



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2015-0098239
(43) 공개일자 2015년08월27일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

A01N 25/26 (2006.01) A01N 37/10 (2006.01)
A01N 43/16 (2006.01) A01N 43/20 (2006.01)
A01N 43/36 (2006.01) A01N 43/38 (2006.01)
A01N 43/40 (2006.01) A01N 43/50 (2006.01)
A01N 43/60 (2006.01) A01N 43/653 (2006.01)
A01N 47/18 (2006.01)

(52) CPC특허분류(Coo. Cl.)

A01N 25/26 (2013.01)
A01N 37/10 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2015-7019011

(22) 출원일자(국제) 2013년12월18일

심사청구일자 없음

(85) 번역문제출일자 2015년07월15일

(86) 국제출원번호 PCT/US2013/076142

(30) 우선권주장

61/739,025 2012년12월19일 미국(US)

(71) 출원인

다우 아그로사이언시즈 엘엘씨

미국 인디애나주 46268-1054 인디애나폴리스 자이언스빌 로드 9330

(72) 발명자

로 윌리엄 시

미국 46037 인디애나주 피셔스 웨더드 엡지 드라이브 12027

헌터 제임스 이

미국 46220 인디애나주 인디애나폴리스 노쓰 에반스톤 애비뉴 5953

(뒷면에 계속)

(74) 대리인

양영준, 류현경

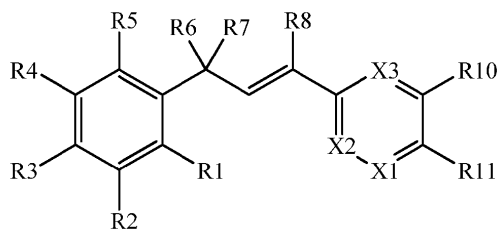
전체 청구항 수 : 총 72 항

(54) 발명의 명칭 살충 조성물 및 그와 관련된 방법

(57) 요약

본원은 하기 화학식 ("화학식 1")을 갖는 분자, 및 그와 연관된 방법에 관한 것이다.

<화학식 1>



(52) CPC특허분류(Coo. Cl.)

A01N 43/16 (2013.01)

A01N 43/20 (2013.01)

A01N 43/36 (2013.01)

A01N 43/38 (2013.01)

A01N 43/40 (2013.01)

A01N 43/50 (2013.01)

A01N 43/60 (2013.01)

A01N 43/653 (2013.01)

A01N 47/18 (2013.01)

(72) 발명자

왓슨 제럴드 비

미국 46077 인디애나주 자이언스빌 웨일 밸리 드라이브 535

패트니 아크셰이

미국 02453 매사추세츠주 월섬 크레센트 스트리트 35 아파트먼트 410

아이어 프래빈 에스

인도 500 026 세쿤데라바드 웨스트 마레드팔리 스트리트 10 만브롬 밀레니엄 레지던시 302

보루와 조쇼디프

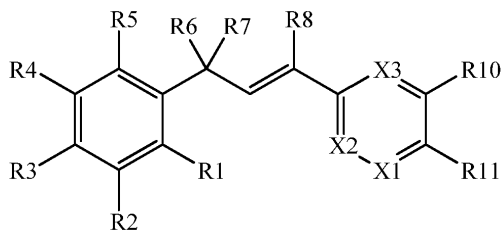
인도 500 007 히데라바드 하브시구다 스트리트 넘버 2 나바라트나 하우스 2-5/87

특허청구의 범위

청구항 1

하기 화학식 1에 따른 분자를 포함하는 조성물.

<화학식 1>



상기 식에서,

(a) R1은

(1) H, F, Cl, Br, I, CN, NO₂, (C₁-C₈)알킬, 할로(C₁-C₈)알킬, (C₁-C₈)알콕시, 할로(C₁-C₈)알콕시, S(C₁-C₈)알킬, S(할로(C₁-C₈)알킬), S(O)(C₁-C₈)알킬, S(O)(할로(C₁-C₈)알킬), S(O)₂(C₁-C₈)알킬, S(O)₂(할로(C₁-C₈)알킬), N(R14)(R15),

(2) 치환된 (C₁-C₈)알킬 (여기서 상기 치환된 (C₁-C₈)알킬은 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 가짐),

(3) 치환된 할로(C₁-C₈)알킬 (여기서 상기 치환된 할로(C₁-C₈)알킬은 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 가짐),

(4) 치환된 (C₁-C₈)알콕시 (여기서 상기 치환된 (C₁-C₈)알콕시는 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 가짐), 및

(5) 치환된 할로(C₁-C₈)알콕시 (여기서 상기 치환된 할로(C₁-C₈)알콕시는 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 가짐)

로부터 선택되고;

(b) R2는

(1) H, F, Cl, Br, I, CN, NO₂, (C₁-C₈)알킬, 할로(C₁-C₈)알킬, (C₁-C₈)알콕시, 할로(C₁-C₈)알콕시, S(C₁-C₈)알킬, S(할로(C₁-C₈)알킬), S(O)(C₁-C₈)알킬, S(O)(할로(C₁-C₈)알킬), S(O)₂(C₁-C₈)알킬, S(O)₂(할로(C₁-C₈)알킬), N(R14)(R15),

(2) 치환된 (C₁-C₈)알킬 (여기서 상기 치환된 (C₁-C₈)알킬은 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 가짐),

(3) 치환된 할로(C₁-C₈)알킬 (여기서 상기 치환된 할로(C₁-C₈)알킬은 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 가짐),

(4) 치환된 (C₁-C₈)알콕시 (여기서 상기 치환된 (C₁-C₈)알콕시는 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 가짐), 및

(5) 치환된 할로(C₁-C₈)알콕시 (여기서 상기 치환된 할로(C₁-C₈)알콕시는 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 가짐)

로부터 선택되고;

(c) R3은

(1) H, F, Cl, Br, I, CN, NO₂, (C₁-C₈)알킬, 할로(C₁-C₈)알킬, (C₁-C₈)알콕시, 할로(C₁-C₈)알콕시, S(C₁-C₈)알킬, S(할로(C₁-C₈)알킬), S(O)(C₁-C₈)알킬, S(O)(할로(C₁-C₈)알킬), S(O)₂(C₁-C₈)알킬, S(O)₂(할로(C₁-C₈)알킬), N(R14)(R15),

(2) 치환된 (C₁-C₈)알킬 (여기서 상기 치환된 (C₁-C₈)알킬은 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 가짐),

(3) 치환된 할로(C₁-C₈)알킬 (여기서 상기 치환된 할로(C₁-C₈)알킬은 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 가짐),

(4) 치환된 (C₁-C₈)알콕시 (여기서 상기 치환된 (C₁-C₈)알콕시는 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 가짐), 및

(5) 치환된 할로(C₁-C₈)알콕시 (여기서 상기 치환된 할로(C₁-C₈)알콕시는 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 가짐)

로부터 선택되고;

(d) R4는

(1) H, F, Cl, Br, I, CN, NO₂, (C₁-C₈)알킬, 할로(C₁-C₈)알킬, (C₁-C₈)알콕시, 할로(C₁-C₈)알콕시, S(C₁-C₈)알킬, S(할로(C₁-C₈)알킬), S(O)(C₁-C₈)알킬, S(O)(할로(C₁-C₈)알킬), S(O)₂(C₁-C₈)알킬, S(O)₂(할로(C₁-C₈)알킬), N(R14)(R15),

(2) 치환된 (C₁-C₈)알킬 (여기서 상기 치환된 (C₁-C₈)알킬은 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 가짐),

(3) 치환된 할로(C₁-C₈)알킬 (여기서 상기 치환된 할로(C₁-C₈)알킬은 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 가짐),

(4) 치환된 (C₁-C₈)알콕시 (여기서 상기 치환된 (C₁-C₈)알콕시는 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 가짐), 및

(5) 치환된 할로(C₁-C₈)알콕시 (여기서 상기 치환된 할로(C₁-C₈)알콕시는 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 가짐)

로부터 선택되고;

(e) R5는

(1) H, F, Cl, Br, I, CN, NO₂, (C₁-C₈)알킬, 할로(C₁-C₈)알킬, (C₁-C₈)알콕시, 할로(C₁-C₈)알콕시, S(C₁-C₈)알킬, S(할로(C₁-C₈)알킬), S(O)(C₁-C₈)알킬, S(O)(할로(C₁-C₈)알킬), S(O)₂(C₁-C₈)알킬, S(O)₂(할로(C₁-C₈)알킬), N(R14)(R15),

(2) 치환된 (C₁-C₈)알킬 (여기서 상기 치환된 (C₁-C₈)알킬은 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 가짐),

(3) 치환된 할로(C₁-C₈)알킬 (여기서 상기 치환된 할로(C₁-C₈)알킬은 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 가짐),

(4) 치환된 (C₁-C₈)알콕시 (여기서 상기 치환된 (C₁-C₈)알콕시는 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 가짐), 및

(5) 치환된 할로(C₁-C₈)알콕시 (여기서 상기 치환된 할로(C₁-C₈)알콕시는 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이

상의 치환기를 가짐)

로부터 선택되고;

(f) R6은 (C₁-C₈)할로알킬이고;

(g) R7은 H, F, Cl, Br, I, OH, (C₁-C₈)알콕시, 및 할로(C₁-C₈)알콕시로부터 선택되고;

(h) R8은 H, (C₁-C₈)알킬, 할로(C₁-C₈)알킬, OR14, 및 N(R14)(R15)로부터 선택되고;

(i) R9는 H, F, Cl, Br, I, (C₁-C₈)알킬, 할로(C₁-C₈)알킬, (C₁-C₈)알콕시, 할로(C₁-C₈)알콕시, OR14, 및 N(R14)(R15)로부터 선택되고;

(j) R10은

(1) H, F, Cl, Br, I, CN, NO₂, (C₁-C₈)알킬, 할로(C₁-C₈)알킬, (C₁-C₈)알콕시, 할로(C₁-C₈)알콕시, 시클로(C₃-C₆)알킬, S(C₁-C₈)알킬, S(할로(C₁-C₈)알킬), S(O)(C₁-C₈)알킬, S(O)(할로(C₁-C₈)알킬), S(O)₂(C₁-C₈)알킬, S(O)₂(할로(C₁-C₈)알킬), NR14R15, C(=O)H, C(=O)N(R14)(R15), CN(R14)(R15)(=NOH), (C=O)O(C₁-C₈)알킬, (C=O)OH, 헤테로시클릴, (C₂-C₈)알케닐, 할로(C₂-C₈)알케닐, (C₂-C₈)알키닐,

(2) 치환된 (C₁-C₈)알킬 (여기서 상기 치환된 (C₁-C₈)알킬은 OH, (C₁-C₈)알콕시, S(C₁-C₈)알킬, S(O)(C₁-C₈)알킬, S(O)₂(C₁-C₈)알킬, NR14R15로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 가짐), 및

(3) 치환된 할로(C₁-C₈)알킬 (여기서 상기 치환된 할로(C₁-C₈)알킬은 (C₁-C₈)알콕시, S(C₁-C₈)알킬, S(O)(C₁-C₈)알킬, S(O)₂(C₁-C₈)알킬, 및 N(R14)(R15)로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 가짐)

로부터 선택되고;

(k) R11은 C(=X5)N(R14)((C₁-C₈)알킬C(=X5)N(R14)(R15)) (여기서 각각의 X5는 독립적으로 O 또는 S로부터 선택됨)로부터 선택되고;

(l) R12는 (v), H, F, Cl, Br, I, CN, (C₁-C₈)알킬, 할로(C₁-C₈)알킬, (C₁-C₈)알콕시, 할로(C₁-C₈)알콕시, 및 시클로(C₃-C₆)알킬로부터 선택되고;

(m) R13은 (v), H, F, Cl, Br, I, CN, (C₁-C₈)알킬, 할로(C₁-C₈)알킬, (C₁-C₈)알콕시, 및 할로(C₁-C₈)알콕시로부터 선택되고;

(n) 각각의 R14는 독립적으로 H, (C₁-C₈)알킬, (C₂-C₈)알케닐, 치환된 (C₁-C₈)알킬, 할로(C₁-C₈)알킬, 치환된 할로(C₁-C₈)알킬, (C₁-C₈)알콕시, 시클로(C₃-C₆)알킬, 아릴, 치환된-아릴, (C₁-C₈)알킬-아릴, (C₁-C₈)알킬-(치환된-아릴), O-(C₁-C₈)알킬-아릴, O-(C₁-C₈)알킬-(치환된-아릴), 헤테로시클릴, 치환된-헤테로시클릴, (C₁-C₈)알킬-헤테로시클릴, (C₁-C₈)알킬-(치환된-헤테로시클릴), O-(C₁-C₈)알킬-헤테로시클릴, O-(C₁-C₈)알킬-(치환된-헤테로시클릴), N(R16)(R17), (C₁-C₈)알킬-C(=O)N(R16)(R17), C(=O)(C₁-C₈)알킬, C(=O)(할로(C₁-C₈)알킬), C(=O)(C₃-C₆)시클로알킬, (C₁-C₈)알킬-C(=O)O(C₁-C₈)알킬, C(=O)H로부터 선택되고,

여기서 각각의 상기 치환된 (C₁-C₈)알킬은 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 갖고,

여기서 각각의 상기 치환된 할로(C₁-C₈)알킬은 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 갖고,

여기서 각각의 상기 치환된-아릴은 F, Cl, Br, I, CN, NO₂, (C₁-C₈)알킬, 할로(C₁-C₈)알킬, (C₁-C₈)알콕시, 할로(C₁-C₈)알콕시, S(C₁-C₈)알킬, S(할로(C₁-C₈)알킬), N((C₁-C₈)알킬)₂ (여기서 각각의 (C₁-C₈)알킬은 독립적으로 선택됨), 및 옥소로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 갖고,

여기서 각각의 상기 치환된-헤테로시클릴은 F, Cl, Br, I, CN, NO₂, (C₁-C₈)알킬, 할로(C₁-C₈)알킬, (C₁-C₈)알콕시, 할로(C₁-C₈)알콕시, (C₃-C₆)시클로알킬, S(C₁-C₈)알킬, S(할로(C₁-C₈)알킬), N((C₁-C₈)알킬)₂ (여기서

각각의 (C₁-C₈)알킬은 독립적으로 선택됨), 헤테로시클릴, C(=O)(C₁-C₈)알킬, C(=O)O(C₁-C₈)알킬, 및 옥소 (여기서 상기 알킬, 알콕시, 및 헤테로시클릴은 F, Cl, Br, I, CN, 및 NO₂ 중 1개 이상으로 추가로 치환될 수 있음)로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 갖고;

(o) 각각의 R15는 독립적으로 H, (C₁-C₈)알킬, (C₂-C₈)알케닐, 치환된 (C₁-C₈)알킬, 할로(C₁-C₈)알킬, 치환된 할로(C₁-C₈)알킬, (C₁-C₈)알콕시, 시클로(C₃-C₆)알킬, 아릴, 치환된-아릴, (C₁-C₈)알킬-아릴, (C₁-C₈)알킬-(치환된-아릴), O-(C₁-C₈)알킬-아릴, O-(C₁-C₈)알킬-(치환된-아릴), 헤테로시클릴, 치환된-헤테로시클릴, (C₁-C₈)알킬-헤테로시클릴, (C₁-C₈)알킬-(치환된-헤테로시클릴), O-(C₁-C₈)알킬-헤테로시클릴, O-(C₁-C₈)알킬-(치환된-헤테로시클릴), N(R16)(R17), (C₁-C₈)알킬-C(=O)N(R16)(R17), C(=O)(C₁-C₈)알킬, C(=O)(할로(C₁-C₈)알킬), C(=O)(C₃-C₆)시클로알킬, (C₁-C₈)알킬-C(=O)O(C₁-C₈)알킬, C(=O)H로부터 선택되고,

여기서 각각의 상기 치환된 (C₁-C₈)알킬은 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 갖고,

여기서 각각의 상기 치환된 할로(C₁-C₈)알킬은 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 갖고,

여기서 각각의 상기 치환된-아릴은 F, Cl, Br, I, CN, NO₂, (C₁-C₈)알킬, 할로(C₁-C₈)알킬, (C₁-C₈)알콕시, 할로(C₁-C₈)알콕시, S(C₁-C₈)알킬, S(할로(C₁-C₈)알킬), N((C₁-C₈)알킬)₂ (여기서 각각의 (C₁-C₈)알킬은 독립적으로 선택됨), 및 옥소로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 갖고,

여기서 각각의 상기 치환된-헤테로시클릴은 F, Cl, Br, I, CN, NO₂, (C₁-C₈)알킬, 할로(C₁-C₈)알킬, (C₁-C₈)알콕시, 할로(C₁-C₈)알콕시, (C₃-C₆)시클로알킬, S(C₁-C₈)알킬, S(할로(C₁-C₈)알킬), N((C₁-C₈)알킬)₂ (여기서 각각의 (C₁-C₈)알킬은 독립적으로 선택됨), 헤테로시클릴, C(=O)(C₁-C₈)알킬, C(=O)O(C₁-C₈)알킬, 및 옥소 (여기서 상기 알킬, 알콕시, 및 헤테로시클릴은 F, Cl, Br, I, CN, 및 NO₂ 중 1개 이상으로 추가로 치환될 수 있음)로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 갖고;

(p) 각각의 R16은 독립적으로 H, (C₁-C₈)알킬, 치환된-(C₁-C₈)알킬, 할로(C₁-C₈)알킬, 치환된-할로(C₁-C₈)알킬, 시클로(C₃-C₆)알킬, 아릴, 치환된-아릴, (C₁-C₈)알킬-아릴, (C₁-C₈)알킬-(치환된-아릴), O-(C₁-C₈)알킬-아릴, O-(C₁-C₈)알킬-(치환된-아릴), 헤테로시클릴, 치환된-헤테로시클릴, (C₁-C₈)알킬-헤테로시클릴, (C₁-C₈)알킬-(치환된-헤테로시클릴), O-(C₁-C₈)알킬-헤테로시클릴, O-(C₁-C₈)알킬-(치환된-헤테로시클릴), O-(C₁-C₈)알킬로부터 선택되고,

여기서 각각의 상기 치환된 (C₁-C₈)알킬은 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 갖고,

여기서 각각의 상기 치환된 할로(C₁-C₈)알킬은 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 갖고,

여기서 각각의 상기 치환된-아릴은 F, Cl, Br, I, CN, NO₂, (C₁-C₈)알킬, 할로(C₁-C₈)알킬, (C₁-C₈)알콕시, 할로(C₁-C₈)알콕시, S(C₁-C₈)알킬, S(할로(C₁-C₈)알킬), N((C₁-C₈)알킬)₂ (여기서 각각의 (C₁-C₈)알킬은 독립적으로 선택됨), 및 옥소로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 갖고,

여기서 각각의 상기 치환된-헤테로시클릴은 F, Cl, Br, I, CN, NO₂, (C₁-C₈)알킬, 할로(C₁-C₈)알킬, (C₁-C₈)알콕시, 할로(C₁-C₈)알콕시, S(C₁-C₈)알킬, S(할로(C₁-C₈)알킬), N((C₁-C₈)알킬)₂ (여기서 각각의 (C₁-C₈)알킬은 독립적으로 선택됨), 및 옥소로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 갖고;

(q) 각각의 R17은 독립적으로 H, (C₁-C₈)알킬, 치환된-(C₁-C₈)알킬, 할로(C₁-C₈)알킬, 치환된-할로(C₁-C₈)알킬, 시클로(C₃-C₆)알킬, 아릴, 치환된-아릴, (C₁-C₈)알킬-아릴, (C₁-C₈)알킬-(치환된-아릴), O-(C₁-C₈)알킬-아릴, O-(C₁-C₈)알킬-(치환된-아릴), 헤테로시클릴, 치환된-헤테로시클릴, (C₁-C₈)알킬-헤테로시클릴, (C₁-C₈)알킬-(치환된-헤테로시클릴), O-(C₁-C₈)알킬-헤테로시클릴, O-(C₁-C₈)알킬-(치환된-헤테로시클릴), O-(C₁-C₈)알킬로부터 선택되고,

여기서 각각의 상기 치환된 (C₁-C₈)알킬은 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 갖고,

여기서 각각의 상기 치환된 할로(C₁-C₈)알킬은 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 갖고,

여기서 각각의 상기 치환된-아릴은 F, Cl, Br, I, CN, NO₂, (C₁-C₈)알킬, 할로(C₁-C₈)알킬, (C₁-C₈)알콕시, 할로(C₁-C₈)알콕시, S(C₁-C₈)알킬, S(할로(C₁-C₈)알킬), N((C₁-C₈)알킬)₂ (여기서 각각의 (C₁-C₈)알킬은 독립적으로 선택됨), 및 옥소로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 갖고,

여기서 각각의 상기 치환된-헤테로시클릴은 F, Cl, Br, I, CN, NO₂, (C₁-C₈)알킬, 할로(C₁-C₈)알킬, (C₁-C₈)알콕시, 할로(C₁-C₈)알콕시, S(C₁-C₈)알킬, S(할로(C₁-C₈)알킬), N((C₁-C₈)알킬)₂ (여기서 각각의 (C₁-C₈)알킬은 독립적으로 선택됨), 및 옥소로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 갖고;

(r) X1은 N 및 CR12로부터 선택되고;

(s) X2는 N, CR9, 및 CR13으로부터 선택되고;

(t) X3은 N 및 CR9으로부터 선택되고;

(v) R12 및 R13은 함께 C, N, O, 및 S로부터 선택된 3 내지 4개의 원자를 함유하는 연결을 형성하고, 여기서 상기 연결은 다시 고리에 연결되어 5 내지 6 원 포화 또는 불포화 시클릭 고리를 형성하고, 여기서 상기 연결은 1개 이상의 치환기 X4를 갖고, 여기서 X4는 R14, N(R14)(R15), N(R14)(C(=O)R14), N(R14)(C(=S)R14), N(R14)(C(=O)N(R14)(R14)), N(R14)(C(=S)N(R14)(R14)), N(R14)(C(=O)N(R14)((C₂-C₈)알케닐)), N(R14)(C(=S)N(R14)((C₂-C₈)알케닐))로부터 선택되고, 여기서 각각의 R14는 독립적으로 선택된다.

청구항 2

제1항에 있어서, R1이 H, F, Cl, Br, I, CN, NO₂, 메틸, 에틸, (C₃)알킬, (C₄)알킬, (C₅)알킬, (C₆)알킬, (C₇)알킬, (C₈)알킬, 할로메틸, 할로에틸, 할로(C₃)알킬, 할로(C₄)알킬, 할로(C₅)알킬, 할로(C₆)알킬, 할로(C₇)알킬, 할로(C₈)알킬, 메톡시, 에톡시, (C₃)알콕시, (C₄)알콕시, (C₅)알콕시, (C₆)알콕시, (C₇)알콕시, (C₈)알콕시, 할로메톡시, 할로에톡시, 할로(C₃)알콕시, 할로(C₄)알콕시, 할로(C₅)알콕시, 할로(C₆)알콕시, 할로(C₇)알콕시, 및 할로(C₈)알콕시로부터 선택된 것인 분자.

청구항 3

제1항에 있어서, R2가 H, F, Cl, Br, I, CN, NO₂, 메틸, 에틸, (C₃)알킬, (C₄)알킬, (C₅)알킬, (C₆)알킬, (C₇)알킬, (C₈)알킬, 할로메틸, 할로에틸, 할로(C₃)알킬, 할로(C₄)알킬, 할로(C₅)알킬, 할로(C₆)알킬, 할로(C₇)알킬, 할로(C₈)알킬, 메톡시, 에톡시, (C₃)알콕시, (C₄)알콕시, (C₅)알콕시, (C₆)알콕시, (C₇)알콕시, (C₈)알콕시, 할로메톡시, 할로에톡시, 할로(C₃)알콕시, 할로(C₄)알콕시, 할로(C₅)알콕시, 할로(C₆)알콕시, 할로(C₇)알콕시, 및 할로(C₈)알콕시로부터 선택된 것인 분자.

청구항 4

제1항에 있어서, R3이 H, F, Cl, Br, I, CN, NO₂, 메틸, 에틸, (C₃)알킬, (C₄)알킬, (C₅)알킬, (C₆)알킬, (C₇)알킬, (C₈)알킬, 할로메틸, 할로에틸, 할로(C₃)알킬, 할로(C₄)알킬, 할로(C₅)알킬, 할로(C₆)알킬, 할로(C₇)알킬, 할로(C₈)알킬, 메톡시, 에톡시, (C₃)알콕시, (C₄)알콕시, (C₅)알콕시, (C₆)알콕시, (C₇)알콕시, (C₈)알콕시, 할로메톡시, 할로에톡시, 할로(C₃)알콕시, 할로(C₄)알콕시, 할로(C₅)알콕시, 할로(C₆)알콕시, 할로(C₇)알콕시, 및 할로(C₈)알콕시로부터 선택된 것인 분자.

청구항 5

제1항에 있어서, R4가 H, F, Cl, Br, I, CN, NO₂, 메틸, 에틸, (C₃)알킬, (C₄)알킬, (C₅)알킬, (C₆)알킬, (C₇)알

킬, (C₈)알킬, 할로메틸, 할로에틸, 할로(C₃)알킬, 할로(C₄)알킬, 할로(C₅)알킬, 할로(C₆)알킬, 할로(C₇)알킬, 할로(C₈)알킬, 메톡시, 에톡시, (C₃)알콕시, (C₄)알콕시, (C₅)알콕시, (C₆)알콕시, (C₇)알콕시, (C₈)알콕시, 할로메톡시, 할로에톡시, 할로(C₃)알콕시, 할로(C₄)알콕시, 할로(C₅)알콕시, 할로(C₆)알콕시, 할로(C₇)알콕시, 및 할로(C₈)알콕시로부터 선택된 것인 분자.

청구항 6

제1항에 있어서, R5가 H, F, Cl, Br, I, CN, NO₂, 메틸, 에틸, (C₃)알킬, (C₄)알킬, (C₅)알킬, (C₆)알킬, (C₇)알킬, (C₈)알킬, 할로메틸, 할로에틸, 할로(C₃)알킬, 할로(C₄)알킬, 할로(C₅)알킬, 할로(C₆)알킬, 할로(C₇)알킬, 할로(C₈)알킬, 메톡시, 에톡시, (C₃)알콕시, (C₄)알콕시, (C₅)알콕시, (C₆)알콕시, (C₇)알콕시, (C₈)알콕시, 할로메톡시, 할로에톡시, 할로(C₃)알콕시, 할로(C₄)알콕시, 할로(C₅)알콕시, 할로(C₆)알콕시, 할로(C₇)알콕시, 및 할로(C₈)알콕시로부터 선택된 것인 분자.

청구항 7

제1항에 있어서, R2 및 R4가 F, Cl, Br, I, CN, 및 NO₂로부터 선택되고, R1, R3, 및 R5가 H인 분자.

청구항 8

제1항에 있어서, R2, R3, 및 R4가 F, Cl, Br, I, CN, 및 NO₂로부터 선택되고, R1 및 R5가 H인 분자.

청구항 9

제1항에 있어서, R2, R3, 및 R4가 독립적으로 F 및 Cl로부터 선택되고, R1 및 R5가 H인 분자.

청구항 10

제1항에 있어서, R1이 Cl 및 H로부터 선택된 것인 분자.

청구항 11

제1항에 있어서, R2가 CF₃, CH₃, Cl, F, 및 H로부터 선택된 것인 분자.

청구항 12

제1항에 있어서, R3이 OCH₃, CH₃, F, Cl, 또는 H로부터 선택된 것인 분자.

청구항 13

제1항에 있어서, R4가 CF₃, CH₃, Cl, F, 및 H로부터 선택된 것인 분자.

청구항 14

제1항에 있어서, R5가 F, Cl, 및 H로부터 선택된 것인 분자.

청구항 15

제1항에 있어서, R6이 할로메틸, 할로에틸, 할로(C₃)알킬, 할로(C₄)알킬, 할로(C₅)알킬, 할로(C₆)알킬, 할로(C₇)알킬, 및 할로(C₈)알킬로부터 선택된 것인 분자.

청구항 16

제1항에 있어서, R6이 트리플루오로메틸인 분자.

청구항 17

제1항에 있어서, R7이 H, F, Cl, Br, 및 I로부터 선택된 것인 분자.

청구항 18

제1항에 있어서, R7이 H, OCH₃, 및 OH로부터 선택된 것인 분자.

청구항 19

제1항에 있어서, R8이 H, 메틸, 에틸, (C₃)알킬, (C₄)알킬, (C₅)알킬, (C₆)알킬, (C₇)알킬, (C₈)알킬, 할로메틸, 할로에틸, 할로(C₃)알킬, 할로(C₄)알킬, 할로(C₅)알킬, 할로(C₆)알킬, 할로(C₇)알킬, 및 할로(C₈)알킬로부터 선택된 것인 분자.

청구항 20

제1항에 있어서, R8이 CH₃ 및 H로부터 선택된 것인 분자.

청구항 21

제1항에 있어서, R9가 H, F, Cl, Br, I, 메틸, 에틸, (C₃)알킬, (C₄)알킬, (C₅)알킬, (C₆)알킬, (C₇)알킬, (C₈)알킬, 할로메틸, 할로에틸, 할로(C₃)알킬, 할로(C₄)알킬, 할로(C₅)알킬, 할로(C₆)알킬, 할로(C₇)알킬, 할로(C₈)알킬, 메톡시, 에톡시, (C₃)알콕시, (C₄)알콕시, (C₅)알콕시, (C₆)알콕시, (C₇)알콕시, (C₈)알콕시, 할로메톡시, 할로에톡시, 할로(C₃)알콕시, 할로(C₄)알콕시, 할로(C₅)알콕시, 할로(C₆)알콕시, 할로(C₇)알콕시, 및 할로(C₈)알콕시로부터 선택된 것인 분자.

청구항 22

제1항에 있어서, R10이 H, F, Cl, Br, I, CN, 메틸, 에틸, (C₃)알킬, (C₄)알킬, (C₅)알킬, (C₆)알킬, (C₇)알킬, (C₈)알킬, 할로메틸, 할로에틸, 할로(C₃)알킬, 할로(C₄)알킬, 할로(C₅)알킬, 할로(C₆)알킬, 할로(C₇)알킬, 할로(C₈)알킬, 메톡시, 에톡시, (C₃)알콕시, (C₄)알콕시, (C₅)알콕시, (C₆)알콕시, (C₇)알콕시, (C₈)알콕시, 할로메톡시, 할로에톡시, 할로(C₃)알콕시, 할로(C₄)알콕시, 할로(C₅)알콕시, 할로(C₆)알콕시, 할로(C₇)알콕시, 할로(C₈)알콕시, 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 및 시클로헥실로부터 선택된 것인 분자.

청구항 23

제1항에 있어서, R10이 H, Cl, Br, CH₃, 및 CF₃으로부터 선택된 것인 분자.

청구항 24

제1항에 있어서, R10이 Br, C(=NOH)NH₂, C(=O)H, C(=O)NH₂, C(=O)OCH₂CH₃, C(=O)OH, CF₃, CH₂CH₃, CH₂OH, CH₃, Cl, CN, F, H, NH₂, NHC(=O)H, NHCH₃, NO₂, OCH₃, OCHF₂, 및 페리딜로부터 선택된 것인 분자.

청구항 25

제1항에 있어서, R11이 C(=O)N(H)(C((CH₃)₂)C(=O)N(H)(CH₂CF₃)), C(=O)N(H)(CH(CH₃)C(=O)N(H)(CH₂CF₃)), C(=O)N(H)(CH(CH₂CH₃)C(=O)N(H)(CH₂CF₃)), C(=O)N(H)(CH(CH₃)C(=S)N(H)(CH₂CF₃)), C(=O)N(H)(C((CH₃)₂)C(=S)N(H)(CH₂CF₃)), 및 C(=S)N(H)(C((CH₃)₂)C(=S)N(H)(CH₂CF₃))로부터 선택된 것인 분자.

청구항 26

제1항에 있어서, R11이 C(=O 또는 S))N(H)((C₁-C₈)알킬)C(=O 또는 S))N(H)(할로(C₁-C₈)알킬))로부터 선택된 것인 분자.

청구항 27

제1항에 있어서, R11이 C(=O)N(H)(C((CH₃)₂)C(=O)N(H)(CH₂CF₃)), C(=O)N(H)(CH(CH₃)C(=O)N(H)(CH₂CF₃)),

$C(=O)N(H)(CH(CH_3)C(=S)N(H)(CH_2CF_3))$, $C(=O)N(H)(C((CH_3)_2)C(=S)N(H)(CH_2CF_3))$, 및 $C(=S)N(H)(C((CH_3)_2)C(=S)N(H)(CH_2CF_3))$ 로부터 선택된 것인 분자.

청구항 28

제1항에 있어서, R11이 $C(=O)N(H)(C((CH_3)_2)C(=O)N(H)(CH_2CF_3))$ 로부터 선택된 것인 분자.

청구항 29

제1항에 있어서, R12가 H, F, Cl, Br, I, 메틸, 에틸, (C₃)알킬, (C₄)알킬, (C₅)알킬, (C₆)알킬, (C₇)알킬, (C₈)알킬, 할로메틸, 할로에틸, 할로(C₃)알킬, 할로(C₄)알킬, 할로(C₅)알킬, 할로(C₆)알킬, 할로(C₇)알킬, 할로(C₈)알킬, 할로메톡시, 할로에톡시, 할로(C₃)알콕시, 할로(C₄)알콕시, 할로(C₅)알콕시, 할로(C₆)알콕시, 할로(C₇)알콕시, 및 할로(C₈)알콕시로부터 선택된 것인 분자.

청구항 30

제1항에 있어서, R12가 CH₃ 및 H로부터 선택된 것인 분자.

청구항 31

제1항에 있어서, R13이 H, F, Cl, Br, I, 메틸, 에틸, (C₃)알킬, (C₄)알킬, (C₅)알킬, (C₆)알킬, (C₇)알킬, (C₈)알킬, 할로메틸, 할로에틸, 할로(C₃)알킬, 할로(C₄)알킬, 할로(C₅)알킬, 할로(C₆)알킬, 할로(C₇)알킬, 할로(C₈)알킬, 할로메톡시, 할로에톡시, 할로(C₃)알콕시, 할로(C₄)알콕시, 할로(C₅)알콕시, 할로(C₆)알콕시, 할로(C₇)알콕시, 및 할로(C₈)알콕시로부터 선택된 것인 분자.

청구항 32

제1항에 있어서, R13이 CH₃, Cl, 및 H로부터 선택된 것인 분자.

청구항 33

제1항에 있어서, R12-R13이 히드로카르빌 연결 $CH=CHCH=CH$ 인 분자.

청구항 34

제1항에 있어서, R14 및 R15가 독립적으로 H, 메틸, 에틸, (C₃)알킬, (C₄)알킬, (C₅)알킬, (C₆)알킬, (C₇)알킬, (C₈)알킬, 할로메틸, 할로에틸, 할로(C₃)알킬, 할로(C₄)알킬, 할로(C₅)알킬, 할로(C₆)알킬, 할로(C₇)알킬, 할로(C₈)알킬, 메틸-아릴, 에틸-아릴, (C₃)알킬-아릴, (C₄)알킬-아릴, (C₅)알킬-아릴, (C₆)알킬-아릴, (C₇)알킬-아릴, (C₈)알킬-아릴, 메틸-(치환된-아릴), 에틸-(치환된-아릴), (C₃)알킬-(치환된-아릴), (C₄)알킬-(치환된-아릴), (C₅)알킬-(치환된-아릴), (C₆)알킬-(치환된-아릴), (C₇)알킬-(치환된-아릴), (C₈)알킬-(치환된-아릴), O-메틸-아릴, O-에틸-아릴, O-(C₃)알킬-아릴, O-(C₄)알킬-아릴, O-(C₅)알킬-아릴, O-(C₆)알킬-아릴, O-(C₇)알킬-아릴, O-(C₈)알킬-아릴, O-메틸-(치환된-아릴), O-에틸-(치환된-아릴), O-(C₃)알킬-(치환된-아릴), O-(C₄)알킬-(치환된-아릴), O-(C₅)알킬-(치환된-아릴), O-(C₆)알킬-(치환된-아릴), O-(C₇)알킬-(치환된-아릴), O-(C₈)알킬-(치환된-아릴), 메틸-헤테로시클릴, 에틸-헤테로시클릴, (C₃)알킬-헤테로시클릴, (C₄)알킬-헤테로시클릴, (C₅)알킬-헤테로시클릴, (C₆)알킬-헤테로시클릴, (C₇)알킬-헤테로시클릴, (C₈)알킬-헤테로시클릴, 메틸-(치환된-헤테로시클릴), 에틸-(치환된-헤테로시클릴), (C₃)알킬-(치환된-헤테로시클릴), (C₄)알킬-(치환된-헤테로시클릴), (C₅)알킬-(치환된-헤테로시클릴), (C₆)알킬-(치환된-헤테로시클릴), (C₇)알킬-(치환된-헤테로시클릴), (C₈)알킬-(치환된-헤테로시클릴), O-메틸-헤테로시클릴, O-에틸-헤테로시클릴, O-(C₃)알킬-헤테로시클릴, O-(C₄)알킬-헤테로시클릴, O-(C₅)알킬-헤테로시클릴, O-(C₆)알킬-헤테로시클릴, O-(C₇)알킬-헤테로시클릴, O-

(C₈)알킬-헥테로시클릴, 0-메틸-(치환된-헥테로시클릴), 0-에틸-(치환된-헥테로시클릴), 0-(C₃)알킬-(치환된-헥테로시클릴), 0-(C₄)알킬-(치환된-헥테로시클릴), 0-(C₅)알킬-(치환된-헥테로시클릴), 0-(C₆)알킬-(치환된-헥테로시클릴), 0-(C₇)알킬-(치환된-헥테로시클릴), 0-(C₈)알킬-(치환된-헥테로시클릴), 메틸-C(=O)N(R16)(R17), 에틸-C(=O)N(R16)(R17), (C₃)알킬-C(=O)N(R16)(R17), (C₄)알킬-C(=O)N(R16)(R17), (C₅)알킬-C(=O)N(R16)(R17), (C₆)알킬-C(=O)N(R16)(R17), (C₇)알킬-C(=O)N(R16)(R17), 및 (C₈)알킬-C(=O)N(R16)(R17)로부터 선택된 것인 분자.

청구항 35

제1항에 있어서, R14 및 R15가 독립적으로 H, CH₃, CH₂CF₃, CH₂-할로피리딜, 옥소-피롤리디닐, 할로페닐, 티에타닐, CH₂-페닐, CH₂-피리딜, 티에타닐-디옥시드, CH₂-할로티아졸릴, C((CH₃)₂)-피리딜, N(H)(할로페닐), CH₂-피리미디닐, CH₂-테트라히드로푸라닐, CH₂-푸라닐, 0-CH₂-할로피리딜, 및 CH₂C(=O)N(H)(CH₂CF₃)으로부터 선택된 것인 분자.

청구항 36

제1항에 있어서, R16 및 R17이 독립적으로 H, 메틸, 에틸, (C₃)알킬, (C₄)알킬, (C₅)알킬, (C₆)알킬, (C₇)알킬, (C₈)알킬, 할로메틸, 할로에틸, 할로(C₃)알킬, 할로(C₄)알킬, 할로(C₅)알킬, 할로(C₆)알킬, 할로(C₇)알킬, 할로(C₈)알킬, 메틸-아릴, 에틸-아릴, (C₃)알킬-아릴, (C₄)알킬-아릴, (C₅)알킬-아릴, (C₆)알킬-아릴, (C₇)알킬-아릴, (C₈)알킬-아릴, 메틸-(치환된-아릴), 에틸-(치환된-아릴), (C₃)알킬-(치환된-아릴), (C₄)알킬-(치환된-아릴), (C₅)알킬-(치환된-아릴), (C₆)알킬-(치환된-아릴), (C₇)알킬-(치환된-아릴), (C₈)알킬-(치환된-아릴), 0-메틸-아릴, 0-에틸-아릴, 0-(C₃)알킬-아릴, 0-(C₄)알킬-아릴, 0-(C₅)알킬-아릴, 0-(C₆)알킬-아릴, 0-(C₇)알킬-아릴, 0-(C₈)알킬-아릴, 0-메틸-(치환된-아릴), 0-에틸-(치환된-아릴), 0-(C₃)알킬-(치환된-아릴), 0-(C₄)알킬-(치환된-아릴), 0-(C₅)알킬-(치환된-아릴), 0-(C₆)알킬-(치환된-아릴), 0-(C₇)알킬-(치환된-아릴), 0-(C₈)알킬-(치환된-아릴), 메틸-헥테로시클릴, 에틸-헥테로시클릴, (C₃)알킬-헥테로시클릴, (C₄)알킬-헥테로시클릴, (C₅)알킬-헥테로시클릴, (C₆)알킬-헥테로시클릴, (C₇)알킬-헥테로시클릴, (C₈)알킬-헥테로시클릴, 메틸-(치환된-헥테로시클릴), 에틸-(치환된-헥테로시클릴), (C₃)알킬-(치환된-헥테로시클릴), (C₄)알킬-(치환된-헥테로시클릴), (C₅)알킬-(치환된-헥테로시클릴), (C₆)알킬-(치환된-헥테로시클릴), (C₇)알킬-(치환된-헥테로시클릴), (C₈)알킬-(치환된-헥테로시클릴), 0-메틸-헥테로시클릴, 0-에틸-헥테로시클릴, 0-(C₃)알킬-헥테로시클릴, 0-(C₄)알킬-헥테로시클릴, 0-(C₅)알킬-헥테로시클릴, 0-(C₆)알킬-헥테로시클릴, 0-(C₇)알킬-헥테로시클릴, 0-(C₈)알킬-헥테로시클릴, 0-메틸-(치환된-헥테로시클릴), 0-에틸-(치환된-헥테로시클릴), 0-(C₃)알킬-(치환된-헥테로시클릴), 0-(C₄)알킬-(치환된-헥테로시클릴), 0-(C₅)알킬-(치환된-헥테로시클릴), 0-(C₆)알킬-(치환된-헥테로시클릴), 0-(C₇)알킬-(치환된-헥테로시클릴), 및 0-(C₈)알킬-(치환된-헥테로시클릴)로부터 선택된 것인 분자.

청구항 37

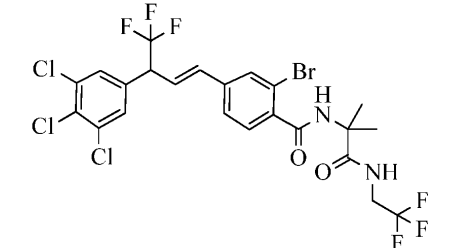
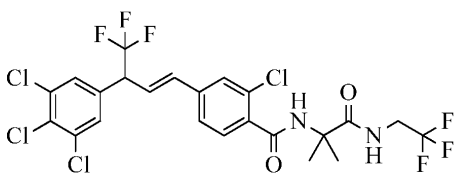
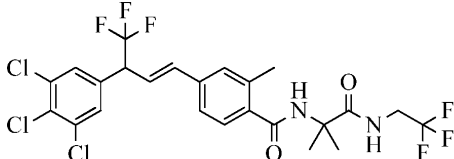
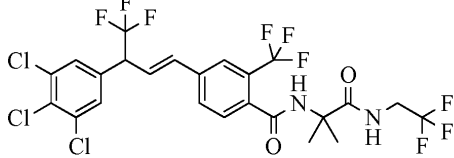
제1항에 있어서, R16 및 R17이 독립적으로 H, CH₂CF₃, 시클로프로필, 티에타닐, 티에타닐 디옥시드, 및 할로페닐로부터 선택된 것인 분자.

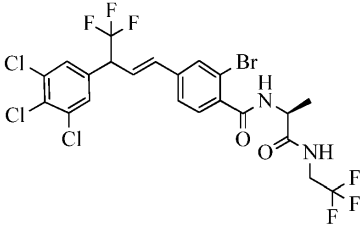
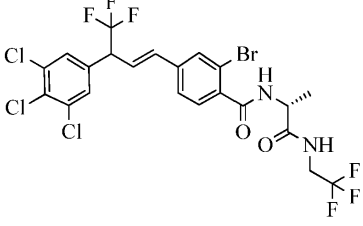
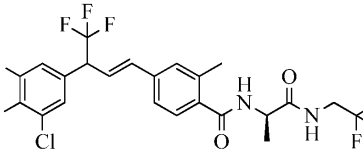
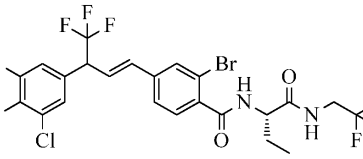
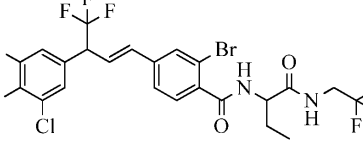
청구항 38

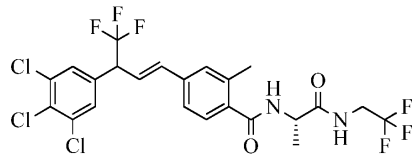
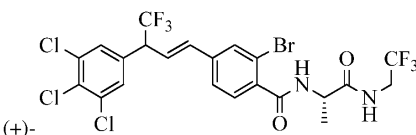
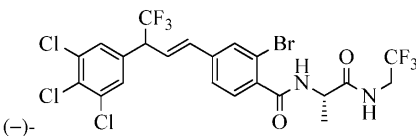
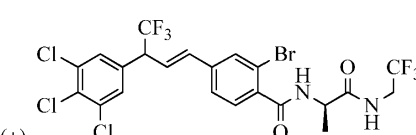
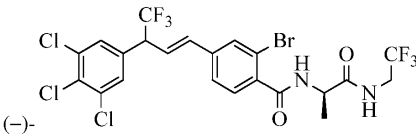
제1항에 있어서, X1이 CR12이고, X2가 CR13이고, X3이 CR9인 분자.

청구항 39

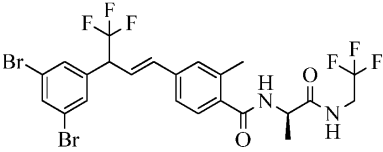
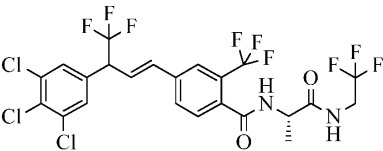
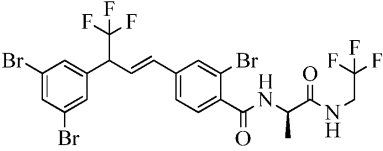
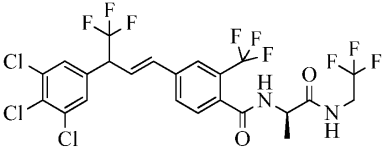
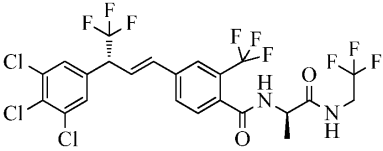
제1항에 있어서, 하기 구조를 갖는 분자.

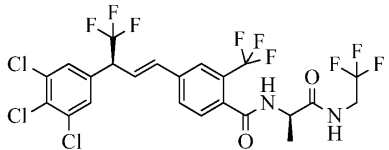
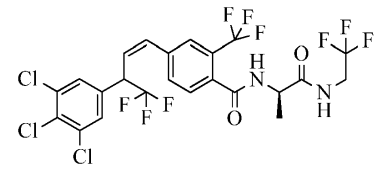
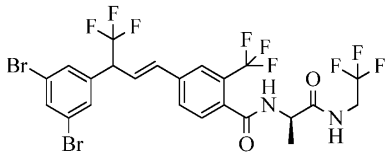
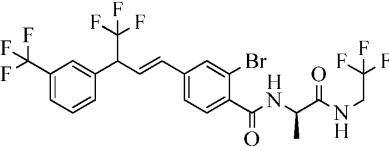
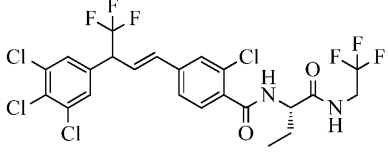
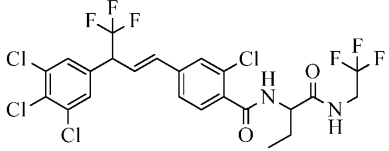
화합물 번호	구조
F1	
F2	
F3	
F4	

F5	
F6	
F7	
F8	
F8A	

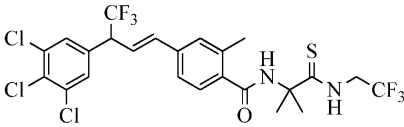
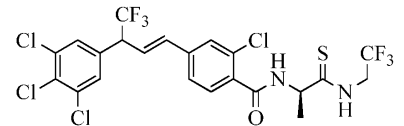
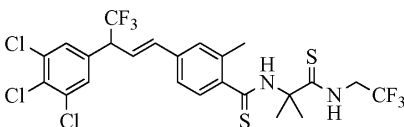
F9	
F10	
F11	
F12	
F13	

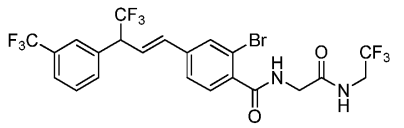
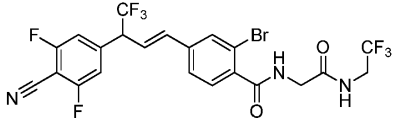
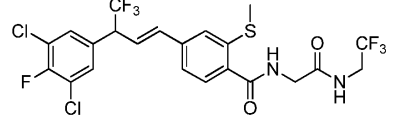
F14	
F15	
F15A	
F16	
F16A	

F17	
F18	
F19	
F20	
F20A	

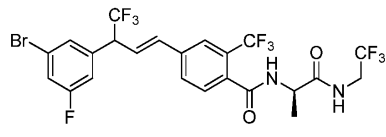
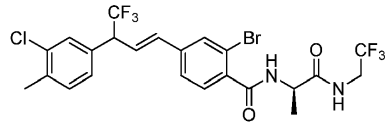
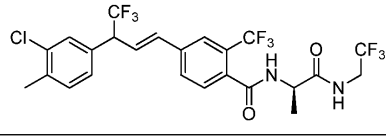
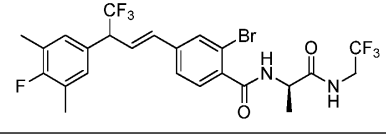
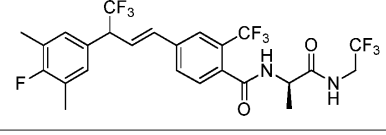
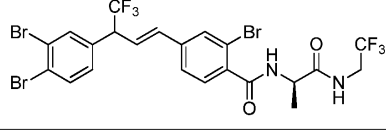
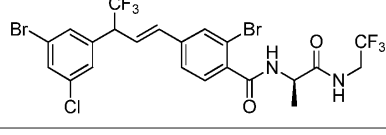
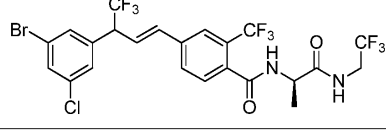
F20B	
F20C	
F21	
F22	
F23	
F23A	

F24	
F25	
F26	
F27	
F28	

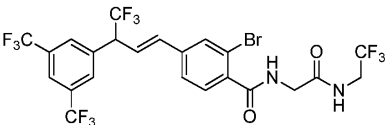
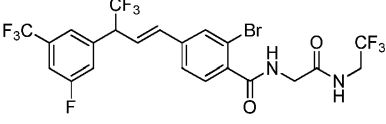
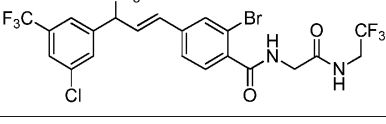
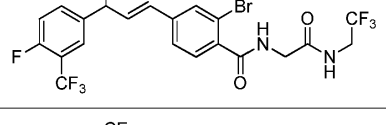
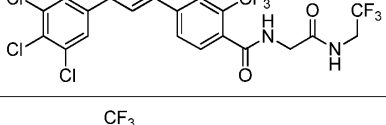
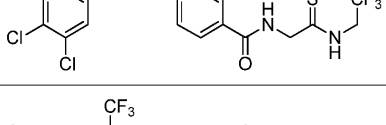
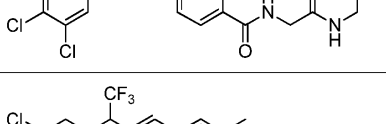
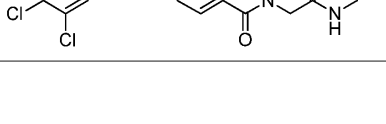
F29	
F30	
F31	

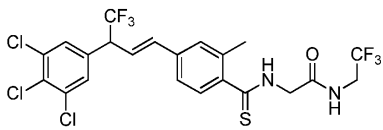
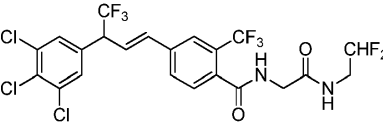
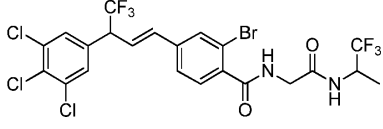
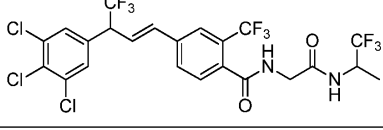
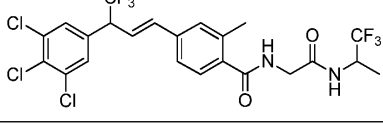
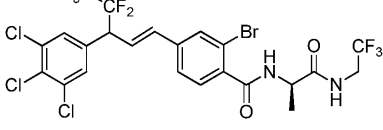
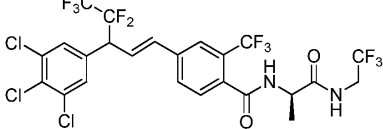
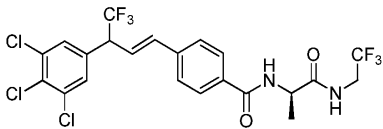
화합물 번호	구조
P1	
P2	
P12	

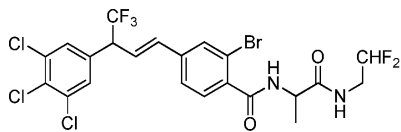
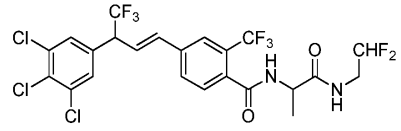
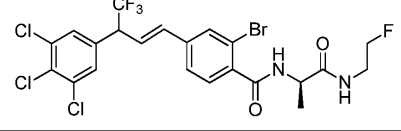
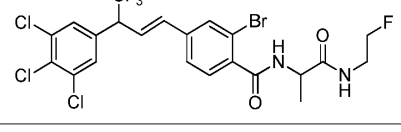
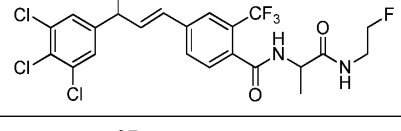
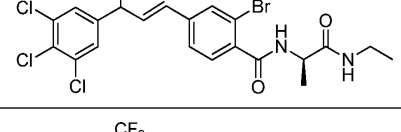
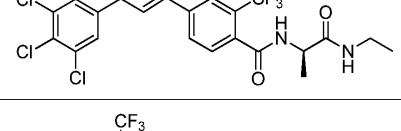
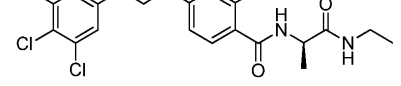
P14	
P15	
P82	
P84	
P156	
P226	
P228	
P298	

P300	
P442	
P444	
P514	
P516	
P568	
P586	
P588	

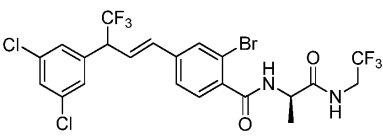
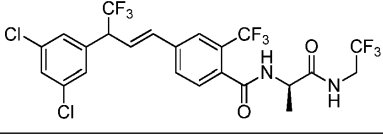
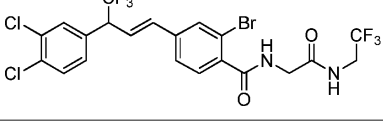
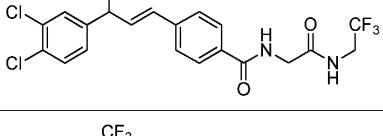
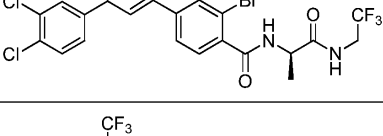
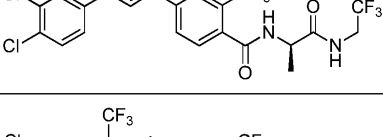
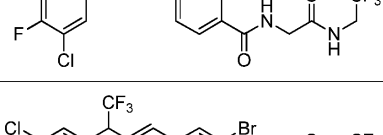
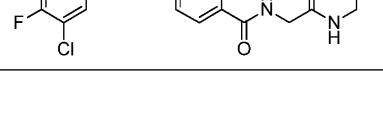
P660	
P730	
P732	
P802	
P804	
P1090	
P1092	
P1197	

P1269	
P1340	
P1411	
P1483	
P1556	
P1558	
P1559	
P1560	

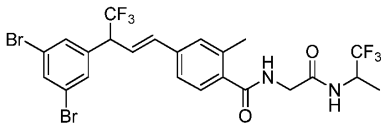
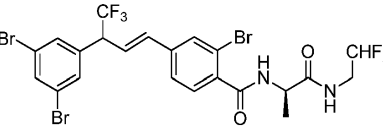
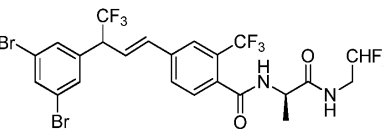
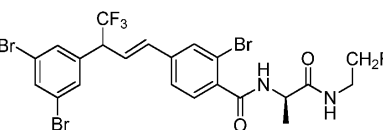
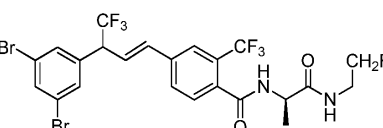
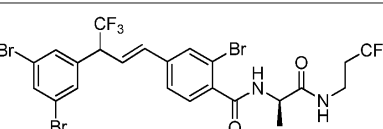
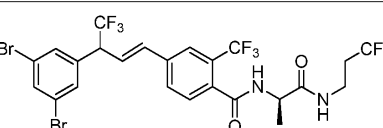
P1564	
P1566	
P1589	
P1591	
P1592	
P1599	
P1601	
P1603	

P1611A	
P1613A	
P1616	
P1616A	
P1618A	
P1621	
P1623	
P1624	

P1631A	
P1633A	
P1636	
P1638	
P1640	
P1641	
P1691	
P1693	

P1696	
P1698	
P1776	
P1781	
P1806	
P1808	
P1862	
P1864	

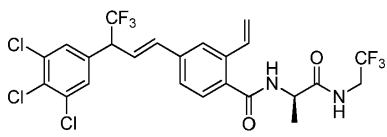
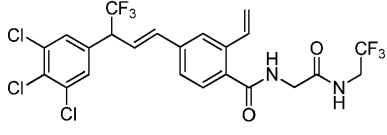
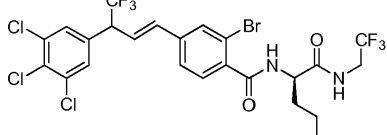
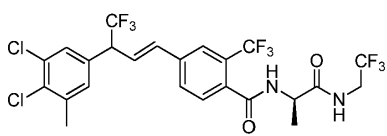
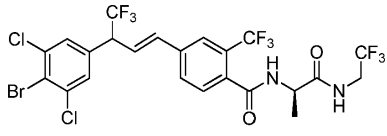
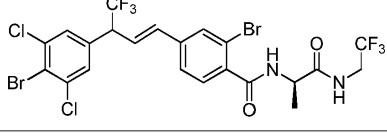
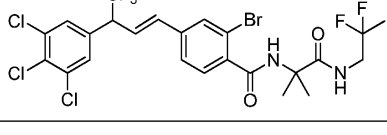
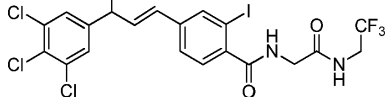
P1866	
P1969	
P1970	
P1971	
P1972	
P2009	
P2010	
P2011	

P2012	
P2036	
P2038	
P2041	
P2043	
P2056	
P2058	

화합물 번호	구조

FA1	
FA2	
FA3	
FA4	
FA5	
FA6	
FA7	
FA8	

FA9	
FA10	
FA11	
FA12	
FA13	
FA14	
FA15	
FA16	

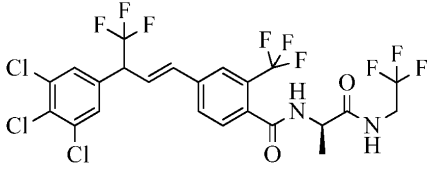
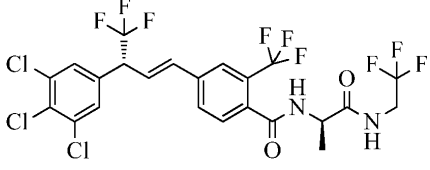
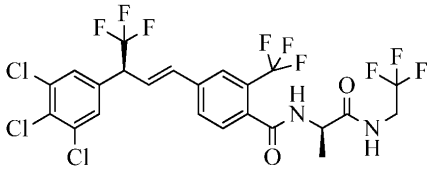
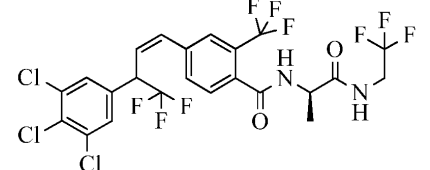
FA17	
FA18	
FA19	
FA20	
FA21	
FA22	
FA23	
FA24	

FA25	
FA26	
FA27	
FA28	
FA29	
FA30	
FA31	

FA32	
FA33	
FA34	

청구항 40

제1항에 있어서, 하기 구조 중 하나를 갖는 분자.

F20	
F20A	
F20B	
F20C	

청구항 41

제1항에 있어서,

(a) 살진드기, 살조, 살균, 살박테리아, 살진균, 제초, 살곤충, 살연체동물, 살선충, 살서, 또는 살바이러스 특성을 갖는 하나 이상의 화합물; 또는

(b) 항섭식제, 조류 기피제, 화학불임제, 제초제 완화제, 곤충 유인제, 곤충 기피제, 포유동물 기피제, 교미 교란제, 식물 활성화제, 식물 성장 조절제, 또는 상승작용제인 하나 이상의 화합물; 또는

(c) (a) 및 (b) 둘 다

를 추가로 포함하는 조성물.

청구항 42

제1항에 있어서, (3-에톡시프로필)수은 브로마이드, 1,2-디클로로프로판, 1,3-디클로로프로펜, 1-메틸시클로프로펜, 1-나프톨, 2-(옥틸티오)에탄올, 2,3,5-트리아이오도벤조산, 2,3,6-TBA, 2,3,6-TBA-디메틸암모늄, 2,3,6-TBA-리튬, 2,3,6-TBA-포타슘, 2,3,6-TBA-소듐, 2,4,5-T, 2,4,5-T-2-부톡시프로필, 2,4,5-T-2-에틸헥실, 2,4,5-T-3-부톡시프로필, 2,4,5-TB, 2,4,5-T-부토메틸, 2,4,5-T-부토틸, 2,4,5-T-부틸, 2,4,5-T-이소부틸, 2,4,5-T-이소옥틸, 2,4,5-T-이소프로필, 2,4,5-T-메틸, 2,4,5-T-펜틸, 2,4,5-T-소듐, 2,4,5-T-트리에틸암모늄, 2,4,5-T-트리아민, 2,4-D, 2,4-D-2-부톡시프로필, 2,4-D-2-에틸헥실, 2,4-D-3-부톡시프로필, 2,4-D-암모늄, 2,4-DB, 2,4-DB-부틸, 2,4-DB-디메틸암모늄, 2,4-DB-이소옥틸, 2,4-DB-포타슘, 2,4-DB-소듐, 2,4-D-부토틸, 2,4-D-부틸, 2,4-D-디에틸암모늄, 2,4-D-디메틸암모늄, 2,4-D-디올아민, 2,4-D-도데실암모늄, 2,4-DEB, 2,4-DEP, 2,4-D-에틸, 2,4-D-헵틸암모늄, 2,4-D-이소부틸, 2,4-D-이소옥틸, 2,4-D-이소프로필, 2,4-D-이소프로필암모늄, 2,4-D-리

튜, 2,4-D-뎀틸, 2,4-D-메틸, 2,4-D-옥틸, 2,4-D-펜틸, 2,4-D-포타슘, 2,4-D-프로필, 2,4-D-소듐, 2,4-D-테푸
 릴, 2,4-D-테트라데실암모늄, 2,4-D-트리에틸암모늄, 2,4-D-트리스(2-히드록시프로필)암모늄, 2,4-D-트롤아민,
 2iP, 2-메톡시에틸수은 클로라이드, 2-페닐페놀, 3,4-DA, 3,4-DB, 3,4-DP, 4-아미노피리딘, 4-CPA, 4-CPA-포타
 슘, 4-CPA-소듐, 4-CPB, 4-CPP, 4-히드록시페네틸 알콜, 8-히드록시퀴놀린 술페이트, 8-페닐머큐리옥시퀴놀린,
 아바멕틴, 아브시스산, ACC, 아세페이트, 아세퀴노실, 아세타미프리트, 아세티온, 아세토클로르, 아세토포스,
 아세토프롤, 아시벤졸라르, 아시벤졸라르-S-메틸, 아시플루오르펜, 아시플루오르펜-메틸, 아시플루오르펜-소듐,
 아클로니펜, 아크렙, 아크리나트린, 아크롤레인, 아크릴로니트릴, 아시페탁스, 아시페탁스-구리, 아시페탁스-아
 연, 알라클로르, 알라니카르브, 알벤다졸, 알디카르브, 알디모르프, 알독시카르브, 알드린, 알레트린, 알리신,
 알리도클로르, 알로사미딘, 알록시딤, 알록시딤-소듐, 알릴 알콜, 알리시카르브, 알로락, 알파-시페르메트린,
 알파-엔도술판, 아메톡트라딘, 아메트리디온, 아메트린, 아미부진, 아미카르바존, 아미카르티아졸, 아미디티온,
 아미도플루메트, 아미도술푸론, 아미노카르브, 아미노시클로피라클로르, 아미노시클로피라클로르-메틸, 아미노
 시클로피라클로르-포타슘, 아미노피탈리드, 아미노피탈리드-포타슘, 아미노피탈리드-트리스(2-히드록시프로필)
 암모늄, 아미프로포스-메틸, 아미프로포스, 아미술브롬, 아미톤, 아미톤 옥살레이트, 아미트라즈, 아미트룰, 암
 모늄 술페이트, 암모늄 α-나프탈렌아세테이트, 아모밤, 암프로필포스, 아나바신, 안시미돌, 아닐라진, 아닐
 로포스, 아니수론, 안트라퀴논, 안투, 아폴레이트, 아라마이트, 아비소산 옥시드, 아소메이트, 아스피린, 아술
 램, 아술람-포타슘, 아술람-소듐, 아티다티온, 아트라톤, 아트라진, 아우레오펜진, 아비글리신, 아비글리신 히
 드로클로라이드, 아자코나졸, 아자디라크틴, 아자페니딘, 아자메티포스, 아짐술푸론, 아진포스-에틸, 아진포스-
 메틸, 아지프로트린, 아지티람, 아조벤젠, 아조시클로틴, 아조토에이트, 아족시스트로빈, 바크메데쉬, 바르반,
 바륨 핵사플루오로실리케이트, 바륨 폴리술퍼드, 바르트린, BCPC, 베플루부타미드, 베날락실, 베날락실-M, 베나
 졸린, 베나졸린-디메틸암모늄, 베나졸린-에틸, 베나졸린-포타슘, 벤카르바존, 벤클로티아즈, 벤디오카르브, 벤
 플루랄린, 벤푸라카르브, 벤푸레세이트, 베노다닐, 베노밀, 베녹사코르, 베녹사포스, 벤퀴녹스, 벤솔푸론, 벤솔
 푸론-메틸, 벤솔리드, 벤솔담, 벤탈루론, 벤타존, 벤타존-소듐, 벤티아발리카르브, 벤티아발리카르브-이소프로
 필, 벤티아졸, 벤트라닐, 벤자독스, 벤자독스-암모늄, 벤즈알코늄 클로라이드, 벤자마크릴, 벤자마크릴-이소부
 틸, 벤자모르프, 벤즈펜디존, 벤지프람, 벤조비시클론, 벤조페남, 벤조플루오르, 벤조히드록삼산,
 벤족시메이트, 벤조일프로프, 벤조일프로프-에틸, 벤즈티아주론, 벤질 벤조에이트, 벤질아데닌, 베르베린, 베르
 베린 클로라이드, 베타-시플루트린, 베타-시페르메트린, 베타사진, 비시클로피론, 비페나제이트, 비페녹스, 비
 펜트린, 비푸준치(bifujunzhi), 빌라나포스, 빌라나포스-소듐, 비나파크릴, 빙링시아오(bingqingxiao), 비오알
 레트린, 비오에타노메트린, 비오페르메트린, 비오레스메트린, 비페닐, 비스아지르, 비스메르티아졸,
 비스피리박, 비스피리박-소듐, 비스트리플루론, 비테르타놀, 비티오놀, 빅사펜, 블라스티시딘-S, 보락스, 보르
 도(Bordeaux) 혼합물, 봉산, 보스칼리드, 브라시놀리드, 브라시놀리드-에틸, 브레비코민, 브로디파콤, 브로펜발
 레레이트, 브로플루트리네이트, 브로마실, 브로마실-리튬, 브로마실-소듐, 브로마디올론, 브로메탈린, 브로메트
 린, 브롬벤진포스, 브로모아세트아미드, 브로모보닐, 브로모부티드, 브로모시클렌, 브로모-DDT, 브로모페녹심,
 브로모포스, 브로모포스-에틸, 브로모프로필레이트, 브로모탈로닐, 브로목시닐, 브로목시닐 부티레이트, 브로목
 시닐 헵타노에이트, 브로목시닐 옥타노에이트, 브로목시닐-포타슘, 브롬피라존, 브로무코나졸, 브로노폴, 부카
 르폴레이트, 부펜카르브, 부미니포스, 부피리메이트, 부프로페진, 버건디(Burgundy) 혼합물, 부술판, 부타카르
 브, 부타클로르, 부타페나실, 부타미포스, 부타티오포스, 부테나클로르, 부테트린, 부티다졸, 부티오베이트, 부
 티우론, 부토카르복심, 부토네이트, 부토피로복심, 부톡시카르복심, 부트랄린, 부트록시딤, 부투론, 부틸아민,
 부틸레이트, 카코딜산, 카두사포스, 카펜스트롤, 칼슘 아르세네이트, 칼슘 클로레이트, 칼슘 시안아미드, 칼슘
 폴리술퍼드, 칼빈포스, 캄벤디클로르, 캄페클로르, 캄포르, 캄타폴, 캄탄, 카르바모르프, 카르바놀레이트, 카르
 바틸, 카르바술람, 카르벤다짐, 카르벤다짐 벤젠술포네이트, 카르벤다짐 술페이트, 카르베타미드, 카르보푸란,
 이황화탄소, 사염화탄소, 카르보페노티온, 카르보술판, 카르복사졸, 카르복시드, 카르복신, 카르펜트라존, 카르
 펜트라존-에틸, 카르프로파미드, 카르담, 카르담 히드록클로라이드, 카르마크롤, 카르본, CDEA, 셀로시딘,
 CEPC, 세탈루레, 체션트(Cheshunt) 혼합물, 키노메티오나트, 키토산, 클로벤티아존, 클로메톡시펜, 클로랄로스,
 클로람벤, 클로람벤-암모늄, 클로람벤-디올아민, 클로람벤-메틸, 클로람벤-메틸암모늄, 클로람벤-소듐, 클로라
 민 인, 클로람페니콜, 클로라니포르메탄, 클로라닐, 클로라노크릴, 클로란트라닐리프롤, 클로라지포프, 클로라
 지포프-프로파르길, 클로라진, 클로르벤시드, 클로르벤주론, 클로르비시클렌, 클로르브로무론, 클로르부팜, 클
 로르단, 클로르데콘, 클로르디메포름, 클로르디메포름 히드록클로라이드, 클로렐렌트린, 클로르에톡시포스, 클
 로레투론, 클로르페나, 클로르페나-암모늄, 클로르페나-소듐, 클로르페나피르, 클로르페나졸, 클로르페네톨, 클
 로르펜프로프, 클로르펜손, 클로르펜술퍼드, 클로르펜빈포스, 클로르플루아주론, 클로르플루라졸,
 클로르플루렌, 클로르플루렌-메틸, 클로르플루레놀, 클로르플루레놀-메틸, 클로리다존, 클로리무론, 클로리무론
 -에틸, 클로르메포스, 클로르메퀴트, 클로르메퀴트 클로라이드, 클로르니딘, 클로르니트로펜,

클로로벤질레이트, 클로로디니트로나프탈렌, 클로로포름, 클로로메부포름, 클로로메티우론, 클로로네브, 클로로파시논, 클로로파시논-소듐, 클로로피크린, 클로로폰, 클로로프로필레이트, 클로로탈로닐, 클로로톨루론, 클로록수론, 클로록시닐, 클로르포늄, 클로르포늄 클로라이드, 클로르폭심, 클로르프라조포스, 클로르프로카르브, 클로르프로팜, 클로르피리포스, 클로르피리포스-메틸, 클로르퀴녹스, 클로르숄푸론, 클로르탈, 클로르탈-디메틸, 클로르탈-모노메틸, 클로르티아미드, 클로르티오포스, 클로줄리네이트, 쿨린 클로라이드, 크로마페노지드, 시네린 I, 시네린 II, 시네린, 시니돈-에틸, 신메틸린, 시노숄푸론, 시오부티드, 시스아닐리드, 시스메트린, 클레토딤, 클렘바졸, 클리오디네이트, 클로디나포프, 클로디나포프-프로파르길, 클로에토카르브, 클로펜세트, 클로펜세트-포타슘, 클로펜데진, 클로피브르산, 클로포프, 클로포프-이소부틸, 클로마존, 클로메프로프, 클로프로프, 클로프로시딤, 클로피랄리드, 클로피랄리드-메틸, 클로피랄리드-올아민, 클로피랄리드-포타슘, 클로피랄리드-트리스(2-히드록시프로필)암모늄, 클로퀸토세트, 클로퀸토세트-멕실, 클로란숄람, 클로란숄람-메틸, 클로산텔, 클로티아니딘, 클로트리마졸, 클록시포낙, 클로시포낙-소듐, CMA, 코들렐루레, 콜로포네이트, 구리 아세테이트, 구리 아세토아르세나이트, 구리 아르세네이트, 구리 카르보네이트, 염기성, 구리 히드록시드, 구리 나프테네이트, 구리 올레네이트, 구리 옥시클로라이드, 구리 실리케이트, 구리 술페이트, 구리 아연 크로메이트, 쿠마클로르, 쿠마푸릴, 쿠마포스, 쿠마테트라릴, 쿠미토에이트, 쿠목시스트로빈, CPMC, CPMF, CPPC, 크레다진, 크레졸, 크리미딘, 크로타미돈, 크로록시포스, 크루포메이트, 크리올라이트, 큐-루어(cue-lure), 쿠프라네브, 쿠밀루론, 쿠프로밤, 산화제1구리, 쿠르쿠메놀, 시안아미드, 시아나트린, 시아나진, 시아노펜포스, 시아노포스, 시안토에이트, 시안트라닐리프롤, 시아조파미드, 시부트린, 시클라푸라미드, 시클라닐리드, 시클레트린, 시클로에이트, 시클로헥시미드, 시클로프레이트, 시클로프로트린, 시클로숄파루론, 시클록사프리드, 시클록시딤, 시클루론, 시에노피라펜, 시플루페나미드, 시플루메토헤, 시플루트린, 시할로포프, 시할로포프-부틸, 시할로트린, 시핵사틴, 시미아졸, 시미아졸 히드로클로라이드, 시목사닐, 시오메트리닐, 시펜다졸, 시페르메트린, 시페르퀴트, 시페르퀴트 클로라이드, 시페노트린, 시프라진, 시프라졸, 시프로코나졸, 시프로디닐, 시프로푸람, 시프로미드, 시프로숄파미드, 시로마진, 시티오에이트, 다이무론, 달라폰, 달라폰-칼슘, 달라폰-마그네슘, 달라폰-소듐, 다미노지드, 다요우통(dayoutong), 다조메트, 다조메트-소듐, DBCP, d-캄포르, DCIP, DCPTA, DDT, 데바카르브, 데카펜틴, 데카르보푸란, 데히드로아세트산, 델라클로르, 델타메트린, 데메피온, 데메피온-0, 데메피온-S, 데메톤, 데메톤-메틸, 데메톤-0, 데메톤-0-메틸, 데메톤-S, 데메톤-S-메틸, 데메톤-S-메틸숄폰, 데스메디팜, 데스메트린, d-판실루퀘빙주치(fanshiluquebingjuzhi), 디아펜티우론, 디알리포스, 디-알레이트, 디아미다포스, 규조토, 디아지논, 디부틸 프탈레이트, 디부틸 숙시네이트, 디캄바, 디캄바-디글리콜아민, 디캄바-디메틸암모늄, 디캄바-디올아민, 디캄바-이소프로필암모늄, 디캄바-메틸, 디캄바-올아민, 디캄바-포타슘, 디캄바-소듐, 디캄바-트롤아민, 디캄톤, 디클로베닐, 디클로펜티온, 디클로플루아니드, 디클론, 디클로랄우레아, 디클로르벤주론, 디클로르플루레놀, 디클로르플루레놀-메틸, 디클로르메이트, 디클로르미드, 디클로로펜, 디클로르프로프, 디클로르프로프-2-에틸헥실, 디클로르프로프-부토틸, 디클로르프로프-디메틸암모늄, 디클로르프로프-에틸암모늄, 디클로르프로프-이속틸, 디클로르프로프-메틸, 디클로르프로프-P, 디클로르프로프-P-2-에틸헥실, 디클로르프로프-P-디메틸암모늄, 디클로르프로프-포타슘, 디클로르프로프-소듐, 디클로르보스, 디클로줄린, 디클로부트라졸, 디클로시메트, 디클로포프, 디클로포프-메틸, 디클로메진, 디클로메진-소듐, 디클로란, 디클로숄람, 디코폴, 디쿠마롤, 디크레실, 디크로토포스, 디시클라닐, 디시클로논, 디엘드린, 디에노클로르, 디에탐퀴트, 디에탐퀴트 디클로라이드, 디에타틸, 디에타틸-에틸, 디에토헤카르브, 디에톨레이트, 디에틸 피로카르보네이트, 디에틸톨루아미드, 디페나콤, 디페노코나졸, 디페노펜텐, 디페노펜텐-에틸, 디페녹수론, 디펜조퀴트, 디펜조퀴트 메틸술페이트, 디페티알론, 디플로비다진, 디플루벤주론, 디플루페니칸, 디플루펜조피르, 디플루펜조피르-소듐, 디플루메토람, 디케굴락, 디케굴락-소듐, 딜로르, 디마티프, 디메플루트린, 디메폭스, 디메푸론, 디메피페레이트, 디메타클론, 디메탄, 디메타카르브, 디메타클로르, 디메타메트린, 디메테나미드, 디메테나미드-P, 디메티핀, 디메티리물, 디메토에이트, 디메토모르프, 디메트린, 디메틸 카르베이트, 디메틸 프탈레이트, 디메틸빈포스, 디메틸란, 디멕사노, 디미다존, 디목시스트로빈, 디넥스, 디넥스-디클렉신, 딩주네주오(dingjunezuo), 디니코나졸, 디니코나졸-M, 디니트라민, 디노부톤, 디노캡, 디노캡-4, 디노캡-6, 디녹톤, 디노페네이트, 디노펜톤, 디노프로프, 디노삼, 디노세브, 디노세브 아세테이트, 디노세브-암모늄, 디노세브-디올아민, 디노세브-소듐, 디노세브-트롤아민, 디노숄폰, 디노테푸란, 디노테르브, 디노테르브 아세테이트, 디노테르본, 디오페놀란, 디옥사벤조포스, 디옥사카르브, 디옥사티온, 디파시논, 디파시논-소듐, 디페나미드, 디페닐 숄폰, 디페닐아민, 디프로팔린, 디프로페트린, 디피리티온, 디퀴트, 디퀴트 디브로마이드, 디스파를루레, 디술, 디숄피람, 디숄포톤, 디술-소듐, 디탈립포스, 디티아논, 디티크로포스, 디티오에테르, 디티오피르, 디우론, d-리모넨, DMPA, DNOC, DNOC-암모늄, DNOC-포타슘, DNOC-소듐, 도데모르프, 도데모르프 아세테이트, 도데모르프 벤조에이트, 도디신, 도디신 히드로클로라이드, 도디신-소듐, 도딘, 도페나핀, 도미니칼루레, 도라멕틴, 드라족솔론, DSMA, 두폴린, EBEP, EBP, 엑디스테론, 에디펜포스, 에글리나진, 에글리나진-에틸,

에마멕틴, 에마멕틴 벤조에이트, EMPC, 엠펜트린, 엔도술판, 엔도탈, 엔도탈-디아모늄, 엔도탈-디포타슘, 엔도탈-디소듐, 엔도티온, 엔드린, 에네스트로부린, EPN, 에포클레온, 에포페노난, 에폭시코나졸, 에프리노멕틴, 에프로나즈, EPTC, 에르본, 에르고칼시페롤, 에를루지시안카오안(erlujixiancaoan), 에스데팔레트린, 에스펜발레레이트, 에스프로카르브, 에타셀라실, 에타코나졸, 에타포스, 에탐, 에타복삼, 에타클로르, 에탈플루랄린, 에타메트술푸론, 에타메트술푸론-메틸, 에타프로클로르, 에테폰, 에티디무론, 에티오펜카르브, 에티올레이트, 에티온, 에티오진, 에티프롤, 에티리몰, 에토에이트-메틸, 에토푸메세이트, 에토헥사디올, 에토프로포스, 에톡시펜, 에톡시펜-에틸, 에톡시퀸, 에톡시술푸론, 에티클로제이트, 에틸 포르메이트, 에틸 α -나프탈렌아세테이트, 에틸-DDD, 에틸렌, 에틸렌 디브로마이드, 에틸렌 디클로라이드, 에틸렌 옥시드, 에틸리신, 에틸수는 2,3-디히드록시프로필 메르캅티드, 에틸수는 아세테이트, 에틸수는 브로마이드, 에틸수는 클로라이드, 에틸수는 포스페이트, 에티노펜, 에트니프로미드, 에토벤자니드, 에토펜프록스, 에톡사졸, 에트리디아졸, 에트림포스, 유게놀, EXD, 과목사돈, 팜푸르, 페나미돈, 페나미노술풀, 페나미포스, 페나파닐, 페나리몰, 페나술람, 페나자플로르, 페나자퀸, 펜부코나졸, 펜부타틴 옥시드, 펜클로라졸, 펜클로라졸-에틸, 펜클로르포스, 펜클로림, 페네타카르브, 펜플루트린, 펜푸람, 펜헥사미드, 페니트로판, 페니트로티온, 펜준통(fenjuntong), 페노부카르브, 페노프로프, 페노프로프-3-부톡시프로필, 페노프로프-부토메틸, 페노프로프-부토틸, 페노프로프-부틸, 페노프로프-이속틸, 페노프로프-메틸, 페노프로프-포타슘, 페노티오카르브, 페녹사크림, 페녹사닐, 페녹사프로프, 페녹사프로프-에틸, 페녹사프로프-P, 페녹사프로프-P-에틸, 페녹사술풀, 페녹시카르브, 펜피클로닐, 펜피리트린, 펜프로파트린, 펜프로피딘, 펜프로피모르프, 펜피라자민, 펜피록시메이트, 펜리다존, 펜리다존-포타슘, 펜리다존-프로필, 펜손, 펜술포티온, 펜테라콜, 펜티아프로프, 펜티아프로프-에틸, 펜티온, 펜티온-에틸, 펜틴, 펜틴 아세테이트, 펜틴 클로라이드, 펜틴 히드록시드, 펜트라자미드, 펜트리파닐, 페누론, 페누론 TCA, 펜발레레이트, 페르밤, 페립존, 황산제1철, 피프로닐, 플람프로프, 플람프로프-이소프로필, 플람프로프-M, 플람프로프-메틸, 플람프로프-M-이소프로필, 플람프로프-M-메틸, 플라자술풀, 플로쿠마펜, 플로메토퀸, 플로니카미드, 플로라술람, 플루아크리피럼, 플루아지포프, 플루아지포프-부틸, 플루아지포프-메틸, 플루아지포프-P, 플루아지포프-P-부틸, 플루아지남, 플루아줄레이트, 플루아주론, 플루벤디아미드, 플루벤즈이민, 플루카르바존, 플루카르바존-소듐, 플루세토술풀, 플루클로랄린, 플루코푸론, 플루시클록수론, 플루시트리네이트, 플루디옥소닐, 플루에네틸, 플루엔술풀, 플루페나세트, 플루페네림, 플루페니칸, 플루페녹수론, 플루펜프록스, 플루펜피르, 플루펜피르-에틸, 플루피프롤, 플루메트린, 플루메토베르, 플루메트랄린, 플루메트술람, 플루메진, 플루미클로락, 플루미클로락-펜틸, 플루미옥사진, 플루미프로핀, 플루모르프, 플루오메투론, 플루오피콜리드, 플루오피람, 플루오르벤시드, 플루오리다미드, 플루오로아세트아미드, 플루오로디펜, 플루오로글리코펜, 플루오로글리코펜-에틸, 플루오로이미드, 플루오로미딘, 플루오로니트로펜, 플루오티우론, 플루오티리마졸, 플루옥사스트로빈, 플루폭삼, 플루프로파실, 플루프로파딘, 플루프로파네이트, 플루프로파네이트-소듐, 플루피라디푸론, 플루피르술푸론, 플루피르술푸론-메틸, 플루피르술푸론-메틸-소듐, 플루퀸코나졸, 플루라졸, 플루레놀, 플루레놀-부틸, 플루레놀-메틸, 플루리돈, 플루로클로리돈, 플루록시피르, 플루록시피르-부토메틸, 플루록시피르-맵틸, 플루르프리미돌, 플루르술라미드, 플루르타몬, 플루실라졸, 플루술파미드, 플루티아세트, 플루티아세트-메틸, 플루티아닐, 플루톨라닐, 플루트리아폴, 플루발리네이트, 플루사피록사드, 플룩소페닐, 플루페트, 포메사펜, 포메사펜-소듐, 포노포스, 포람술푸론, 포르클로르페누론, 포름알데히드, 포르메타네이트, 포르메타네이트 히드로클로라이드, 포르모티온, 포름파라네이트, 포름파라네이트 히드로클로라이드, 포사민, 포사민-암모늄, 포세틸, 포세틸-알루미늄, 포스메틸란, 포스피레이트, 포스티아제이트, 포스티에탄, 프론탈린, 푸베리다졸, 푸카오징(fucaojing), 푸카오미, 푸나이헤카올링(funaihecaoling), 푸네티오우레아, 푸랄란, 푸랄락실, 푸라메트린, 푸라메트피르, 푸라티오카르브, 푸르카르바닐, 푸르코나졸, 푸르코나졸-시스, 푸레트린, 푸르푸랄, 푸릴라졸, 푸르메시클록스, 푸로파네이트, 푸릴옥시펜, 감마-시알로트린, 감마-HCH, 게니트, 지베렐산, 지베렐린, 글리프토르, 글루포시네이트, 글루포시네이트-암모늄, 글루포시네이트-P, 글루포시네이트-P-암모늄, 글루포시네이트-P-소듐, 글리오딘, 글리옥심, 글리포세이트, 글리포세이트-디아모늄, 글리포세이트-디메틸암모늄, 글리포세이트-이소프로필암모늄, 글리포세이트-모노암모늄, 글리포세이트-포타슘, 글리포세이트-세스퀴소듐, 글리포세이트-트리메슘, 글리포신, 고시플루레, 그란들루레, 그리세오폴빈, 구아자틴, 구아자틴 아세테이트, 할라크리네이트, 할펜프록스, 할로페노지드, 할로사펜, 할로술푸론, 할로술푸론-메틸, 할록시딘, 할록시포프, 할록시포프-에토틸, 할록시포프-메틸, 할록시포프-P, 할록시포프-P-에토틸, 할록시포프-P-메틸, 할록시포프-소듐, HCH, 헤멜, 헴파, HEOD, 헵타클로르, 헵테노포스, 헵토파르길, 헵테로포스, 헥사클로로아세톤, 헥사클로로벤젠, 헥사클로로부타디엔, 헥사클로로펜, 헥사코나졸, 헥사플루무론, 헥사플루레이트, 헥살루레, 헥사미드, 헥사지논, 헥실티오포스, 헥시티아족스, HHDN, 홀로술풀, 후안카이위(huancaiwo), 후앙가올링(huangcaoling), 후안준주오(huanjunzuo), 히드라메틸논, 히드라르가펜, 수화 석회, 시안화수소, 히드로펜, 히백사졸, 히퀸카르브, IAA, IBA, 이카리딘, 이마잘릴, 이마잘릴 니트레이트, 이마잘릴 술페이트, 이마자메타벤즈, 이마자메타벤즈-메틸, 이마자목스, 이마자목

스-암모늄, 이마자픽, 이마자픽-암모늄, 이마자피르, 이마자피르-이소프로필암모늄, 이마자퀸, 이마자퀸-암모늄, 이마자퀸-메틸, 이마자퀸-소듐, 이마제타피르, 이마제타피르-암모늄, 이마조솔푸론, 이미벤코나졸, 이미시아포스, 이미다클로프리드, 이미다클로티즈, 이미녹타딘, 이미녹타딘 트리아세테이트, 이미녹타딘 트리알베실레이트, 이미프로트린, 이나벤피드, 인다노판, 인다지플람, 인독사카르브, 이네진, 아이오도보닐, 아이오도카르브, 아이오도메탄, 아이오도솔푸론, 아이오도솔푸론-메틸, 아이오도솔푸론-메틸-소듐, 이오펜솔푸론, 이오펜솔푸론-소듐, 이옥시닐, 이옥시닐 옥타노에이트, 이옥시닐-리튬, 이옥시닐-소듐, 이파진, 이프코나졸, 이프펜카르바존, 이프로벤포스, 이프로디온, 이프로발리카르브, 이프리미담, 입스디엔올, 입센올, IPSP, 이사미도포스, 이사조포스, 이소벤잔, 이소카르바미드, 이소카르보포스, 이소실, 이소드린, 이소펜포스, 이소펜포스-메틸, 이솔란, 이소메티오진, 이소노루론, 이소폴리네이트, 이소프로카르브, 이소프로팔린, 이소프로티올란, 이소프로투론, 이소피라잠, 이소피리물, 이소티오네이트, 이소티아닐, 이소우론, 이소발레디온, 이속사벤, 이속사클로르톨, 이속사디펜, 이속사디펜-에틸, 이속사플루톨, 이속사피리포르, 이속사티온, 이베르멕틴, 이조팜포스, 자포닐루레, 자포트린스, 자스몰린 I, 자스몰린 II, 자스몬산, 지아후양충종(jiahuangchongzong), 지아지젠시아올린(jiajizengxiaolin), 지아시양준치(jiaxiangjunzhi), 지에카오완(jiecaowan), 지에카옥시(jiecaoxi), 조드펜포스, 유충 호르몬 I, 유충 호르몬 II, 유충 호르몬 III, 카데트린, 카르부틸레이트, 카레타잔, 카레타잔-포타슘, 카수가마이신, 카수가마이신 히드로클로라이드, 케준린, 켈레반, 케토스피라독스, 케토스피라독스-포타슘, 키네티, 키노프렌, 크레속심-메틸, 쿠이카옥시, 락토펴, 람다-시할로트린, 라틸루레, 납 아르세네이트, 레나실, 레피멕틴, 렐토포스, 린단, 리네아틴, 리누론, 리립포스, 리틀루레, 루플루레, 루페누론, 르브딩준치(lddingjunzhi), 르복시아나올린(lvbiancaolin), 리티다티온, MAA, 말라티온, 말레산 히드라지드, 말로노벤, 말토텍스트린, MAMA, 만코퍼, 만코제브, 만디프로파미드, 마네브, 마트린, 마지독스, MCPA, MCPA-2-에틸헥실, MCPA-부틸, MCPA-부틸, MCPA-디메틸암모늄, MCPA-디올아민, MCPA-에틸, MCPA-이소부틸, MCPA-이속틸, MCPA-이소프로필, MCPA-메틸, MCPA-올아민, MCPA-포타슘, MCPA-소듐, MCPA-티오에틸, MCPA-트올아민, MCPB, MCPB-에틸, MCPB-메틸, MCPB-소듐, 메베닐, 메카르밤, 메카르빈지드, 메카르폰, 메코프로프, 메코프로프-2-에틸헥실, 메코프로프-디메틸암모늄, 메코프로프-디올아민, 메코프로프-에타닐, 메코프로프-이속틸, 메코프로프-메틸, 메코프로프-P, 메코프로프-P-2-에틸헥실, 메코프로프-P-디메틸암모늄, 메코프로프-P-이소부틸, 메코프로프-포타슘, 메코프로프-P-포타슘, 메코프로프-소듐, 메코프로프-트올아민, 메디메프름, 메디노테르브, 메디노테르브 아세테이트, 메들루레, 메페나세트, 메펜피르, 메펜피르-디에틸, 메플루이디드, 메플루이디드-디올아민, 메플루이디드-포타슘, 메가톱산, 메나존, 메파니피림, 메페르플루트린, 메페네이트, 메포스폴란, 메피퀴트, 메피퀴트 클로라이드, 메피퀴트 펜타보레이트, 메프로닐, 멍틸디노캡, 염화제2수은, 산화제2수은, 염화제1수은, 메르포스, 메소프라진, 메소솔푸론, 메소솔푸론-메틸, 메소트리온, 메솔펜, 메솔펜포스, 메타플루미존, 메탈락실, 메탈락실-M, 메타알데히드, 메탐, 메탐-암모늄, 메타미도포스, 메타미트론, 메탐-포타슘, 메탐-소듐, 메타자클로르, 메타조솔푸론, 메타족솔론, 메트코나졸, 메테파, 메트플루라존, 메타벤즈티아주론, 메타크리로스, 메탈프로팔린, 메타미도포스, 메타술포카르브, 메타졸, 메트푸록삼, 메티다티온, 메티오벤카르브, 메티오카르브, 메티오피리솔푸론, 메티오테파, 메티오졸린, 메티우론, 메토크로토포스, 메토메론, 메토밀, 메토프렌, 메토프로트린, 메토킨-부틸, 메토티린, 메톡시클로르, 메톡시페노지드, 메톡시페논, 메틸 아폴레이트, 메틸 브로마이드, 메틸 유게놀, 메틸 아이오다이드, 메틸 이소티오시아네이트, 메틸아세토포스, 메틸클로로포름, 메틸덱론, 메틸렌 클로라이드, 메틸수은 벤조에이트, 메틸수은 디시안디아미드, 메틸수은 펜타클로로페녹시드, 메틸네오데칸아미드, 메티람, 메토벤주론, 메토브로무론, 메토플루트린, 메톨라클로르, 메톨카르브, 메토미노스트로빈, 메토솔람, 메톡사디아존, 메톡수론, 메트라페논, 메트리부진, 메트술포박스, 메트솔푸론, 메트솔푸론-메틸, 메빈포스, 맥사카르베이트, 미에슈안(mieshuan), 밀베멕틴, 밀베마이신 옥심, 밀네브, 미파폭스, 미렉스, MNAF, 모구춘(moguchun), 물리네이트, 몰로솔탐, 모날리드, 모니소우론, 모노클로로아세트산, 모노크로토포스, 모노리누론, 모노솔푸론, 모노솔푸론-에스테르, 모누론, 모누론 TCA, 모르팜퀴트, 모르팜퀴트 디클로라이드, 모록시딘, 모록시딘 히드로클로라이드, 모르포티온, 모르지드, 목시텍틴, MSMA, 무스칼루레, 미클로부타닐, 미클로졸린, N-(에틸수은)-p-톨루엔술포아닐리드, 나밤, 나프탈로포스, 날레드, 나프탈렌, 나프탈렌아세트아미드, 나프탈산 무수물, 나프톡시아세트산, 나프로아닐리드, 나프로파미드, 나프탈람, 나프탈람-소듐, 나타마이신, 네부론, 니클로사미드, 니클로사미드-올아민, 니코솔푸론, 니코틴, 니플루리디드, 니피라클로펜, 니텐피람, 니티아진, 니트랄린, 니트라피린, 니트릴카르브, 니트로펜, 니트로플루오르펜, 니트로스티렌, 니트로탈-이소프로필, 노르보르미드, 노르플루라존, 노르니코틴, 노루론, 노발루론, 노비플루무론, 누아리물, OCH, 옥타클로로디프로필 에테르, 옥틸리논, 오프레이스, 오페토에이트, 오르벤카르브, 오르프탈루레, 오르토-디클로로벤젠, 오르토솔파무론, 오락탈루레, 오리사스트로빈, 오리잘린, 오스톨, 오스트라몬, 옥사베트리닐, 옥사디아르길, 옥사디아존, 옥사디실, 옥사메이트, 옥사밀, 옥사피라존, 옥사피라존-디몰아민, 옥사피라존-소듐, 옥사솔푸론, 옥사지클로메폰, 옥신-구리, 옥솔린산, 옥스포코나졸, 옥스포코나졸

푸마레이트, 옥시카르복신, 옥시데메톤-메틸, 옥시데프로포스, 옥시디술포톤, 옥시플루오르펜, 옥시마트린, 옥시테트라시클린, 옥시테트라시클린 히드로클로라이드, 파클로부트라졸, 파이충딩(paichongding), 파라-디클로로벤젠, 파라플루론, 파라퀴트, 파라퀴트 디클로라이드, 파라퀴트 디메틸술페이트, 파라티온, 파라티온-메틸, 파리놀, 페블레이트, 페푸라조에이트, 펠라르곤산, 펜코나졸, 펜시쿠론, 펜디메탈린, 펜플루엔, 펜플루론, 페녹스숴람, 펜타클로로페놀, 펜타노클로르, 펜티오피라드, 펜트메트린, 펜톡사존, 피플루이돈, 페르메트린, 페톡사미드, 페나마크릴, 페나진 옥시드, 펜이소팜, 펜캅톤, 펜메디팜, 펜메디팜-에틸, 페노벤주론, 페노트린, 펜프록시드, 펜토에이트, 페닐머큐리우레아, 페닐수은 아세테이트, 페닐수은 클로라이드, 피로카테콜의 페닐수은 유도체, 페닐수은 니트레이트, 페닐수은 살리실레이트, 포레이트, 포스아세틸, 포살론, 포스디펜, 포스폴란, 포스폴란-메틸, 포스글리신, 포스메트, 포스니클로르, 포스파미돈, 포스핀, 포스포카르브, 인, 포스틴, 폭심, 폭심-메틸, 프탈리드, 피클로람, 피클로람-2-에틸헥실, 피클로람-이소틸, 피클로람-메틸, 피클로람-올아민, 피클로람-포타슘, 피클로람-트리에틸암모늄, 피클로람-트리스(2-히드록시프로필)암모늄, 피콜리나펜, 피콕시스트로빈, 핀돈, 핀돈-소듐, 피녹사텐, 피페탈린, 피페로닐 부톡시드, 피페로닐 시클로넨, 피페로포스, 피프록타닐, 피프록타닐 브로마이드, 피프로탈, 피리메타포스, 피리미카르브, 피리미옥시포스, 피리미포스-에틸, 피리미포스-메틸, 폴리페네이트, 폴리카르바메이트, 폴리옥신, 폴리옥소림, 폴리옥소림-아연, 폴리티알란, 포타슘 아르세나이트, 포타슘 아지드, 포타슘 시아네이트, 포타슘 지베렐레이트, 포타슘 나프테네이트, 포타슘 폴리숴피드, 포타슘 티오시아네이트, 포타슘 α -나프탈렌아세테이트, pp'-DDT, 프랄레트린, 프레코센 I, 프레코센 II, 프레코센 III, 프레틸라클로르, 프리미도포스, 프리미숴푸론, 프리미숴푸론-메틸, 프로베나졸, 프로클로라즈, 프로클로라즈-망가니즈, 프로클로놀, 프로시아진, 프로시미돈, 프로디아민, 프로페노포스, 프로플루아졸, 프로플루랄린, 프로플루트린, 프로폭시딤, 프로글리나진, 프로글리나진-에틸, 프로헥사디온, 프로헥사디온-칼슘, 프로히드로자스몬, 프로마실, 프로파카르브, 프로메톤, 프로메트린, 프로무리트, 프로파클로르, 프로파미딘, 프로파미딘 디히드로클로라이드, 프로파모카르브, 프로파모카르브 히드로클로라이드, 프로파닐, 프로파포스, 프로파퀴자포프, 프로파르기트, 프로파르트린, 프로파진, 프로페탐포스, 프로팜, 프로피코나졸, 프로피네브, 프로피소클로르, 프로폭수르, 프로폭시카르바존, 프로폭시카르바존-소듐, 프로필 이소메, 프로피리숴푸론, 프로피자미드, 프로퀴나지드, 프로솔레르, 프로솔팔린, 프로솔포카르브, 프로솔푸론, 프로티다티온, 프로티오카르브, 프로티오카르브 히드로클로라이드, 프로티오코나졸, 프로티오포스, 프로토에이트, 프로트리켄부트, 프록산, 프록산-소듐, 프리나클로르, 피다논, 피메트로진, 피라카르볼리드, 피라클로포스, 피라클로닐, 피라클로스트로빈, 피라플루엔, 피라플루엔-에틸, 피라플루프롤, 피라마트, 피라메토스트로빈, 피라옥시스트로빈, 피라숴포톨, 피라졸리네이트, 피라조포스, 피라조숴푸론, 피라조숴푸론-에틸, 피라조티온, 피라족시펜, 피레스메트린, 피레트린 I, 피레트린 II, 피레트린, 피리밤벤즈-이소프로필, 피리밤벤즈-프로필, 피리벤카르브, 피리벤족심, 피리부티카르브, 피리클로르, 피리다벤, 피리다폴, 피리달릴, 피리다펜티온, 피리데이트, 피리디니트릴, 피리페녹스, 피리플루퀴나존, 피리프탈리드, 피리메타닐, 피리미디펜, 피리미노박, 피리미노박-메틸, 피리미숴판, 피리미테이트, 피리누론, 피리오페논, 피리프롤, 피리프로판올, 피리프록시펜, 피리티오박, 피리티오박-소듐, 피롤란, 피로퀼론, 피록사숴론, 피록스숴람, 피록시클로르, 피록시푸르, 콰시아, 퀴나세톨, 퀴나세톨 숴페이트, 퀴날포스, 퀴날포스-메틸, 퀴나자미드, 퀴날로락, 퀴코나졸, 퀴메락, 퀴노클라민, 퀴논아미드, 퀴노티온, 퀴녹시펜, 퀴티오포스, 퀴토젠, 퀴잘로포프, 퀴잘로포프-에틸, 퀴잘로포프-P, 퀴잘로포프-P-에틸, 퀴잘로포프-P-테푸릴, 쿠웬치(quwenzhi), 쿠잉딩(quyingding), 라벤자졸, 라폭사니드, 레베미드, 레스메트린, 로데타닐, 로도자포닌-III, 리바비린, 림숴푸론, 로테논, 리아니아, 사플루페나실, 사이준마오(saijunmao), 사이센통(saisentong), 살리실아닐리드, 상귀나린(sanguinarine), 산토닌, 쉬라단, 실리로시드, 세부틸라진, 세크부메톤, 세닥산, 셀라멕틴, 세미아미트라즈, 세미아미트라즈 클로라이드, 세사멕스, 세사몰린, 세톡시딤, 슈양지아안카올린(shuangjiaancaolin), 시두론, 시글루레, 실라플루오펜, 실라트란, 실리카 겔, 실티오팜, 시마진, 시메코나졸, 시메톤, 시메트린, 신토펜, SMA, S-메톨라클로르, 소듐 아르세나이트, 소듐 아지드, 소듐 클로레이트, 소듐 플루오라이드, 소듐 플루오로아세테이트, 소듐 헥사플루오로실리케이트, 소듐 나프테네이트, 소듐 오르토페닐페녹시드, 소듐 펜타클로로페녹시드, 소듐 폴리숴피드, 소듐 티오시아네이트, 소듐 α -나프탈렌아세테이트, 소파미드, 스피네토람, 스피노사드, 스피로디클로펜, 스피로메시펜, 스피로테트라마트, 스피록사민, 스트렙토마이신, 스트렙토마이신 세스퀴숴페이트, 스트리크닌, 숴카톨, 숴코푸론, 숴코푸론-소듐, 숴코트리온, 숴팔레이트, 숴펜트라존, 숴피람, 숴플루라미드, 숴포메투론, 숴포메투론-메틸, 숴포숴푸론, 숴포텡, 숴폭사플로르, 숴폭시드, 숴폭심, 황, 황산, 숴푸릴 플루오라이드, 숴글리카펜, 숴프로포스, 숴트로펜, 스웨프, 타우-플루발리네이트, 타브론, 타짐카르브, TCA, TCA-암모늄, TCA-칼슘, TCA-에타닐, TCA-마그네슘, TCA-소듐, TDE, 테부코나졸, 테부페노지드, 테부펜피라드, 테부플로퀼, 테부피딴포스, 테부탐, 테부티우론, 테클로프탈람, 테크나젠, 테코람, 테플루벤주론, 테플루트린, 테푸릴트리온, 템보트리온, 테메포스, 테파, TEPP, 테프랄록시딤, 테랄레트린, 테르바실, 테르부카르브, 테르부클로르, 테르부포스, 테르부메톤, 테르부틸라진, 테르부트린, 테트시클라시스, 테트라

클로로에탄, 테트라클로르빈포스, 테트라코나졸, 테트라디폰, 테트라플루론, 테트라메트린, 테트라메틸플루트린, 테트라민, 테트라낙틴, 테트라솔, 탈륨 술페이트, 테닐클로르, 세타-시페르메트린, 티아벤다졸, 티아클로프리드, 티아디플루오르, 티아메톡삼, 티아프로닐, 티아자플루론, 티아조피르, 티크로포스, 티시오펜, 티디아지민, 티디아주론, 티엔카르바존, 티엔카르바존-메틸, 티펜술푸론, 티펜술푸론-메틸, 티플루자미드, 티오벤카르브, 티오카르복심, 티오클로르펜팜, 티오시클람, 티오시클람 히드로클로라이드, 티오시클람 옥살레이트, 티오디아졸-구리, 티오디카르브, 티오파녹스, 티오플루옥시메이트, 티오헬파, 티오펜살, 티오펜톤, 티오나진, 티오파네이트, 티오파네이트-메틸, 티오킨옥스, 티오세미카르바지드, 티오솔탑, 티오솔탑-디아모늄, 티오솔탑-디소듐, 티오솔탑-모노소듐, 티오테파, 티람, 투린기엔신, 티아디닐, 티아오지에안(tiaojiean), 티오카르바질, 티오클로림, 티옥시미드, 티르페이트, 톨클로포스-메틸, 톨펜피라드, 톨릴플루아니드, 톨릴수은 아세테이트, 토프라메존, 트랄록시딤, 트랄로시트린, 트랄로메트린, 트랄로피릴, 트랜스플루트린, 트랜스페르메트린, 트레타민, 트리아콘탄올, 트리아디메폰, 트리아디메놀, 트리아파몬, 트리아라이트, 트리아미포스, 트리아펜테놀, 트리아라텐, 트리아리몰, 트리아솔푸론, 트리아자메이트, 트리아즈부틸, 트리아지플람, 트리아조포스, 트리아족시드, 트리베누론, 트리베누론-메틸, 트리부포스, 트리부틸틴 옥시드, 트리캄바, 트리클라미드, 트리클로르폰, 트리클로르메타포스-3, 트리클로로나트, 트리클로피르, 트리클로피르-부토틸, 트리클로피르-에틸, 트리클로피르-트리에틸암모늄, 트리시클라졸, 트리데모르프, 트리디판, 트리에타진, 트리펜모르프, 트리페노포스, 트리플록시스트로빈, 트리플록시솔푸론, 트리플록시솔푸론-소듐, 트리플루미졸, 트리플루무론, 트리플루랄린, 트리플루솔푸론, 트리플루솔푸론-메틸, 트리포프, 트리포프-메틸, 트리포프심, 트리포린, 트리히드록시트리아진, 트리메들루레, 트리메타카르브, 트리메투론, 트리넥사팍, 트리넥사팍-에틸, 트리프렌, 트리프로핀단, 트리프톨리드, 트리탁, 트리티코나졸, 트리토솔푸론, 트렁크-콜(trunc-call), 유니코나졸, 유니코나졸-P, 우르바시드, 우레테파, 발레레이트, 발리다마이신, 발리페날레이트, 발론, 바미도티온, 반가르드, 바닐리프롤, 베르놀레이트, 빈클로졸린, 와파린, 와파린-포타슘, 와파린-소듐, 시아오충리울린(xiaochongliulin), 신주난(xinjunan), 시위주난(xiwojunan), XMC, 크실라클로르, 크실레놀스, 크실릴카르브, 이시징(yishijing), 자릴아미드, 제아틴, 쟁시아오안(zengxiaoan), 제타-시페르메트린, 아연 나프테네이트, 아연 포스피드, 아연티아졸, 지네브, 지람, 줄라프로포스, 족사미드, 주오미후앙롱(zuomihuanglong), α -클로로히드린, α -엑디손, α -멀티스트리아틴, 및 α -나프탈렌아세트산으로부터 선택된 하나 이상의 화합물을 추가로 포함하는 조성물.

청구항 43

제1항에 있어서, 농업상 허용되는 담체를 추가로 포함하는 조성물.

청구항 44

제1항에 있어서, 상기 분자가 살충용으로 허용되는 산 부가염의 형태인 조성물.

청구항 45

제1항에 있어서, 상기 분자가 염 유도체의 형태인 조성물.

청구항 46

제1항에 있어서, 상기 분자가 수화물의 형태인 조성물.

청구항 47

제1항에 있어서, 상기 분자가 에스테르 유도체의 형태인 조성물.

청구항 48

제1항에 있어서, 상기 분자가 결정 다형체의 형태인 조성물.

청구항 49

제1항에 있어서, 상기 분자가 ^1H 대신에 ^2H 를 갖는 것인 조성물.

청구항 50

제1항에 있어서, 상기 분자가 ^{12}C 대신에 ^{14}C 를 갖는 것인 조성물.

청구항 51

제1항에 있어서, 생물살충제를 추가로 포함하는 조성물.

청구항 52

제1항에 있어서, 하기 화합물:

- (a) 3-(4-클로로-2,6-디메틸페닐)-4-히드록시-8-옥사-1-아자스피로[4,5]데스-3-엔-2-온;
- (b) 3-(4'-클로로-2,4-디메틸[1,1'-비페닐]-3-일)-4-히드록시-8-옥사-1-아자스피로[4,5]데스-3-엔-2-온;
- (c) 4-[(6-클로로-3-피리디닐)메틸]메틸아미노-2(5H)-푸라논;
- (d) 4-[(6-클로로-3-피리디닐)메틸]시클로프로필아미노-2(5H)-푸라논;
- (e) 3-클로로-N2-[(1S)-1-메틸-2-(메틸술포닐)에틸]-N1-[2-메틸-4-[1,2,2,2-테트라플루오로-1-(트리플루오로메틸)에틸]페닐]-1,2-벤젠디카르복사아미드;
- (f) 2-시아노-N-에틸-4-플루오로-3-메톡시-벤젠술포나미드;
- (g) 2-시아노-N-에틸-3-메톡시-벤젠술포나미드;
- (h) 2-시아노-3-디플루오로메톡시-N-에틸-4-플루오로-벤젠술포나미드;
- (i) 2-시아노-3-플루오로메톡시-N-에틸-벤젠술포나미드;
- (j) 2-시아노-6-플루오로-3-메톡시-N,N-디메틸-벤젠술포나미드;
- (k) 2-시아노-N-에틸-6-플루오로-3-메톡시-N-메틸-벤젠술포나미드;
- (l) 2-시아노-3-디플루오로메톡시-N,N-디메틸벤젠술포나미드;
- (m) 3-(디플루오로메틸)-N-[2-(3,3-디메틸부틸)페닐]-1-메틸-1H-피라졸-4-카르복사아미드;
- (n) N-에틸-2,2-디메틸프로피온아미드-2-(2,6-디클로로- α, α, α -트리플루오로-p-톨릴)히드라존;
- (o) N-에틸-2,2-디클로로-1-메틸시클로프로판카르복사아미드-2-(2,6-디클로로- α, α, α -트리플루오로-p-톨릴)히드라존 니코틴;
- (p) O-[(E)-[2-(4-클로로-페닐)-2-시아노-1-(2-트리플루오로메틸페닐)-비닐]] S-메틸 티오카르보네이트;
- (q) (E)-N1-[2-(2-클로로-1,3-티아졸-5-일메틸)]-N2-시아노-N1-메틸아세트아미드;
- (r) 1-(6-클로로피리딘-3-일메틸)-7-메틸-8-니트로-1,2,3,5,6,7-헥사히드로-이미다조[1,2-a]피리딘-5-올;
- (s) 4-[4-클로로페닐-(2-부틸리딘-히드라조노)메틸]페닐 메실레이트; 및
- (t) N-에틸-2,2-디클로로-1-메틸시클로프로판카르복사아미드-2-(2,6-디클로로-알파,알파,알파-트리플루오로-p-톨릴)히드라존

중 하나 이상을 추가로 포함하는 조성물.

청구항 53

제1항에 있어서, 하기 작용 방식: 아세틸콜린에스테라제 억제제; 나트륨 채널 조절제; 키틴 생합성 억제제; GABA 및 글루타메이트-게이팅 클로라이드 채널 길항제; GABA 및 글루타메이트-게이팅 클로라이드 채널 효능제; 아세틸콜린 수용체 효능제; 아세틸콜린 수용체 길항제; MET I 억제제; Mg-자극 ATPase 억제제; 니코틴성 아세틸콜린 수용체; 중장 막 붕괴제; 산화성 인산화 붕괴제 및 리아노딘 수용체(RyRs) 중 하나 이상을 갖는 화합물을 추가로 포함하는 조성물.

청구항 54

제1항에 있어서, 종자를 추가로 포함하는 조성물.

청구항 55

제1항에 있어서, 하나 이상의 특수화 형질을 발현하도록 유전자 변형된 종자를 추가로 포함하는 조성물.

청구항 56

제1항에 있어서, 상기 조성물이 캡슐의 내부로 캡슐화되거나 또는 캡슐의 표면 상에 배치된 것인 조성물.

청구항 57

제1항에 있어서, 상기 조성물이 캡슐의 내부로 캡슐화되거나 또는 캡슐의 표면 상에 배치되며, 상기 캡슐은 약 100-900 나노미터 또는 약 10-900 마이크로미터의 직경을 갖는 것인 조성물.

청구항 58

제1항에 따른 조성물을 해충을 방제하기 위한 영역에, 이러한 해충을 방제하기에 충분한 양으로 적용하는 것을 포함하는 방법.

청구항 59

제58항에 있어서, 상기 해충이 딱정벌레, 집게벌레, 바퀴벌레, 파리, 진딧물, 깍지벌레, 가루이, 매미충, 개미, 말벌, 흰개미, 나방, 나비, 이, 방아깨비, 메뚜기, 귀뚜라미, 벼룩, 총채벌레, 쯤, 응애, 진드기, 선충, 및 결합류로부터 선택된 것인 방법.

청구항 60

제58항에 있어서, 상기 해충이 선형동물문 또는 절지동물문으로부터의 것인 방법.

청구항 61

제58항에 있어서, 상기 해충이 협각아문, 다시아문 또는 육각아문으로부터의 것인 방법.

청구항 62

제58항에 있어서, 상기 해충이 거미강, 결합강 또는 곤충강으로부터의 것인 방법.

청구항 63

제58항에 있어서, 상기 해충이 이아목, 딱정벌레목, 집게벌레목, 바퀴목, 파리목, 노린재목, 딱시목, 흰개미목, 인시목, 털이목, 메뚜기목, 벼룩목, 총채벌레목, 쯤목, 응애목 또는 흙작은지네목으로부터의 것인 방법.

청구항 64

제58항에 있어서, 상기 해충이 BAW, CEW, 또는 GPA인 방법.

청구항 65

제58항에 있어서, 상기 양이 헥타르당 약 0.01 그램 내지 헥타르당 약 5000 그램인 방법.

청구항 66

제58항에 있어서, 상기 양이 헥타르당 약 0.1 그램 내지 헥타르당 약 500 그램인 방법.

청구항 67

제58항에 있어서, 상기 양이 헥타르당 약 1 그램 내지 헥타르당 약 50 그램인 방법.

청구항 68

제58항에 있어서, 상기 영역이 사과, 옥수수, 목화, 대두, 카놀라, 밀, 벼, 소르굼, 보리, 귀리, 감자, 오렌지, 알팔파, 상추, 딸기, 토마토, 페퍼, 크루시퍼, 배, 담배, 아몬드, 사탕무 또는 콩이 성장하거나, 그의 종자가 식재될 영역인 방법.

청구항 69

제58항에 있어서, 상기 조성물을 하나 이상의 특수화 형질을 발현하도록 유전자 변형된 유전자 변형 식물에 적용하는 것을 추가로 포함하는 방법.

청구항 70

제1항에 있어서, 상기 조성물이 황산암모늄을 추가로 포함하는 것인 방법.

청구항 71

제1항에 따른 조성물을 비-인간 동물에게 경구 투여하거나; 국소 적용하여 내부기생충, 외부기생충 또는 둘 다를 방제하는 것을 포함하는 방법.

청구항 72

해충 활성이 낮은 시기에, 제1항에 따른 조성물을 식물의 건강, 수확량, 활력, 품질 또는 내성을 증진시키기 위해 식물에 적용하는 것을 포함하는 방법.

명세서

기술분야

[0001] 관련 출원의 상호 참조

[0002] 본원은 2012년 12월 19일 출원된 미국 특허 가출원 일련 번호 61/739,025를 우선권 주장하며, 그의 개시 내용은 본원에 명백히 참조로 포함된다.

[0003] 개시내용의 분야

[0004] 본원에 개시된 발명은 살충제 (예를 들어, 살진드기제, 살곤충제, 살연체동물제, 및 살선충제)로서 유용한 분자의 제조 방법, 상기 분자, 및 상기 분자를 사용하여 해충을 방제하는 방법의 분야에 관한 것이다.

배경기술

[0005] 해충으로 인해 매년 전 세계에서 수백만의 인간이 사망한다. 또한, 농업에서 손실을 야기하는 1만 종을 초과하는 해충이 존재한다. 세계적인 농업적 손실은 매년 수십억 미국 달러에 달한다.

[0006] 흰개미는 모든 종류의 민간 및 공공 구조물에 피해를 준다. 흰개미에 의한 세계적인 피해 손실은 매년 수십억 미국 달러에 달한다.

[0007] 저장 식품 해충은 저장 식품을 섭취하고 품질을 저하시킨다. 세계적인 저장 식품 손실은 매년 수십억 미국 달러에 달하지만, 보다 중요하게는 사람에게서 필요한 식품을 박탈한다.

[0008] 신규한 살충제가 시급히 요구되고 있다. 특정 해충은 현용되는 살충제에 대해 저항성이 발생하고 있다. 수백종의 해충은 하나 이상의 살충제에 대해 저항성이 있다. 보다 오래된 살충제 중 일부, 예컨대 DDT, 카르바메이트, 및 유기포스페이트에 대한 저항성의 발생은 널리 공지되어 있다. 그러나, 심지어는 일부 보다 신규한 살충제, 예를 들어 이미다클로프리드에 대해서도 저항성이 발생하였다.

[0009] 따라서, 상기한 이유를 비롯한 많은 이유로, 신규한 살충제에 대한 필요성이 존재한다.

발명의 내용

[0010] 정의

[0011] 정의에서 주어진 예는 일반적으로 비-포괄적이며, 본원에 개시된 발명을 제한하는 것으로 해석되어서는 안된다. 치환기는 부착되는 특정한 분자에 관련하여 화학 결합 규칙 및 입체 상용성 제약에 따라야 한다는 것을 이해한다.

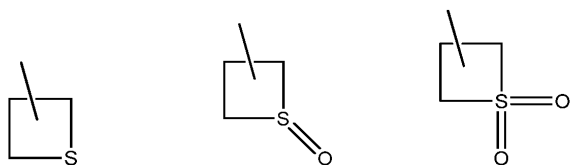
[0012] "알케닐"은 탄소 및 수소로 이루어진 비-시클릭, 불포화 (1개 이상의 탄소-탄소 이중 결합), 분지형 또는 비분지형 치환기, 예를 들어 비닐, 알릴, 부테닐, 펜테닐 및 헥세닐을 의미한다.

[0013] "알케닐옥시"는 탄소-산소 단일 결합으로 추가로 이루어진 알케닐, 예를 들어 알릴옥시, 부테닐옥시, 펜테닐옥

시, 헥세닐옥시를 의미한다.

- [0014] "알콕시"는 탄소-산소 단일 결합으로 추가로 이루어진 알킬, 예를 들어 메톡시, 에톡시, 프로폭시, 이소프로폭시, 부톡시, 이소부톡시 및 tert-부톡시를 의미한다.
- [0015] "알킬"은 탄소 및 수소로 이루어진 비-시클릭, 포화, 분지형 또는 비분지형 치환기, 예를 들어 메틸, 에틸, n-프로필 및 이소프로필을 나타내는 (C₃)알킬, n-부틸, sec-부틸, 이소부틸, 및 tert-부틸을 나타내는 (C₄)알킬을 의미한다.
- [0016] "알키닐"은 탄소 및 수소로 이루어진 비-시클릭, 불포화 (1개 이상의 탄소-탄소 삼중 결합), 분지형 또는 비분지형 치환기, 예를 들어 에티닐, 프로파르길, 부티닐 및 펜티닐을 의미한다.
- [0017] "알키닐옥시"는 탄소-산소 단일 결합으로 추가로 이루어진 알키닐, 예를 들어 펜티닐옥시, 헥시닐옥시, 헵티닐옥시 및 옥티닐옥시를 의미한다.
- [0018] "아릴"은 수소 및 탄소로 이루어진 시클릭, 방향족 치환기, 예를 들어 페닐, 나프틸 및 비페닐을 의미한다.
- [0019] "(C_x-C_y)" (여기서 아래 첨자 "x" 및 "y"는 1, 2, 또는 3과 같은 정수임)는, 치환기에 대한 탄소 원자의 범위를 의미하며 - 예를 들어, (C₁-C₄)알킬은 각각 개별적으로 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, sec-부틸, 이소부틸 및 tert-부틸을 의미한다.
- [0020] "시클로알케닐"은 탄소 및 수소로 이루어진 모노시클릭 또는 폴리시클릭, 불포화 (1개 이상의 탄소-탄소 이중 결합) 치환기, 예를 들어 시클로부테닐, 시클로펜테닐, 시클로헥세닐, 노르보르네닐, 비시클로[2.2.2]옥테닐, 테트라히드로나프틸, 헥사히드로나프틸 및 옥타히드로나프틸을 의미한다.
- [0021] "시클로알케닐옥시"는 탄소-산소 단일 결합으로 추가로 이루어진 시클로알케닐, 예를 들어 시클로부테닐옥시, 시클로펜테닐옥시, 노르보르네닐옥시 및 비시클로[2.2.2]옥테닐옥시를 의미한다.
- [0022] "시클로알킬"은 탄소 및 수소로 이루어진 모노시클릭 또는 폴리시클릭, 포화 치환기, 예를 들어 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 노르보르닐, 비시클로[2.2.2]옥틸 및 데카히드로나프틸을 의미한다.
- [0023] "시클로알콕시"는 탄소-산소 단일 결합으로 추가로 이루어진 시클로알킬, 예를 들어 시클로프로필옥시, 시클로부틸옥시, 시클로펜틸옥시, 노르보르닐옥시 및 비시클로[2.2.2]옥틸옥시를 의미한다.
- [0024] "할로"는 플루오로, 클로로, 브로모 및 아이오도를 의미한다
- [0025] "할로알콕시"는 1 내지 최대 가능한 수의 동일하거나 상이한 할로로 추가로 이루어진 알콕시, 예를 들어 플루오로메톡시, 트리플루오로메톡시, 2,2-디플루오로프로폭시, 클로로메톡시, 트리클로로메톡시, 1,1,2,2-테트라플루오로에톡시 및 펜타플루오로에톡시를 의미한다.
- [0026] "할로알킬"은 1 내지 최대 가능한 수의 동일하거나 상이한 할로로 추가로 이루어진 알킬, 예를 들어 플루오로메틸, 트리플루오로메틸, 2,2-디플루오로프로필, 클로로메틸, 트리클로로메틸 및 1,1,2,2-테트라플루오로에틸을 의미한다.
- [0027] "헤테로시클릴"은 완전 포화, 부분 불포화, 또는 완전 불포화일 수 있는 시클릭 치환기를 의미하고, 여기서 시클릭 구조는 1개 이상의 탄소 및 1개 이상의 헤테로원자를 함유하고, 여기서 상기 헤테로원자는 질소, 황 또는 산소이다. 황의 경우에, 그 원자는 술폭시드 및 술포나 같은 다른 산화 상태일 수 있다. 방향족 헤테로시클릴의 예로는 벤조푸라닐, 벤조이소티아졸릴, 벤조이소사졸릴, 벤조사졸릴, 벤조티에닐, 벤조티아졸릴, 신놀리닐, 푸라닐, 이미다졸릴, 인다졸릴, 인돌릴, 이소인돌릴, 이소퀴놀리닐, 이소티아졸릴, 이소사졸릴, 옥사디아졸릴, 옥사졸리닐, 옥사졸릴, 프탈라지닐, 피라지닐, 피라졸리닐, 피라졸릴, 피리다지닐, 피리딜, 피리미디닐, 피롤릴, 퀴나졸리닐, 퀴놀리닐, 퀴놀살리닐, 테트라졸릴, 티아졸리닐, 티아졸릴, 티에닐, 트리아지닐 및 트리아졸릴이 포함되지만, 이에 제한되지 않는다. 완전 포화된 헤테로시클릴의 예로는 피페라지닐, 피페리디닐, 모르폴리닐, 피롤리디닐, 옥세타닐, 테트라히드로푸라닐, 테트라히드로티에닐 및 테트라히드로피라닐이 포함되지만, 이에 제한되지 않는다. 부분 불포화 헤테로시클릴의 예로는 1,2,3,4-테트라히드로퀴놀리닐, 4,5-디히드로-옥사졸릴, 4,5-디히드로-1H-피라졸릴, 4,5-디히드로-이소사졸릴 및 2,3-디히드로-[1,3,4]-옥사디아졸릴이 포함되지만, 이에 제한되지 않는다.

추가 예로는 다음이 포함된다:



티에타닐

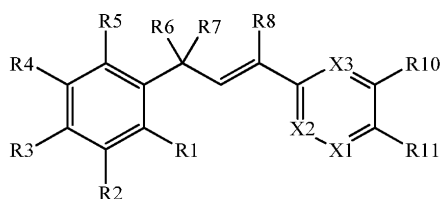
티에타닐-옥시드

티에타닐-디옥시드

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

본원은 하기 화학식 ("화학식 1")을 갖는 분자를 개시한다:

<화학식 1>



상기 식에서,

(a) R1은

(1) H, F, Cl, Br, I, CN, NO₂, (C₁-C₈)알킬, 할로(C₁-C₈)알킬, (C₁-C₈)알콕시, 할로(C₁-C₈)알콕시, S(C₁-C₈)알킬, S(할로(C₁-C₈)알킬), S(O)(C₁-C₈)알킬, S(O)(할로(C₁-C₈)알킬), S(O)₂(C₁-C₈)알킬, S(O)₂(할로(C₁-C₈)알킬), N(R14)(R15),

(2) 치환된 (C₁-C₈)알킬 (여기서 상기 치환된 (C₁-C₈)알킬은 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 가짐),

(3) 치환된 할로(C₁-C₈)알킬 (여기서 상기 치환된 할로(C₁-C₈)알킬은 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 가짐),

(4) 치환된 (C₁-C₈)알콕시 (여기서 상기 치환된 (C₁-C₈)알콕시는 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 가짐), 및

(5) 치환된 할로(C₁-C₈)알콕시 (여기서 상기 치환된 할로(C₁-C₈)알콕시는 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 가짐)

로부터 선택되고;

(b) R2는

(1) H, F, Cl, Br, I, CN, NO₂, (C₁-C₈)알킬, 할로(C₁-C₈)알킬, (C₁-C₈)알콕시, 할로(C₁-C₈)알콕시, S(C₁-C₈)알킬, S(할로(C₁-C₈)알킬), S(O)(C₁-C₈)알킬, S(O)(할로(C₁-C₈)알킬), S(O)₂(C₁-C₈)알킬, S(O)₂(할로(C₁-C₈)알킬), N(R14)(R15),

(2) 치환된 (C₁-C₈)알킬 (여기서 상기 치환된 (C₁-C₈)알킬은 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 가짐),

(3) 치환된 할로(C₁-C₈)알킬 (여기서 상기 치환된 할로(C₁-C₈)알킬은 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 가짐),

(4) 치환된 (C₁-C₈)알콕시 (여기서 상기 치환된 (C₁-C₈)알콕시는 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치

환기를 가짐), 및

[0046] (5) 치환된 할로(C₁-C₈)알콕시 (여기서 상기 치환된 할로(C₁-C₈)알콕시는 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 가짐)

[0047] 로부터 선택되고;

[0048] (c) R3은

[0049] (1) H, F, Cl, Br, I, CN, NO₂, (C₁-C₈)알킬, 할로(C₁-C₈)알킬, (C₁-C₈)알콕시, 할로(C₁-C₈)알콕시, S(C₁-C₈)알킬, S(할로(C₁-C₈)알킬), S(O)(C₁-C₈)알킬, S(O)(할로(C₁-C₈)알킬), S(O)₂(C₁-C₈)알킬, S(O)₂(할로(C₁-C₈)알킬), N(R14)(R15),

[0050] (2) 치환된 (C₁-C₈)알킬 (여기서 상기 치환된 (C₁-C₈)알킬은 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 가짐),

[0051] (3) 치환된 할로(C₁-C₈)알킬 (여기서 상기 치환된 할로(C₁-C₈)알킬은 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 가짐),

[0052] (4) 치환된 (C₁-C₈)알콕시 (여기서 상기 치환된 (C₁-C₈)알콕시는 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 가짐), 및

[0053] (5) 치환된 할로(C₁-C₈)알콕시 (여기서 상기 치환된 할로(C₁-C₈)알콕시는 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 가짐)

[0054] 로부터 선택되고;

[0055] (d) R4는

[0056] (1) H, F, Cl, Br, I, CN, NO₂, (C₁-C₈)알킬, 할로(C₁-C₈)알킬, (C₁-C₈)알콕시, 할로(C₁-C₈)알콕시, S(C₁-C₈)알킬, S(할로(C₁-C₈)알킬), S(O)(C₁-C₈)알킬, S(O)(할로(C₁-C₈)알킬), S(O)₂(C₁-C₈)알킬, S(O)₂(할로(C₁-C₈)알킬), N(R14)(R15),

[0057] (2) 치환된 (C₁-C₈)알킬 (여기서 상기 치환된 (C₁-C₈)알킬은 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 가짐),

[0058] (3) 치환된 할로(C₁-C₈)알킬 (여기서 상기 치환된 할로(C₁-C₈)알킬은 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 가짐),

[0059] (4) 치환된 (C₁-C₈)알콕시 (여기서 상기 치환된 (C₁-C₈)알콕시는 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 가짐), 및

[0060] (5) 치환된 할로(C₁-C₈)알콕시 (여기서 상기 치환된 할로(C₁-C₈)알콕시는 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 가짐)

[0061] 로부터 선택되고;

[0062] (e) R5는

[0063] (1) H, F, Cl, Br, I, CN, NO₂, (C₁-C₈)알킬, 할로(C₁-C₈)알킬, (C₁-C₈)알콕시, 할로(C₁-C₈)알콕시, S(C₁-C₈)알킬, S(할로(C₁-C₈)알킬), S(O)(C₁-C₈)알킬, S(O)(할로(C₁-C₈)알킬), S(O)₂(C₁-C₈)알킬, S(O)₂(할로(C₁-C₈)알킬), N(R14)(R15),

[0064] (2) 치환된 (C₁-C₈)알킬 (여기서 상기 치환된 (C₁-C₈)알킬은 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 가짐),

[0065] (3) 치환된 할로(C₁-C₈)알킬 (여기서 상기 치환된 할로(C₁-C₈)알킬은 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의

치환기를 가짐),

[0066] (4) 치환된 (C₁-C₈)알콕시 (여기서 상기 치환된 (C₁-C₈)알콕시는 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 가짐), 및

[0067] (5) 치환된 할로(C₁-C₈)알콕시 (여기서 상기 치환된 할로(C₁-C₈)알콕시는 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 가짐)

[0068] 로부터 선택되고;

[0069] (f) R₆은 (C₁-C₈)할로알킬이고;

[0070] (g) R₇은 H, F, Cl, Br, I, OH, (C₁-C₈)알콕시, 및 할로(C₁-C₈)알콕시로부터 선택되고;

[0071] (h) R₈은 H, (C₁-C₈)알킬, 할로(C₁-C₈)알킬, OR₁₄, 및 N(R₁₄)(R₁₅)로부터 선택되고;

[0072] (i) R₉는 H, F, Cl, Br, I, (C₁-C₈)알킬, 할로(C₁-C₈)알킬, (C₁-C₈)알콕시, 할로(C₁-C₈)알콕시, OR₁₄, 및 N(R₁₄)(R₁₅)로부터 선택되고;

[0073] (j) R₁₀은

[0074] (1) H, F, Cl, Br, I, CN, NO₂, (C₁-C₈)알킬, 할로(C₁-C₈)알킬, (C₁-C₈)알콕시, 할로(C₁-C₈)알콕시, 시클로(C₃-C₆)알킬, S(C₁-C₈)알킬, S(할로(C₁-C₈)알킬), S(O)(C₁-C₈)알킬, S(O)(할로(C₁-C₈)알킬), S(O)₂(C₁-C₈)알킬, S(O)₂(할로(C₁-C₈)알킬), NR₁₄R₁₅, C(=O)H, C(=O)N(R₁₄)(R₁₅), CN(R₁₄)(R₁₅)(=NOH), (C=O)O(C₁-C₈)알킬, (C=O)OH, 헤테로시클릴, (C₂-C₈)알케닐, 할로(C₂-C₈)알케닐, (C₂-C₈)알키닐,

[0075] (2) 치환된 (C₁-C₈)알킬 (여기서 상기 치환된 (C₁-C₈)알킬은 OH, (C₁-C₈)알콕시, S(C₁-C₈)알킬, S(O)(C₁-C₈)알킬, S(O)₂(C₁-C₈)알킬, NR₁₄R₁₅로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 가짐), 및

[0076] (3) 치환된 할로(C₁-C₈)알킬 (여기서 상기 치환된 할로(C₁-C₈)알킬은 (C₁-C₈)알콕시, S(C₁-C₈)알킬, S(O)(C₁-C₈)알킬, S(O)₂(C₁-C₈)알킬, 및 N(R₁₄)(R₁₅)로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 가짐)

[0077] 로부터 선택되고;

[0078] (k) R₁₁은 C(=X₅)N(R₁₄)((C₁-C₈)알킬C(=X₅)N(R₁₄)(R₁₅)) (여기서 각각의 X₅는 독립적으로 O 또는 S로부터 선택됨)로부터 선택되고;

[0079] (l) R₁₂는 (v), H, F, Cl, Br, I, CN, (C₁-C₈)알킬, 할로(C₁-C₈)알킬, (C₁-C₈)알콕시, 할로(C₁-C₈)알콕시, 및 시클로(C₃-C₆)알킬로부터 선택되고;

[0080] (m) R₁₃은 (v), H, F, Cl, Br, I, CN, (C₁-C₈)알킬, 할로(C₁-C₈)알킬, (C₁-C₈)알콕시, 및 할로(C₁-C₈)알콕시로부터 선택되고;

[0081] (n) 각각의 R₁₄는 독립적으로 H, (C₁-C₈)알킬, (C₂-C₈)알케닐, 치환된 (C₁-C₈)알킬, 할로(C₁-C₈)알킬, 치환된 할로(C₁-C₈)알킬, (C₁-C₈)알콕시, 시클로(C₃-C₆)알킬, 아릴, 치환된-아릴, (C₁-C₈)알킬-아릴, (C₁-C₈)알킬-(치환된-아릴), O-(C₁-C₈)알킬-아릴, O-(C₁-C₈)알킬-(치환된-아릴), 헤테로시클릴, 치환된-헤테로시클릴, (C₁-C₈)알킬-헤테로시클릴, (C₁-C₈)알킬-(치환된-헤테로시클릴), O-(C₁-C₈)알킬-헤테로시클릴, O-(C₁-C₈)알킬-(치환된-헤테로시클릴), N(R₁₆)(R₁₇), (C₁-C₈)알킬-C(=O)N(R₁₆)(R₁₇), C(=O)(C₁-C₈)알킬, C(=O)(할로(C₁-C₈)알킬), C(=O)(C₃-C₆)시클로알킬, (C₁-C₈)알킬-C(=O)O(C₁-C₈)알킬, C(=O)H로부터 선택되고,

[0082] 여기서 각각의 상기 치환된 (C₁-C₈)알킬은 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 갖고,

[0083] 여기서 각각의 상기 치환된 할로(C₁-C₈)알킬은 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 갖고,

- [0084] 여기서 각각의 상기 치환된-아틸은 F, Cl, Br, I, CN, NO₂, (C₁-C₈)알킬, 할로(C₁-C₈)알킬, (C₁-C₈)알콕시, 할로(C₁-C₈)알콕시, S(C₁-C₈)알킬, S(할로(C₁-C₈)알킬), N((C₁-C₈)알킬)₂ (여기서 각각의 (C₁-C₈)알킬은 독립적으로 선택됨), 및 옥소로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 갖고,
- [0085] 여기서 각각의 상기 치환된-헤테로시클릴은 F, Cl, Br, I, CN, NO₂, (C₁-C₈)알킬, 할로(C₁-C₈)알킬, (C₁-C₈)알콕시, 할로(C₁-C₈)알콕시, (C₃-C₆)시클로알킬, S(C₁-C₈)알킬, S(할로(C₁-C₈)알킬), N((C₁-C₈)알킬)₂ (여기서 각각의 (C₁-C₈)알킬은 독립적으로 선택됨), 헤테로시클릴, C(=O)(C₁-C₈)알킬, C(=O)O(C₁-C₈)알킬, 및 옥소 (여기서 상기 알킬, 알콕시, 및 헤테로시클릴은 F, Cl, Br, I, CN, 및 NO₂ 중 1개 이상으로 추가로 치환될 수 있음)로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 갖고;
- [0086] (o) 각각의 R15는 독립적으로 H, (C₁-C₈)알킬, (C₂-C₈)알케닐, 치환된 (C₁-C₈)알킬, 할로(C₁-C₈)알킬, 치환된 할로(C₁-C₈)알킬, (C₁-C₈)알콕시, 시클로(C₃-C₆)알킬, 아틸, 치환된-아틸, (C₁-C₈)알킬-아틸, (C₁-C₈)알킬-(치환된-아틸), O-(C₁-C₈)알킬-아틸, O-(C₁-C₈)알킬-(치환된-아틸), 헤테로시클릴, 치환된-헤테로시클릴, (C₁-C₈)알킬-헤테로시클릴, (C₁-C₈)알킬-(치환된-헤테로시클릴), O-(C₁-C₈)알킬-헤테로시클릴, O-(C₁-C₈)알킬-(치환된-헤테로시클릴), N(R16)(R17), (C₁-C₈)알킬-C(=O)N(R16)(R17), C(=O)(C₁-C₈)알킬, C(=O)(할로(C₁-C₈)알킬), C(=O)(C₃-C₆)시클로알킬, (C₁-C₈)알킬-C(=O)O(C₁-C₈)알킬, C(=O)H로부터 선택되고,
- [0087] 여기서 각각의 상기 치환된 (C₁-C₈)알킬은 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 갖고,
- [0088] 여기서 각각의 상기 치환된 할로(C₁-C₈)알킬은 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 갖고,
- [0089] 여기서 각각의 상기 치환된-아틸은 F, Cl, Br, I, CN, NO₂, (C₁-C₈)알킬, 할로(C₁-C₈)알킬, (C₁-C₈)알콕시, 할로(C₁-C₈)알콕시, S(C₁-C₈)알킬, S(할로(C₁-C₈)알킬), N((C₁-C₈)알킬)₂ (여기서 각각의 (C₁-C₈)알킬은 독립적으로 선택됨), 및 옥소로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 갖고,
- [0090] 여기서 각각의 상기 치환된-헤테로시클릴은 F, Cl, Br, I, CN, NO₂, (C₁-C₈)알킬, 할로(C₁-C₈)알킬, (C₁-C₈)알콕시, 할로(C₁-C₈)알콕시, (C₃-C₆)시클로알킬, S(C₁-C₈)알킬, S(할로(C₁-C₈)알킬), N((C₁-C₈)알킬)₂ (여기서 각각의 (C₁-C₈)알킬은 독립적으로 선택됨), 헤테로시클릴, C(=O)(C₁-C₈)알킬, C(=O)O(C₁-C₈)알킬, 및 옥소 (여기서 상기 알킬, 알콕시, 및 헤테로시클릴은 F, Cl, Br, I, CN, 및 NO₂ 중 1개 이상으로 추가로 치환될 수 있음)로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 갖고;
- [0091] (p) 각각의 R16은 독립적으로 H, (C₁-C₈)알킬, 치환된-(C₁-C₈)알킬, 할로(C₁-C₈)알킬, 치환된-할로(C₁-C₈)알킬, 시클로(C₃-C₆)알킬, 아틸, 치환된-아틸, (C₁-C₈)알킬-아틸, (C₁-C₈)알킬-(치환된-아틸), O-(C₁-C₈)알킬-아틸, O-(C₁-C₈)알킬-(치환된-아틸), 헤테로시클릴, 치환된-헤테로시클릴, (C₁-C₈)알킬-헤테로시클릴, (C₁-C₈)알킬-(치환된-헤테로시클릴), O-(C₁-C₈)알킬-헤테로시클릴, O-(C₁-C₈)알킬-(치환된-헤테로시클릴), O-(C₁-C₈)알킬로부터 선택되고,
- [0092] 여기서 각각의 상기 치환된 (C₁-C₈)알킬은 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 갖고,
- [0093] 여기서 각각의 상기 치환된 할로(C₁-C₈)알킬은 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 갖고,
- [0094] 여기서 각각의 상기 치환된-아틸은 F, Cl, Br, I, CN, NO₂, (C₁-C₈)알킬, 할로(C₁-C₈)알킬, (C₁-C₈)알콕시, 할로(C₁-C₈)알콕시, S(C₁-C₈)알킬, S(할로(C₁-C₈)알킬), N((C₁-C₈)알킬)₂ (여기서 각각의 (C₁-C₈)알킬은 독립적으로 선택됨), 및 옥소로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 갖고,
- [0095] 여기서 각각의 상기 치환된-헤테로시클릴은 F, Cl, Br, I, CN, NO₂, (C₁-C₈)알킬, 할로(C₁-C₈)알킬, (C₁-C₈)알콕시, 할로(C₁-C₈)알콕시, S(C₁-C₈)알킬, S(할로(C₁-C₈)알킬), N((C₁-C₈)알킬)₂ (여기서 각각의 (C₁-C₈)알킬은 독립적으로 선택됨), 및 옥소로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 갖고;

- [0096] (q) 각각의 R17은 독립적으로 H, (C₁-C₈)알킬, 치환된-(C₁-C₈)알킬, 할로(C₁-C₈)알킬, 치환된-할로(C₁-C₈)알킬, 시클로(C₃-C₆)알킬, 아릴, 치환된-아릴, (C₁-C₈)알킬-아릴, (C₁-C₈)알킬-(치환된-아릴), O-(C₁-C₈)알킬-아릴, O-(C₁-C₈)알킬-(치환된-아릴), 헤테로시클릴, 치환된-헤테로시클릴, (C₁-C₈)알킬-헤테로시클릴, (C₁-C₈)알킬-(치환된-헤테로시클릴), O-(C₁-C₈)알킬-헤테로시클릴, O-(C₁-C₈)알킬-(치환된-헤테로시클릴), O-(C₁-C₈)알킬로부터 선택되고,
- [0097] 여기서 각각의 상기 치환된 (C₁-C₈)알킬은 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 갖고,
- [0098] 여기서 각각의 상기 치환된 할로(C₁-C₈)알킬은 CN 및 NO₂로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 갖고,
- [0099] 여기서 각각의 상기 치환된-아릴은 F, Cl, Br, I, CN, NO₂, (C₁-C₈)알킬, 할로(C₁-C₈)알킬, (C₁-C₈)알콕시, 할로(C₁-C₈)알콕시, S(C₁-C₈)알킬, S(할로(C₁-C₈)알킬), N((C₁-C₈)알킬)₂ (여기서 각각의 (C₁-C₈)알킬은 독립적으로 선택됨), 및 옥소로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 갖고,
- [0100] 여기서 각각의 상기 치환된-헤테로시클릴은 F, Cl, Br, I, CN, NO₂, (C₁-C₈)알킬, 할로(C₁-C₈)알킬, (C₁-C₈)알콕시, 할로(C₁-C₈)알콕시, S(C₁-C₈)알킬, S(할로(C₁-C₈)알킬), N((C₁-C₈)알킬)₂ (여기서 각각의 (C₁-C₈)알킬은 독립적으로 선택됨), 및 옥소로부터 선택된 1개 이상의 치환기를 갖고;
- [0101] (r) X1은 N 및 CR12로부터 선택되고;
- [0102] (s) X2는 N, CR9, 및 CR13으로부터 선택되고;
- [0103] (t) X3은 N 및 CR9로부터 선택되고;
- [0104] (v) R12 및 R13은 함께 C, N, O, 및 S로부터 선택된 3 내지 4개의 원자를 함유하는 연결을 형성하고, 여기서 상기 연결은 다시 고리에 연결되어 5 내지 6 원 포화 또는 불포화 시클릭 고리를 형성하고, 여기서 상기 연결은 1개 이상의 치환기 X4를 갖고, 여기서 X4는 R14, N(R14)(R15), N(R14)(C(=O)R14), N(R14)(C(=S)R14), N(R14)(C(=O)N(R14)(R14)), N(R14)(C(=S)N(R14)(R14)), N(R14)(C(=O)N(R14)((C₂-C₈)알케닐)), N(R14)(C(=S)N(R14)((C₂-C₈)알케닐))로부터 선택되고, 여기서 각각의 R14는 독립적으로 선택된다.
- [0105] 본 발명의 또 다른 실시양태에서 R1은 하기 - H, F, Cl, Br, I, CN, NO₂, 메틸, 에틸, (C₃)알킬, (C₄)알킬, (C₅)알킬, (C₆)알킬, (C₇)알킬, (C₈)알킬, 할로메틸, 할로에틸, 할로(C₃)알킬, 할로(C₄)알킬, 할로(C₅)알킬, 할로(C₆)알킬, 할로(C₇)알킬, 할로(C₈)알킬, 메톡시, 에톡시, (C₃)알콕시, (C₄)알콕시, (C₅)알콕시, (C₆)알콕시, (C₇)알콕시, (C₈)알콕시, 할로메톡시, 할로에톡시, 할로(C₃)알콕시, 할로(C₄)알콕시, 할로(C₅)알콕시, 할로(C₆)알콕시, 할로(C₇)알콕시, 및 할로(C₈)알콕시 중 1개 이상의 임의의 조합으로부터 선택될 수 있다.
- [0106] 본 발명의 또 다른 실시양태에서 R2는 하기 - H, F, Cl, Br, I, CN, NO₂, 메틸, 에틸, (C₃)알킬, (C₄)알킬, (C₅)알킬, (C₆)알킬, (C₇)알킬, (C₈)알킬, 할로메틸, 할로에틸, 할로(C₃)알킬, 할로(C₄)알킬, 할로(C₅)알킬, 할로(C₆)알킬, 할로(C₇)알킬, 할로(C₈)알킬, 메톡시, 에톡시, (C₃)알콕시, (C₄)알콕시, (C₅)알콕시, (C₆)알콕시, (C₇)알콕시, (C₈)알콕시, 할로메톡시, 할로에톡시, 할로(C₃)알콕시, 할로(C₄)알콕시, 할로(C₅)알콕시, 할로(C₆)알콕시, 할로(C₇)알콕시, 및 할로(C₈)알콕시 중 1개 이상의 임의의 조합으로부터 선택될 수 있다.
- [0107] 본 발명의 또 다른 실시양태에서 R3은 하기 - H, F, Cl, Br, I, CN, NO₂, 메틸, 에틸, (C₃)알킬, (C₄)알킬, (C₅)알킬, (C₆)알킬, (C₇)알킬, (C₈)알킬, 할로메틸, 할로에틸, 할로(C₃)알킬, 할로(C₄)알킬, 할로(C₅)알킬, 할로(C₆)알킬, 할로(C₇)알킬, 할로(C₈)알킬, 메톡시, 에톡시, (C₃)알콕시, (C₄)알콕시, (C₅)알콕시, (C₆)알콕시, (C₇)알콕시, (C₈)알콕시, 할로메톡시, 할로에톡시, 할로(C₃)알콕시, 할로(C₄)알콕시, 할로(C₅)알콕시, 할로(C₆)알콕시, 할로(C₇)알콕시, 및 할로(C₈)알콕시 중 1개 이상의 임의의 조합으로부터 선택될 수 있다.
- [0108] 본 발명의 또 다른 실시양태에서 R4는 하기 - H, F, Cl, Br, I, CN, NO₂, 메틸, 에틸, (C₃)알킬, (C₄)알킬, (C₅)알킬, (C₆)알킬, (C₇)알킬, (C₈)알킬, 할로메틸, 할로에틸, 할로(C₃)알킬, 할로(C₄)알킬, 할로(C₅)알킬, 할로

(C₆)알킬, 할로(C₇)알킬, 할로(C₈)알킬, 메톡시, 에톡시, (C₃)알콕시, (C₄)알콕시, (C₅)알콕시, (C₆)알콕시, (C₇)알콕시, (C₈)알콕시, 할로메톡시, 할로에톡시, 할로(C₃)알콕시, 할로(C₄)알콕시, 할로(C₅)알콕시, 할로(C₆)알콕시, 할로(C₇)알콕시, 및 할로(C₈)알콕시 중 1개 이상의 임의의 조합으로부터 선택될 수 있다.

[0109] 본 발명의 또 다른 실시양태에서 R5는 하기 - H, F, Cl, Br, I, CN, NO₂, 메틸, 에틸, (C₃)알킬, (C₄)알킬, (C₅)알킬, (C₆)알킬, (C₇)알킬, (C₈)알킬, 할로메틸, 할로에틸, 할로(C₃)알킬, 할로(C₄)알킬, 할로(C₅)알킬, 할로(C₆)알킬, 할로(C₇)알킬, 할로(C₈)알킬, 메톡시, 에톡시, (C₃)알콕시, (C₄)알콕시, (C₅)알콕시, (C₆)알콕시, (C₇)알콕시, (C₈)알콕시, 할로메톡시, 할로에톡시, 할로(C₃)알콕시, 할로(C₄)알콕시, 할로(C₅)알콕시, 할로(C₆)알콕시, 할로(C₇)알콕시, 및 할로(C₈)알콕시 중 1개 이상의 임의의 조합으로부터 선택될 수 있다.

[0110] 본 발명의 또 다른 실시양태에서 R2 및 R4는 F, Cl, Br, I, CN, 및 NO₂로부터 선택되고 R1, R3, 및 R5는 H이다.

[0111] 본 발명의 또 다른 실시양태에서 R2, R3, 및 R4는 F, Cl, Br, I, CN, 및 NO₂로부터 선택되고 R1, 및 R5는 H이다.

[0112] 본 발명의 또 다른 실시양태에서 R2, R3, 및 R4는 독립적으로 F 및 Cl로부터 선택되고 R1 및 R5는 H이다.

[0113] 본 발명의 또 다른 실시양태에서 R1은 Cl 및 H로부터 선택된다.

[0114] 본 발명의 또 다른 실시양태에서 R2는 CF₃, CH₃, Cl, F, 및 H로부터 선택된다.

[0115] 본 발명의 또 다른 실시양태에서 R3은 OCH₃, CH₃, F, Cl, 또는 H로부터 선택된다.

[0116] 본 발명의 또 다른 실시양태에서 R4는 CF₃, CH₃, Cl, F, 및 H로부터 선택된다.

[0117] 본 발명의 또 다른 실시양태에서 R5는 F, Cl, 및 H로부터 선택된다.

[0118] 본 발명의 또 다른 실시양태에서 R6은 하기 - 할로메틸, 할로에틸, 할로(C₃)알킬, 할로(C₄)알킬, 할로(C₅)알킬, 할로(C₆)알킬, 할로(C₇)알킬, 및 할로(C₈)알킬 중 1개 이상의 임의의 조합으로부터 선택될 수 있다.

[0119] 본 발명의 또 다른 실시양태에서 R6은 트리플루오로메틸이다.

[0120] 본 발명의 또 다른 실시양태에서 R7은 하기 - H, F, Cl, Br, 및 I 중 1개 이상의 임의의 조합으로부터 선택될 수 있다.

[0121] 본 발명의 또 다른 실시양태에서 R7은 H, OCH₃, 및 OH로부터 선택된다.

[0122] 본 발명의 또 다른 실시양태에서 R8은 하기 - H, 메틸, 에틸, (C₃)알킬, (C₄)알킬, (C₅)알킬, (C₆)알킬, (C₇)알킬, (C₈)알킬, 할로메틸, 할로에틸, 할로(C₃)알킬, 할로(C₄)알킬, 할로(C₅)알킬, 할로(C₆)알킬, 할로(C₇)알킬, 및 할로(C₈)알킬 중 1개 이상의 임의의 조합으로부터 선택될 수 있다.

[0123] 본 발명의 또 다른 실시양태에서 R8은 CH₃ 및 H로부터 선택된다.

[0124] 본 발명의 또 다른 실시양태에서 R9는 하기 - H, F, Cl, Br, I, 메틸, 에틸, (C₃)알킬, (C₄)알킬, (C₅)알킬, (C₆)알킬, (C₇)알킬, (C₈)알킬, 할로메틸, 할로에틸, 할로(C₃)알킬, 할로(C₄)알킬, 할로(C₅)알킬, 할로(C₆)알킬, 할로(C₇)알킬, 할로(C₈)알킬, 메톡시, 에톡시, (C₃)알콕시, (C₄)알콕시, (C₅)알콕시, (C₆)알콕시, (C₇)알콕시, (C₈)알콕시, 할로메톡시, 할로에톡시, 할로(C₃)알콕시, 할로(C₄)알콕시, 할로(C₅)알콕시, 할로(C₆)알콕시, 할로(C₇)알콕시, 및 할로(C₈)알콕시 중 1개 이상의 임의의 조합으로부터 선택될 수 있다.

[0125] 본 발명의 또 다른 실시양태에서 R10은 하기 - H, F, Cl, Br, I, CN, 메틸, 에틸, (C₃)알킬, (C₄)알킬, (C₅)알킬, (C₆)알킬, (C₇)알킬, (C₈)알킬, 할로메틸, 할로에틸, 할로(C₃)알킬, 할로(C₄)알킬, 할로(C₅)알킬, 할로(C₆)알킬, 할로(C₇)알킬, 할로(C₈)알킬, 메톡시, 에톡시, (C₃)알콕시, (C₄)알콕시, (C₅)알콕시, (C₆)알콕시, (C₇)알콕시, (C₈)알콕시, 할로메톡시, 할로에톡시, 할로(C₃)알콕시, 할로(C₄)알콕시, 할로(C₅)알콕시, 할로(C₆)알

콕시, 할로(C₇)알콕시, 할로(C₈)알콕시, 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 및 시클로헥실 중 1개 이상의 임의의 조합으로부터 선택될 수 있다.

[0126] 본 발명의 또 다른 실시양태에서 R10은 하기 - H, Cl, Br, CH₃, 및 CF₃ 중 1개 이상의 임의의 조합으로부터 선택될 수 있다.

[0127] 본 발명의 또 다른 실시양태에서 R10은 Br, C(=NOH)NH₂, C(=O)H, C(=O)NH₂, C(=O)OCH₂CH₃, C(=O)OH, CF₃, CH₂CH₃, CH₂OH, CH₃, Cl, CN, F, H, NH₂, NHC(=O)H, NHCH₃, NO₂, OCH₃, OCHF₂, 및 피리딜로부터 선택된다.

[0128] 본 발명의 또 다른 실시양태에서 R11은 하기 - C(=O)N(H)(C((CH₃)₂)C(=O)N(H)(CH₂CF₃)), C(=O)N(H)(CH(CH₃)C(=O)N(H)(CH₂CF₃)), C(=O)N(H)(CH(CH₂CH₃)C(=O)N(H)(CH₂CF₃)), C(=O)N(H)(CH(CH₃)C(=S)N(H)(CH₂CF₃)), C(=O)N(H)(C((CH₃)₂)C(=S)N(H)(CH₂CF₃)), 및 C(=S)N(H)(C((CH₃)₂)C(=S)N(H)(CH₂CF₃)) 중 1개 이상의 임의의 조합으로부터 선택될 수 있다.

[0129] 본 발명의 또 다른 실시양태에서 R11은 C(=O 또는 S)N(H)((C₁-C₈)알킬)C(=O 또는 S)N(H)(할로(C₁-C₈)알킬))이고, 이는 R1 내지 R10 및 X1 내지 X3의 임의의 실시양태와 조합하여 사용될 수 있다.

[0130] 본 발명의 또 다른 실시양태에서 R12는 하기 - H, F, Cl, Br, I, 메틸, 에틸, (C₃)알킬, (C₄)알킬, (C₅)알킬, (C₆)알킬, (C₇)알킬, (C₈)알킬, 할로메틸, 할로에틸, 할로(C₃)알킬, 할로(C₄)알킬, 할로(C₅)알킬, 할로(C₆)알킬, 할로(C₇)알킬, 할로(C₈)알킬, 할로메톡시, 할로에톡시, 할로(C₃)알콕시, 할로(C₄)알콕시, 할로(C₅)알콕시, 할로(C₆)알콕시, 할로(C₇)알콕시, 및 할로(C₈)알콕시 중 1개 이상의 임의의 조합으로부터 선택될 수 있다.

[0131] 본 발명의 또 다른 실시양태에서 R12는 CH₃, 및 H로부터 선택된다.

[0132] 본 발명의 또 다른 실시양태에서 R13은 하기 - H, F, Cl, Br, I, 메틸, 에틸, (C₃)알킬, (C₄)알킬, (C₅)알킬, (C₆)알킬, (C₇)알킬, (C₈)알킬, 할로메틸, 할로에틸, 할로(C₃)알킬, 할로(C₄)알킬, 할로(C₅)알킬, 할로(C₆)알킬, 할로(C₇)알킬, 할로(C₈)알킬, 할로메톡시, 할로에톡시, 할로(C₃)알콕시, 할로(C₄)알콕시, 할로(C₅)알콕시, 할로(C₆)알콕시, 할로(C₇)알콕시, 및 할로(C₈)알콕시 중 1개 이상의 임의의 조합으로부터 선택될 수 있다.

[0133] 본 발명의 또 다른 실시양태에서 R13은 CH₃, Cl 및 H로부터 선택된다.

[0134] 본 발명의 또 다른 실시양태에서 R12-R13은 CH=CHCH=CH를 함유하는 히드로카르빌 연결이다.

[0135] 본 발명의 또 다른 실시양태에서 R14는 하기 - H, 메틸, 에틸, (C₃)알킬, (C₄)알킬, (C₅)알킬, (C₆)알킬, (C₇)알킬, (C₈)알킬, 할로메틸, 할로에틸, 할로(C₃)알킬, 할로(C₄)알킬, 할로(C₅)알킬, 할로(C₆)알킬, 할로(C₇)알킬, 할로(C₈)알킬, 메틸-아릴, 에틸-아릴, (C₃)알킬-아릴, (C₄)알킬-아릴, (C₅)알킬-아릴, (C₆)알킬-아릴, (C₇)알킬-아릴, (C₈)알킬-아릴, 메틸-(치환된-아릴), 에틸-(치환된-아릴), (C₃)알킬-(치환된-아릴), (C₄)알킬-(치환된-아릴), (C₅)알킬-(치환된-아릴), (C₆)알킬-(치환된-아릴), (C₇)알킬-(치환된-아릴), (C₈)알킬-(치환된-아릴), 0-메틸-아릴, 0-에틸-아릴, 0-(C₃)알킬-아릴, 0-(C₄)알킬-아릴, 0-(C₅)알킬-아릴, 0-(C₆)알킬-아릴, 0-(C₇)알킬-아릴, 0-(C₈)알킬-아릴, 0-메틸-(치환된-아릴), 0-에틸-(치환된-아릴), 0-(C₃)알킬-(치환된-아릴), 0-(C₄)알킬-(치환된-아릴), 0-(C₅)알킬-(치환된-아릴), 0-(C₆)알킬-(치환된-아릴), 0-(C₇)알킬-(치환된-아릴), 0-(C₈)알킬-(치환된-아릴), 메틸-헤테로시클릴, 에틸-헤테로시클릴, (C₃)알킬-헤테로시클릴, (C₄)알킬-헤테로시클릴, (C₅)알킬-헤테로시클릴, (C₆)알킬-헤테로시클릴, (C₇)알킬-헤테로시클릴, (C₈)알킬-헤테로시클릴, 메틸-(치환된-헤테로시클릴), 에틸-(치환된-헤테로시클릴), (C₃)알킬-(치환된-헤테로시클릴), (C₄)알킬-(치환된-헤테로시클릴), (C₅)알킬-(치환된-헤테로시클릴), (C₆)알킬-(치환된-헤테로시클릴), (C₇)알킬-(치환된-헤테로시클릴), (C₈)알킬-(치환된-헤테로시클릴), 0-메틸-헤테로시클릴, 0-에틸-헤테로시클릴, 0-(C₃)알킬-헤테로시클릴, 0-(C₄)알킬-헤테로시클릴, 0-(C₅)알킬-헤테로시클릴, 0-(C₆)알킬-헤테로시클릴, 0-(C₇)알킬-헤테로시클릴, 0-

(C₈)알킬-헥테로시클릴, O-메틸-(치환된-헥테로시클릴), O-에틸-(치환된-헥테로시클릴), O-(C₃)알킬-(치환된-헥테로시클릴), O-(C₄)알킬-(치환된-헥테로시클릴), O-(C₅)알킬-(치환된-헥테로시클릴), O-(C₆)알킬-(치환된-헥테로시클릴), O-(C₇)알킬-(치환된-헥테로시클릴), O-(C₈)알킬-(치환된-헥테로시클릴), 메틸-C(=O)N(R16)(R17), 에틸-C(=O)N(R16)(R17), (C₃)알킬-C(=O)N(R16)(R17), (C₄)알킬-C(=O)N(R16)(R17), (C₅)알킬-C(=O)N(R16)(R17), (C₆)알킬-C(=O)N(R16)(R17), (C₇)알킬-C(=O)N(R16)(R17), 및 (C₈)알킬-C(=O)N(R16)(R17) 중 1개 이상의 임의의 조합으로부터 선택될 수 있다.

[0136]

본 발명의 또 다른 실시양태에서 R14는 하기 - H, CH₃, CH₂CF₃, CH₂-할로피리디닐, 옥소-피롤리디닐, 할로페닐, 티에타닐, CH₂-페닐, CH₂-피리디닐, 티에타닐-디옥시드, CH₂-할로티아졸릴, C((CH₃)₂)-피리디닐, N(H)(할로페닐), CH₂-피리미디닐, CH₂-테트라히드로푸라닐, CH₂-푸라닐, O-CH₂-할로피리디닐, 및 CH₂C(=O)N(H)(CH₂CF₃) 중 1개 이상의 임의의 조합으로부터 선택될 수 있다.

[0137]

본 발명의 또 다른 실시양태에서 R15는 하기 - H, 메틸, 에틸, (C₃)알킬, (C₄)알킬, (C₅)알킬, (C₆)알킬, (C₇)알킬, (C₈)알킬, 할로메틸, 할로에틸, 할로(C₃)알킬, 할로(C₄)알킬, 할로(C₅)알킬, 할로(C₆)알킬, 할로(C₇)알킬, 할로(C₈)알킬, 메틸-아릴, 에틸-아릴, (C₃)알킬-아릴, (C₄)알킬-아릴, (C₅)알킬-아릴, (C₆)알킬-아릴, (C₇)알킬-아릴, (C₈)알킬-아릴, 메틸-(치환된-아릴), 에틸-(치환된-아릴), (C₃)알킬-(치환된-아릴), (C₄)알킬-(치환된-아릴), (C₅)알킬-(치환된-아릴), (C₆)알킬-(치환된-아릴), (C₇)알킬-(치환된-아릴), (C₈)알킬-(치환된-아릴), O-메틸-아릴, O-에틸-아릴, O-(C₃)알킬-아릴, O-(C₄)알킬-아릴, O-(C₅)알킬-아릴, O-(C₆)알킬-아릴, O-(C₇)알킬-아릴, O-(C₈)알킬-아릴, O-메틸-(치환된-아릴), O-에틸-(치환된-아릴), O-(C₃)알킬-(치환된-아릴), O-(C₄)알킬-(치환된-아릴), O-(C₅)알킬-(치환된-아릴), O-(C₆)알킬-(치환된-아릴), O-(C₇)알킬-(치환된-아릴), O-(C₈)알킬-(치환된-아릴), 메틸-헥테로시클릴, 에틸-헥테로시클릴, (C₃)알킬-헥테로시클릴, (C₄)알킬-헥테로시클릴, (C₅)알킬-헥테로시클릴, (C₆)알킬-헥테로시클릴, (C₇)알킬-헥테로시클릴, (C₈)알킬-헥테로시클릴, 메틸-(치환된-헥테로시클릴), 에틸-(치환된-헥테로시클릴), (C₃)알킬-(치환된-헥테로시클릴), (C₄)알킬-(치환된-헥테로시클릴), (C₅)알킬-(치환된-헥테로시클릴), (C₆)알킬-(치환된-헥테로시클릴), (C₇)알킬-(치환된-헥테로시클릴), (C₈)알킬-(치환된-헥테로시클릴), O-메틸-헥테로시클릴, O-에틸-헥테로시클릴, O-(C₃)알킬-헥테로시클릴, O-(C₄)알킬-헥테로시클릴, O-(C₅)알킬-헥테로시클릴, O-(C₆)알킬-헥테로시클릴, O-(C₇)알킬-헥테로시클릴, O-(C₈)알킬-헥테로시클릴, O-메틸-(치환된-헥테로시클릴), O-에틸-(치환된-헥테로시클릴), O-(C₃)알킬-(치환된-헥테로시클릴), O-(C₄)알킬-(치환된-헥테로시클릴), O-(C₅)알킬-(치환된-헥테로시클릴), O-(C₆)알킬-(치환된-헥테로시클릴), O-(C₇)알킬-(치환된-헥테로시클릴), O-(C₈)알킬-(치환된-헥테로시클릴), 메틸-C(=O)N(R16)(R17), 에틸-C(=O)N(R16)(R17), (C₃)알킬-C(=O)N(R16)(R17), (C₄)알킬-C(=O)N(R16)(R17), (C₅)알킬-C(=O)N(R16)(R17), (C₆)알킬-C(=O)N(R16)(R17), (C₇)알킬-C(=O)N(R16)(R17), 및 (C₈)알킬-C(=O)N(R16)(R17) 중 1개 이상의 임의의 조합으로부터 선택될 수 있다.

[0138]

본 발명의 또 다른 실시양태에서 R15는 하기 - H, CH₃, CH₂CF₃, CH₂-할로피리디닐, 옥소-피롤리디닐, 할로페닐, 티에타닐, CH₂-페닐, CH₂-피리디닐, 티에타닐-디옥시드, CH₂-할로티아졸릴, C((CH₃)₂)-피리디닐, N(H)(할로페닐), CH₂-피리미디닐, CH₂-테트라히드로푸라닐, CH₂-푸라닐, O-CH₂-할로피리디닐, 및 CH₂C(=O)N(H)(CH₂CF₃) 중 1개 이상의 임의의 조합으로부터 선택될 수 있다.

[0139]

본 발명의 또 다른 실시양태에서 R16은 하기 - H, 메틸, 에틸, (C₃)알킬, (C₄)알킬, (C₅)알킬, (C₆)알킬, (C₇)알킬, (C₈)알킬, 할로메틸, 할로에틸, 할로(C₃)알킬, 할로(C₄)알킬, 할로(C₅)알킬, 할로(C₆)알킬, 할로(C₇)알킬, 할로(C₈)알킬, 메틸-아릴, 에틸-아릴, (C₃)알킬-아릴, (C₄)알킬-아릴, (C₅)알킬-아릴, (C₆)알킬-아릴, (C₇)알킬-아릴, (C₈)알킬-아릴, 메틸-(치환된-아릴), 에틸-(치환된-아릴), (C₃)알킬-(치환된-아릴), (C₄)알킬-(치환된-아릴), (C₅)알킬-(치환된-아릴), (C₆)알킬-(치환된-아릴), (C₇)알킬-(치환된-아릴), (C₈)알킬-(치환된-아릴), O-메

틸-아릴, 0-에틸-아릴, 0-(C₃)알킬-아릴, 0-(C₄)알킬-아릴, 0-(C₅)알킬-아릴, 0-(C₆)알킬-아릴, 0-(C₇)알킬-아릴, 0-(C₈)알킬-아릴, 0-메틸-(치환된-아릴), 0-에틸-(치환된-아릴), 0-(C₃)알킬-(치환된-아릴), 0-(C₄)알킬-(치환된-아릴), 0-(C₅)알킬-(치환된-아릴), 0-(C₆)알킬-(치환된-아릴), 0-(C₇)알킬-(치환된-아릴), 0-(C₈)알킬-(치환된-아릴), 메틸-헤테로시클릴, 에틸-헤테로시클릴, (C₃)알킬-헤테로시클릴, (C₄)알킬-헤테로시클릴, (C₅)알킬-헤테로시클릴, (C₆)알킬-헤테로시클릴, (C₇)알킬-헤테로시클릴, (C₈)알킬-헤테로시클릴, 메틸-(치환된-헤테로시클릴), 에틸-(치환된-헤테로시클릴), (C₃)알킬-(치환된-헤테로시클릴), (C₄)알킬-(치환된-헤테로시클릴), (C₅)알킬-(치환된-헤테로시클릴), (C₆)알킬-(치환된-헤테로시클릴), (C₇)알킬-(치환된-헤테로시클릴), (C₈)알킬-(치환된-헤테로시클릴), 0-메틸-헤테로시클릴, 0-에틸-헤테로시클릴, 0-(C₃)알킬-헤테로시클릴, 0-(C₄)알킬-헤테로시클릴, 0-(C₅)알킬-헤테로시클릴, 0-(C₆)알킬-헤테로시클릴, 0-(C₇)알킬-헤테로시클릴, 0-(C₈)알킬-헤테로시클릴, 0-메틸-(치환된-헤테로시클릴), 0-에틸-(치환된-헤테로시클릴), 0-(C₃)알킬-(치환된-헤테로시클릴), 0-(C₄)알킬-(치환된-헤테로시클릴), 0-(C₅)알킬-(치환된-헤테로시클릴), 0-(C₆)알킬-(치환된-헤테로시클릴), 0-(C₇)알킬-(치환된-헤테로시클릴), 및 0-(C₈)알킬-(치환된-헤테로시클릴) 중 1개 이상의 임의의 조합으로부터 선택될 수 있다.

[0140] 본 발명의 또 다른 실시양태에서 R16은 하기 - H, CH₂CF₃, 시클로프로필, 티에타닐, 티에타닐 디옥시드, 및 할로페닐 중 1개 이상의 임의의 조합으로부터 선택될 수 있다.

[0141] 본 발명의 또 다른 실시양태에서 R17은 하기 - H, 메틸, 에틸, (C₃)알킬, (C₄)알킬, (C₅)알킬, (C₆)알킬, (C₇)알킬, (C₈)알킬, 할로메틸, 할로에틸, 할로(C₃)알킬, 할로(C₄)알킬, 할로(C₅)알킬, 할로(C₆)알킬, 할로(C₇)알킬, 할로(C₈)알킬, 메틸-아릴, 에틸-아릴, (C₃)알킬-아릴, (C₄)알킬-아릴, (C₅)알킬-아릴, (C₆)알킬-아릴, (C₇)알킬-아릴, (C₈)알킬-아릴, 메틸-(치환된-아릴), 에틸-(치환된-아릴), (C₃)알킬-(치환된-아릴), (C₄)알킬-(치환된-아릴), (C₅)알킬-(치환된-아릴), (C₆)알킬-(치환된-아릴), (C₇)알킬-(치환된-아릴), (C₈)알킬-(치환된-아릴), 0-메틸-아릴, 0-에틸-아릴, 0-(C₃)알킬-아릴, 0-(C₄)알킬-아릴, 0-(C₅)알킬-아릴, 0-(C₆)알킬-아릴, 0-(C₇)알킬-아릴, 0-(C₈)알킬-아릴, 0-메틸-(치환된-아릴), 0-에틸-(치환된-아릴), 0-(C₃)알킬-(치환된-아릴), 0-(C₄)알킬-(치환된-아릴), 0-(C₅)알킬-(치환된-아릴), 0-(C₆)알킬-(치환된-아릴), 0-(C₇)알킬-(치환된-아릴), 0-(C₈)알킬-(치환된-아릴), 메틸-헤테로시클릴, 에틸-헤테로시클릴, (C₃)알킬-헤테로시클릴, (C₄)알킬-헤테로시클릴, (C₅)알킬-헤테로시클릴, (C₆)알킬-헤테로시클릴, (C₇)알킬-헤테로시클릴, (C₈)알킬-헤테로시클릴, 메틸-(치환된-헤테로시클릴), 에틸-(치환된-헤테로시클릴), (C₃)알킬-(치환된-헤테로시클릴), (C₄)알킬-(치환된-헤테로시클릴), (C₅)알킬-(치환된-헤테로시클릴), (C₆)알킬-(치환된-헤테로시클릴), (C₇)알킬-(치환된-헤테로시클릴), (C₈)알킬-(치환된-헤테로시클릴), 0-메틸-헤테로시클릴, 0-에틸-헤테로시클릴, 0-(C₃)알킬-헤테로시클릴, 0-(C₄)알킬-헤테로시클릴, 0-(C₅)알킬-헤테로시클릴, 0-(C₆)알킬-헤테로시클릴, 0-(C₇)알킬-헤테로시클릴, 0-(C₈)알킬-헤테로시클릴, 0-메틸-(치환된-헤테로시클릴), 0-에틸-(치환된-헤테로시클릴), 0-(C₃)알킬-(치환된-헤테로시클릴), 0-(C₄)알킬-(치환된-헤테로시클릴), 0-(C₅)알킬-(치환된-헤테로시클릴), 0-(C₆)알킬-(치환된-헤테로시클릴), 0-(C₇)알킬-(치환된-헤테로시클릴), 및 0-(C₈)알킬-(치환된-헤테로시클릴) 중 1개 이상의 임의의 조합으로부터 선택될 수 있다.

[0142] 본 발명의 또 다른 실시양태에서 R17은 하기 - H, CH₂CF₃, 시클로프로필, 티에타닐, 티에타닐 디옥시드, 및 할로페닐 중 1개 이상의 임의의 조합으로부터 선택될 수 있다.

[0143] 본 발명의 또 다른 실시양태에서 X1은 CR12이고, X2는 CR13이고, X3은 CR9이다.

[0144] 본 발명의 또 다른 실시양태에서 헤테로시클릴은 고리 구조 내에 바람직하게는 약 6 내지 10개의 원자, 보다 바람직하게는 6 내지 8개의 원자를 갖는다.

[0145] 화학식 1의 분자는 일반적으로 약 100 달톤 내지 약 1200 달톤의 분자 질량을 가질 것이다. 그러나, 분자 질량이 약 120 달톤 내지 약 900 달톤인 경우가 일반적으로 바람직하고, 분자 질량이 약 140 달톤 내지 약 600 달톤

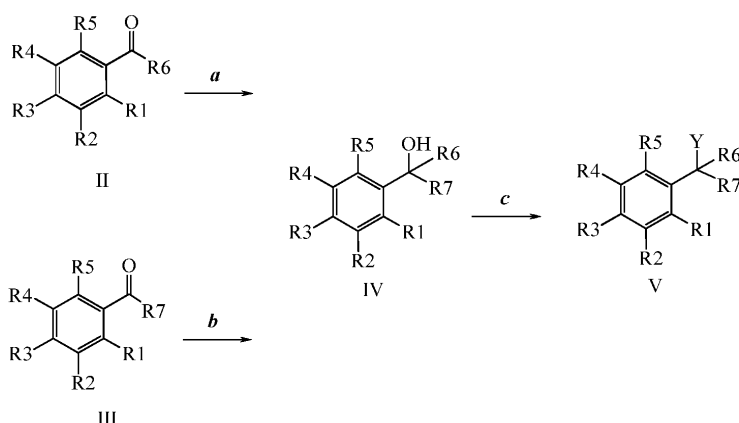
인 경우가 보다 더 일반적으로 바람직하다.

[0146]

화학식 IV의 벤질 알콜 (여기서 R1, R2, R3, R4, R5, R6, 및 R7은 상기 개시된 바와 같음)을 두 방법으로 합성할 수 있다. 반응식 I의 단계 **a**에 개시된 한 방법은, 화학식 II의 케톤 (여기서, R1, R2, R3, R4, R5, 및 R6은 상기 개시된 바와 같음)을, 0℃에서 메틸 알콜 (MeOH)과 같은 극성 양성자성 용매 중에서 수성 수산화나트륨 (NaOH)과 같은 염기성 조건 하에, 수소화붕소나트륨 (NaBH₄)과 같은 환원제로 처리하는 것이다. 대안적으로, 화학식 III의 알데히드 (여기서, R1, R2, R3, R4, R5, 및 R7은 상기 개시된 바와 같음)를, 반응식 I의 단계 **b**에서와 같이, 테트라히드로푸란 (THF)과 같은 극성 비양성자성 용매 중에서 촉매량의 테트라부틸암모늄 플루오라이드 (TBAF)의 존재 하에 트리플루오로트리메틸실란과 반응시킨다. 화학식 IV의 화합물을, 반응식 I의 단계 **c**에서와 같이, 환류 온도에서 디클로로메탄 (CH₂Cl₂)과 같은 비반응성 용매 중에서, 할로젠화제, 예컨대 N-브로모숙신이미드 (NBS) 및 트리에틸 포스파이트와 반응시켜 Y = Br를 획득하거나, 환류 온도에서 톨루엔과 같은 탄화수소 용매 중에서, 예컨대 티오닐 클로라이드 및 피리딘과 반응시켜 Y = Cl를 획득함으로써 화학식 V의 화합물 (여기서, Y는 Br, Cl 또는 I로부터 선택되고 R1, R2, R3, R4, R5, R6, 및 R7은 상기 개시된 바와 같음)로 변환시킬 수 있다.

[0147]

<반응식 I>



[0148]

[0149]

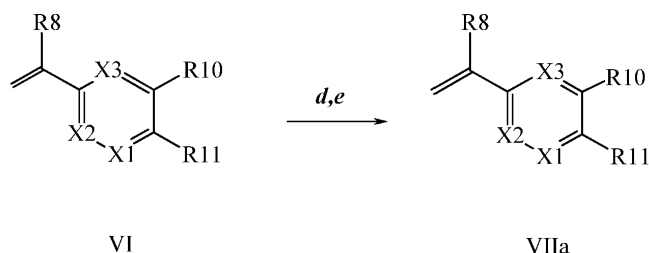
스티렌 커플링 파트너의 형성은 반응식 II, III, IV 및 V에서와 같이 완수될 수 있다.

[0150]

반응식 II에서, 화학식 VI의 비닐벤조산 (여기서, R11은 (C=O)OH이고 R8, R9, R10, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을 두 단계로 화학식 VIIa의 비닐벤즈아미드 (여기서, R11은 (C=O)N(R14)(R15)이고, R8, R9, R10, R12, R13, R14, R15, 및 X는 상기 개시된 바와 같음)로 전환시킬 수 있다. 반응식 II의 단계 **d**에서와 같이, 화학식 VI의 벤조산을 CH₂Cl₂와 같은 비반응성 용매 중에서 촉매량의 N,N-디메틸포름아미드 (DMF)의 존재 하에 옥살릴 클로라이드로 처리하여 산 클로라이드를 형성하고, 이를 후속적으로, 반응식 II의 단계 **e**에서와 같이, THF와 같은 극성 비양성자성 용매 중에서 트리에틸아민 (TEA)과 같은 염기의 존재 하에 아민 (HN(R14)(R15)) (여기서, R14 및 R15는 상기 개시된 바와 같음)과 반응시켜, 화학식 VIIa의 비닐 벤즈아미드 (여기서, R11은 (C=O)N(R14)(R15)이고, R8, R9, R10, R12, R13, R14, R15, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)를 획득한다.

[0151]

<반응식 II>



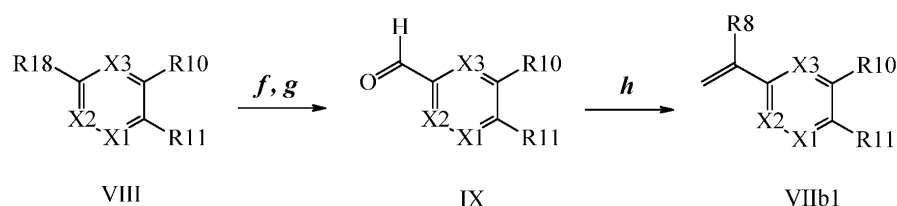
[0152]

[0153]

반응식 III 및 IV에서, 화학식 VIII의 할로벤조산 (여기서, R18은 Br 또는 I이고, R11은 (C=O)OH이고 R9, R10,

R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을 화학식 VIIb1 또는 화학식 VIIb2의 비닐벤조산 에스테르 (여기서, R18은 Br 또는 I이고, R11은 (C=O)O(C₁-C₆ 알킬)이고, R8, R9, R10, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)로 전환시킬 수 있다. 반응식 III의 단계 **f**에서, 화학식 VIII의 할로벤조산 (여기서, R18은 Br임)을, 약 -78℃의 온도에서, THF와 같은 극성 비양성자성 용매 중에서 염기, 예컨대 n-부틸리튬 (n-BuLi), 및 DMF로 처리한다. 생성된 포르밀 벤조산을, 단계 **g**에서와 같이, 에틸 알콜 (EtOH)과 같은 알콜의 존재 하에 황산 (H₂SO₄)과 같은 산과 반응시켜, 화학식 IX의 포르밀 벤조산 에틸 에스테르 (여기서, R11은 (C=O)O(C₁-C₆ 알킬)이고, R9, R10, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)를 수득한다. 화학식 VIIb1의 비닐 벤조산 에스테르는, 반응식 III의 단계 **h**에서와 같이, 화학식 IX의 화합물을, 주위 온도에서, 1,4-디옥산과 같은 극성 비양성자성 용매 중에서 염기, 예컨대 탄산칼륨 (K₂CO₃), 및 메틸 트리페닐 포스포늄 브로마이드와 반응시킴으로써 수득한다.

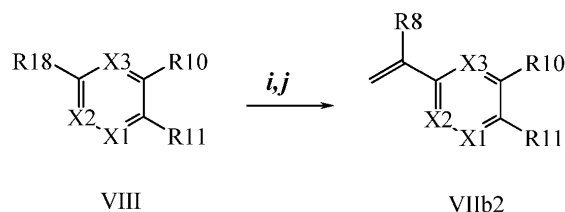
[0154] <반응식 III>



[0155]

[0156] 반응식 IV의 단계 **i**에서, 화학식 VIII의 할로벤조산 (여기서, R18은 Br이고, R11은 (C=O)OH이고, R8, R9, R10, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을 주위 온도에서, THF와 같은 극성 비양성자성 용매 중에서 염기, 예컨대 TEA 및 촉매량의 4-(디메틸아미노)피리딘 (DMAP)의 존재 하에 디-tert-부틸 디카르보네이트로 처리한다. 생성된 벤조산 tert-부틸 에스테르를, 단계 **j**에서와 같이, 환류 온도에서 톨루엔과 같은 비반응성 용매 중에서 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (Pd(PPh₃)₄)과 같은 팔라듐 촉매, 및 K₂CO₃과 같은 염기의 존재 하에 비닐 보론산 무수물 피리딘 착물과 반응시켜, 화학식 VIIb2의 비닐 벤조산 에스테르 (여기서, R11은 (C=O)O(C₁-C₆ 알킬)이고, R8, R9, R10, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)를 수득한다.

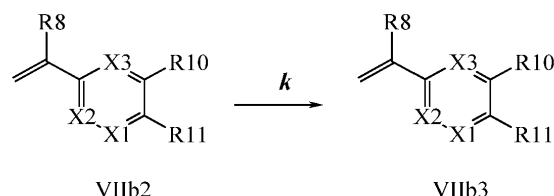
[0157] <반응식 IV>



[0158]

[0159] 반응식 V의 단계 **k**에서, 화학식 VIIb2의 비닐 벤조산 에스테르 (여기서, R10은 Br이고, R11은 (C=O)O(C₁-C₆ 알킬)이고, R8, R9, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 정의된 바와 같음)를, 140℃에서 DMF와 같은 극성 비양성자성 용매 중에서 시안화구리(I) (CuCN)와 반응시켜 화학식 VIIb3의 상응하는 비닐 벤조산 에스테르 (여기서, R10은 CN이고, R11은 (C=O)O(C₁-C₆ 알킬)이고, R8, R9, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)로 추가로 변환시킬 수 있다.

[0160] <반응식 V>



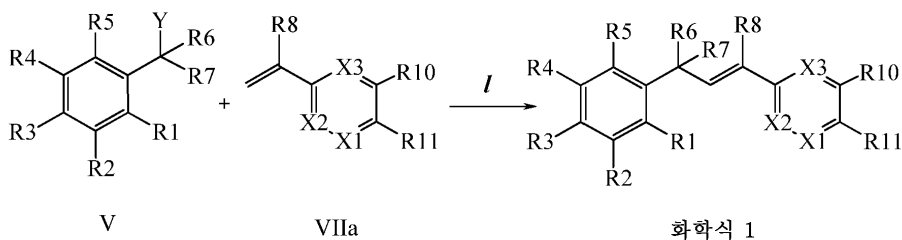
[0161]

[0162]

화학식 V의 화합물과 화학식 VIIa, VIIb1, VIIb2 및 VIIb3의 화합물과의 커플링은, 반응식 VI, VII, 및 VIII에서와 같이 완수될 수 있다. 반응식 VI의 단계 1에서, 화학식 V의 화합물 (여기서, Y, R1, R2, R3, R4, R5, R6, 및 R7은 상기 개시된 바와 같음) 및 화학식 VIIa의 비닐벤즈아미드 (여기서, R11은 (C=O)N(R14)(R15)이고, R8, R9, R10, R12, R13, R14, R15, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)를 약 180℃의 온도에서 1,2-디클로로벤젠과 같은 용매 중에서 염화구리(I) (CuCl) 및 2,2-비피리딘의 존재 하에 반응시켜 화학식 1의 분자 (여기서, R11은 (C=O)N(R14)(R15)이고, R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, R9, R10, R12, R13, R14, R15, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)를 수득한다.

[0163]

<반응식 VI>



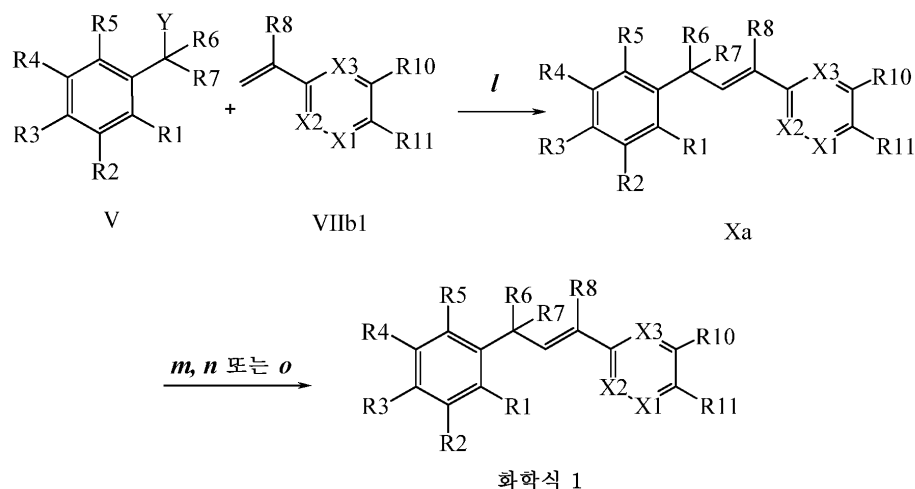
[0164]

[0165]

반응식 VII의 단계 1에서, 화학식 V의 화합물 (여기서, Y, R1, R2, R3, R4, R5, R6, 및 R7은 상기 개시된 바와 같음) 및 화학식 VIIb1의 비닐벤조산 에스테르 (여기서, R11은 (C=O)O(C₁-C₆ 알킬)이고, R8, R9, R10, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)를 약 180℃의 온도에서 1,2-디클로로벤젠과 같은 용매 중에서 CuCl 및 2,2-비피리딘의 존재 하에 반응시켜 화학식 Xa의 화합물 (여기서, R11은 (C=O)O(C₁-C₆ 알킬)이고, R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, R9, R10, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을 수득한다. 이어서, 화학식 Xa의 화합물을 단계 m 및 n에 개시된 바와 같은 두 단계 과정에 의해 또는 단계 o에 개시된 바와 같은 한 단계로, 화학식 1의 분자 (여기서, R11은 (C=O)N(R14)(R15)이고, R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, R9, R10, R12, R13, R14, R15, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)로 전환시킨다. 반응식 VII의 단계 m에서, 화학식 Xa의 에스테르를 약 100℃에서 1,4-디옥산과 같은 극성 비양성자성 용매 중에서 약 11 노르말 (N) 염산 (HCl)과 같은 산성 조건 하에 상응하는 산으로 비누화시킨다. 산을 후속적으로 N,N-디이소프로필에틸아민 (DIPEA) 또는 DMAP과 같은 염기의 존재 하에 1-히드록시벤조트리아졸 (HOBt), N-(3-디메틸아미노프로필)-N'-에틸-카르보디이미드 히드록로라이드 (EDC · HCl), 벤조트리아졸-1-일-옥시트리피롤리딘노포스포늄 헥사플루오로포스페이트 (PyBOP), 2-클로로-1,3-디메틸이미다졸리디늄 헥사플루오로포스페이트 (CIP), 1-히드록시-7-아자벤조트리아졸 (HOAt) 또는 O-벤조트리아졸-N,N,N',N'-테트라메틸-우로늄-헥사플루오로-포스페이트 (HBTU)와 같은 펩티드 커플링 시약을 사용하여 아민 (HN(R14)(R15)) (여기서, R14 및 R15는 상기 개시된 바와 같음)에 커플링시켜, 화학식 1의 분자 (여기서, R11은 (C=O)N(R14)(R15)이고, R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, R9, R10, R12, R13, R14, R15, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)를 수득할 수 있다. 대안적으로, 화학식 Xa의 에스테르를, 반응식 VII의 단계 o에서와 같이, 주위 온도에서 CH₂Cl₂와 같은 비반응성 용매 중에서 톨루엔 중 트리메틸알루미늄의 용액의 존재 하에 아민 (HN(R14)(R15))과 반응시켜, 화학식 1의 분자 (여기서, R11은 (C=O)N(R14)(R15)이고, R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, R9, R10, R12, R13, R14, R15, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)를 수득한다.

[0166]

<반응식 VII>



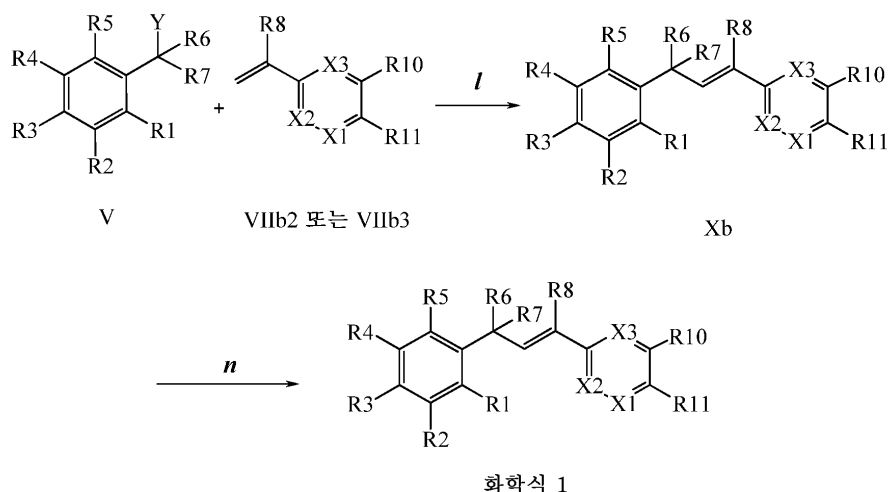
[0167]

[0168]

반응식 VIII의 단계 1에서, 화학식 V의 화합물 (여기서, Y, R1, R2, R3, R4, R5, R6, 및 R7은 상기 개시된 바와 같음) 및 화학식 VIIb2 또는 VIIb3의 비닐벤조산 에스테르 (여기서, R11은 (C=O)O(C₁-C₆ 알킬)이고, R8, R9, R10, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)를 약 180℃의 온도에서 1,2-디클로로벤젠과 같은 용매 중에서 CuCl 및 2,2-비피리딘의 존재 하에 반응시켜 화학식 Xb의 화합물 (여기서, R11은 (C=O)OH이고, R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, R9, R10, R12, R13, R14, R15, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을 수득한다. 이어서, 화학식 Xb의 화합물을 단계 n에 개시된 바와 같이 한 단계로, 화학식 1의 분자 (여기서, R11은 (C=O)N(R14)(R15)이고, R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, R9, R10, R12, R13, R14, R15, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)로 전환시킨다. 반응식 VIII의 단계 n에서, 화학식 Xb의 산을 DIPEA 또는 DMAP와 같은 염기의 존재 하에 HOBt, EDC·HCl, PyBOP, CIP, HOAt 또는 HBTU와 같은 펩티드 커플링 시약을 사용하여 아민 (HN(R14)(R15)) (여기서, R14 및 R15는 상기 개시된 바와 같음)에 커플링시켜, 화학식 1의 분자 (여기서, R11은 (C=O)N(R14)(R15)이고, R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, R9, R10, R12, R13, R14, R15, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)를 수득할 수 있다.

[0169]

<반응식 VIII>



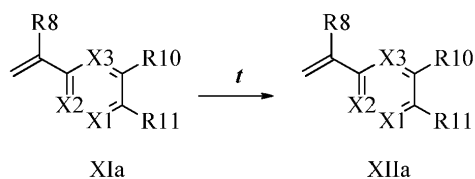
[0170]

[0171]

반응식 XIII의 단계 t에서, 화학식 XIa의 비닐 벤질 클로라이드 (여기서, R11은 -CH₂Cl이고 R8, R9, R10, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 정의된 바와 같음)를, 70℃에서 DMF와 같은 극성 비양성자성 용매 중에서 포타슘 프탈이미드와 반응시켜 화학식 XIIa의 상응하는 프탈이미드-보호된 벤질 아민 (여기서, R11은 CH₂N(프탈이미드)이고, R8, R9, R10, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)으로 변환시킬 수 있다.

[0172]

<반응식 XIII>



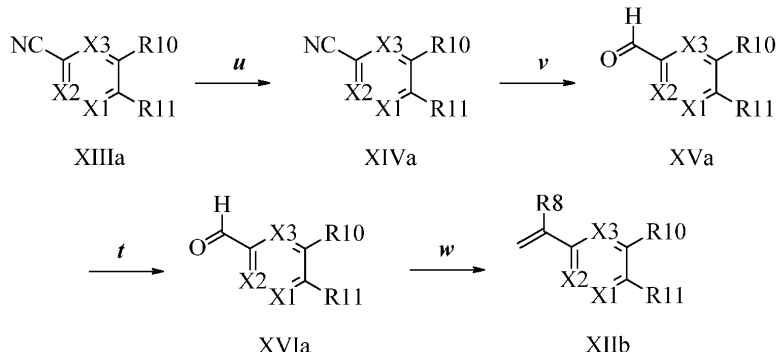
[0173]

[0174]

반응식 XIV의 단계 **u**에서, 화학식 XIIIa의 4-메틸벤조니트릴 (여기서, R11은 CH₃이고 R9, R10, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 정의된 바와 같음)을 77℃에서 사염화탄소 (CCl₄)와 같은 비반응성 용매 중에서 NBS 및 아조비스이소부티로니트릴 (AIBN)과 반응시켜 화학식 XIVa의 상응하는 벤질 브로마이드 (여기서, R11은 CH₂Br이고 R8, R9, R10, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)로 변환시킬 수 있다. 화학식 XIVa의 니트릴기 (CN)를, 반응식 XIV의 단계 **v**에서와 같이, 0℃에서, 톨루엔과 같은 비양성자성 용매 중에서 다이소부틸알루미늄 히드라이드 (DIBAL-H)와 반응시키고, 이어서 1.0 M HCl로 킬링함으로써 화학식 XVa의 상응하는 알데히드 (여기서, R11은 CH₂Br이고 R9, R10, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 정의된 바와 같음)로 환원시킬 수 있다. 화학식 XVa의 화합물을 반응식 XIV의 단계 **t**에서와 같이 60℃에서 DMF와 같은 극성 비양성자성 용매 중에서 포타슘 프탈이미드와 반응시켜, 화학식 XVIa의 상응하는 프탈이미드-보호된 벤질 아민 (여기서, R11은 CH₂N(프탈이미드)이고 R9, R10, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)으로 추가로 변환시킬 수 있다. 반응식 XIV의 단계 **w**에서, 화학식 XVIa의 알데히드를 주위 온도에서 K₂CO₃과 같은 염기의 존재 하에 1,4-디옥산과 같은 극성 비양성자성 용매 중에서 메틸 트리페닐 포스포늄 브로마이드와 반응시켜 화학식 XIIb의 올레핀 (여기서, R11은 CH₂N(프탈이미드)이고 R8, R9, R10, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)으로 전환시킬 수 있다.

[0175]

<반응식 XIV>



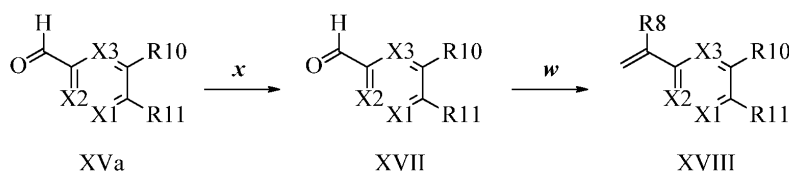
[0176]

[0177]

화학식 XVa의 알데히드 (여기서, R11은 CH₂Br이고 R9, R10, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 정의된 바와 같음)를, 반응식 XV의 단계 **x**에서와 같이, 주위 온도에서 K₂CO₃과 같은 염기의 존재 하에 N,N-디메틸아세트아미드 (DMA)와 같은 극성 비양성자성 용매 중에서 2-아미노피리딘과 같은 친핵체와 반응시켜 화학식 XVII의 화합물 (여기서, R11은 CH₂NH(2-피리딘)이고 R9, R10, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을 획득할 수 있다. 반응식 XV의 단계 **w**에서, 화학식 XVII의 화합물을 화학식 XVIII의 올레핀 (여기서, R11은 CH₂NH(2-피리딘)이고 R8, R9, R10, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)으로 전환시킬 수 있다.

[0178]

<반응식 XV>



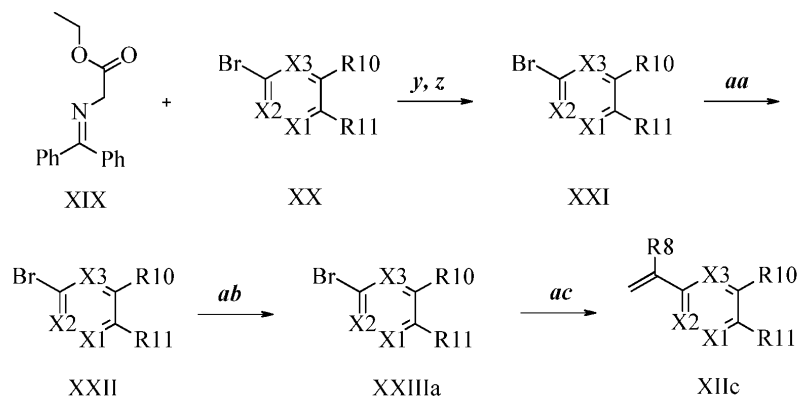
[0179]

[0180]

반응식 XVI의 단계 **y** 및 **z**에서와 같이 두 단계, 윈-포트 반응으로, 화학식 XIX의 화합물을 주위 온도에서, 수소화나트륨 (NaH)과 같은 염기, 및 DMF와 같은 극성 비양성자성 용매의 존재 하에 화학식 XX의 화합물 (여기서, R10 및 R11은 C1이고, X1은 N이고, R9, R13, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)과 반응시켜 화학식 XXI의 화합물 (여기서, R10은 C1이고, R11은 (CH)₂NH₂CO₂CH₂CH₃이고, X1은 N이고, R9, R13, X2, 및 X3은 상기 정의된 바와 같음)을 수득할 수 있다. 화학식 XXI의 화합물의 가수분해 및 탈카르복실화를, 반응식 XVI의 단계 **aa**에서와 같이, 환류 온도에서 산성 조건 하에, 예컨대 3 N HCl을 사용하여 반응시켜 완수함으로써, 화학식 XXII의 화합물 (여기서, R10은 C1이고, R11은 CH₂NH₂·HCl이고, X1은 N이고, R9, R13, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을 수득할 수 있다. 화학식 XXII의 화합물을, 반응식 XVI의 단계 **ab**에서와 같이, 환류 온도에서 TEA와 같은 염기, 및 톨루엔과 같은 비양성자성 용매의 존재 하에 프탈산 무수물과 반응시켜, 화학식 XXIIIa의 상응하는 프탈이미드-보호된 벤질 아민 (여기서, R10은 C1이고, R11은 CH₂N(프탈이미드)이고, X1은 N이고, R9, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)으로 추가로 변환시킬 수 있다. 화학식 XXIIIa의 브로마이드를, 반응식 XVI의 단계 **ac**에서와 같이, 환류 온도에서 톨루엔과 같은 비반응성 용매 중에서 Pd(PPh₃)₄와 같은 팔라듐 촉매, 및 K₂CO₃와 같은 염기의 존재 하에 비닐 보론산 무수물 피리딘 착물과 반응시켜, 화학식 XIIc의 올레핀 (여기서, R10은 C1이고, R11은 CH₂N(프탈이미드)이고, X1은 N이고, R8, R9, R13, X2 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)으로 전환시킬 수 있다.

[0181]

<반응식 XVI>



[0182]

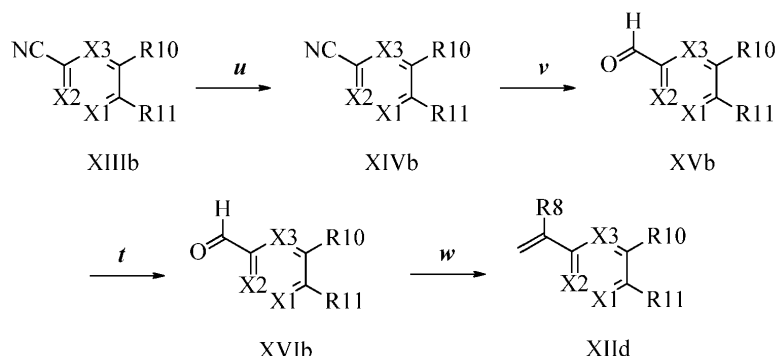
[0183]

반응식 XVII의 단계 **u**에서, 화학식 XIIb의 4-메틸나프토티트릴 (여기서, X3은 CR₉이고, R10 및 X3은 함께 4개의 탄소 원자를 갖는 연결을 형성하고 고리 탄소 원자와 함께 6-원 방향족 고리를 형성하고, R11은 CH₃이고, R12, R13, X1 및 X2는 상기 정의된 바와 같음)을 77°C에서 CC1₄와 같은 비반응성 용매 중에서 NBS 및 AIBN과 반응시켜, 화학식 XIVb의 상응하는 나프틸 브로마이드 (여기서, X3은 CR₉이고, R10 및 X3은 함께 4개의 탄소 원자를 갖는 연결을 형성하고 고리 탄소 원자와 함께 6-원 방향족 고리를 형성하고, R11은 CH₂Br이고, R12, R13, X1 및 X2는 상기 개시된 바와 같음)로 변환시킬 수 있다. 화학식 XIVb의 니트릴기 (CN)를, 반응식 XVII의 단계 **v**에서와 같이, 0°C에서, 톨루엔과 같은 비양성자성 용매 중에서 디이소부틸알루미늄 히드라이드 (DIBAL-H)와 반응시키고, 이어서 1.0 M HCl로 키텡함으로써 화학식 XVb의 상응하는 알데히드 (여기서, X3은 CR₉이고, R10 및 X3은 함께 4개의 탄소 원자를 갖는 연결을 형성하고 고리 탄소 원자와 함께 6-원 방향족 고리 (또는 목적하는 경우 비-방향족 고리)를 형성하고, R11은 CH₂Br이고, R12, R13, X1 및 X2는 상기 정의된 바와 같음)로 환원시킬 수 있다. 화학식 XVb의 화합물을 반응식 XVII의 단계 **t**에서와 같이 60°C에서 DMF와 같은 극성 비양성자성 용매 중에서 포타슘 프탈이미드와 반응시켜, 화학식 XVIb의 상응하는 프탈이미드-보호된 벤질 아민 (여기서, X3은

CR9이고, R10 및 X3은 함께 4개의 탄소 원자를 갖는 연결을 형성하고 고리 탄소 원자와 함께 6-원 방향족 고리를 형성하고, R11은 CH₂N(프탈이미드)이고, R12, R13, X1 및 X2는 상기 개시된 바와 같음)으로 추가로 변환시킬 수 있다. 반응식 XVII의 단계 **w**에서, 화학식 XVIb의 알데히드를 주위 온도에서 K₂CO₃과 같은 염기의 존재 하에 1,4-디옥산과 같은 극성 비양성자성 용매 중에서 메틸 트리페닐 포스포늄 브로마이드와 반응시켜, 화학식 XIId의 올레핀 (여기서, X3은 CR9이고, R10 및 X3은 함께 4개의 탄소 원자를 갖는 연결을 형성하고 고리 탄소 원자와 함께 6-원 방향족 고리를 형성하고, R11은 CH₂N(프탈이미드)이고, R8, R12, R13, X1 및 X2는 상기 개시된 바와 같음)으로 전환시킬 수 있다.

[0184]

<반응식 XVII>



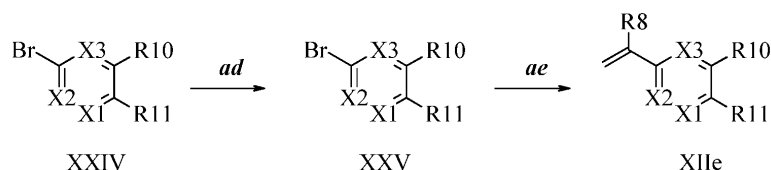
[0185]

[0186]

화학식 XXIV의 화합물 (여기서, R11은 NHNH₂·HCl이고 R9, R10, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을, 반응식 XVIII의 단계 **ad**에서와 같이 환류 온도에서 빙초산 (AcOH) 중에서 프탈산 무수물과 반응시켜, 화학식 XXV의 상응하는 프탈이미드-보호된 히드라진 (여기서, R11은 NHN(프탈이미드)이고 R9, R10, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)로 변환시킬 수 있다. 화학식 XXV의 브로마이드를, 반응식 XVIII의 단계 **ae**에서와 같이, 마이크로웨이브 조건 하에 150℃에서 1,2-디메톡시에탄과 같은 극성 비양성자성 용매 중에서 Pd(PPh₃)₄와 같은 팔라듐 촉매, 및 K₂CO₃과 같은 염기의 존재 하에 비닐 보론산 무수물 피리딘 착물과 반응시켜, 화학식 XIIe의 올레핀 (여기서, R11은 NHN(프탈이미드)이고 R8, R9, R10, R13, X1, X2 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)으로 전환시킬 수 있다.

[0187]

<반응식 XVIII>



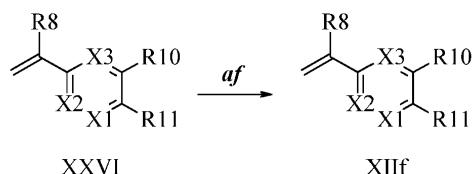
[0188]

[0189]

반응식 XIX의 단계 **af**에서, 화학식 XXVI의 화합물 (여기서, R11은 B(OH)₂이고, R8, R9, R10, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을 주위 온도에서, 1,2-디클로로벤젠과 같은 용매 중에서 CuCl 및 피리딘의 존재 하에 2-히드록시이소인돌린-1,3-디온과 반응시켜 화학식 XIIIf의 화합물 (여기서, R11은 ON(프탈이미드)이고 R8, R9, R10, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을 수득한다.

[0190]

<반응식 XIX>



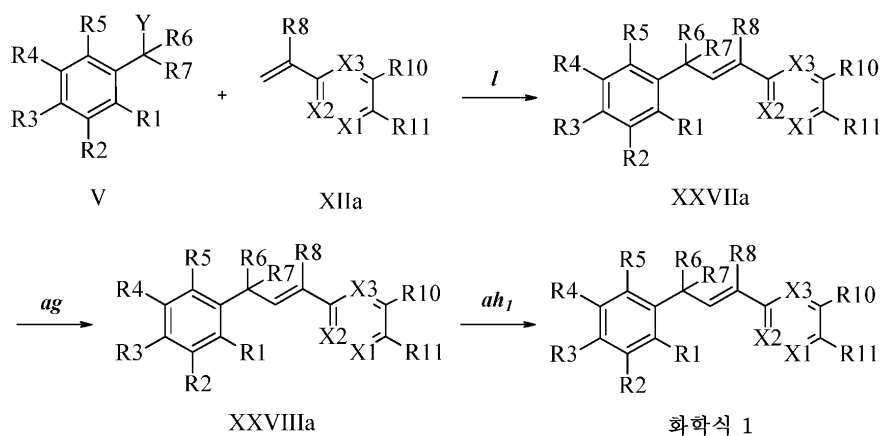
[0191]

[0192]

반응식 XX의 단계 **1**에서, 화학식 V의 화합물 (여기서, Y, R1, R2, R3, R4, R5, R6, 및 R7은 상기 개시된 바와

같음) 및 화학식 XIIa의 화합물 (여기서, R11은 CH₂N(프탈이미드)이고 R8, R9, R10, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을 약 180℃의 온도에서 1,2-디클로로벤젠과 같은 용매 중에서 CuCl 및 2,2-비피리딘의 존재 하에 반응시켜 화학식 XXVIIa의 상응하는 화합물 (여기서, R11은 CH₂N(프탈이미드)이고 R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, R9, R10, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을 수득한다. 화학식 XXVIIa의 화합물에서의 프탈이미드 보호기를, 반응식 XX의 단계 **ag**에서와 같이, 90℃에서 EtOH와 같은 극성 양성자성 용매 중에서 히드라진 수화물과 반응시켜 제거하여 화학식 XXVIIIa의 화합물 (여기서, R11은 CH₂NH₂이고 R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, R9, R10, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을 수득한다. 화학식 XXVIIIa의 화합물을, 반응식 XX의 단계 **ah₁**에서와 같이 0℃에서 CH₂Cl₂와 같은 비반응성 용매 중에서, 아세트산 무수물과 같은 무수물 및 TEA와 같은 염기로 아실화시켜 화학식 1의 화합물 (여기서, R11은 CH₂N(C=O)(R14)이고 R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, R9, R10, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)로 변환시킬 수 있다.

[0193] <반응식 XX>



반응식 XXI의 단계 1에서, 화학식 V의 화합물 (여기서, Y, R1, R2, R3, R4, R5, R6, 및 R7은 상기 개시된 바와 같음) 및 화학식 XIIb의 화합물 (여기서, R11은 CH₂N(프탈이미드)이고 R8, R9, R10, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을 약 180℃의 온도에서 1,2-디클로로벤젠과 같은 용매 중에서 CuCl 및 2,2-비피리딘의 존재 하에 반응시켜 화학식 XXVIIb의 상응하는 화합물 (여기서, R11은 CH₂N(프탈이미드)이고 R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, R9, R10, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을 수득한다. 화학식 XXVIIb의 화합물에서의 프탈이미드 보호기를 반응식 XXI의 단계 **ag**에서와 같이 90℃에서 EtOH와 같은 극성 양성자성 용매 중에서 히드라진 수화물과 반응시켜 제거하여 화학식 XXVIIIb의 화합물 (여기서, R11은 CH₂NH₂이고 R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, R9, R10, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을 수득한다. 화학식 XXVIIIb의 화합물을, 반응식 XXI의 단계 **ah_{2a}**에서와 같이, DMF와 같은 극성 비양성자성 용매 중에서, HOBt · H₂O, EDC · HCl, 및 DIPEA와 같은 염기의 존재 하에 산과 반응시켜, 화학식 1의 화합물 (여기서, R11은 CH₂N(C=O)(R14)이고 R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, R9, R10, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)로 변환시킬 수 있다.

또 다른 실시양태에서, 화학식 XXVIIIb의 화합물을, 반응식 XXI의 단계 **ah₂**에서와 같이, DMF와 같은 극성 비양성자성 용매 중에서, HOBt · H₂O, EDC · HCl 및 DIPEA와 같은 염기의 존재 하에 티오산과 반응시켜, 화학식 1의 화합물 (여기서, R11은 CH₂N(C=S)(R14)이고 R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, R9, R10, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)로 변환시킬 수 있다.

또 다른 실시양태에서, 화학식 XXVIIIb의 화합물을 두 단계로 화학식 1의 화합물 (여기서, R11은 CH₂N(C=O)N(R14)(R15)이고 R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, R9, R10, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)로 변환시킬 수 있다. 제1 단계 (반응식 XXI의 단계 **ah_{3a}**)는 MeOH와 같은 극성 양성자성 용매 중에서 알데히드와 반응시킨 후, NaBH₄와 반응시키는 것을 포함한다. 제2 단계 (반응식 XXI의 단계 **ah_{3b}**)는 반응식 XXI

의, 주위 온도에서 CH_2Cl_2 와 같은 비반응성 용매 중에서, 시클로프로필카르보닐 클로라이드와 같은 산 클로라이드, 및 TEA와 같은 염기를 사용한 아실화를 포함한다.

[0198]

또 다른 실시양태에서, 화학식 XXVIIIb의 화합물을, 0℃에서 TEA와 같은 염기의 존재 하에 및 CH_2Cl_2 와 같은 비반응성 용매 중에서 이소시아네이트 (반응식 XXI의 단계 **ai**₁) 또는 카르바모일 클로라이드 (반응식 XXI의 단계 **ai**₂)와 반응시켜, 화학식 1의 화합물 (여기서, R11은 $\text{CH}_2\text{N}(\text{C}=\text{O})\text{N}(\text{R14})(\text{R15})$ 이고 R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, R9, R10, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)로 변환시킬 수 있다.

[0199]

또 다른 실시양태에서, 화학식 XXVIIIb의 화합물을, 반응식 XXI의 단계 **aj**에서와 같이, 0℃에서 TEA와 같은 염기의 존재 하에 및 CH_2Cl_2 와 같은 비반응성 용매 중에서 이소티오시아네이트와 반응시켜, 화학식 1의 화합물 (여기서, R11은 $\text{CH}_2\text{N}(\text{C}=\text{S})\text{N}(\text{R14})(\text{R15})$ 이고 R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, R9, R10, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)로 변환시킬 수 있다.

[0200]

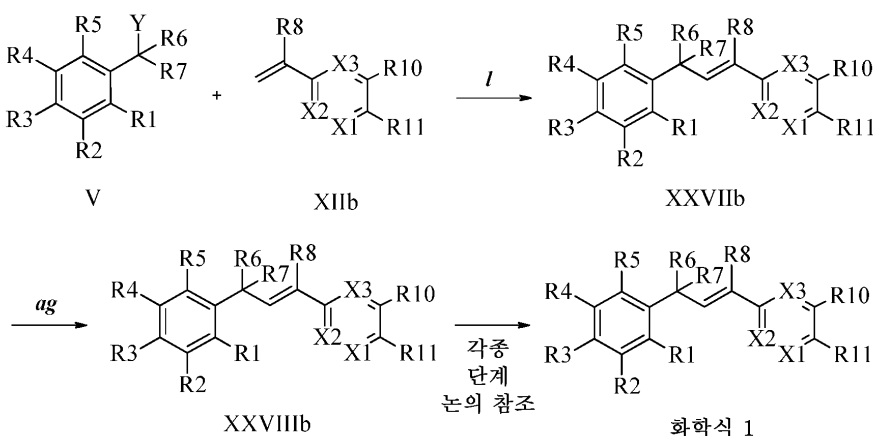
또 다른 실시양태에서, 화학식 XXVIIIb의 화합물을, 반응식 XXI의 단계 **ak**에서와 같이, 주위 온도에서 TEA와 같은 염기의 존재 하에 및 CH_2Cl_2 와 같은 비반응성 용매 중에서 디-tert-부틸 디카르보네이트와 같은 디카르보네이트와 반응시켜, 화학식 1의 화합물 (여기서, R11은 $\text{CH}_2\text{N}(\text{C}=\text{O})\text{O}(\text{R14})$ 이고 R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, R9, R10, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)로 변환시킬 수 있다.

[0201]

또 다른 실시양태에서, 화학식 XXVIIIb의 화합물을, 반응식 XXI의 단계 **al**에서와 같이, 0℃에서 TEA와 같은 염기의 존재 하에 및 CH_2Cl_2 와 같은 비반응성 용매 중에서 2-클로로-2-옥소아세트이트와 같은 클로로옥살산 에스테르와 반응시켜, 화학식 1의 화합물 (여기서, R11은 $\text{CH}_2\text{N}(\text{C}=\text{O})(\text{C}=\text{O})\text{O}(\text{R14})$ 이고 R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, R9, R10, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)로 변환시킬 수 있다.

[0202]

<반응식 XXI>



[0203]

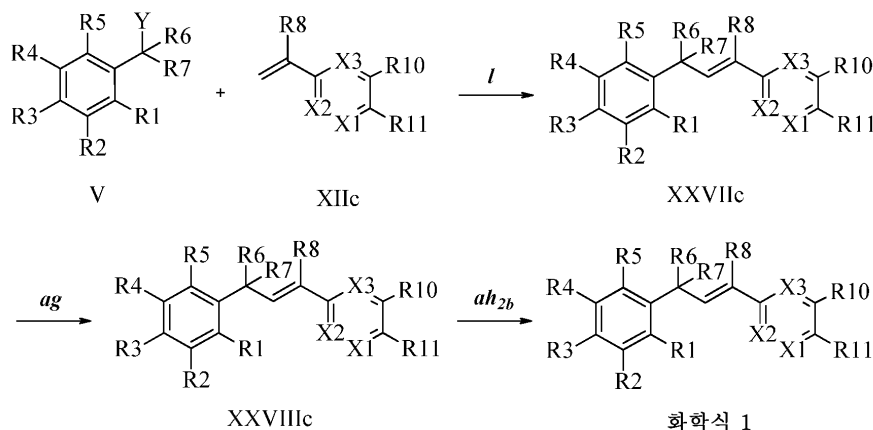
[0204]

반응식 XXII의 단계 **1**에서, 화학식 V의 화합물 (여기서, Y, R1, R2, R3, R4, R5, R6, 및 R7은 상기 개시된 바와 같음) 및 화학식 XIIc의 화합물 (여기서, R10은 Cl이고, R11은 CH_2N (프탈이미드)이고, X1은 N이고, R8, R9, R12, R13, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을 약 180℃의 온도에서 1,2-디클로로벤젠과 같은 용매 중에서 CuCl 및 2,2-비피리딜의 존재 하에 반응시켜 화학식 XXVIIc의 상응하는 화합물 (여기서, R10은 Cl이고, R11은 CH_2N (프탈이미드)이고, X1은 N이고, R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, R9, R12, R13, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을 수득한다. 화학식 XXVIIc의 화합물에서의 프탈이미드 보호기를, 반응식 XXII의 단계 **ag**에서와 같이, 90℃에서 EtOH와 같은 극성 양성자성 용매 중에서 히드라진 수화물과 반응시켜 제거하여 화학식 XXVIIc의 화합물 (여기서, R10은 Cl이고, R11은 CH_2NH_2 이고, X1은 N이고, R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, R9, R12, R13, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을 수득한다. 화학식 XXVIIc의 화합물을, 반응식 XXII의 단계 **ah**_{2b}에서와 같이, CH_2Cl_2 와 같은 극성 비양성자성 용매 중에서, HOBt · H_2O , EDC · HCl 및 DIPEA와 같은 염기의 존재 하에 산과 반응시켜, 화학식 1의 화합물 (여기서, R10은 Cl이고, R11은 $\text{CH}_2\text{N}(\text{C}=\text{O})(\text{R14})$ 이고, X1은 N이고, R1,

R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, R9, R12, R13, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)로 변환시킬 수 있다.

[0205]

<반응식 XXII>



[0206]

[0207]

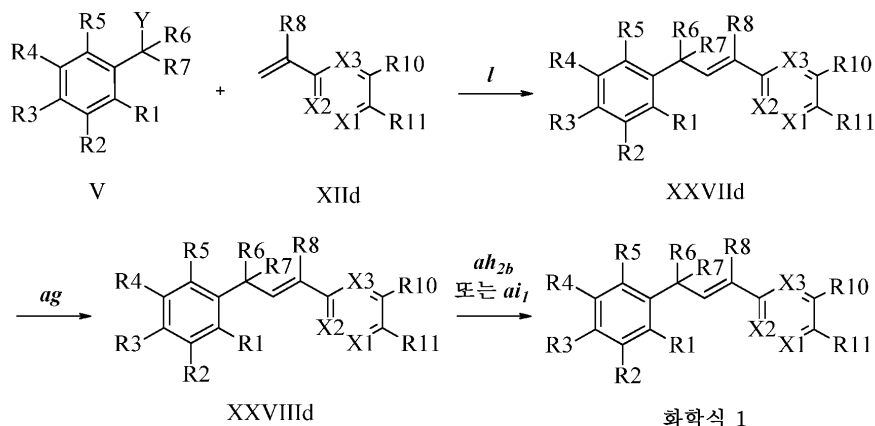
반응식 XXIII의 단계 1에서, 화학식 V의 화합물 (여기서, Y, R1, R2, R3, R4, R5, R6, 및 R7은 상기 개시된 바와 같음) 및 화학식 XIIc의 화합물 (여기서, X3은 CR9이고, R10 및 X3은 함께 4개의 탄소 원자를 갖는 연결을 형성하고 고리 탄소 원자와 함께 6-원 방향족 고리 (또는 목적하는 경우 비-방향족 고리)를 형성하고, R11은 CH₂N(프탈이미드)이고 R8, R9, R12, R13, X1 및 X2는 상기 개시된 바와 같음)을 약 180℃의 온도에서 1,2-디클로로벤젠과 같은 용매 중에서 CuCl 및 2,2-비피리딘의 존재 하에 반응시켜 화학식 XXVIIc의 상응하는 화합물 (여기서, X3은 CR9이고, R10 및 X3은 함께 4개의 탄소 원자를 갖는 연결을 형성하고 고리 탄소 원자와 함께 6-원 방향족 고리를 형성하고, R11은 CH₂N(프탈이미드)이고 R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, R9, R12, R13, X1 및 X2는 상기 개시된 바와 같음)을 수득한다. 화학식 XXVIIc의 화합물에서의 프탈이미드 보호기를, 반응식 XXIII의 단계 ag에서와 같이, 90℃에서 EtOH와 같은 극성 양성자성 용매 중에서 히드라진 수화물과 반응시켜 제거하여 화학식 XXVIIIc의 화합물 (여기서, X3은 CR9이고, R10 및 X3은 함께 4개의 탄소 원자를 갖는 연결을 형성하고 탄소 원자와 함께 6-원 방향족 고리를 형성하고, R11은 CH₂NH₂이고 R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, R9, R12, R13, X1 및 X2는 상기 개시된 바와 같음)을 수득한다. 화학식 XXVIIIc의 화합물을, 반응식 XXIII의 단계 ah_{2b}에서와 같이, CH₂Cl₂와 같은 극성 비양성자성 용매 중에서, HOBt · H₂O, EDC · HCl 및 DIPEA와 같은 염기의 존재 하에 산과 반응시켜, 화학식 1의 화합물 (여기서, X3은 CR9이고, R10 및 X3은 함께 4개의 탄소 원자를 갖는 연결을 형성하고 고리 탄소 원자와 함께 6-원 방향족 고리를 형성하고, R11은 CH₂N(C=O)(R14)이고 R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, R9, R12, R13, X1 및 X2는 상기 개시된 바와 같음)로 변환시킬 수 있다.

[0208]

또 다른 실시양태에서, 화학식 XXVIIIc의 화합물을, 반응식 XXIII의 단계 ai₁에서와 같이, 0℃에서 TEA와 같은 염기의 존재 하에 및 CH₂Cl₂와 같은 비반응성 용매 중에서 이소시아네이트와 반응시켜, 화학식 1의 화합물 (여기서, X3은 CR9이고, R10 및 X3은 함께 4개의 탄소 원자를 갖는 연결을 형성하고 고리 탄소 원자와 함께 6-원 방향족 고리를 형성하고, R11은 CH₂N(C=O)N(R14)(R15)이고 R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, R9, R10, R12, R13, X1 및 X2는 상기 개시된 바와 같음)로 변환시킬 수 있다.

[0209]

<반응식 XXIII>



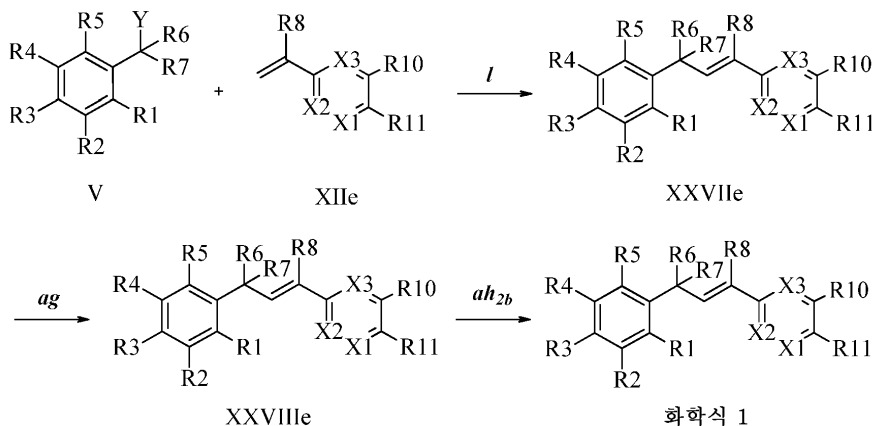
[0210]

[0211]

반응식 XXIV의 단계 1에서, 화학식 V의 화합물 (여기서, Y, R1, R2, R3, R4, R5, R6, 및 R7은 상기 개시된 바와 같음) 및 화학식 XIIId의 화합물 (여기서, R11은 NHN(프탈이미드)이고 R8, R9, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을 약 180℃의 온도에서 1,2-디클로로벤젠과 같은 용매 중에서 CuCl 및 2,2-비피리딘의 존재 하에 반응시켜 화학식 XXVIIId의 상응하는 화합물 (여기서, R11은 NHN(프탈이미드)이고 R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, R9, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을 수득한다. 화학식 XXVIIId의 화합물에서의 프탈이미드 보호기를, 반응식 XXIV의 단계 ag에서와 같이, 90℃에서 EtOH와 같은 극성 양성자성 용매 중에서 히드라진 수화물과 반응시켜 제거하여 화학식 XXVIIIId의 화합물 (여기서, R11은 NHNH₂이고 R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, R9, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을 수득한다. 화학식 XXVIIIId의 화합물을, 반응식 XXIV의 단계 ah_{2b}에서와 같이, CH₂Cl₂와 같은 극성 비양성자성 용매 중에서, HOBT · H₂O, EDC · HCl 및 DIPEA와 같은 염기의 존재 하에 산과 반응시켜, 화학식 1의 화합물 (여기서, R11은 NHN(C=O)(R14)이고 R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, R9, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)로 변환시킬 수 있다.

[0212]

<반응식 XXIV>



[0213]

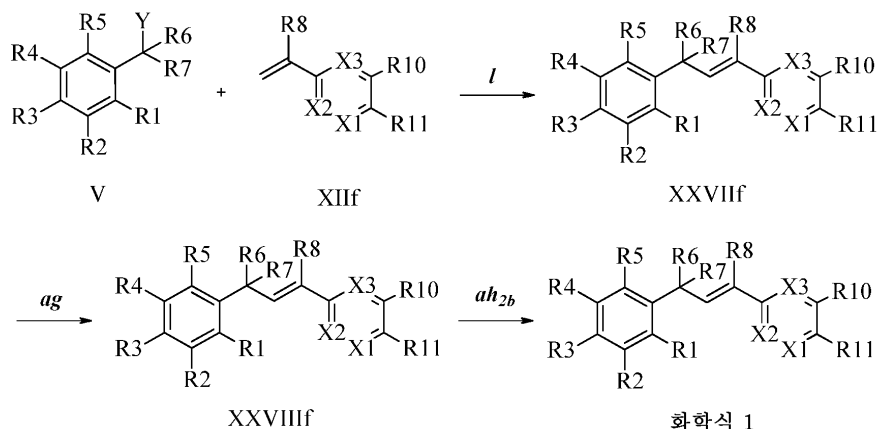
[0214]

반응식 XXV의 단계 1에서, 화학식 V의 화합물 (여기서, Y, R1, R2, R3, R4, R5, R6, 및 R7은 상기 개시된 바와 같음) 및 화학식 XIIIf의 화합물 (여기서, R11은 ON(프탈이미드)이고 R8, R9, R10, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을 약 180℃의 온도에서 1,2-디클로로벤젠과 같은 용매 중에서 CuCl 및 2,2-비피리딘의 존재 하에 반응시켜 화학식 XXVIIIf의 상응하는 화합물 (여기서, R11은 ON(프탈이미드)이고 R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, R9, R10, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을 수득한다. 화학식 XXVIIIf의 화합물에서의 프탈이미드 보호기를, 반응식 XXV의 단계 ag에서와 같이, 90℃에서 EtOH와 같은 극성 양성자성 용매 중에서 히드라진 수화물과 반응시켜 제거하여 화학식 XXVIIIf의 화합물 (여기서, R11은 ONH₂이고 R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, R9, R10, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을 수득한다. 화학식

XXVIIIIf의 화합물을, 반응식 XXV의 단계 **ah_{2b}**에서와 같이, CH₂Cl₂와 같은 극성 비양성자성 용매 중에서, HOBT · H₂O, EDC · HCl 및 DIPEA와 같은 염기의 존재 하에 산과 반응시켜, 화학식 1의 화합물 (여기서, R11은 ON(C=O)(R14)이고 R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, R9, R10, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)로 변환시킬 수 있다.

[0215]

<반응식 XXV>



[0216]

[0217]

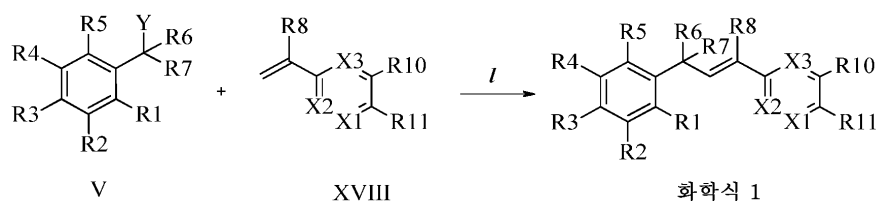
반응식 XXVI의 단계 **1**에서, 화학식 V의 화합물 (여기서, Y, R1, R2, R3, R4, R5, R6, 및 R7은 상기 개시된 바와 같음) 및 화학식 XVIII의 화합물 (여기서, R11은 CH₂NH(2-피리딘)이고 R8, R9, R10, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을 약 180℃의 온도에서 1,2-디클로로벤젠과 같은 용매 중에서 CuCl 및 2,2-비피리딘의 존재 하에 반응시켜 화학식 1의 상응하는 화합물 (여기서, R11은 CH₂NH(2-피리딘)이고, R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, R9, R10, R12, R13, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을 수득한다.

[0218]

화학식 1의 화합물을 표준 방법에 의해 추가로 정교하게 만들 수 있다. 예를 들어, R11이 티오에테르를 함유하는 경우, 티오에테르를, 주위 온도에서 아세트산:물 혼합물의 존재 하에 옥손으로 처리하여 술폰으로 산화시킬 수 있다. R11이 옥살레이트 에스테르를 함유하는 경우, 화학식 1의 화합물을, CH₂Cl₂와 같은 비반응성 용매 중에서 톨루엔 중 트리메틸알루미늄의 용액 및 아민 히드로클로라이드와 반응시켜 상응하는 옥살아미드로 변환시킬 수 있다.

[0219]

<반응식 XXVI>

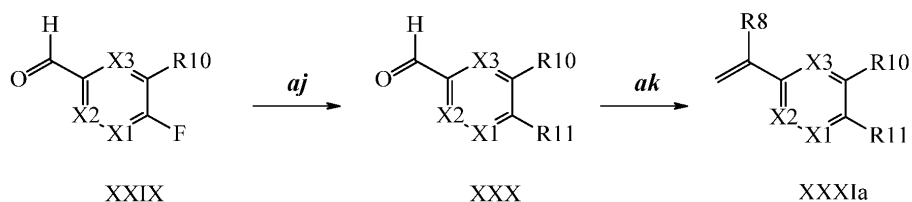


[0220]

[0221]

반응식 XXVII에서, 화학식 XXIX의 플루오로벤즈알데히드 (여기서, R10, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)를, 단계 **aj**에서와 같이 DMF와 같은 용매 중에서, K₂CO₃와 같은 염기의 존재 하에 치환된 또는 비치환된 1,2,4-트리아졸과 반응시켜, 화학식 XXX의 (1,2,4-트리아졸-1-일)벤즈알데히드 (여기서, R11은 치환된 또는 비치환된 1,2,4-트리아졸-1-일 기이고, R10, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)로 전환시킬 수 있다. 단계 **ak**에서, 화학식 XXX의 (1,2,4-트리아졸-1-일)벤즈알데히드를, 1,4-디옥산과 같은 비양성자성 용매 중에서 K₂CO₃와 같은 염기의 존재 하에 트리페닐 포스포늄 브로마이드와 반응시켜 화학식 XXXIa의 (1,2,4-트리아졸-1-일)비닐 벤젠 (여기서 R11은 치환된 또는 비치환된 1,2,4-트리아졸-1-일 기이고, R8, R10, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)으로 전환시킨다.

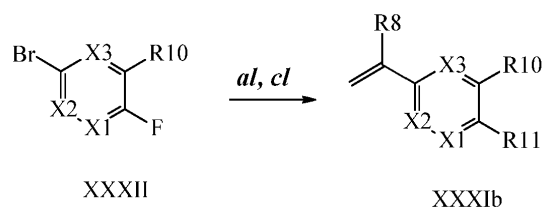
[0222] <반응식 XXVII>



[0223]

[0224] 반응식 XXVIII에서, 화학식 XXXII의 브로모플루오로벤젠 (여기서, R10, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을 두 단계로 화학식 XXXIb의 (1,2,4-트리아졸-1-일)비닐벤젠 (여기서, R11은 치환된 또는 비치환된 1,2,4-트리아졸-1-일 기이고, R8, R10, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)으로 전환시킬 수 있다. 단계 **al**에서, 브로모플루오로벤젠을 DMF와 같은 용매 중에서, K₂CO₃와 같은 염기의 존재 하에 치환된 또는 비치환된 1,2,4-트리아졸과 반응시켜 (1,2,4-트리아졸-1-일)브로모벤젠을 생성시킨다. 단계 **cl**에서, (1,2,4-트리아졸-1-일)브로모벤젠을 톨루엔과 같은 용매 중에서, Pd(PPh₃)₄와 같은 촉매, 및 K₂CO₃와 같은 염기의 존재 하에 비닐 보론산 무수물 피리딘 착물과 반응시킨다.

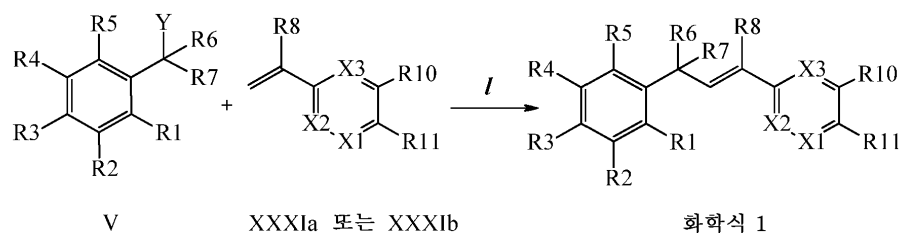
[0225] <반응식 XXVIII>



[0226]

[0227] 화학식 V의 화합물과 화학식 XXXIa 및 XXXIb의 화합물과의 커플링은, 반응식 XXIX에서와 같이 완수될 수 있다. 단계 1에서, 화학식 V의 화합물 (여기서, Y는 Br이고, R1, R2, R3, R4, R5, R6, 및 R7은 상기 개시된 바와 같음) 및 화학식 XXXIa 또는 XXXIb의 비닐벤젠 (여기서, R11은 치환된 또는 비치환된 1,2,4-트리아졸-1-일 기이고, R8, R9, R10, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을 약 180℃의 온도에서 1,2-디클로로벤젠과 같은 용매 중에서 CuCl 및 2,2-비피리딘의 존재 하에 반응시켜 화학식 1의 분자 (여기서, R11은 치환된 또는 비치환된 1,2,4-트리아졸-1-일 기이고, R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, R10, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)를 수득한다.

[0228] <반응식 XXIX>

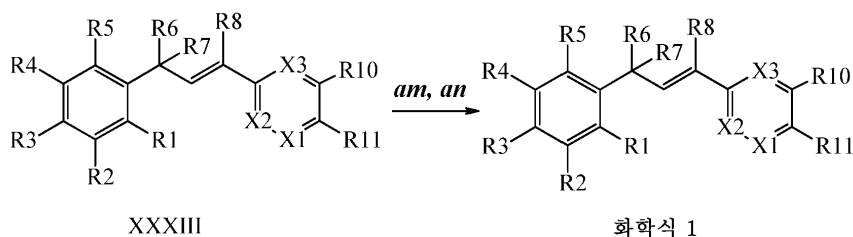


[0229]

[0230] 반응식 XXX에서, 화학식 XXXIII의 화합물 (여기서 R11은 3-니트로-1,2,4-트리아졸-1-일 기이고, R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, R10, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을 두 단계 과정에 의해 화학식 1의 화합물 (여기서, R11은 3-아미노-1,2,4-트리아졸-1-일 기이고, R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, R10, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)로 전환시킬 수 있다. 단계 **am**에서, 3-니트로-1,2,4-트리아졸-1-일 기를 MeOH와 같은 양성자성 용매 중에서 아연 분진 및 염화암모늄 (NH₄Cl)의 존재 하에 3-아미노-1,2,4-트리아졸-1-일 기로 환원시킨다. 단계 **an**에서, 3-아미노-1,2,4-트리아졸-1-일 기를 CH₂Cl₂와 같은 용매 중에서 TEA와 같은 염기의 존재 하에 산 클로라이드, 예컨대 시클로프로필카르보닐 클로라이드 또는 아세틸 클로라이드로 아실화시킨다.

[0231]

<반응식 XXX>



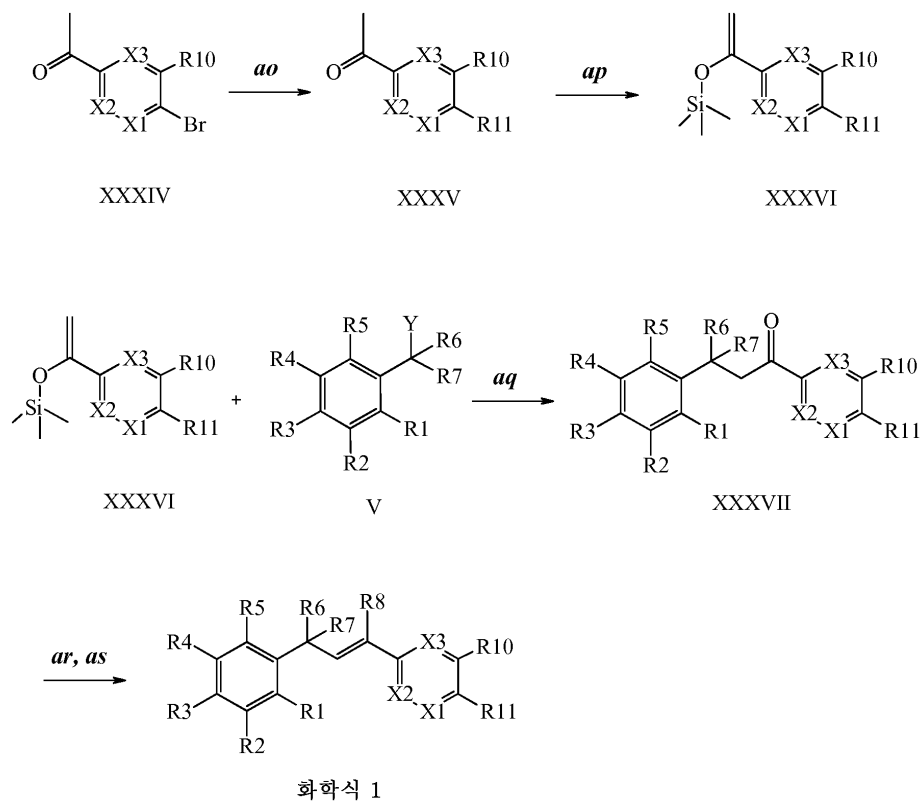
[0232]

[0233]

반응식 XXXI의 단계 **ao**에서, 화학식 XXXIV의 브로모페닐 메틸 케톤 (여기서 R10, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을, DMF와 같은 용매 중에서, 탄산세슘 (Cs_2CO_3)과 같은 염기, 및 아이오딘화구리 (CuI)와 같은 촉매의 존재 하에 1,2,4-트리아졸로 처리하여 화학식 XXXV의 페닐 메틸 케톤 (여기서 R11은 1,2,4-트리아졸-1-일 기이고, R10, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)으로 전환시킨다. 단계 **ap**에서, 화학식 XXXV의 1,2,4-트리아졸릴아세토페논을, CH_2Cl_2 와 같은 비양성자성 용매 중에서 TEA와 같은 염기의 존재 하에 트리메틸실릴 트리플루오로메탄술포네이트로 처리하여 화학식 XXXVI의 트리메틸실릴 에놀 에테르로 전환시킨다. 단계 **aq**에서, 실릴 에놀 에테르를, 약 180℃의 온도에서 1,2-디클로로벤젠과 같은 용매 중에서 CuCl 및 2,2-비피리딘의 존재 하에 화학식 V의 화합물 (여기서, Y는 Br이고, R1, R2, R3, R4, R5, R6, 및 R7은 상기 개시된 바와 같음)과 반응시켜 화학식 XXXVII의 케톤 (여기서, R11은 1,2,4-트리아졸-1-일 기이고, R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R10, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을 생성시킨다. 단계 **ar**에서, 화학식 XXXVII의 케톤을 THF와 같은 비양성자성 용매 중에서 메틸마그네슘 브로마이드로 처리하여 3차 알콜을 생성시킨다. 이어서, 3차 알콜은, 단계 **as**에서와 같이, 톨루엔과 같은 용매 중에서 촉매량의 p-톨루엔술포산으로 처리시, 물의 공비 제거를 가능하게 하는 온도로 가열시에 제거 반응을 겪어, 화학식 1의 화합물 (여기서 R11은 1,2,4-트리아졸-1-일 기이고, R8은 메틸이고, R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R10, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을 생성한다.

[0234]

<반응식 XXXI>



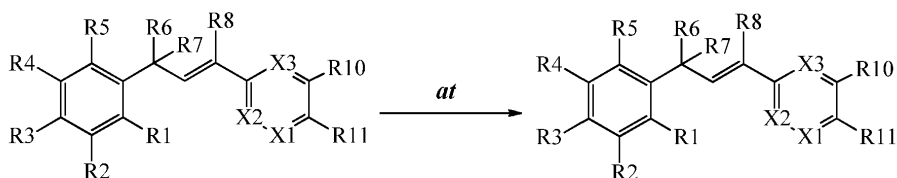
[0235]

[0236]

반응식 XXXII에서, 화학식 XXXVIII의 화합물 (여기서, R10 및 R11은 함께 3-4개의 탄소 원자 및 옥소 치환기를

갖는 연결을 형성하고 고리 탄소 원자와 함께 5- 또는 6-원 시클릭 고리를 형성하고, R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을, 1,2-디클로로에탄 (DCE)과 같은 용매 중에서 소듐 시아노보로히드라이드 (NaBH₃CN)와 같은 환원제의 존재 하에 3,3,3-트리플루오로프로필아민과 같은 알킬아민으로 처리하여, 화학식 1의 분자 (여기서, R10 및 R11은 함께 3-4개의 탄소 원자 및 알킬아민 치환기를 갖는 연결을 형성하고 고리 탄소 원자와 함께 5- 또는 6-원 시클릭 고리를 형성하고 R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)로 전환시킨다.

[0237] <반응식 XXXII>



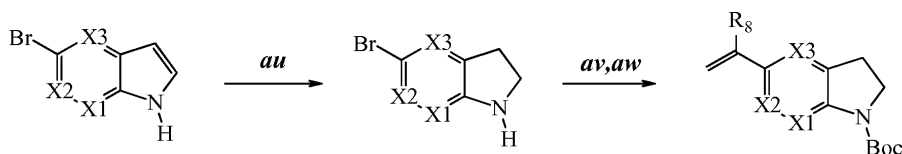
XXXVIII

화학식 1

[0238]

[0239] 반응식 XXXIII에서, 화학식 XXXIX의 화합물 (여기서, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을, 단계 **au**에서와 같이, AcOH와 같은 용매 중에서 NaBH₃CN과 같은 환원제로 처리하여 화학식 XL의 분자 (여기서, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)로 전환시킨다. 단계 **av**에서, 아세토니트릴 (MeCN)과 같은 용매 중에서, DMAP와 같은 촉매의 존재 하에 디-tert-부틸 디카르보네이트와 반응시켜 질소 원자를 tert-부틸옥시카르보닐 (BOC) 기로 보호시킨다. 화학식 XL의 브로마이드를, 단계 **aw**에서와 같이, 100℃에서 디메틸설폭사이드 (DMSO)와 같은 극성 비양성자성 용매 중에서 PdCl₂(dppf)와 같은 팔라듐 촉매, 및 K₂CO₃과 같은 염기의 존재 하에 포타슘 비닐 트리플루오로보레이트와 반응시켜, 화학식 XLI의 올레핀 (여기서, R8, X1, X2 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)으로 전환시킬 수 있다.

[0240] <반응식 XXXIII>



XXXIX

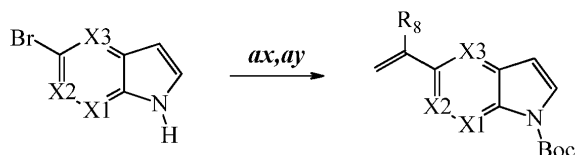
XL

XLI

[0241]

[0242] 반응식 XXXIV에서, 화학식 XXXIX의 화합물 (여기서, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을 두 단계로 화학식 XLII의 분자 (여기서, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)로 전환시킨다. 단계 **ax**에서, 브로마이드를, THF/물과 같은 용매 혼합물 중에서, PdCl₂와 같은 팔라듐 촉매, 및 트리페닐포스핀과 같은 리간드, 및 Cs₂CO₃과 같은 염기의 존재 하에 포타슘 비닐 트리플루오로보레이트로 처리하여 올레핀을 형성시킨다. 단계 **ay**에서, MeCN과 같은 용매 중에서 DMAP와 같은 촉매의 존재 하에 디-tert-부틸 디카르보네이트와 반응시켜 질소 원자를 BOC 기로 보호시킨다.

[0243] <반응식 XXXIV>



XXXIX

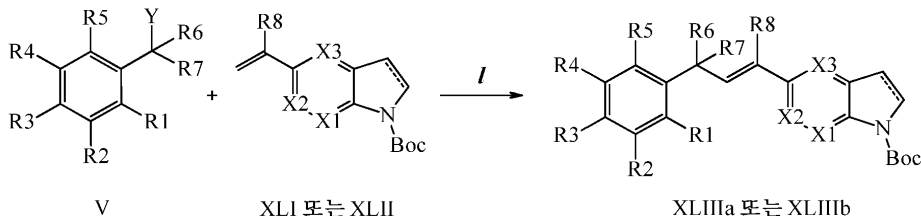
XLII

[0244]

[0245] 반응식 XXXV의 단계 1에서, 화학식 V의 화합물 (여기서, Y, R1, R2, R3, R4, R5, R6, 및 R7은 상기 개시된 바와 같음) 및 화학식 XLI 또는 XLII의 화합물 (여기서, R8, X1, X2 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을 약 150℃

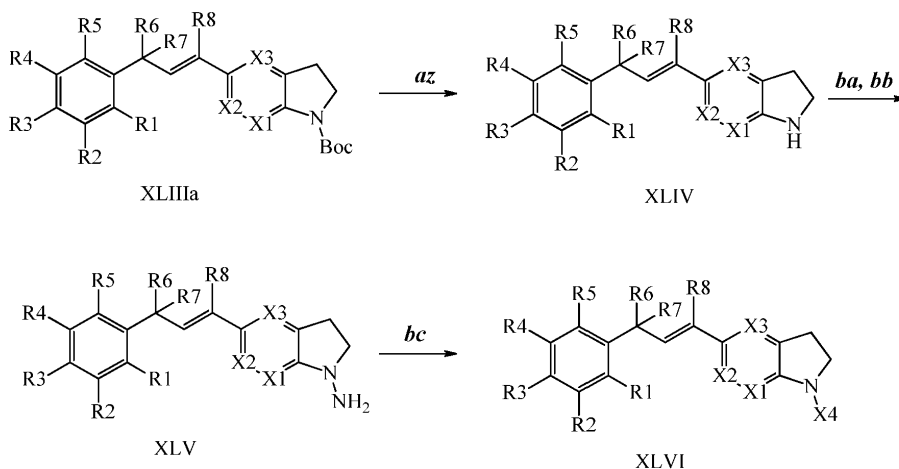
의 온도에서 1,2-디클로로벤젠과 같은 용매 중에서 CuCl 및 2,2-비피리딜의 존재 하에 반응시켜 화학식 XLIIIa 또는 XLIIIb의 상응하는 화합물 (여기서, R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을 수득한다.

[0246] <반응식 XXXV>



[0247] 반응식 XXXVI에서, 화학식 XLIIIa의 화합물 (여기서, R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을, 단계 **az**에서와 같이, CH₂Cl₂와 같은 용매 중에서 트리플루오로아세트산 (TFA)으로 처리하여 화학식 XLIV의 분자 (여기서, R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)로 전환시킨다. 이어서, 화학식 XLIV의 화합물을 두 단계로 화학식 XLV의 화합물 (여기서, R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)로 변환시킬 수 있다. 단계 **ba**에서, 인돌린을 약 5℃ 온도에서 진한 HCl과 같은 산 중에서 아질산나트륨 (NaNO₂)으로 처리하여 니트로소인돌을 형성시킨다. 단계 **bb**에서, 니트로소인돌을 MeOH와 같은 양성자성 용매 중에서 아연 분말의 존재 하에 NH₄Cl과 반응시킨다. 단계 **bc**에서, 화학식 XLV의 화합물을, 극성 비양성자성 용매, 예컨대 CH₂Cl₂ 중에서 산, 예컨대 3,3,3-트리플루오로프로판산, PyBOP, 및 염기, 예컨대 DIPEA로 처리하여, 화학식 XLVI의 화합물 (여기서, X4는 N(R14)(C(=O)R14)이고 R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)로 변환시킨다.

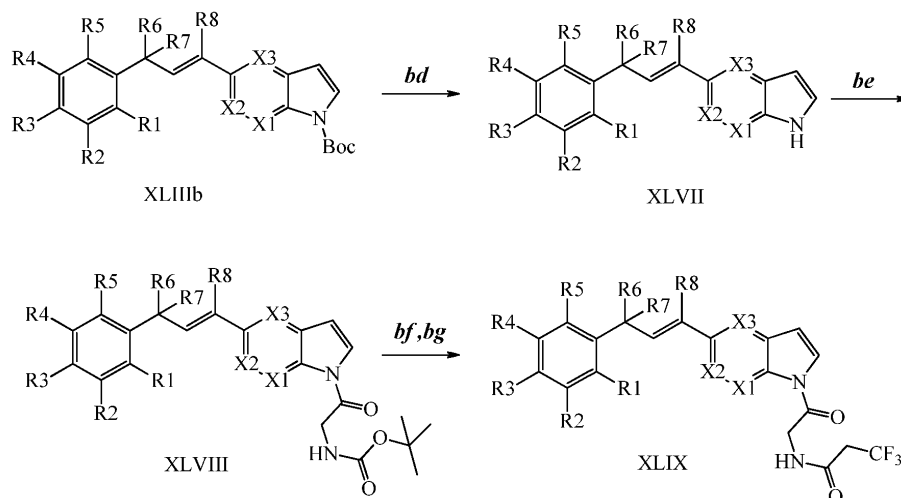
[0249] <반응식 XXXVI>



[0250] 반응식 XXXVII에서, 화학식 XLIIIb의 화합물 (여기서, R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을, 단계 **bd**에서와 같이, CH₂Cl₂와 같은 용매 중에서 TFA로 처리하여 화학식 XLVII의 인돌 (여기서, R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)로 전환시킨다. 화학식 XLVII의 화합물을, 단계 **be**에서와 같이, MeCN과 같은 용매 중에서 플루오린화칼륨 (KF) 및 18-크라운-6-에테르와 같은 크라운 에테르의 존재 하에 4-니트로페닐-2-((tert-부톡시카르보닐)아미노)아세테이트와 반응시켜, 화학식 XLVIII의 화합물 (여기서, R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)로 변환시킬 수 있다. 화학식 XLVIII의 화합물을 두 단계로 화학식 XLIX의 화합물 (여기서, R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)로 변환시킬 수 있다. 단계 **bf**에서, CH₂Cl₂와 같은 용매 중에서 TFA로 처리하여 Boc 기를 제거한다. 단계 **bg**에서, 아민을, 극성 비양성자성 용매, 예컨대 CH₂Cl₂ 중에서 3,3,3-트리플루오로프로판산, PyBOP, 및 염기, 예컨대 DIPEA로 처리한다.

[0252]

<반응식 XXXVII>



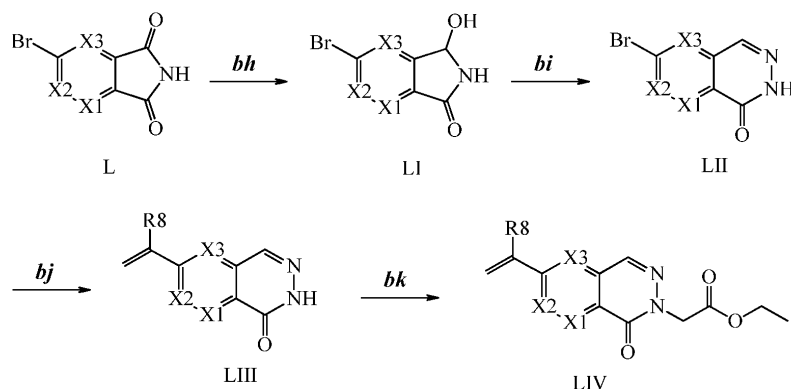
[0253]

[0254]

반응식 XXXVIII에서, 화학식 L의 화합물 (여기서, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을, 단계 **bh**에서 같이, NaOH와 같은 염기 중에서 황산구리(II) 오수화물 및 Zn 분말로 처리하여 화학식 LI의 화합물 (여기서, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)로 전환시킨다. 화학식 LI의 화합물을, 단계 **bi**에서와 같이, 약 95℃ 온도에서 물과 같은 용매 중에서 히드라진과 반응시켜, 화학식 LII의 화합물 (여기서, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)로 변환시킬 수 있다. 단계 **bj**에서, 화학식 LIII의 올레핀 (여기서, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을, 브로마이드를 DMSO와 같은 용매 혼합물 중에서 PdCl₂(dppf)와 같은 팔라듐 촉매, 및 K₂CO₃과 같은 염기의 존재 하에 포타슘 비닐 트리플루오로보레이트로 처리하여 형성시킨다. 화학식 LIV의 화합물 (여기서, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을, DMF와 같은 용매 중에서, Cs₂CO₃과 같은 염기의 존재 하에 에틸 브로모아세테이트와 반응시켜 화학식 LIII의 화합물로부터 형성시킬 수 있다.

[0255]

<반응식 XXXVIII>



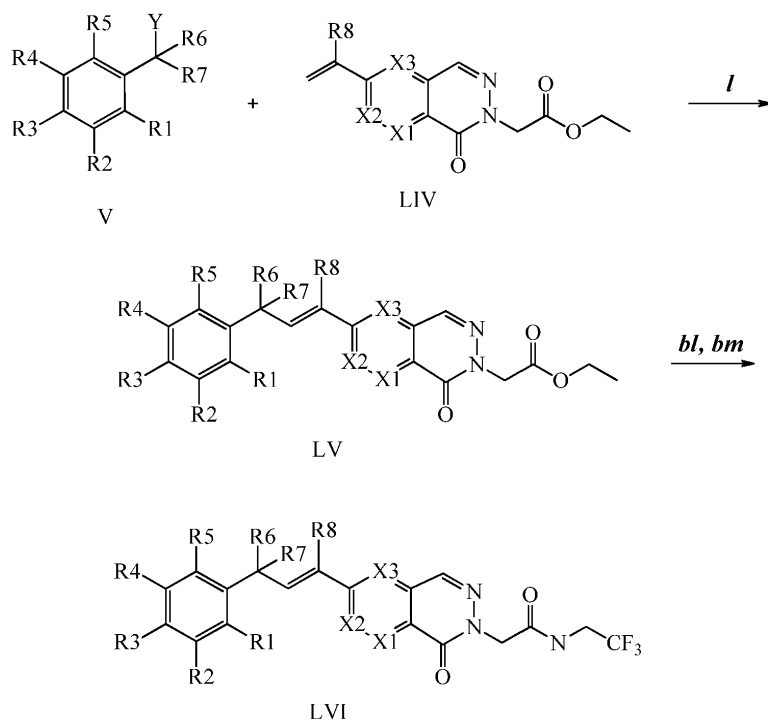
[0256]

[0257]

반응식 XXXIX의 단계 1에서, 화학식 V의 화합물 (여기서, Y, R1, R2, R3, R4, R5, R6, 및 R7은 상기 개시된 바와 같음) 및 화학식 LIV의 화합물 (여기서, R8, X1, X2 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을 약 180℃의 온도에서 1,2-디클로로벤젠과 같은 용매 중에서 CuCl 및 2,2-비피리딘의 존재 하에 반응시켜 화학식 LV의 상응하는 화합물 (여기서, R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을 수득한다. 화학식 LV의 화합물을 화학식 LVI의 화합물 (여기서, R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)로 두 단계로 추가로 변환시킬 수 있다. 단계 **bl**에서, 에스테르를 약 100℃의 온도에서 HCl 및 AcOH의 존재 하에 산으로 가수분해시킨다. 단계 **bm**에서, 산을 극성 비양성자성 용매, 예컨대 CH₂Cl₂ 중에서 아민, 예컨대 2,2,2-트리플루오로에틸아민, PyBOP, 및 염기, 예컨대 DIPEA로 처리한다.

[0258]

<반응식 XXXIX>



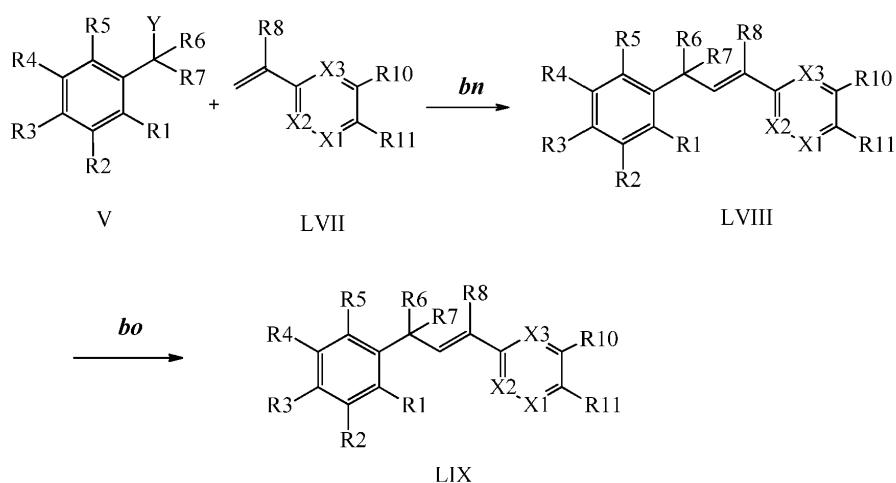
[0259]

[0260]

반응식 XL의 단계 **bn**에서, 화학식 LVII의 카르복실산 (여기서, R11은 C(=O)OH이고 R8, R10, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음) 및 화학식 V의 화합물 (여기서, Y는 Br이고 R1, R2, R3, R4, R5, R6, 및 R7은 상기 개시된 바와 같음)을 약 150℃의 온도에서 N-메틸피롤리딘과 같은 용매 중에서 CuCl 및 2,2-비피리딘의 존재 하에 반응시켜 화학식 LVIII의 화합물 (여기서, R11은 C(=O)OH이고 R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, R9, R10, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)을 수득한다. 화학식 LVIII의 화합물을, 단계 **bo**에서와 같이, 극성 비양성자성 용매, 예컨대 CH₂Cl₂ 중에서 아민, 예컨대 2-아미노-N-(2,2,2-트리플루오로에틸)아세트아미드, PyBOP, 및 염기, 예컨대 DIPEA로 처리하여, 화학식 LIX의 상응하는 벤즈아미드 (여기서, R11은 C(=O)N(R14)(R15)이고, R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, R9, R10, X1, X2, 및 X3은 상기 개시된 바와 같음)로 추가로 변환시킬 수 있다

[0261]

<반응식 XL>



[0262]

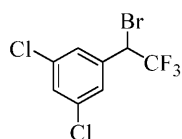
[0263]

실시예

[0264] 본 실시예는 예시 목적을 위한 것이고 본원에 개시된 발명을 단지 이들 실시예에 개시된 실시양태로 제한하는 것으로 해석되어서는 안된다.

[0265] 상업적인 공급원으로부터 구입된 출발 물질, 시약 및 용매는 추가 정제 없이 사용하였다. 무수 용매는 알드리치(Aldrich)로부터의 슈어/실(Sure/Seal)TM로서 구매하였고 수령한 대로 사용하였다. 용점은 스탠포드 리서치 시스템즈(Stanford Research Systems)로부터의 토마스 후버 유니멜트(Thomas Hoover Unimelt) 모세관 용점 장치 또는 옵티멜트 오토메이티드 멜팅 포인트 시스템(OptiMelt Automated Melting Point System)에서 얻었고 보정하지 않았다. 아이시스 드로우(ISIS Draw), 켐드로우(ChemDraw), 또는 ACD 네임 프로(Name Pro) 내의 명칭 프로그램에 따라 명명된, 그의 공지된 명칭이 분자들에게 주어졌다. 상기 프로그램이 분자를 명명하는 것이 불가능한 경우, 분자는 통상적인 명명 규칙을 사용하여 명명되었다. 달리 언급되지 않는 한, ¹H NMR 스펙트럼 데이터는 ppm (δ)으로 및 300, 400 또는 600 MHz에서 기록하였고, ¹³C NMR 스펙트럼 데이터는 ppm (δ)으로 및 75, 100 또는 150 MHz에서 기록하였다.

[0266] 실시예 1: 1-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-3,5-디클로로벤젠 (AI1)의 제조



[0267]

[0268] 단계 1 방법 A. 1-(3,5-디클로로페닐)-2,2,2-트리플루오로에탄올 (AI2). 0℃에서 MeOH (100 밀리리터 (mL)) 중 1-(3,5-디클로로페닐)-2,2,2-트리플루오로에탄올 (리케 메탈즈(Rieke Metals), UK로부터 입수; 5.0 그램 (g), 20.5 밀리몰 (mmol))의 교반 용액에 NaBH₄ (3.33 g, 92.5 mL) 및 1 N 수성 NaOH 용액 (10 mL)을 첨가하였다. 반응 혼합물을 25℃로 가온하고, 2시간 (h) 동안 교반하였다. 박층 크로마토그래피 (TLC)에 의해 반응이 완료된 것으로 여겨진 후, 포화 수성 NH₄Cl 용액을 반응 혼합물에 첨가하고, 혼합물을 감압 하에 농축하였다. 잔류물을 디에틸 에테르 (Et₂O)로 희석하고 물 (3 x 50 mL)로 세척하였다. 유기 층을 황산나트륨 (Na₂SO₄) 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 표제 화합물을 액체 (4.0 g, 79%)로서 수득하였다.

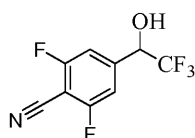
¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.41 (m, 3H), 5.00 (m, 2H), 2.74 (s, 1H); ESIMS *m/z* 242.97 ([M-H]⁻).

[0269]

[0270] 단계 1 방법 B. 1-(3,5-디클로로페닐)-2,2,2-트리플루오로에탄올 (AI2). THF (250 mL) 중 3,5-디클로로벤즈 알데히드 (10 g, 57 mmol)의 교반 용액에 트리플루오로메틸트리메틸실란 (9.79 g, 69.2 mmol) 및 촉매량의 TBAF를 첨가하였다. 반응 혼합물을 8시간 동안 25℃에서 교반하였다. TLC에 의해 반응이 완료된 것으로 여겨진 후, 반응 혼합물을 3 N HCl로 희석한 다음 16시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 물로 희석하고 에틸 아세테이트 (EtOAc; 3 x)로 추출하였다. 합한 유기 추출물을 염수로 세척하고, Na₂SO₄ 상에서 건조시키고, 감압 하에 농축하여 표제 화합물을 액체 (8.41 g, 60%)로서 수득하였다.

[0271] 하기 화합물을 상기 실시예 1의 단계 1 방법 A에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

[0272] 2,6-디플루오로-4-(2,2,2-트리플루오로-1-히드록시에틸)벤조니트릴



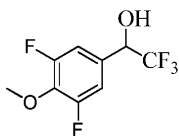
[0273]

[0274] 생성물을 갈색 고체로서 단리하였다.

mp 83-87 °C; ¹H NMR (300 MHz, CDCl₃) δ 7.26 (d, *J* = 9.0 Hz, 2H), 5.12 (d, *J* = 6.0 Hz, 1H), 3.06 (s, 1H); ESIMS *m/z* 237.1 ([M+H]⁺).

[0275]

[0276] 1-(3,5-디플루오로-4-메톡시페닐)-2,2,2-트리플루오로에탄올



[0277]

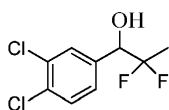
[0278] 생성물을 연황색 액체로서 분리하였다.

$^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) δ 7.06

(d, $J = 8.4$ Hz, 2H), 4.97-4.94 (m, 1H), 4.03 (s, 3H), 2.64 (s, 1H); EIMS m/z 242.1 ($[\text{M}]^+$); IR (박막) 3459, 1135 cm^{-1} .

[0279]

[0280] 1-(3,4-디클로로페닐)-2,2-디플루오로프로판-1-올



[0281]

[0282] 생성물을 무색 액체로서 분리하였다.

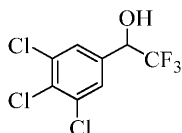
$^1\text{H NMR}$ (300 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ 7.65

- 7.62 (m, 2H), 7.41 (d, $J = 8.4$ Hz, 1H), 6.49 (d, $J = 5.1$ Hz, 1H), 4.87 - 4.78 (m, 1H), 1.53 (t, $J = 18.9$ Hz, 3H); EIMS m/z 240.0 ($[\text{M}]^+$); IR (박막) 3434, 1131, 801, 512 cm^{-1} .

[0283]

[0284] 하기 화합물을 상기 실시예 1의 단계 1 방법 B에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

[0285] 2,2,2-트리플루오로-1-(3,4,5-트리클로로페닐)에탄올 (AI3)



[0286]

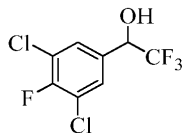
[0287] 생성물을 연황색 액체 (500 mg, 65%)로서 분리하였다.

$^1\text{H NMR}$ (400 MHz,

CDCl_3) δ 7.45 (s, 2H), 5.00 (m, 1H), 2.80 (s, 1H); ESIMS m/z 278 ($[\text{M}+\text{H}]^+$); IR (박막) 3420, 1133, 718 cm^{-1} .

[0288]

[0289] 1-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-2,2,2-트리플루오로에탄올 (AI4)



[0290]

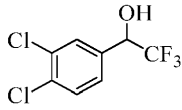
[0291] 생성물을 연황색 액체 (500 mg, 65%)로서 분리하였다.

$^1\text{H NMR}$ (400 MHz,

CDCl_3) δ 7.41 (s, 2H), 5.00 (m, 1H), 2.80 (s, 1H); ESIMS m/z 262 ($[\text{M}+\text{H}]^+$); IR (박막) 3420, 1133, 718 cm^{-1} .

[0292]

[0293] 1-(3,4-디클로로페닐)-2,2,2-트리플루오로에탄올 (AI5)

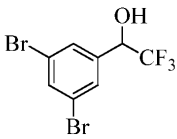


[0294]

[0295] 생성물을 연황색 액체 (500 mg, 65%)로서 분리하였다.

[0296] ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.60 (s, 1H), 7.51 (m, 1H), 7.35 (m, 1H), 5.01 (m, 1H), 2.60 (s, 1H); EIMS m/z 244 ($[\text{M}]^+$).

[0297] 1-(3,5-디브로모페닐)-2,2,2-트리플루오로에탄올

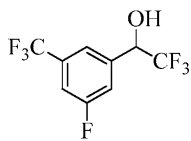


[0298]

[0299] 표제 분자를 무색 액체로서 분리하였다.

[0300] ^1H NMR (300 MHz, CDCl_3) δ 7.67 (s, 1H), 7.58 (s, 2H), 5.08-5.02 (m, 1H), 4.42 (bs, 1H); EIMS m/z 333.7 ($[\text{M}]^+$); IR (박막) 3417, 2966, 1128, 531 cm^{-1} .

[0301] 2,2,2-트리플루오로-1-(3-플루오로-5-(트리플루오로메틸)페닐)에탄올

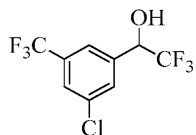


[0302]

[0303] 표제 분자를 투명한 무색 오일로서 분리하였다.

[0304] ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.56 (s, 1H), 7.45 - 7.37 (m, 2H), 5.11 (q, $J = 6.4$ Hz, 1H), 3.22 (bs, 1H); ^{13}C NMR (101 MHz, CDCl_3) δ 162.42 (d, $J = 249.5$ Hz), 137.46 (d, $J = 7.8$ Hz), 132.89 (qd, $J = 33.5, 7.9$ Hz), 123.67 (q, $J = 283.8$ Hz), 122.92 (q, $J = 270.68$ Hz), 120.10 (t, $J = 4.1$ Hz), 118.13 (d, $J = 23.0$ Hz), 113.94 (dq, $J = 24.2, 3.9$ Hz), 71.57 (q, $J = 32.4$ Hz); EIMS m/z 262 ($[\text{M}]^+$).

[0305] 1-(3-클로로-5-(트리플루오로메틸)페닐)-2,2,2-트리플루오로에탄올



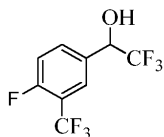
[0306]

[0307] 생성물을 백색 고체 (4.98 g, 77%)로서 분리하였다.

mp 42-46 °C; ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.83 - 7.50 (m, 3H), 5.10 (p, $J = 6.2$ Hz, 1H), 2.88 (d, $J = 4.3$ Hz, 1H); ^{13}C NMR (101 MHz, CDCl_3) δ 137.12, 135.84, 131.4, 133.03 (q, $J = 33.3$ Hz), 127.15 (q, $J = 3.8$ Hz), 124.50 (q, $J = 308.0$ Hz), 123.45 (q, $J = 301.8$ Hz), 123.04, 72.06 (q, $J = 32.5$ Hz); ^{19}F NMR (376 MHz, CDCl_3) δ -62.93, -78.43; EIMS m/z 278 ($[\text{M}]^+$).

[0308]

[0309] 2,2,2-트리플루오로-1-(4-플루오로-3-(트리플루오로메틸)페닐)에탄올



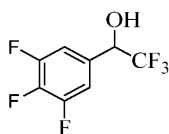
[0310]

[0311] 생성물을 갈색 액체로서 분리하였다.

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.76 (d, $J = 6.8$ Hz, 1H), 7.69-7.67 (m, 1H), 7.28-7.23 (m, 1H), 5.05-5.02 (m, 1H); ESIMS m/z 261.1 ($[\text{M}-\text{H}]$); IR (박막) 3418, 1131 cm^{-1} .

[0312]

[0313] 2,2,2-트리플루오로-1-(3,4,5-트리플루오로페닐)에탄올



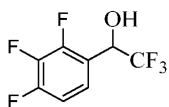
[0314]

[0315] 생성물을 무색 액체로서 분리하였다.

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3) δ 7.19-7.10 (m, 2H), 5.03-4.96 (m, 1H), 2.85 (bs, 1H); EIMS m/z 230.1 ($[\text{M}]^+$).

[0316]

[0317] 2,2,2-트리플루오로-1-(2,3,4-트리플루오로페닐)에탄올



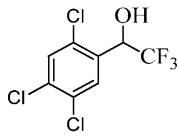
[0318]

[0319] 생성물을 투명한 무색 액체 (4.61 g, 66%)로서 분리하였다.

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.23 (qd, $J = 7.4, 6.1, 4.2$ Hz, 1H), 6.93 (tdd, $J = 9.2, 6.9, 2.2$ Hz, 1H), 5.25 (q, $J = 6.3$ Hz, 1H), 3.02 - 2.74 (m, 1H); ^{13}C NMR (101 MHz, CDCl_3) δ 151.79 (ddd, $J = 254.5, 9.8, 3.4$ Hz), 149.52 (ddd, $J = 253.5, 11.0, 3.5$ Hz), 139.67 (dt, $J = 252.5, 15.3$ Hz), 123.68 (q, $J = 282.2$ Hz), 122.48 (dt, $J = 8.2, 4.1$ Hz), 118.95 (dd, $J = 10.6, 3.6$ Hz), 112.73 (dd, $J = 17.7, 3.9$ Hz), 66.58 - 64.42 (m); ^{19}F NMR (376 MHz, CDCl_3) δ -78.95 (d, $J = 6.2$ Hz), -132.02 (dd, $J = 20.0, 8.2$ Hz), -137.89 (m), 159.84 (t, $J = 20.3$ Hz); EIMS m/z 230 ($[\text{M}]^+$).

[0320]

[0321] 2,2,2-트리플루오로-1-(2,4,5-트리클로로페닐)에탄올



[0322]

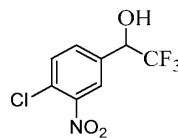
[0323] 생성물을 백색 고체 (3.37 g, 73%)로서 분리하였다.

mp 70-73 °C; ¹H NMR (400

MHz, CDCl₃) δ 7.63 (d, *J* = 2.5 Hz, 1H), 7.54 (d, *J* = 2.5 Hz, 1H), 5.72 - 5.57 (m, 1H), 2.85 (d, *J* = 4.8 Hz, 1H); ¹⁹F NMR (376 MHz, CDCl₃) δ -77.84.

[0324]

[0325] 1-(4-클로로-3-니트로페닐)-2,2,2-트리플루오로에탄올



[0326]

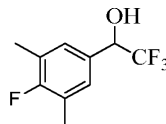
[0327] 생성물을 황색 오일 (6.52 g, 73%)로서 분리하였다.

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ

8.04 (d, *J* = 2.0 Hz, 1H), 7.75 - 7.51 (m, 2H), 5.16 (m, 1H), 3.41 (d, *J* = 4.3 Hz, 1H); ¹³C NMR (101 MHz, CDCl₃) δ 147.65, 134.44, 132.23, 132.17, 128.11, 124.66, 123.60 (q, *J* = 283.8), 70.99 (q, *J* = 32.6 Hz); ¹⁹F NMR (376 MHz, CDCl₃) δ -78.47; EIMS *m/z* 230 ([M]⁺).

[0328]

[0329] 2,2,2-트리플루오로-1-(4-플루오로-3,5-디메틸페닐)에탄올



[0330]

[0331] 생성물을 백색 고체 (6.49 g, 84%)로서 분리하였다.

mp 45-49 °C; ¹H NMR (400

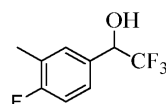
MHz, CDCl₃) δ 7.10 (d, *J* = 6.8 Hz, 2H), 4.89 (m, 1H), 2.63 (d, *J* = 4.3 Hz, 1H), 2.27 (d, *J* = 2.2 Hz, 6H); ¹³C NMR (101 MHz, CDCl₃) δ 160.45 (d, *J* = 246.0 Hz), 128.73, 127.97, 124.92 (d, *J* = 18.6 Hz), 124.19 (q, *J* = 279.1 Hz), 72.36 (q, *J* = 32.0 Hz), 14.61 (d, *J* = 4.1 Hz).

[0332]

; ¹⁹F NMR (376 MHz, CDCl₃) δ -78.48, -120.14; EIMS *m/z* 222 ([M]⁺).

[0333]

[0334] 2,2,2-트리플루오로-1-(4-플루오로-3-메틸페닐)에탄올



[0334]

[0335]

생성물을 백색 고체 (2.12 g, 33%)로서 분리하였다.

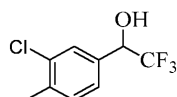
mp 40-46 °C; ^1H NMR (400

MHz, CDCl_3) δ 7.28 (d, $J = 7.4$ Hz, 1H), 7.25 - 7.14 (m, 1H), 7.01 (t, $J = 8.9$ Hz, 1H), 5.05 - 4.63 (m, 1H), 3.03 (d, $J = 4.2$ Hz, 1H); ^{13}C NMR (101 MHz, CDCl_3) δ 161.91 (d, $J = 247.0$ Hz), 130.62 (d, $J = 5.6$ Hz), 129.41 (d, $J = 3.5$ Hz), 126.55 (d, $J = 8.5$ Hz), 115.19 (d, $J = 22.9$ Hz), 72.23 (q, $J = 32.1$ Hz), 14.44 (d, $J = 3.6$ Hz); ^{19}F NMR (376 MHz, CDCl_3) δ -78.57, -116.15; EIMS m/z 208 ($[\text{M}]^+$).

[0336]

[0337]

1-(3-클로로-4-메틸페닐)-2,2,2-트리플루오로에탄올



[0338]

[0339]

생성물을 투명한 무색 오일 (4.99 g, 75%)로서 분리하였다.

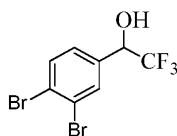
^1H NMR (400 MHz,

CDCl_3) δ 7.31 (s, 1H), 7.10 (m, 2H), 4.79 (q, $J = 6.1$ Hz, 1H), 2.89 (bs, 1H), 2.25 (s, 3H); ^{13}C NMR (101 MHz, CDCl_3) δ 137.64, 134.67, 132.99, 131.09, 128.01, 125.58, 124.02 (q, $J = 284.8$ Hz), 72.08 (q, $J = 32.3$ Hz); ^{19}F NMR (376 MHz, CDCl_3) δ -78.39; EIMS m/z 224.5 ($[\text{M}]^+$).

[0340]

[0341]

1-(3,4-디브로모페닐)-2,2,2-트리플루오로에탄올



[0342]

[0343]

생성물을 투명한 무색 오일 (5.92 g, 88%)로서 분리하였다.

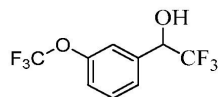
^1H NMR (400 MHz,

CDCl_3) δ 7.76 (d, $J = 2.0$ Hz, 1H), 7.66 (d, $J = 8.3$ Hz, 1H), 7.29 (dd, $J = 8.3, 2.0$ Hz, 1H), 4.99 (qd, $J = 6.4, 4.2$ Hz, 1H), 2.75 (d, $J = 4.3$ Hz, 1H); ^{13}C NMR (101 MHz, CDCl_3) δ 134.52, 133.81, 132.60, 127.45, 126.19, 125.16, 123.71 (q, $J = 283.8$ Hz), 71.57 (q, $J = 32.5$ Hz); ^{19}F NMR (376 MHz, CDCl_3) δ -78.44; EIMS m/z 334 ($[\text{M}]^+$).

[0344]

[0345]

2,2,2-트리플루오로-1-(3-(트리플루오로메톡시)페닐)에탄올



[0346]

[0347]

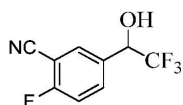
생성물을 투명한 무색 오일 (20.9 g, 79%)로서 분리하였다.

^1H NMR (400 MHz,

CDCl_3) δ 7.55 - 7.36 (m, 3H), 7.33 - 7.14 (m, 1H), 5.06 (m, 1H), 2.80 (br m, 1H); ^{13}C NMR (101 MHz, CDCl_3) δ 149.36 (q, $J = 2.0$ Hz), 136.04, 129.99, 125.78, 123.91 (q, $J = 282.8$ Hz), 121.90, 120.31 (q, $J = 258.6$ Hz), 120.12, 72.04 (q, $J = 32.3$ Hz); ^{19}F NMR (376 MHz, CDCl_3) δ -57.92, -78.49; EIMS m/z 260 ($[\text{M}]^+$).

[0348]

[0349] 2-플루오로-5-(2,2,2-트리플루오로-1-히드록시에틸)벤조니트릴



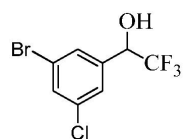
[0350]

[0351] 생성물을 투명한 무색 오일 (5.47 g, 58%)로서 분리하였다.

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.80 (dd, *J* = 5.9, 2.2 Hz, 1H), 7.76 (ddd, *J* = 7.8, 5.0, 2.3 Hz, 1H), 7.30 (d, *J* = 8.6 Hz, 1H), δ 5.09 (qd, *J* = 6.3, 4.2 Hz, 1H), 3.12 (bm, 1H); ¹³C NMR (101 MHz, CDCl₃) δ 163.49 (d, *J* = 261.7 Hz), 134.23 (d, *J* = 8.6 Hz), 132.67, 131.17, 123.66 (q, *J* = 282.4 Hz), 116.79 (d, *J* = 20.1 Hz), 113.39, 100.96 (d, *J* = 194.9), 71.07 (q, *J* = 32.5 Hz); ¹⁹F NMR (376 MHz, CDCl₃) δ -78.70, -105.22; EIMS *m/z* 219 ([M]⁺).

[0352]

[0353] 1-(3-브로모-5-클로로페닐)-2,2,2-트리플루오로에탄올



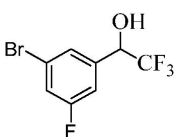
[0354]

[0355] 생성물을 황색 액체로서 분리하였다.

¹H NMR (300 MHz, DMSO-*d*₆) δ 7.78 (s, 1H), 7.67 (s, 1H), 7.57 (s, 1H), 7.15 (d, *J* = 5.7 Hz, 1H); EIMS *m/z* 288 ([M]⁺); IR (박막) 3435, 1175, 750 cm⁻¹.

[0356]

[0357] 1-(3-브로모-5-플루오로페닐)-2,2,2-트리플루오로에탄올



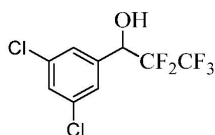
[0358]

[0359] 생성물을 연황색 액체로서 분리하였다.

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.43 (s, 1H), 7.29 - 7.26 (m, 1H), 7.18 (d, *J* = 8.8 Hz, 1H), 5.03 - 4.98 (m, 1H), 3.60 (bs, 1H); EIMS *m/z* 272.0 ([M]⁺); IR (박막) 3400, 1176, 520 cm⁻¹.

[0360]

[0361] 1-(3,5-디클로로페닐)-2,2,3,3,3-펜타플루오로프로판-1-올

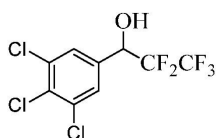


[0362]

[0363] 펜타플루오로에틸트리메틸실란을 사용하여, 생성물을 백색 고체 (6.22 g, 88%)로서 분리하였다.

mp 71-73 °C; ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.42 (t, J = 1.9 Hz, 1H), 7.37 (d, J = 1.8 Hz, 2H), 5.11 (dt, J = 16.2, 5.7 Hz, 1H), 2.62 (d, J = 4.9 Hz, 1H); ^{13}C NMR (101 MHz, CDCl_3) δ 136.90, 135.31, 129.84, 126.38, 70.94 (dd, J = 28.2, 23.1 Hz); ^{19}F NMR (376 MHz, CDCl_3) δ -81.06, -120.94 (d, J = 277.5 Hz), -129.18 (d, J = 277.5 Hz); EIMS m/z 295 ($[\text{M}]^+$).

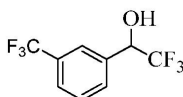
[0364]
[0365] 2,2,3,3,3-펜타플루오로-1-(3,4,5-트리클로로페닐)프로판-1-올



[0366]
[0367] 펜타플루오로에틸트리메틸실란을 사용하여, 생성물을 회백색 반고체로서 분리하였다.

^1H NMR (300 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ 7.78 (s, 2H), 7.29 (d, J = 5.4 Hz, 1H), 5.50 - 5.40 (m, 1H); EIMS m/z 328.0 ($[\text{M}]^+$); IR (박막) 3459, 1188, 797 cm^{-1} .

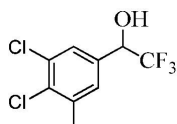
[0368]
[0369] 2,2,2-트리플루오로-1-(3-(트리플루오로메틸)페닐)에탄올



[0370]
[0371] 생성물을 담황색 (13.8 g, 89%)으로서 분리하였다.

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.77 (s, 1H), 7.70-7.67 (m, 2H), 7.55 (t, J = 7.8 Hz, 1H), 5.12 (q, J = 6.6 Hz, 1H), 2.76 (s, 1H); ^{19}F NMR (376 MHz, CDCl_3) δ -62.8, -78.5; EIMS m/z 244 ($[\text{M}]^+$).

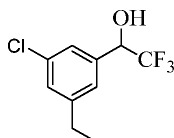
[0372]
[0373] 1-(3,4-디클로로-5-메틸페닐)-2,2,2-트리플루오로에탄올



[0374]
[0375] 생성물을 연한 회황색 고체로서 분리하였다.

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.44 (s, 1H), 7.26 (s, 1H), 4.98 - 4.95 (m, 1H), 2.61 (d, J = 4.4 Hz, 1H), 2.44 (s, 3H).
; EIMS m/z 258.1 ($[\text{M}]^+$); IR (박막) 3421, 2926, 1129, 748 cm^{-1} .

[0376]
[0377] 1-(3-클로로-5-에틸페닐)-2,2,2-트리플루오로에탄올

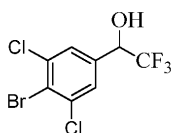


[0378]

생성물을 회갈색 액체 (0.43 g, 85%)로서 분리하였다.

$^1\text{H NMR}$ (300 MHz, DMSO- d_6) δ 7.34 (s, 1H), 7.31 - 7.30 (m, 2H), 6.99 (d, $J = 5.7$ Hz, 1H), 5.23 - 5.16 (m, 1H), 2.67 (m, 2H), 1.19 (t, $J = 7.8$ Hz, 3H); EIMS m/z 238.0 ($[\text{M}]^+$); IR (박막) 3361, 1172, 749 cm^{-1} .

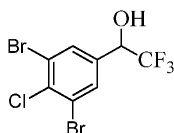
1-(4-브로모-3,5-디클로로페닐)-2,2,2-트리플루오로에탄올



생성물을 무색 액체로서 분리하였다.

$^1\text{H NMR}$ (300 MHz, DMSO- d_6) δ 7.75 (s, 2H), 7.24 (d, $J = 6.0$ Hz, 1H), 5.34 - 5.29 (m, 1H); EIMS m/z 321.88 ($[\text{M}]^+$); IR (박막) 3420, 1706, 1267, 804, 679 cm^{-1} .

1-(3,5-디브로모-4-클로로페닐)-2,2,2-트리플루오로에탄올



생성물을 연황색 겔로서 분리하였다.

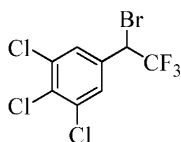
$^1\text{H NMR}$ (300 MHz, DMSO- d_6) δ 7.89 (s, 2H), 7.20 (d, $J = 6.0$ Hz, 1H) 5.34 - 5.30 (m, 1H); EIMS m/z 366.0 ($[\text{M}]^+$).

단계 2. 1-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-3,5-디클로로벤젠 (AI1). CH_2Cl_2 (50 mL) 중 1-(3,5-디클로로페닐)-2,2,2-트리플루오로에탄올 (4.0 g, 16.3 mmol)의 교반 용액에, NBS (2.9 g, 16.3 mmol) 및 트리페닐 포스파이트 (5.06 g, 16.3 mmol)를 첨가하고, 생성된 반응 혼합물을 18시간 동안 환류 하에 가열하였다. TLC에 의해 반응이 완료된 것으로 여겨진 후, 반응 혼합물을 25°C로 냉각하고 감압 하에 농축하였다. 플래쉬 칼럼 크로마토그래피 (SiO_2 , 100-200 메쉬; 100% 헥산으로 용리)에 의해 정제하여 표제 화합물을 액체 (2.0 g, 40%)로서 수득하였다.

$^1\text{H NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) δ 7.41 (s, 3H), 5.00 (m, 1H); EIMS m/z 306 ($[\text{M}]^+$).

하기 화합물을 실시예 1의 단계 2에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

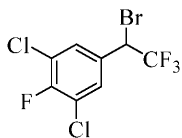
5-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-1,2,3-트리클로로벤젠 (AI6)



생성물을 무색 오일 (300 mg, 60%)로서 분리하였다.

$^1\text{H NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) δ 7.59 (s, 2H), 5.00 (m, 1H); EIMS m/z 340.00 ($[\text{M}]^+$).

[0396] 5-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-1,3-디클로로-2-플루오로벤젠 (AI7)

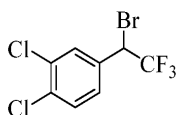


[0397]

[0398] 생성물을 무색 오일 (320 mg, 60%)로서 분리하였다.

[0399] $^1\text{H NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) δ 7.45 (s, 2H), 5.00 (m, 2H); EIMS m/z 324.00 ($[\text{M}]^+$).

[0400] 4-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-1,2-디클로로벤젠 (AI8)

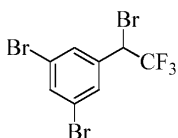


[0401]

[0402] 생성물을 무색 오일 (300 mg, 60%)로서 분리하였다.

[0403] $^1\text{H NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) δ 7.63 (s, 1H), 7.51 (m, 1H), 7.35 (m, 1H), 5.01 (m, 1H); EIMS m/z 306.00 ($[\text{M}]^+$).

[0404] 1,3-디브로모-5-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)벤젠

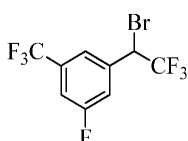


[0405]

[0406] 표제 분자를 무색 액체로서 분리하였다.

[0407] $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) δ 7.71 (s, 1H), 7.59 (s, 2H), 5.04-4.97 (m, 1H); EIMS m/z 394.6 ($[\text{M}]^+$); IR (박막) 1114, 535 cm^{-1} .

[0408] 1-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-3-플루오로-5-(트리플루오로메틸)벤젠

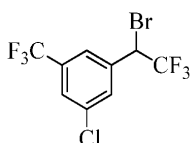


[0409]

[0410] 표제 분자를 무색 액체로서 분리하였다.

[0411] $^1\text{H NMR}$ (400 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ 7.90 (d, $J = 8.4$ Hz, 1H), 7.79-7.77 (m, 2H), 6.40-6.34 (m, 1H); EIMS m/z 324.00 ($[\text{M}]^+$); IR (박막) 1175, 525 cm^{-1} .

[0412] 1-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-3-클로로-5-(트리플루오로메틸)벤젠



[0413]

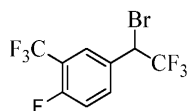
[0414] 표제 분자를 무색 액체로서 분리하였다.

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ

7.71 (s, 1H), 7.67 (s, 1H), 7.64 (s, 1H), 5.15-5.09 (m, 1H); EIMS m/z 340.00 ($[\text{M}]^+$); IR(박막)

[0415] 1178, 750, 540 cm^{-1} .

[0416] 4-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-1-플루오로-2-(트리플루오로메틸)벤젠



[0417]

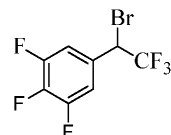
[0418] 표제 분자를 무색 액체로서 분리하였다.

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ

7.75-7.72 (m, 2H), 7.28-7.24 (m, 1H), 5.19-5.16 (m, 1H); EIMS m/z 326.0 ($[\text{M}]^+$); IR (박막)

[0419] 1114, 571 cm^{-1} .

[0420] 5-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-1,2,3-트리플루오로벤젠



[0421]

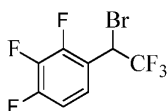
[0422] 표제 분자를 갈색 액체로서 분리하였다.

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3) δ

7.23-7.12 (m, 2H), 5.05-4.98 (m, 1H); EIMS m/z 292.0 ($[\text{M}]^+$); IR (박막) 1116, 505 cm^{-1} .

[0423]

[0424] 1-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-2,3,4-트리플루오로벤젠



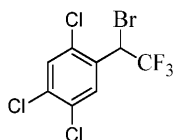
[0425]

[0426] 표제 분자를 무색 오일로서 분리하였다.

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3) δ 7.44 (qd, $J = m$, 1H), 7.11-7.03 (m, 1H), 5.53-5.45 (m, 1H).

[0427]

[0428] 1-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-2,4,5-트리클로로벤젠



[0429]

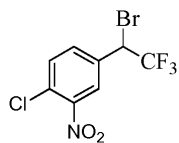
[0430] 표제 분자를 회백색 고체로서 분리하였다.

^1H NMR (300 MHz, $\text{DMSO}-d_6$)

δ 8.06 (d, $J = 2.1$ Hz, 1H), 7.71 (s, 1H), 6.45 - 6.37 (m, 1H); EIMS m/z 340.0 ($[\text{M}]^+$); IR (박막)

[0431] 1186, 764, 576 cm^{-1} .

[0432] 4-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-1-클로로-2-니트로벤젠



[0433]

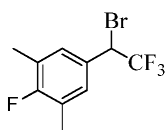
[0434] 표제 분자를 회백색 고체로서 분리하였다.

^1H NMR (300 MHz, DMSO- d_6)

δ 8.30 (s, 1H), 7.92 (d, $J = 9.0$ Hz, 1H), 6.43 - 6.35 (m, 1H); EIMS m/z 317.0 ($[\text{M}]^+$); IR (박막) 2927, 1540, 1353, 1177, 766, 530 cm^{-1} .

[0435]

[0436] 5-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-2-플루오로-1,3-디메틸벤젠



[0437]

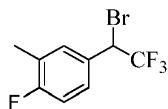
[0438] 표제 분자를 무색 액체로서 분리하였다.

^1H NMR (300 MHz, DMSO- d_6)

δ 7.32 (d, $J = 7.2$ Hz, 2H), 6.15-6.07 (m, 1H), 3.23 (s, 6H); ESIMS m/z 284.1 ($[\text{M}+\text{H}]^+$); IR (박막) 2962, 1112, 500 cm^{-1} .

[0439]

[0440] 4-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-1-플루오로-2-메틸벤젠



[0441]

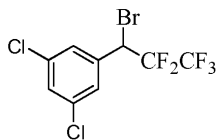
[0442] 표제 분자를 무색 액체로서 분리하였다.

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3) δ

7.34-7.28 (m, 2H), 7.04-6.98 (m, 1H), 5.10-5.03 (m, 1H), 2.29 (s, 3H); EIMS m/z 270.1 ($[\text{M}]^+$); IR (박막) 2989, 1163 cm^{-1} .

[0443]

[0444] 1-(1-브로모-2,2,3,3,3-펜타플루오로프로필)-3,5-디클로로벤젠



[0445]

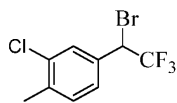
[0446] 표제 분자를 무색 액체로서 분리하였다.

^1H NMR (400 MHz, DMSO- d_6)

δ 7.79 (t, $J = 2.0$ Hz, 1H), 7.63 (s, 2H), 6.37-6.29 (m, 1H); EIMS m/z 356 ($[\text{M}]^+$); IR (박막) 1673, 1130, 715, 518 cm^{-1} .

[0447]

[0448] 4-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-2-클로로-1-메틸벤젠



[0449]

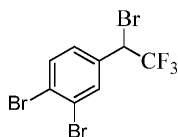
[0450] 표제 분자를 무색 액체로서 분리하였다.

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3) δ

7.55 - 7.50 (m, 2H), 7.44 (d, $J = 8.4$ Hz, 1H), 6.24 - 6.16 (m, 1H); IR (박막) 2983, 1112, 749, 564 cm^{-1} .

[0451]

[0452] 1,2-디브로모-4-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)벤젠



[0453]

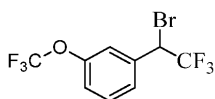
[0454] 표제 분자를 무색 액체로서 분리하였다.

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3) δ

7.75 (s, 1H), 7.67 (d, $J = 8.4$ Hz, 1H), 7.33-7.30 (m, 1H), 5.07-5.00 (m, 1H); EIMS m/z 393.8 ($[\text{M}]^+$); IR (박막) 2981, 1644, 1165 cm^{-1} .

[0455]

[0456] 1-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-3-(트리플루오로메톡시)벤젠



[0457]

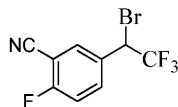
[0458] 표제 분자를 무색 액체로서 분리하였다.

^1H NMR (300 MHz, $\text{DMSO}-d_6$)

δ 7.65-7.60 (m, 2H), 7.56-7.50 (m, 2H), 6.35-6.27 (m, 1H); EIMS m/z 322 ($[\text{M}]^+$); IR (박막) 3413, 1161, 564 cm^{-1} .

[0459]

[0460] 5-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-2-플루오로벤조니트릴



[0461]

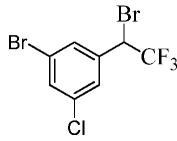
[0462] 표제 분자를 연황색 액체로서 분리하였다.

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3) δ

8.15 - 8.12 (m, 1H), 8.00 - 7.98 (m, 1H), 7.69 - 7.63 (m, 1H), 6.31 - 6.26 (m, 1H); EIMS m/z 280.9 ($[\text{M}]^+$).

[0463]

[0464] 1-브로모-3-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-5-클로로벤젠



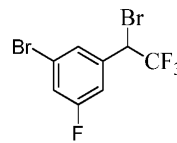
[0465]

[0466] 표제 분자를 연황색 액체로서 분리하였다.

^1H NMR (400 MHz, DMSO- d_6) δ 7.90 (s, 1H), 7.74 (s, 1H), 7.65 (s, 1H), 6.26 - 6.20 (m, 1H); EIMS m/z 349.9 ($[\text{M}]^+$); IR (박막) 1114, 764 cm^{-1} .

[0467]

[0468] 5-(1-브로모-2,2,3,3,3-펜타플루오로프로필)-1,2,3-트리클로로벤젠



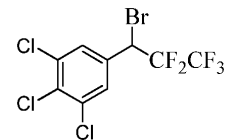
[0469]

[0470] 표제 분자를 무색 액체로서 분리하였다.

^1H NMR(400 MHz, CDCl_3) δ 7.43 (s, 1H), 7.32 - 7.29 (m, 1H), 7.22 (d, $J = 8.8$ Hz, 1H), 1.06 (q, 1H); EIMS m/z 334.0 ($[\text{M}]^+$); IR (박막) 3087, 1168, 533 cm^{-1} .

[0471]

[0472] 1-브로모-3-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-5-플루오로벤젠



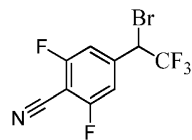
[0473]

[0474] 표제 분자를 무색 액체로서 분리하였다.

^1H NMR (300 MHz, DMSO- d_6) δ 7.85 (s, 2H), 6.38 - 6.29 (m, 1H); EIMS m/z 389.9 ($[\text{M}]^+$); IR (박막) 1208, 798, 560 cm^{-1} .

[0475]

[0476] 4-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-2,6-디플루오로벤조니트릴



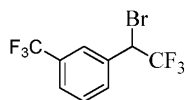
[0477]

[0478] 표제 분자를 자주색 고체로서 분리하였다.

mp 59-63 $^{\circ}\text{C}$; ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.25 (s, 2H), 5.11-5.07 (m, 1H); ESIMS m/z 299.0 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

[0479]

[0480] 1-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-3-(트리플루오로메틸)벤젠



[0481]

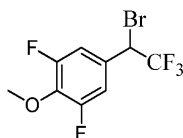
[0482] 표제 분자를 무색 액체로서 분리하였다.

mp 59-63 °C; ¹H NMR (300

MHz, CDCl₃) δ 7.75-7.67 (m, 3H), 7.57-7.52 (m, 1H), 5.20-5.13 (m, 1H); ESIMS *m/z* 306.0 ([M]⁺); IR (박막) 3436, 2925, 1265, 749 cm⁻¹.

[0483]

[0484] 5-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-1,3-디플루오로-2-메톡시벤젠



[0485]

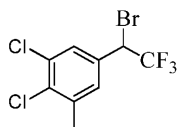
[0486] 표제 분자를 연황색 액체로서 분리하였다.

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ

7.08 (d, *J* = 8.4 Hz, 2H), 5.03-4.98 (m, 1H), 4.04 (s, 3H); ESIMS *m/z* 304.1 ([M+H]⁺); IR (박막) 1114, 613 cm⁻¹.

[0487]

[0488] 5-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-1,2-디클로로-3-메틸벤젠



[0489]

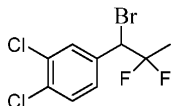
[0490] 표제 분자를 무색 액체로서 분리하였다.

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ

7.46 (s, 1H), 7.27 (s, 1H), 5.04 - 4.99 (m, 1H), 2.44 (s, 3H); EIMS *m/z* 320.0 ([M]⁺); IR (박막) 2925, 1112, 752, 580 cm⁻¹.

[0491]

[0492] 4-(1-브로모-2,2-디플루오로프로필)-1,2-디클로로벤젠



[0493]

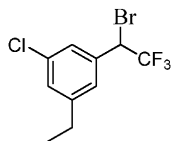
[0494] 표제 분자를 무색 액체로서 분리하였다.

¹H NMR (300 MHz, DMSO-d₆)

δ 7.76 - 7.70 (m, 2H), 7.54 (dd, *J* = 8.4 1.8 Hz, 1H), 5.81 - 5.73 (m, 1H), 1.67 (d, *J* = 18.9 Hz, 3H); EIMS *m/z* 304.0 ([M]⁺); IR (박막) 1118, 800, 499 cm⁻¹.

[0495]

[0496] 1-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-3-클로로-5-에틸벤젠



[0497]

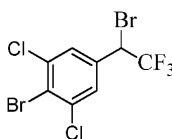
[0498] 표제 분자를 무색 액체로서 분리하였다.

^1H NMR (400 MHz, DMSO- d_6)

δ 7.43 (d, J = 5.6 Hz, 2H), 7.39 (s, 1H), 6.20-6.16 (m, 1H), 2.68 - 2.62 (m, 2H), 1.19 (t, J = 7.6 Hz, 3H); EIMS m/z 300.0 ($[\text{M}]^+$); IR (박막) 2970, 1167, 716, 539 cm^{-1} .

[0499]

[0500] 2-브로모-5-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-1,3-디클로로벤젠



[0501]

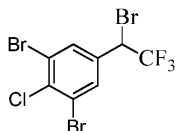
[0502] 표제 분자를 무색 액체로서 분리하였다.

^1H NMR (400 MHz, DMSO- d_6)

δ 7.79 (s, 2H), 6.27 - 6.21 (m, 1H); EIMS m/z 383.9 ($[\text{M}]^+$); IR (박막) 2924, 1114, 749, 534 cm^{-1} .

[0503]

[0504] 1,3-디브로모-5-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-2-클로로벤젠



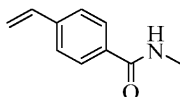
[0505]

[0506] 표제 분자를 연황색 액체로서 분리하였다.

^1H NMR (300 MHz, DMSO- d_6) δ 7.97 (s, 2H), 6.27 - 6.19 (m, 1H); EIMS m/z 428.0 ($[\text{M}]^+$).

[0507]

[0508] 실시예 2: N-메틸-4-비닐벤즈아미드 (AI9)의 제조



[0509]

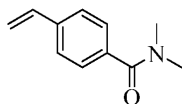
[0510] 단계 1. 4-비닐벤조일 클로라이드 (AI10). 0°C에서 CH_2Cl_2 (20 mL) 중 4-비닐벤조산 (1 g, 6.75 mmol)의 교반 용액에 촉매량의 DMF 및 옥살릴 클로라이드 (1.27 g, 10.12 mmol)를 15분 (min)의 기간에 걸쳐 적가하였다. 반응 혼합물을 6시간 동안 25°C에서 교반하였다. TLC에 의해 반응이 완료된 것으로 여겨진 후, 반응 혼합물을 감압 하에 농축하여 조 산 클로라이드를 수득하였다.

[0511] 단계 2. N-메틸-4-비닐벤즈아미드 (AI9). 0°C에서 THF 중 1 M N-메틸아민 (13.5 mL, 13.5 mmol)에 TEA (1.34 mL, 10.12 mmol) 및 THF (10 mL) 중 상기 단계 1로부터의 산 클로라이드를 첨가하고, 반응 혼합물을 3시간 동안 25°C에서 교반하였다. TLC에 의해 반응이 완료된 것으로 여겨진 후, 반응 혼합물을 물로 채팅한 다음 EtOAc (3x)로 추출하였다. 합한 EtOAc 층을 염수로 세척하고 Na_2SO_4 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 표제 화합물을 회백색 고체 (650 mg, 60%)로서 수득하였다.

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.76 (d, *J* = 8.0 Hz, 2H), 7.45 (d, *J* = 8.0 Hz, 2H), 6.79 (m, 1H), 6.20 (br s, 1H), 5.82 (d, *J* = 17.6 Hz, 1H), 5.39 (d, *J* = 10.8 Hz, 1H); ESIMS *m/z* 161.95 ([M+H]⁺).

하기 화합물을 실시예 2에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

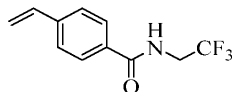
N,N-디메틸-4-비닐벤즈아미드 (AI11)



생성물을 회백색 고체 (650 mg, 60%)로서 분리하였다.

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.42 (m, 4H), 6.71 (m, 1H), 5.80 (d, *J* = 17.6 Hz, 1H), 5.31 (d, *J* = 10.8 Hz, 1H), 3.05 (s, 3H), 3.00 (s, 3H); ESIMS *m/z* 176.01 ([M+H]⁺).

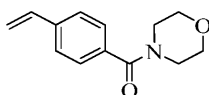
N-(2,2,3-트리플루오로메틸)-4-비닐벤즈아미드 (AI12)



생성물을 회백색 고체 (900 mg, 60%)로서 분리하였다.

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.76 (d, *J* = 8.0 Hz, 2H), 7.45 (d, *J* = 8.0 Hz, 2H), 6.79 (m, 1H), 6.20 (br s, 1H), 5.82 (d, *J* = 17.6 Hz, 1H), 5.39 (d, *J* = 10.8 Hz, 1H), 4.19 (m, 2H); ESIMS *m/z* 230.06 ([M+H]⁺).

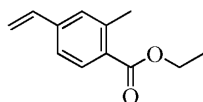
모르폴리노(4-비닐페닐)메탄온 (AI13)



생성물을 백색 고체 (850 mg, 60%)로서 분리하였다.

ESIMS *m/z* 218.12 ([M+H]⁺).

실시예 3: 에틸 2-메틸-4-비닐벤조에이트 (AI14)의 제조



단계 1. 4-포르밀-2-메틸벤조산 (AI15). -78℃에서 건조 THF (360 mL) 중 4-브로모-2-메틸벤조산 (10 g, 46.4 mmol)의 교반 용액에 *n*-BuLi (헥산 중 1.6 M 용액; 58.17 mL, 93.0 mmol) 및 DMF (8 mL)를 첨가하였다. 반응 혼합물을 1시간 동안 -78℃에서 교반한 다음 25℃로 가온하고 1시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 1 N HCl 용액으로 킨칭하고 EtOAc로 추출하였다. 합한 EtOAc 추출물을 염수로 세척하고 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하였다. 잔류물을 *n*-헥산으로 세척하여 표제 화합물을 고체 (3.0 g, 40%)로서 수득하였다.

mp 196–198 °C; ^1H NMR (400 MHz, DMSO- d_6) δ 13.32 (br s, 1H), 10.05 (s, 1H), 7.98 (m, 1H), 7.84 (m, 2H), 2.61 (s, 3H); ESIMS m/z 163.00 ([M-H] $^-$).

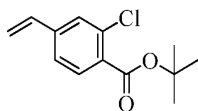
단계 2. 에틸 4-포르밀-2-메틸벤조에이트 (AI16). EtOH (30 mL) 중 4-포르밀-2-메틸벤조산 (3 g, 18.2 mmol)의 교반 용액에 H_2SO_4 를 첨가하고, 반응 혼합물을 18시간 동안 80°C에서 가열하였다. 반응 혼합물을 25°C로 냉각하고 감압 하에 농축하였다. 잔류물을 EtOAc로 희석하고 물로 세척하였다. 합한 EtOAc 추출물을 염수로 세척하고, Na_2SO_4 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 표제 화합물을 고체 (2.8 g, 80%)로서 수득하였다.

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 10.05 (s, 1H), 8.04 (m, 1H), 7.75 (m, 2H), 4.43 (m, 2H), 2.65 (s, 3H), 1.42 (m, 3H).

단계 3. 에틸 2-메틸-4-비닐벤조에이트 (AI14). 1,4-디옥산 (20 mL) 중 에틸 4-포르밀-2-메틸벤조에이트 (2.8 g, 4 mmol)의 교반 용액에 25°C에서 K_2CO_3 (3.01 g, 21.87 mmol) 및 메틸트리페닐 포스포늄 브로마이드 (7.8 g, 21.87 mmol)를 첨가하였다. 이어서, 반응 혼합물을 18시간 동안 100°C에서 가열하였다. TLC에 의해 반응이 완료된 것으로 여겨진 후, 반응 혼합물을 25°C로 냉각하고 여과하고, 여과물을 감압 하에 농축하였다. 조 화합물을 플래쉬 크로마토그래피 (SiO_2 , 100-200 메쉬; n-헥산 중 25-30% EtOAc로 용리)에 의해 정제하여 표제 화합물을 고체 (2.0 g, 72%)로서 수득하였다.

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.86 (m, 1H), 7.27 (m, 2H), 6.68 (dd, $J=17.6$, 10.8 Hz, 1H), 5.84 (d, $J=17.6$ Hz, 1H), 5.39 (d, $J=10.8$ Hz, 1H), 4.39 (m, 2H), 2.60 (s, 3H), 1.40 (m, 3H); ESIMS m/z 191.10 ([M-H] $^-$); IR (박막) 2980, 1716, 1257 cm^{-1} .

실시예 4: tert-부틸 2-클로로-4-비닐벤조에이트 (AI17)의 제조

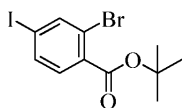


단계 1. tert-부틸 4-브로모-2-클로로벤조에이트 (AI18). THF (30 mL) 중 4-브로모-2-클로로벤조산 (5 g, 21.37 mmol)의 교반 용액에 디-tert-부틸 디카르보네이트 (25.5 g, 25.58 mmol), TEA (3.2 g, 31.98 mmol) 및 DMAP (0.78 g, 6.398 mmol)을 첨가하고, 반응 혼합물을 18시간 동안 25°C에서 교반하였다. 반응 혼합물을 EtOAc로 희석하고 물로 세척하였다. 합한 유기 층을 염수로 세척하고, Na_2SO_4 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하였다. 잔류물을 플래쉬 크로마토그래피 (SiO_2 , 100-200 메쉬; n-헥산 중 2-3% EtOAc로 용리)에 의해 정제하여 표제 화합물을 액체 (3.2 g, 51%)로서 수득하였다.

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.62 (m, 2H), 7.44 (d, $J=8.4$ Hz, 1H), 1.59 (s, 9H); ESIMS m/z 290.10 ([M+H] $^+$); IR (박막) 1728 cm^{-1} .

하기 화합물을 실시예 4의 단계 1에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

tert-부틸 2-브로모-4-아이오도벤조에이트 (AI19)



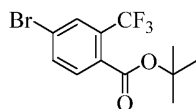
[0541] 생성물을 무색 오일 (1.2 g, 50%)로서 분리하였다.

$^1\text{H NMR}$ (400 MHz, CDCl_3)

δ 8.01 (s, 1H), 7.68 (d, $J = 8.4$ Hz, 1H), 7.41 (d, $J = 8.0$ Hz, 1H), 1.59 (s, 9H); ESIMS m/z

[0542] 382.10 ($[\text{M}+\text{H}]^+$); IR (박막) 1727 cm^{-1} .

[0543] **tert-부틸 4-브로모-2-(트리플루오로메틸)벤조에이트 (AI20)**



[0544]

[0545] 생성물을 무색 오일 (1 g, 52%)로서 분리하였다.

$^1\text{H NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) δ

7.85 (s, 1H), 7.73 (d, $J = 8.4$ Hz, 1H), 7.62 (d, $J = 8.4$ Hz, 1H), 1.57 (s, 9H); ESIMS m/z

[0546] 324.10 ($[\text{M}+\text{H}]^+$); IR (박막) 1725 cm^{-1} .

[0547] **단계 2. tert-부틸 2-클로로-4-비닐벤조에이트 (AI17).** 톨루엔 (20 mL) 중 tert-부틸 4-브로모-2-클로로벤조에이트 (1.6 g, 5.50 mmol)의 교반 용액에 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (0.31 mg, 0.27 mmol), K_2CO_3 (2.27 g, 16.5 mmol) 및 비닐보론산 무수물 피리딘 착물 (2.0 g, 8.3 mmol)을 첨가하고, 반응 혼합물을 16시간 동안 환류 하에 가열하였다. 반응 혼합물을 여과하고, 여과물을 물 및 염수로 세척하고, Na_2SO_4 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하였다. 플래쉬 칼럼 크로마토그래피 (SiO_2 , 100-200 메쉬; n-헥산 중 5-6% EtOAc로 용리)에 의해 정제하여 표제 화합물을 액체 (0.6 g, 46%)로서 수득하였다.

$^1\text{H NMR}$ (400

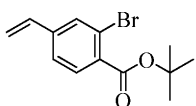
MHz, CDCl_3) δ 7.72 (d, $J = 8.1$ Hz, 1H), 7.44 (m, 1H), 7.31 (d, $J = 8.0$ Hz, 1H), 6.69 (dd, J

=17.6, 10.8 Hz, 1H), 5.85 (d, $J = 17.6$ Hz, 1H), 5.40 (d, $J = 10.8$ Hz, 1H), 1.60 (s, 9H);

[0548] ESIMS m/z 238.95 ($[\text{M}+\text{H}]^+$); IR (박막) 2931, 1725, 1134 cm^{-1} .

[0549] 하기 화합물을 실시예 4의 단계 2에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

[0550] **tert-부틸 2-브로모-4-비닐벤조에이트 (AI21)**



[0551]

[0552] 생성물을 무색 오일 (1 g, 52%)로서 분리하였다.

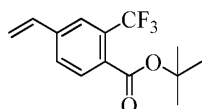
$^1\text{H NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) δ

7.68 (m, 2H), 7.36 (d, $J = 8.0$ Hz, 1H), 6.68 (dd, $J = 17.6, 10.8$ Hz, 1H), 5.84 (d, $J = 17.6$ Hz,

1H), 5.39 (d, $J = 10.8$ Hz, 1H), 1.60 (s, 9H); ESIMS m/z 282.10 ($[\text{M}+\text{H}]^+$); IR (박막)

[0553] 2978, 1724, 1130 cm^{-1} .

[0554] **tert-부틸 2-(트리플루오로메틸)-4-비닐벤조에이트 (AI22)**



[0555]

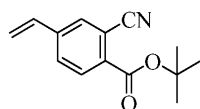
[0556] 생성물을 무색 오일 (1.2 g, 50%)로서 분리하였다.

$^1\text{H NMR}$ (400 MHz, CDCl_3)

δ 7.71 (d, $J = 6.4$ Hz, 2H), 7.59 (d, $J = 7.6$ Hz, 1H), 6.77 (dd, $J = 17.6, 10.8$ Hz, 1H), 5.89 (d, $J = 17.6$ Hz, 1H), 5.44 (d, $J = 10.8$ Hz, 1H), 1.58 (s, 9H); ESIMS m/z 272.20 ($[\text{M}+\text{H}]^+$); IR (박막) 2982, 1727, 1159 cm^{-1} .

[0557]

[0558] 실시예 5: tert-부틸 2-시아노-4-비닐벤조에이트 (AI23)의 제조



[0559]

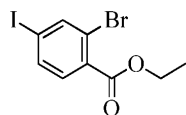
[0560] DMF (20 mL) 중 tert-부틸 2-브로모-4-비닐벤조에이트 (0.5 g, 1.77 mmol)의 교반 용액에 CuCN (0.23 g, 2.65 mmol)을 첨가하고, 반응 혼합물을 3시간 동안 140°C에서 가열하였다. 반응 혼합물을 25°C로 냉각하고, 물로 희석하고, EtOAc로 추출하였다. 합한 유기 층을 염수로 세척하고, Na_2SO_4 상에서 건조시키고, 감압 하에 농축하였다. 잔류물을 플래쉬 크로마토그래피 (SiO_2 , 100-200 메쉬; n-헥산 중 15% EtOAc로 용리)에 의해 정제하여 표제 화합물을 백색 고체 (0.3 g, 72%)로서 수득하였다.

mp 51–53 °C; $^1\text{H NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) δ

8.03 (s, 1H), 7.77 (s, 1H), 7.64 (d, $J = 8.4$ Hz, 1H), 6.75 (dd, $J = 17.6, 10.8$ Hz, 1H), 5.93 (d, $J = 17.6$ Hz, 1H), 5.51 (d, $J = 10.8$ Hz, 1H), 1.65 (s, 9H); ESIMS m/z 229.84 ($[\text{M}+\text{H}]^+$); IR (박막) 2370, 1709, 1142 cm^{-1} .

[0561]

[0562] 실시예 6: 에틸 2-브로모-4-아이오도벤조에이트 (AI46)의 제조



[0563]

[0564] EtOH (100 mL) 중 4-아이오도-2-브로모벤조산 (5 g, 15.29 mmol)의 교반 용액에 H_2SO_4 (5 mL)를 첨가하고, 반응 혼합물을 18시간 동안 80°C에서 가열하였다. 반응 혼합물을 25°C로 냉각하고 감압 하에 농축하였다. 잔류물을 EtOAc (2x100 mL)로 희석하고 물 (100 mL)로 세척하였다. 합한 EtOAc 추출물을 염수로 세척하고, Na_2SO_4 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 화합물을 연황색 고체 (5 g, 92%)로서 수득하였다.

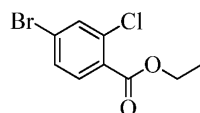
$^1\text{H NMR}$ (400 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ 8.04 (d, $J = 1.2$ Hz, 1H), 7.71 (d, $J = 7.6$ Hz, 1H),

7.51 (d, $J = 8.4$ Hz, 1H), 4.41 (q, $J = 7.2$ Hz, 2H), 1.41 (t, $J = 7.2$ Hz, 3H).

[0565]

[0566] 하기 화합물을 실시예 6에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

[0567] 에틸 4-브로모-2-클로로벤조에이트 (AI47)



[0568]

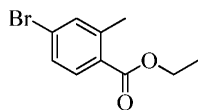
[0569] 표제 화합물을 회백색 고체 (2.0 g, 80%)로서 분리하였다.

$^1\text{H NMR}$ (400

MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ 8.25 (d, $J = 1.2$ Hz, 1H), 7.79 (d, $J = 7.6$ Hz, 1H), 7.65 (d, $J = 8.4$ Hz, 1H), 4.65 (q, $J = 7.2$ Hz, 2H), 1.56 (t, $J = 7.2$ Hz, 3H).

[0570]

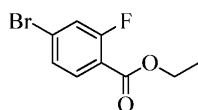
[0571] 에틸 4-브로모-2-메틸벤조에이트 (AI48)



[0572] 표제 화합물을 연황색 액체 (3.0 g, 83%)로서 분리하였다.

[0573] $^1\text{H NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) δ 7.79 (d, $J = 8.4$ Hz, 1H), 7.41 (s, 1H), 7.39 (d, $J = 8.4$ Hz, 1H), 4.42 (q, $J = 7.2$ Hz, 2H), 2.60 (s, 3H), 1.40 (t, $J = 7.2$ Hz, 3H); ESIMS m/z 229.11 ($[\text{M}+\text{H}]^+$); IR (박막) 1725 cm^{-1} .

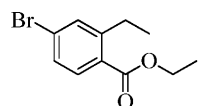
[0574] 에틸 4-브로모-2-플루오로벤조에이트 (AI49)



[0575] 표제 화합물을 무색 액체 (9.0 g, 79%)로서 분리하였다.

[0576] $^1\text{H NMR}$ (400 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ 7.84 (t, $J = 8.4$ Hz, 1H), 7.76 (d, $J = 2.0$ Hz, 1H), 7.58 (d, $J = 1.6$ Hz, 1H), 4.34 (q, $J = 7.2$ Hz, 2H), 1.32 (t, $J = 7.2$ Hz, 3H); ESIMS m/z 246.99 ($[\text{M}+\text{H}]^+$), IR (박막) 1734 cm^{-1} .

[0577] 실시예 7: 에틸 4-브로모-2-에틸벤조에이트 (AI50)의 제조



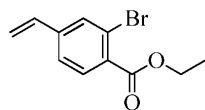
[0578] THF (16 mL) 중 4-브로모-2-플루오로벤조산 (2.0 g, 9.17 mmol)의 교반 용액에, 0°C 에서 THF 중 1.0 M 에틸 마그네슘 브로마이드 (32 mL, 32.0 mmol)를 적가하고 생성된 반응 혼합물을 18시간 동안 주위 온도에서 교반하였다. 반응 혼합물을 2 N HCl로 킨칭하고 EtOAc로 추출하였다. 합한 EtOAc 층을 무수 Na_2SO_4 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 조 4-브로모-2-에틸벤조산을 무색 액체로서 수득하고 이를 정제 없이 다음 단계에서 사용하였다 (0.4 g).

[0579] $^1\text{H NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) δ 7.64 (d, $J = 8.4$ Hz, 1H), 7.47 (m, 1H), 7.43 (m, 1H), 2.95 (q, $J = 4.0$ Hz, 2H), 1.32 (t, $J = 4.0$ Hz, 3H); ESIMS m/z 228.97 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

[0580] 표제 화합물을 실시예 6에서의 절차에 따라 4-브로모-2-에틸벤조산으로부터 합성하고, 무색 액체 (0.15 g, 68%)로서 분리하였다.

[0581] $^1\text{H NMR}$ (400 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ 7.90 (d, $J = 8.4$ Hz, 1H), 7.47 (m, 2H), 4.40 (q, $J = 7.2$ Hz, 2H), 3.06 (q, $J = 7.6$ Hz, 2H), 1.42 (t, $J = 7.2$ Hz, 3H), 1.26 (t, $J = 7.6$ Hz, 3H); ESIMS m/z 226.96 ($[\text{M}-\text{H}]^-$); IR (박막) $3443, 1686, 568\text{ cm}^{-1}$.

실시예 8: 에틸 2-브로모-4-비닐벤조에이트 (AI51)의 제조

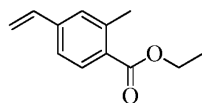


THF/물 (100 mL, 9:1) 중 에틸 2-브로모-4-아이오도벤조에이트 (5 g, 14.3 mmol)의 교반 용액에 포타슘 비닐트리플루오로보레이트 (1.89 g, 14.3 mmol), Cs₂CO₃ (18.27 g, 56.07 mmol) 및 트리페닐포스핀 (0.22 g, 0.85 mmol)을 첨가하고 반응 혼합물을 20분 동안 아르곤으로 탈기한 다음, PdCl₂ (0.05 g, 0.28 mmol)로 충전하였다. 반응 혼합물을 16시간 동안 환류 하에 가열하였다. 반응 혼합물을 주위 온도로 냉각하고 셀라이트® 층을 통해 여과하고 EtOAc로 세척하였다. 여과물을 다시 EtOAc로 추출하고 합한 유기 층을 물 및 염수로 세척하고, Na₂SO₄ 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 조 화합물을 수득하였다. 조 화합물을 칼럼 크로마토그래피 (SiO₂, 100-200 메쉬; 2% EtOAc/ 석유 에테르로 용리)에 의해 정제하여 표제 화합물을 담갈색 점착성 물질 (2 g, 56%)로서 수득하였다.

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.78 (d, *J* = 8.4 Hz, 1H), 7.71 (d, *J* = 1.2 Hz, 1H), 7.51 (d, *J* = 8.4 Hz, 1H), 6.69 (dd, *J* = 17.6, 10.8 Hz, 1H), 5.86 (d, *J* = 17.6 Hz, 1H), 5.42 (d, *J* = 11.2 Hz, 1H), 4.42 (q, *J* = 7.2 Hz, 2H), 1.43 (t, *J* = 3.6 Hz, 3H); ESIMS *m/z* 255.18 ([M+H]⁺); IR (박막) 1729 cm⁻¹.

하기 화합물을 실시예 8에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

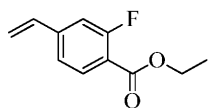
에틸 2-메틸-4-비닐벤조에이트 (AI52)



표제 화합물을 무색 액체 (0.8 g, 80%)로서 분리하였다.

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.89 (d, *J* = 8.4 Hz, 1H), 7.27 (m, 2H), 6.79 (dd, *J* = 17.6, 10.8 Hz, 1H), 5.86 (d, *J* = 17.6 Hz, 1H), 5.42 (d, *J* = 11.2 Hz, 1H), 4.42 (q, *J* = 7.2 Hz, 2H), 2.60 (s, 3H), 1.43 (t, *J* = 7.2 Hz, 3H); ESIMS *m/z* 191.10 ([M+H]⁺); IR (박막) 1717, 1257 cm⁻¹.

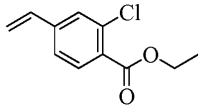
에틸 2-플루오로-4-비닐벤조에이트 (AI53)



표제 화합물을 연황색 액체 (2.0 g, 50%)로서 분리하였다.

¹H NMR (400 MHz, DMSO-d₆) δ 7.87 (t, *J* = 8.0 Hz, 1H), 7.51 (d, *J* = 16.0 Hz, 1H), 7.48 (d, *J* = 16.0 Hz, 1H), 6.82 (dd, *J* = 17.6, 10.8 Hz, 1H), 6.09 (d, *J* = 17.6 Hz, 1H), 5.50 (d, *J* = 10.8 Hz, 1H), 4.35 (q, *J* = 7.2 Hz, 2H), 1.35 (t, *J* = 7.2 Hz, 3H); ESIMS *m/z* 195.19 ([M+H]⁺); IR (박막) 1728 cm⁻¹.

[0598] 실시예 9: 에틸 2-클로로-4-비닐벤조에이트 (AI54)의 제조



[0599]

[0600]

DMSO (20 mL) 중 에틸 2-클로로-4-브로모벤조에이트 (2 g, 7.63 mmol)의 교반 용액에 포타슘 비닐트리플루오로보레이트 (3.06 g, 22.9 mmol) 및 K_2CO_3 (3.16 g, 22.9 mmol)를 첨가하였다. 반응 혼합물을 30분 동안 아르곤으로 탈기하였다. 비스트리페닐포스핀(디페닐포스피노페로센)팔라듐 디클로라이드 (0.27 g, 0.38 mmol)를 첨가하고 반응 혼합물을 1시간 동안 80°C로 가열하였다. 반응 혼합물을 물 (100 mL)로 희석하고, EtOAc (2 x 50 mL)로 추출하고, 염수로 세척하고, Na_2SO_4 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 화합물을 갈색 점착성 물질 (1.1 g, 69%)로서 수득하였다.

[0601]

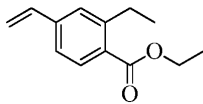
^1H NMR (400 MHz, $CDCl_3$) δ 7.81 (d, J = 8.4 Hz, 1H), 7.46 (s, 1H), 7.33 (d, J = 8.4 Hz, 1H), 6.70 (dd, J = 17.6, 11.2 Hz, 1H), 5.87 (d, J = 17.6 Hz, 1H), 5.42 (d, J = 10.8 Hz, 1H), 4.41 (q, J = 7.2 Hz, 2H), 1.43 (t, J = 7.2 Hz, 3H); ESIMS m/z 211.22 ($[M+H]^+$); IR (박막) 1729, 886 cm^{-1} .

[0602]

하기 화합물을 실시예 9에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

[0603]

에틸 2-에틸-4-비닐벤조에이트 (AI55)



[0604]

[0605]

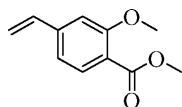
표제 화합물을 무색 액체 (1.0 g, 66%)로서 분리하였다.

[0606]

^1H NMR (300 MHz, $CDCl_3$) δ 7.85 (m, 1H), 7.29 (m, 2H), 6.76 (d, J = 10.8 Hz, 1H), 5.86 (d, J = 17.6 Hz, 1H), 5.36 (d, J = 10.5 Hz, 1H), 4.41 (q, J = 7.2 Hz, 2H), 3.10 (q, J = 7.2 Hz, 2H), 1.40 (t, J = 7.2 Hz, 3H), 1.30 (t, J = 7.2 Hz, 3H); ESIMS m/z 205.26 ($[M+H]^+$); IR (박막) 1720, 1607, 1263 cm^{-1} .

[0607]

메틸 2-메톡시-4-비닐벤조에이트 (AI56)



[0608]

[0609]

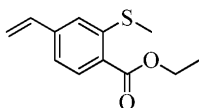
표제 화합물을 연황색 액체 (1.2 g, 75%)로서 분리하였다.

[0610]

^1H NMR (400 MHz, $CDCl_3$) δ 7.79 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 7.04 (d, J = 1.2 Hz, 1H), 6.97 (s, 1H), 6.74 (dd, J = 11.2, 11.2 Hz, 1H), 5.86 (d, J = 17.6 Hz, 1H), 5.39 (d, J = 17.6 Hz, 1H), 3.93 (s, 3H), 3.91 (s, 3H). ESIMS m/z 193.18 ($[M+H]^+$); IR (박막) 1732 cm^{-1} .

[0611]

에틸 2-(메틸티오)-4-비닐벤조에이트



[0612]

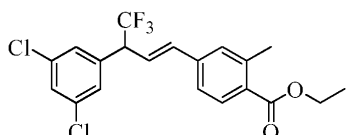
[0613] 표제 화합물을 갈색 액체로서 분리하였다.

$^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) δ

7.98 (d, $J = 8.4$ Hz, 1H), 7.23 - 7.18 (m, 2H), 6.78 (dd, $J = 17.7, 10.8$, Hz, 1H), 5.89 (d, $J = 17.4$ Hz, 1H), 5.42 (d, $J = 10.8$ Hz, 1H), 4.39 - 4.36 (m, 2H), 2.48 (s, 3H), 1.39 (t, $J = 6.9$ Hz, 3H); ESIMS m/z 221.9 ($[\text{M}+\text{H}]^+$); IR (박막) 1708 cm^{-1} .

[0614]

[0615] 실시예 10: (E)-에틸 4-(3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-에닐)-2-메틸벤조에이트 (AI24)의 제조



[0616]

[0617] 1,2-디클로로벤젠 (25 mL) 중 에틸 2-메틸-4-비닐벤조에이트 (2.0 g, 10.5 mmol)의 교반 용액에 1-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-3,5-디클로로벤젠 (6.44 g, 21.0 mmol), CuCl (208 mg, 21 mmol) 및 2,2-비피리딘 (0.65 g, 4.1 mmol)을 첨가하였다. 반응 혼합물을 30분 동안 아르곤으로 탈기한 다음 24시간 동안 180°C 에서 교반하였다. TLC에 의해 반응이 완료된 것으로 여겨진 후, 반응 혼합물을 25°C 로 냉각하고 여과하고, 여과물을 감압 하에 농축하였다. 플래쉬 크로마토그래피 (SiO_2 , 100-200 메쉬; 석유 에테르 중 25-30% EtOAc로 용리)에 의해 정제하여 표제 화합물을 고체 (1.7 g, 40%)로서 수득하였다.

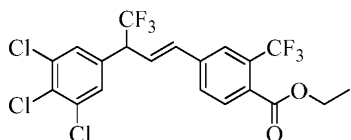
$^1\text{H NMR}$ (400 MHz,

CDCl_3) δ 7.91 (d, $J = 8.0$ Hz, 1H), 7.37 (m, 1H), 7.27-7.24 (m, 4H), 6.59 (d, $J = 16.0$ Hz, 1H), 6.59 (dd, $J = 16.0, 8.0$ Hz, 1H), 4.38 (q, $J = 7.2$ Hz, 2H), 4.08 (m, 1H), 2.62 (s, 3H), 1.42 (t, $J = 7.2$ Hz, 3H); ESIMS m/z 415.06 ($[\text{M}-\text{H}]^-$); IR (박막) $1717, 1255, 1114\text{ cm}^{-1}$.

[0618]

[0619] 화합물 AI25, AI57-AI68 및 AC1-AC5 (표 1)를 실시예 10에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

[0620] (E)-에틸 4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-에닐)-2-(트리플루오로메틸)-벤조산 (AI25)



[0621]

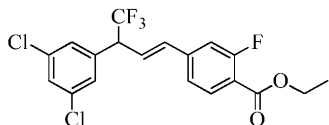
[0622] 생성물을 연갈색 점착성 액체 (500 mg, 40%)로서 분리하였다.

$^1\text{H NMR}$

(400 MHz, CDCl_3) δ 7.79 (d, $J = 8.0$ Hz, 1H), , 7.71 (m, 1H), 7.61 (d, $J = 7.6$ Hz, 1H), 7.42 (s, 2H), 6.70 (d, $J = 16.0$ Hz, 1H), 6.57 (dd, $J = 16.0, 8.0$ Hz, 1H), 4.42 (q, $J = 7.2$ Hz, 2H), 4.19 (m, 1H), 1.40 (t, $J = 7.6$ Hz, 3H),; ESIMS m/z 502.99 ($[\text{M}-\text{H}]^-$); IR (박막) $1730, 1201, 1120, 749\text{ cm}^{-1}$.

[0623]

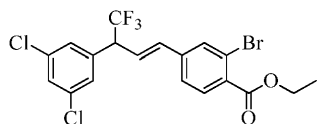
[0624] (E)-에틸 4-(3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-에닐)-2-플루오로벤조에이트 (AI57)



[0625]

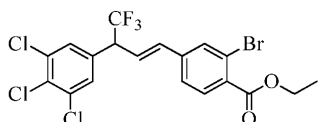
^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.38 (s, 1H), 7.26 (s, 3H), 7.21 (d, $J = 8.4$ Hz, 1H), 7.16 (d, $J = 11.6$ Hz, 1H), 6.59 (d, $J = 16.0$ Hz, 1H), 6.47 (dd, $J = 16.0, 8.0$ Hz, 1H), 4.41 (q, $J = 6.8$ Hz, 2H), 4.18 (m, 1H), 1.41 (t, $J = 6.8$ Hz, 3H); ESIMS m/z 419.33 ([M-H] $^-$); IR (박막) 1723, 1115, 802 cm^{-1} .

(E)-에틸 4-(3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-에닐)-2-브로모벤조에이트 (AI58)



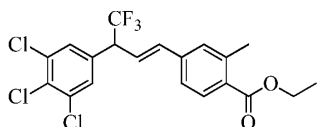
^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.79 (d, $J = 8.0$ Hz, 1H), 7.67 (s, 1H), 7.38 (m, 2H), 7.26 (m, 2H), 6.56 (d, $J = 16.0$ Hz, 1H), 6.45 (dd, $J = 16.0, 7.6$ Hz, 1H), 4.42 (q, $J = 7.2$ Hz, 2H), 4.39 (m, 1H), 1.42 (t, $J = 7.2$ Hz, 3H); ESIMS m/z 481.22 ([M-H] $^-$); IR (박막) 1727, 1114, 801, 685 cm^{-1} .

(E)-에틸 2-브로모-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-에닐)벤조에이트 (AI59)



^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.79 (d, $J = 8.0$ Hz, 1H), 7.67 (d, $J = 1.6$ Hz, 1H), 7.40 (s, 2H), 7.36 (d, $J = 1.6$ Hz, 1H), 6.56 (d, $J = 16.0$ Hz, 1H), 6.44 (dd, $J = 16.0, 7.6$ Hz, 1H), 4.42 (q, $J = 6.8$ Hz, 2H), 4.15 (m, 1H), 1.42 (t, $J = 6.8$ Hz, 3H); ESIMS m/z 514.74 ([M-H] $^-$); IR (박막) 1726, 1115, 808, 620 cm^{-1} .

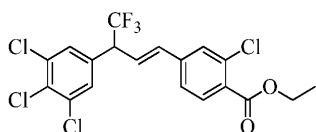
(E)-에틸 2-메틸-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-에닐)벤조에이트 (AI60)



표제 화합물을 담갈색 점착성 물질로서 단리하였다.

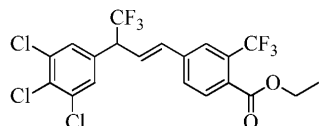
^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.90 (d, $J = 8.8$ Hz, 1H), 7.34 (d, $J = 6.0$ Hz, 2H), 7.25 (d, $J = 7.2$ Hz, 2H), 6.59 (d, $J = 16.0$ Hz, 1H), 6.42 (dd, $J = 16.0, 8.0$ Hz, 1H), 4.38 (q, $J = 7.2$ Hz, 2H), 4.19 (m, 1H), 2.63 (s, 3H), 1.41 (t, $J = 7.2$ Hz, 3H).

(E)-에틸 2-클로로-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-에닐)벤조에이트 (AI61)



^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.87 (d, $J = 8.0$ Hz, 1H), 7.46 (d, $J = 1.6$ Hz, 1H), 7.40 (s, 2H), 7.31 (d, $J = 1.6$ Hz, 1H), 6.57 (d, $J = 16.0$ Hz, 1H), 6.44 (dd, $J = 16.0$ Hz, 8.0 Hz, 1H), 4.42 (q, $J = 6.8$ Hz, 2H), 4.15 (m, 1H), 1.42 (t, $J = 6.8$ Hz, 3H); ESIMS m/z 470.73 ($[\text{M}-\text{H}]^-$); IR (박막) 1726, 1115, 809, 3072 cm^{-1} .

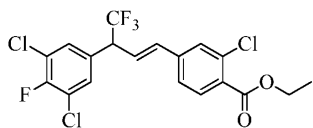
(E)-에틸 4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-에닐)-2-(트리플루오로메틸)벤조에이트 (AI62)



표제 화합물을 연갈색 액체 (1.0 g, 46.3%)로서 분리하였다.

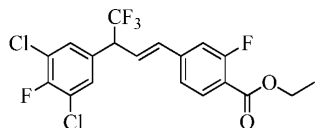
^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.79 (d, $J = 8.0$ Hz, 1H), 7.71 (s, 1H), 7.61 (d, $J = 7.6$ Hz, 1H), 7.41 (s, 2H), 6.65 (d, $J = 16.0$ Hz, 1H), 6.49 (dd, $J = 16.0, 8.0$ Hz, 1H), 4.42 (q, $J = 7.6$ Hz, 2H), 4.15 (m, 1H), 1.42 (t, $J = 7.6$ Hz, 3H); ESIMS m/z 502.99 ($[\text{M}-\text{H}]^-$); IR (박막) 1730, 1202, 1120, 750 cm^{-1} .

(E)-에틸 2-클로로-4-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-에닐)벤조에이트 (AI63)



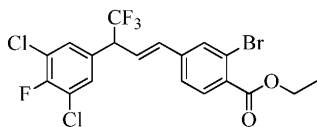
^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.85 (d, $J = 6.0$ Hz, 1H), 7.46 (d, $J = 1.8$ Hz, 2H), 7.34 (m, 1H), 7.24 (m, 1H), 6.57 (d, $J = 16.2$ Hz, 1H), 6.45 (dd, $J = 16.2, 7.2$ Hz, 1H), 4.43 (q, $J = 7.2$ Hz, 2H), 4.13 (m, 1H), 1.41 (t, $J = 7.2$ Hz, 3H); ESIMS m/z 455.0 ($[\text{M}+\text{H}]^+$); IR (박막) 1728, 1115, 817 cm^{-1} .

(E)-에틸 2-플루오로-4-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-에닐)벤조에이트 (AI64)



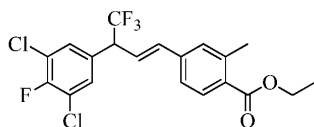
^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.93 (t, $J = 7.6$ Hz, 1H), 7.34 (d, $J = 5.6$ Hz, 2H), 7.21 (d, $J = 8.0$ Hz, 1H), 7.16 (d, $J = 11.6$ Hz, 1H), 6.59 (d, $J = 16.0$ Hz, 1H), 6.49 (dd, $J = 16.0, 7.6$ Hz, 1H), 4.42 (q, $J = 7.6$ Hz, 2H), 4.13 (m, 1H), 1.41 (t, $J = 7.6$ Hz, 3H); ESIMS m/z 436.81 ($[\text{M}-\text{H}]^-$); IR (박막) 1725 cm^{-1} .

(E)-에틸 2-브로모-4-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-에닐)벤조에이트 (AI65)



^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.94 (d, $J = 8.0$ Hz, 1H), 7.67 (s, 1H), 7.36 (m, 3H), 6.56 (d, $J = 15.6$ Hz, 1H), 6.44 (dd, $J = 15.6, 8.0$ Hz, 1H), 4.42 (q, $J = 6.8$ Hz, 2H), 4.10 (m, 1H), 1.42 (t, $J = 6.8$ Hz, 3H); ESIMS m/z 498.74 ($[\text{M}-\text{H}]^-$); IR (박막) 1726, 1114, 820, 623 cm^{-1} .

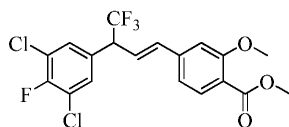
(E)-에틸 2-메틸-4-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-에닐)벤조에이트 (AI66)



표제 화합물을 갈색 반고체로서 분리하였다.

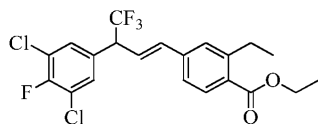
^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.90 (d, $J = 8.8$ Hz, 1H), 7.34 (d, $J = 6.0$ Hz, 2H), 7.25 (d, $J = 7.2$ Hz, 2H), 6.59 (d, $J = 16.0$ Hz, 1H), 6.42 (dd, $J = 16.0$ Hz, 8.0 Hz, 1H), 4.38 (q, $J = 7.2$ Hz, 2H), 4.19 (m, 1H), 2.63 (s, 3H), 1.41 (t, $J = 7.2$ Hz, 3H); ESIMS m/z 432.90 ($[\text{M}-\text{H}]^-$); IR (박막) 1715 cm^{-1} .

(E)-메틸 2-메톡시-4-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-에닐)벤조에이트 (AI67)



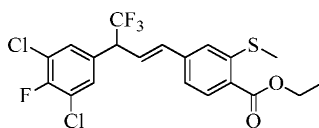
^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.80 (d, $J = 8.4$ Hz, 1H), 7.35 (d, $J = 6.0$ Hz, 2H), 7.03 (d, $J = 1.2$ Hz, 1H), 6.92 (s, 1H), 6.59 (d, $J = 15.6$ Hz, 1H), 6.42 (dd, $J = 15.6, 8.0$ Hz, 1H), 4.13 (m, 1H), 3.93 (s, 3H), 3.88 (s, 3H); ESIMS m/z 437.29 ($[\text{M}+\text{H}]^+$); IR (박막) 1724 cm^{-1} .

(E)-에틸 2-에틸-4-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-에닐)벤조에이트 (AI68)



^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.85 (d, $J = 8.0$ Hz, 1H), 7.35 (d, $J = 9.6$ Hz, 2H), 7.26 (m, 1H), 7.24 (m, 1H), 6.60 (d, $J = 15.6$ Hz, 1H), 6.42 (dd, $J = 15.6, 8.0$ Hz, 1H), 4.38 (q, $J = 7.2$ Hz, 2H), 4.14 (m, 1H), 3.01 (q, $J = 7.6$ Hz, 2H), 1.41 (t, $J = 7.2$ Hz, 3H), 1.26 (t, $J = 7.6$ Hz, 3H); ESIMS m/z 447.05 ($[\text{M}-\text{H}]^-$); IR (박막) 1715, 1115, 817 cm^{-1} .

(E)-에틸 4-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-2-(메틸티오)벤조에이트

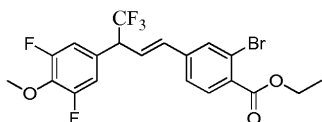


[0665] 갈색 액체로서 분리하였다.

$^1\text{H NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) δ 7.99 (d, $J = 8.1$ Hz, 2H), 7.35 - 7.32 (m, 2H), 7.21 - 7.16 (m, 2H), 6.63 (d, $J = 15.8$ Hz, 1H), 6.45 (dd, $J = 15.9, 7.8$ Hz, 1H), 4.41 - 4.31 (m, 2H), 4.30 - 4.10 (m, 1H), 2.47 (s, 3H), 1.40 (t, $J = 7.5$ Hz, 3H); ESIMS m/z 466.88 ($[\text{M}+\text{H}]^+$); IR (박막) 1705, 1114 cm^{-1} .

[0666]

[0667] (E)-에틸 2-브로모-4-(3-(3,5-디플루오로-4-메톡시페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)벤조에이트



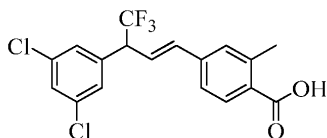
[0668]

[0669] 생성물을 연황색 액체로서 분리하였다.

$^1\text{H NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) δ 7.78 (d, $J = 8.0$ Hz, 1H), 7.66 (d, $J = 1.6$ Hz, 1H), 7.35 - 7.33 (m, 1H), 6.96 - 6.90 (m, 2H), 6.54 (d, $J = 15.6$ Hz, 1H), 6.43 (dd, $J = 15.6, 8.0$ Hz, 1H), 4.39 (q, $J = 6.8$ Hz, 2H), 4.09 - 4.05 (m, 1H), 4.02 (s, 3H), 1.40 (t, $J = 7.2$ Hz, 3H); EIMS m/z 478.2 ($[\text{M}]^+$); IR (박막) 1727, 1113 cm^{-1} .

[0670]

[0671] 실시예 11: (E)-4-(3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-2-메틸벤조산 (AI32)의 제조



[0672]

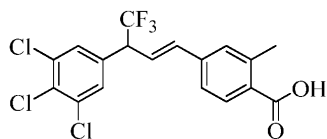
[0673] 1,4-디옥산 (10 mL) 중 (E)-에틸 4-(3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-2-메틸벤조에이트 (1.7 g, 4.0 mmol)의 교반 용액에 11 N HCl (30 mL)을 첨가하고, 반응 혼합물을 48시간 동안 100°C에서 가열하였다. 반응 혼합물을 25°C로 냉각하고 감압 하에 농축하였다. 잔류물을 물로 희석하고 클로로포름 (CHCl_3)으로 추출하였다. 합한 유기 층을 Na_2SO_4 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하고, 조 화합물을 n-헥산으로 세척하여 표제 화합물을 백색 고체 (0.7 g, 50%)로서 수득하였다.

mp 142-143 °C; $^1\text{H NMR}$ (400 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ 12.62 (br s, 1H), 7.81 (d, $J = 8.0$ Hz, 1H), 7.66 (s, 3H), 7.52-7.44 (m, 2H), 6.89 (dd, $J = 16.0, 8.0$ Hz, 1H), 6.78-6.74 (d, $J = 16.0$ Hz, 1H), 4.84 (m, 1H), 2.50 (s, 3H); ESIMS m/z 387.05 ($[\text{M}-\text{H}]^-$); IR (박막) 3448, 1701, 1109, 777 cm^{-1} .

[0674]

[0675] 하기 화합물을 실시예 11에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

[0676] (E)-2-메틸-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤조산 (AI26)



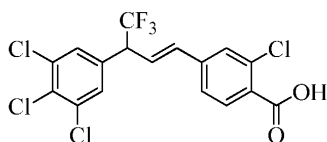
[0677]

[0678] 생성물을 연갈색 점착성 액체 (1 g, 46%)로서 분리하였다.

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.97 (d, *J* = 8.0 Hz, 1H), 7.77 (s, 1H), 7.65 (m, 1H), 7.41 (s, 2H), 6.68 (d, *J* = 16.0 Hz, 1H), 6.53 (dd, *J* = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.16 (m, 1H), 2.50 (s, 3H); ESIMS *m/z* 422.67 ([M-H]).

[0679]

[0680] (E)-2-클로로-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-에닐)벤조산 (AI27)



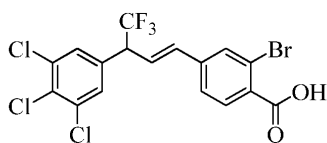
[0681]

[0682] 생성물을 회백색 반고체 (1 g, 45%)로서 분리하였다.

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.99 (d, *J* = 8.4 Hz, 1H), 7.50 (m, 1H), 7.40 (s, 1H), 7.36 (m, 2H), 6.59 (d, *J* = 15.6 Hz, 1H), 6.48 (dd, *J* = 15.6, 7.6 Hz, 1H), 4.14 (m, 1H); ESIMS *m/z* 442.72 ([M-H]); IR (박막) 3472, 1704, 1113, 808 cm⁻¹.

[0683]

[0684] (E)-2-브로모-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-에닐)벤조산 (AI28)



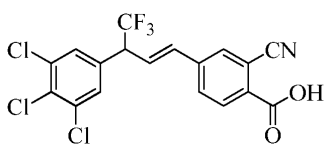
[0685]

[0686] 생성물을 갈색 고체 (1 g, 45%)로서 분리하였다.

mp 70–71 °C; ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.99 (d, *J* = 8.0 Hz, 1H), 7.72 (s, 1H), 7.40 (m, 3H), 6.58 (d, *J* = 16.0 Hz, 1H), 6.48 (dd, *J* = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.14 (m, 1H); ESIMS *m/z* 484.75 ([M-H]); IR (박막) 3468, 1700 cm⁻¹.

[0687]

[0688] (E)-2-시아노-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-에닐)벤조산 (AI29)



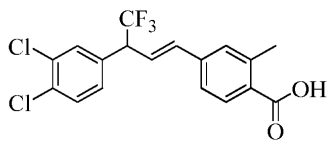
[0689]

[0690] 생성물을 회백색 고체 (500 mg, 45%)로서 분리하였다.

mp 100–101 °C; ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.90 (s, 1H), 7.85 (d, *J* = 7.6 Hz, 1H), 7.72 (d, *J* = 8.0 Hz, 1H), 7.65 (br s, 1H), 7.42 (s, 2H), 6.73 (d, *J* = 16.0 Hz, 1H), 6.58 (dd, *J* = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.19 (m, 1H); ESIMS *m/z* 431.93 ([M-H]).

[0691]

[0692] (E)-4-(3-(3,4-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-에닐)-2-메틸벤조산 (AI30)



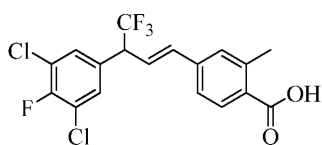
[0693]

[0694] 생성물을 연갈색 액체 (500 mg, 46%)로서 분리하였다.

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 8.03 (m, 1H), 7.49 (m, 2H), 7.29 (m, 1H), 7.22 (m, 2H), 6.73 (d, $J = 16.0$ Hz, 1H), 6.58 (dd, $J = 16.0, 7.8$ Hz, 1H), 4.16 (m, 1H), 2.64 (s, 3H); ESIMS m/z 386.84 ($[\text{M}-\text{H}]^-$); IR (박막) 3428, 1690, 1113, 780 cm^{-1} .

[0695]

[0696] (E)-4-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-에닐)-2-메틸벤조산 (AI31)



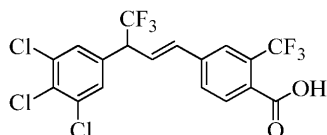
[0697]

[0698] 생성물을 백색 고체 (500 mg, 50%)로서 분리하였다.

mp 91–93°C; ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 8.02 (d, $J = 8.0$ Hz, 1H), 7.35 (d, $J = 5.6$ Hz, 1H), 7.30 (m, 3H), 6.61 (d, $J = 16.0$ Hz, 1H), 6.48 (dd, $J = 16.0, 8.0$ Hz, 1H), 4.13 (m, 1H), 2.65 (s, 3H); ESIMS m/z 406.87 ($[\text{M}-\text{H}]^-$).

[0699]

[0700] (E)-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-에닐)-2-(트리플루오로메틸)벤조산 (AI33)



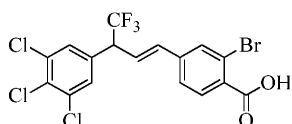
[0701]

[0702] 생성물을 백색 고체 (500 mg, 45%)로서 분리하였다.

mp 142–143 °C; ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.97 (d, $J = 8.0$ Hz, 1H), 7.77 (s, 1H), 7.65 (m, 1H), 7.41 (s, 2H), 6.68 (d, $J = 16.0$ Hz, 1H), 6.53 (dd, $J = 16.0, 8.0$ Hz, 1H), 4.16 (m, 1H); ESIMS m/z 474.87 ($[\text{M}-\text{H}]^-$).

[0703]

[0704] (E)-2-브로모-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-에닐)벤조산 (AI69)



[0705]

표제 화합물을 갈색 고체 (0.8 g, 28%)로서 분리하였다.

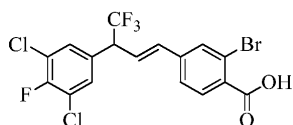
^1H NMR (400 MHz,

CDCl_3) δ 13.42 (br, 1H), 7.98 (d, $J = 1.5$ Hz, 1H), 7.94 (m, 2H), 7.75 (d, $J = 8.1$ Hz, 1H),

7.65 (m, 1H), 7.06 (dd, $J = 15.9, 9.0$ Hz, 1H), 6.80 (d, $J = 15.9$ Hz, 1H), 4.91 (m, 1H);

ESIMS m/z 484.75 ($[\text{M}-\text{H}]^-$); IR (박막) 3469, 1700 cm^{-1} .

(E)-2-브로모-4-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-에닐)벤조산 (AI70)



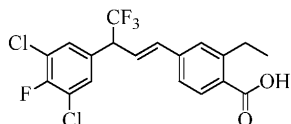
표제 화합물을 황색 액체 (0.3 g, 조 물질)로서 분리하였다.

^1H NMR (300

MHz, CDCl_3) δ 7.79 (d, $J = 8.1$ Hz, 1H), 7.67 (s, 1H), 7.34 (m, 3H), 6.56 (d, $J = 15.9$ Hz,

1H), 6.45 (dd, $J = 15.9, 7.6$ Hz, 1H), 4.43 (m, 1H); ESIMS m/z 471.0 ($[\text{M}-\text{H}]^-$).

(E)-4-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-에닐)-2-에틸벤조산 (AI71)



표제 화합물을 갈색 점착성 물질 (0.2 g, 조 물질)로서 분리하였다.

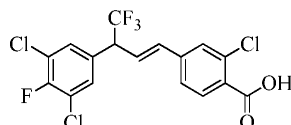
^1H NMR

(300 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ 12.5 (br, 1H), 7.85 (d, $J = 6.3$ Hz, 2H), 7.75 (d, $J = 8.1$ Hz, 1H), 7.52

(m, 2H), 6.96 (dd, $J = 8.7, 8.7$ Hz, 1H), 6.78 (d, $J = 15.6$ Hz, 1H), 4.80 (m, 1H), 4.06 (q, $J =$

7.2 Hz, 2H), 1.33 (t, $J = 7.2$ Hz, 3H); ESIMS m/z 419.06 ($[\text{M}-\text{H}]^-$).

(E)-2-클로로-4-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-에닐)벤조산 (AI72)



표제 화합물을 황색 액체 (0.7 g, 95%)로서 분리하였다.

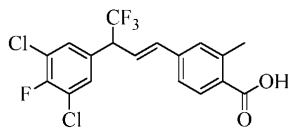
^1H NMR (300 MHz,

CDCl_3) δ 7.85 (d, $J = 6.0$ Hz, 1H), 7.46 (d, $J = 1.8$ Hz, 1H), 7.41 (s, 3H), 6.57 (d, $J = 16.0$

Hz, 1H), 6.45 (dd, $J = 16.0, 8.0$ Hz, 1H), 4.16 (m, 1H); ESIMS m/z 455.0 ($[\text{M}+\text{H}]^+$); IR

(박막) 1728, 1115, 817 cm^{-1} .

[0720] (E)-4-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-에닐)-2-메틸벤조산 (AI73)



[0721]

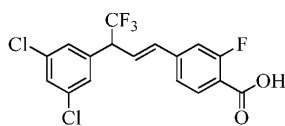
[0722] 표제 화합물을 담갈색 점착성 물질 (0.7 g, 38%)로서 분리하였다.

mp

91-93 °C; ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 8.02 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 7.35 (d, J = 5.6 Hz, 1H), 7.30 (m, 3H), 6.10 (d, J = 16.0 Hz, 1H), 6.46 (dd, J = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.03 (m, 1H), 2.65 (s, 3H); ESIMS m/z 406.87 ($[\text{M}-\text{H}]^-$).

[0723]

[0724] (E)-4-(3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-에닐)-2-플루오로벤조산 (AI74)



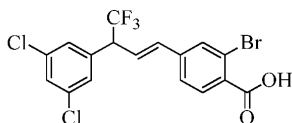
[0725]

[0726] 표제 화합물을 담갈색 액체 (0.3 g, 조 물질)로서 분리하였다.

[0727] ESIMS m/z 393.15 ($[\text{M}-\text{H}]^-$).

[0728]

(E)-2-브로모-4-(3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-에닐)벤조산 (AI75)



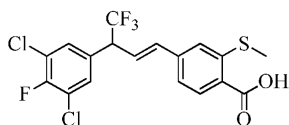
[0729]

[0730] 표제 화합물을 담갈색 액체 (0.35 g, 조 물질)로서 분리하였다.

[0731] ESIMS m/z 451.91 ($[\text{M}-\text{H}]^-$).

[0732]

(E)-4-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-2-(메틸티오)벤조산

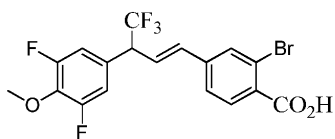


[0733]

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.88 - 7.85 (m, 3H), 7.46 (d, J = 6.8 Hz, 1H), 7.37 (s, 1H), 6.99 (dd, J = 15.6, 8.8 Hz, 1H), 6.85 (d, J = 16.0 Hz, 1H), 4.85 - 4.81 (m, 2H), 2.45 (s, 3H); ESIMS m/z 436.89 ($[\text{M}-\text{H}]^-$); IR (박막) 3469, 1686, 1259, 714 cm^{-1} .

[0734]

[0735] (E)-2-브로모-4-(3-(3,5-디플루오로-4-메톡시페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)벤조산



[0736]

[0737] 표제 분자를 갈색 액체로서 단리하였다.

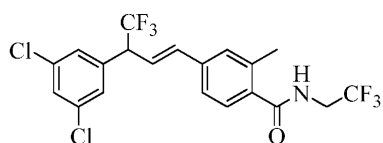
^1H NMR (300 MHz, DMSO- d_6) δ

13.48 (bs, 1H), 8.03 (s, 1H), 7.81 (d, $J = 7.8$ Hz, 1H), 7.69 (d, $J = 8.1$ Hz, 1H), 7.48 (d, $J = 9.3$ Hz, 2H), 7.05 (dd, $J = 15.6, 9.0$ Hz, 1H), 6.83 (d, $J = 15.9$ Hz, 1H), 4.86 - 4.74 (m, 1H), 4.00 (s, 3H); EIMS m/z 451.18 ($[\text{M}]^+$); IR (박막) 3431, 1132 cm^{-1} .

[0738]

[0739] 마찬가지로, 화합물 AI34, AI36-AI41, AI44-AI45 (표 1)를 실시예 10, 또는 실시예 10 및 11에 개시된 절차에 따라 제조할 수 있었다.

[0740] 실시예 12: (E)-4-(3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-에닐)-2-메틸-N-(2,2,2-트리플루오로에틸)벤즈아미드 (AC6)의 제조



[0741]

[0742] DMF 중 (E)-4-(3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-에닐)-2-메틸벤조산의 교반 용액에 2,2,2-트리플루오로에틸아민, HOBT · H₂O, EDC · HCl 및 DIPEA를 첨가하고, 반응 혼합물을 18시간 동안 25℃에서 교반하였다. 반응 혼합물을 물로 희석하고 EtOAc로 추출하였다. 합한 유기 층을 염수로 세척하고, Na₂SO₄ 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하였다. 플래쉬 칼럼 크로마토그래피 (SiO₂, 100-200 메쉬; 헥산: EtOAc로 용리)에 의해 정제하여 백색 반고체 (110 mg, 50%)를 수득하였다.

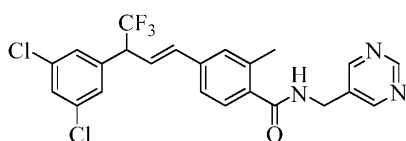
^1H NMR (400 MHz, CDCl₃) 7.40 (m, 2H), 7.26 (m, 3H),

6.56 (d, $J = 16.0$ Hz, 1H), 6.48 (dd, $J = 16.0, 8.0$ Hz, 1H), 5.82 (br s, 1H), 4.08 (m, 3H), 2.52 (s, 3H); ESIMS m/z 468.40 ($[\text{M}-\text{H}]^-$); IR (박막) 1657, 1113, 804 cm^{-1} .

[0743]

[0744] 화합물 AC7-AC38, AC40-AC58, AC110-AC112, AC117, 및 AC118 (표 1)을 실시예 12에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

[0745] 실시예 13: 4-((E)-3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-에닐)-2-메틸-N-((피리미딘-5-일)메틸)벤즈아미드 (AC39)의 제조



[0746]

[0747] CH₂Cl₂ (10 mL) 중 (피리미딘-5-일)메탄아민 (0.15 g, 1.43 mmol)의 교반 용액에 트리메틸알루미늄 (톨루엔 중 2 M 용액; 0.71 mL, 1.43 mmol)을 적가하고, 반응 혼합물을 30분 동안 25℃에서 교반하였다. CH₂Cl₂ 중 에틸 4-((E)-3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-에닐)-2-메틸벤조에이트 (0.3 g, 0.71 mmol)의 용액을 25℃에서 반응 혼합물에 적가하였다. 반응 혼합물을 18시간 동안 환류 하에 교반하고, 25℃로 냉각하고, 0.5 N HCl 용액 (50 mL)으로 켄칭하고 EtOAc (2 x 50 mL)로 추출하였다. 합한 유기 추출물을 염수로 세척하고, Na₂SO₄ 상에서 건조시키고, 감압 하에 농축하였다. 조 화합물을 플래쉬 크로마토그래피 (SiO₂, 100-200 메쉬; n-헥산 중 40% EtOAc로 용리)에 의해 정제하여 표제 화합물 (0.18 g, 55%)을 수득하였다.

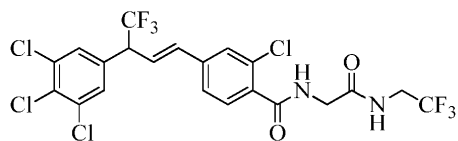
mp 141-144 °C;

^1H (400 MHz, CDCl₃) δ 9.19 (s, 1H), 8.79 (s, 2H), 7.37 (m, 2H), 7.23 (m, 2H), 7.21 (m, 1H), 6.57 (d, $J = 16.0$ Hz, 1H), 6.40 (dd, $J = 16.0, 7.6$ Hz 1H), 6.21 (m, 1H), 4.65 (s, 2H), 4.11 (m, 1H), 2.46 (s, 3H); ESIMS m/z 477.83 ($[\text{M}-\text{H}]^-$).

[0748]

[0749]

실시예 14: (E)-2-클로로-N-(2-옥소-2-((2,2,2-트리플루오로에틸)아미노)에틸)-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤즈아미드 (AC64)의 제조



[0750]

[0751]

CH₂Cl₂ (5 mL) 중 글리신 아마이드 (0.15 g, 0.58 mmol)의 교반 용액에 트리메틸알루미늄 (톨루엔 중 2 M 용액; 1.45 mL, 2.91 mmol)을 적가하고, 반응 혼합물을 30분 동안 28℃에서 교반하였다. CH₂Cl₂ (5 mL) 중 (E)-에틸 2-클로로-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤조에이트 (0.3 g, 0.58 mmol)의 용액을 28℃에서 반응 혼합물에 적가하였다. 반응 혼합물을 18시간 동안 환류 하에 교반하고, 25℃로 냉각하고, 1N HCl 용액 (50 mL)으로 켄칭하고 CH₂Cl₂ (2 x 50 mL)로 추출하였다. 합한 유기 추출물을 염수로 세척하고, Na₂SO₄ 상에서 건조시키고, 감압 하에 농축하였다. 조 화합물을 플래쉬 크로마토그래피 (SiO₂, 100-200 메쉬; n-헥산 중 40% EtOAc로 용리)에 의해 정제하여 표제 화합물을 황색 고체 (0.15 g, 50%)로서 수득하였다.

mp 83-85 °C; ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ

7.72 (d, *J* = 8.0 Hz, 1H), 7.44 (s, 1H), 7.40 (s, 2H), 7.36 (d, *J* = 6.8 Hz, 1H), 7.05 (t, *J* = 5.2 Hz, 1H), 6.70 (t, *J* = 5.2 Hz, 1H), 6.57 (d, *J* = 15.6 Hz, 1H), 6.44 (dd, *J* = 15.6, 8.0 Hz, 1H), 4.23 (d, *J* = 5.6 Hz, 2H), 4.15 (m, 1H), 4.01 (m, 2H); ESIMS *m/z* 580.72 ([M-H]).

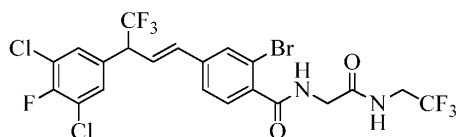
[0752]

[0753]

화합물 AC59-AC75 (표 1)를 실시예 14에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

[0754]

실시예 15: (E)-2-브로모-4-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-N-(2-옥소-2-((2,2,2-트리플루오로에틸)아미노)에틸)벤즈아미드 (AC79)의 제조



[0755]

[0756]

CH₂Cl₂ (5.0 mL) 중 (E)-2-브로모-4-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)벤조산 (300 mg, 0.638 mmol)의 교반 용액에 2-아미노-N-(2,2,2-트리플루오로에틸)아세트아미드 (172. mg, 0.638 mmol), 이어서 PyBOP (364.5 mg, 0.701 mmol) 및 DIPEA (0.32 mL, 1.914 mmol)를 첨가하고, 생성된 반응 혼합물을 18시간 동안 주위 온도에서 교반하였다. 반응 혼합물을 물로 희석하고, CH₂Cl₂로 추출하였다. 합한 CH₂Cl₂ 층을 염수로 세척하고, Na₂SO₄ 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하였다. 플래쉬 칼럼 크로마토그래피 (SiO₂, 100-200 메쉬; 40% EtOAc/ 석유 에테르로 용리)에 의해 정제하여 표제 화합물을 회백색 고체 (121 mg, 31%)로서 수득하였다.

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 8.69 (t, *J* = 6.0 Hz, 1H), 8.58 (t, *J* = 6.0

Hz, 1H), 7.92 (s, 1H), 7.87 (d, *J* = 6.4 Hz, 2H), 7.62 (d, *J* = 8.4 Hz, 1H), 7.45 (d, *J* = 8.4 Hz, 1H), 7.0 (m, 1H), 6.76 (d, *J* = 15.6 Hz, 1H), 4.83 (t, *J* = 8.0 Hz, 1H), 3.98 (m, 4H); ESIMS

m/z 610.97 ([M+H]⁺); IR (박막) 3303, 1658, 1166, 817 cm⁻¹.

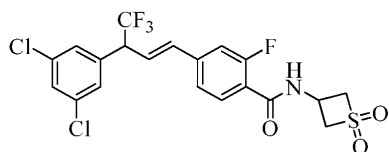
[0757]

[0758]

화합물 AC76-AC80, AC96-AC102, 및 AC113 (표 1)을 실시예 15에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

[0759]

실시예 16: (E)-4-(3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-N-(1,1-디옥시도티에탄-3-일)-2-플루오로벤즈아미드 (AC83)의 제조



[0760]

[0761]

아세트/ 물 (1:1, 5.0 mL) 중 (E)-4-(3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-2-플루오로-N-(티에탄-3-일)벤즈아미드 (100 mg, 0.2159 mmol)의 교반 용액에 옥손 (266 mg, 0.4319 mmol)을 첨가하고 생성된 반응 혼합물을 4시간 동안 주위 온도에서 교반하였다. 반응 혼합물을 물로 희석하고 EtOAc로 추출하였다. 합한 EtOAc 층을 무수 Na_2SO_4 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하였다. 플래쉬 칼럼 크로마토그래피 (SiO_2 , 100-200 메쉬; 30% EtOAc/ 석유 에테르로 용리)에 의해 정제하여 표제 화합물을 회백색 고체 (70.0 mg, 66%)로서 수득하였다.

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 8.07 (t, $J = 8.4$ Hz, 1H), 7.39 (t, $J = 1.6$ Hz, 1H), 7.31 (d, $J = 1.2$ Hz, 1H), 7.26 (m, 2H), 7.23 (m, 2H), 7.19 (d, $J = 1.6$ Hz, 1H), 6.60 (d, $J = 16.8$ Hz, 1H), 6.49 (dd, $J = 16.8, 7.6$ Hz, 1H), 4.90 (m, 1H), 4.64 (m, 2H), 4.14 (m, 2H); ESIMS m/z 493.83 ($[\text{M}-\text{H}]^-$); IR (박막) 1527, 1113, 801, 1167, 1321 cm^{-1} .

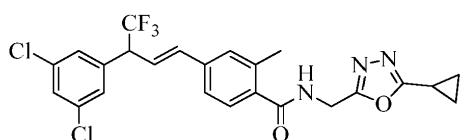
[0762]

[0763]

화합물 AC81-AC87 (표 1)을 실시예 16에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

[0764]

실시예 17: (E)-N-((5-시클로프로필-1,3,4-옥사디아졸-2-일)메틸)-4-(3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-2-메틸벤즈아미드 (AC89)의 제조



[0765]

[0766]

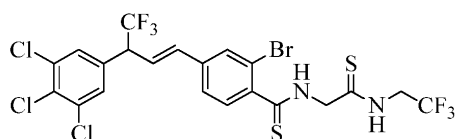
포스포릴 클로라이드 (POCl_3 , 2.0 mL) 중 (E)-N-(2-(2-(시클로프로판카르보닐)히드라지닐)-2-옥소에틸)-4-(3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-2-메틸벤즈아미드 (200 mg, 0.379 mmol)의 용액을 10분 동안 주위 온도에서 교반한 다음, 생성된 반응 혼합물을 1시간 동안 50°C로 가열하였다. 반응 혼합물을 0°C에서 빙수로 쿨링하고 EtOAc로 추출하였다. 합한 EtOAc 층을 포화 중탄산나트륨 (NaHCO_3) 용액 및 염수 용액으로 세척하고, 무수 Na_2SO_4 상에서 건조시키고, 감압 하에 농축하였다. 플래쉬 칼럼 크로마토그래피 (SiO_2 , 100-200 메쉬; 50% EtOAc/ 석유 에테르로 용리)에 의해 정제하여 표제 화합물을 담갈색 점착성 물질 (70.0 mg, 36%)로서 수득하였다.

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.43 (m, 2H), 7.27 (m, 2H), 7.23 (m, 2H), 6.58 (d, $J = 16.0$ Hz, 1H), 6.41 (dd, $J = 16.0, 7.6$ Hz, 1H), 4.79 (d, $J = 5.6$ Hz, 2H), 4.14 (m, 1H), 2.48 (s, 3H), 2.18 (m, 1H), 1.16 (m, 4H); ESIMS m/z 509.89 ($[\text{M}+\text{H}]^+$); IR (박막) 1666, 1166, 1112, 800 cm^{-1} .

[0767]

[0768]

실시예 18: (E)-2-브로모-N-(2-티옥소-2-((2,2,2-트리플루오로에틸)아미노)에틸)-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤조티오아미드 (AC90)의 제조



[0769]

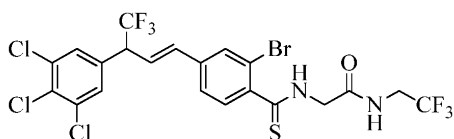
[0770]

주위 온도에서 5 mL의 THF 중 (E)-2-브로모-N-(2-티옥소-2-((2,2,2-트리플루오로에틸)아미노)에틸)-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤즈아미드 (400 mg, 0.638 mmol)의 교반 용액에 2,4-비스(4-메톡시페닐)-1,3,2,4-디티아디포스페탄-2,4-디설피드 (라웨슨(Lawesson) 시약) (336 mg, 0.830 mmol)를 한번에 첨가하였다. 생성된 반응 혼합물을 18시간 동안 교반하였다. TLC가 반응이 완료되지 않았음을 나타냈

으므로, 추가의 라웨슨 시약 (168 mg, 0.415 mmol)을 첨가하고 반응물을 48시간 동안 교반하였다. TLC에 의해 반응이 완료된 것으로 여겨진 후, 반응 혼합물을 감압 하에 농축하였다. 플래쉬 크로마토그래피 (SiO₂, 230-400 메쉬; 헥산 중 20% EtOAc로 용리)에 의해 정제하여 표제 화합물을 황색 유리질 오일 (188 mg, 44.7%)로서 수득하였다.

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 8.34 (m, 1H), 8.27 (m, 1H), 7.60 (d, *J* = 1.6 Hz, 1H), 7.49 (d, *J* = 8.0 Hz, 2H), 7.40 (s, 2H), 7.36 (dd, *J* = 8.2, 1.7 Hz, 1H), 6.53 (d, *J* = 16.0 Hz, 1H), 6.38 (dd, *J* = 15.9, 7.9 Hz, 1H), 4.89 (d, *J* = 8.4, 5.5 Hz, 2H), 4.48 (qd, *J* = 9.0, 6.0 Hz, 2H), 4.11 (m, 1H); ESIMS *m/z* 656.9 ([M-H]).

실시예 19: (E)-2-(2-브로모-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)페닐티오아미도)-N-(2,2,2-트리플루오로에틸)아세트아미드 (AC91)의 제조

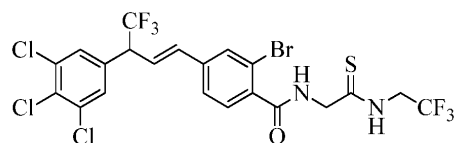


주위 온도에서 5 mL의 THF 중 (E)-2-브로모-N-(2-옥소-2-((2,2,2-트리플루오로에틸)아미노)에틸)-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤즈아미드 (400 mg, 0.638 mmol)의 교반 용액에 라웨슨 시약 (64.5 mg, 0.160 mmol)을 한번에 첨가하였다. 생성된 반응 혼합물을 18시간 동안 교반한 후, 반응 혼합물을 감압 하에 농축하였다. 플래쉬 크로마토그래피 (SiO₂, 230-400 메쉬; 헥산 중 20% EtOAc로 용리)에 의해 정제하여 표제 화합물을 황색 오일 (18.5 mg, 4.51%)로서 수득하였다.

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 8.18 (t, *J* = 5.0 Hz, 1H), 7.58 (d, *J* = 1.6 Hz, 1H), 7.47 (d, *J* = 8.0 Hz, 1H), 7.40 (s, 2H), 7.34 (dd, *J* = 8.1, 1.6 Hz, 1H), 6.52 (m, 2H), 6.37 (dd, *J* = 15.9, 7.9 Hz, 1H), 4.54 (d, *J* = 4.9 Hz, 2H), 4.12 (m, 1H), 3.99 (qd, *J* = 8.9, 6.5 Hz, 2H); ESIMS *m/z* 640.9 ([M-H]).

하기 화합물을 실시예 19에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

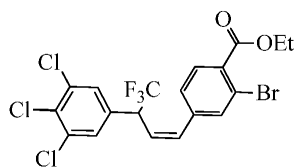
(E)-2-브로모-N-(2-티옥소-2-((2,2,2-트리플루오로에틸)아미노)에틸)-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤즈아미드 (AC92)



생성물을 무색 오일 (17.9 mg, 4.36%)로서 단리하였다.

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 9.16 (d, *J* = 6.1 Hz, 1H), 7.65 (d, *J* = 1.6 Hz, 1H), 7.57 (d, *J* = 8.0 Hz, 1H), 7.41 (m, 3H), 7.21 (t, *J* = 5.6 Hz, 1H), 6.55 (d, *J* = 15.9 Hz, 1H), 6.41 (dd, *J* = 15.9, 7.8 Hz, 1H), 4.59 (d, *J* = 5.6 Hz, 2H), 4.45 (qd, *J* = 9.0, 6.0 Hz, 2H), 4.12 (q, *J* = 7.2 Hz, 1H); ESIMS *m/z* 640.9 ([M-H]).

실시예 106: 에틸 (Z)-2-브로모-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤조에이트 (AI76)의 제조



[0782]

[0783]

표제 화합물을 실시예 88에 개시된 절차에 따라 제조하고 황색 점성 오일 (416 mg, 23%)로서 분리하였다.

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ

7.80 (d, $J = 8.0$ Hz, 1H), 7.40 (d, $J = 1.7$ Hz, 1H), 7.35 (s, 2H), 7.12 (dd, $J = 8.0, 1.7$ Hz, 1H),

6.86 (d, $J = 11.4$ Hz, 1H), 6.23 - 5.91 (m, 1H), 4.42 (q, $J = 7.1$ Hz, 2H), 4.33 - 4.10 (m, 1H),

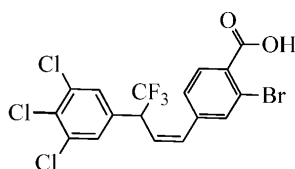
1.42 (t, $J = 7.2$ Hz, 3H); ^{19}F NMR (376 MHz, CDCl_3) δ -69.34 (d, $J = 8.3$ Hz); EIMS m/z

514.10 ([M] $^+$); IR (박막) 2983, 1727, 1247, 1204, 1116 cm^{-1} .

[0784]

[0785]

실시예 107: (Z)-2-브로모-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤조산 (AI77)의 제조



[0786]

[0787]

CH_3CN (1.0 mL) 중 (Z)-에틸 2-브로모-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤조에이트 (360 mg, 0.70 mmol)의 교반 용액에 아이오도트리메틸실란 (0.28 mL, 2.8 mmol)을 첨가하였다. 반응 혼합물을 20시간 동안 환류 하에 가열하고, 주위 온도로 냉각하고 CH_2Cl_2 와 수성 10% 티오황산나트륨 ($\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$) 사이에 분배하였다. 유기상을 수성 10% $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$ 으로 1회 세척하고 황산 마그네슘 (MgSO_4) 상에서 건조시키고 진공 하에 농축하였다. 용리 용매로서 헥산 중 10% EtOAc, 이어서 CH_2Cl_2 중 20% MeOH를 사용하여 물질을 실리카 플러그에 통과시켜 표제 화합물을 황색 발포체 (143 mg, 42%)로서 수득하였다.

mp 54-64°C; ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ

11.36 (s, 1H), 7.99 (d, $J = 8.0$ Hz, 1H), 7.43 (s, 1H), 7.30 (s, 2H), 7.14 (d, $J = 7.9$ Hz, 1H),

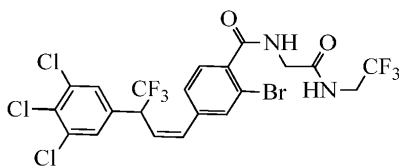
6.85 (d, $J = 11.4$ Hz, 1H), 6.15 (t, $J = 10.9$ Hz, 1H), 4.36 - 4.09 (m, 1H); ^{19}F NMR (376 MHz,

CDCl_3) δ -69.30.

[0788]

[0789]

실시예 108: (Z)-2-브로모-N-(2-옥소-2-((2,2,2-트리플루오로에틸)아미노)에틸)-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤즈아미드 (AC95)의 제조



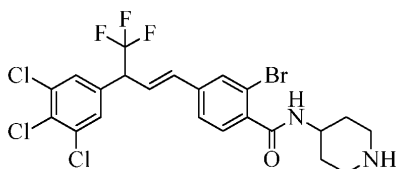
[0790]

[0791]

무수 THF (5.0 mL) 중 (Z)-2-브로모-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤조산 (200 mg, 0.41 mmol)의 교반 용액에 카르보닐디이미다졸 (82 mg, 0.51 mmol)을 첨가하였다. 혼합물을 1.5시간 동안 50°C 오일 조에서 가열하고, 2-아미노-N-(2,2,2-트리플루오로에틸)아세트아미드 히드로클로라이드 (109 mg, .057 mmol)로 처리하고 생성 혼합물을 8시간 동안 환류 하에 가열하였다. 주위 온도로 냉각 후, 혼합물을 Et₂O에 녹이고 수성 5% 중황산나트륨 (NaHSO_4)으로 2회 (2X) 및 포화 NaCl로 1회 (1X) 세척하였다. MgSO_4 상에서 건조시키고, 진공 하에 농축하고 용리액으로 EtOAc/헥산을 사용하여 실리카 상에서 중압 크로마토그래피에 의해 정제 한 후, 표제 화합물을 백색 발포체 (160 mg, 41%)로서 수득하였다.

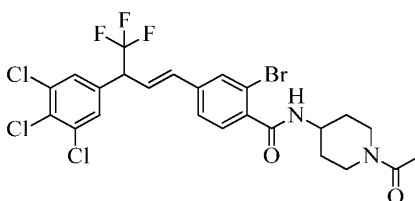
mp 48-61°C; ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.58 (d, $J = 7.9$ Hz, 1H), 7.44 - 7.29 (m, 3H), 7.14 (dd, $J = 7.9, 1.6$ Hz, 1H), 6.86 (d, $J = 11.4$ Hz, 1H), 6.76 (t, $J = 5.9$ Hz, 1H), 6.59 (br s, 1H), 6.21 - 6.04 (m, 1H), 4.23 (d, $J = 5.5$ Hz, 1H), 3.98 (qd, $J = 9.0, 6.5$ Hz, 2H); ^{19}F NMR (376 MHz, CDCl_3) δ -69.31, -72.3; EIMS m/z 626.9 ($[\text{M}+1]^+$).

실시예 109a: (E)-2-브로모-N-(피페리딘-4-일)-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤즈아미드 (AC114)의 제조



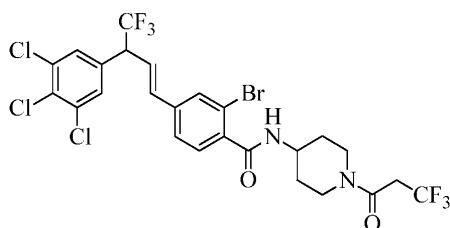
(E)-tert-부틸 4-(2-브로모-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤즈아미도)피페리딘-1-카복실레이트 (0.75 g, 1.11 mmol)를 0°C에서 디옥산 HCl (10 mL)에 첨가하고 18시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 감압 하에 농축하고 디에틸에테르로 연화처리하여 화합물을 담갈색 고체 (0.6 g, 88%)로서 수득하였다.

실시예 109b: (E)-N-(1-아세틸피페리딘-4-일)-2-브로모-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤즈아미드 (AC103)의 제조



CH_2Cl_2 (10.0 mL) 중 (E)-2-브로모-N-(피페리딘-4-일)-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤즈아미드 (0.1 g, 0.16 mmol)의 교반 용액에 TEA (0.046 mL, 0.35 mmol)를 첨가하고 10분 동안 교반하였다. 이어서, 아세틸 클로라이드 (0.014, 0.18 mmol)를 첨가하고 주위 온도에서 16시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 CH_2Cl_2 로 희석하고 포화 NaHCO_3 용액 및 염수 용액으로 세척하였다. 합한 CH_2Cl_2 층을 Na_2SO_4 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 조 화합물을 수득하였다. 조 화합물을 5% Et_2O / n-펜탄으로 세척하여 표제 화합물을 백색 고체 (0.054 g, 50%)로서 수득하였다.

실시예 110: (E)-2-브로모-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)-N-(1-(3,3,3-트리플루오로프로파노일)피페리딘-4-일)벤즈아미드 (AC104)의 제조

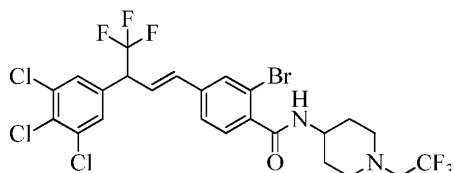


CH_2Cl_2 (10.0 mL) 중 3,3,3-트리플루오로프로판산 (0.02 g, 0.16 mmol)의 교반 용액에, (E)-2-브로모-N-(피페리딘-4-일)-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤즈아미드 (0.1 g, 0.16 mmol), PYBOP (0.09 g, 0.17 mmol), 및 DIPEA (0.06 g, 0.48 mmol)를 주위 온도에서 첨가하였다. 반응 혼합물을 5시간 동안 주위 온도에서 교반하였다. 반응 혼합물을 CH_2Cl_2 로 희석하였다. 합한 CH_2Cl_2 층을 3N HCl 및 포화 NaHCO_3 용

액으로 세척하고, 분리된 CH_2Cl_2 층을 무수 Na_2SO_4 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 조 화합물을 수득하였다. 조 화합물을 칼럼 크로마토그래피 (SiO_2 , 100-200 메쉬; CH_2Cl_2 중 2% MeOH로 용리)에 의해 정제하여 표제 화합물을 회백색 점착성 물질 (0.035 g, 29.%)로서 수득하였다.

[0802]

실시예 111: (E)-2-브로모-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)-N-(1-(2,2,2-트리플루오로에틸)피페리딘-4-일)벤즈아미드 (AC105)의 제조



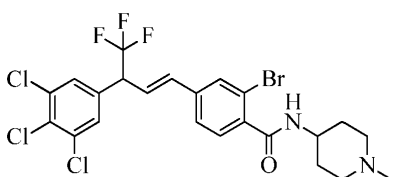
[0803]

[0804]

THF (5.0 mL) 중 (E)-2-브로모-N-(피페리딘-4-일)-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤즈아미드 (0.1 g, 0.16 mmol)의 교반 용액에 TEA (0.06 mL, 0.64 mmol)를 첨가하고 10분 동안 교반하였다. 이어서, 2,2,2-트리플루오로에틸 트리플루오로메탄술포네이트 (0.03, 0.16 mmol)를 첨가하고 주위 온도에서 16시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 EtOAc로 희석하고 포화 NaHCO_3 용액 및 염수 용액으로 세척하였다. 합한 EtOAc 층을 Na_2SO_4 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 표제 화합물을 갈색 고체 (0.05 g, 44%)로서 수득하였다.

[0805]

실시예 112: (E)-2-브로모-N-(1-메틸피페리딘-4-일)-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤즈아미드 (AC106)의 제조



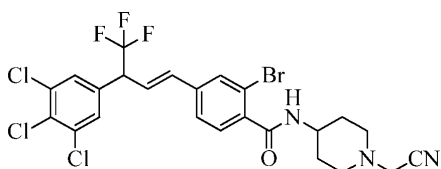
[0806]

[0807]

MeOH (5.0 mL) 중 (E)-2-브로모-N-(피페리딘-4-일)-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤즈아미드 (0.1 g, 0.16 mmol), 포름알데히드 (물 중 30%) (0.1 mL, 0.16 mmol) 및 AcOH (0.01 mL)의 용액을 30분 동안 주위 온도에서 교반하였다. 그 후 NaBH_3CN (0.01 g, 0.16 mmol)을 0°C 에서 첨가하고 반응물을 주위 온도에서 8시간 동안 교반하였다. 용매를 감압 하에 제거하여 잔류물을 수득하고 이를 EtOAc로 희석하고 포화 수성 NaHCO_3 용액 및 염수 용액으로 세척하였다. 합한 EtOAc 층을 Na_2SO_4 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 잔류물을 수득하고, 이를 Et_2O /펜탄으로 연화처리하여 표제 화합물을 연황색 점착성 물질 (0.06 g, 59%)로서 수득하였다.

[0808]

실시예 113: ((E)-2-브로모-N-(1-(시아노메틸)피페리딘-4-일)-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤즈아미드 (AC107)의 제조



[0809]

[0810]

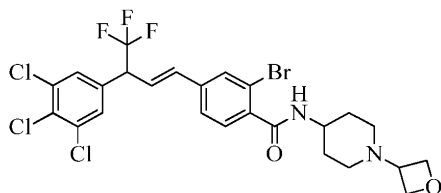
THF (10.0 mL) 중 (E)-2-브로모-N-(피페리딘-4-일)-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤즈아미드 (0.25 g, 0.43 mmol)의 교반 용액에 TEA (0.16 mL, 1.29 mmol)를 첨가하고 반응물을 10분 동안 교반하였다. 이어서, 2-브로모아세토니트릴 (0.07, 0.65 mmol)을 첨가하고 반응물을 주위 온도에서 8시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 EtOAc로 희석하고 포화 염수 용액으로 세척하였다. 합한 EtOAc 층을 Na_2SO_4 상에서

건조시키고 감압 하에 농축하여 표제 화합물을 회백색 고체 (0.125 g, 46.8%)로서 수득하였다.

실시예

114:

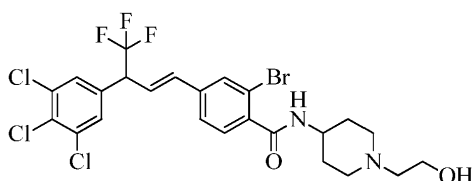
(E)-2-브로모-N-(1-(옥세탄-3-일)피페리딘-4-일)-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤즈아미드 (AC108)의 제조



MeOH (5.0 mL) 중 (E)-2-브로모-N-(피페리딘-4-일)-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤즈아미드 (0.2 g, 0.35 mmol), 옥세탄-3-온 (0.027 g, 0.38 mmol) 및 AcOH (0.01 mL)의 용액을 30분 동안 주위 온도에서 교반하였다. 그 후 NaBH₃CN (0.022 g, 0.35 mmol)을 10분의 기간에 걸쳐 0℃에서 서서히 로트별로 첨가하고 반응물을 주위 온도에서 8시간 동안 교반하였다. 용매를 감압 하에 제거하여 잔류물을 수득하고 이를 EtOAc로 희석하고 포화 NaHCO₃ 용액 및 염수 용액으로 세척하였다. 합한 EtOAc 층을 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 잔류물을 수득하고, 이를 Et₂O/ 펜탄으로 연화처리하여 표제 화합물을 회백색 고체 (0.05 g, 23%)로서 수득하였다.

실시예

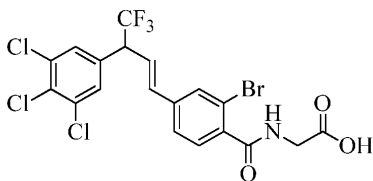
115: (E)-2-브로모-N-(1-(2-히드록시에틸)피페리딘-4-일)-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤즈아미드 (AC109)의 제조



THF (10.0 mL) 중 (E)-2-브로모-N-(피페리딘-4-일)-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤즈아미드 (0.25 g, 0.43 mmol)의 교반 용액에 TEA (0.16 mL, 1.29 mmol)를 첨가하고 반응물을 10분 동안 교반하였다. 이어서, 2-클로로에탄올 (0.05, 0.65 mmol)을 첨가하고 반응물을 주위 온도에서 8시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 EtOAc로 희석하고 포화 염수 용액으로 세척하였다. 합한 EtOAc 층을 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 표제 화합물을 회백색 고체 (0.09 g, 34%)로서 수득하였다.

실시예

116: (E)-2-(2-브로모-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤즈아미도)아세트산 (AI78)의 제조

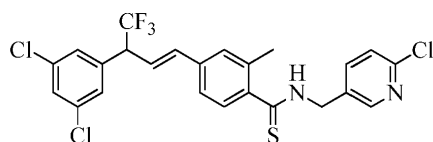


CH₂Cl₂ (36.0 mL) 중 (E)-tert-부틸 2-(2-브로모-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤즈아미도)아세테이트 (440 mg, 0.734 mmol)의 교반 용액에, TFA (4.0 mL)를 첨가하고 반응 혼합물을 1시간 동안 주위 온도에서 교반하였다. 반응 혼합물을 감압 하에 농축하여 잔류물을 수득하고 이를 n-펜탄으로 세척하여 표제 화합물을 회백색 고체 (310 mg, 78%)로서 수득하였다.

¹H

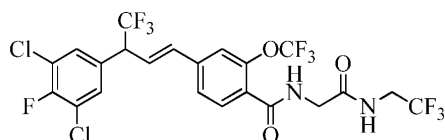
NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 13.0 (s, 1H), 8.75 (t, *J* = 5.7 Hz, 1H), 7.93 (m, 2H), 7.62 (d, *J* = 7.5 Hz, 1H), 7.40 (d, *J* = 8.1 Hz, 1H), 6.96 (dd, *J* = 15.3, 9.3 Hz, 1H), 6.78 (d, *J* = 15.3 Hz, 1H), 4.83 (m, 1H), 3.90 (d, *J* = 5.7 Hz, 2H); ESIMS *m/z* 543.61 ([M+H]⁺); IR (박막) 3429, 1635, 1114, 772 cm⁻¹.

실시예 117: (E)-N-((6-클로로피리딘-3-일)메틸)-4-(3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-2-메틸벤조티오아미드 (AC115)의 제조



톨루엔 (3 mL) 중 (E)-N-((6-클로로피리딘-3-일)메틸)-4-(3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-2-메틸벤조아미드 (0.06 g, 0.117 mmol)의 교반 용액에 라웨슨 시약 (0.14 g, 0.351 mmol)을 첨가하고 반응물을 1시간 동안 100℃에서 조사한 다음, 주위 온도로 냉각하고 감압 하에 농축하여 조 화합물을 수득하였다. 조 생성물을 정제용 HPLC에 의해 정제하여 생성물을 황색 고체 (0.03 g, 49%)로서 수득하였다.

실시예 118: (E)-4-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-N-(2-옥소-2-((2,2,2-트리플루오로에틸)아미노)에틸)-2-(트리플루오로메톡시)벤조아미드 (AC116)의 제조



단계 1. 2-(트리플루오로메톡시)-4-비닐벤조산 (AI79): DMSO (20 mL) 중 4-브로모-2-(트리플루오로메톡시)벤조산 (1 g, 3.67 mmol)의 교반 용액에 포타슘 비닐트리플루오로보레이트 (1.47 g, 11.02 mmol) 및 K₂CO₃ (1.52 g, 11.02 mmol)를 첨가하였다. 반응 혼합물을 30분 동안 아르곤으로 탈기하였다. 비스트리페닐포스핀(디페닐포스피노페노센)팔라듐 디클로라이드 (0.13 g, 0.18 mmol)를 첨가하고 반응 혼합물을 1시간 동안 80℃로 가열하였다. 반응 혼합물을 물 (100 mL)로 희석하고, EtOAc (2 x 50 mL)로 추출하고, 염수로 세척하고, Na₂SO₄ 상에서 건조시켰다. 감압 하에 농축하여 조 화합물을 수득하고 이를 플래쉬 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제하여 생성물을 연황색 점착성 물질 (0.4 g, 47%)로서 수득하였다.

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 8.05 (d, *J* = 8.1 Hz, 1H), 7.44 (d, *J* = 1.8 Hz, 1H), 7.35 (s, 1H), 6.78 (dd, *J* = 17.4, 11.1 Hz, 1H), 5.92 (d, *J* = 17.4 Hz, 1H), 5.51 (d, *J* = 10.8 Hz, 1H); ESIMS *m/z* 232.97 ([M+H]⁺).

단계 2. (E)-4-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-2-(트리플루오로메톡시)벤조산 (AI80): 1N 메틸 피롤리돈 (5.0 mL) 중 2-(트리플루오로메톡시)-4-비닐벤조산 (0.356 g, 1.53 mmol)의 교반 용액에 1-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-3,5-디클로로-4-플루오로벤젠 (1.0 g, 3.07 mmol), CuCl (0.03 g, 0.307 mmol) 및 2,2-비피리딘 (0.095 g, 0.614 mmol)을 첨가하였다. 반응 혼합물을 1시간 동안 150℃에서 교반하였다. TLC에 의해 반응이 완료된 후, 반응 혼합물을 물 (100 mL)로 희석하고 EtOAc (2X 50 mL)로 추출하였다. 합한 유기 층을 염수로 세척하고, Na₂SO₄ 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 조 화합물을 수득하고 이를 플래쉬 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제하여 생성물을 연황색 점착성 물질 (0.3 g, 21%)로서 수득하였다.

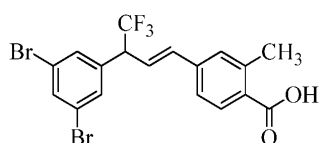
¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 8.08 (d, *J* = 8.0 Hz, 1H), 7.45 (d, *J* = 1.6 Hz, 1H), 7.35 (s, 3H), 6.63 (d, *J* = 16.0 Hz, 1H), 6.50 (dd, *J* = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.15 (m, 1H); ESIMS *m/z* 474.81 ([M-H]⁻).

단계 3. (E)-4-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-N-(2-옥소-2-(2,2,2-트리플

루오로에틸아미노)에틸)-2-(트리플루오로메톡시)벤즈아미드 (AC116): CH₂Cl₂ (10.0 mL) 중 (E)-4-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔일)-2-(트리플루오로메톡시)벤조산 (0.25 g, 0.52 mmol), 2-아미노-N-(2,2,2-트리플루오로에틸)아세트아미드 (0.158 g, 0.62 mmol), PyBOP (0.40 g, 0.78 mmol) 및 DIPEA (0.134 g, 1.04 mmol)의 혼합물을 16시간 동안 주위 온도에서 교반하였다. 반응 혼합물을 물로 희석하고 CH₂Cl₂로 추출하였다. 합한 CH₂Cl₂ 층을 염수로 세척하고, Na₂SO₄ 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하였다. 플래쉬 칼럼 크로마토그래피 (SiO₂, 100-200 메쉬; 20% EtOAc/ 석유 에테르로 용리)에 의해 정제하여 표제 화합물을 연황색 점착성 물질 (0.15 g, 47%)로서 수득하였다.

하기 분자를 실시예 118, 단계 2에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

(E)-4-(3-(3,5-디브로모페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔일)-2-메틸벤조산

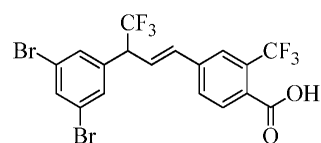


표제 분자를 갈색 고체로서 단리하였다.

¹H NMR (400 MHz, DMSO-*d*₆) δ

12.90 (bs, 1H), 7.85 (s, 1H), 7.78-7.75 (m, 3H), 7.47-7.41 (m, 2H), 6.89 (dd, *J* = 15.6, 9.2 Hz, 1H), 6.72 (d, *J* = 15.6 Hz, 1H), 4.80-4.75 (m, 1H), 2.33 (s, 3H); ESIMS *m/z* 474.90 ([M-H]⁻); IR (박막) 3437, 1689, 1165, 579 cm⁻¹.

(E)-4-(3-(3,5-디브로모페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔일)-2-(트리플루오로메틸)벤조산

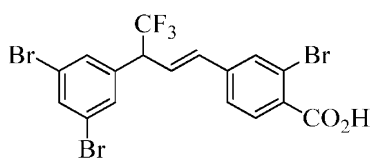


표제 분자를 갈색 고체로서 단리하였다.

¹H NMR (300 MHz, DMSO-*d*₆) δ

13.5 (bs, 1H), 8.03 (s, 1H), 7.95-7.85 (m, 4H), 7.81 (d, *J* = 7.8 Hz, 1H), 7.14 (dd, *J* = 15.6, 9.6 Hz, 1H), 6.90 (d, *J* = 15.9 Hz, 1H), 4.86-4.79 (m, 1H); ESIMS *m/z* 528.82 ([M-H]⁺); IR (박막) 3437, 1707, 1153, 555 cm⁻¹.

(E)-2-브로모-4-(3-(3,5-디브로모페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔일)벤조산

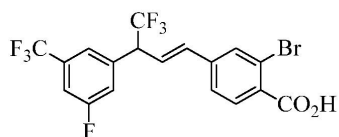


표제 분자를 갈색 액체로서 단리하였다.

¹H NMR (400 MHz, DMSO-*d*₆) δ

13.90 (bs, 1H), 7.98 (s, 1H), 7.88 (s, 1H), 7.84 (s, 2H), 7.74 (d, *J* = 7.6 Hz, 1H), 7.64 (d, *J* = 8.8 Hz, 1H), 7.04 (dd, *J* = 15.6, 8.8 Hz, 1H), 6.78 (d, *J* = 15.6 Hz, 1H), 4.80-4.78 (m, 1H); ESIMS *m/z* 538.74 ([M-H]⁻); IR (박막) 3424, 1695, 1168, 578 cm⁻¹.

[0844] (E)-2-브로모-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3-플루오로-5-(트리플루오로메틸)페닐)부트-1-엔-1-일)벤조산



[0845]

[0846] 표제 분자를 갈색 액체로서 분리하였다.

^1H NMR (400 MHz, DMSO- d_6) δ

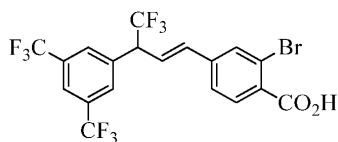
13.3 (bs, 1H), 7.93 (s, 1H), 7.82-7.77 (m, 2H), 7.72-7.66 (m, 2H), 7.59 (d, $J = 8.0$ Hz, 1H),

7.03 (dd, $J = 15.6, 9.2$ Hz, 1H), 6.76 (d, $J = 15.6$ Hz, 1H), 4.94-4.90 (m, 1H); ESIMS m/z

469.02 ([M-H] $^-$); IR (박막) 3444, 1704, 1172, 513 cm^{-1} .

[0847]

[0848] (E)-4-(3-(3,5-비스(트리플루오로메틸)페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-2-브로모벤조산



[0849]

[0850] 표제 분자를 갈색 고체로서 분리하였다.

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.98

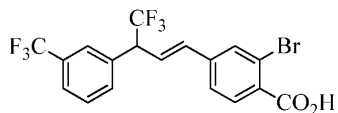
(d, $J = 7.6$ Hz, 1H), 7.92 (s, 1H), 7.83 (s, 2H), 7.73 (d, $J = 1.6$ Hz, 1H), 7.42-7.40 (m, 1H),

6.62 (d, $J = 16.4$ Hz, 1H), 6.55 (dd, $J = 16.0, 8.0$ Hz, 1H), 4.40-4.30 (m, 1H); ESIMS m/z

518.94 ([M-H] $^-$); IR (박막) 3447, 1705, 1171, 526 cm^{-1} .

[0851]

[0852] (E)-2-브로모-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3-(트리플루오로메틸)페닐)부트-1-엔-1-일)벤조산



[0853]

[0854] 표제 분자를 갈색 액체로서 분리하였다.

^1H NMR (300 MHz, DMSO- d_6) δ

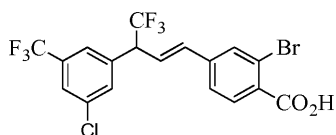
13.50 (bs, 1H), 7.97-7.87 (m, 3H), 7.78-7.61 (m, 4H), 7.08 (dd, $J = 15.9, 9.3$ Hz, 1H), 6.81

(d, $J = 15.9$ Hz, 1H), 4.97-4.84 (m, 1H); ESIMS m/z 518.94 ([M-H] $^-$); IR (박막) 3447,

1705, 1171, 526 cm^{-1} .

[0855]

[0856] (E)-2-브로모-4-(3-(3-클로로-5-(트리플루오로메틸)페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)벤조산



[0857]

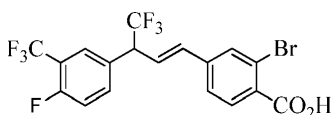
[0858] 표제 분자를 연황색 검으로서 분리하였다.

^1H NMR (300 MHz, DMSO- d_6)

δ 13.9 (s, 1H), 8.03 (s, 1H), 7.96 - 7.91 (m, 3H), 7.72 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 7.63 - 7.60 (m, 1H), 7.11 (dd, J = 15.9, 9.6 Hz, 1H), 6.79 (d, J = 15.9 Hz, 1H), 4.98 - 4.91 (m, 1H); ESIMS m/z

[0859] 484.94 ([M-H]⁻); IR (박막) 3444, 1705, 1171, 764 cm^{-1} .

[0860] (E)-2-브로모-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(4-플루오로-3-(트리플루오로메틸)페닐)부트-1-엔-1-일)벤조산



[0861]

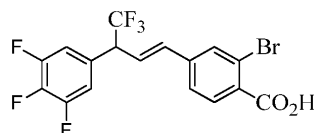
[0862] 표제 분자를 갈색 액체로서 분리하였다.

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3) δ 8.00

(d, J = 8.1 Hz, 1H), 7.71 (s, 1H), 7.61-7.59 (m, 2H), 7.41 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 7.30-7.24 (m, 1H), 6.59 (dd, J = 16.2, 6.0 Hz, 1H), 6.48 (d, J = 16.5 Hz, 1H), 4.26-4.21 (m, 1H); ESIMS m/z 469.0 ([M-H]⁻); IR (박막) 3444, 1699, 1327 cm^{-1} .

[0863]

[0864] (E)-2-브로모-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리플루오로페닐)부트-1-엔-1-일)벤조산



[0865]

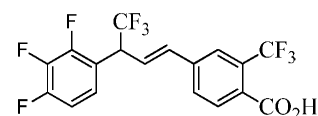
[0866] 표제 분자를 갈색 검으로서 분리하였다.

^1H NMR (300 MHz, DMSO- d_6) δ

13.60 (bs, 1H), 7.97 (s, 2H), 7.72 (d, J = 7.2 Hz, 1H), 7.41 - 7.31 (m, 2H), 7.04 (dd, J = 15.6, 9.0 Hz, 1H), 6.71 (d, J = 15.9 Hz, 1H), 4.15 - 4.11 (m, 1H); ESIMS m/z 438.8 ([M+H]⁺).

[0867]

[0868] (E)-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(2,3,4-트리플루오로페닐)부트-1-엔-1-일)-2-(트리플루오로메틸)벤조산



[0869]

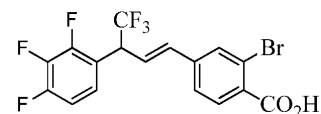
[0870] 표제 분자를 갈색 검으로서 분리하였다.

^1H NMR (300 MHz, DMSO- d_6) δ

8.00 (s, 1H), 7.93 (d, J = 8.4 Hz, 1H), 7.81 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 7.63 - 7.60 (m, 1H), 7.47 - 7.44 (m, 1H), 7.02 - 7.01 (m, 1H), 5.10 - 4.90 (m, 1H).

[0871]

[0872] (E)-2-브로모-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(2,3,4-트리플루오로페닐)부트-1-엔-1-일)벤조산

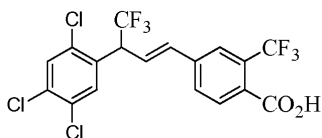


[0873]

[0874] 표제 분자를 갈색 검으로서 분리하고, 조 산을 다음 단계에 직접 사용하였다.

¹H NMR (300 MHz, DMSO-*d*₆) δ 13.65 (bs, 1H), 7.95 (s, 1H), 7.75 (d, *J* = 7.8 Hz, 1H), 7.62 - 7.59 (m, 2H), 7.50 (dd, *J* = 15.6, 9.0 Hz, 1H), 6.95 (d, *J* = 15.9 Hz, 1H), 4.86 - 4.74 (m, 1H); ESIMS *m/z* 436.92 ([M-H]⁻); IR (박막) 3445, 1641, 1116 cm⁻¹.

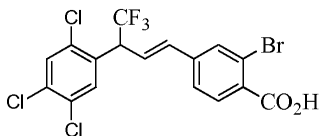
[0876] (E)-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(2,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)-2-(트리플루오로메틸)벤조산



[0878] 표제 분자를 갈색 검으로서 분리하였다.

¹H NMR (300 MHz, DMSO-*d*₆) δ 13.6 (s, 1H), 8.04 (s, 1H), 7.96 (d, *J* = 8.4 Hz, 3H), 7.83 (d, *J* = 8.1 Hz, 1H), 7.17 - 7.03 (m, 2H), 5.16 - 5.05 (m, 1H); ESIMS *m/z* 476.9 ([M-H]⁻); IR (박막) 3436, 1651, 1116, 661 cm⁻¹.

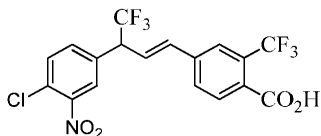
[0880] (E)-2-브로모-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(2,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤조산



[0882] 표제 분자를 갈색 검으로서 분리하였다.

¹H NMR (300 MHz, DMSO-*d*₆) δ 13.4 (s, 1H), 7.99 (d, *J* = 10.2 Hz, 3H), 7.76 (d, *J* = 8.1 Hz, 1H), 7.65 (d, *J* = 7.8 Hz, 1H), 7.09 - 6.91 (m, 2H), 5.11 - 5.05 (m, 1H); ESIMS *m/z* 486.8 ([M-H]⁻); IR (박막) 3436, 1651, 1115, 737 cm⁻¹.

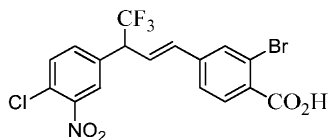
[0884] (E)-4-(3-(4-클로로-3-니트로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-2-(트리플루오로메틸)벤조산



[0886] 표제 분자를 갈색 검으로서 분리하고, 조 산을 다음 단계에 직접 사용하였다.

¹H NMR (300 MHz, DMSO-*d*₆) 13.80 (bs, 1H), 8.33 (s, 1H), 7.94-7.81 (m, 5H), 7.75-7.72 (m, 1H), 7.06 (dd, *J* = 15.9, 8.7 Hz, 1H), 6.90 (d, *J* = 15.9 Hz, 1H), 5.02-4.81 (m, 1H).

(E)-2-브로모-4-(3-(4-클로로-3-니트로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)벤조산

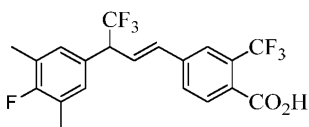


표제 분자를 갈색 검으로서 단리하였다.

^1H NMR (300 MHz, DMSO- d_6)

13.50 (bs, 1H), 8.31 (s, 1H), 8.00 - 7.77 (m, 3H), 7.75 - 7.72 (m, 1H), 7.63 - 7.55 (m, 1H), 7.03 (dd, $J = 15.9, 9.0$ Hz, 1H), 6.81 (d, $J = 15.9$ Hz, 1H), 5.04 - 4.91 (m, 1H); ESIMS m/z 462.16 ([M-H] $^-$); IR (박막) 3428, 1697, 1113, 749 cm^{-1} .

(E)-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(4-플루오로-3,5-디메틸페닐)부트-1-엔-1-일)-2-(트리플루오로메틸)벤조산

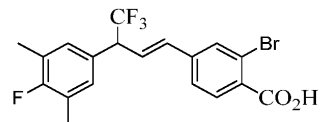


표제 분자를 갈색 검으로서 단리하였다.

^1H NMR (300 MHz, DMSO- d_6) δ

7.96 (s, 1H), 7.92 (d, $J = 8.4$ Hz, 1H), 7.80 - 7.75 (m, 1H), 7.27 (d, $J = 6.9$ Hz, 2H), 6.96 (dd, $J = 15.6, 8.7$ Hz, 1H), 6.87 (d, $J = 15.6$ Hz, 1H), 4.68-4.56 (m, 1H), 2.23 (s, 6H); ESIMS m/z 419.03 ([M-H] $^-$); IR (박막) 3445, 2928, 1713, 1146 cm^{-1} .

(E)-2-브로모-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(4-플루오로-3,5-디메틸페닐)부트-1-엔-1-일)벤조산

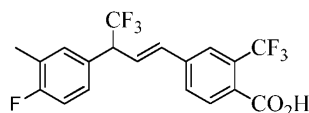


표제 분자를 갈색 검으로서 단리하였다.

^1H NMR (300 MHz, DMSO- d_6) δ

7.91 (s, 1H), 7.74 (d, $J = 7.8$ Hz, 1H), 7.61-7.58 (m, 1H), 7.26 (d, $J = 6.6$ Hz, 2H), 6.93 (dd, $J = 15.9, 8.7$ Hz, 1H), 6.87 (d, $J = 15.9$ Hz, 1H), 4.59-4.53 (m, 1H), 2.23 (s, 6H); ESIMS m/z 428.97 ([M-H] $^-$); IR (박막) 3473, 1701, 1111, 581 cm^{-1} .

(E)-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(4-플루오로-3-메틸페닐)부트-1-엔-1-일)-2-(트리플루오로메틸)벤조산

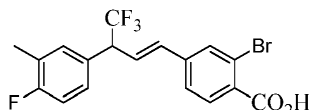


[0902] 표제 분자를 갈색 액체로서 분리하였다.

^1H NMR (300 MHz, DMSO- d_6) δ
 13.58 (bs, 1H), 7.98 (s, 1H), 7.92 - 7.90 (m, 1H), 7.80 (d, $J = 8.1$ Hz, 1H), 7.48 - 7.45 (m, 1H), 7.42 - 7.37 (m, 1H), 7.22 - 7.16 (m, 1H), 7.04 (dd, $J = 15.9, 8.7$ Hz, 1H), 6.88 (d, $J = 15.9$ Hz, 1H), 4.70 - 4.60 (m, 1H), 4.04 - 3.99 (m, 1H), 2.26 (s, 3H); ESIMS m/z 405.05 ($[\text{M}-\text{H}]^-$); IR (박막) 3437, 1710, 1145 cm^{-1} .

[0903]

[0904] (E)-2-브로모-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(4-플루오로-3-메틸페닐)부트-1-엔-1-일)벤조산



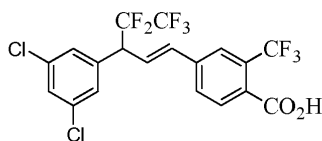
[0905]

[0906] 표제 분자를 갈색 액체로서 분리하였다.

^1H NMR (300 MHz, DMSO- d_6) δ
 13.39 (bs, 1H), 7.91 (s, 1H), 7.72 (d, $J = 8.1$ Hz, 1H), 7.61 - 7.58 (m, 1H), 7.47 - 7.44 (m, 1H), 7.38 - 7.36 (m, 1H), 7.18 (t, $J = 9.6$ Hz, 1H), 6.95 (dd, $J = 15.6, 8.7$ Hz, 1H), 6.76 (d, $J = 15.9$ Hz, 1H), 4.67 - 4.61 (m, 1H), 2.25 (s, 3H); ESIMS m/z 415.0 ($[\text{M}-\text{H}]^-$); IR (박막) 3435, 2989, 1700, 1260 cm^{-1} .

[0907]

[0908] (E)-4-(3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,5,5,5-펜타플루오로펜트-1-엔-1-일)-2-(트리플루오로메틸)벤조산



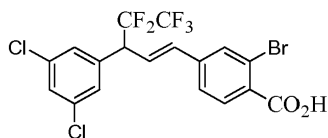
[0909]

[0910] 표제 분자를 갈색 반고체로서 분리하였다.

^1H NMR (400 MHz, DMSO- d_6) δ 13.70 (bs, 1H), 8.01 (s, 1H), 7.91 (s, 1H), 7.80 (d, $J = 8.4$ Hz, 1H), 7.72 ($J = 1.6$ Hz, 2H), 7.66 (t, $J = 3.2$ Hz, 1H), 7.15 (dd, $J = 15.6, 9.6$ Hz, 1H), 6.91 (d, $J = 15.6$ Hz, 1H), 4.86-4.78 (m, 1H); ESIMS m/z 491.0 ($[\text{M}-\text{H}]^-$); IR (박막) 3446, 1712, 1141, 749 cm^{-1} .

[0911]

[0912] (E)-2-브로모-4-(3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,5,5,5-펜타플루오로펜트-1-엔-1-일)벤조산



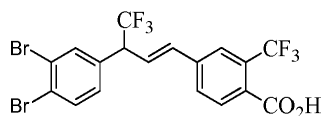
[0913]

[0914] 표제 분자를 갈색 검으로서 분리하였다.

^1H NMR (400 MHz, DMSO- d_6) δ
 7.85 (s, 1H), 7.70 (s, 2H), 7.65-7.64 (m, 1H), 7.56-7.52 (m, 2H), 6.94 (d, $J = 9.2$ Hz, 1H), 6.76 (d, $J = 16$ Hz, 1H), 4.82-4.80 (m, 1H); ESIMS m/z 500.8 ($[\text{M}-\text{H}]^-$); IR (박막) 3422, 1683, 1184, 750, 575 cm^{-1} .

[0915]

(E)-4-(3-(3,4-디브로모페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-2-(트리플루오로메틸)벤조산

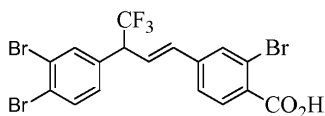


표제 분자를 갈색 검으로서 분리하였다.

^1H NMR (300 MHz, DMSO- d_6) δ

13.5 (bs, 1H), 8.01-7.99 (m, 2H), 7.94-7.91 (m, 1H), 7.85-7.78 (m, 2H), 7.53-7.50 (m, 1H), 7.09 (dd, $J = 15.6, 8.7$ Hz, 1H), 6.89 (d, $J = 15.9$ Hz, 1H), 4.85-4.78 (m, 1H); ESIMS m/z 528.8 ([M-H] $^-$); IR (박막) 3437, 1722, 1168 cm^{-1} .

(E)-2-브로모-4-(3-(3,4-디브로모페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)벤조산

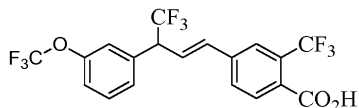


표제 분자를 갈색 검으로서 분리하였다.

^1H NMR (300 MHz, DMSO- d_6) δ

13.38 (bs, 1H), 7.98-7.96 (m, 2H), 7.84 (d, $J = 8.4$ Hz, 1H), 7.74 (d, $J = 8.1$ Hz, 1H), 7.63-7.61 (m, 1H), 7.51-7.49 (m, 1H), 7.01 (dd, $J = 15.9, 9.0$ Hz, 1H), 6.78 (d, $J = 15.6$ Hz, 1H), 4.82-4.76 (m, 1H); ESIMS m/z 538.8 ([M-H] $^-$); IR (박막) 3446, 1699, 1166, 581 cm^{-1} .

(E)-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3-(트리플루오로메톡시)페닐)부트-1-엔-1-일)-2-(트리플루오로메틸)벤조산

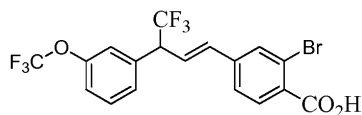


표제 분자를 갈색 반고체로서 분리하였다.

^1H NMR (300 MHz, DMSO-

d_6) δ 8.01(s, 1H), 7.94 (d, $J = 8.7$ Hz, 1H), 7.80 (d, $J = 8.1$ Hz, 1H), 7.63-7.55 (m, 3H), 7.41(d, $J = 7.5$ Hz, 1H), 7.11(dd, $J = 15.6, 9.0$ Hz, 1H), 6.92 (d, $J = 15.9$ Hz, 1H), 4.89-4.82 (m, 1H); ESIMS m/z 456.98 ([M-H] $^-$); IR (박막) 3413, 1668, 1161 cm^{-1} .

(E)-2-브로모-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3-(트리플루오로메톡시)페닐)부트-1-엔-1-일)벤조산



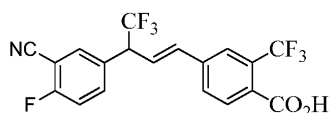
[0930] 표제 분자를 갈색 고체로서 분리하였다.

^1H NMR (300 MHz, DMSO- d_6) δ

7.73 (s, 1H), 7.59 (m, 3H), 7.44 (s, 1H), 7.40 (d, $J = 7.6$ Hz, 2H), 6.88 (dd, $J = 15.6, 9.0$ Hz, 1H), 6.73 (d, $J = 15.9$ Hz, 1H), 4.85-4.82 (m, 1H); ESIMS m/z 466.93 ([M-H] $^-$); IR (박막) 3437, 1703, 1111 cm^{-1} .

[0931]

[0932] (E)-4-(3-(3-시아노-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-2-(트리플루오로메틸)벤조산



[0933]

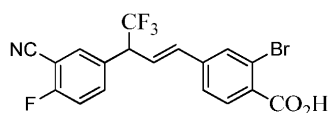
[0934] 표제 분자를 갈색 액체로서 분리하였다.

^1H NMR (300 MHz, DMSO- d_6) δ

13.60 (bs, 1H), 8.21-8.19(m, 1H), 8.01-7.91(m, 3H), 7.81 (d, $J = 8.4$ Hz, 1H), 7.12 (dd, $J = 15.9, 8.1$ Hz, 1H), 6.91 (d, $J = 15.6$ Hz, 1H), 4.92-4.86 (m, 1H); ESIMS m/z 416.27 ([M-H] $^-$); IR (박막) 3429, 2238, 1713, 1116 cm^{-1} .

[0935]

[0936] (E)-2-브로모-4-(3-(3-시아노-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)벤조산



[0937]

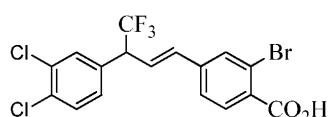
[0938] 표제 분자를 갈색 검으로서 분리하였다.

^1H NMR (300 MHz, DMSO- d_6) δ

13.56 (bs, 1H), 8.21 - 8.18 (m, 1H), 8.00 - 7.95(m, 2H), 7.73 - 7.59 (m, 3H), 7.03 (dd, $J = 15.9, 9.3$ Hz, 1H), 6.79 (d, $J = 15.3$ Hz, 1H), 4.87 - 4.84 (m, 1H); ESIMS m/z 426.0 ([M-H] $^-$).

[0939]

[0940] (E)-2-브로모-4-(3-(3,4-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)벤조산



[0941]

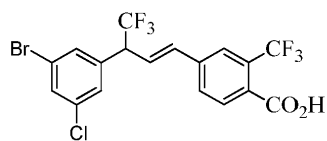
[0942] 표제 분자를 갈색 검으로서 분리하였다.

^1H NMR (300 MHz, DMSO- d_6) δ

13.4 (s, 1H), 7.96 (d, $J = 1.2$ Hz, 1H), 7.88 (d, $J = 1.8$ Hz, 1H), 7.74 - 7.68 (m, 2H), 7.63 (dd, $J = 8.1, 1.2$ Hz, 1H), 7.57 (dd, $J = 8.4, 1.8$ Hz, 1H), 7.02 (dd, $J = 15.9, 9.3$ Hz, 1H), 6.78 (dd, $J = 5.9$ Hz, 1H), 4.84 - 4.78 (m, 1H); ESIMS m/z 451.0 ([M-H] $^-$); IR (박막) 3445, 1704, 1113, 740 cm^{-1} .

[0943]

[0944] (E)-4-(3-(3-브로모-5-클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-2-(트리플루오로메틸)벤조산



[0945]

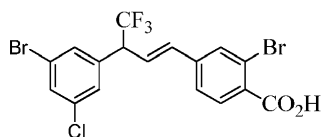
[0946] 표제 분자를 갈색 고체로서 분리하였다.

^1H NMR (300 MHz, DMSO- d_6) δ

13.50 (bs, 1H), 7.91 (s, 1H), 7.86 - 7.64 (m, 5H), 7.06 (dd, J = 15.9, 9.0 Hz, 1H), 6.87 (d, J = 15.9 Hz, 1H), 4.85 - 4.78 (m, 1H); ESIMS m/z 485.17 ([M-H] $^-$); IR (박막) 3438, 1708, 1114, 774, 516 cm^{-1} .

[0947]

[0948] (E)-2-브로모-4-(3-(3-브로모-5-클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)벤조산



[0949]

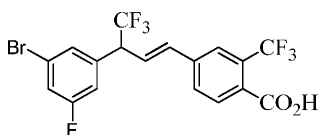
[0950] 표제 분자를 갈색 검으로서 분리하였다.

^1H NMR (300 MHz, DMSO- d_6) δ

13.38 (bs, 1H), 7.98 (s, 1H), 7.80 - 7.72 (m, 4H), 7.64 - 7.61 (m, 1H), 7.06 (dd, J = 15.9, 9.3 Hz, 1H), 6.79 (d, J = 15.6 Hz, 1H), 4.88 - 4.80 (m, 1H); ESIMS m/z 495.05 ([M-H] $^-$); IR (박막) 3436, 1699, 1116, 750, 531 cm^{-1} .

[0951]

[0952] (E)-4-(3-(3-브로모-5-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-2-(트리플루오로메틸)벤조산



[0953]

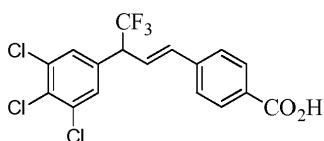
[0954] 표제 분자를 갈색 액체로서 분리하였다.

^1H NMR (300 MHz, DMSO- d_6) δ

13.6 (bs, 1H), 8.02 (s, 1H), 7.91 - 7.89 (m, 1H), 7.81 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 7.69 (s, 1H), 7.63 - 7.59 (m, 1H), 7.55 (d, J = 9.3 Hz, 1H), 7.11 (dd, J = 15.9, 9.0 Hz, 1H), 6.91 (d, J = 15.9 Hz, 1H), 4.87 - 4.80 (m, 1H); ESIMS m/z 469.07 ([M-H] $^-$); IR (박막) 3428, 1712, 1171, 523 cm^{-1} .

[0955]

[0956] (E)-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤조산



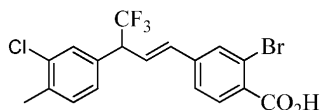
[0957]

[0958] 표제 분자를 황색 고체로서 분리하였다.

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 8.18 – 8.03 (m, 2H), 7.49 (d, J = 8.3 Hz, 2H), 7.42 (s, 2H), 6.66 (d, J = 15.9 Hz, 1H), 6.47 (dd, J = 15.9, 8.0 Hz, 1H), 4.13 (p, J = 8.6 Hz, 1H); ^{19}F NMR (376 MHz, CDCl_3) δ -68.65; ESIMS m/z 409.1 ([M-H] $^-$).

[0959]

[0960] (E)-2-브로모-4-(3-(3-클로로-4-메틸페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)벤조산



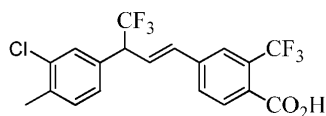
[0961]

[0962] 표제 분자를 갈색 액체로서 분리하였다.

^1H NMR (300 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ 13.30 (bs, 1H), 7.93 (d, J = 1.2 Hz, 1H), 7.42 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 7.62 (dd, J = 1.5, 8.1 Hz, 1H), 7.53 (s, 1H), 7.48 (d, J = 7.8 Hz, 1H), 7.39 (d, J = 7.8 Hz, 1H), 6.96 (dd, J = 15.6, 8.7 Hz, 1H), 6.77 (d, J = 15.6 Hz, 1H), 4.73 - 4.61 (m, 1H), 2.35 (s, 3H); ESIMS m/z 431.77 ([M-H] $^-$); IR (박막) 3435, 1701, 1111, 750 cm^{-1} .

[0963]

[0964] (E)-4-(3-(3-클로로-4-메틸페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-2-(트리플루오로메틸)벤조산



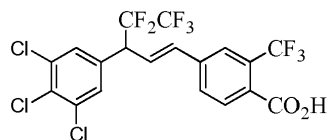
[0965]

[0966] 표제 분자를 갈색 검으로서 분리하였다.

^1H NMR (300 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ 13.50 (bs, 1H), 7.98 (s, 1H), 7.92 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 7.80 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 7.53 (s, 1H), 7.48 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 7.40 (d, J = 8.4 Hz, 1H), 7.04 (dd, J = 15.6, 8.4 Hz, 1H), 6.88 (d, J = 15.6 Hz, 1H), 4.72 - 4.66 (m, 1H), 2.35 (s, 3H); ESIMS m/z 421.82 ([M-H] $^-$); IR (박막) 3460, 2926, 1712, 1170, 750 cm^{-1} .

[0967]

[0968] (E)-4-(4,4,5,5,5-펜타플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)펜트-1-엔-1-일)-2-(트리플루오로메틸)벤조산



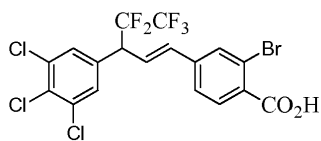
[0969]

[0970] 표제 분자를 암갈색 검으로서 분리하였다.

^1H NMR (300 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ 13.6 (bs, 1H), 8.03 (s, 1H), 7.95 - 7.86 (m, 3H), 7.81 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 7.16 (dd, J = 15.3, 9.3 Hz, 1H), 6.92 (d, J = 15.6 Hz, 1H), 4.95 - 4.88 (m, 1H); ^{19}F NMR (300 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ -80.35, -58.02; ESIMS m/z 526.8 ([M+H] $^+$).

[0971]

[0972] (E)-2-브로모-4-(4,4,5,5,5-펜타플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)펜트-1-엔-1-일)벤조산



[0973]

[0974] 표제 분자를 암갈색 검으로서 분리하였다.

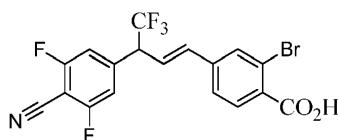
$^1\text{H NMR}$ (300 MHz, $\text{DMSO}-d_6$)

δ 13.6 (bs, 1H), 7.94 (s, 2H), 7.78 (d, $J = 7.8$ Hz, 1H), 7.71 (d, $J = 7.8$ Hz, 1H), 7.60 (d, $J = 7.5$ Hz, 1H), 7.07 (dd, $J = 15.0, 8.7$ Hz, 1H), 6.79 (d, $J = 15.6$ Hz, 1H), 4.93 - 4.78 (m, 1H);

[0975]

ESIMS m/z 538.9 ($[\text{M}+\text{H}]^+$); IR (박막) 3420, 1602, 1123, 746 cm^{-1} .

[0976] (E)-2-브로모-4-(3-(4-시아노-3,5-디플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)벤조산

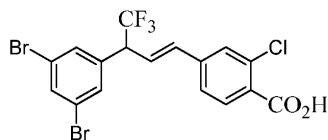


[0977]

[0978] 표제 분자를 갈색 검으로서 분리하였다.

[0979] ESIMS m/z 443.91 ($[\text{M}-\text{H}]^-$); IR (박막) 3447, 2244, 1703, 1114 cm^{-1} .

[0980] (E)-2-클로로-4-(3-(3,5-디브로모페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)벤조산



[0981]

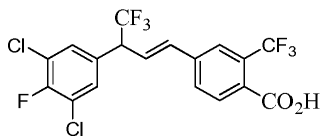
[0982] 표제 분자를 갈색 액체로서 분리하였다.

$^1\text{H NMR}$ (300 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ

13.39 (bs, 1H), 7.95-7.70 (m, 5H), 7.61 (d, $J = 8.1$ Hz, 1H), 7.07 (dd, $J = 15.6, 9.3$ Hz, 1H), 6.80 (d, $J = 15.6$ Hz, 1H), 4.84-4.78 (m, 1H); ESIMS m/z 496.77 ($[\text{M}-\text{H}]^-$); IR (박막) 3439, 2920, 1707, 1165 cm^{-1} .

[0983]

[0984] (E)-4-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-2-(트리플루오로메틸)벤조산



[0985]

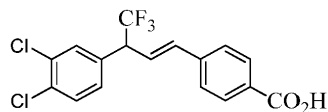
[0986] 표제 분자를 회백색 고체로서 분리하였다.

mp 140-143 $^{\circ}\text{C}$; $^1\text{H NMR}$ (400

MHz, DMSO) δ 13.60 (bs, 1H), 8.02 (s, 1H), 7.94 - 7.90 (m, 1H), 7.88 - 7.86 (m, 2H), 7.81 - 7.79 (m, 1H), 7.12 (dd, $J = 15.6, 8.8$ Hz, 1H), 6.89 (d, $J = 15.6$ Hz, 1H), 4.86 - 4.81 (m, 2H); ESIMS m/z 458.88 ($[\text{M}-\text{H}]^-$).

[0987]

[0988] (E)-4-(3-(3,4-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)벤조산



[0989]

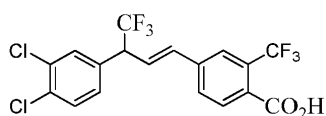
[0990] 표제 분자를 담오렌지색 결정질 고체 (875 mg, 88%)로서 분리하였다.

¹H

NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 12.35 (s, 1H), 8.08 (d, *J* = 8.4 Hz, 2H), 7.55 - 7.41 (m, 4H), 7.24 (dd, *J* = 8.3, 2.1 Hz, 1H), 6.64 (d, *J* = 15.8 Hz, 1H), 6.51 (dd, *J* = 15.9, 7.7 Hz, 1H), 4.15 (p, *J* = 8.7 Hz, 1H); ¹⁹F NMR 376 MHz, CDCl₃) δ -68.75; ESIMS *m/z* 375 ([M+H]⁺).

[0991]

[0992] (E)-4-(3-(3,4-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-2-(트리플루오로메틸)벤조산



[0993]

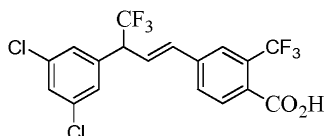
[0994] 표제 분자를 갈색 검으로서 분리하였다.

¹H NMR (400 MHz,

DMSO-*d*₆) δ 13.6 (s, 1H), 8.02 (s, 1H), 7.93 - 7.89 (m, 2H), 7.80 (d, *J* = 7.6 Hz, 1H), 7.73 (d, *J* = 8.4, Hz, 1H), 7.58 (dd, *J* = 8.4, 2.0 Hz, 1H), 7.09 (dd, *J* = 15.6, 8.8, Hz, 1H), 6.89 (d, *J* = 15.6, Hz, 1H), 4.86 - 4.81 (m, 1H); ESIMS *m/z* 441.0 ([M-H]⁻); IR (박막) 3447, 1710, 1169, 749 cm⁻¹.

[0995]

[0996] (E)-4-(3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-2-(트리플루오로메틸)벤조산



[0997]

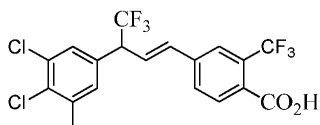
[0998] 표제 분자를 갈색 검으로서 분리하였다.

¹H NMR (300 MHz,

DMSO-*d*₆) δ 13.6 (bs, 1H), 7.98 (s, 1H), 7.91 (d, *J* = 7.8 Hz 1H), 7.75 - 7.66 (m, 1H), 7.10 (dd, *J* = 15.6, 9.0 Hz, 1H), 6.89 (d, *J* = 15.9 Hz 1H), 4.86 - 4.80 (m, 1H); ESIMS *m/z* 441.1 ([M-H]⁻); IR (박막) 3460, 2928, 1721, 1170, 764 cm⁻¹.

[0999]

[1000] (E)-4-(3-(3,4-디클로로-5-메틸페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-2-(트리플루오로메틸)벤조산

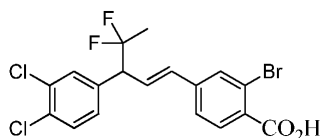


[1001]

표제 분자를 연황색 반고체로서 분리하였다.

^1H NMR (400 MHz, DMSO- d_6) δ 13.58 (bs, 1H), 8.00 (s, 1H), 7.93 (d, $J = 8.4$ Hz, 1H), 7.80 (d, $J = 8.4$ Hz, 1H), 7.72 (s, 1H), 7.55 (s, 1H), 7.07 (dd, $J = 16.4, 9.6$ Hz, 1H), 6.89 (d, $J = 15.6$ Hz, 1H), 4.78 - 4.73 (m, 1H), 2.42 (s, 3H); ESIMS m/z 455.0 ([M-H] $^-$); IR (박막) 1713, 1170, 750 cm^{-1} .

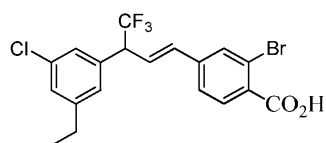
(E)-2-브로모-4-(3-(3,4-디클로로페닐)-4,4-디플루오로펜트-1-엔-1-일)벤조산



표제 분자를 갈색 검으로서 분리하였다.

^1H NMR (400 MHz, DMSO- d_6) δ 13.3 (s, 1H), 7.92 (s, 1H), 7.77 - 7.71 (m, 2H), 7.68 - 7.63 (m, 1H), 7.61 - 7.60 (m, 1H), 7.60 - 7.58 (m, 1H), 6.98 (dd, $J = 15.6, 9.2$ Hz, 1H), 6.65 (d, $J = 15.6$ Hz, 1H), 4.83 - 4.80 (m, 1H), 1.59 - 1.54 (m, 3H); ESIMS m/z 448.8 ([M-H] $^-$).

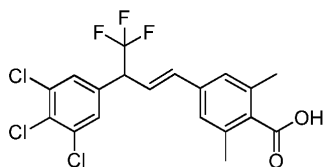
(E)-2-브로모-4-(3-(3-클로로-5-에틸페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)벤조산



표제 화합물을 갈색 액체로서 분리하였다.

^1H NMR (400 MHz, DMSO- d_6) δ 13.4 (bs, 1H), 7.97 (s, 2H), 7.91 (s, 1H), 7.74 (d, $J = 8.4$ Hz, 2H), 7.66 - 7.61 (m, 1H), 7.03 (dd, $J = 16.0, 8.4$ Hz, 1H), 6.8 (d, $J = 15.6$ Hz, 1H), 4.89 - 4.84 (m, 1H), 2.66 - 2.65 (m, 2H), 1.25 (t, $J = 9.2$ Hz, 3H); ESIMS m/z 446.8 ([M+H] $^+$).

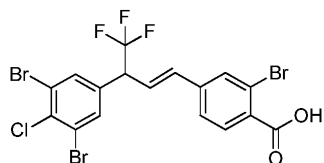
(E)-2,6-디메틸-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤조산.



표제 분자를 갈색 검으로서 분리하였다.

^1H NMR (300 MHz, DMSO- d_6) δ 13.1 (s, 1H), 7.87 (s, 2H), 7.27 (s, 2H), 6.81 (dd, $J = 15.6, 8.7$ Hz, 1H), 6.69 (d, $J = 15.3$ Hz, 1H), 4.85 - 4.79 (m, 1H), 2.27 (s, 6H); ESIMS m/z 437.01 ([M-H] $^-$); IR (박막) 3285, 1621, 1162, 954 cm^{-1} .

[1016] (E)-2-브로모-4-(3-(3,5-디브로모-4-클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)벤조산



[1017]

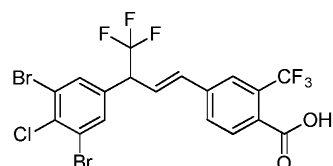
[1018] 표제 분자를 갈색 검으로서 분리하였다.

^1H NMR (300 MHz, DMSO- d_6) δ

13.40 (bs, 1H), 8.07(d, J = 7.5 Hz, 1H), 7.94-7.89 (m, 2H), 7.66 -7.60 (m, 2H), 7.10 (dd, J = 8.7, 16.0 Hz, 1H), 6.96 (d, J = 15.6 Hz, 1H), 4.82-4.80 (m, 1H); ESIMS m/z 574.7 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

[1019]

[1020] (E)-4-(3-(3,5-디브로모-4-클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-2-(트리플루오로메틸)벤조산



[1021]

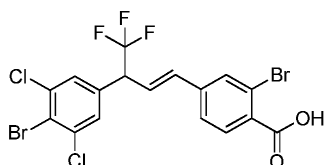
[1022] 표제 분자를 갈색 검으로서 분리하였다.

^1H NMR (300 MHz, DMSO- d_6) δ

13.36 (bs, 1H) 8.05(s, 2H), 7.95 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 7.87-7.67 (m, 2H), 7.14 (dd, J = 9.0, 15.6 Hz, 1H), 6.96 (d, J = 15.6 Hz, 1H), 4.88-4.82 (m, 1H); ESIMS m/z 564.58 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

[1023]

[1024] (E)-2-브로모-4-(3-(4-브로모-3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)벤조산



[1025]

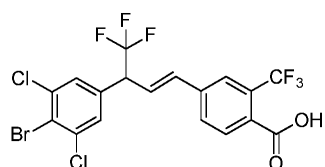
[1026] 표제 분자를 갈색 검으로서 분리하였다.

^1H NMR (300 MHz, DMSO- d_6) δ

13.40 (bs, 1H), 7.98 (s, 1H), 7.87 (s, 2H), 7.75 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 7.65 - 7.62 (m, 1H), 7.06 (dd, J = 15.9, 9.3 Hz, 1H), 6.80 (d, J = 15.9 Hz, 1H), 4.87 - 4.80 (m, 1H); ESIMS m/z 518.9 ($[\text{M}-\text{H}]^-$).

[1027]

[1028] (E)-4-(3-(4-브로모-3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-2-(트리플루오로메틸)벤조산



[1029]

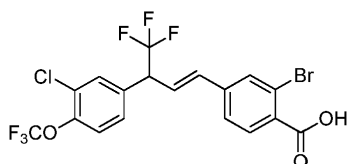
[1030] 표제 분자를 갈색 검으로서 분리하였다.

^1H NMR (300 MHz, DMSO- d_6) δ

13.6 (bs, 1H) 8.03 (s, 1H), 7.95 (d, $J = 8.4$ Hz, 1H), 7.88 (s, 2H), 7.81 (d, $J = 8.1$ Hz, 1H), 7.13 (dd, $J = 16.2, 7.5$ Hz, 1H), 6.91 (d, $J = 15.9$ Hz, 1H), 4.89 - 4.83 (m, 1H); ESIMS m/z 532.0 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

[1031]

[1032] (E)-2-브로모-4-(3-(3-클로로-4-(트리플루오로메톡시)페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)벤조산



[1033]

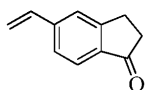
[1034] 표제 분자를 갈색 검으로서 분리하였다.

^1H NMR (400 MHz, DMSO- d_6) δ

13.36 (bs, 1H) 7.95 (s, 1H), 7.73 (d, $J = 7.6$ Hz, 1H), 7.63 (d, $J = 8.1$ Hz, 1H), 7.46 (s, 1H) 7.35-7.31(m, 2H), 7.04 (dd, $J = 16.0, 8.8$ Hz, 1H), 6.78 (d, $J = 16.4$ Hz, 1H), 4.71 - 4.68 (m, 1H); ESIMS m/z 500.8 ($[\text{M}-\text{H}]^-$).

[1035]

[1036] 실시예 20: 5-비닐-2,3-디히드로-1H-인덴-1-온 (BI1)의 제조



[1037]

[1038] 톨루엔 중 5-브로모-2,3-디히드로-1H-인덴-1-온 (5 g, 23.7 mmol)의 교반 용액에 비닐보론산 무수물 피리딘 착물 (8.55 g, 35.54 mmol), $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (0.1 g, 0.094 mmol), K_2CO_3 (22.88 g, 165.83 mmol)을 첨가하였다. 생성된 반응 혼합물을 16시간 동안 환류 하에 가열하였다. 반응 혼합물을 25℃로 냉각하고 여과하고, 여과물을 감압 하에 농축하였다. 잔류물을 EtOAc로 희석하고 물 및 염수로 세척하였다. 합한 유기 추출물을 무수 Na_2SO_4 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하였다. 수득된 잔류물을 플래쉬 칼럼 크로마토그래피 (SiO_2 , 석유 에테르 중 5% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 고체 (1.8 g, 48%)로서 수득하였다.

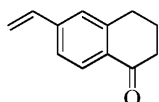
^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.74 (d, $J = 7.2$ Hz, 1H), 7.49 (br s, 1H),

7.44 (d, $J = 7.2$ Hz, 1H), 6.82 (m, 1H), 5.90 (d, $J = 7.4$ Hz, 1H), 5.42 (d, $J = 6.4$ Hz, 1H), 3.20 (m, 2H), 2.70 (m, 2H); ESIMS m/z 159.06 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

[1039]

[1040] 하기 화합물을 실시예 20에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

[1041] 6-비닐-3,4-디히드로나프탈렌-1(2H)-온 (BI2)

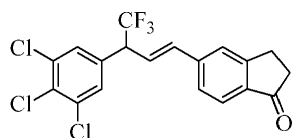


[1042]

생성물을 회백색 고체 (5 g, 48%)로서 분리하였다.

$^1\text{H NMR}$ (400 MHz, DMSO- d_6) δ 7.85 (d, J = 8.4 Hz, 1H), 7.48 (m, 2H), 6.82 (m, 1H), 6.02 (d, J = 7.4 Hz, 1H), 5.44 (d, J = 6.4 Hz, 1H), 2.95 (m, 2H), 2.60 (m, 2H), 2.00 (m, 2H); ESIMS m/z 173.14 ([M-H]); IR (박막) 1681 cm^{-1} .

실시예 21: (E)-5-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-에닐)-2,3-디히드로-1H-인덴-1-온 (BI3)의 제조

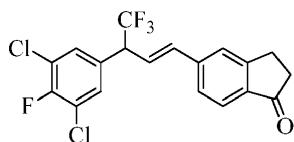


1,2-디클로로벤젠 (25 mL) 중 5-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-1,2,3-트리클로로벤젠 (4 g, 11.7 mmol), 5-비닐-2,3-디히드로-1H-인덴-1-온 (0.92 g, 5.8 mmol), CuCl (0.115 g, 1.171 mmol) 및 2,2-비피리딘 (0.053 g, 0.34 mmol)을 16시간 동안 180°C에서 가열하였다. 반응 혼합물을 25°C로 냉각하고 감압 하에 농축하였다. 잔류물을 플래시 칼럼 크로마토그래피 (SiO_2 , 석유 에테르 중 5% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 액체 (1.28 g, 25%)로서 수득하였다.

$^1\text{H NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) δ 7.76 (d, J = 7.4 Hz, 1H), 7.52 (m, 3H), 6.68 (d, J = 7.4 Hz, 1H), 6.52 (m, 1H), 4.18 (m, 1H), 3.18 (m, 2H), 2.75 (m, 2H); ESIMS m/z 419.14 ([M+H]); IR (박막) 1708.94, 1113.60, 807.77 cm^{-1} .

하기 화합물을 실시예 21에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

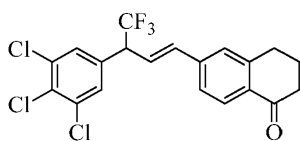
(E)-5-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-2,3-디히드로-1H-인덴-1-온 (BI4)



생성물을 갈색 반고체 (1.2 g, 16%)로서 분리하였다.

$^1\text{H NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) δ 7.76 (d, J = 7.4 Hz, 1H), 7.54 (m, 3H), 7.30 (s, 1H), 6.68 (d, J = 7.4 Hz, 1H), 6.52 (m, 1H), 4.18 (m, 1H), 3.18 (m, 2H), 2.75 (m, 2H); ESIMS m/z 400.84 ([M-H]); IR (박막) 815, 1113, 1709 cm^{-1} .

(E)-6-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-에닐)-3,4-디히드로나프탈렌-1(2H)-온 (BI5)



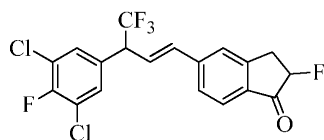
[1056] 생성물을 연황색 반고체 (1.2 g, 30%)로서 분리하였다.

^1H NMR (400

MHz, CDCl_3) δ 8.20 (d, $J = 8.0$ Hz, 1H), 7.42 (s, 2H), 7.35 (m, 1H), 7.24 (m, 2H), 6.62 (d, $J = 16$ Hz, 1H), 6.46 (m, 1H), 4.18 (m, 1H), 2.95 (m, 2H), 2.65 (m, 2H), 2.19 (m, 2H); ESIMS m/z 432.94 ([M-H]⁻); IR (박막) 1680, 1113, 808 cm^{-1} .

[1057]

[1058] 실시예 22: (E)-5-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-2-플루오로-2,3-디히드로-1H-인덴-1-온 (BI6)의 제조



[1059]

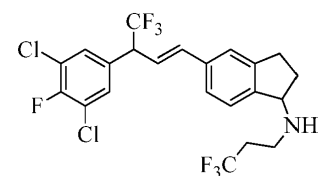
[1060] MeCN (20 mL) 중 (E)-5-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-2,3-디히드로-1H-인덴-1-온 (0.5 g, 1.24 mmol)의 교반 용액에, 셀렉트플루오르(Selectfluor)[®] (0.52 g, 1.48 mmol)를 첨가하고 반응물을 16시간 동안 환류 온도로 가열하였다. 반응 혼합물을 실온으로 냉각하고, 감압 하에 농축하고 CH_2Cl_2 로 희석하였다. 용액을 물 및 염수로 세척하고, 무수 Na_2SO_4 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 조 생성물을 수득하고 이를 플래쉬 칼럼 크로마토그래피 (SiO_2 , 100-200 메쉬; 석유 에테르 중 15% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 연황색 반고체 (0.1 g, 24%)로서 수득하였다.

^1H

NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.80 (m, 1H), 7.48 (m, 2H), 7.32 (m, 2H), 6.65 (d, $J = 16.0$ Hz, 1H), 6.54 (dd, $J = 16.0, 8.0$ Hz, 1H), 5.38 (m, 1H), 4.18 (m, 1H), 3.62 (m, 1H), 3.32 (m, 1H); ESIMS m/z 419.06 ([M-H]⁻); IR (박막) 1728, 1114, 817 cm^{-1} .

[1061]

[1062] 실시예 23: (E)-5-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-N-(3,3,3-트리플루오로프로필)-2,3-디히드로-1H-인덴-1-아민 (BC10)의 제조



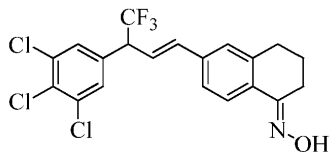
[1063]

[1064] DCE (10 mL) 중 (E)-5-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-2,3-디히드로-1H-인덴-1-온 (0.15 g, 0.35 mmol)의 교반 용액에, 냉각하면서 트리플루오로프로필 아민 (0.048 g, 0.42 mmol) 및 NaBH_3CN (0.055 g, 0.875 mmol)을 첨가하고 반응 혼합물을 16시간 동안 실온에서 교반하였다. 반응 혼합물을 DCE로 희석하고, 물 및 염수로 세척하고 무수 Na_2SO_4 상에서 건조시켰다. 감압 하에 농축하여 조 화합물을 수득하고, 이를 플래쉬 칼럼 크로마토그래피 (SiO_2 , 100-200 메쉬; 석유 에테르 중 10-15% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 무색 점착성 물질 (0.042 g, 24%)로서 수득하였다.

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.38-7.20 (m, 5H), 6.62 (d, $J = 16.0$ Hz, 1H), 6.34 (dd, $J = 16.0, 8.0$ Hz, 1H), 5.83 (br, 1H), 5.52 (m, 1H), 4.12 (m, 1H), 3.02 (m, 3H), 2.82 (m, 1H), 2.50 (m, 2H), 1.82 (m, 1H), 1.42 (m, 1H); ESIMS m/z 497.98 ([M-H]⁻); IR (박막) 3027, 1654, 815 cm^{-1} .

[1065]

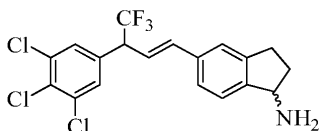
[1066] 실시예 24: 6-((E)-4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)-3,4-디히드로나프탈렌-1(2H)-온 옥심 (BI5a)의 제조



EtOH (50 mL) 중 ((E)-6-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-에닐)-3,4-디히드로나프탈렌-1(2H)-온 (0.4 g, 0.92 mmol)의 교반 용액에 히드록실아민 히드로클로라이드 (0.128 g, 1.85 mmol) 및 아세트산나트륨 (NaOAc, 0.23 g, 2.77 mmol)을 첨가하고, 반응 혼합물을 3시간 동안 환류 하에 가열하였다. 반응 혼합물을 감압 하에 농축하고, 잔류물을 물로 희석하고 EtOAc로 추출하였다. 합한 유기 추출물을 염수로 세척하고, 무수 Na_2SO_4 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 조 화합물을 수득하고, 이를 플래쉬 칼럼 크로마토그래피 (SiO_2 , 100-200 메쉬; 석유 에테르 중 10-15% EtOAc)에 의해 정제하였다. 표제 화합물을 고체 (0.3 g, 73%)로서 분리하였다.

mp 155-158 °C; ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.89 (d, J = 8.4 Hz, 1H), 7.41 (s, 2H), 7.24 (m, 1H), 7.17 (m, 1H), 6.57 (d, J = 16 Hz, 1H), 6.46 (dd, J = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.13 (m, 1H), 2.82 (m, 4H), 2.04 (m, 2H); ESIMS m/z 445.95 ($[\text{M}-\text{H}]^-$).

실시예 25: (E)-5-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-에닐)-2,3-디히드로-1H-인덴-1-아민 (BI5b)의 제조

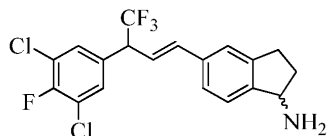


MeOH (10 mL) 중 (E)-5-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-에닐)-2,3-디히드로-1H-인덴-1-온 (1 g, 2.39 mmol)의 교반 용액에 아세트산암모늄 (NH_4OAc , 1.84 g, 23.9 mmol) 및 NaCNBH_3 (0.44 g, 7.17 mmol)를 첨가하고, 반응 혼합물을 16시간 동안 환류 하에 가열하였다. 반응 혼합물을 감압 하에 농축하고, 잔류물을 물로 희석하고 EtOAc로 추출하였다. 합한 유기 추출물을 물 및 포화 수성 NaHCO_3 용액으로 세척하고, 무수 Na_2SO_4 상에서 건조시키고, 감압 하에 농축하여 표제 화합물을 액체 (500 mg, 조 물질)로서 수득하였다.

^1H NMR (400 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ 7.85 (s, 2H), 7.40 (s, 1H), 7.30 (s, 2H), 6.71 (s, 2H), 4.78 (m, 1H), 4.2 (m, 1H), 2.80 (m, 1H), 2.73 (m, 1H), 1.60 (m, 2H); ESIMS m/z 419.02 ($[\text{M}+\text{H}]^+$); IR (박막) 2924, 1552, 1112, 807 cm^{-1} .

하기 화합물을 실시예 25에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

(E)-5-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-2,3-디히드로-1H-인덴-1-아민 (BI7)

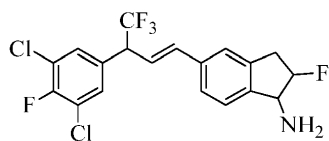


생성물을 담갈색 점착성 물질로서 분리하고, 이를 다음 단계에 그대로 사용하였다 (0.15 g, 조 화합물).

ESIMS m/z 401.97 ($[\text{M}-\text{H}]^-$).

(E)-5-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-2-플루오로-2,3-디히드로-1H-인덴

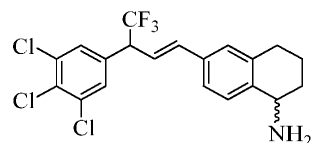
-1-아민 (BI8)



생성물을 담갈색 점착성 물질로서 분리하고, 이를 다음 단계에 그대로 사용하였다 (0.15 g, 조 화합물).

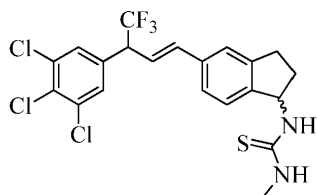
ESIMS m/z 420.15 ($[M-H]^+$).

(E)-6-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-에닐)-1,2,3,4-테트라히드로나프탈렌-1-아민 (BI9)



생성물을 연황색 액체 (500 mg, 조 물질)로서 분리하였다.

실시예 26: (E)-1-메틸-3-(5-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-에닐)-2,3-디히드로-1H-인덴-1-일)티오우레아 (BC1)의 제조

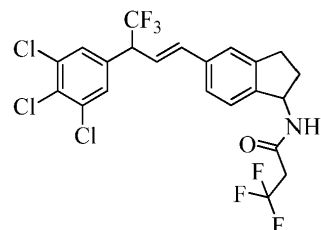


Et₂O (5 mL) 중 (E)-5-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-에닐)-2,3-디히드로-1H-인덴-1-아민 (0.1 g, 0.23 mmol)의 교반 용액에 메틸이소티오시아네이트 (0.026 g, 0.35 mmol)를 첨가하고, 혼합물을 25 °C에서 2시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 감압 하에 농축하고, 잔류물을 플래쉬 칼럼 크로마토그래피 (SiO₂, 석유 에테르 중 20% EtOAc)에 의해 정제하였다. 표제 화합물을 액체 (65 mg, 50%)로서 분리하였다.

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.39 (s, 2H), 7.25 – 7.18 (m, 3H), 6.58 (d, J = 16.0 Hz, 1H), 6.30 (dd, J = 16.0, 8.4 Hz, 1H), 5.91 – 5.70 (br, 2H), 4.05 (m, 1H), 3.05 – 2.80 (m, 6H), 2.70 (m, 1H), 1.81 (m, 1H); ESIMS m/z 492.17 ($[M+H]^+$); IR (박막) 3211, 1569, 1113, 806 cm⁻¹.

표 1에서의 화합물 BC2-BC3을 실시예 26에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

실시예 27: (E)-3,3,3-트리플루오로-N-(5-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-에닐)-2,3-디히드로-1H-인덴-1-일)프로판아미드 (BC4)의 제조



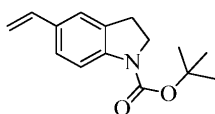
CH₂Cl₂ (10 mL) 중 (E)-5-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-에닐)-2,3-디히드로-1H-인덴-1-

아민 (0.1 g, 0.23 mmol)의 교반 용액에 트리플루오로프로피온산 (0.044 g, 0.34 mmol), EDC·HCl (0.038 g, 0.35 mmol), HOBT·H₂O (0.07 g, 0.46 mmol) 및 DIPEA (0.074 g, 0.57 mmol)를 첨가하고, 반응 혼합물을 25℃에서 16시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 CH₂Cl₂로 희석하고 물로 세척하였다. 합한 유기 층을 염수로 세척하고, 무수 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고, 감압 하에 농축하였다. 조 물질을 플래쉬 칼럼 크로마토그래피 (SiO₂, 석유 에테르 중 15% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 액체 (65 mg, 65%)로서 수득하였다.

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.39 (s, 2H), 7.25-7.20 (m, 3H), 6.34 (d, *J* = 16.0 Hz, 1H), 6.30 (dd, *J* = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 5.81 (br, 1H), 5.48 (m, 1H), 4.10 (m, 1H), 3.10 (m, 2H), 2.86-3.07 (m, 2H), 2.86 (m, 1H), 1.81 (m, 1H); ESIMS *m/z* 529.02 ([M+H]⁺); IR (박막) 3283, 1652, 1241, 811 cm⁻¹.

표 1에서의 화합물 BC5-BC9, BC11을 실시예 27에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

실시예 28: tert-부틸 5-비닐인돌린-1-카르복실레이트 (BI10)의 제조



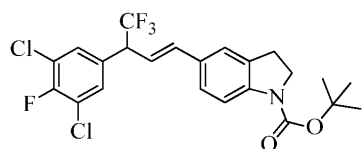
단계 1. 5-브로모-인돌린 (BI11): AcOH (10.0 mL) 중 5-브로모-1H-인돌 (2.5 g, 12.82 mmol)에, NaBH₃CN (2.38 g, 38.46 mmol)을 20분의 기간에 걸쳐 10℃에서 조금씩 첨가하였다. 그 후 반응 혼합물을 3시간 동안 주위 온도에서 교반하였다. 반응 혼합물을 물로 희석하고 Et₂O로 추출하였다. 유기 층을 포화 NaHCO₃, 물 및 염수 용액으로 세척하였다. 합한 에테르 층을 무수 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 표제 화합물을 연황색 반고체 (1.8 g, 71%)로서 수득하였다.

단계 2. tert-부틸-5-브로모인돌린-1-카르복실레이트 (BI12): MeCN (100 mL) 중 5-브로모-인돌린 (3.0 g, 15 mmol)의 교반 용액에, DMAP (0.185 g, 1.522 mmol) 및 디-tert-부틸 디카르보네이트 (3.98 g, 18.3 mmol)를 첨가하고 반응물을 16시간 동안 주위 온도에서 교반하였다. 반응 혼합물을 감압 하에 농축하여 잔류물을 수득하고 이를 Et₂O로 희석하고 물 및 염수 용액 (2X)으로 세척하였다. 합한 에테르 층을 무수 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 조 생성물을 회백색 고체로서 수득하고, 이를 추가 정제 없이 다음 단계에서 사용하였다 (3.0 g).

단계 3. tert-부틸-5-비닐인돌린-1-카르복실레이트 (BI10): DMSO (50.0 mL) 중 tert-부틸-5-브로모인돌린-1-카르복실레이트 (2.0 g, 6.73 mmol), 포타슘 비닐 트리플루오로보레이트 (2.6 g, 20.20 mmol) 및 K₂CO₃ (2.78 g, 20.2 mmol)의 교반 용액을 주위 온도에서 20분 동안 아르곤으로 탈기하였다. PdCl₂(dppf) (0.49 g, 0.67mmol)를 주위 온도에서 첨가한 다음, 반응 혼합물을 3시간 동안 100℃로 가열하였다. 반응 혼합물을 주위 온도로 냉각하고 진공하에 셀라이트® 층을 통해 여과하고 Et₂O로 세척하였다. 반응 혼합물을 Et₂O로 추출하였다. 합한 Et₂O 층을 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 조 생성물을 수득하였다. 조 화합물을 칼럼 크로마토그래피 (SiO₂, 100-200 메쉬; 2% EtOAc/ 석유 에테르로 용리)에 의해 정제하여 표제 화합물을 회백색 고체 (1.2 g, 73%)로서 수득하였다.

Mp 85.5 -88.6 °C; ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.23 (m, 3H), 6.69 (dd, *J* = 17.4, 10.8 Hz, 1H), 5.64 (d, *J* = 10.5 Hz, 1H), 5.13 (d, *J* = 10.5 Hz, 1H), 4.00 (t, *J* = 9.0 Hz, 2H), 3.10 (t, *J* = 9.0 Hz, 2H), 1.55 (bs, 9H).

실시예 29: (E)-tert-부틸 5-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)인돌린-1-카르복실레이트 (BI13)의 제조



[1103]

[1104]

1,2-디클로로벤젠 (10.0 mL) 중 tert-부틸-5-비닐인돌린-1-카르복실레이트 (1.28 g, 5.23mmol)의 교반 용액에, 5-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-1,3-디클로로-2-플루오로벤젠 (3.4 g, 10 mmol), CuCl (103 mg, 1.05 mmol) 및 2,2-비피리딘 (0.326 g, 2.092 mmol)을 첨가하고 생성된 반응 혼합물을 30분 동안 아르곤으로 탈기하고 1시간 동안 150℃로 가열하였다. 반응 혼합물을 주위 온도로 냉각하고 여과하고 여과물을 감압 하에 농축하였다. 조 화합물을 칼럼 크로마토그래피 (SiO₂, 100-200 메쉬; 2% EtOAc/ 석유 에테르)에 의해 정제하여 표제 화합물을 연황색 점착성 고체 (0.3 g, 61%)로서 수득하였다.

¹H NMR (400 MHz,

CDCl₃) δ 7.34 (d, *J* = 6.0 Hz, 2H), 7.22 (s, 2H), 7.16 (d, *J* = 8.4 Hz, 1H), 6.52 (d, *J* = 16.0

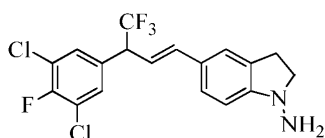
Hz, 1H), 6.21 (dd, *J* = 16.0, 7.6 Hz, 1H), 4.07 (m, 3H), 3.10 (t, *J* = 8.4 Hz, 2H), 1.55 (s, 9H);

ESIMS *m/z* 433.79 ([M-H]⁻); IR (박막) 1168, 858 cm⁻¹.

[1105]

[1106]

실시예 30: (E)-5-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)인돌린-1-아민 (BI14)의 제조



[1107]

[1108]

단계 1. (E)- 5-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)인돌린 (BI15) CH₂Cl₂ (10.0 mL) 중 (E)-tert-부틸-5-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)인돌린-1-카르복실레이트 (0.2 g, 0.4 mmol)의 교반 용액에 TFA (0.6 mL)를 첨가하고 반응물을 2시간 동안 주위 온도에서 교반하였다. 반응 혼합물을 CH₂Cl₂로 희석하고, 포화 수성 NaHCO₃, 물 및 염수 용액으로 세척하였다. 분리된 CH₂Cl₂ 층을 무수 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 조 생성물을 담갈색 점착성 물질로서 수득하고 이를 추가 정제 없이 다음 단계에서 사용하였다 (0.12 g).

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ

7.33 (d, *J* = 6.4 Hz, 2H), 7.21 (s, 1H), 7.02 (d, *J* = 8.0 Hz, 1H), 6.57 (d, *J* = 8.4 Hz, 1H), 6.49

(d, *J* = 15.6 Hz, 1H), 6.21(dd, *J* = 15.6, 8.4 Hz, 1H), 4.07 (m, 1H), 3.61 (t, *J* = 8.4 Hz, 2H),

3.05 (t, *J* = 8.4 Hz, 2H); ESIMS *m/z* 389.89 ([M+H]⁺); IR (박막) 3385, 1112, 816 cm⁻¹.

[1109]

[1110]

단계 2. 5-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-1-니트로소인돌린 (BI16): 5℃에서 진한 HCl (5.0 mL) 중 (E)-5-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)인돌린 (0.2 g, 0.5 mmol)에, 물 중 NaNO₂를 서서히 첨가하고 반응물을 2시간 동안 주위 온도에서 교반하였다. 반응 혼합물을 CH₂Cl₂로 희석하고, CH₂Cl₂ 층을 물 및 염수 용액으로 세척하였다. 분리된 CH₂Cl₂ 층을 무수 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 조 생성물을 연황색 고체로서 수득하고 이를 추가 정제 없이 다음 단계에서 사용하였다 (0.2 g).

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.33 (d, *J* = 8.4

Hz, 1H), 7.39 (m, 4H), 6.61 (d, *J* = 16.0 Hz, 1H), 6.35 (dd, *J* = 16.0, 8.4 Hz, 1H), 4.07 (m,

3H), 3.23 (t, *J* = 8.4 Hz, 2H); ESIMS *m/z* 418.82 ([M+H]⁺); IR (박막) 1488, 1112, 860

cm⁻¹.

[1111]

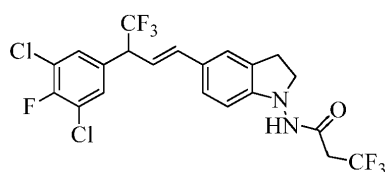
[1112]

단계 3. (E)-5-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)인돌린-1-아민 (BI14):

MeOH (10.0 mL) 중 (E)-5-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-에닐)-1-니트로소인돌린 (0.1 g, 0.2 mmol)에 물 (2.0 mL) 중 아연 분말 (77.5 mg) 및 NH_4Cl (36.9 mg, 0.69 mmol)을 첨가하였다. 반응 혼합물을 3시간 동안 주위 온도에서 교반하였다. 반응 혼합물을 CH_2Cl_2 로 희석하고 CH_2Cl_2 층을 물 및 염수 용액으로 세척하였다. 분리된 CH_2Cl_2 층을 무수 Na_2SO_4 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 조 화합물을 수득하고, 이를 칼럼 크로마토그래피 (SiO_2 , 100-200 메쉬; 2% EtOAc/ 석유 에테르로 용리)에 의해 정제하여 표제 화합물을 담갈색 점착성 물질 (0.08 g)로서 수득하였다.

ESIMS m/z 404.86 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

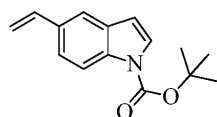
실시예 31: (E)-N-(5-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)인돌린-1-일)-3,3,3-트리플루오로프로판아미드 (BC12)의 제조



CH_2Cl_2 (10.0 mL) 중 (E)-5-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-에닐)인돌린-1-아민 (0.1 g, 0.247 mmol)의 교반 용액에 3,3,3-트리플루오로프로판산 (0.038 g, 0.297 mmol), PyBOP (0.192 g, 0.370 mmol) 및 DIPEA (0.047 g, 0.370 mmol)를 첨가하고 반응물을 18시간 동안 주위 온도에서 교반하였다. 반응 혼합물을 CH_2Cl_2 로 희석하고, 분리된 CH_2Cl_2 층을 무수 Na_2SO_4 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 조 화합물을 수득하였다. 조 화합물을 칼럼 크로마토그래피 (SiO_2 , 100-200 메쉬; 20-25% EtOAc/ 석유 에테르)에 의해 정제하여 표제 화합물을 담갈색 점착성 물질 (0.12 g, 33%)로서 수득하였다.

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.32, (d, $J = 6.0$ Hz, 2H) 7.28 (m, 1H), 7.20 (d, $J = 8.0$, 1H), 7.14 (d, $J = 8.8$, 1H), 6.70 (d, $J = 8.0$ Hz, 1H), 6.60 (m, 2H), 4.15 (m, 1H), 3.85 (m, 1H), 3.65 (m, 1H), 3.46 (m, 2H), 3.19 (m, 2H); ESIMS m/z 514.86 ($[\text{M}+\text{H}]^+$); IR (박막) 3428, 1112, 857 cm^{-1} .

실시예 32: tert-부틸-5-비닐-1H-인돌-1-카르복실레이트 (BI17)의 제조



단계 1. 5-비닐-1H-인돌 (BI18): THF/물 (9:1, 75 mL) 중 5-브로모-1H-인돌 (2.5 g, 12.82 mmol), 포타슘 비닐트리플루오로보레이트 (2.57 g, 19.2 mmol), Cs_2CO_3 (12.53 g, 38.46 mmol) 및 트리페닐포스핀 (201 mg, 0.769 mmol)의 혼합물을 20분 동안 아르곤으로 탈기한 다음, PdCl_2 (45.3 mg, 0.256 mmol)로 충전하였다. 반응 혼합물을 16시간 동안 환류 하에 가열한 다음, 주위 온도로 냉각하고, 셀라이트® 층을 통해 여과하고 EtOAc로 세척하였다. 여과물을 다시 EtOAc로 추출하고, 합한 유기 층을 물 및 염수로 세척하고, Na_2SO_4 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 조 화합물을 수득하였다. 조 화합물을 칼럼 크로마토그래피 (SiO_2 , 100-200 메쉬; 2% EtOAc/ 석유 에테르)에 의해 정제하여 표제 화합물을 담갈색 점착성 물질 (1.5 g, 83%)로서 수득하였다.

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 8.20 (br, 1H), 7.68 (s, 1H), 7.45 (s, 2H), 7.21 (m, 1H), 6.90 (dd, $J = 16.0$, 10.8 Hz, 1H), 6.55 (m, 1H), 5.75 (d, $J = 10.5$ Hz, 1H), 5.21 (d, $J = 10.5$ Hz, 1H); ESIMS m/z 142.05 ($[\text{M}-\text{H}]$).

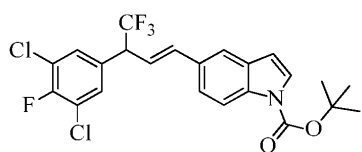
단계 2. tert-부틸-5-비닐-1H-인돌-1-카르복실레이트 (BI17): MeCN (20 mL) 중 5-비닐-1H-인돌 (0.7 g, 4.89

mmol)의 교반 용액에 DMAP (59.65 mg, 0.489 mmol) 및 디-tert-부틸 디카르보네이트 (1.38 g, 6.36 mmol)를 첨가하고, 반응물을 3시간 동안 주위 온도에서 교반하였다. 반응 혼합물을 감압 하에 농축하여 잔류물을 수득하고 이를 CH_2Cl_2 로 희석하고 물 및 염수 용액으로 세척하였다. 합한 CH_2Cl_2 층을 무수 Na_2SO_4 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 조 화합물을 수득하였다. 조 화합물을 칼럼 크로마토그래피 (SiO_2 , 100-200 메쉬; 2% EtOAc/ 석유 에테르)에 의해 정제하여 표제 화합물을 회백색 반고체 (0.7 g, 59%)로서 수득하였다.

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ

8.15 (d, $J = 8.0$ Hz, 1H), 7.60 (s, 2H), 7.30 (d, $J = 8.4$ Hz, 1H), 7.21 (m, 1H), 6.90 (dd, $J = 16.0, 10.8$ Hz, 1H), 6.59 (s, 1H), 5.75 (d, $J = 10.5$ Hz, 1H), 5.21 (d, $J = 10.5$ Hz, 1H), 1.65 (s, 9H); ESIMS m/z 242.10 ($[\text{M}-\text{H}]^-$); IR (박막) 1630 cm^{-1} .

실시예 33: (E)-tert-부틸 5-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-1H-인돌-1-카르복실레이트 (BI19)의 제조

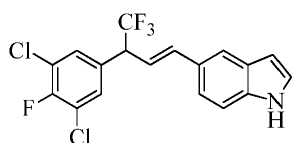


1,2-디클로로벤젠 (10.0 mL) 중 tert-부틸 5-비닐-1H-인돌-1-카르복실레이트 (0.65 g, 2.67 mmol)의 교반 용액에 5-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-1,3-디클로로-2-플루오로벤젠 (1.74 g, 5.37 mmol), CuCl (53 mg, 0.537 mmol) 및 2,2-비피리딘 (167 mg, 1.07 mmol)을 첨가하였다. 생성된 반응 혼합물을 30분 동안 아르곤으로 탈기하고 2시간 동안 150°C 로 가열하였다. 반응 혼합물을 주위 온도로 냉각하고 여과하고, 여과물을 감압 하에 농축하였다. 조 화합물을 칼럼 크로마토그래피 (SiO_2 , 100-200 메쉬; 2% EtOAc/ 석유 에테르)에 의해 정제하여 표제 화합물을 담갈색 점착성 물질 (0.25 g, 10%)로서 수득하였다.

^1H NMR (400

MHz, CDCl_3) δ 8.20 (d, $J = 8.0$ Hz, 1H), 7.60 (m, 2H), 7.39 (m, 3H), 6.69 (d, $J = 16.0$ Hz, 1H), 6.55 (d, $J = 10.5$ Hz, 1H), 6.36 (dd, $J = 16.0, 8.0$ Hz, 1H), 4.10 (m, 1H), 1.65 (s, 9H); ESIMS m/z 485.91 ($[\text{M}-\text{H}]^-$); IR (박막) $1165, 854\text{ cm}^{-1}$.

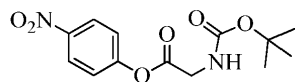
실시예 34: (E)-5-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-1H-인돌 (BI20)의 제조



CH_2Cl_2 (10.0 mL) 중 (E)-tert-부틸 5-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-1H-인돌-1-카르복실레이트 (0.2 g, 0.40 mmol)의 교반 용액에 TFA (70 mg, 0.61 mmol)를 첨가하고 반응물을 2시간 동안 주위 온도에서 교반하였다. 반응 혼합물을 CH_2Cl_2 로 희석하고 포화 NaHCO_3 용액, 물 및 염수 용액으로 세척하였다. 분리된 CH_2Cl_2 층을 무수 Na_2SO_4 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 표제 화합물을 담갈색 고체 (0.2 g, 97%)로서 수득하였다.

mp $132.9-138.8^\circ\text{C}$; ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 11.19 (br, 1H), 8.20 (d, $J = 8.0$ Hz, 1H), 7.60 (m, 2H), 7.39 (m, 3H), 6.69 (d, $J = 16.0$ Hz, 1H), 6.55 (d, $J = 10.5$ Hz, 1H), 6.36 (dd, $J = 16.0, 8.0$ Hz, 1H), 4.82 (m, 1H); ESIMS m/z 387.98 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

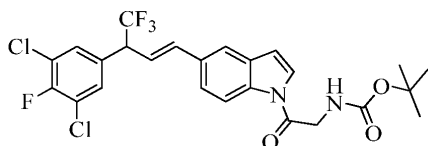
실시예 35: 4-니트로페닐 2-((tert-부톡시카르보닐)아미노)아세테이트 (BI21)의 제조



CH₂Cl₂ (20.0 mL) 중 4-니트로페놀 (1.0 g, 7.19 mmol)의 교반 용액에 N-Boc 글리신 (1.38 g, 7.91 mmol) 및 EDC HCl (2.05 g, 10.785 mmol)을 첨가하고 반응물을 24시간 동안 주위 온도에서 교반하였다. 반응 혼합물을 CH₂Cl₂로 희석하고 물 및 포화 염수 용액으로 세척하였다. 분리된 CH₂Cl₂ 층을 무수 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 표제 화합물을 담갈색 점착성 물질로서 수득하고 이를 추가 정제 없이 다음 단계에서 사용하였다 (1.1 g).

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 8.29 (d, *J* = 9.2 Hz, 2H), 7.33 (d, *J* = 8.8 Hz, 2H), 5.07 (br, 1H), 4.20 (s, 2H), 1.47 (s, 9H); ESIMS *m/z* 296.27 ([M+H]⁺).

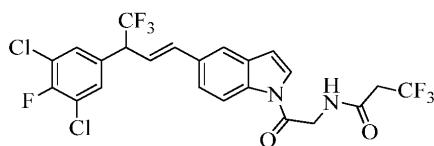
실시예 36: (E)-tert-부틸 2-(5-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-1H-인돌-1-일)-2-옥소에틸)카르바메이트 (BI22)의 제조



MeCN (5.0 mL) 중 (E)-5-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-1H-인돌 (0.1 g, 0.258 mmol)의 교반 용액에 4-니트로페닐 2-((tert-부톡시카르보닐)아미노)아세테이트 (0.114 g, 0.387 mmol), KF (0.03 g, 0.516 mmol), 18-크라운-6-에테르 (0.075 g, 0.283 mmol) 및 DIPEA (0.0332 g, 0.258 mmol)를 첨가하고 반응물을 16시간 동안 주위 온도에서 교반하였다. 반응 혼합물을 농축하여 잔류물을 수득하고 이를 CH₂Cl₂로 희석하고 물 및 염수 용액으로 세척하였다. 분리된 CH₂Cl₂ 층을 무수 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 조 표제 화합물을 담갈색 점착성 물질로서 수득하고 이를 추가 정제 없이 다음 단계에서 사용하였다 (0.1 g).

ESIMS *m/z* 545.23 ([M+H]⁺).

실시예 37: (E)-N-(2-(5-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-1H-인돌-1-일)-2-옥소에틸)-3,3,3-트리플루오로프로판아미드 (BC13)의 제조



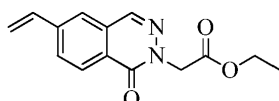
단계 1. (E)-2-아미노-1-(5-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-1H-인돌-1-일)에탄논 (BI23): CH₂Cl₂ (5.0 mL) 중 (E)-tert-부틸 2-(5-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-1H-인돌-1-일)-2-옥소에틸카르바메이트 (0.05 g, 0.09 mmol)의 교반 용액에 TFA (0.01 mL)를 첨가하고 반응물을 16시간 동안 주위 온도에서 교반하였다. 반응 혼합물을 CH₂Cl₂로 희석하고 포화 NaHCO₃ 용액, 물 및 염수 용액으로 세척하였다. 분리된 CH₂Cl₂ 층을 무수 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 조 표제 화합물을 수득하고 이를 추가 정제 없이 다음 단계에서 사용하였다 (50 mg).

단계 2. (E)-N-(2-(5-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-1H-인돌-1-일)-2-옥소에틸)-3,3,3-트리플루오로프로판아미드 (BC13): CH₂Cl₂ (5.0 mL) 중 (E)-2-아미노-1-(5-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-1H-인돌-1-일)에탄논 (0.04 g, 0.09 mmol)의 교반 용액에 3,3,3-트리플루오로프로판산 (17.5 mg, 0.136 mmol), PyBOP (70 mg, 0.135 mmol) 및 DIPEA (29 mg, 0.225 mmol)를 첨가하고 반응물을 16시간 동안 주위 온도에서 교반하였다. 반응 혼합물을 CH₂Cl₂로 희석하고 포화 NaHCO₃ 용액, 물 및 염수 용액으로 세척하였다. 분리된 CH₂Cl₂ 층을 무수 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 조 표제 화합물을 수득하고 이를 추가 정제 없이 다음 단계에서 사용하였다 (50 mg).

mmol)를 첨가하고 반응물을 16시간 동안 주위 온도에서 교반하였다. 반응 혼합물을 CH_2Cl_2 로 희석하고, CH_2Cl_2 층을 물 및 포화 염수 용액으로 세척하였다. 분리된 CH_2Cl_2 층을 무수 Na_2SO_4 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 조 화합물을 수득하고, 이를 칼럼 크로마토그래피 (SiO_2 , 100-200 메쉬; 10% EtOAc/ 석유 에테르)에 의해 정제하여 표제 화합물을 회백색 고체 (30 mg, 60%)로서 수득하였다.

mp 121-126 °C; ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 8.33 (br, 1H), 7.59 (s, 1H), 7.45 (m, 4H), 6.72 (d, $J = 3.6$ Hz, 3H), 6.39 (m, 1H), 4.71 (t, $J = 7.2$ Hz, 2H), 4.15 (m, 1H), 3.51 (m, 1H), 3.28 (m, 1H); ESIMS m/z 553.06 ($[\text{M}-\text{H}]^-$).

실시예 38: 에틸 2-(1-옥소-6-비닐프탈라진-2(1H)-일)아세테이트 (BI24)의 제조



단계 1. 5-브로모-3-히드록시이소인돌린-1-온 (BI25): Zn 분말 (1.73 g, 26.154 mmol), 황산구리(II) 오수화물 (0.02 g, 0.08 mmol) 및 2M 수성 NaOH (27 mL)의 혼합물을 0°C로 냉각하였다. 5-브로모이소인돌린-1,3-디온 (5 g, 22 mmol)을 30분의 기간에 걸쳐 동일 온도에서 첨가하였다. 반응 혼합물을 0°C에서 30분 동안 및 주위 온도에서 3시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 여과하고 여과물을 진한 HCl로 중화시켰다. 반응 혼합물을 에탄올로 희석하고 EtOAc로 추출하였다. 합한 EtOAc 층을 Na_2SO_4 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 조 표제 화합물을 갈색 고체로서 수득하고, 이를 추가 정제 없이 다음 단계에서 사용하였다 (1.3 g).

mp 258-261°C; ^1H NMR (400 MHz, DMSO- d_6) δ 9.03 (br, 1H), 7.81 (m, 2H), 7.69 (m, 1H), 6.44 (m, 1H), 5.88 (d, $J = 9.3$ Hz, 1H); ESIMS m/z 225.83 ($[\text{M}-\text{H}]^-$); IR (박막) 1684, 3246, 606 cm^{-1} .

단계 2. 6-브로모프탈라진-1(2H)-온 (BI26): 물 중 5-브로모-3-히드록시이소인돌린-1-온 (1.0 g, 4.40 mmol)의 교반 용액에, 히드라진 수화물 (0.45 g, 8.80 mmol)을 첨가하고 5시간 동안 95°C로 가열하였다. 반응 혼합물을 주위 온도로 냉각하고, 여과하고 Et₂O 및 펜탄 (1:1)으로 세척하여 표제 화합물을 백색 고체로서 수득하고 이를 추가 정제 없이 다음 단계에서 사용하였다 (0.5 g).

ESIMS m/z 225.15 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

단계 3. 6-비닐프탈라진-1(2H)-온 (BI27): DMSO (2 mL) 중 6-브로모프탈라진-1(2H)-온 (0.25 g, 1.11 mmol), 포타슘 비닐 트리플루오로보레이트 (0.446 g, 3.33 mmol) 및 K_2CO_3 (0.46 g, 3.33 mmol)의 용액을 주위 온도에서 20분 동안 아르곤으로 탈기하였다. $\text{PdCl}_2(\text{dppf})$ (0.04 g, 0.055 mmol)를 주위 온도에서 첨가하고, 반응 혼합물을 2시간 동안 80°C로 가열하였다. 반응 혼합물을 주위 온도로 냉각하고 진공하에 셀라이트® 층을 통해 여과하고 EtOAc로 세척하였다. 반응 혼합물을 EtOAc로 추출하고 합한 EtOAc 층을 Na_2SO_4 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 조 생성물을 수득하였다. 조 화합물을 칼럼 크로마토그래피 (SiO_2 , 100-200 메쉬; 50% EtOAc/ 석유 에테르)에 의해 정제하여 표제 화합물을 갈색 고체 (0.12 g, 63%)로서 수득하였다.

^1H NMR (400 MHz, DMSO- d_6) δ 13.61 (br, 1H), 8.33 (m, 1H), 8.19 (m, 1H), 8.01 (m, 2H), 6.97 (m, 1H), 6.15 (m, 1H), 5.56 (d, $J = 10.8$ Hz, 1H); ESIMS m/z 172.93 ($[\text{M}+\text{H}]^+$); IR (박막) 1748, 1655, 3241 cm^{-1} .

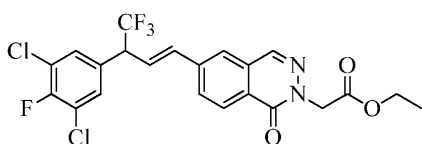
단계 4. 에틸 2-(1-옥소-6-비닐프탈라진-2(1H)-일)아세테이트 (BI24): DMF (5.0 mL) 중 6-비닐프탈라진-1(2H)-온 (0.5 g, 2.90 mmol)의 교반 용액에 Cs_2CO_3 (0.94 g, 2.90 mmol)을 첨가하고 반응물을 10분 동안 교반하였다. 에틸 브로모아세테이트 (0.48 g, 2.90 mmol)를 주위 온도에서 반응 혼합물에 첨가하고 반응물을 주위 온도에서 8시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 희석하고 EtOAc로 추출하고, EtOAc 층을 물 및 염수 용액

(2X)으로 세척하였다. 분리된 EtOAc 층을 무수 Na_2SO_4 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 조 생성물을 수득하였다. 조 화합물을 칼럼 크로마토그래피 (SiO_2 , 100-200 메쉬; 25% EtOAc/ 석유 에테르)에 의해 정제하여 표제 화합물을 갈색 고체 (0.34 g, 45%)로서 수득하였다.

^1H NMR (400 MHz,

DMSO-d_6) δ 8.45 (m, 1H), 8.24 (m, 1H), 8.04 (m, 2H), 7.01 (m, 1H), 6.17 (d, $J = 2.1$ Hz, 1H), 5.56 (d, $J = 10.8$ Hz, 1H), 4.92 (s, 2H), 4.19 (m, 2H), 1.23 (m, 3H). ESIMS m/z 259.10 ($[\text{M}+\text{H}]^+$); IR (박막) 1750, 1660 cm^{-1} .

실시예 39: (E)-에틸 2-(6-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-1-옥소프탈라진-2(1H)-일)아세테이트 (BI28)의 제조

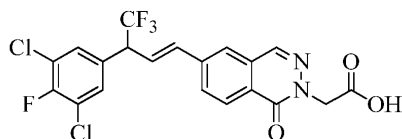


1,2-디클로로벤젠 (1.0 mL) 중 에틸-2-(1-옥소-6-비닐프탈라진-2(1H)-일 아세테이트 (0.07 g, 0.27mmol)의 교반 용액에 5-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-1,3-디클로로-2-플루오로벤젠 (0.17 g, 0.54 mmol), CuCl (0.005 g, 0.05 mmol) 및 2,2-비피리딜 (0.016 g, 0.10 mmol)을 첨가하고 생성된 반응 혼합물을 30분 동안 아르곤으로 탈기하고 12시간 동안 180°C 로 가열하였다. 반응 혼합물을 주위 온도로 냉각하고 여과하고 여과물을 감압 하에 농축하였다. 조 화합물을 칼럼 크로마토그래피 (SiO_2 , 100-200 메쉬; 10-15% EtOAc/ 석유 에테르)에 의해 정제하여 표제 화합물을 갈색 고체 (40 mg, 29%)로서 수득하였다.

^1H NMR (400 MHz,

DMSO-d_6) δ 8.40 (d, $J = 8.4$ Hz, 1H), 7.84 (d, $J = 1.5$ Hz, 1H), 7.65 (s, 1H), 7.37 (d, $J = 6.3$ Hz, 2H), 6.76 (d, $J = 16.0$ Hz, 1H), 6.59 (dd, $J = 16.0, 8.0$ Hz, 1H), 4.96 (s, 2H), 4.29 (m, 3H), 1.31 (t, $J = 7.2$ Hz, 3H); ESIMS m/z 503.0 ($[\text{M}+\text{H}]^+$); IR (박막) 1660, 1114, 817 cm^{-1} .

실시예 40: (E)-2-(6-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-1-옥소프탈라진-2(1H)-일)아세트산 (BI29)의 제조

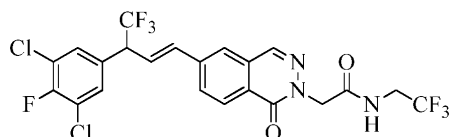


HCl (0.5 mL) 및 AcOH (0.5 mL) 중 (E)-에틸-2-(6-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-1-옥소프탈라진-2(1H)-일)아세테이트 (0.04 g, 0.07mmol)의 용액을 3시간 동안 100°C 로 가열하였다. 용매를 감압 하에 제거하고 잔류물을 물로 희석하였다. 수성 층을 EtOAc로 추출하고 분리된 EtOAc 층을 무수 Na_2SO_4 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 조 화합물을 수득하였다. 조 화합물을 Et_2O -펜탄 혼합물로 연화 처리하여 표제 화합물을 갈색 고체 (0.03 g)로서 수득하였다.

^1H NMR (400

MHz, DMSO-d_6) δ 13.0 (br s, 1H), 8.43 (m, 1H), 8.23 (d, $J = 8.1$ Hz, 1H), 8.14 (m, 2H), 7.91 (m, 2H), 7.16 (dd, $J = 16.0, 8.0$ Hz, 1H), 6.99 (d, $J = 16.0$ Hz, 1H), 4.96 (m, 3H); ESIMS m/z 473.0 ($[\text{M}-\text{H}]^-$); IR (박막) 1629, 1168, 817 cm^{-1} .

실시예 41: (E)-2-(6-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-1-옥소프탈라진-2(1H)-일)-N-(2,2,2-트리플루오로에틸)아세트아미드 (BC14)의 제조



[1164]

[1165]

CH_2Cl_2 (20.0 mL) 중 (E)-2-(6-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔일)-1-옥소프탈라진-2(1H)-일)아세트산 (0.15 g, 0.31 mmol)의 교반 용액에 주위 온도에서 2,2,2,-트리플루오로에탄아민 (0.03 g, 0.31mmol), PyBOP (0.17 g, 0.34 mmol) 및 DIPEA (0.15 ml, 0.93 mmol)를 첨가하고, 반응물을 18시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 CH_2Cl_2 로 희석하고 3N HCl (2 x 20 mL), NaHCO_3 (2 x 20 mL) 및 염수 용액 (2x)으로 세척하였다. 분리된 CH_2Cl_2 층을 무수 Na_2SO_4 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 조 화합물을 수득하였다. 조 화합물을 칼럼 크로마토그래피 (SiO_2 , 100-200 메쉬; 20-25% EtOAc/ 석유 에테르)에 의해 정제하여 표제 화합물을 갈색 고체 (0.11 g)로서 수득하였다.

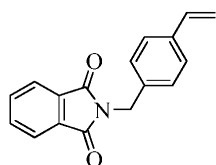
mp

172-175 °C; ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 8.83 (t, J = 6.6 Hz, 1H), 8.42 (t, J = 14.7 Hz, 1H), 8.22 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 8.13 (t, J = 6.3 Hz, 1H), 7.98-7.86 (m, 2H), 7.16 - 7.07 (m, 1H), 7.01 - 6.93 (m, 1H), 4.96 - 4.81 (m, 3H), 4.00 - 3.88 (m, 2H); ESIMS m/z 554.0 ($[\text{M}-\text{H}]^-$).

[1166]

[1167]

실시예 42: 2-(4-비닐벤질)이소인돌린-1,3-디온 (CI1)의 제조



[1168]

[1169]

DMF (100 mL) 중 1-(클로로메틸)-4-비닐벤젠 (10 g, 66 mmol)의 교반 용액에 포타슘 프탈이미드 (13.3 g, 72.1 mmol)를 첨가하고, 생성된 반응 혼합물을 16시간 동안 70°C에서 가열하였다. 반응 혼합물을 물로 희석하고 CHCl_3 으로 추출하였다. 합한 CHCl_3 층을 염수로 세척하고, Na_2SO_4 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하였다. MeOH로부터 재결정화하여 표제 화합물을 회백색 고체 (8 g, 46%)로서 수득하였다.

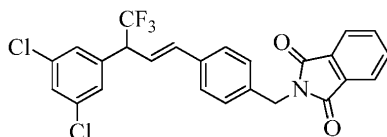
^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.83 (m, 2H),

7.71 (m, 2H), 7.39 (m, 4H), 6.65 (dd, J = 17.6, 10.8 Hz, 1H), 5.72 (d, J = 17.6 Hz, 1H), 5.21 (d, J = 10.8 Hz, 1H), 4.82 (s, 2H); GCMS m/z 263.2 ($[\text{M}]^+$); IR (박막) 3420, 1133, 718 cm^{-1} .

[1170]

[1171]

실시예 43: (E)-2-(4-(3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)벤질)이소인돌린-1,3-디온 (CI2)의 제조



[1172]

[1173]

출발 물질로서의 2-(4-비닐벤질)이소인돌린-1,3-디온 및 1-(1-브로모에틸)-3,5-디클로로벤젠과 함께 실시예 10의 절차를 사용하여, 표제 화합물을 회백색 고체 (0.3 g, 40-50%)로서 단리하였다.

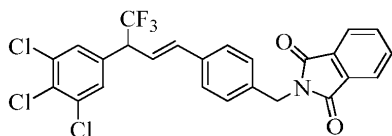
mp 142-145 °C; ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3)

δ 7.86 (m, 2H), 7.74 (m, 2H), 7.42 (m, 2H), 7.36 (m, 3H), 7.27 (m, 2H), 6.58 (d, J = 16.0 Hz, 1H), 6.32 (dd, J = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.82 (s, 2H), 4.05 (m, 1H); ESIMS m/z 488.17 ($[\text{M}-\text{H}]^-$).

[1174]

하기 화합물을 실시예 43에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

(E)-2-(4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤질)이소인돌린-1,3-디온 (CI3)



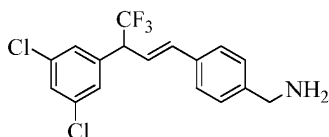
표제 화합물을 회백색 고체 (0.3 g, 56%)로서 분리하였다.

mp 145–146 °C;

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.86 (m, 2H), 7.74 (m, 2H), 7.42–7.31 (m, 6H), 6.58 (d, *J* = 16.0 Hz, 1H), 6.53 (dd, *J* = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.82 (s, 2H), 4.05 (m, 1H); ESIMS *m/z* 522.2 ([M-H]⁺); IR (박막) 1716, 1110, 712 cm⁻¹.

마찬가지로, 화합물 CI4–CI5 (표 1)를 실시예 43에 개시된 절차에 따라 제조할 수 있었다.

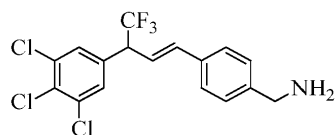
실시예 44: (E)-4-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)페닐)메탄아민 (CI6)의 제조



EtOH 중 (E)-2-(4-(3-(3,5-디클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤질)-이소인돌린-1,3-디온 (1.2 g, 2.45 mmol)의 교반 용액에 히드라진 수화물 (0.61 g, 12 mmol)을 첨가하고, 생성된 반응 혼합물을 1시간 동안 90°C에서 가열하였다. 반응 혼합물을 여과하고, 여과물을 농축하였다. 잔류물을 CH₂Cl₂에 용해시키고, 염수로 세척하고, Na₂SO₄ 상에서 건조시키고, 감압 하에 농축하여 조 표제 화합물을 점착성 액체 (0.9 g)로서 수득하고 이를 추가 정제 없이 사용하였다.

하기 화합물을 실시예 44에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

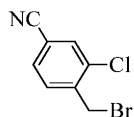
(E)-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)페닐)메탄아민 (CI7)



표제 화합물을 분리하고 추가 정제 없이 사용하였다.

마찬가지로, 화합물 CI8–CI9 (표 1)를 실시예 44에 개시된 절차에 따라 제조할 수 있었다.

실시예 45: 4-(브로모메틸)-3-클로로벤조니트릴 (CI10)의 제조



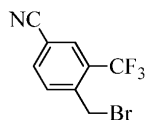
아르곤 분위기 하에 CCl₄ (50 mL) 중 3-클로로-4-메틸벤조니트릴 (5 g, 25.4 mmol)의 교반 용액에 NBS (5.16 g, 29 mmol)를 첨가하고, 혼합물을 30분 동안 탈기하였다. 여기에 AIBN (0.3 g, 1.8 mmol)을 첨가하고, 생성된 반응 혼합물을 4시간 동안 환류 하에 가열하였다. 반응 혼합물을 주위 온도로 냉각하고, 물로 세척하고, CH₂Cl₂로 추출하였다. 합한 CH₂Cl₂ 층을 염수로 세척하고, Na₂SO₄ 상에서 건조시키고, 감압 하에 농축하였다. 조 화합물을 플래쉬 칼럼 크로마토그래피 (SiO₂, 100–200 메쉬; n-헥산 중 5% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을

백색 고체 (4.8 g, 68%)로서 수득하였다.

mp 87–88 °C; ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.71 (s, 1H), 7.59 (s, 2H), 4.60 (s, 2H); ESIMS m/z 229.77 ($[\text{M}+\text{H}]^+$); IR (박막) 2235, 752, 621 cm^{-1} .

하기 화합물을 실시예 45에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

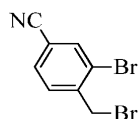
4-(브로모메틸)-3-(트리플루오로메틸)벤조니트릴 (CI11)



표제 화합물을 회백색 점착성 물질 (5 g, 66%)로서 분리하였다.

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.96 (s, 1H), 7.86 (d, $J = 8.0$ Hz, 1H), 7.76 (d, $J = 8.0$ Hz, 1H), 4.62 (s, 2H); ESIMS m/z 262.11 ($[\text{M}-\text{H}]^-$); IR (박막) 2236, 1132, 617 cm^{-1} .

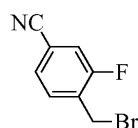
3-브로모-4-(브로모메틸)벤조니트릴 (CI12)



표제 화합물을 회백색 고체 (5 g, 67%)로서 분리하였다.

mp 82–83 °C; ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.90 (s, 1H), 7.61 (m, 2H), 4.62 (s, 2H); EIMS m/z 272.90; IR (박막) 2229, 618 cm^{-1} .

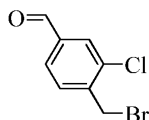
4-(브로모메틸)-3-플루오로벤조니트릴 (CI13)



표제 화합물을 회백색 고체 (2 g, 60%)로서 분리하였다.

mp 79–81 °C; ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.54 (t, $J = 8.0$ Hz, 1H), 7.48 (dd, $J = 8.0$ Hz, 8.0, 1H), 7.38 (dd, $J = 5$ Hz, 1H), 4.5 (s, 2H); EIMS m/z 215.

실시예 46: 4-(브로모메틸)-3-클로로벤조알데히드 (CI14)의 제조



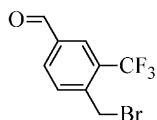
0°C에서 톨루엔 (50 mL) 중 4-(브로모메틸)-3-클로로벤조니트릴 (4.8 g, 17 mmol)의 교반 용액에 DIBAL-H (톨루엔 중 1.0 M 용액; 23.9 mL)를 적가하고, 반응 혼합물을 1시간 동안 0°C에서 교반하였다. 물 중 10 M HCl (5 mL)을 반응 혼합물이 백색 슬러리로 될 때까지 첨가한 다음 추가의 1 N HCl (20 mL)을 첨가하였다. 유기 층을 수집하고 수성 층을 CHCl_3 으로 추출하였다. 합한 유기 층을 Na_2SO_4 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하였다.

조 화합물을 플래쉬 칼럼 크로마토그래피 (SiO₂, 100-200 메쉬; n-헥산 중 5% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 백색 고체 (3.8 g, 80%)로서 수득하였다.

mp 64-66 °C; ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 10.00 (s, 1H), 7.92 (s, 1H), 7.78 (d, *J* = 8.0 Hz, 1H), 7.64 (d, *J* = 8.0 Hz, 1H), 4.60 (s, 2H); ESIMS *m/z* 232.78 ([M+H]⁺).

하기 화합물을 실시예 46에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

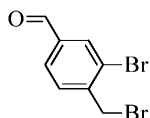
4-(브로모메틸)-3-(트리플루오로메틸)벤즈알데히드 (CI15)



표제 화합물을 연황색 저융점 고체 (5 g, 60%)로서 분리하였다.

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 10.09 (s, 1H), 8.19 (s, 1H), 8.09 (m, 1H), 7.81 (m, 1H), 4.61 (s, 2H); ESIMS *m/z* 265.04 ([M-H]⁻); IR (박막) 1709, 1126, 649 cm⁻¹.

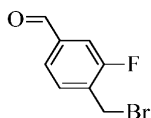
3-브로모-4-(브로모메틸)벤즈알데히드 (CI16)



표제 화합물을 연황색 고체 (5 g, 62%)로서 분리하였다.

mp 94-95 °C; ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 9.96 (s, 1H), 8.05 (s, 1H), 7.81 (d, *J* = 8.0 Hz, 1H), 7.62 (d, *J* = 8.0 Hz, 1H), 4.60 (s, 2H); EIMS *m/z* 275.90 ([M]⁺).

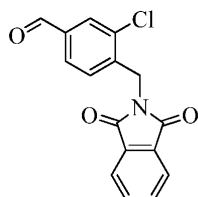
4-(브로모메틸)-3-플루오로벤즈알데히드 (CI17)



표제 화합물을 회백색 고체 (5 g, 61%)로서 분리하였다.

mp 43-45 °C; ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 9.1 (s, 1H), 7.54 (t, *J* = 8 Hz, 1H), 7.48 (d, *J* = 8 Hz, 1H), 7.38 (d, *J* = 5 Hz, 1H), 4.5 (s, 2H); EIMS *m/z* 216 ([M]⁺).

실시예 47: 3-클로로-4-((1,3-디옥소이소인돌린-2-일)메틸)벤즈알데히드 (CI18)의 제조



[1225] DMF (40 mL) 중 4-(브로모메틸)-3-클로로벤즈알데히드 (3.8 g, 14 mmol)의 교반 용액에 포타슘 프탈이미드 (3.54 g, 19.14 mmol)를 첨가하고, 혼합물을 6시간 동안 60℃에서 가열하였다. 반응 혼합물을 주위 온도로 냉각하고 물 (100 mL)로 희석하였다. 수득된 고체를 여과에 의해 분리하고 진공하에 건조시켜 표제 화합물을 백색 고체 (2.8 g, 60%)로서 수득하였다.

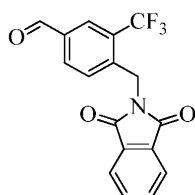
mp 123–126 °C; ¹H NMR (400 MHz,

CDCl₃) δ 9.95 (s, 1H), 8.21 (s, 1H), 7.91 (m, 3H), 7.80 (m, 2H), 7.20 (m, 1H), 5.05 (s, 2H);

ESIMS *m/z* 298.03 ([M-H]⁺).

[1226] 하기 화합물을 실시예 47에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

[1228] 4-((1,3-디옥소이소인돌린-2-일)-3-(트리플루오로메틸)벤즈알데히드 (CI19)

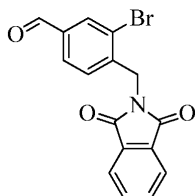


[1229] 표제 화합물을 회백색 고체 (1 g, 62%)로서 분리하였다.

mp 142–143 °C; ¹H

NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 10.05 (s, 1H), 8.15 (s, 1H), 7.91 (m, 2H), 7.80 (m, 3H), 7.27 (m, 1H), 5.19 (s, 2H); ESIMS *m/z* 332.03 ([M-H]⁺).

[1231] 3-브로모-4-((1,3-디옥소이소인돌린-2-일)메틸)벤즈알데히드 (CI20)

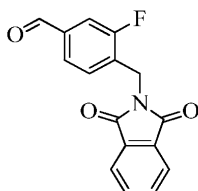


[1233] 표제 화합물을 회백색 고체 (0.5 g, 64%)로서 분리하였다.

mp 159–161 °C;

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 9.95 (s, 1H), 8.21 (s, 1H), 7.91 (m, 3H), 7.80 (m, 2H), 7.20 (m, 1H), 5.05 (s, 2H); ESIMS *m/z* 314.00 ([M-CHO]⁺).

[1235] 4-((1,3-디옥소이소인돌린-2-일)-3-플루오로벤즈알데히드 (CI21)



[1237]

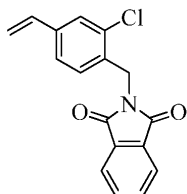
[1238] 표제 화합물을 백색 고체 (2 g, 60%)로서 분리하였다.

mp 154–156 °C; ¹H

NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 9.95 (s, 1H), 7.9 (m, 2H), 7.75 (m, 2H), 7.6 (m, 2H), 7.5 (t, *J* = 7.6 Hz, 1H), 5.05 (s, 2H); EIMS *m/z* 283.1 ([M]⁺).

[1239]

[1240] 실시예 48: 2-(2-클로로-4-비닐벤질)이소인돌린-1,3-디온 (CI22)의 제조



[1241]

[1242] 1,4-디옥산 (30 mL) 중 3-클로로-4-((1,3-디옥소이소인돌린-2-일)메틸)벤즈알데히드 (2.8 g, 8.2 mmol)의 교반 용액에 주위 온도에서 K₂CO₃ (1.68 g, 12.24 mmol) 및 메틸 트리페닐 포스포늄 브로마이드 (4.37 g, 12.24 mmol)를 첨가하였다. 이어서, 생성된 반응 혼합물을 18시간 동안 100°C에서 가열하였다. TLC에 의해 반응이 완료된 것으로 여겨진 후, 반응 혼합물을 주위 온도로 냉각하고 여과하고, 수득된 여과물을 감압 하에 농축하였다. 잔류물을 플래쉬 크로마토그래피 (SiO₂, 100–200 메쉬; n-헥산 중 20% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 백색 고체 (1.94 g, 70%)로서 수득하였다.

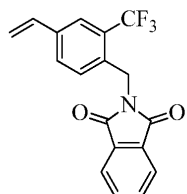
mp 141–143 °C; ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ

7.85 (m, 2H), 7.70 (m, 2H), 7.41 (m, 1H), 7.21 (m, 2H), 6.71 (dd, *J* = 17.6, 10.8 Hz, 1H), 5.72 (d, *J* = 17.6 Hz, 1H), 5.23 (d, *J* = 10.8 Hz, 1H), 4.92 (s, 2H); ESIMS *m/z* 298.10 ([M-H][−]).

[1243]

[1244] 하기 화합물을 실시예 48에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

[1245] 2-(2-(트리플루오로메틸)-4-비닐벤질)이소인돌린-1,3-디온 (CI23)



[1246]

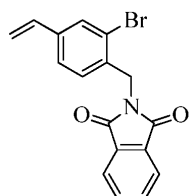
[1247] 표제 화합물을 담갈색 고체 (0.5 g, 60%)로서 분리하였다.

mp 134–135 °C;

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.92 (m, 2H), 7.80 (m, 2H), 7.71 (s, 1H), 7.46 (d, *J* = 8.0 Hz, 1H), 7.16 (d, *J* = 8.0 Hz, 1H), 6.65 (m, 1H), 5.80 (d, *J* = 17.8 Hz, 1H), 5.19 (d, *J* = 10.8 Hz, 1H), 5.09 (s, 2H); ESIMS *m/z* 332.10 ([M+H]⁺).

[1248]

[1249] 2-(2-브로모-4-비닐벤질)이소인돌린-1,3-디온 (CI24)



[1250]

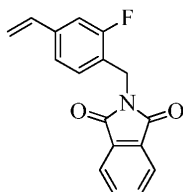
[1251] 표제 화합물을 회백색 고체 (0.5 g, 62%)로서 단리하였다.

mp 126–128 °C;

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.92 (m, 2H), 7.79 (m, 2H), 7.62 (s, 1H), 7.21 (m, 1H), 7.16 (d, *J* = 8.0 Hz, 1H), 6.62 (m, 1H), 5.72 (d, *J* = 17.8 Hz, 1H), 5.15 (d, *J* = 10.8 Hz, 1H), 4.95 (s, 2H); EIMS *m/z* 341.10 ([M]⁺).

[1252]

[1253] 2-(2-플루오로-4-비닐벤질)이소인돌린-1,3-디온 (CI25)



[1254]

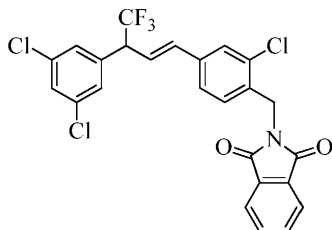
[1255] 표제 화합물을 백색 고체 (0.5 g, 61%)로서 단리하였다.

mp 140–142 °C; ¹H

NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.85 (m, 2H), 7.72 (m, 2H), 7.25 (m, 1H), 7.11 (m, 2H), 6.63 (m, 1H), 5.80 (d, *J* = 17.6 Hz, 1H), 5.28 (d, *J* = 10.8 Hz, 1H), 4.92 (s, 2H); EIMS *m/z* 282.08.

[1256]

[1257] 실시예 49: (E)-2-(2-클로로-4-(3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)벤질)이소인돌린-1,3-디온 (CI26)의 제조



[1258]

[1259] 1,2-디클로로벤젠 (25 mL) 중 2-(2-클로로-4-비닐벤질)이소인돌린-1,3-디온 (2.0 g, 6.51 mmol)의 교반 용액에 1-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-3,5-디클로로벤젠 (3.48 g, 11.36 mmol), CuCl (112 mg, 1.13 mmol) 및 2,2-비피리딜 (0.35 g)을 첨가하였다. 생성된 반응 혼합물을 30분 동안 아르곤으로 탈기한 다음 24시간 동안 180°C에서 교반하였다. TLC에 의해 반응이 완료된 것으로 여겨진 후, 반응 혼합물을 주위 온도로 냉각하고 여과하고, 여과물을 감압 하에 농축하였다. 잔류물을 플래쉬 크로마토그래피 (SiO₂, 100–200 메쉬; n-헥산 중 25–30% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 고체 (1.3 g, 50%)로서 수득하였다.

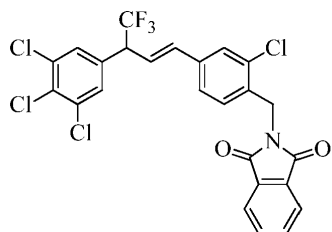
mp 141–143 °C; ¹H

NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.92 (m, 2H), 7.79 (m, 2H), 7.42 (m, 2H), 7.24 (m, 2H), 7.20 (m, 2H), 6.54 (d, *J* = 16.0 Hz, 1H), 6.34 (dd, *J* = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 5.00 (s, 2H), 4.10 (m, 1H); ESIMS *m/z* 524.07 ([M+H]⁺).

[1260]

[1261] 하기 화합물을 실시예 49에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

[1262] (E)-2-(2-클로로-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤질)이소인돌린-1,3-디온 (CI27)

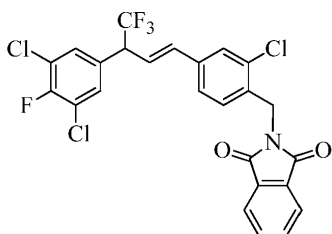


표제 화합물을 연백색 고체 (0.2 g, 55%)로서 단리하였다.

mp 128–129 °C;

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.92 (m, 2H), 7.79 (m, 2H), 7.42 (m, 3H), 7.22 (m, 2H), 6.52 (d, $J = 16.0$ Hz, 1H), 6.32 (dd, $J = 16.0, 8.0$ Hz, 1H), 5.00 (s, 2H), 4.05 (m, 1H); ESIMS m/z 557.99 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

(E)-2-(2-(2-클로로-4-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)벤질)이소인돌린-1,3-디온 (CI28)

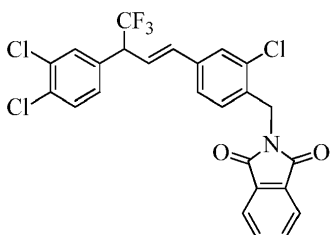


표제 화합물을 회백색 고체 (0.2 g, 54%)로서 단리하였다.

mp 177–180 °C;

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.90 (m, 2H), 7.77 (m, 2H), 7.42 (s, 1H), 7.32 (d, $J = 8.0$ Hz, 2H), 7.21 (m, 2H), 6.52 (d, $J = 16.0$ Hz, 1H), 6.32 (dd, $J = 16.0, 8.0$ Hz, 1H), 5.00 (s, 2H), 4.05 (m, 1H); ESIMS m/z 540.08 ($[\text{M}-\text{H}]^-$); IR (박막) 1716 cm^{-1} .

(E)-2-(2-(2-클로로-4-(3-(3,4-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)벤질)이소인돌린-1,3-디온 (CI29)

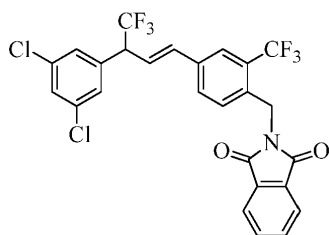


표제 화합물을 회백색 고체 (0.2 g, 59%)로서 단리하였다.

^1H NMR (400

MHz, CDCl_3) δ 7.89 (m, 2H), 7.76 (m, 2H), 7.47 (m, 3H), 7.21 (m, 3H), 6.50 (d, $J = 16.0$ Hz, 1H), 6.32 (dd, $J = 16.0, 7.6$ Hz, 1H), 4.97 (s, 2H), 4.11 (m, 1H); ESIMS m/z 522.27 ($[\text{M}-\text{H}]^-$); IR (박막) 3064, 1717, 1111, 715 cm^{-1} .

(E)-2-(4-(3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-2-(트리플루오로메틸)-벤질)이소인돌린-1,3-디온 (CI30)

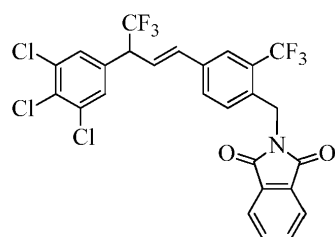


표제 화합물을 회백색 고체 (0.2 g, 54%)로서 단리하였다.

mp 141–142 °C;

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) 7.94 (m, 2H), 7.80 (m, 2H), 7.69 (s, 1H), 7.44 (m, 1H), 7.38 (m, 1H), 7.24 (m, 2H), 7.19 (m, 1H), 6.60 (d, *J* = 16.0 Hz, 1H), 6.39 (dd, *J* = 16.0, 7.6 Hz, 1H), 5.10 (s, 2H), 4.11 (m, 1H); ESIMS *m/z* 556.00 ([M-H]⁺).

(E)-2-(4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)-2-(트리플루오로메틸)-벤질)-이소인돌린-1,3-디온 (CI31)

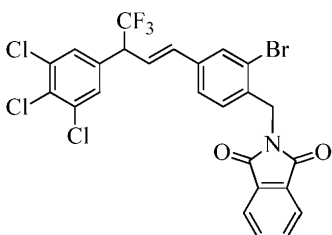


표제 화합물을 회백색 고체 (0.2 g, 56%)로서 단리하였다.

mp 130–132 °C;

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.94 (m, 2H), 7.80 (m, 2H), 7.69 (s, 1H), 7.44 (m, 3H), 7.19 (m, 1H), 6.61 (d, *J* = 16.0 Hz, 1H), 6.38 (dd, *J* = 16.0, 7.6 Hz, 1H), 5.10 (s, 2H), 4.12 (m, 1H); ESIMS *m/z* 589.57 ([M-2H]⁺).

(E)-2-(2-브로모-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤질)-이소인돌린-1,3-디온 (CI32)

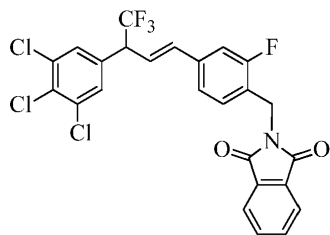


표제 화합물을 연황색 고체 (0.2 g, 55%)로서 단리하였다.

mp 160–162 °C;

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.92 (m, 2H), 7.80 (m, 2H), 7.62 (s, 1H), 7.39 (s, 2H), 7.24 (m, 1H), 7.16 (m, 1H), 6.52 (d, *J* = 16.0 Hz, 1H), 6.32 (dd, *J* = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.98 (s, 2H), 4.12 (m, 1H); ESIMS *m/z* 599.78 ([M-H]⁺).

(E)-2-(2-플루오로-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤질)-이소인돌린-1,3-디온 (CI33)



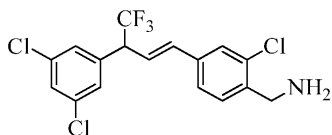
표제 화합물을 회백색 고체 (0.2 g, 55%)로서 분리하였다.

mp 72–74 °C; ^1H

NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.88 (m, 2H), 7.74 (m, 2H), 7.38 (s, 2H), 7.34 (m, 1H), 7.18 (m, 2H), 6.54 (d, $J = 16.0$ Hz, 1H), 6.32 (dd, $J = 16.0, 8.0$ Hz, 1H), 4.91 (s, 2H), 4.08 (m, 1H); ESIMS m/z 539.89 ($[\text{M}-\text{H}]^-$); IR (박막) 1773 cm^{-1} .

마찬가지로, 화합물 **CI34-CI41** (표 1)을 **실시예 49**에 개시된 절차에 따라 제조할 수 있었다.

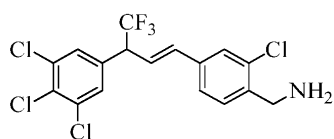
실시예 50: (E)-2-(2-클로로-4-(3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)페닐)메탄아민 (CI42)의 제조



EtOH 중 (E)-2-(2-클로로-4-(3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)벤질)이소인돌린-1,3-디온 (0.4 g, 0.76 mmol)의 교반 용액에 히드라진 수화물 (0.38 g, 7.6 mmol)을 첨가하고, 생성된 반응 혼합물을 2시간 동안 80 °C에서 가열하였다. 반응 혼합물을 여과하고, 여과물을 농축하였다. 잔류물을 CH_2Cl_2 에 용해시키고, 염수로 세척하고, Na_2SO_4 상에서 건조시키고, 감압 하에 농축하여 표제 화합물을 점착성 액체 (0.3 g)로서 수득하고, 이를 추가 정제 없이 다음 단계에 사용하였다.

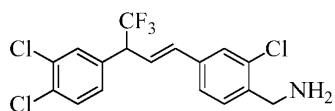
하기 화합물을 **실시예 50**에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

(E)-2-(2-클로로-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)페닐)-메탄아민 (CI43)



본 반응에서 수득된 생성물을 추가 정제 없이 다음 단계에 사용하였다.

(E)-2-(2-클로로-4-(3-(3,4-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)페닐)-메탄아민 (CI44)

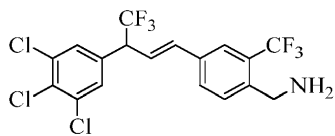


본 반응에서 수득된 생성물을 추가 정제 없이 다음 단계에 사용하였다.

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.48 (d, $J = 8.4$ Hz, 2H), 7.39 (m, 2H), 7.23 (m, 2H), 6.52 (d, $J = 16.0$ Hz, 1H), 6.38 (dd, $J = 16.0, 7.6$ Hz, 1H), 4.12 (m, 1H), 3.90 (s, 2H); ESIMS m/z 391.90 ($[\text{M}-\text{H}]^-$); IR (박막) $3370, 3280, 1111, 817\text{ cm}^{-1}$.

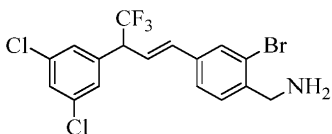
(E)-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)-2-(트리플루오로메틸)-페닐)메탄아민

(CI45)



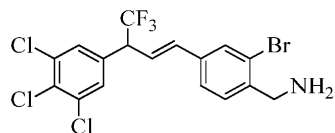
표제 화합물을 점착성 물질로서 분리하였다. 본 반응에서 수득된 생성물을 추가 정제 없이 다음 단계에 사용하였다.

(E)-(2-브로모-4-(3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)페닐)-메탄아민 (CI46)



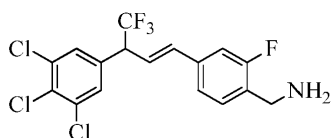
표제 화합물을 점착성 물질로서 분리하였다. 본 반응에서 수득된 생성물을 추가 정제 없이 다음 단계에 사용하였다.

(E)-(2-브로모-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)페닐)-메탄아민 (CI47)



표제 화합물을 점착성 물질로서 분리하였다. 본 반응에서 수득된 생성물을 추가 정제 없이 다음 단계에 사용하였다.

(E)-(2-플루오로-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)페닐)-메탄아민 (CI48)



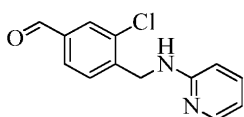
표제 화합물을 점착성 물질로서 분리하였다.

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ

7.40 (s, 2H), 7.33 (t, *J* = 7.6 Hz, 1H), 7.13 (m, 2H), 6.56 (d, *J* = 16.0 Hz, 1H), 6.33 (dd, *J* = 16.0, 7.6 Hz, 1H), 4.08 (m, 1H), 3.90 (s, 2H); ESIMS *m/z* 413.84 ([M+H]⁺); IR (박막) 3368, 3274, 1114, 808 cm⁻¹.

마찬가지로, 화합물 CI49-CI57 (표 1)을 실시예 50에 개시된 절차에 따라 제조할 수 있었다.

실시예 51: 3-클로로-4-((피리딘-2-일아미노)메틸)벤즈알데히드 (CI58)의 제조

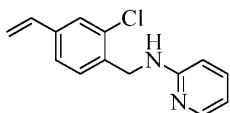


N,N-디메틸아세트아미드 (DMA; 20 mL) 중 4-(브로모메틸)-3-클로로벤즈알데히드 (2 g, 9 mmol)의 교반 용액에 K₂CO₃ (2.36 g, 17.16 mmol) 및 2-아미노피리딘 (0.84 g, 8.58 mmol)을 첨가하고, 반응 혼합물을 4시간 동안 주위 온도에서 교반하였다. 반응 혼합물을 물로 희석하고 EtOAc로 추출하였다. 합한 유기 층을 염수로

세척하고, Na₂SO₄ 상에서 건조시키고, 감압 하에 농축하였다. 잔류물을 플래쉬 칼럼 크로마토그래피 (SiO₂, 100-200 메쉬; n-헥산 중 20% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 회백색 고체 (1.05 g, 50%)로서 수득하였다.

mp 122-123 °C; ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 9.94 (s, 1H), 8.11 (s, 1H), 7.88 (s, 1H), 7.72 (d, *J* = 4.8 Hz, 1H), 7.62 (d, *J* = 5.7 Hz, 1H), 7.4 (m, 1H), 6.64 (d, *J* = 3.9 Hz, 1H), 6.38 (d, *J* = 6.3 Hz, 1H), 5.04 (br s, 1H), 4.71 (s, 2H); ESIMS *m/z* 246.97 ([M+H]⁺).

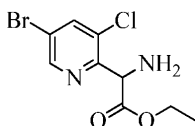
실시예 52: N-(2-클로로-4-비닐벤질)피리딘-2-아민 (CI59)의 제조



1,4-디옥산 (20 mL) 중 3-클로로-4-((피리딘-2-일아미노)메틸)벤즈알데히드 (1 g, 4. mmol)의 교반 용액에 주위 온도에서 K₂CO₃ (0.84 g, 6.09 mmol) 및 메틸 트리페닐 포스포늄 브로마이드 (2.17 g, 6.09 mmol)를 첨가하였다. 이어서, 생성된 반응 혼합물을 18시간 동안 100°C에서 가열하였다. TLC에 의해 반응이 완료된 것으로 여겨진 후, 반응 혼합물을 주위 온도로 냉각하고 여과하고, 수득된 여과물을 감압 하에 농축하였다. 잔류물을 플래쉬 크로마토그래피 (SiO₂, 100-200 메쉬; n-헥산 중 10% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 백색 고체 (0.5 g, 50%)로서 수득하였다.

mp 119-121 °C; ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 8.12 (s, 1H), 7.42 - 7.40 (m, 3H), 7.26 (s, 1H), 6.66 (m, 2H), 6.36 (d, *J* = 6.3 Hz, 1H), 5.75 (d, *J* = 13.2 Hz, 1H), 4.92 (br s, 1H), 4.60 (s, 2H); ESIMS *m/z* 245.05 ([M+H]⁺).

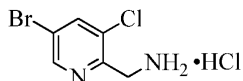
실시예 53: 에틸 2-아미노-2-(5-브로모-3-클로로피리딘-2-일)아세테이트 (CI60)의 제조



에틸 2-(디페닐메틸렌아미노)아세테이트 (10.2 g, 38.2 mmol)를 0°C에서 DMF (50 mL) 중 수소화나트륨 (NaH; 3.18 g, 133.52 mmol)에 첨가하고, 혼합물을 30분 동안 교반하였다. 여기에 5-브로모-2,3-디클로로피리딘 (12.9 g, 57.23 mmol)을 첨가하고, 반응 혼합물을 주위 온도에서 3시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 2 N HCl 용액으로 켄칭한 다음 주위 온도에서 4시간 동안 교반하였다. 혼합물을 EtOAc로 추출하였다. 합한 EtOAc 층을 염수로 세척하고, 무수 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고, 감압 하에 농축하였다. 플래쉬 칼럼 크로마토그래피 (헥산 중 20-30% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 액체 (1.3 g, 20%)로서 수득하였다.

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 8.52 (s, 1H), 7.89 (s, 1H), 5.09 (s, 1H), 4.23 (m, 2H), 2.27 (br s, 2H), 1.26 (m, 3H); ESIMS *m/z* 293.05 ([M+H]⁺); IR (박막) 3381, 3306, 1742, 759, 523 cm⁻¹.

실시예 54: (5-브로모-3-클로로피리딘-2-일)메탄아민 히드로클로라이드 (CI61)의 제조

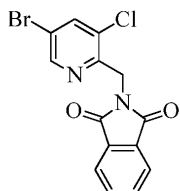


3 N HCl (25 mL) 중 에틸 2-아미노-2-(5-브로모-3-클로로피리딘-2-일)아세테이트 (0.5 g, 1.7 mmol)의 교반 용액을 4시간 동안 환류 하에 가열하였다. 반응 혼합물을 Et₂O 및 물로 세척하였다. 합한 에테르 층을 감압 하에 농축하여 표제 화합물을 회백색 고체 (400 mg, 65%)로서 수득하였다.

¹H NMR (400

MHz, CDCl₃) δ 8.78 (s, 1H), 8.70 (br s, 2H), 8.45 (s, 1H), 4.56 (m, 2H); ESIMS *m/z* 221.15 ([M+H]⁺).

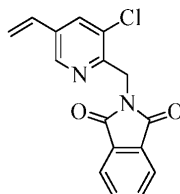
실시예 55: 2-((5-브로모-3-클로로피리딘-2-일)메틸)이소인돌린-1,3-디온 (CI62)의 제조



톨루엔 (40 mL) 중 (5-브로모-3-클로로피리딘-2-일)메탄아민 히드로클로라이드 (0.3 g, 1.4 mmol)의 교반 용액에 TEA (0.41 g, 4.08 mmol) 및 프탈산 무수물 (0.24 g, 1.63 mmol)을 첨가하고, 반응 혼합물을 2시간 동안 환류 하에 가열하였다. 반응 혼합물을 감압 하에 농축하고, 잔류물을 물로 희석하고 EtOAc로 추출하였다. 합한 EtOAc 층을 염수로 세척하고, 무수 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고, 감압 하에 농축하였다. 잔류물을 칼럼 크로마토그래피 (헥산 중 20-30% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 백색 고체 (0.25 g, 65%)로서 수득하였다.

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 8.78 (s, 1H), 8.45 (s, 1H), 7.88 (m, 2H), 7.74 (m, 2H), 4.56 (m, 2H); ESIMS *m/z* 349 ([M-H]⁻); IR (박막) 3307, 1665, 1114, 813 cm⁻¹.

실시예 56: 2-((3-클로로-5-비닐피리딘-2-일)메틸)이소인돌린-1,3-디온 (CI63)의 제조

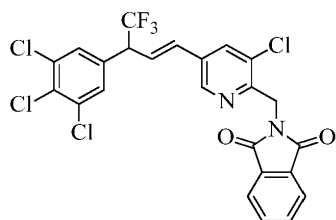


톨루엔 (10 mL) 중 2-((5-브로모-3-클로로피리딘-2-일)메틸)이소인돌린-1,3-디온 (0.23 g, 0.65 mmol)의 교반 용액에 Pd(PPh₃)₄ (3.7 mg, 0.003 mmol), K₂CO₃ (0.269 g, 1.95 mmol) 및 비닐 보론산 무수물 피리딘 착물 (0.78 g, 3.28 mmol)을 첨가하고, 반응 혼합물을 16시간 동안 환류 하에 가열하였다. 반응 혼합물을 여과하고, 여과물을 물 및 염수로 세척하고, 무수 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고, 감압 하에 농축하였다. 플래쉬 칼럼 크로마토그래피 (헥산 중 20-30% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 회백색 고체 (0.2 g, 65%)로서 수득하였다.

¹H NMR

(400 MHz, CDCl₃) δ 8.30 (s, 1H), 7.91 (m, 2H), 7.77 (m, 3H), 7.72 (m, 1H), 6.63 (m, 1H), 5.79 (d, *J* = 16.0 Hz, 1H), 5.39 (d, *J* = 16.0 Hz, 1H), 5.12 (s, 2H); ESIMS *m/z* 299.20 ([M+H]⁺).

실시예 57: (E)-2-((3-클로로-5-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로-페닐)부트-1-엔-1-일)피리딘-2-일)메틸)이소인돌린-1,3-디온 (CI64)의 제조



[1342]

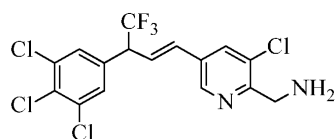
1,2-디클로로벤젠 (10 mL) 중 2-((3-클로로-5-비닐피리딘-2-일)메틸)이소인돌린-1,3-디온 (0.35 g, 1.17 mmol)의 교반 용액에 5-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-1,2,3-트리클로로벤젠 (0.8 g, 2.3 mmol), CuCl (23 mg, 0.12 mmol), 2,2-비피리딘 (0.073 g, 0.234 mmol)을 첨가하고, 반응 혼합물을 16시간 동안 180℃에서 가열하였다. 반응 혼합물을 감압 하에 농축하고 칼럼 크로마토그래피 (헥산 중 20-30% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 액체 (0.4 g, 50%)로서 수득하였다.

mp 79–82 °C; ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 8.27 (s, 1H), 7.91 (m, 2H), 7.77 (m, 3H), 7.36 (s, 2H), 6.51 (d, J = 15.6 Hz, 1H), 6.32 (dd, J = 15.6, 8.0 Hz, 1H), 5.30 (s, 2H), 4.13 (m, 1H); ESIMS m/z 559 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

[1343]

[1344]

실시예 58: (E)-2-((3-클로로-5-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)피리딘-2-일)메탄아민 (CI65)의 제조



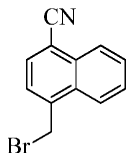
[1345]

[1346]

EtOH (5 mL) 중 (E)-2-((3-클로로-5-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)피리딘-2-일)메틸)이소인돌린-1,3-디온 (200 mg, 0.358 mmol)의 교반 용액에 히드라진 수화물 (89.6 mg, 1.79 mmol)을 첨가하고, 반응 혼합물을 2시간 동안 환류 하에 가열하였다. 반응 혼합물을 감압 하에 농축하고, 잔류물을 CH_2Cl_2 에 용해시켰다. 유기 층을 물 및 염수로 세척하고, 무수 Na_2SO_4 상에서 건조시키고, 감압 하에 농축하여 표제 화합물을 고체 (100 mg)로서 수득하였다. 본 반응에서 수득된 생성물을 추가 정제 없이 다음 단계에 사용하였다.

[1347]

실시예 59: 4-(브로모메틸)-1-나프토니트릴 (CI66)의 제조



[1348]

[1349]

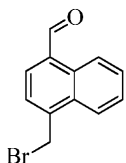
아르곤 분위기 하에 CCl_4 (50 mL) 중 4-메틸-1-나프토니트릴 (5 g, 30 mmol)의 교반 용액에 NBS (6.06 g, 34.09 mmol)를 첨가하고, 반응 혼합물을 30분 동안 탈기하였다. AIBN (0.3 g, 2.1 mmol)을 첨가하고, 생성된 반응 혼합물을 4시간 동안 환류 하에 가열하였다. 반응 혼합물을 주위 온도로 냉각하고, 물로 희석하고 CH_2Cl_2 (3 x 100 mL)로 추출하였다. 합한 CH_2Cl_2 층을 염수로 세척하고, Na_2SO_4 상에서 건조시키고, 감압 하에 농축하였다. 잔류물을 플래쉬 칼럼 크로마토그래피 (SiO_2 , 100-200 메쉬; n-헥산 중 5% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 백색 고체 (3.8 g, 52%)로서 수득하였다.

mp 131–133 °C; ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 8.33 (m, 1H), 8.24 (m, 1H), 7.88 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 7.78 (m, 2H), 7.62 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 4.95 (s, 2H); ESIMS m/z 245.92 ($[\text{M}+\text{H}]^+$); IR (박막) 2217 cm^{-1} .

[1350]

[1351]

실시예 60: 4-(브로모메틸)-1-나프탈데히드 (CI67)의 제조



[1352]

[1353]

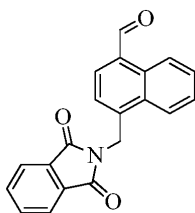
0℃에서 톨루엔 (100 mL) 중 4-(브로모메틸)-1-나프토니트릴 (8 g, 33 mmol)의 교반 용액에 DIBAL-H (톨루엔

중 1.0 M 용액; 43 mL)를 적가하고, 반응 혼합물을 1시간 동안 0℃에서 교반하였다. 물 중 3 N HCl (50 mL)을 혼합물이 백색 슬러리로 될 때까지 혼합물에 첨가한 다음 추가의 1 N HCl (20 mL)을 첨가하였다. 유기 층을 수집하고 수성 층을 EtOAc (3 x100 mL)로 추출하였다. 합한 유기 층을 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하였다. 플래쉬 칼럼 크로마토그래피 (SiO₂, 100-200 메쉬; 석유 에테르 중 5% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 백색 고체 (7 g, 88%)로서 수득하였다.

mp 115–116 °C; ¹H NMR

(400 MHz, CDCl₃) δ 10.41 (s, 1H), 9.35 (m, 1H), 8.22 (m, 1H), 7.90 (d, *J* = 8.0 Hz, 1H), 7.75 (m, 3H), 4.95 (s, 2H); ESIMS *m/z* 248.88 ([M+H]⁺).

실시예 61: 4-((1,3-디옥소이소인돌린-2-일)메틸)-1-나프탈알데히드 (CI68)의 제조

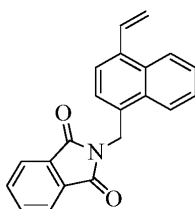


DMF (100 mL) 중 4-(브로모메틸)-1-나프탈알데히드 (7 g, 28. mmol)의 교반 용액에 포타슘 프탈이미드 (7.3 g, 39.5 mmol)를 첨가하고, 혼합물을 2시간 동안 85℃에서 가열하였다. 반응 혼합물을 주위 온도로 냉각하고 물 (100 mL)로 희석하였다. 수득된 고체를 여과에 의해 분리하고 진공하에 건조시켜 표제 화합물을 백색 고체 (8.8 g, 98%)로서 수득하였다.

mp 190–192 °C; ¹H NMR (400 MHz,

CDCl₃) δ 10.39 (s, 1H), 9.25 (m, 1H), 8.41 (m, 1H), 8.10 (d, *J* = 8.0 Hz, 1H), 7.95 (m, 4H), 7.80 (m, 4H), 7.61 (m, 4H), 5.39 (s, 2H); ESIMS *m/z* 316.09 ([M+H]⁺); IR (박막) 1708 cm⁻¹.

실시예 62: 2-((4-비닐나프탈렌-1-일)메틸)이소인돌린-1,3-디온 (CI69)의 제조

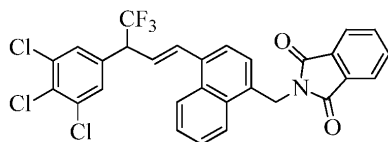


1,4-디옥산 (100 mL) 중 4-((1,3-디옥소이소인돌린-2-일)메틸)-1-나프탈알데히드 (9 g, 28.5 mmol)의 교반 용액에 주위 온도에서 K₂CO₃ (6 g, 42.8 mmol) 및 메틸 트리페닐 포스포늄 브로마이드 (15.3 g, 35.7 mmol)를 첨가하였다. 반응 혼합물을 14시간 동안 100℃에서 가열한 다음 주위 온도로 냉각하였다. 반응 혼합물을 여과하고, 수득된 여과물을 감압 하에 농축하였다. 플래쉬 크로마토그래피 (SiO₂, 100-200 메쉬; 석유 에테르 중 20% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 백색 고체 (6 g, 67%)로서 수득하였다.

mp 146–147 °C; ¹H

NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 8.35 (m, 2H), 7.95 (m, 4H), 7.65 (m, 4H), 7.39 (m, 1H), 5.81 (m, 1H), 5.45 (m, 1H), 5.21 (s, 2H); ESIMS *m/z* 314.13 ([M+H]⁺).

실시예 63: (E)-2-((4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)나프탈렌-1-일)메틸)이소인돌린-1,3-디온 (CI70)의 제조



[1364]

[1365]

1,2-디클로로벤젠 (15 mL) 중 2-((4-비닐나프탈렌-1-일)메틸)이소인돌린-1,3-디온 (1.5 g, 4.79 mmol)의 교반 용액에 1-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-3,4,5-트리클로로벤젠 (3.2 g, 9.5 mmol), CuCl (24 mg, 0.24 mmol) 및 2,2-비피리딘 (0.149 g, 0.95 mmol)을 첨가하고, 생성된 반응 혼합물을 30분 동안 아르곤으로 탈기한 다음 14시간 동안 180℃에서 교반하였다. TLC에 의해 반응이 완료된 것으로 여겨진 후, 반응 혼합물을 주위 온도로 냉각하고 여과하고, 여과물을 감압 하에 농축하였다. 플래쉬 크로마토그래피 (SiO₂, 100-200 메쉬; 석유 에테르 중 25-30% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 회백색 고체 (1.5 g, 56%)로서 수득하였다.

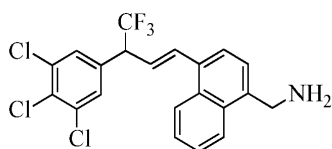
mp

158-160 °C; ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 8.40 (m, 1H), 7.89 (m, 2H), 7.74 (m, 2H), 7.64 (m, 2H), 7.58 (m, 2H), 7.46 (s, 2H), 7.36 (m, 2H), 6.31 (m, 1H), 5.30 (s, 2H), 4.21 (m, 1H); ESIMS *m/z* 572.08 ([M-H]).

[1366]

[1367]

실시예 64: (E)-(4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)나프탈렌-1-일)메탄아민 (CI71)의 제조



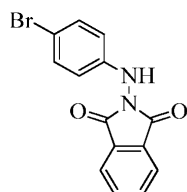
[1368]

[1369]

EtOH 중 (E)-2-((4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)나프탈렌-1-일)메틸)이소인돌린-1,3-디온 (0.4 g, 0.7 mmol)의 교반 용액에 히드라진 수화물 (0.18 g, 3.5 mmol)을 첨가하고, 생성된 반응 혼합물을 2시간 동안 80℃에서 가열하였다. 반응 혼합물을 여과하고, 여과물을 농축하였다. 잔류물을 CH₂Cl₂에 용해시키고, 용액을 염수로 세척하고, Na₂SO₄ 상에서 건조시키고, 감압 하에 농축하였다. 표제 화합물을 점착성 액체 (150 mg, 50%)로서 분리하였다. 본 반응에서 수득된 생성물을 추가 정제 없이 다음 단계에 사용하였다.

[1370]

실시예 65: 2-((4-브로모페닐)아미노)이소인돌린-1,3-디온 (CI72)의 제조



[1371]

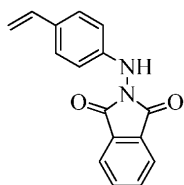
[1372]

AcOH (8 mL) 중 (4-브로모페닐)히드라진 히드로클로라이드 (0.5 g, 2.2 mmol)의 교반 용액에 프탈산 무수물 (0.398 g, 2.690 mmol)을 첨가하고, 반응 혼합물을 질소 분위기 하에 1시간 동안 130℃에서 교반하였다. 반응 혼합물을 포화 수성 NaHCO₃ 용액으로 켄칭하고 여과하여 고체를 수득하였다. 칼럼 크로마토그래피 (SiO₂, 석유 에테르 중 0-10% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 고체 (60 mg, 84%)로서 수득하였다.

mp 205-206 °C; ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 8.71 (s, 1H), 7.99 (m, 4H), 7.32 (d, *J* = 8.8 Hz, 2H), 6.79 (d, *J* = 8.8 Hz, 2H); ESIMS *m/z* 314.95 ([M-H]).

[1373]

[1374] 실시예 66: 2-((4-비닐페닐)아미노)이소인돌린-1,3-디온 (CI73)의 제조



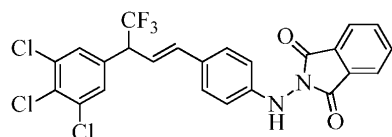
[1375]

[1376] 1,2-디메톡시에탄 (20 mL) 및 물 (4 mL) 중 2-(4-브로모페닐아미노)이소인돌린-1,3-디온 (2 g, 6. mmol)의 용액에 비닐 보론산 무수물 피리딘 착물 (4.57 g, 18.98 mmol) 및 K₂CO₃ (1.3 g, 9.5 mmol), 이어서 Pd(PPh₃)₄ (0.219 g, 0.189 mmol)를 첨가하였다. 생성된 반응 혼합물을 30분 동안 마이크로웨이브 하에 150℃에서 가열한 다음 감압 하에 농축하였다. 칼럼 크로마토그래피 (SiO₂, 석유 에테르 중 15% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 고체 (200 mg, 13%)로서 수득하였다.

mp 174–176 °C; ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 8.65 (s, 1H), 7.94 (m, 4H), 7.29 (d, *J* = 8.4 Hz, 2H), 6.72 (d, *J* = 8.4 Hz, 2H), 6.61 (m, 1H), 5.61 (d, *J* = 17.6 Hz, 1H), 5.05 (d, *J* = 11.2 Hz, 1H); ESIMS *m/z* 263.18 ([M-H]).

[1377]

[1378] 실시예 67: (E)-2-((4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)페닐)아미노)이소인돌린-1,3-디온 (CI74)의 제조



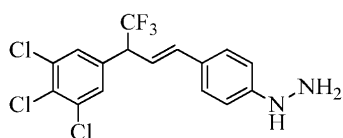
[1379]

[1380] 1,2-디클로로벤젠 (5 mL) 중 2-(4-비닐페닐아미노)이소인돌린-1,3-디온 (0.3 g, 1.1 mmol)의 교반 용액에 CuCl (0.022 g, 0.273 mmol), 2,2-비피리딘 (0.07 g, 0.46 mmol) 및 5-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-1,2,3-트리클로로벤젠 (0.77 g, 2.27 mmol)을 첨가하였다. 반응 혼합물을 30분 동안 아르곤으로 탈기하고 2시간 동안 180℃에서 가열하였다. 이어서, 반응 혼합물을 감압 하에 농축하고, 잔류물을 칼럼 크로마토그래피 (SiO₂, 석유 에테르 중 0-30% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 고체 (450 mg, 75%)로서 수득하였다.

mp 187–189 °C; ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 8.75 (s, 1H), 7.96 (m, 4H), 7.82 (s, 2H), 7.37 (d, *J* = 8.8 Hz, 1H), 6.73 (d, *J* = 8.4 Hz, 2H), 6.61 (m, 2H), 6.58 (m, 1H), 4.59 (m, 1H); ESIMS *m/z* 523.05 ([M-H]).

[1381]

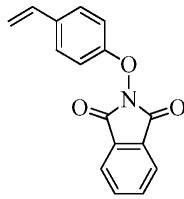
[1382] 실시예 68: (E)-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)페닐히드라진 (CI75)의 제조



[1383]

[1384] EtOH (5 mL) 중 (E)-2-(4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)페닐아미노)이소인돌린-1,3-디온 (0.16 g, 0.31 mmol)의 교반 용액에, 히드라진 수화물 (0.076 g, 1.52 mmol)을 첨가하고, 반응 혼합물을 1시간 동안 85℃에서 가열하였다. 반응 혼합물을 주위 온도로 냉각하고 여과하고, 여과물을 감압 하에 농축하여 표제 화합물을 고체 (0.08 g, 66%)로서 수득하고 이를 추가 정제 없이 다음 단계에 사용하였다.

[1385] 실시예 69: 2-(4-비닐페녹시)이소인돌린-1,3-디온 (CI76)의 제조

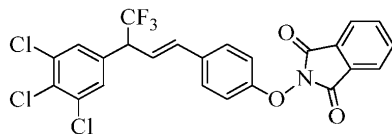


[1386]

[1387] 1,2-디클로로에탄 (50 mL) 중 4-비닐페닐보론산 (2 g, 13 mmol), 2-히드록시이소인돌린-1,3-디온 (3.63 g, 24.53 mmol), 및 CuCl (1.214 g, 12.26 mmol)의 교반 용액에 피리딘 (1.065 g, 13.48 mmol)을 첨가하고, 생성된 반응 혼합물을 48시간 동안 주위 온도에서 교반하였다. 반응 혼합물을 물로 희석하고 CHCl₃으로 추출하였다. 합한 CHCl₃ 층을 염수로 세척하고, Na₂SO₄ 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하였다. 플래쉬 칼럼 크로마토그래피 (SiO₂; 석유 에테르 중 20% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 백색 고체 (2 g, 63%)로서 수득하였다.

[1388]

[1389] 실시예 70: (E)-2-(4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)페녹시)이소인돌린-1,3-디온 (CI77)의 제조

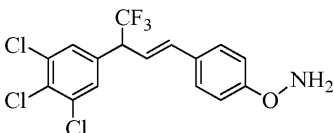


[1390]

[1391] 1,2-디클로로벤젠 (10 mL) 중 2-(4-비닐페녹시)이소인돌린-1,3-디온 (0.3g, 1.1 mmol)의 교반 용액에 1-(1-브로모에틸)-3,4,5-트리클로로벤젠 (769 mg, 2.26 mmol), CuCl (22 mg, 0.22 mmol) 및 2,2-비피리딘 (35 mg, 0.44 mmol)을 첨가하고, 생성된 반응 혼합물을 30분 동안 아르곤으로 탈기하고 24시간 동안 180℃로 가열하였다. 반응 혼합물을 주위 온도로 냉각하고 여과하고, 여과물을 감압 하에 농축하였다. 조 물질을 칼럼 크로마토그래피 (SiO₂, 100-200 메쉬; 석유 에테르 중 20% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 고체 (0.29 g, 50%)로서 수득하였다.

[1392]

[1393] 실시예 71: (E)-O-(4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)페닐)히드록실아민 (CI78)의 제조



[1394]

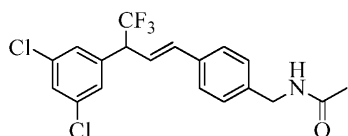
[1395] EtOH 중 (E)-2-(4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)페녹시)이소인돌린-1,3-디온 (0.2 g, 0.4 mmol)의 교반 용액에 히드라진 수화물 (0.1 g, 1.9 mmol)을 첨가하고, 생성된 반응 혼합물을 1시간 동안 90℃에서 가열하였다. 반응 혼합물을 여과하고, 여과물을 농축하였다. 잔류물을 CH₂Cl₂에 용해시키고, 염수로 세척하고, Na₂SO₄ 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 조 표제 화합물을 점착성 액체 (0.08 g, 53%)로서 수득하였다.

$^1\text{H NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) δ 7.40

(s, 2H), 6.98 (s, 1H), 6.82 (s, 2H), 6.48 (m, 1H), 6.20 (m, 1H), 5.02 (s, 1H), 4.08 (m, 1H);

ESIMS m/z 394.94 ($[\text{M}-\text{H}]^-$).

실시예 72: (E)-N-(4-(3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)벤질)아세트아미드 (CC1)의 제조



CH_2Cl_2 (10 mL) 중 (E)-(2-클로로-4-(3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)페닐)메탄아민 (0.3 g, 0.8 mmol)의 교반 용액에 아세트산 무수물 (0.12 mL, 1.14 mmol), 및 TEA (0.217 mL, 1.52 mmol)를 첨가하고, 생성된 반응 혼합물을 6시간 동안 주위 온도에서 교반하였다. 반응 혼합물을 물로 희석하고 CH_2Cl_2 로 추출하였다. 합한 CH_2Cl_2 층을 염수로 세척하고, Na_2SO_4 상에서 건조시키고, 감압 하에 농축하였다. 플래쉬 칼럼 크로마토그래피 (SiO_2 , 100-200 메쉬; 헥산 중 30-50% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 회백색 고체 (0.2g, 60%)로서 수득하였다.

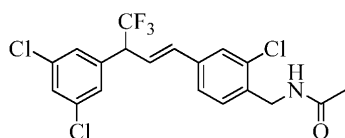
mp 107-109 °C; $^1\text{H NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) δ

7.37 (m, 3H), 7.28 (m, 4H), 6.60 (d, $J = 16.0$ Hz, 1H), 6.36 (dd, $J = 16.0, 8.0$ Hz, 1H), 5.75

(br s, 1H), 4.46 (d, $J = 6$ Hz, 2H), 4.01 (m, 1H), 2.11 (s, 3H); ESIMS m/z 402.00 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

표 1의 화합물 CC2-CC6을 실시예 72에 개시된 절차에 따라 제조하였다. 또한, 표 1의 화합물 DC56을 실시예 72에 개시된 절차에 따라 화합물 DC55로부터 제조하였다.

실시예 73: (E)-N-(2-클로로-4-(3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)벤질)아세트아미드 (CC7)의 제조



DMF (5 mL) 중 (E)-(2-클로로-4-(3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)페닐)메탄아민 (0.3 g, 0.8 mmol)의 교반 용액에 2,2,2-트리플루오로-프로판산 (97 mg, 0.76 mmol), $\text{HOBt} \cdot \text{H}_2\text{O}$ (174 mg, 1.14 mmol) 및 EDC $\cdot$ HCl (217 mg, 1.14 mmol) 및 DIPEA (196 mg, 1.52 mmol)를 첨가하고, 생성된 반응 혼합물을 18시간 동안 주위 온도에서 교반하였다. 반응 혼합물을 물로 희석하고 EtOAc로 추출하였다. 합한 EtOAc 층을 염수로 세척하고, Na_2SO_4 상에서 건조시키고, 감압 하에 농축하였다. 플래쉬 칼럼 크로마토그래피 (SiO_2 , 100-200 메쉬; 헥산 중 EtOAc (30-50%))에 의해 정제하여 표제 화합물을 회백색 고체 (0.2 g, 60%)로서 수득하였다.

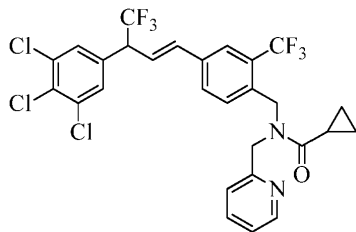
mp 127-128 °C; $^1\text{H NMR}$ (400 MHz, CDCl_3)

δ 7.42 (m, 4H), 7.24 (m, 2H), 6.53 (d, $J = 16.0$ Hz, 1H), 6.36 (dd, $J = 16.0, 8.0$ Hz, 1H), 5.86

(br s, 1H), 4.51 (d, $J = 6.0$ Hz, 2H), 4.05 (m, 1H), 2.02 (s, 3H); ESIMS m/z 436.03 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

표 1의 화합물 CC8-CC28을 실시예 73에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

실시예 74: (E)-N-(피리딘-2-일메틸)-N-(4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)-2-(트리플루오로메틸)벤질)시클로프로판카르복사미드 (CC29)의 제조



단계 1: (E)-1-(피리딘-2-일)-N-(4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔일)-2-(트리플루오로메틸)벤질)메탄아민. (E)-(4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)-2-(트리플루오로메틸)페닐)메탄아민 (0.46 g, 1 mmol)을 MeOH (3 mL)에 용해시켰다. 여기에 피리딘-2-카르브알데히드 (0.107 g, 1 mmol)를 첨가하였다. 반응 혼합물을 1시간 동안 교반하였다. 1시간 후, NaBH₄ (0.076 g, 2 mmol)를 첨가하고 3시간 동안 주위 온도에서 방치하였다. 반응 혼합물을 농축하여 유성 잔류물을 수득하였다. 플래쉬 칼럼 크로마토그래피 (SiO₂, 100-200 메쉬; 헥산 중 30-50% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 연황색 액체 (0.22 g, 40%)로서 수득하였다.

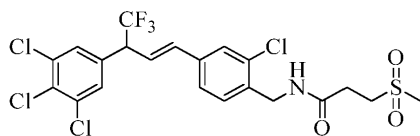
¹H NMR (400

MHz, CDCl₃) δ 8.58 (d, *J* = 4.8 Hz, 1H), 7.74 (m, 1H), 7.62 (m, 2H), 7.52 (m, 1H), 7.4 (s, 2H), 7.3 (m, 1H), 7.2 (m, 2H), 6.60 (d, *J* = 16.0 Hz, 1H), 6.38 (dd, *J* = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.10 (m, 1H), 4.02 (s, 2H), 3.96 (s, 2H); ESIMS *m/z* 552.95 ([M+H]⁺); IR (박막) 3338, 1114, 808 cm⁻¹.

단계 2: (E)-N-(피리딘-2-일메틸)-N-(4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔일)-2-(트리플루오로메틸)벤질)시클로프로판카르복스아미드. (E)-1-(피리딘-2-일)-N-(4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)-2-(트리플루오로메틸)벤질)메탄아민 (0.27 g, 0.05 mmol)을 CH₂Cl₂ (3 mL)에 녹였다. 여기에 TEA (0.14 mL, 0.1 mmol)를 첨가하였다. 반응 혼합물을 10분 동안 교반하였다. 10분 후, 반응 혼합물을 0°C로 냉각하고, 시클로프로판카르보닐 클로라이드 (0.08 mL, 0.075 mmol)를 첨가하였다. 반응 혼합물을 1시간 동안 주위 온도에서 교반한 다음 물 및 포화 수성 NaHCO₃ 용액으로 세척하였다. 유기 층을 무수 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고 증발시켜 연황색 점착성 물질 (0.15 g, 50%)을 수득하였다.

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 8.58 (d, *J* = 4.6 Hz, 1H), 7.74 (m, 1H), 7.62 (m, 2H), 7.52 (m, 1H), 7.4 (s, 2H), 7.3 (m, 1H), 7.2 (m, 2H), 6.60 (d, *J* = 16.0 Hz, 1H), 6.38 (dd, *J* = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 5.02 (s, 1H), 4.8 (s, 1H), 4.8 (d, *J* = 10 Hz, 2H), 4.10 (m, 1H), 1.8 (m, 1H), 1.2 (m, 2H), 0.6 (m, 2H); ESIMS *m/z* 620.86 ([M-H]⁻); IR (박막) 1645, 1115, 808 cm⁻¹.

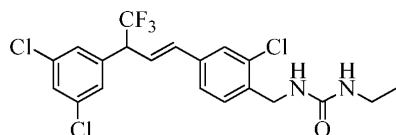
실시예 75: (E)-N-(2-클로로-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤질)-3-(메틸술포닐)프로판아미드 (CC30)의 제조



(E)-N-(2-클로로-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤질)-3-(메틸티오)프로판아미드 (0.15 g, 0.28 mmol)를 주위 온도에서 4시간 동안 1:1 아세톤:물 (20 mL) 중 옥손 (0.175 g, 0.569 mmol)으로 처리하였다. 아세톤을 증발시켜 백색 고체 (0.095 g, 60%)를 수득하였다.

mp 101–104 °C; ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.41 (m, 4H), 7.24 (m, 1H), 6.53 (d, $J = 16.0$ Hz, 1H), 6.35 (dd, $J = 16.0, 8.0$ Hz, 1H), 6.12 (br s, 1H), 4.53 (m, 2H), 4.10 (m, 1H), 3.42 (m, 2H), 2.91 (s, 3H), 2.78 (m, 2H); ESIMS m/z 559.75 ([M-H]).

실시예 76: (E)-1-(2-클로로-4-(3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)벤질)-3-에틸우레아 (CC31)의 제조

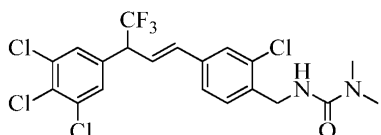


0°C에서 CH_2Cl_2 (5 mL) 중 (E)-(2-클로로-4-(3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)페닐)메탄아민 (0.2 g, 0.5 mmol)의 교반 용액에 TEA (0.141 mL, 1 mmol) 및 에틸이소시아네이트 (0.053 g, 0.75 mmol)를 첨가하고, 반응 혼합물을 0°C에서 1시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 CH_2Cl_2 로 희석하였다. 유기 층을 물 및 염수로 세척하고, Na_2SO_4 상에서 건조시키고, 감압 하에 농축하였다. 칼럼 크로마토그래피 (SiO_2 , 100–200 메쉬; 헥산 중 30–50% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 고체 (0.141 g, 60%)로서 수득하였다.

mp 177–178 °C; ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.58 (m, 2H), 7.41 (m, 3H), 7.24 (m, 1H), 6.53 (d, $J = 16.0$ Hz, 1H), 6.35 (dd, $J = 16.0, 8.0$ Hz, 1H), 4.70 (br s, 1H), 4.43 (s, 2H), 4.08 (m, 1H), 3.21 (m, 2H), 1.25 (m, 3H); ESIMS m/z 463 ([M-H]).

표 1의 화합물 CC32–CC35를 실시예 76에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

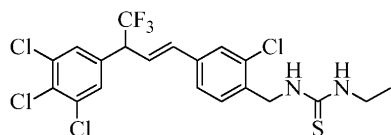
실시예 77: (E)-3-(2-클로로-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤질)-1,1-디메틸우레아 (CC36)의 제조



0°C에서 CH_2Cl_2 (5 mL) 중 (E)-(2-클로로-4-(3-(3,4,5-트리클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)페닐)메탄아민 (0.2 g, 0.5 mmol)의 교반 용액에 TEA (0.141 mL, 1 mmol) 및 N,N-디메틸카르바모일 클로라이드 (0.08 g, 0.075 mmol)를 첨가하고, 반응 혼합물을 0°C에서 1시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 CH_2Cl_2 로 희석하였다. 유기 층을 물 및 염수로 세척하고, Na_2SO_4 상에서 건조시키고, 감압 하에 농축하였다. 칼럼 크로마토그래피 (SiO_2 , 100–200 메쉬; 헥산 중 30–50% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 고체 (0.15 g, 60%)로서 수득하였다.

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.39 (m, 4H), 7.28 (m, 1H), 6.54 (d, $J = 16.0$ Hz, 1H), 6.34 (dd, $J = 16.0, 8.0$ Hz, 1H), 4.97 (br s, 1H), 4.38 (d, $J = 6.0$ Hz, 2H), 4.10 (m, 1H), 2.9 (s, 3H), 2.7 (s, 3H); ESIMS m/z 497 ([M-H]); IR (박막) 3350, 1705, 1114, 808 cm^{-1} .

실시예 78: (E)-1-(2-클로로-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤질)-3-에틸티오우레아 (CC37)의 제조



[1427]

[1428]

0℃에서 CH_2Cl_2 (5 mL) 중 (E)-(2-클로로-4-(3-(3,4,5-트리클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)페닐)메탄아민 (0.2 g, 0.5 mmol)의 교반 용액에 TEA (0.141 mL, 1 mmol) 및 에틸 이소티오시아네이트 (0.053 g, 0.75 mmol)를 첨가하고, 반응 혼합물을 0℃에서 1시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 CH_2Cl_2 로 희석하였다. 유기 층을 물 및 염수로 세척하고, Na_2SO_4 상에서 건조시키고, 감압 하에 농축하였다. 칼럼 크로마토그래피 (SiO_2 , 100-200 메쉬; 헥산 중 30-50% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 고체 (0.14 g, 60%)로서 수득하였다.

mp 88-91 °C; ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.49 (d, J = 8 Hz, 1H), 7.41 (d, J = 7.2 Hz, 2H), 7.26 (m, 2H), 6.50 (d, J = 16 Hz, 1H), 6.35 (dd, J = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 6.0 (br s, 1H), 5.73 (br s, 1H), 4.80 (br s, 2H), 4.09 (m, 1H), 1.23 (m, 3H); ESIMS m/z 515.01 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

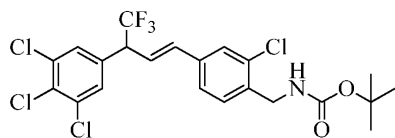
[1429]

[1430]

표 1의 화합물 CC38을 실시예 78에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

[1431]

실시예 79: (E)-tert-부틸 (2-클로로-4-(3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)벤질)-3-에틸우레아 (CC39)의 제조



[1432]

[1433]

0℃에서 CH_2Cl_2 (5 mL) 중 (E)-(2-클로로-4-(3-(3,4,5-트리클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)페닐)메탄아민 (0.2 g, 0.5 mmol)의 교반 용액에 TEA (0.141 mL, 1 mmol) 및 디-tert-부틸 디카르보네이트 (0.163 mL, 0.75 mmol)를 첨가하고, 반응 혼합물을 주위 온도에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 CH_2Cl_2 로 희석하였다. 유기 층을 물 및 염수로 세척하고, Na_2SO_4 상에서 건조시키고, 감압 하에 농축하였다. 칼럼 크로마토그래피 (SiO_2 , 100-200 메쉬; 헥산 중 10-20% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 백색 고체 (0.147 g, 60%)로서 수득하였다.

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.39 (m, 4H), 7.28 (m, 1H), 6.54 (d, J = 16.0 Hz, 1H), 6.34 (dd, J = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.97 (br s, 1H), 4.38 (d, J = 6.0 Hz, 2H), 4.10 (m, 1H), 1.53 (s, 9H); ESIMS m/z 526.09 ($[\text{M}-\text{H}]^-$); IR (박막) 3350, 1705, 1114, 808 cm^{-1} .

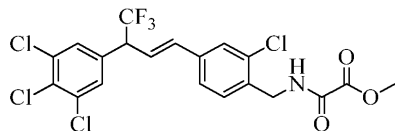
[1434]

[1435]

표 1의 화합물 CC40을 실시예 79에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

[1436]

실시예 80: (E)-메틸 2-((2-클로로-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤질)아미노)-2-옥소아세테이트 (CC41)의 제조



[1437]

[1438]

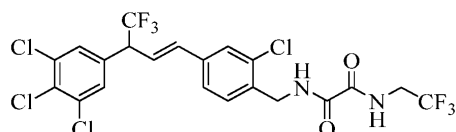
0℃에서 CH_2Cl_2 (5 mL) 중 (E)-(2-클로로-4-(3-(3,4,5-트리클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)페닐)메탄아민 (0.2 g, 0.5 mmol)의 교반 용액에 TEA (0.141 mL, 1 mmol) 및 메틸 2-클로로-2-옥소아세테이트 (0.09 g, 0.75 mmol)를 첨가

하고, 반응 혼합물을 0℃에서 1시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 CH₂Cl₂로 희석하였다. 유기 층을 물 및 염수로 세척하고, Na₂SO₄ 상에서 건조시키고, 감압 하에 농축하였다. 칼럼 크로마토그래피 (SiO₂, 100-200 메쉬; 헥산 중 20% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 고체 (0.12 g, 50%)로서 수득하였다.

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃)

δ 7.48 (m, 1H), 7.43 (m, 3H), 7.38 (m, 1H), 7.23 (s, 1H), 6.55 (d, *J* = 16.0 Hz, 1H), 6.36 (dd, *J* = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.60 (d, *J* = 4.4 Hz, 2H), 4.18 (m, 1H), 3.85 (s, 3H); ESIMS *m/z* 512.22 ([M-H]); IR (박막) 1740, 1701, 1114, 808 cm⁻¹.

실시예 81: (E)-N¹-(2-클로로-플루오로-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤질)-N²-(2,2,2-트리플루오로에틸)옥살아미드 (CC42)의 제조

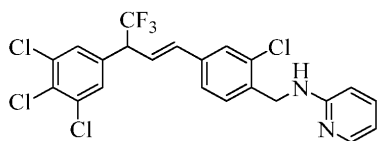


CH₂Cl₂ (10 mL) 중 2,2,2-트리플루오로에틸아민 히드록로라이드 (0.1 g, 0.77 mmol)의 교반 용액에 트리메틸알루미늄 (톨루엔 중 2 M 용액; 0.39 mL, 0.77 mmol)을 적가하고, 반응 혼합물을 30분 동안 25℃에서 교반하였다. CH₂Cl₂ (5 mL) 중 (E)-메틸 2-((2-클로로-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤질)-2-옥소아세테이트 (0.2 g, 0.38 mmol)의 용액을 25℃에서 반응 혼합물에 적가하였다. 반응 혼합물을 18시간 동안 환류 하에 교반하고, 25℃로 냉각하고, 0.5 N HCl 용액 (50 mL)으로 켄칭하고 EtOAc (2 x 50 mL)로 추출하였다. 합한 유기 추출물을 염수로 세척하고, Na₂SO₄ 상에서 건조시키고, 감압 하에 농축하였다. 조 화합물을 플래쉬 크로마토그래피 (SiO₂, 100-200 메쉬; n-헥산 중 20%-40% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물 (0.13 g, 60%)을 수득하였다.

mp 161-163 °C;

¹H NMR (400 MHz, DMSO-*d*₆) δ 9.45 (br s, 2H), 7.90 (s, 2H), 7.75 (s, 1H), 7.46 (s, 1H), 7.28 (s, 1H), 6.93 (m, 1H), 6.75 (m, 1H), 4.80 (m, 1H), 4.40 (s, 2H), 3.90 (s, 2H); ESIMS *m/z* 578.96 ([M-H]).

실시예 82: (E)-N-(2-클로로-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤질)피리딘-2-아민 (CC43)의 제조

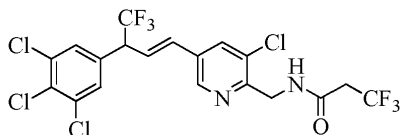


1,2-디클로로벤젠 (5 mL) 중 N-(2-클로로-4-비닐벤질)피리딘-2-아민 (0.3 g, 1.22 mmol)의 교반 용액에 5-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-1,2,3-트리클로로벤젠 (0.83 g, 2.44 mmol), CuCl (24 mg, 0.24 mmol) 및 2,2-비피리딘 (76 mg, 0.48 mmol)을 첨가하였다. 생성된 반응 혼합물을 30분 동안 아르곤으로 탈기한 다음 24시간 동안 180℃에서 교반하였다. TLC에 의해 반응이 완료된 것으로 여겨진 후, 반응 혼합물을 주위 온도로 냉각하고 여과하고, 여과물을 감압 하에 농축하였다. 플래쉬 크로마토그래피 (SiO₂, 100-200 메쉬; n-헥산 중 15% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 회백색 고체 (0.2 g, 35%)로서 수득하였다.

mp 140–

142 °C; ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 8.11 (d, $J = 4.0$ Hz, 1H), 7.40 (m, 5H), 7.22 (m, 1H), 6.61 (m, 2H), 6.35 (m, 2H), 4.94 (br s, 1H), 4.61 (d, $J = 6.4$ Hz, 2H), 4.11 (m, 1H); ESIMS m/z 505.39 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

실시예 83: (E)-N-((3-클로로-5-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)-부트-1-엔-1-일)피리딘-2-일)메틸)-3,3,3-트리플루오로프로판아미드 (CC44)의 제조

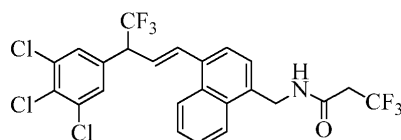


CH_2Cl_2 (5 mL) 중 (E)-(3-클로로-5-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)피리딘-2-일)메탄아민 (0.1 g, 0.2 mmol)의 교반 용액에 3,3,3-트리플루오로프로판산 (45 mg, 0.350 mmol), EDC · HCl (67 mg, 0.350 mmol), HOBt · H_2O (71 mg, 0.467 mmol) 및 DIPEA (60.2 mg, 0.467 mmol)를 첨가하고, 반응 혼합물을 18시간 동안 주위 온도에서 교반하였다. 반응 혼합물을 CH_2Cl_2 로 희석하고 물로 세척하였다. 합한 CH_2Cl_2 층을 염수로 세척하고, 무수 Na_2SO_4 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하였다. 플래쉬 칼럼 크로마토그래피 (SiO_2 , 100–200 메쉬; 석유 에테르 중 15% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 연황색 액체 (30 mg, 35%)로서 수득하였다.

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 8.41 (s, 1H), 7.77 (s, 1H), 7.47 (br s, 1H), 7.40 (s, 2H), 6.58 (d, $J = 16.0$ Hz, 1H), 6.45 (dd, $J = 16.0, 8.0$ Hz, 1H), 4.68 (d, $J = 4.0$ Hz, 2H), 4.14 (m, 1H), 3.24 (q, $J = 10.8$ Hz, 2H); ESIMS m/z 536.88 ($[\text{M}-\text{H}]^-$); IR (박막) 3320, 1674, 1114, 808.

표 1의 화합물 CC45를 실시예 83에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

실시예 84: (E)-3,3,3-트리플루오로-N-((4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)나프탈렌-1-일)메틸)프로판아미드 (CC46)의 제조



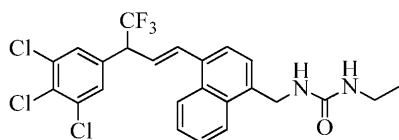
CH_2Cl_2 (8 mL) 중 (E)-(4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)나프탈렌-1-일)메탄아민 (0.1 g, 0.22 mmol)의 교반 용액에 3,3,3-트리플루오로프로판산 (0.032 g, 0.24 mmol), HOBt · H_2O (52 mg, 0.33 mmol), EDC · HCl (0.065 g, 0.33 mmol) 및 DIPEA (0.044 g, 0.45 mmol)를 첨가하고, 생성된 반응 혼합물을 18시간 동안 주위 온도에서 교반하였다. 반응 혼합물을 물로 희석하고 EtOAc (3 x 30 mL)로 추출하였다. 합한 EtOAc 층을 염수로 세척하고, Na_2SO_4 상에서 건조시키고, 감압 하에 농축하였다. 플래쉬 칼럼 크로마토그래피 (SiO_2 , 100–200 메쉬; n-헥산 중 15% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 점착성 물질 (60 mg, 50%)로서 수득하였다.

mp 151–153 °C; ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 8.06 (m, 1H), 7.61 (m, 4H), 7.48 (s, 2H), 7.44 (d, $J = 8.0$ Hz, 1H), 7.38 (m, 1H), 6.42 (m, 1H), 5.92 (br s, 1H), 4.92 (m, 2H), 4.24 (m, 1H), 3.12 (m, 2H); ESIMS m/z 554.04 ($[\text{M}-\text{H}]^-$).

표 1의 화합물 CC47–CC48을 실시예 84에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

실시예 85: (E)-1-에틸-3-((4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)나프탈렌-1-일)메

틸)우레아 (CC49)의 제조

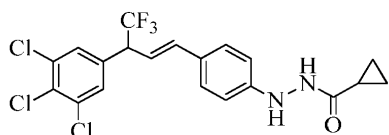


0℃에서 CH_2Cl_2 중 (E)-(4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)나프탈렌-1-일)메탄아민 (0.1 g, 0.22 mmol)의 교반 용액에 TEA (0.064 mL, 0.44 mmol) 및 에틸이소시아네이트 (0.023 mL, 0.33 mmol)를 첨가하고, 반응 혼합물을 0℃에서 1시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 CH_2Cl_2 로 희석하였다. 유기층을 물 및 염수로 세척하고, Na_2SO_4 상에서 건조시키고, 감압 하에 농축하였다. 칼럼 크로마토그래피 (SiO_2 , 100-200 메쉬; 헥산 중 30% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 고체 (0.07 g, 60%)로서 수득하였다.

mp 84-87 °C; ^1H NMR (400

MHz, CDCl_3) δ 8.06 (m, 1H), 7.98 (m, 1H), 7.61 (m, 3H), 7.48 (s, 2H), 7.44 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 7.38 (m, 2H), 6.42 (m, 1H), 4.92 (s, 2H), 4.6 (br s, 1H), 4.24 (m, 1H), 3.21 (m, 2H), 1.2 (t, J = 4.6 Hz, 3H); ESIMS m/z 515.33 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

실시예 86: (E)-N'-(4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)페닐)시클로프로판카르보히드라이드 (CC50)의 제조



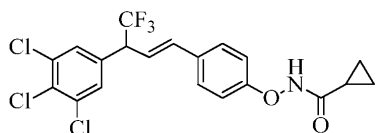
CH_2Cl_2 (10 mL) 중 (E)-(4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)페닐)히드라진 (0.1 g, 0.3 mmol)의 교반 용액에 DIPEA (65 mg, 0.51 mmol), HOBt · H_2O (59 mg, 0.38 mmol), EDC · HCl (73 mg, 0.38 mmol) 및 시클로프로판카르보닐 클로라이드 (0.024 g, 0.28 mmol)를 첨가하고, 반응 혼합물을 1시간 동안 주위 온도에서 교반하였다. 반응 혼합물을 포화 수성 NaHCO_3 용액으로 희석하고 CH_2Cl_2 로 추출하였다. 합한 CH_2Cl_2 층을 염수로 세척하고, 무수 Na_2SO_4 상에서 건조시키고, 감압 하에 농축하였다. 플래쉬 칼럼 크로마토그래피 (SiO_2 ; 석유 에테르 중 5-25% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 고체 (65 mg, 55%)로서 수득하였다.

mp 138-140 °C; ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 9.81 (s, 1H), 7.90 (s,

1H), 7.84 (s, 2H), 7.34 (d, J = 8.4 Hz, 2H), 6.65 (d, J = 15.6 Hz, 1H), 6.61 (m, 1H), 6.57 (s, 1H), 6.48 (dd, J = 15.6, 8.8 Hz, 1H), 4.74 (m, 1H), 1.64 (m, 1H), 0.75 (m, 4H); ESIMS m/z 461.32 ($[\text{M}-\text{H}]^-$).

표 1의 화합물 CC51을 실시예 86에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

실시예 87: (E)-N-(4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)페녹시)시클로프로판카르복스아미드 (CC52)의 제조



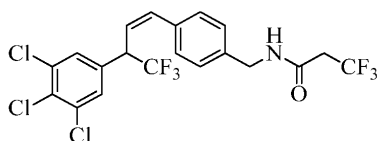
CH_2Cl_2 (5 mL) 중 (E)-O-(4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)페닐)히드록실아민 (0.15 g, 0.38 mmol)의 교반 용액에 EDC · HCl (0.109 g, 0.569 mmol), HOBt · H_2O (0.087 g, 0.569 mmol), DIPEA (0.097 g, 0.758 mmol) 및 시클로프로판카르복실산 (0.049 g, 0.569 mmol)을 첨가하였다. 생성된 반응

혼합물을 18시간 동안 주위 온도에서 교반하였다. 반응 혼합물을 물로 희석하고 CHCl_3 (35 mL)으로 추출하였다. 합한 CHCl_3 층을 염수로 세척하고, Na_2SO_4 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하였다. 플래쉬 칼럼 크로마토그래피 (SiO_2 ; 헥산 중 20% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 갈색 액체 (0.06 g, 34%)로서 수득하였다.

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.40 (s, 2H), 7.18 (s, 1H), 7.08 (s, 1H), 6.85 (m, 1H), 6.45 (m, 1H), 6.65 (m, 1H), 6.20 (m, 1H), 5.55 (s, 1H), 4.08 (m, 1H), 1.90 (m, 1H), 1.30 – 1.10 (m, 4H); ESIMS m/z 464.87 ($[\text{M}-\text{H}]^-$).

표 1의 화합물 CC53을 실시예 87에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

실시예 88: (Z)-3,3,3-트리플루오로-N-(4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤질)프로판아미드 (CC54)의 제조

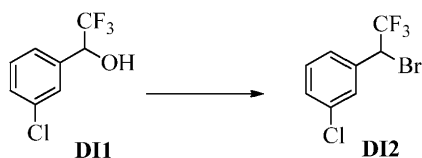


붕산규소 바이알을 (E)-3,3,3-트리플루오로-N-(4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤질)프로판아미드 (133 mg, 0.269 mmol) 및 디메틸 술폭시드 (DMSO; 10 mL)로 충전하였다. 혼합물을 72시간 동안 길게 늘어선 8 개의 115 와트 실바니아(Sylvania) FR48T12/350BL/VHO/180 형광 튜브 블랙 라이트(Fluorescent Tube Black Light) 및 4개의 115 와트 실바니아 (주광) F48T12/D/VHO 스트레이트(Straight) T12 형광 튜브 라이트(Fluorescent Tube Light)의 0.6 내지 1 미터 (m) 이내에 위치시켰다. 혼합물을 진공 하에 농축하고 역상 크로마토그래피에 의해 정제하여 표제 화합물을 무색 오일 (11 mg, 8%)로서 수득하였다.

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3) δ 7.28 (s, 2H), 7.25 (m, 2H), 7.10 (d, J = 8.0 Hz, 2H), 6.89 (d, J = 11.4 Hz, 1H), 6.07 (br s, 1H), 6.01 (m, 1H), 4.51 (d, J = 5.8 Hz, 2H), 4.34 (m, 1H), 3.12 (q, J = 7.5 Hz, 2H); ^{13}C NMR (101 MHz, CDCl_3) δ 162.44, 137.20, 135.38, 135.23, 134.82, 134.68, 131.71, 129.00, 128.80, 128.69, 128.10, 127.96, 122.63, 76.70, 47.33 (q, J = 28 Hz), 43.59, 42.12 (q, J = 30 Hz); ESIMS m/z 504 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

표 1의 화합물 DC46, AC93, AC94를 실시예 88에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

실시예 89: 1-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-3-클로로벤젠 (DI2)의 제조



표제 화합물을 두 단계로, 1-(3-클로로페닐)-2,2,2-트리플루오로에탄올 (DI1, 실시예 1의 단계 1, 방법 B에서와 같이 제조됨)을 통해 합성하고; 무색 점성 오일 (1.5 g, 75%)로서 분리하고,

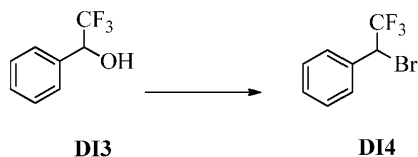
^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.50 (s, 1H), 7.42-7.35 (m, 3H), 5.02 (m, 1H), 2.65 (br s, 1H)

실시예 1의 단계 2를 통해 합성하고 분리하였다 (0.14 g, 22%).

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.50 (br s, 1H), 7.42-7.35 (m, 3H), 5.07 (m, 1H).

하기 화합물을 실시예 89에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

[1484] (1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)벤젠 (DI4)



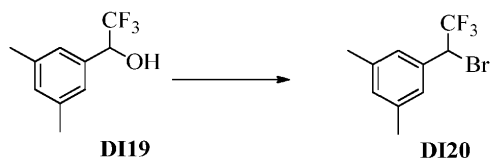
[1485] 2,2,2-트리플루오로-1-페닐에탄올 (DI3)을 단리하였다 (10 g, 80%).

¹H NMR (300 MHz, CDCl₃) δ 7.48 (m, 2H), 7.40 (m, 3H), 5.02 (m, 1H), 2.65 (d, *J* = 7.1 Hz, 1H).

[1486] 표제 화합물 (DI4)을 액체 (8.0 g, 60%)로서 단리하였다.

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.50 (m, 2H), 7.40 (m, 3H), 5.00 (q, *J* = 7.5 Hz, 1H).

[1487] 1-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-3,5-디메틸벤젠 (DI20)

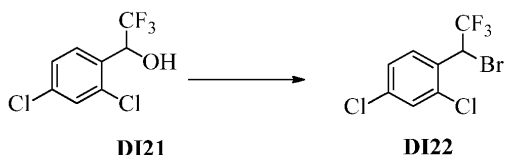


[1491] 1-(3,5-디메틸페닐)-2,2,2-트리플루오로에탄올 (DI19)을 희백색 고체로서 단리하였다.

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.05 (s, 2H), 7.02 (s, 1H), 4.95 (m, 1H), 2.32 (s, 6H); ESIMS *m/z* 204 ([M]⁺).

[1492] 표제 화합물 (DI20)을 단리하였다 (3.0 g, 51%).

[1493] 1-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-2,4-디클로로벤젠 (DI22)



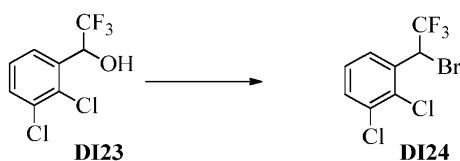
[1494] 1-(2,4-디클로로페닐)-2,2,2-트리플루오로에탄올 (DI21)을 희백색 분말 (5.3 g, 61%)로서 단리하였다.

mp 49-51 °C; ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.62-7.66 (d, 1H), 7.42-7.44 (d, 1H), 7.32-7.36 (d, 1H), 5.6 (m, 1H), 2.7 (s, 1H); ESIMS *m/z* 244 ([M]⁺).

[1495] 표제 화합물 (DI22)을 단리하였다 (3.2 g, 50%).

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.62-7.72 (m, 1H), 7.4-7.42 (m, 1H), 7.3-7.38 (m, 1H), 5.7-5.8 (m, 1H).

[1500] 1-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-2,3-디클로로벤젠 (DI24)



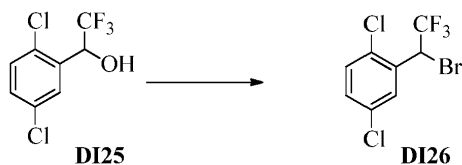
1-(2,3-디클로로페닐)-2,2,2-트리플루오로에탄올 (DI23)을 연황색 오일 (5.2 g, 60%)로서 분리하였다.

$^1\text{H NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) δ 7.62-7.64 (d, 1H), 7.52-7.54 (m, 1H), 7.29-7.33 (t, 1H), 5.6-5.76 (m, 1H), 2.7 (s, 1H); ESIMS m/z 243.9 ($[\text{M}]^+$).

표제 화합물 (DI24)을 오일 (8.7 g, 60%)로서 분리하였다.

$^1\text{H NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) δ 7.62-7.71 (m, 1H), 7.44-7.52 (m, 1H), 7.27-7.3 (s, 1H), 5.81-5.91 (m, 1H).

2-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-1,4-디클로로벤젠 (DI26)



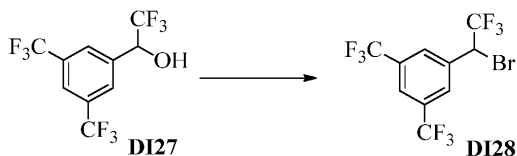
1-(2,5-디클로로페닐)-2,2,2-트리플루오로에탄올 (DI25)을 황색 오일 (4.1 g, 60%)로서 분리하였다.

$^1\text{H NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) δ 7.68-7.7 (s, 1H), 7.3-7.37 (m, 2H), 5.51-5.6 (m, 1H), 2.7 (s, 1H); ESIMS m/z 244 ($[\text{M}]^+$).

표제 화합물 (DI26)을 분리하였다 (3.0 g, 60%).

$^1\text{H NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) δ 7.7-7.78 (m, 1H), 7.3-7.4 (m, 2H), 5.7-5.8 (m, 1H).

1-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-3,5-비스(트리플루오로메틸)벤젠 (DI28)

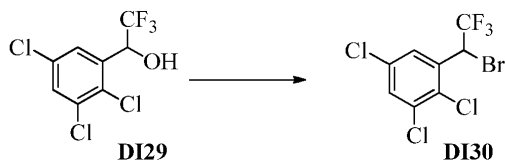


1-(3,5-비스(트리플루오로메틸)페닐)-2,2,2-트리플루오로에탄올 (DI27)을 분리하였다 (3.8 g, 60%).

$^1\text{H NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) δ 7.98 (m, 3H), 5.25 (m, 1H), 3.2 (br, 1H); ESIMS m/z 312.2 ($[\text{M}]^+$).

표제 화합물 (DI28)을 제조하고 조 물질을 사용하였다.

1-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-2,3,5-트리클로로벤젠 (DI30)



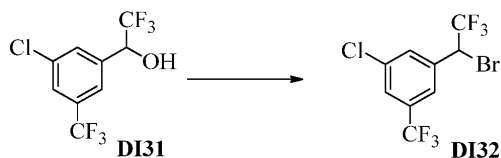
2,2,2-트리플루오로-1-(2,3,5-트리클로로페닐)에탄올 (DI29)을 백색 고체 (4.0 g, 60%)로서 분리하였다.

mp 113-115 °C; $^1\text{H NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) δ 7.62 (d, 1H), 7.50 (d, 1H), 5.60-5.70 (m, 1H), 2.75 (s, 1H); ESIMS m/z 278.0 ($[\text{M}]^+$).

표제 화합물 (DI30)을 단리하였다 (2.9 g, 60%).

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.70 (d, 1H), 7.50 (d, 1H), 5.72-5.82 (m, 1H).

1-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-3-클로로-5-(트리플루오로메틸)벤젠 (DI32)



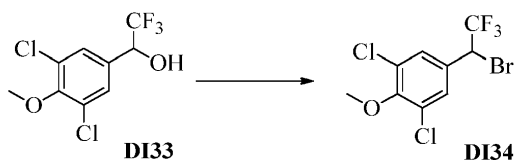
1-(3-클로로-5-(트리플루오로메틸)페닐)-2,2,2-트리플루오로에탄올 (DI31)을 연황색 오일 (2.0 g, 50%)로서 단리하였다.

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.51 (m, 3H), 5.08 (m, 1H), 2.81 (s, 1H); ESIMS m/z 278.1 ($[\text{M}]^+$).

표제 화합물 (DI32)을 오일 (2.0 g, 40%)로서 단리하였다.

ESIMS m/z 342 ($[\text{M}]^+$).

5-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-1,3-디클로로-2-메톡시벤젠 (DI34)

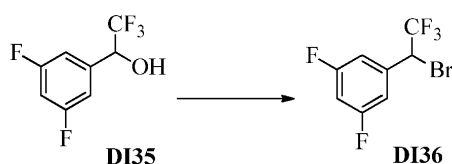


1-(3,5-디클로로-4-메톡시페닐)-2,2,2-트리플루오로에탄올 (DI33)을 희백색 고체 (0.8 g, 60%)로서 단리하였다.

mp 92-95 °C; ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.41 (s, 2H), 5.00 (m, 1H), 3.89 (s, 3H), 2.64 (m, 1H); ESIMS m/z 274 ($[\text{M}]^+$).

표제 화합물 (DI34)을 무색 액체 (0.6 g, 57%)로서 단리하였다.

실시예 90: 1-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-3,5-디플루오로벤젠 (DI36)의 제조



표제 화합물을 두 단계로, 1-(3,5-디플루오로페닐)-2,2,2-트리플루오로에탄올 (DI35, 실시예 1의 단계 1, 방법 A에서와 같이 제조됨)을 통해 합성하고; 무색 오일 (0.2 g, 75%)로서 단리하고,

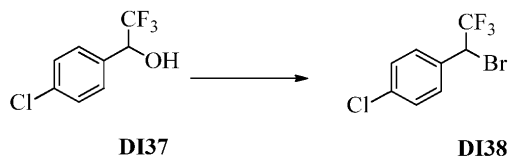
^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.05 (m, 2H), 6.88 (m, 1H), 5.06 (m, 1H), 2.66 (s, 1H); ESIMS m/z 212 ($[\text{M}]^+$)

실시예 1의 단계 2를 통해 합성하고 단리하였다 (3.2 g, 50%).

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.05 (m, 2H), 6.86 (m, 1H), 5.03 (q, $J = 7.4$ Hz, 1H).

하기 화합물을 실시예 90에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

1-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-4-클로로벤젠 (DI38)



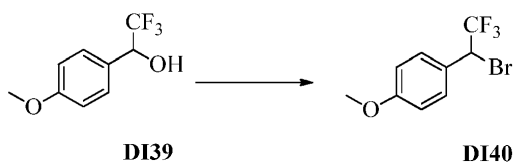
1-(4-클로로페닐)-2,2,2-트리플루오로에탄올 (DI37)을 무색 오일 (5.0 g, 99%)로서 분리하였다.

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.44-7.38 (m, 4H), 5.05 (m, 1H), 2.55 (s, 1H);
ESIMS m/z 210 ($[\text{M}]^+$).

표제 화합물 (DI38)을 분리하였다 (3.0 g, 46%).

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.45 (d, $J = 8.2$ Hz, 2H), 7.37 (d, $J = 8.2$ Hz, 2H), 5.10 (q, $J = 7.2$ Hz, 1H).

1-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-4-메톡시벤젠 (DI40)

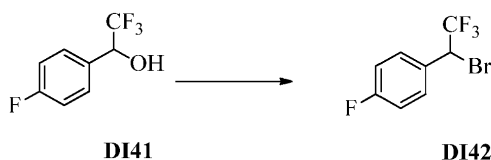


2,2,2-트리플루오로-1-(4-메톡시페닐)에탄올 (DI39)을 연황색 액체로서 분리하였다.

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.41 (d, $J = 8.8$ Hz, 2H), 6.95 (m, $J = 8.8$ Hz, 2H),
5.00 (m, 1H), 3.82 (s, 3H), 2.44 (s, 1H); ESIMS m/z 206.1 ($[\text{M}]^+$).

표제 화합물 (DI40)을 분리하였다 (3.8 g, 62%).

1-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-4-플루오로벤젠 (DI42)

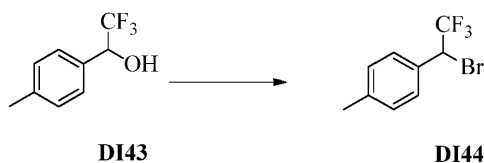


2,2,2-트리플루오로-1-(4-플루오로페닐)에탄올 (DI41)을 무색 오일 (5 g, 99%)로서 분리하였다.

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.48-7.45 (m, 2H), 7.13-7.07 (m, 2H), 5.06 (m, 1H),
2.53 (s, 1H); ESIMS m/z 194 ($[\text{M}]^+$).

표제 화합물 (DI42)을 제조하고 조 중간체로서 사용하였다.

1-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-4-메틸벤젠 (DI44)

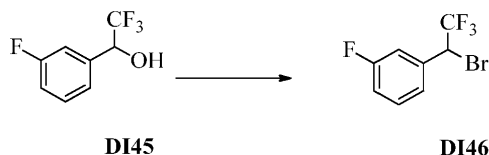


2,2,2-트리플루오로-1-(p-톨릴)에탄올 (DI43)을 무색 오일 (5.0 g, 99%)로서 분리하였다.

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.37 (d, $J = 8.0$ Hz, 2H), 7.23 (d, $J = 8.0$ Hz, 2H), 5.02 (m, 1H), 2.46 (m, 1H), 2.37 (s, 3H); ESIMS m/z 190 ($[\text{M}]^+$).

표제 화합물 (DI44)을 분리하였다 (3.0 g, 45%).

1-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-3-플루오로벤젠 (DI46)

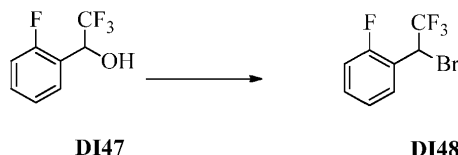


2,2,2-트리플루오로-1-(3-플루오로페닐)에탄올 (DI45)을 무색 점성 오일 (2.8 g, 93%)로서 분리하였다.

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.41 (m, 1H), 7.25 (m, 2H), 7.14 (m, 1H), 5.06 (m, 1H), 2.60 (s, 1H); ESIMS m/z 194 ($[\text{M}]^+$).

표제 화합물 (DI46)을 분리하였다 (2.0 g, 61%).

1-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-2-플루오로벤젠 (DI48)



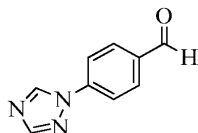
2,2,2-트리플루오로-1-(2-플루오로페닐)에탄올 (DI47)을 무색 오일 (2.5 g, 99%)로서 분리하였다.

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.40 (m, 1H), 7.43 (m, 1H), 7.24 (m, 1H), 7.13 (m, 1H), 5.42 (m, 1H), 2.65 (s, 1H); ESIMS m/z 194 ($[\text{M}]^+$).

표제 화합물 (DI48)을 분리하였다 (2.0 g, 61%).

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.61 (m, 1H), 7.40 (m, 1H), 7.23 (m, 1H), 7.10 (m, 1H), 5.40 (m, 1H); GCMS m/z 255 ($[\text{M}-\text{H}]^+$).

실시예 91: 4-(1H-1,2,4-트리아졸-1-일)벤즈알데히드 (DI5)의 제조



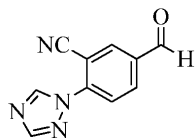
DMF (150 mL) 중 4-플루오로벤즈알데히드 (10.0 g, 80.6 mmol)의 교반 중인 용액에 K_2CO_3 (13.3 g, 96.7 mmol) 및 1,2,4-트리아졸 (6.67 g, 96.7 mmol)을 첨가하고 생성된 반응 혼합물을 6시간 동안 120°C 에서 교반하였다. 반응 완료 후 (TLC에 의함), 반응 혼합물을 물로 희석하고 EtOAc (3 x 100 mL)로 추출하였다. 합한 EtOAc 층을 물 및 염수로 세척하고, Na_2SO_4 상에서 건조시키고, 감압 하에 농축하여 표제 화합물을 고체 (9.0 g, 65%)로서 수득하였다.

mp

$145\text{--}149^\circ\text{C}$: ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 10.08 (s, 1H), 8.70 (s, 1H), 8.16 (s, 1H), 8.06 (d, $J = 8.0$ Hz, 2H), 7.92 (d, $J = 8.0$ Hz, 2H); ESIMS m/z 173.9 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

하기 화합물을 실시예 91에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

5-포르밀-2-(1H-1,2,4-트리아졸-1-일)벤조니트릴 (DI49)



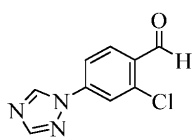
표제 화합물을 단리하였다 (2.8 g, 60%).

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 10.10

(s, 1H), 8.98 (s, 1H), 8.35 (s, 1H), 8.30 (d, 1H), 8.22 (s, 1H), 8.07 (d, 1H); IR (박막)

3433, 3120, 1702, 1599, 1510 cm^{-1} .

2-클로로-4-(1H-1,2,4-트리아졸-1-일)벤즈알데히드 (DI50)



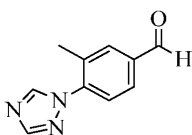
표제 화합물을 회백색 고체 (3.0 g, 40%)로서 단리하였다.

mp 149-151 $^{\circ}\text{C}$;

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 10.05 (s, 1H), 8.74 (s, 1H), 8.17 (s, 1H), 8.10 (s, 1H), 7.90 (m,

2H); ESIMS m/z 208.10 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

5-메틸-4-(1H-1,2,4-트리아졸-1-일)벤즈알데히드 (DI51)



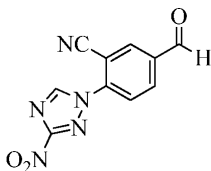
표제 화합물을 백색 고체 (0.5 g, 74%)로서 단리하였다.

mp 109-111 $^{\circ}\text{C}$; ^1H

NMR (400 MHz, $\text{D}_6\text{-DMSO}$) δ 10.06 (s, 1H), 9.00 (s, 1H), 8.30 (s, 1H), 7.99 (s, 1H), 7.92

(d, $J = 9.2$ Hz, 1H), 7.69 (d, $J = 9.2$ Hz, 1H), 2.30 (s, 3H); ESIMS m/z 188.13 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

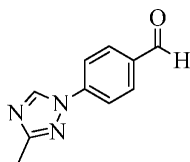
실시예 92: 5-포르밀-2-(3-니트로-1H-1,2,4-트리아졸-1-일)벤조니트릴 (DI52)의 제조



DMF (25 mL) 중 2-플루오로-5-포르밀벤조니트릴 (0.5 g, 3.3 mmol)의 교반 중인 용액에 K_2CO_3 (0.68 g, 4.95 mmol) 및 3-니트로-1,2,4-트리아졸 (0.45 g, 4.2 mmol)을 첨가하고 생성된 반응 혼합물을 14시간 동안 주위 온도에서 교반하였다. 반응 완료 후 (TLC), 반응 혼합물을 물로 희석하고 EtOAc로 추출하였다. 합한 EtOAc 층을 물 및 염수로 세척한 다음 Na_2SO_4 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 표제 화합물을 연황색 고체 (0.36 g, 45%)로서 수득하였다.

mp 170-172 °C; ^1H NMR (300 MHz, DMSO- d_6) δ 10.12 (s, 1H), 9.61 (s, 1H), 8.69 (s, 1H), 8.45 (d, J = 9.3 Hz, 1H), 8.23 (d, J = 9.3 Hz, 1H); ESIMS m/z 242.3 ([M-H] $^-$); IR (박막) 2238, 1705, 1551, 1314 cm^{-1} .

실시예 93: 4-(3-메틸-1H-1,2,4-트리아졸-1-일)벤즈알데히드 (DI53)의 제조

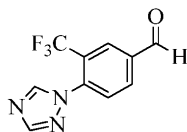


DMF (50 mL) 중 4-플루오로벤즈알데히드 (5.0 g, 40.32 mmol)의 교반 중인 용액에, K_2CO_3 (3.34 g, 40.32 mmol) 및 3-메틸-1,2,4-트리아졸 (3.34 g, 40.32 mmol)을 첨가하고 생성된 반응 혼합물을 4시간 동안 주위 온도에서 교반하였다. 반응 완료 후 (TLC), 반응 혼합물을 물로 희석하고 EtOAc (3x)로 추출하였다. 합한 EtOAc 층을 물 및 염수로 세척한 다음 Na_2SO_4 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 표제 화합물을 백색 고체 (4.1 g, 60%)로서 수득하였다.

mp 125-128°C; ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 10.05 (s, 1H), 8.76 (s, 1H), 8.02 (d, 2H), 7.85 (d, 2H), 2.50 (s, 3H); ESIMS m/z 188.04 ([M+H] $^+$).

하기 화합물을 실시예 93에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

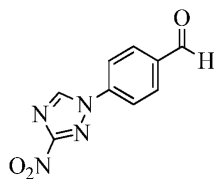
4-(1H-1,2,4-트리아졸-1-일)-3-(트리플루오로메틸)벤즈알데히드 (DI54)



표제 화합물을 백색 고체 (1.05g, 60%)로서 분리하였다.

mp 81-83 °C; ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 10.15 (s, 1H), 8.43 (s, 1H), 8.37 (s, 1H), 8.25 (d, J = 7.2 Hz, 1H), 8.18 (s, 1H), 7.79 (d, J = 7.2 Hz, 1H); ESIMS m/z 241.0 ([M] $^+$).

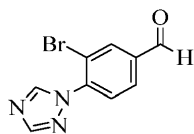
4-(3-니트로-1H-1,2,4-트리아졸-1-일)벤즈알데히드 (DI55)



표제 화합물을 연황색 고체 (0.10 g, 23%)로서 분리하였다.

mp 159-161 °C; ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 10.10 (s, 1H), 8.89 (s, 1H), 8.15 (m, 2H), 8.00 (m, 2H); ESIMS m/z 217.11 ([M-H] $^-$).

[1608] 3-브로모-4-(1H-1,2,4-트리아졸-1-일)벤즈알데히드 (DI56)



[1609]

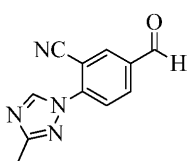
[1610] 표제 화합물을 백색 고체 (3.2 g, 51%)로서 분리하였다.

mp 126-128 °C; ¹H

NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 10.04 (s, 1H), 8.69 (s, 1H), 8.27 (M, 1H, 8.18 (s, 1H) 7.99 (d, *J* = 9.2 Hz, 1H), 7.76 (d, *J* = 9.2 Hz, 1H); ESIMS *m/z* 250.9 ([M]⁺).

[1611]

[1612] 5-포르밀-2-(3-메틸-1H-1,2,4-트리아졸-1-일)벤조니트릴 (DI57)



[1613]

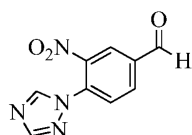
[1614] 표제 화합물을 백색 고체 (0.13 g, 30%)로서 분리하였다.

mp 147-149 °C; ¹H

NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 10.07 (s, 1H), 8.89 (s, 1H), 8.32 (d, *J* = 1.8 Hz, 1H), 8.24 (dd, *J* = 8.6, 1.3 Hz, 1H), 8.06 (d, *J* = 8.6 Hz, 1H), 2.54 (s, 3H); ESIMS *m/z* 213.09 ([M+H]⁺); IR (박막) 2239, 1697 cm⁻¹.

[1615]

[1616] 3-니트로-4-(1H-1,2,4-트리아졸-1-일)벤즈알데히드 (DI58)



[1617]

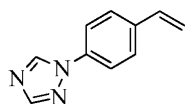
[1618] 표제 화합물을 연황색 고체 (3.0 g, 60%)로서 분리하였다.

mp 116-118 °C;

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 10.15 (s, 1H), 8.48 (s, 1H), 8.46 (s, 1H), 8.26 (d, *J* = 6.9 Hz, 1H), 8.16 (s, 1H), 7.83 (d, *J* = 6.9 Hz, 1H); ESIMS *m/z* 219.00 ([M+H]⁺).

[1619]

[1620] 실시예 94: 1-(4-비닐페닐)-1H-1,2,4-트리아졸 (DI59)의 제조



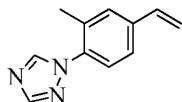
[1621]

[1622] 1,4-디옥산 (100 mL) 중 4-[1,2,4]트리아졸-1-일-벤즈알데히드 (9.0 g, 52 mmol)의 교반 용액에, 실온에서 K₂CO₃ (10.76 g, 78 mmol) 및 메틸 트리페닐 포스포늄 브로마이드 (22.2 g, 62.4 mmol)를 첨가하였다. 생성된 반응 혼합물을 18시간 동안 70°C로 가열하였다. 반응 완료 후 (TLC), 반응 혼합물을 실온으로 냉각하고 여과하고 수득된 여과물을 감압 하에 농축하였다. 플래쉬 크로마토그래피 (SiO₂, 100-200 메쉬; 석유 에테르 중 25-30% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 백색 고체 (5.6 g, 63%)로서 수득하였다.

[1623] ESIMS *m/z* 172.09 ([M+H]⁺).

하기 화합물을 실시예 94에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

1-(2-메틸-4-비닐페닐)-1H-1,2,4-트리아졸 (DI60)

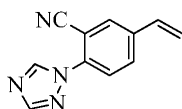


표제 화합물을 회백색 고체 (1.5 g, 76%)로서 분리하였다.

^1H NMR (400

MHz, CDCl_3) δ 8.25 (s, 1H), 8.11 (s, 1H), 7.35 (m, 2H), 7.27 (d, $J = 8.7$ Hz, 1H), 6.74 (m, 1H), 5.82 (d, $J = 17.3$ Hz, 1H), 5.36 (d, $J = 10.0$ Hz, 1H), 2.25 (s, 3H); ESIMS m/z 186.14 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

2-(1H-1,2,4-트리아졸-1-일)-5-비닐벤조니트릴 (DI61)

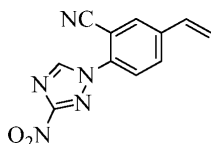


표제 화합물을 회백색 고체 (1.40 g, 71%)로서 분리하였다.

mp 126-129 °C;

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 8.76 (s, 1H), 8.18 (s, 1H), 7.82-7.84 (m, 1H), 7.72-7.80 (m, 2H), 6.70-6.80 (dd, $J = 17.6, 10.8$ Hz, 1H), 5.90-5.95 (d, $J = 17.6$ Hz, 1H), 5.50-5.70 (d, $J = 10.8$ Hz, 1H); ESIMS m/z 197.03 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

실시예 95: 2-(3-니트로-1H-1,2,4-트리아졸-1-일)-5-비닐벤조니트릴 (DI62)의 제조



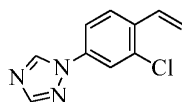
1,4-디옥산 (25 mL) 중 5-포르밀-2-(3-니트로-1H-1,2,4-트리아졸-1-일)벤조니트릴 (0.36 g, 1.49 mmol)의 교반 용액에, K_2CO_3 (0.3 g, 2.2 mmol) 및 메틸 트리페닐 포스포늄 브로마이드 (0.63 g, 1.79 mmol)를 첨가하였다. 생성된 반응 혼합물을 18시간 동안 100°C로 가열하였다. 반응 완료 후 (TLC), 반응 혼합물을 실온으로 냉각하고 여과하고 수득된 여과물을 감압 하에 농축하였다. 플래쉬 크로마토그래피 (SiO_2 , 100-200 메쉬; 석유 에테르 중 25-30% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 고체 (0.25 g, 70%)로서 수득하였다.

mp 103-105 °C; ^1H

NMR (400 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ 9.50 (s, 1H), 8.34 (m, 1H), 7.98 (d, $J = 7.8$ Hz, 1H), 7.68 (d, $J = 7.8$ Hz, 1H), 6.87 (m, 1H), 6.20 (d, $J = 15.7$ Hz, 1H), 5.56 (d, $J = 11.8$ Hz, 1H); ESIMS m/z 240.27 ($[\text{M}-\text{H}]^-$); IR (박막) 2240, 1514, 1312 cm^{-1} .

하기 화합물을 실시예 95에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

1-(3-클로로-4-비닐페닐)-1H-1,2,4-트리아졸 (DI63)



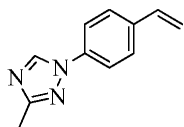
[1640] 표제 화합물을 희백색 고체 (2.3 g, 80%)로서 단리하였다.

mp 134-137 °C;

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 8.56 (s, 1H), 8.11 (s, 1H), 7.76 (s, 1H), 7.70 (d, *J* = 9.0 Hz, 1H), 7.57 (d, *J* = 9.0 Hz, 1H), 7.10 (m, 1H), 5.80 (d, *J* = 17.2 Hz, 1H), 5.47 (d, *J* = 12.4 Hz, 1H); ESIMS *m/z* 206.04 ([M+H]⁺).

[1641]

[1642] 3-메틸-1-(4-비닐페닐)-1H-1,2,4-트리아졸 (DI64)



[1643]

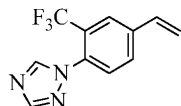
[1644] 표제 화합물을 백색 고체 (0.6 g, 60%)로서 단리하였다.

mp 109-111 °C; ¹H

NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 8.42 (s, 1H), 7.40-7.60 (m, 4H), 6.70-7.00 (dd, *J* = 17.6, 10.8 Hz, 1H), 5.80 (d, *J* = 17.6 Hz, 1H), 5.30 (d, *J* = 17.6 Hz, 1H), 2.50 (s, 3H); ESIMS *m/z* 186.20 ([M+H]⁺).

[1645]

[1646] 1-(2-(트리플루오로메틸)-4-비닐페닐)-1H-1,2,4-트리아졸 (DI65)



[1647]

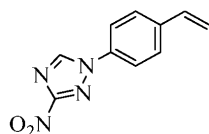
[1648] 표제 화합물을 무색 오일 (0.6 g, 60%)로서 단리하였다.

¹H NMR (400 MHz,

CDCl₃) δ 8.32 (s, 1H), 8.14 (s, 1H), 7.84 (s, 1H), 7.72 (d, *J* = 8.0 Hz, 1H), 7.50 (d, *J* = 7.6 Hz, 1H), 6.70-6.90 (dd, *J* = 17.6, 10.8 Hz, 1H), 5.90-6.00 (d, *J* = 17.6 Hz, 1H), 5.50-5.80 (d, *J* = 10.8 Hz, 1H); ESIMS *m/z* 240.16 ([M+H]⁺).

[1649]

[1650] 3-니트로-1-(4-비닐페닐)-1H-1,2,4-트리아졸 (DI66)



[1651]

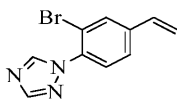
[1652] 표제 화합물을 연황색 고체 (61 mg, 20%)로서 단리하였다.

mp 137-139 °C;

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 8.60 (s, 1H), 7.68 (d, *J* = 7.7 Hz, 2H), 7.60 (d, *J* = 8.3 Hz, 2H), 6.77 (dd, *J* = 17.7, 10.8, 1H), 5.87 (d, *J* = 17.7 Hz, 1H), 5.42 (d, *J* = 10.8 Hz, 1H); ESIMS *m/z* 217.28 ([M+H]⁺).

[1653]

[1654] 1-(2-브로모-4-비닐페닐)-1H-1,2,4-트리아졸 (DI67)



[1655]

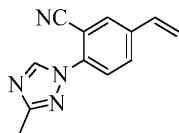
[1656] 표제 화합물을 백색 고체 (1.2 g, 40%)로서 분리하였다.

mp 75-77 °C; ¹H NMR

(400 MHz, CDCl₃) δ 8.48 (s, 1H), 8.12 (s, 1H), 7.75 (s, 1H) 7.42 (s, 2H), 6.70 (m, 1H), 5.83 (d, *J* = 18 Hz, 1H), 5.42 (d, *J* = 12 Hz, 1H); ESIMS *m/z* 249.1 ([M]⁺).

[1657]

[1658] 2-(3-메틸-1H-1,2,4-트리아졸-1-일)-5-비닐벤조니트릴 (DI68)



[1659]

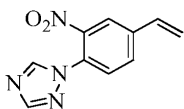
[1660] 표제 화합물을 회백색 고체 (0.6 g, 60%)로서 분리하였다.

mp 96-97 °C; ¹H

NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 8.66 (s, 1H), 7.80 (s, 1H), 7.74 (m, 2H), 6.73 (dd, *J* = 17.6 Hz, 10.8 Hz, 1H), 5.88 (d, *J* = 17.6 Hz, 1H), 5.49 (d, *J* = 10.8 Hz, 1H), 2.52 (s, 3H); ESIMS *m/z* 211.10 ([M+H]⁺); IR (박막) 2229 cm⁻¹.

[1661]

[1662] 1-(2-니트로-4-비닐페닐)-1H-1,2,4-트리아졸 (DI69)



[1663]

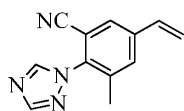
[1664] 표제 화합물을 황색 고체 (1.78 g, 60%)로서 분리하였다.

mp 102-104 °C; ¹H

NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 8.40 (s, 1H), 8.12 (s, 1H), 8.02 (s, 1H), 7.72-7.76 (d, *J* = 8.0 Hz, 1H), 7.52-7.56 (d, *J* = 17.6 Hz, 1H), 6.70-6.82 (dd, *J* = 17.6, 10.8 Hz, 1H), 5.85-6.00 (d, *J* = 17.6 Hz, 1H), 5.50-5.60 (d, *J* = 10.8, Hz 1H); ESIMS *m/z* 217.0 ([M+H]⁺).

[1665]

[1666] 실시예 96: 3-메틸-2-(1H-1,2,4-트리아졸-1-일)-5-비닐벤조니트릴 (DI70)의 제조



[1667]

[1668] 단계 1. 5-브로모-2-플루오로-3-메틸벤즈알데히드: THF (20 mL) 중 디-이소프로필 아민 (4.01 g, 39.88 mmol)의 교반 용액에 -78°C에서 n-BuLi (헥산 중 1.6 M) (19.9 mL, 31.91 mmol)을 10분의 기간에 걸쳐 서서히 적가하고, 반응 혼합물을 30분 동안 -78°C에서 교반하였다. THF (30.0 mL) 중 4-브로모-1-플루오로-2-메틸벤젠 (5.0 g, 26.6 mmol)의 용액을 -78°C에서 첨가하고, 반응 혼합물을 동일 온도에서 1시간 동안 교반하였다. DMF (5.0 mL)를 첨가하고 추가로 30분 동안 -78°C에서 교반하였다. TLC에 의해 반응을 모니터링한 다음; 반응 혼합물을 0°C에서 1N HCl 용액 (수성)으로 키텔하였다. 수성 층을 Et₂O로 추출하고, 물 및 포화 염수 용액으로 세척하였다. 합한 유기 층을 무수 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 조 화합물을 수득하고, 플래쉬 칼럼 크로마토그래피 (SiO₂, 100-200 메쉬; 5% EtOAc/ 석유 에테르로 용리)에 의해 정제하여 표제 화합물을 백색 고체 (3.6 g, 64%)로서 수득하였다.

mp 48-

50°C: ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 8.33 (s, 1H), 8.22 (s, 1H), 7.67 (s, 1H), 7.60 (s, 1H), 6.75 (dd, $J = 17.6, 10.8$ Hz, 1H), 5.92 (dd, $J = 17.6, 10.8$ Hz, 1H), 5.52 (d, $J = 17.6$ Hz, 1H), 2.21 (s, 3H); ESIMS m/z 211.35 ($[\text{M}-\text{H}]^-$).

[1669]

[1670]

단계 2. ((E)-5-브로모-2-플루오로-3-메틸벤즈알데히드 옥심: 에탄올 (50.0 mL) 중 5-브로모-2-플루오로-3-메틸벤즈알데히드 (3.5 g, 16.2 mmol)의 교반 용액에 주위 온도에서 NaOAc (2.0 g, 24.3 mmol) 및 히드록실아민 히드록로라이드 (1.69 g, 24.3 mmol)를 첨가하였다. 반응 혼합물을 3시간 동안 주위 온도에서 교반하였다. 반응 혼합물을 회전 증발기에서 농축하여 조 화합물을 수득하고, 이를 물로 세척하고, 여과하고 진공하에 건조시켜 표제 화합물을 백색 고체로서 수득하였다.

mp 126-127 °C; ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 8.32 (s, 1H), 7.73 (d, $J = 2.4$ Hz, 1H), 7.51 (s, 1H), 7.34 (d, $J = 2.4$ Hz, 1H), 2.25 (s, 3H); ESIMS m/z 232.10 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

[1671]

[1672]

단계 3. 5-브로모-2-플루오로-3-메틸벤조니트릴: 아세트산 무수물 (5.0 mL) 중 (E)-5-브로모-2-플루오로-3-메틸벤즈알데히드 옥심 (0.5 g, 2.2 mmol)의 교반 용액을 18시간 동안 환류 하에 가열하였다. 반응 혼합물을 물로 희석하고 EtOAc로 추출하였다. 합한 EtOAc 층을 염수로 세척하고 Na_2SO_4 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 조 화합물을 담갈색 점착성 물질 (0.4 g, 조 물질)로서 수득하였다.

ESIMS m/z 213.82 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

[1673]

[1674]

단계 4. 5-브로모-3-메틸-2-(1H-1,2,4-트리아졸-1-일)벤조니트릴 (DI71): DMF (10.0 mL) 중 5-브로모-2-플루오로-3-메틸벤조니트릴 (1.0 g, 47.716 mmol)의 교반 용액에 주위 온도에서 K_2CO_3 (1.95 g, 14.14 mmol), 이어서 1H-1,2,4-트리아졸 (0.811 g, 9.433 mmol)을 첨가하였다. 반응 혼합물을 18시간 동안 140°C로 가열하였다. 반응 혼합물을 주위 온도로 냉각하고, 물로 희석하고 EtOAc (2 x 100 mL)로 추출하였다. 합한 EtOAc 층을 염수로 세척하고 Na_2SO_4 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 조 화합물을 수득하고 이를 플래쉬 칼럼 크로마토그래피 (SiO_2 , 100-200 메쉬; 30% EtOAc/ 석유 에테르로 용리)에 의해 정제하여 표제 화합물을 분홍색 고체 (0.6 g, 49%)로서 수득하였다.

^1H

NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 8.39 (s, 1H), 8.23 (s, 1H), 7.91 (d, $J = 2.4$ Hz, 2H), 2.21 (s, 3H), ESIMS m/z 262.57 ($[\text{M}+\text{H}]^+$); IR (박막) 2231, 554 cm^{-1} .

[1675]

[1676]

단계 5. 3-메틸-2-(1H-1,2,4-트리아졸-1-일)-5-비닐벤조니트릴 (DI70): 톨루엔 (20.0 mL) 중 5-브로모-3-메틸-2-(1H-1,2,4-트리아졸-1-일)벤조니트릴 (0.6 g, 2.3 mmol), K_2CO_3 (0.95 g, 6.87 mmol), 비닐 보론산 무수물 (0.82 g, 3.43 mmol) 및 트리페닐포스핀 (0.13 g, 0.114 mmol)의 혼합물을 교반하고 30분 동안 아르곤으로 탈기하였다. 반응 혼합물을 18시간 동안 환류 하에 가열하였다. 반응 혼합물을 주위 온도로 냉각하고, 물로 희석하고 EtOAc (2 x 100 mL)로 추출하였다. 합한 EtOAc 층을 염수로 세척하고, Na_2SO_4 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 조 화합물을 수득하고 이를 플래쉬 칼럼 크로마토그래피 (SiO_2 , 100-200 메쉬; 30% EtOAc/ 석유 에테르로 용리)에 의해 정제하여 표제 화합물을 분홍색 고체 (0.25 g, 52%)로서 수득하였다.

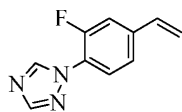
^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 8.33 (s, 1H), 8.22 (s, 1H), 7.67 (s, 1H), 7.60 (s, 1H), 6.75 (dd, $J = 17.6, 10.8$ Hz, 1H), 5.92 (d, $J = 17.6, 10.8$ Hz, 1H), 5.52 (d, $J = 10.8$ Hz, 1H), 2.21 (s, 3H), ESIMS m/z 211.35 ($[\text{M}+\text{H}]^+$); IR (박막) 2236, 1511 cm^{-1} .

[1677]

[1678]

하기 화합물을 실시예 96의 단계 4 및 5에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

[1679] 1-(2-플루오로-4-비닐페닐)-1H-1,2,4-트리아졸 (DI72)



[1680]

[1681] 1-(4-브로모-2-플루오로페닐)-1H-1,2,4-트리아졸 (DI73)을 연황색 고체 (3.0 g, 75%)로서 분리하였다.

mp 113-116 °C; ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 8.69 (s, 1H), 8.13 (m, 2H), 7.50 (m, 1H), 7.21 (m, 1H); ESIMS *m/z* 241.93 ([M]⁺).

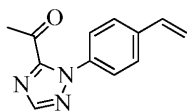
[1682]

[1683] 표제 화합물 (DI72)을 황색 고체 (1.0 g, 71%)로서 분리하였다.

mp 67-70 °C; ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 8.67 (s, 1H), 8.13 (s, 1H), 7.94 (m, 1H), 7.41 (m, 1H), 7.24 (s, 1H), 6.75 (dd, *J* = 17.6, 10.8 Hz, 1H), 5.81 (d, *J* = 17.6 Hz, 1H), 5.37 (d, *J* = 10.8 Hz, 1H); ESIMS *m/z* 190.00 ([M+H]⁺).

[1684]

[1685] 실시예 119: 1-(1-(4-비닐페닐)-1H-1,2,4-트리아졸-5-일)에탄논 (DI78)의 제조



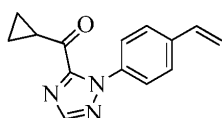
[1686]

[1687] 25 mL의 THF 중 1-(4-비닐-페닐)-1H-[1,2,4]트리아졸 (1 g, 5.8 mmol)의 교반 용액에, -78°C에서 n-BuLi (0.37 g, 5.8 mmol)를 첨가하고 30분 동안 교반하였다. 여기에 THF 중 N-메톡시-N-메틸 아세트아미드 (0.66 g, 6.4 mmol)를 첨가하고 생성된 반응 혼합물을 16시간 동안 주위 온도에서 교반하였다. 반응 혼합물을 포화 수성 NH₄Cl 용액으로 킨칭하고 EtOAc (3 x 50 mL)로 추출하였다. 합한 EtOAc 층을 염수로 세척하고 황산나트륨 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하였다. 조 화합물을 플래쉬 크로마토그래피 (SiO₂, 100-200 메쉬, 석유 에테르 중 40% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 회백색 고체 (280 mg, 23%)로서 수득하였다.

mp 97-98 °C; ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 8.10 (s, 1H), 7.50 (d, 2H), 7.38 (d, 2H), 6.68 (dd, 1H), 5.85 (d, 1H), 5.38 (d, 1H), 2.75 (s, 3H); ESIMS *m/z* 214.14 ([M+H]⁺).

[1688]

[1689] 실시예 120: 시클로프로필(1-(4-비닐페닐)-1H-1,2,4-트리아졸-5-일)메탄온 (DI79)의 제조



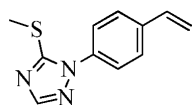
[1690]

[1691] 25 mL의 THF 중 1-(4-비닐-페닐)-1H-[1,2,4]트리아졸 (1 g, 5.8 mmol)의 교반 용액에, -78°C에서 n-BuLi (0.37 g, 5.8 mmol)를 첨가하고 30분 동안 교반하였다. 여기에 THF 중 N-메톡시 N-메틸시클로프로폭시드 (0.82 g, 6.4 mmol)를 첨가하고 생성된 반응 혼합물을 16시간 동안 주위 온도에서 교반하였다. 반응 혼합물을 포화 수성 NH₄Cl 용액으로 킨칭하고 EtOAc (3 x 25 mL)로 추출하였다. 합한 EtOAc 층을 염수로 세척하고 황산나트륨 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하였다. 조 화합물을 플래쉬 크로마토그래피 (SiO₂, 100-200 메쉬, 석유 에테르 중 40% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 회백색 고체 (420 mg, 30%)로서 수득하였다.

mp 90-91 °C; ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 8.12 (s, 1H), 7.50 (d, *J* = 7.8 Hz, 2H), 7.38 (d, *J* = 7.8 Hz, 2H), 6.75 (dd, *J* = 16.3, 10.7 Hz, 1H), 5.81 (d, *J* = 16.3 Hz, 1H), 5.35 (d, *J* = 10.7 Hz, 1H), 3.22 (m, 1H), 1.27(m, 2H), 1.18 (m, 2H); ESIMS *m/z* 240.18 ([M+H]⁺); IR (박막) 2922, 1630 cm⁻¹.

[1692]

[1693] 실시예 121: 5-(메틸티오)-1-(4-비닐페닐)-1H-1,2,4-트리아졸 (DI80)의 제조



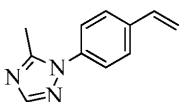
[1694]

[1695] 50 mL의 THF 중 1-(4-비닐-페닐)-1H-[1,2,4]트리아졸 (1 g, 5.8 mmol)의 교반 용액에, -78℃에서 n-BuLi (0.41 g, 6.4 mmol)를 첨가하고 30분 동안 교반하였다. 여기에 THF 중 디메틸디설피드 (0.6 g, 6.43 mmol)를 첨가하고 생성된 반응 혼합물을 16시간 동안 주위 온도에서 교반하였다. 반응 혼합물을 포화 수성 NH₄Cl 용액으로 킨칭하고 EtOAc (3 x 25 mL)로 추출하였다. 합한 EtOAc 층을 염수로 세척하고 황산나트륨 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하였다. 조 화합물을 플래쉬 크로마토그래피 (SiO₂, 100-200 메쉬, 석유 에테르 중 40% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 회백색 고체 (0.6 g, 48%)로서 수득하였다.

mp 68-70 °C; ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.96 (s, 1H), 7.05 (m, 4H), 6.75 (dd, *J* = 16.4, 10.7 Hz, 1H), 5.81 (d, *J* = 16.4 Hz, 1H), 5.35 (d, *J* = 10.7 Hz, 1H), 2.73 (s, 3H); ESIMS *m/z* 218.09 ([M+H]⁺).

[1696]

[1697] 실시예 122: 5-메틸-1-(4-비닐페닐)-1H-1,2,4-트리아졸 (DI81)의 제조



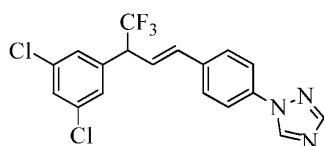
[1698]

[1699] 10 mL의 THF 중 1-(4-비닐-페닐)-1H-[1,2,4]트리아졸 (0.5 g, 2.9 mmol)의 교반 용액에, -78℃에서 n-BuLi (0.22 g, 3.5 mmol)를 첨가하고 30분 동안 교반하였다. 여기에 THF 중 메틸 아이오다이드 (0.50 g, 3.5 mmol)를 첨가하고 생성된 반응 혼합물을 16시간 동안 주위 온도에서 교반하였다. 반응 혼합물을 포화 수성 NH₄Cl 용액으로 킨칭하고 EtOAc (3 x 25 mL)로 추출하였다. 합한 EtOAc 층을 염수로 세척하고 황산나트륨 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하였다. 조 화합물을 플래쉬 크로마토그래피 (SiO₂, 100-200 메쉬, 석유 에테르 중 40% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 연갈색 액체 (250 mg, 46%)로서 수득하였다.

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.93 (s, 1H), 7.55 (d, *J* = 9 Hz, 2H), 7.42 (d, *J* = 9 Hz, 2H), 6.76 (dd, *J* = 18, 11 Hz, 1H), 5.83 (d, *J* = 18 Hz, 1H), 5.38 (d, *J* = 11 Hz, 1H), 2.55 (s, 3H); ESIMS *m/z* 186.13 ([M+H]⁺); IR (박막) 1517, 1386, 1182, 847 cm⁻¹.

[1700]

[1701] 실시예 97: (E)-1-(4-(3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)페닐)-1H-1,2,4-트리아졸 (DC1)의 제조



[1702]

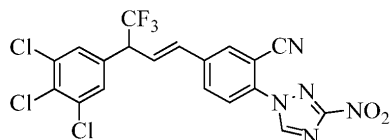
[1703] 1,2-디클로로벤젠 (25 mL) 중 1-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로-에틸)-3,5-디클로로-벤젠 (2.0 g, 6.51 mmol)의 교반 용액에, 1-(4-비닐-페닐)-1H-[1,2,4]트리아졸 (2.22 g, 13.0 mmol), CuCl (64 mg, 0.65 mmol) 및 2,2-비피리딘 (0.2 g, 1.3 mmol)을 첨가하였다. 생성된 반응 혼합물을 30분 동안 아르곤으로 탈기한 다음, 24시간 동안 180℃에서 교반하였다. 반응 완료 후 (TLC), 반응 혼합물을 주위 온도로 냉각하고 여과하고 여과물을 감압 하에 농축하였다. 플래쉬 크로마토그래피 (SiO₂, 100-200 메쉬; 석유 에테르 중 25-30% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 회백색 고체 (0.8 g, 32%)로서 수득하였다.

mp 93–97 °C; ¹H NMR

(300 MHz, CDCl₃) δ 8.56 (s, 1H), 8.11 (s, 1H), 7.68 (d, *J* = 8.4 Hz, 2H), 7.54 (d, *J* = 8.4 Hz, 2H), 7.38 (t, *J* = 1.8 Hz, 1H), 7.29 (s, 2H), 6.62 (d, *J* = 15.6 Hz, 1H), 6.42 (dd, *J* = 15.6, 8.2 Hz, 1H), 4.15 (m, 1H); ESIMS *m/z* 398.05 ([M+H]⁺).

표 1의 화합물 DC2-DC37, DC44, DC45, DC47-49, DC50, DC51, DC54, DC58, DC60, DC62, 및 DC63-DC67을 실시예 97에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

실시예 98: (E)-2-(3-니트로-1H-1,2,4-트리아졸-1-일)-5-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤조니트릴 (DC40)의 제조

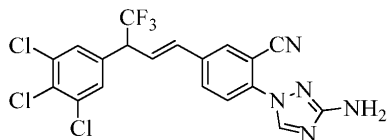


1,2-디클로로벤젠 (10 mL) 중 2-(3-니트로-1H-1,2,4-트리아졸-1-일)-5-비닐벤조니트릴 (0.9 g, 3.7 mmol)의 교반 용액에, 5-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-1,2,3-트리클로로벤젠 (2.5 g, 7.5 mmol), CuCl (73 mg, 0.74 mmol) 및 2,2-비피리딘 (0.23 g, 1.49 mmol)을 첨가하고 생성된 반응 혼합물을 30분 동안 아르곤으로 탈기 한 다음 14시간 동안 180°C에서 교반하였다. 반응 완료 후 (TLC), 반응 혼합물을 주위 온도로 냉각하고 여과하고 여과물을 감압 하에 농축하였다. 플래쉬 크로마토그래피 (SiO₂, 100-200 메쉬, 석유 에테르 중 25-30% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 회백색 고체 (0.9 g, 50%)로서 수득하였다.

mp 70–73 °C; ¹H

NMR (300 MHz, CDCl₃) δ 8.86 (s, 1H), 7.88 (m, 3H), 7.44 (s, 2H), 6.67 (d, *J* = 16.0 Hz, 1H), 6.56 (dd, *J* = 16.0, 7.6 Hz, 1H), 4.19 (m, 1H); ESIMS *m/z* 436.11 ([M-2H]⁻).

실시예 99: (E)-2-(3-아미노-1H-1,2,4-트리아졸-1-일)-5-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤조니트릴 (DC41)의 제조



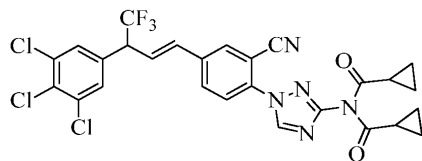
MeOH (10 mL) 중 (E)-2-(3-니트로-1H-1,2,4-트리아졸-1-일)-5-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤조니트릴 (0.6 g, 1.2 mmol)의 교반 용액에, Zn 분진 (0.39 g, 5.98 mmol) 및 포화 수성 NH₄Cl 용액 (5 mL)을 첨가하고 생성된 반응 혼합물을 2시간 동안 주위 온도에서 교반하였다. 반응 완료 후 (TLC), 반응물을 감압 하에 농축하였다. 반응물을 CH₂Cl₂로 희석하고, 셀라이트® 층을 통해 여과하고, 수득된 여과물을 감압 하에 농축하여 표제 화합물을 고체 (0.5 g, 89%)로서 수득하였다.

mp 72–75 °C; ¹H NMR

(300 MHz, DMSO-*d*₆) δ 8.72 (s, 1H), 8.26 (s, 1H), 8.01 (d, *J* = 8.4 Hz, 1H), 7.91 (s, 2H), 7.77 (d, *J* = 8.4 Hz, 1H), 6.42 (dd, *J* = 15.6, 9.2 Hz, 1H), 6.83 (d, *J* = 15.6 Hz, 1H), 5.87 (s, 2H), 4.89 (m, 1H); ESIMS *m/z* 469.95 ([M-H]⁻).

표 1의 화합물 DC38을 실시예 99에 개시된 절차에 따라 제조하였다. 또한, 표 1의 화합물 DC55를, NH₄Cl 대신에 암모늄 포르메이트를 사용한 것을 제외하고는 실시예 99에 개시된 절차에 따라 DC54로부터 제조하였다.

실시예 100: (E)-N-(1-(2-시아노-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)페닐)-1H-1,2,4-트리아졸-3-일)-N-(시클로프로판카르보닐)시클로프로판카르복스아미드 (DC42)의 제조



[1716]

[1717]

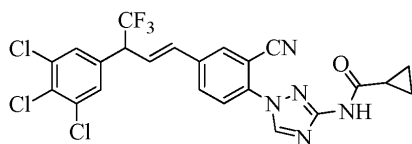
주위 온도에서 CH_2Cl_2 중 (E)-2-(3-아미노-1H-1,2,4-트리아졸-1-일)-5-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔일)벤조니트릴 (0.1 g, 0.21 mmol)의 교반 용액에, 시클로프로필카르보닐 클로라이드 (0.045 g, 0.42 mmol)를 첨가하고 반응 혼합물을 주위 온도에서 2시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 CH_2Cl_2 로 희석하고 물 및 염수로 세척하고 Na_2SO_4 상에서 건조시켰다. 감압 하에 농축하고 정제용 HPLC에 의해 정제하여 표제 화합물을 고체 (0.09 g, 79%)로서 수득하였다.

mp 104-107 °C; ^1H NMR (300 MHz, CDCl_3) δ 8.78 (s, 2H), 7.83 (s, 1H), 7.80 (m, 2H), 7.42 (s, 2H), 6.65 (d, $J = 16.4$ Hz, 1H), 6.51 (dd, $J = 7.6, 8.0$ Hz, 1H), 4.17 (m, 1H), 2.16 (m, 2H), 1.25 (m, 4H), 1.00 (m, 4H); ESIMS m/z 609.98 ($[\text{M}+\text{H}]^+$); IR (박막) 2234, 1714, 1114, 807 cm^{-1} .

[1718]

[1719]

실시예 101: (E)-N-(1-(2-시아노-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)페닐)-1H-1,2,4-트리아졸-3-일)시클로프로판카르복사미드 (DC43)의 제조



[1720]

[1721]

0°C에서 CH_2Cl_2 중 (E)-2-(3-아미노-1H-1,2,4-트리아졸-1-일)-5-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔일)벤조니트릴 (0.15 g, 0.31 mmol)의 교반 용액에, TEA (0.1 g, 1 mmol) 및 시클로프로필카르보닐 클로라이드 (0.04 g, 0.38 mmol)를 첨가하고 반응 혼합물을 0°C에서 1시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 CH_2Cl_2 로 희석하고 물 및 염수로 세척하고 Na_2SO_4 상에서 건조시켰다. 감압 하에 농축하고 칼럼 크로마토그래피 (SiO_2 , 100-200 메쉬)에 의해 정제하여 표제 화합물을 고체 (66 mg, 34%)로서 수득하였다.

mp 109-112 °C; ^1H NMR (300 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ 10.94 (br s, 1H), 8.36 (s, 1H), 8.08 (m, $J = 8.4$ Hz, 1H), 7.91 (s, 2H), 7.84 (d, $J = 8.4$ Hz, 1H), 7.13 (dd, $J = 15.6, 9.2$ Hz, 1H), 6.87 (d, $J = 15.6$ Hz, 1H), 4.92 (m, 1H), 1.99 (br s, 1H), 0.82 (s, 4H); ESIMS m/z 540.04 ($[\text{M}+\text{H}]^+$); IR (박막) 3233, 2233, 1699, 1114, 807 cm^{-1} .

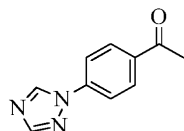
[1722]

[1723]

표 1의 화합물 DC39를 실시예 101에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

[1724]

실시예 102: 1-(4-(1H-1,2,4-트리아졸-1-일)페닐)에타논 (DI74)의 제조



[1725]

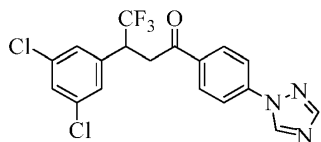
[1726]

DMF (100 mL) 중 4-브로모아세트페논 (10 g, 50 mmol)의 교반 용액에, 1,2,4-트리아졸 (5 g, 75 mmol), Cs_2CO_3 (32.6 g, 100.5 mmol) 및 CuI (1.4 g, 10.1 mmol)를 첨가하고 생성된 반응 혼합물을 48시간 동안 환류하였다. 반응 완료 후 (TLC에 의함), 반응 혼합물을 주위 온도로 냉각하고 물 (200 mL)로 희석하고 EtOAc로 추출하였다. 합한 유기 층을 염수로 세척하고 Na_2SO_4 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하였다. Et₂O로 세척함으로써 정제하여 표제 화합물을 고체 (5g, 96%)로서 수득하였다.

¹H NMR (400

MHz, CDCl₃) δ 8.71 (s, 1H), 8.16, (s, 1H), 8.13 (d, *J* = 8.6 Hz, 2H), 7.83 (d, *J* = 8.6 Hz, 2H), 2.66 (s, 3H); ESIMS *m/z* 186.02 ([M-H]).

실시예 103: 1-(4-(1H-1,2,4-트리아졸-1-일)페닐)-3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부탄-1-온 (DI75)의 제조



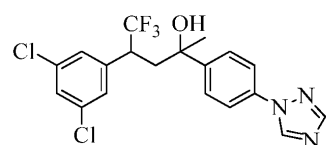
단계 1. 1-(4-(1-(트리메틸실릴옥시)비닐)페닐)-1H-1,2,4-트리아졸 (DI76) 0℃에서 CH₂Cl₂ 중 1-(4-(1H-1,2,4-트리아졸-1-일)페닐)에탄논 (4.5 g, 24.0 mmol)의 교반 용액에, TEA (3.7 g, 36.1 mmol) 및 트리메틸실릴 트리플루오로메탄술포네이트 (8 g, 36 mmol)를 첨가하고 생성된 반응 혼합물을 1시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 포화 수성 NaHCO₃ 용액과 에테르의 혼합물로 켄칭하였다. 에테르 층을 분리하고, 염수로 세척하고, Na₂SO₄ 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 표제 화합물 (5.5 g)을 수득하고 이를 다음 단계에 직접 사용하였다.

단계 2. 1-(4-(1H-1,2,4-트리아졸-1-일)페닐)-3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부탄-1-온 (DI75): 1,2-디클로로벤젠 (30 mL) 중 1-(4-(1-(트리메틸실릴옥시)비닐)페닐)-1H-1,2,4-트리아졸 (6 g, 23 mmol) 및 1-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로-에틸)-3,5-디클로로벤젠 (7.1 g, 34.7 mmol)의 교반 용액을 아르곤으로 탈기하였다. 여기에 CuCl (0.23 g, 2.31 mmol) 및 2,2-비피리딘 (0.73 g, 4.63 mmol)을 상기 반응 혼합물에 첨가하고 생성된 반응 혼합물을 18시간 동안 180℃로 가열하였다. 반응 완료 후 (TLC에 의한), 반응 혼합물을 실리카 겔 상으로 흡수시키고 칼럼 크로마토그래피 (SiO₂; 석유 에테르 중 10% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 고체 (3 g, 31%)로서 수득하였다.

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 8.67 (s,

1H), 8.15 (s, 1H), 8.10 (d, *J* = 8.3 Hz, 2H), 7.82 (d, *J* = 8.3 Hz, 2H), 7.33 (m, 1H), 7.30 (m, 2H), 4.20 (m, 1H), 3.63 (m, 2H); ESIMS *m/z* 412. 14 ([M-H]).

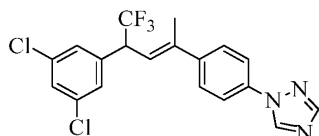
실시예 104: 2-(4-(1H-1,2,4-트리아졸-1-일)페닐)-4-(3,5-디클로로페닐)-5,5,5-트리플루오로펜탄-2-올 (DI77)의 제조



0℃로 냉각된 THF 중 1-(4-(1H-1,2,4-트리아졸-1-일)페닐)-3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부탄-1-온 (300 mg, 0.726 mmol)의 용액에 메틸마그네슘 브로마이드 (450 mg, 5 mmol)를 적가하였다. 반응물을 0℃에서 3시간 동안 교반한 다음, 반응 혼합물을 포화 수성 NH₄Cl 용액으로 켄칭하고 EtOAc로 추출하였다. 합한 EtOAc 층을 물 및 염수로 세척하고, Na₂SO₄ 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하였다. 칼럼 크로마토그래피 (SiO₂, 100-200 메쉬; 석유 에테르 중 20%-25% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 고체 (100 mg, 32%)로서 수득하였다.

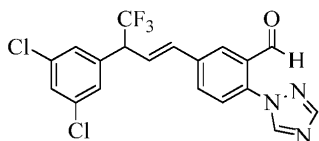
¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 2종의 부분입체이성질체 8.58 (s, 1H, 부차), 8.48 (s, 1H, 주요), 8.13 (s, 1H, 부차), 8.09 (s, 1H, 주요), 7.70 (d, *J* = 9.0 Hz, 2H, 부차), 7.53 (d, *J* = 9.0 Hz, 2H, 부차), 7.40 (d, *J* = 9.0 Hz, 2H, 주요), 7.31 (m, 1H, 부차), 7.27 (d, *J* = 9.0 Hz, 2H, 주요), 7.20 (m, 2H, 부차), 7.01 (m, 1H, 주요), 6.75 (m, 2H, 주요), 3.50 (m, 1H), 2.50 (m, 2H), 1.56 (s, 3H, 주요), 1.54 (s, 3H, 부차); ESIMS *m/z* 430.05 ([M+H]⁺).

실시예 105: (E)-1-(4-(4-(3,5-디클로로페닐)-5,5,5-트리플루오로펜트-2-엔-2-일)페닐)-1H-1,2,4-트리아졸 (DC68)의 제조



톨루엔 중 2-(4-(1H-1,2,4-트리아졸-1-일)페닐)-4-(3,5-디클로로페닐)-5,5,5-트리플루오로펜탄-2-올 (100 mg, 0.233 mmol)의 용액에 촉매량의 p-톨루엔술폰산을 첨가하고 물을 12시간의 과정에 걸쳐 공비 증류에 의해 제거하였다. 반응 혼합물을 실온으로 냉각하고, EtOAc에 용해시켰다. 용액을 포화 수성 NaHCO₃ 용액 및 염수로 세척하고, Na₂SO₄ 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하였다. 칼럼 크로마토그래피 (SiO₂, 100-200 메쉬; 석유 에테르 중 20%-25% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 고체 (30 mg, 31%)로서 수득하였다.

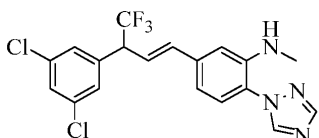
실시예 123: (E)-5-(3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-2-(1H-1,2,4-트리아졸-1-일)벤즈알데히드 (DC52)의 제조



-78℃에서 톨루엔 (10 mL) 중 (E)-5-(3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-2-(1H-1,2,4-트리아졸-1-일)벤조니트릴 (0.3 g, 0.71 mmol)의 교반 용액에 디이소부틸알루미늄 히드라이드 (DIBAL-H, 톨루엔 중 1.0 M 용액; 0.85 mL)를 적가하고, 반응 혼합물을 20분 동안 -78℃에서 교반하였다. 반응 혼합물을 1 N HCl 용액을 첨가하여 킨칭한 다음, 수성 층을 EtOAc (2x)로 추출하였다. 합한 유기 층을 염수로 세척하고, Na₂SO₄ 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하였다. 조 화합물을 플래쉬 칼럼 크로마토그래피 (SiO₂; 50% EtOAc/석유 에테르)에 의해 정제하여 표제 화합물을 황색 오일로서 수득하였다.

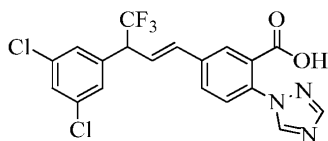
표 1의 화합물 DC53을 실시예 123에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

실시예 124: (E)-5-(3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-N-메틸-2-(1H-1,2,4-트리아졸-1-일)아닐린 (DC57)의 제조



CH₂Cl₂ (10 mL) 중 (E)-5-(3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-2-(1H-1,2,4-트리아졸-1-일)아닐린 (0.3 g, 0.7 mmol)의 교반 용액에 TEA (0.155 mL, 1.09 mmol) 및 메틸 아이오다이드 (0.124 g, 0.873 mmol)를 첨가하였다. 반응물을 18시간 동안 주위 온도에서 교반하였다. CH₂Cl₂ 층을 물 및 염수로 세척하고, Na₂SO₄ 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하였다. 조 화합물을 플래쉬 칼럼 크로마토그래피 (SiO₂; 50% EtOAc/석유 에테르)에 의해 정제하여 표제 화합물을 황색 반고체 (0.07 g, 70%)로서 수득하였다.

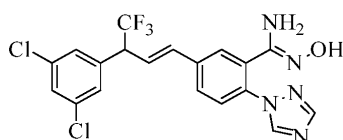
[1747] 실시예 125: (E)-5-(3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-2-(1H-1,2,4-트리아졸-1-일)벤조산 (DC61)의 제조



[1748]

[1749] 6 N HCl (10 mL) 중 (E)-에틸 5-(3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-2-(1H-1,2,4-트리아졸-1-일)벤조에이트 (0.2 g, 0.4 mmol)의 용액을 18시간 동안 100℃에서 교반하였다. 반응물을 주위 온도로 냉각하고, 이로써 백색 고체 침전물이 생성되었다. 침전물을 여과하여 표제 화합물을 백색 고체 (0.12 g, 60%)로서 수득하였다.

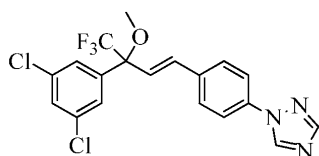
[1750] 실시예 126: (Z)-5-(E)-3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-N'-히드록시-2-(1H-1,2,4-트리아졸-1-일)벤즈이미드아미드 (DC59)의 제조



[1751]

[1752] 9:1 에탄올/물 혼합물 (10 mL) 중 (E)-5-(3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-엔-1-일)-2-(1H-1,2,4-트리아졸-1-일)벤조니트릴 (0.3 g, 0.71 mmol), NaOAc (0.087 g, 1.065 mmol) 및 히드록실암모늄클로라이드 (0.072 g, 1.065 mmol)의 용액을 8시간 동안 70℃에서 교반하였다. 반응물을 주위 온도로 냉각하고, 에탄올을 증발시켰다. 잔류물을 물에 용해시키고 EtOAc (2x)로 추출하였다. 합한 유기 층을 염수로 세척하고, Na₂SO₄ 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 표제 화합물을 회백색 고체로서 수득하였다.

[1753] 실시예 127: (E)-1-(4-(3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로-3-메톡시부트-1-엔-1-일)페닐)-1H-1,2,4-트리아졸 (DC70)의 제조



[1754]

[1755] 단계 1. (E)-3-(4-(1H-1,2,4-트리아졸-1-일)페닐)-1-(3,5-디클로로페닐)프로프-2-엔-1-온: 에탄올 (20 mL) 중 1-(3,5-디클로로페닐)에타논 (0.5 g, 2.6 mmol)의 용액에 4-(1H-1,2,4-트리아졸-1-일)벤즈알데히드 (0.46 g, 2.65 mmol)를 첨가하고 반응물을 0℃로 냉각하였다. 이어서, 물 (10 mL) 중 NaOH (0.22 g, 5.29 mmol)을 첨가하고 반응물을 0℃에서 2시간 동안 교반하였다. 반응물을 EtOAc로 추출하고 합한 유기 층을 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 표제 화합물 (0.149 g, 17%)을 수득하였다.

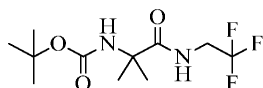
[1756] ESIMS *m/z* 430.05 ([M+H]⁺) 344.08

[1757] 단계 2. (E)-4-(4-(1H-1,2,4-트리아졸-1-일)페닐)-2-(3,5-디클로로페닐)-1,1,1-트리플루오로부트-3-엔-2-올 (DC69): THF (150 mL) 중 (E)-3-(4-(1H-1,2,4-트리아졸-1-일)페닐)-1-(3,5-디클로로페닐)프로프-2-엔-1-온 (1 g, 3 mmol)의 용액에 0℃에서 트리플루오로메틸트리메틸실란 (0.517 g, 3.644 mmol) 및 테트라-*n*-부틸암모늄 플루오라이드 (TBAF) (1.0 M, 1 mL)를 첨가하였다. 반응물을 주위 온도로 서서히 가온하고 2시간 동안 교반하였다. 이어서, 반응물을 0℃로 냉각하고 5 M HCl 용액을 첨가하고 반응물을 주위 온도에서 추가로 4시간 동안 교반하였다. 반응물을 CH₂Cl₂로 추출하고 합한 유기 층을 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하였다. 조 화합물을 플래쉬 칼럼 크로마토그래피 (SiO₂; 25% EtOAc/ 헥산)에 의해 정제하여 표제 화합물을 회백색 고체 (0.3 g, 25%)로서 수득하였다.

[1758] 단계 3. (E)-1-(4-(3-(3,5-디클로로페닐)-4,4,4-트리플루오로-3-메톡시부트-1-엔-1-일)페닐)-1H-1,2,4-트리아

줄 (DC70): THF (5 mL) 중 (E)-4-(4-(1H-1,2,4-트리아졸-1-일)페닐)-2-(3,5-디클로로페닐)-1,1,1-트리플루오로부트-3-엔-2-올 (0.15 g, 0.36 mmol)의 용액에 0℃에서 NaH (60%, 10 mg, 0.44 mmol)를 첨가하였다. 반응물을 30분 동안 0℃에서 교반한 다음, 메틸 아이오다이드 (61 mg, 0.44 mmol)를 서서히 첨가하고 반응물을 주위 온도로 가온하고 4시간 동안 교반하였다. 반응물을 수성 NH₄Cl 용액으로 킨칭하고 CH₂Cl₂로 추출하였다. 합한 유기층을 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고 감압 하에 농축하여 표제 화합물을 회백색 고체 (55 mg, 35%)로서 수득하였다.

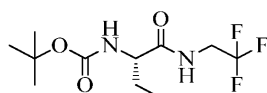
실시예 128: tert-부틸 (2-메틸-1-옥소-1-((2,2,2-트리플루오로에틸)아미노)프로판-2-일)카르바메이트의 제조



메틸렌 클로라이드 (50 mL) 중 2-((tert-부톡시카르보닐)아미노)-2-메틸프로판산 (4.58 g, 22.6 mmol)의 교반 용액에 EDC·HCl (4.75 g, 24.8 mmol)에 이어서 2,2,2-트리플루오로에틸아민 (2.67 g, 27.0 mmol) 및 DMAP (3.03 g, 24.8 mmol)를 첨가하였다. 반응 혼합물을 주위 온도에서 18시간 동안 교반한 다음, 수성 5% NaHSO₄ (2x), 수성 10 % HCl (1x) 및 수성 포화 NaHCO₃ (2x)으로 세척하였다. 유기 상을 건조 (MgSO₄)시키고, 진공 하에 농축시켜 표제 화합물을 백색 고체 (2.97 g, 46%)로서 수득하였다.

하기 분자를 **실시예 128**에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

(S)-tert-부틸 (1-옥소-1-((2,2,2-트리플루오로에틸)아미노)부탄-2-일)카르바메이트

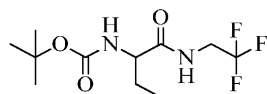


표제 분자를 백색 고체로서 단리하였다.

mp 108-111 °C; ¹H NMR (400 MHz,

CDCl₃) δ 6.90 (s, 1H), 5.04 (m, 1H), 4.07 (m, 1H), 3.92 (m, 3H), 1.87 (m, 1H), 1.66 (m, 1H), 1.44 (s, 9H), 0.96 (t, *J* = 7.4 Hz, 3H); ¹⁹F NMR (376 MHz, CDCl₃) δ -72.54; ¹³C NMR (101 MHz, CDCl₃) δ 173.05, 156.04, 124.03 (q, *J* = 278.5 Hz), 80.30, 55.56, 40.43 (q, *J* = 34.7 Hz), 28.19, 25.63, 9.80; [α]_D = -33.3 (c, CH₂Cl₂ 중 10.1 mg/mL).

tert-부틸 (1-옥소-1-((2,2,2-트리플루오로에틸)아미노)부탄-2-일)카르바메이트

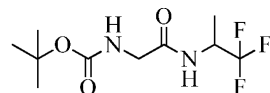


표제 분자를 백색 고체로서 단리하였다.

mp 113-116 °C; ¹H NMR (400 MHz,

CDCl₃) δ 7.36 (d, *J* = 8.4 Hz, 1H), 5.43 - 5.25 (m, 1H), 4.16 (m, 1H), 3.98 (m, 1H), 3.82 (m, 1H), 1.84 (dt, *J* = 14.0, 7.0 Hz, 1H), 1.66 (dt, *J* = 14.2, 7.3 Hz, 1H), 1.44 (s, 9H), 0.95 (t, *J* = 7.3 Hz, 3H); ¹⁹F NMR (376 MHz, CDCl₃) δ -72.51; ¹³C NMR (101 MHz, CDCl₃) δ 172.94, 156.02, 124.47 (q, *J* = 380.8 Hz), 80.33, 55.54, 40.46 (q, *J* = 34.8 Hz), 28.19, 25.61, 9.79.

tert-부틸 (2-옥소-2-((1,1,1-트리플루오로프로판-2-일)아미노)에틸)카르바메이트



[1773]

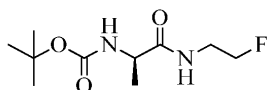
표제 분자를 백색 고체로서 단리하였다.

mp 84-88 °C; ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 6.89 (s, 1H), 5.44 (t, *J* = 5.8 Hz, 1H), 4.77 - 4.48 (m, 1H), 3.83 (d, *J* = 5.9 Hz, 2H), 1.45 (s, 9H), 1.33 (d, *J* = 7.0 Hz, 3H); ¹⁹F NMR (376 MHz, CDCl₃) δ -77.63; ¹³C NMR (101 MHz, CDCl₃) δ 169.84, 156.33, 125.19 (q, *J* = 280.9 Hz), 80.29, 46.20 (q, *J* = 31.7 Hz), 44.15, 28.11, 13.88; EIMS *m/z* 270 ([M]⁺).

[1774]

[1775]

(R)-tert-부틸 (1-((2-플루오로에틸)아미노)-1-옥소프로판-2-일)카르바메이트



[1776]

[1777]

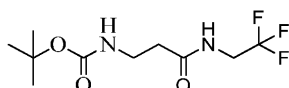
표제 분자를 백색 고체로서 단리하였다.

mp 91-94 °C; ¹H NMR (300 MHz, DMSO-*d*₆) δ 7.98 (bs, 1H), 6.87 (t, *J* = 7.2 Hz, 1H), 4.47 (t, *J* = 4.8 Hz, 1H), 4.32 (t, *J* = 5.1 Hz, 1H), 3.97 - 3.92 (m, 1H), 3.41 - 3.37 (m, 1H), 3.33 - 3.28 (m, 1H), 1.37 (s, 9H), 1.16 (d, *J* = 7.3 Hz, 3H); ESIMS *m/z* 235.0 ([M+H]⁺).

[1778]

[1779]

tert-부틸 (3-옥소-3-((2,2,2-트리플루오로에틸)아미노)프로필)카르바메이트



[1780]

[1781]

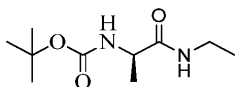
표제 분자를 백색 고체로서 단리하였다.

mp 123-125 °C; ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 6.42 - 6.22 (m, 1H), 5.07 (s, 1H), 3.92 (qd, *J* = 9.1, 6.4 Hz, 2H), 3.43 (q, *J* = 6.2 Hz, 2H), 2.50 (t, *J* = 6.0 Hz, 2H), 1.43 (s, 9H); ¹⁹F NMR (376 MHz, CDCl₃) δ -72.50; ¹³C NMR (101 MHz, CDCl₃) δ 171.76, 156.30, 124.02 (q, *J* = 278.5 Hz), 79.67, 40.53 (q, *J* = 34.8 Hz), 36.41, 36.27, 28.31.

[1782]

[1783]

(R)-tert-부틸 (1-(에틸아미노)-1-옥소프로판-2-일)카르바메이트



[1784]

[1785]

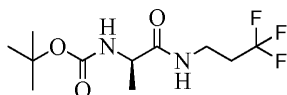
표제 분자를 백색 고체로서 단리하였다.

mp 88-93 °C; ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 6.35 (s, 1H), 5.25 - 5.04 (m, 1H), 4.21 - 3.99 (m, 1H), 3.29 (dd, *J* = 7.5, 5.9 Hz, 2H), 1.45 (s, 8H), 1.35 (d, *J* = 7.0 Hz, 3H), 1.13 (t, *J* = 7.3 Hz, 3H); ¹³C NMR (101 MHz, CDCl₃) δ 172.79, 155.51, 79.59, 49.97, 34.16, 28.25, 18.77, 14.60.

[1786]

[1787]

(R)-tert-부틸 (1-옥소-1-((3,3,3-트리플루오로프로필)아미노)프로판-2-일)카르바메이트



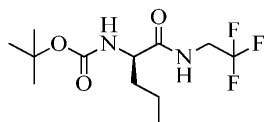
[1788]

[1789] 표제 분자를 회백색 고체로서 단리하였다.

mp 101-105 °C; ¹H NMR (300 MHz, DMSO-*d*₆) δ 7.96 (bs, 1H), 6.90 (d, *J* = 6.9 Hz, 1H), 3.91 - 3.86 (m, 1H), 3.34 - 3.19 (m, 2H), 2.50 - 2.32 (m, 2H), 1.37 (s, 9H), 1.15 (d, *J* = 7.2 Hz, 3H).

[1790]

[1791] (R)-tert-부틸 (1-옥소-1-((2,2,2-트리플루오로에틸)아미노)펜탄-2-일)카르바메이트



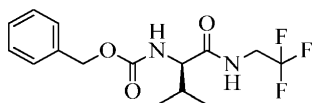
[1792]

[1793] 표제 분자를 백색 고체로서 단리하였다.

mp 107-122 °C; ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 6.90 (s, 1H), 5.00 (d, *J* = 8.0 Hz, 1H), 4.12 (d, *J* = 7.3 Hz, 1H), 3.99 - 3.76 (m, 2H), 1.87 - 1.73 (m, 1H), 1.65 - 1.52 (m, 1H), 1.44 (s, 9H), 1.38 (m, 2H), 0.94 (t, *J* = 7.3 Hz, 3H); ¹⁹F NMR (376 MHz, CDCl₃) δ 회전이성질체 -72.55, -73.27; ¹³C NMR (101 MHz, CD₃OD) δ 회전이성질체 176.08, 157.86, 부차 126.13 (q, *J* = 279.8 Hz), 주요 125.83 (q, *J* = 278.8 Hz), 80.65, 55.90, 부차 42.27 (q, *J* = 35.4 Hz), 주요 41.24 (q, *J* = 35.4 Hz), 35.50, 28.73, 20.04, 14.03.

[1794]

[1795] (R)-벤질 (3-메틸-1-옥소-1-((2,2,2-트리플루오로에틸)아미노)부탄-2-일)카르바메이트



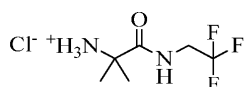
[1796]

[1797] 표제 분자를 백색 고체로서 단리하였다.

mp 157-161 °C; ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.46 - 7.31 (m, 5H), 6.57 (d, *J* = 8.3 Hz, 1H), 5.34 (d, *J* = 8.9 Hz, 1H), 5.11 (s, 2H), 4.02 (dq, *J* = 16.1, 8.8, 7.7 Hz, 2H), 3.78 (td, *J* = 9.0, 4.7 Hz, 1H), 2.15 (q, *J* = 6.7 Hz, 1H), 0.97 (d, *J* = 6.8 Hz, 3H), 0.94 (d, *J* = 6.8 Hz, 3H); ¹⁹F NMR (376 MHz, CDCl₃) δ -72.44.

[1798]

[1799] 실시예 129: N-(2,2,2-트리플루오로에틸) 1-아미노-2-메틸프로판카르복사미드 히드로클로라이드의 제조

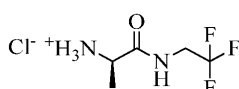


[1800]

[1801] 메틸렌 클로라이드 (20 mL) 중 tert-부틸 (2-메틸-1-옥소-1-((2,2,2-트리플루오로에틸)아미노)프로판-2-일)카르바메이트 (2.61 g, 9.18 mmol)에 디옥산 (20 mL) 중 4 M HCl을 첨가하였다. 용액을 주위 온도에서 6시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 진공 하에 농축시켜 표제 화합물을 백색 고체 (2.18 g)로서 수득하였다.

[1802] 하기 분자를 실시예 129에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

[1803] (R)-1-옥소-1-((2,2,2-트리플루오로에틸)아미노)프로판-2-아미늄 클로라이드



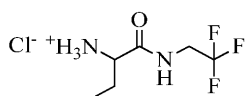
[1804]

[1805] 표제 분자를 백색 고체로서 단리하였다.

mp 210-213 °C; ^1H NMR (400 MHz, DMSO- d_6) δ 9.22 (t, J = 6.3 Hz, 1H), 8.37 - 8.27 (m, 3H), 4.07 - 3.95 (m, 2H), 3.95 - 3.84 (m, 1H), 1.38 (d, J = 7.0 Hz, 3H); ^{19}F NMR (376 MHz, DMSO- d_6) δ -70.75; $[\alpha]_D$ = - 6.6 (c, MeOH 중 5.0 mg/mL).

[1806]

[1807] 1-옥소-1-((2,2,2-트리플루오로에틸)아미노)부탄-2-아미늄 클로라이드



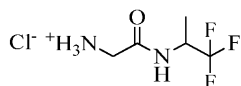
[1808]

[1809] 표제 분자를 백색 고체로서 단리하였다.

^1H NMR (300 MHz, DMSO- d_6) δ 9.12 (t, J = 5.7 Hz, 1H), 8.19 (s, 3H), 4.14-3.93 (m, 2H), 3.78 (t, J = 6.0 Hz, 1H), 1.81-1.71(m, 2H), 0.88 (t, J = 7.2 Hz, 3H); ESIMS m/z 184.90 ([M-TFA+H] $^+$); IR (박막) 3269, 1681, 1158 cm^{-1} .

[1810]

[1811] 2-옥소-2-((1,1,1-트리플루오로프로판-2-일)아미노)에탄아미늄 클로라이드



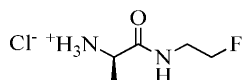
[1812]

[1813] 표제 분자를 백색 고체로서 단리하였다.

^1H NMR (300 MHz, DMSO- d_6) δ 8.96 (d, J = 8.7 Hz, 1H), 8.09 (bs, 3H), 4.71 - 4.59 (m, 1H), 3.64 - 3.62 (m, 2H), 1.27 (d, J = 6.9 Hz, 3H); EIMS m/z 170.1 ([M] $^+$).

[1814]

[1815] (R)-1-((2-플루오로에틸)아미노)-1-옥소프로판-2-아미늄 클로라이드



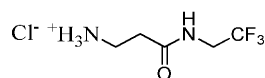
[1816]

[1817] 표제 분자를 백색 고체로서 단리하였다.

^1H NMR (300 MHz, DMSO- d_6) δ 8.76 (t, J = 5.1 Hz, 1H), 8.21 (bs, 3H), 4.54 (t, J = 5.1 Hz, 1H), 4.38 (t, J = 4.8 Hz, 1H), 3.85 - 3.79 (m, 1H), 3.50 - 3.45 (m, 1H), 3.41 - 3.36 (m, 1H), 1.36 (d, J = 7.2 Hz, 3H); ESIMS m/z 135.1 ([M+H] $^+$); IR (박막) 3331, 2983, 1660, 1161, 597 cm^{-1} .

[1818]

[1819] 3-옥소-3-((2,2,2-트리플루오로에틸)아미노)프로판-1-아미늄 클로라이드



[1820]

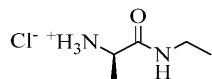
[1821] 표제 분자를 백색 고체로서 단리하였다.

mp 193-197 °C; ¹H NMR (400 MHz,

DMSO-*d*₆) δ 8.94 (t, *J* = 6.4 Hz, 1H), 8.16 (s, 3H), 3.99 - 3.79 (m, 2H), 2.98 (t, *J* = 7.3 Hz, 2H), 2.64 (t, *J* = 7.3 Hz, 2H); ¹⁹F NMR (376 MHz, DMSO-*d*₆) δ -70.74.

[1822]

[1823] (R)-1-(에틸아미노)-1-옥소프로판-2-아미늄 클로라이드



[1824]

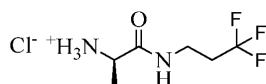
[1825] 표제 분자를 백색 고체로서 단리하였다.

mp 223-236 °C; ¹H NMR (400 MHz,

DMSO-*d*₆) δ 8.65 (t, *J* = 5.4 Hz, 1H), 8.32 (s, 3H), 3.89 - 3.66 (m, 1H), 3.12 (p, *J* = 7.0 Hz, 2H), 1.35 (d, *J* = 6.9 Hz, 3H), 1.05 (t, *J* = 7.2 Hz, 3H); ¹³C NMR (101 MHz, DMSO-*d*₆) δ 168.98, 48.08, 33.54, 17.16, 14.43.

[1826]

[1827] (R)-1-옥소-1-((3,3,3-트리플루오로프로필)아미노)프로판-2-아미늄 클로라이드



[1828]

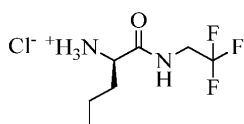
[1829] 표제 분자를 회백색 고체로서 단리하였다.

mp 128-131 °C; ¹H NMR (300

MHz, DMSO-*d*₆) δ 8.62 (bs, 1H), 8.10 (bs, 3H), 3.82 - 3.79 (m, 1H), 3.50 - 3.38 (m, 2H), 2.50 - 2.37 (m, 2H), 1.34 (d, *J* = 6.9 Hz, 3H).

[1830]

[1831] (R)-1-옥소-1-((2,2,2-트리플루오로에틸)아미노)펜탄-2-아미늄 클로라이드



[1832]

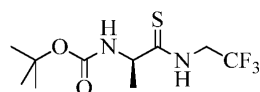
[1833] 표제 분자를 백색 고체로서 단리하였다.

mp 204-210 °C; ¹H NMR (400 MHz,

CD₃OD) δ 4.17 - 4.00 (m, 1H), 3.98 - 3.69 (m, 2H), 1.83 (dt, *J* = 15.0, 7.5 Hz, 2H), 1.50 - 1.35 (m, 2H), 0.99 (t, *J* = 7.3 Hz, 3H); ¹⁹F NMR (376 MHz, CD₃OD) δ -73.90; ¹³C NMR (101 MHz, CD₃OD) δ 170.97, 125.72 (q, *J* = 277.9 Hz), 54.37, 41.30 (q, *J* = 34.7 Hz), 34.65, 19.00, 13.94.

[1834]

[1835] 실시예 130: (R)-tert-부틸 1-티옥소-1-(2,2,2-트리플루오로에틸아미노)프로판-2-일카르바메이트의 제조



[1836]

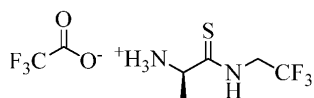
[1837] CH₂Cl₂ (10 mL) 중 (R)-tert-부틸 1-티옥소-1-(2,2,2-트리플루오로에틸아미노)프로판-2-일카르바메이트 (100 mg, 0.37 mmol)의 교반 용액에 실온에서 P₂S₅ (24 mg, 0.11 mmol) 및 헥사메틸디실록산 (HMDO) (0.13 mL, 0.59

mmol)을 첨가하고, 혼합물을 3시간 동안 환류하였다. 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 또 다른 양의 P_2S_5 (24 mg, 0.11 mmol)를 첨가하고, 생성된 혼합물을 18시간 동안 환류하였다. 휘발성 물질을 증발시키고, 펜탄 (25 mL)을 잔류물에 첨가하고, 10-15분 동안 교반하였다. 펜탄 층을 따라내고, 진공 하에 농축시키고, 펜탄에 이어서 CH_2Cl_2 로 용리시키면서 잔류물을 짧은 실리카 패드에 통과시켜 표제 화합물을 무색 액체 (30 mg, 30%)로서 수득하였다.

^1H NMR (400 MHz, $DMSO-d_6$) δ

10.27 (t, $J = 5.4$ Hz, 1H), 7.00 (d, $J = 6.8$ Hz, 1H), 4.57 - 4.35 (m, 3H), 1.32 (s, 9H), 1.25 (d, $J = 7.6$ Hz, 3H); ESIMS m/z 286.2 ($[M+H]^+$); IR (박막) 3233, 1683, 1257 cm^{-1} .

실시예 131: (R)-1-티옥소-1-((2,2,2-트리플루오로에틸)아미노)프로판-2-아미늄 2,2,2-트리플루오로아세테이트의 제조



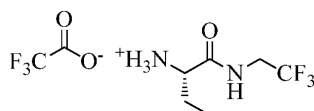
CH_2Cl_2 (5 mL) 중 (R)-tert-부틸 1-티옥소-1-(2,2,2-트리플루오로에틸아미노)프로판-2-일카르바메이트 (200 mg, 0.69 mmol)의 교반 용액에 TFA (0.5 mL)를 적가하고, 반응 혼합물을 18시간 동안 교반하였다. 휘발성 물질을 증발시키고, 잔류물을 펜탄으로 연화처리하여 표제 화합물을 무색 검으로서 수득하였으며, 이를 후속 단계에 추가 정제 없이 사용하였다 (200 mg).

^1H NMR (300 MHz, $DMSO-d_6$) δ 10.99 (bs, 1H),

8.23 (bs, 2H), 4.62-4.55 (m, 2H), 4.23-4.19 (m, 1H), 1.43 (d, $J = 8.4$ Hz, 3H); ESIMS m/z 186.2 ($[M+H]^+$); IR (박막) 3445, 2967, 1168 cm^{-1} .

하기 분자를 실시예 131에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

(S)-1-티옥소-1-((2,2,2-트리플루오로에틸)아미노)부탄-2-아미늄 2,2,2-트리플루오로아세테이트

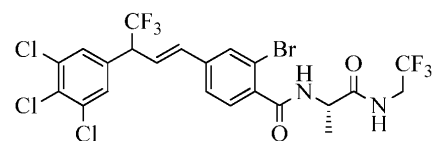


표제 분자를 무색 검으로서 단리시켰다.

^1H NMR (300 MHz, $DMSO-d_6$) δ

9.12 (t, $J = 5.7$ Hz, 1H), 8.19 (bs, 2H), 4.14-3.93 (m, 2H), 3.80 (t, $J = 6.0$ Hz, 1H), 1.81-1.71 (m, 2H), 0.88 (t, $J = 7.2$ Hz, 3H); ESIMS m/z 185.00 ($[M+H]^+$); IR (박막) 3459, 1674, 1169 cm^{-1} .

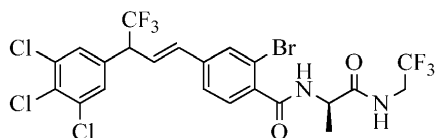
실시예 132: 2-브로모-N-((S)-1-티옥소-1-((2,2,2-트리플루오로에틸)아미노)프로판-2-일)-4-((E)-4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤즈아미드 (F10 및 F11)의 제조



표제 분자를 실시예 15에 기재된 바와 같이 제조하였다. 부분입체이성질체 쌍을 주위 온도에서 유량 1.0 mL/분에서 헥산 중 0.1% TFA 및 이소프로판올 (등용매 70:30)을 이동상으로 사용하여 키랄팩® IA (4.6 x 250 mm) 5

μm 칼럼을 사용하여 키랄 HPLC에 의해 분리하였다. 부분입체이성질체 F10을 4.55분의 체류 시간에서 수집하였고, 이는 $[\alpha]_D^{30} = +35.6$ (c, CH_2Cl_2 중 0.5%)의 선광도를 보유했다. 부분입체이성질체 F11을 8.71분에서 수집하였고, 이는 $[\alpha]_D^{30} = -82.0$ (c, CH_2Cl_2 중 0.5%)의 선광도를 보유했다. 이들 분자에 대한 특성화 데이터를 표 2에 나열하였다.

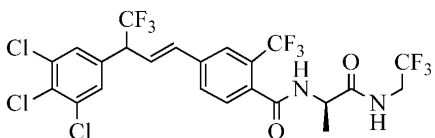
실시예 133: 2-브로모-N-((R)-1-옥소-1-((2,2,2-트리플루오로에틸)아미노)프로판-2-일)-4-((E)-4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤즈아미드 (F12 및 F13)의 제조



표제 분자를 실시예 15에 기재된 바와 같이 제조하였다. 부분입체이성질체 쌍을 주위 온도에서 유량 1.0 mL/분에서 헥산 중 0.1% TFA 및 이소프로판올 (등용매 70:30)을 이동상으로 사용하여 키랄팩® IA (4.6 x 250 mm) 5 μm 칼럼을 사용하여 키랄 HPLC에 의해 분리하였다. 부분입체이성질체 F12를 5.62분의 체류 시간에서 수집하였고, 이는 $[\alpha]_D^{30} = +59.4$ (c, CH_2Cl_2 중 1%)의 선광도를 보유했다. 부분입체이성질체 F13을 8.85분의 체류 시간에서 수집하였고, 이는 $[\alpha]_D^{30} = -44.0$ (c, CH_2Cl_2 중 1%)의 선광도를 보유했다. 이들 분자에 대한 특성화 데이터를 표 2에 나열하였다.

하기 분자를 실시예 133에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

N-((R)-1-옥소-1-((2,2,2-트리플루오로에틸)아미노)프로판-2-일)-4-((E)-4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)-2-(트리플루오로메틸)벤즈아미드 (F20A 및 F20B)



부분입체이성질체 F20A (이성질체 1)를 4.13분의 체류 시간에서 수집하였고, 이는 $[\alpha]_D^{25} = +49.2$ (c, CH_2Cl_2 중 1.0%)의 선광도를 보유했다. 부분입체이성질체 F20B를 4.88분의 체류 시간에서 수집하였고, 이는 $[\alpha]_D^{25} = -38.8$ (c, CH_2Cl_2 중 1.0%)의 선광도를 보유했다. 이들 분자에 대한 특성화 데이터를 표 2에 나열하였다.

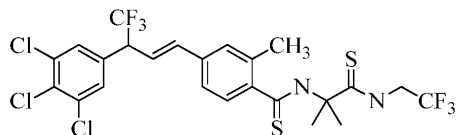
F20A 및 F20B 입체화학적 할당 F20A 및 F20B를 CDCl_3 중에 용해시키고, BaF_2 윈도우를 구비한 100 μm 경로 길이 셀에 두었다. IR 및 진동 원편광 이색성 (VCD) 스펙트럼을 이중 PEM 보조장치가 구비된 IR-2XTM VCD 분광계 (바이오툴스, 인크.(BioTools, Inc.)) 상에서 4 cm^{-1} 해상도로 기록하였다. 샘플 및 CDCl_3 스펙트럼을 21시간 동안 1400 cm^{-1} 에서 최적화된 기기 상에서 얻었다. 용매-차감한 IR 및 VCD 스펙트럼을 수집하였다.

이론적 계산: R,R- 및 S,R-배위를 갖는 F20을 마에스트로(Maestro) (슈뢰딩거, 엘엘씨.(Schrodinger, LLC.) 뉴욕주 뉴욕)를 이용하여 구축하였다. 마크로모델(MacroModel) (슈뢰딩거, 엘엘씨. 뉴욕주 뉴욕)을 이용하여 MMFF94x 포스 필드로 입체형태 연구를 수행하여 저에너지 이형태체를 생성하였다. 단일점 계산 (SPE), 기하구조, 주파수, 및 IR 및 VCD 계산을 재규어(Jaguar) (슈뢰딩거, 엘엘씨. 뉴욕주 뉴욕)에서 DFT 수준 (B3LYP/1acvp**)에서 수행하였다. 0.96의 스케일링 인자를 주파수 계산에 적용하였다. 분석: R,R- 및 S,R-배위를 갖는 F20에 대해, 마크로모델로 생성된 저에너지 이형태체 상위 100개를 DFT SPE 계산을 위해 선택하였다. 이들 계산은 R,R- 및 S,R-배위에 대한 최저 에너지 이형태체 각각에 대해 1 kcal/mol 이내로 보다 높은 에너지를 갖는 8개 및 4개의 이형태체를 생성하였다. 주파수 계산을 이들 이형태체에 대해 수행하여 IR 및 VCD 스펙트럼을 결정하였다. 이들 이형태체의 볼츠만-가중 IR 및 VCD 스펙트럼을 관찰된 IR 및 VCD 스펙트럼과 비교하였다. 관찰된 스펙트럼과 계산된 스펙트럼 사이의 VCD 스펙트럼에서의 전체적인 일치에 기초하여, F20A의 절대

배위를 R,R- 배위로 할당하였다. 이 할당을 컴패어보아(compareVOA) 프로그램 (바이오툴스)에 의해 평가하였다. 이 할당의 신뢰 수준은 상이한 키랄 구조에 대한 105개의 이전의 정확한 할당을 포함하는 데이터 베이스에 기초하여 88%이다. 그러나, F20B에 대해 관찰된 스펙트럼은 65%의 신뢰 수준으로 S,R- 배위에 대해 계산된 스펙트럼과 잘 일치하지 않았다. 그러나, 상기 화합물이 오로지 1개의 키랄 중심, 2개의 가능한 배위를 가지며, F20A가 R,R- 배위인 것을 고려하여, F20B는 높은 신뢰 수준으로 S,R-배위로 할당될 수 있다.

[1860]

실시예 134: (E)-2-메틸-N-(2-메틸-1-티옥소-1-(2,2,2-트리플루오로에틸아미노)프로판-2-일)-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-에닐)벤조티오아미드 (F31)의 제조



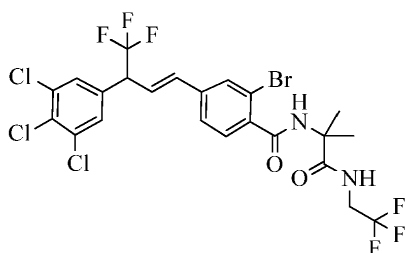
[1861]

[1862]

CH₂Cl₂ (50 mL) 중 (E)-2-메틸-N-(2-메틸-1-옥소-1-(2,2,2-트리플루오로에틸아미노)프로판-2-일)-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-에닐)벤즈아미드 (400 mg, 0.68 mmol)의 교반 용액에 실온에서 P₂S₅ (75 mg, 0.34 mmol) 및 HMDO (0.25 mL, 1.12 mmol)를 첨가하고, 혼합물을 3시간 동안 환류하였다. 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 또 다른 양의 P₂S₅ (75 mg, 0.34 mmol)를 첨가하고, 생성된 혼합물을 18시간 동안 환류하였다. 휘발성 물질을 증발시키고, 잔류물을 정제용 TLC에 의해 정제하여 표제 화합물을 연황색 검 (47 mg, 11%)으로서 수득하였다. 이 분자에 대한 특성화 데이터를 표 2에 나열하였다.

[1863]

실시예 135: (E)-2-브로모-N-(2-메틸-1-옥소-1-(2,2,2-트리플루오로에틸아미노)프로판-2-일)-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤즈아미드 (F1)의 제조



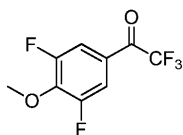
[1864]

[1865]

MeCN (5 mL) 중 (E)-2-브로모-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-에닐)벤조산 (200 mg, 0.409 mmol)에 1H-벤조[d][1,2,3]트리아졸-1-올 수화물 (63 mg, 0.411 mmol), HBTU (155 mg, 0.409 mmol), N-(2,2,2-트리플루오로에틸) 1-아미노-2-메틸-프로판카르복사미드 히드록로라이드 (180 mg, 0.816 mmol) 및 디이소프로필에틸아민 (0.24 mL, 1.38 mmol)을 첨가하였다. 24시간 후, 이 물질을 진공 하에 농축시켰다. 조 반응 혼합물을 EtOAc/헥산 (1:2)으로 용리시키면서 실리카 프릿에 통과시킴으로써 조 생성물을 정제하였다. 회수된 물질을 추가로 용리액으로서 EtOAc/헥산을 이용하여 실리카 상에서 증압 크로마토그래피에 의해 정제하여 표제를 백색 발포체 (147 mg, 55%)로서 수득하였다. 이 분자에 대한 특성화 데이터를 표 2에 나열하였다.

[1866]

실시예 136: 1-(3,5-디플루오로-4-메톡시페닐)-2,2,2-트리플루오로에탄논의 제조



[1867]

[1868]

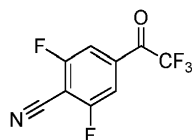
이소프로필 염화마그네슘 염화리튬 착물 (22.0 mL, 28.02 mmol)을 THF (100 mL) 중 5-브로모-1,3-디플루오로-2-메톡시벤젠 (5.0 g, 22.42 mmol)의 -5°C에서의 교반 용액에 적가하고, 반응 혼합물을 동일한 온도에서 30분 동안 교반하였다. 메틸 트리플루오로아세테이트 (3.67g, 28.69 mmol)를 적가하고, 반응 혼합물을 주위 온도에서 2시간 동안 교반하였다. 2 N HCl 용액 (200 mL)을 첨가하여 반응물을 킨칭한 다음, 이것을 디에틸에테르로 추출하였다. 합한 유기 층을 염수로 세척하고, 건조 (Na₂SO₄)시키고, 여과하고, 농축시켜 표제 화합물 (5.4 g,

조 물질)을 황색 액체로서 수득하였다. 물질을 후속 단계에 추가 정제 없이 사용하였다.

¹H NMR(400 MHz, CDCl₃) δ 7.68 - 7.60 (m, 2H) 4.19 (s, 3H); ESIMS *m/z* 240.1 ([M]⁺).

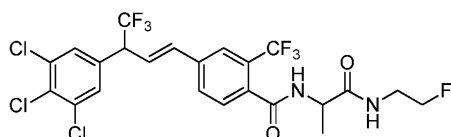
하기 분자를 실시예 136에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

2,6-디플루오로-4-(2,2,2-트리플루오로아세틸)벤조니트릴



¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.45 (d, *J* = 8.4 Hz, 1H), 7.37 (d, *J* = 8.4 Hz, 1H); EIMS *m/z* 235.1 ([M]⁺).

실시예 137: (E)-N-(1-((2-플루오로에틸)아미노)-1-옥소프로판-2-일)-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)-2-(트리플루오로메틸)벤즈아미드 (P1618A)의 제조



단계 1: (2R)-tert-부틸 2-(4-((E)-4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)-2-(트리플루오로메틸)벤즈아미도)프로판노에이트: 표제 화합물을 실시예 15에 요약된 절차에 따라 제조하였다.

¹H NMR (400 MHz, DMSO-*d*₆) δ 8.73 (d, *J* = 6.8 Hz, 1H), 7.92 - 7.90 (m, 3H), 7.61 (d, *J* = 7.2 Hz, 1H), 7.36 (d, *J* = 7.6 Hz, 1H), 6.99 (dd, *J* = 15.2, 9.2 Hz, 1H), 6.77 (d, *J* = 15.2 Hz, 1H), 4.85 - 4.80 (m, 1H), 4.30 - 4.26 (m, 1H), 1.43 (s, 9H), 1.33 (d, *J* = 6.8 Hz, 3H); ESIMS *m/z* 601.9 ([M-H]⁺); IR (KBr) 3414, 1732, 1661, 1170, 748 cm⁻¹.

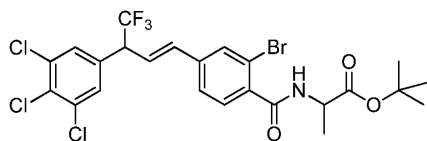
단계 2: (2R)-(4-((E)-4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)-2-(트리플루오로메틸)벤즈아미도)프로판산: TFA (1 mL)를 CH₂Cl₂ (20 mL) 중 tert-부틸 2-(2-브로모-4-((E)-4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤즈아미도)프로판노에이트 (1.0 g, 1.63 mmol)의 교반 용액에 0°C에서 첨가하고, 반응 혼합물을 주위 온도에서 18시간 동안 교반하였다. 휘발성 물질을 진공 하에 증발시키고, 잔류물을 펜탄으로 연화처리하여 표제 화합물을 갈색 고체 (0.65 g, 67%)로서 수득하였다.

¹H NMR (400 MHz, DMSO-*d*₆) δ 12.60 (bs, 1H), 8.82 (d, *J* = 8.0 Hz, 1H), 7.99 (s, 1H), 7.92 - 7.89 (m, 3H), 7.51 (d, *J* = 8.0 Hz, 1H), 7.08 (dd, *J* = 15.6, 8.8 Hz, 1H), 6.88 (d, *J* = 15.6 Hz, 1H), 4.88 - 4.83 (m, 1H), 4.41 - 4.34 (m, 1H), 1.34 (d, *J* = 7.2 Hz, 3H); ESIMS: *m/z* 545.7 ([M-H]⁺); IR (KBr) 3410, 3281, 2928, 1728, 1172, 744 cm⁻¹.

단계 3. (E)-N-(1-((2-플루오로에틸)아미노)-1-옥소프로판-2-일)-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)-2-(트리플루오로메틸)벤즈아미드 (P1618): DIPEA (0.60 mL, 1.08 mmol), PyBOP (180 mg, 0.36 mmol) 2-(4-((E)-4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)-2-(트리플루오로메틸)벤즈아미도)프로판산 (35 mg, 0.36 mmol)을 CH₂Cl₂ (10 mL) 중 화합물 1 (200 mg, 0.36 mmol)의 교반 용액에 주위 온도에서 첨가하고, 반응 혼합물을 18시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 CH₂Cl₂로 희석시키고, 1N HCl에 이어서 포화 NaHCO₃ 용액, 물 및 염수로 세척하였다. 유기 상을 건조 (Na₂SO₄)시키고, 여과하고, 농축시키고, 잔류물을 실리카 상에서 칼럼 크로마토그래피 (100-200 메쉬)에 의해 석유 에테르 중 10% EtOAc로 용리시키면서 정제하여 표제 화합물을 갈색 고체 (85 mg, 39%)로서 수득하였다.

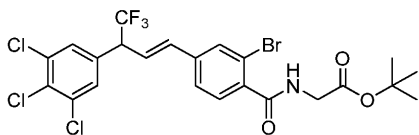
하기 분자를 실시예 137, 단계 1에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

tert-부틸 2-(2-브로모-4-((E)-4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-에닐)벤즈아미도)프로판노에이트



^1H NMR (400 MHz, DMSO- d_6): δ 8.82 (d, J = 7.6 Hz, 1H), 7.99 (s, 1H), 7.91 - 7.90 (m, 3H), 7.50 (d, J = 7.6 Hz, 1H), 7.07 (dd, J = 16.0, 8.8 Hz, 1H), 6.88 (d, J = 15.2 Hz, 1H), 4.88 - 4.83 (m, 1H), 4.31 - 4.27 (m, 1H), 1.42 (s, 9H), 1.32 (d, J = 7.6 Hz, 3H); ESIMS m/z 611.7 ([M-H] $^-$); IR (KBr) 3296, 2932, 1732, 1162, 743, 556 cm^{-1} .

(E)-tert-부틸 2-(2-브로모-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-에닐)벤즈아미도)아세트레이트

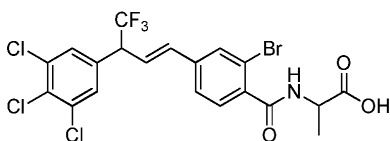


연황색 고체 (620 mg, 72%)로서 분리하였다.

^1H NMR (400 MHz, DMSO- d_6) δ 8.77 (t, J = 6.0 Hz, 1H), 7.93 - 7.91 (m, 3H), 7.62 (d, J = 6.8 Hz, 1H), 7.39 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 7.00 (dd, J = 15.6, 9.2 Hz, 1H), 6.77 (d, J = 16.0 Hz, 1H), 4.86 - 4.81 (m, 1H), 3.86 - 3.85 (m, 2H), 1.33 (s, 9H). ESIMS m/z 599.87 ([M+H] $^+$).

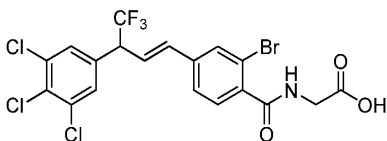
하기 분자를 실시예 137, 단계 2에 개시된 절차에 따라 제조하였다.

2-(2-브로모-4-((E)-4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-에닐)벤즈아미도)프로판산



^1H NMR (400 MHz, DMSO- d_6): δ 12.62 (bs, 1H), 8.73 (d, J = 9.6 Hz, 1H), 7.93 - 7.91 (m, 3H), 7.61 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 7.37 (d, J = 7.8 Hz, 1H), 7.01 (dd, J = 15.6, 9.0 Hz, 1H), 6.78 (d, J = 15.9 Hz, 1H), 4.89 - 4.79 (m, 1H), 4.42 - 4.32 (m, 1H), 1.36 (d, J = 7.2 Hz, 3H); ESIMS: m/z 558.0 ([M+H] $^+$); IR (KBr) 3418, 1650, 1115, 747, 560 cm^{-1} .

(E)-2-(2-브로모-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-에닐)벤즈아미도)아세트산



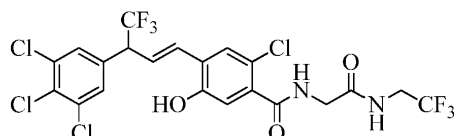
[1895] 회백색 고체 (550 mg, 97%)로서의 단리하였다.

¹H NMR (300 MHz, DMSO-d₆) δ

12.56 (bs, 1H), 8.73 (t, *J* = 5.4 Hz, 1H), 7.93 - 7.91 (m, 3H), 7.62 (d, *J* = 9.3 Hz, 1H), 7.40 (d, *J* = 8.1 Hz, 1H), 7.01 (dd, *J* = 15.9, 9.0 Hz, 1H), 6.78 (d, *J* = 15.9 Hz, 1H), 4.89 - 4.80 (m, 1H), 3.90 - 3.88 (m, 2H). ESIMS *m/z* 541.82 ([M-H]⁺).

[1896]

[1897] 실시예 138: (E)-2-클로로-5-히드록시-N-(2-옥소-2-((2,2,2-트리플루오로에틸)아미노)에틸)-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤즈아미드의 제조



[1898]

[1899] 단계 1. 메틸 4-브로모-2-클로로-5-메톡시벤조에이트: 자기 교반 막대가 구비된 25 mL 둥근 바닥 플라스크에 4-브로모-2-클로로-5-메톡시벤조산 (JACS, 1963, 730-2; 1.25 g, 4.72 mmol), 20% MeOH/EtOAc (25 mL)를 채우고, 빙수조에서 냉각시켰다. 트리메틸실릴디아조메탄 (헥산 중 TMSCHN₂ 2 M, 2.6 mL, 5.20 mmol)을 첨가 갈때기를 통해 적가하였다. 반응물을 1시간 동안 계속 교반한 다음, 이를 농축시켜 표제 화합물을 백색 고체 (1.31 g, 100%)로서 수득하였다.

mp 78-79 °C; ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.65 (s, 1H), 7.36 (s, 1H), 3.94 (s, 3H),

3.93 (s, 3H); EIMS *m/z* 280 ([M]⁺).

[1900]

[1901] 단계 2. 2-클로로-5-메톡시-4-비닐벤조산: 25 mL 둥근 바닥 플라스크에 메틸 4-브로모-2-클로로-5-메톡시벤조에이트 (640 mg, 2.29 mmol), K₂CO₃ (665 mg, 4.81 mmol), 칼륨 트리플루오로(비닐)보레이트 (920 mg, 6.87 mmol), PdCl₂(dppf) (84 mg, 0.11 mmol) 및 무수 DMSO (15 mL)를 채우고, 80°C에서 2시간 동안 교반하였다. 반응물을 냉각되도록 하고, 물 (150 mL)을 첨가한 다음, Et₂O로 여러 번 추출하였다. 유기 층을 염수로 세척하고, MgSO₄ 상에서 건조시키고, 여과하고, 농축시켜 갈색 잔류물을 수득하였다. 조 생성물을 플래쉬 크로마토그래피에 의해 15% Et₂O/헥산으로 용리하면서 정제하여 메틸 2-클로로-5-메톡시-4-비닐벤조에이트를 황색 오일 (440 mg, 85%)로서 수득하였다. 메틸 2-클로로-5-메톡시-4-비닐벤조에이트 (440 mg, 1.94 mmol) 및 MeOH (10 mL)가 들어 있는 25 mL 둥근 바닥 플라스크에 1N NaOH (2 mL, 2.04 mmol)를 첨가하고, 반응물을 주위 온도에서 18시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 농축시켜 고체 잔류물을 수득하였다. 잔류물을 물 중에 용해시키고, 50% Et₂O/헥산으로 1회 추출하였다. 수성 층을 2N HCl을 이용하여 산성으로 만들고, CH₂Cl₂로 2회 추출하고, MgSO₄ 상에서 건조시키고, 여과하고, 농축시켜 표제 화합물을 백색 고체 (0.39 g, 94%)로서 수득하였다.

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.54 (d, *J* = 0.5

Hz, 1H), 7.52 (s, 1H), 6.98 (ddd, *J* = 17.7, 11.2, 0.6 Hz, 1H), 5.87 (dd, *J* = 17.7, 1.1 Hz, 1H),

5.45 (dd, *J* = 11.2, 1.1 Hz, 1H), 3.90 (s, 3H).

[1902]

[1903] 단계 3. (E)-2-클로로-5-메톡시-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤조산: 50 mL 3구 둥근 바닥 플라스크에 2-클로로-5-메톡시-4-비닐벤조산 (390 mg, 1.84 mmol), 5-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-1,2,3-트리클로로벤젠 (754 mg, 2.20 mmol) 및 무수 N-메틸 피롤리딘 (10 mL)을 채웠다. 질소를 15분 동안 반응 혼합물 내로 버블링하였다. 이 시간 후, 2,2'-디피리딜 (57.3 mg, 0.37 mmol) 및 CuBr (11.7 mg, 0.18 mmol)을 첨가하고, 반응 혼합물을 150°C에서 1시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 냉각되도록 하고, 물 (300 mL)을 첨가하고, Et₂O로 여러 번 추출하였다. 유기 층을 물로 반복해서 세척하고, MgSO₄ 상에서 건조시키고, 여과하고, 농축시켜 - 담갈색 발포체 (870 mg, 100%)로서의 표제 화합물을 수득하였다. 이 물질은 LC/MS에 의해 95% 순도였다.

LC/MS; ESIMS m/z 473 ([M-H]⁻).

이 물질을 추가 정제 없이 사용하였다.

단계 4. (E)-2-클로로-5-메톡시-N-(2-옥소-2-((2,2,2-트리플루오로에틸)아미노)에틸)-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤즈아미드: 50 mL 둥근 바닥 플라스크에 (E)-2-클로로-5-메톡시-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤조산 (780 mg, 1.65 mmol), 디(1H-이미다졸-1-일)메탄 (267 mg, 1.65 mmol) 및 무수 THF (30 mL)를 채웠다. 생성된 혼합물을 기체 생성이 중지될 때까지 환류 하에 가열하였다. 2-아미노-N-(2,2,2-트리플루오로에틸)아세트아미드 HCl (257 mg, 1.65 mmol)을 한번에 첨가하고, 반응 혼합물을 환류 하에 18시간 동안 계속 교반하였다. 반응 혼합물을 농축 건조시키고, 잔류물을 Et₂O (50 mL) 및 0.1N HCl (10 mL)에 녹였다. 층을 분리하였다. 수성 층을 Et₂O로 2회 추출하였다. Et₂O 층을 합하고, 수성 NaHCO₃로 1회, 염수로 1회 세척하고, MgSO₄ 상에서 건조시키고, 여과하고, 농축시켜 갈색 오일을 수득하였다. 조 생성물을 플래쉬 크로마토그래피에 의해 30-40% EtOAc/헥산으로 용리시키면서 정제하여 표제 화합물을 - 백색 발포체 (280 mg, 28%)로서 수득하였다.

¹H

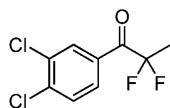
NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.45 (s, 1H), 7.41 (s, 2H), 7.29 (s, 1H), 7.28 (s, 1H), 6.84 (m, 2H), 6.43 (dd, $J = 16.0, 8.3$ Hz, 1H), 4.25 (d, $J = 5.4$ Hz, 2H), 4.10 (m, 1H), 3.97 (qd, $J = 9.0, 6.4$ Hz, 2H), 3.87 (s, 3H); ESIMS m/z 613.1 ([M+H]⁺).

단계 5. (E)-2-클로로-5-히드록시-N-(2-옥소-2-((2,2,2-트리플루오로에틸)아미노)에틸)-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤즈아미드: 25 mL 둥근 바닥 플라스크에 (E)-2-클로로-5-메톡시-N-(2-옥소-2-((2,2,2-트리플루오로에틸)아미노)에틸)-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤즈아미드 (57 mg, 0.093 mmol) 및 CH₂Cl₂ (3 mL)를 채웠다. 반응 혼합물을 -78℃로 냉각시키고, 삼브로민화붕소 (BBr₃, CH₂Cl₂ 중 1.0M 용액, 0.33 mL, 0.326 mmol)를 시린지를 통해 천천히 첨가하였다. 반응물을 주위 온도로 가온되도록 하고, 18시간 동안 교반하였다. 추가 0.3-0.4 mL의 BBr₃를 주위 온도에서 첨가하고, 계속해서 3시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 수성 NaHCO₃에 첨가하고, CH₂Cl₂로 3회 추출하였다. CH₂Cl₂ 층을 합하고, MgSO₄ 상에서 건조시키고, 여과하고, 농축시켜 오일을 수득하였다. 조 물질을 플래쉬 크로마토그래피에 의해 50% EtOAc/헥산으로 용리시키면서 정제하여 표제 화합물을 백색 고체 (18 mg, 33%)로서 수득하였다.

mp 190 °C

(dec.); ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 9.81 (s, 1H), 8.06 (d, $J = 7.0$ Hz, 1H), 7.71 (m, 1H), 7.44 (d, $J = 2.8$ Hz, 2H), 7.37 (s, 1H), 7.20 (s, 1H), 6.82 (d, $J = 15.9$ Hz, 1H), 6.50 (m, 1H), 4.14 (m, 3H), 3.89 (m, 2H); ESIMS m/z 599 ([M+H]⁺).

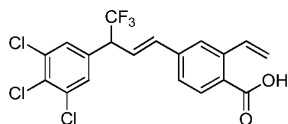
실시예 139: 1-(3,4-디클로로페닐)-2,2-디플루오로프로판-1-온의 제조



건조 Et₂O (109 mL) 중 4-브로모-1,2-디클로로벤젠 (5.64 g, 24.98 mmol)의 자기 교반 용액에 n-BuLi (10.86 mL, 24.98 mmol)를 질소 분위기 하에 첨가 깔때기를 통해 첨가하였다. 반응 혼합물을 -78℃에서 30분 동안 교반하였다. Et₂O (10 mL) 중 에틸 2,2-디플루오로프로파노에이트 (3.0 g, 21.7 mmol)의 용액을 15분에 걸쳐 적가하고, 1시간 동안 교반되도록 하였다. 이어서, 반응물을 1 N HCl (4 mL)로 조심스럽게 퀀칭하고, 23℃로 가온되도록 하였다. 용액을 Et₂O로 희석시키고, 물로 세척하였다. 합한 유기 층을 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고, 감압 하에 농축시키고, 생성된 물질을 플래쉬 칼럼 크로마토그래피에 의해 용리액으로서 100% 헥산에서 5% 아세톤/95% 헥산을 사용하여 정제하였다. 관련 분획을 감압 하에 농축시켜 표제 화합물을 무색 오일 (3.89 g, 71%)로서 수득하였다.

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 8.21 – 8.18 (m, 1H), 7.99 – 7.93 (m, 1H), 7.59 (dd, J = 8.4, 4.2 Hz, 1H), 1.89 (t, J = 19.6 Hz, 3H); ^{19}F NMR (376 MHz, CDCl_3) δ -92.08 – -93.21 (m); EISMS m/z 240 ($[\text{M}-\text{H}]^+$).

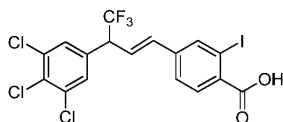
실시예 140: (E)-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-에닐)-2-비닐벤조산



건조 톨루엔 (10 mL) 중 (E)-2-브로모-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-에닐)벤조산 (600 mg, 1.23 mmol)의 교반 용액에 트리부틸(비닐)스탄난 (470 mg, 1.48 mmol)을 첨가하고, 혼합물을 아르곤으로 15분 동안 탈기하였다. $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (72 mg, 0.06 mmol)를 첨가하고, 반응 혼합물을 2시간 동안 환류하였다. 반응 혼합물을 주위 온도가 되도록 하고, 물을 첨가하고, 혼합물을 EtOAc로 추출하였다. 유기 층을 2N HCl 및 염수로 세척하고, 건조 (Na_2SO_4)시키고, 여과하고, 농축시켰다. 잔류물을 실리카 상에서 칼럼 크로마토그래피에 의해 석유 에테르 중 30% EtOAc로 용리시키면서 정제하여 표제 화합물을 갈색 고체 (295 mg, 55%)로서 수득하였다.

^1H NMR (300 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ 13.05 (bs, 1H), 7.91 (s, 2H), 7.81 - 7.75 (m, 2H), 7.59 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 7.48 (dd, J = 17.4, 10.8 Hz, 1H), 7.03 (dd, J = 15.9, 8.7 Hz, 1H), 6.84 (d, J = 15.6 Hz, 1H), 5.88 (d, J = 16.5 Hz, 1H), 5.39 (d, J = 12.3 Hz, 1H), 4.89 - 4.82 (m, 1H); ESIMS m/z 432.18 ($[\text{M}-\text{H}]^-$); IR (박막) 3418, 1689, 1114, 747 cm^{-1} .

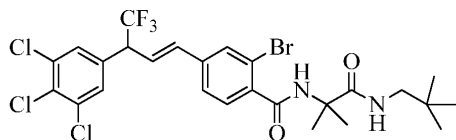
실시예 141: (E)-2-아이오도-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-에닐)벤조산



문헌 [Per Buchwald, et al.; JACS, 2002, 124, 14844-14845], 아이오딘화칼륨 (KI, 273 mg, 1.64 mmol), CuI (31 mg, 0.16 mmol) 및 트랜스-N,N'-디메틸시클로헥산-1,2-디아민 (촉매량)을 1,4-디옥산 (8 mL) 중 (E)-2-브로모-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-에닐)벤조산 (400 mg, 0.82 mmol)의 용액에 첨가하였다. 에이스(Ace) 압력 튜브 중의 혼합물을 100°C에서 3시간 동안 가열하였다. 반응 혼합물을 주위 온도가 되도록 하고, 셀라이트® 패드를 통해 여과하였다. 여과물을 농축시키고, 잔류물을 EtOAc로 희석하고, 1N HCl에 이어서 염수로 세척하였다. 유기 층을 건조 (Na_2SO_4)시키고, 여과하고, 농축시켰다. 잔류물을 실리카 상에서 칼럼 크로마토그래피에 의해 석유 에테르 중 25% EtOAc로 용리시키면서 정제하여 표제 화합물을 갈색 반고체 (240 mg, 55%)로서 수득하였다.

^1H NMR (400 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ 13.3 (bs, 1H), 8.21 (s, 1H), 7.91 (s, 2H), 7.71 - 7.64 (m, 2H), 7.01 (dd, J = 15.6, 9.2 Hz, 1H), 6.75 (d, J = 15.6 Hz, 1H), 4.85 - 4.81 (m, 1H); ESIMS m/z 532.8 ($[\text{M}-\text{H}]^-$); IR (박막) 3436, 1699, 1113, 750 cm^{-1} .

실시예 142: (E)-2-브로모-N-(2-메틸-1-(네오펜틸아미노)-1-옥소프로판-2-일)-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤즈아미드의 제조



단계 1. (E)-2-(2-브로모-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤즈아미도)-2-메틸프로판산: 자기 교반 막대 및 환류 응축기가 구비된 25 mL 둥근 바닥 플라스크에 (E)-2-(2-브로모-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤조산 (400 mg, 0.82 mmol) 및 1,2-디클로로에탄 (DCE) (5 mL)을 채웠다. 티오닐 클로라이드 (0.12 mL, 1.64 mmol)를 순수한 상태로 한 번에 첨가하고, 생성된 반응 혼합물을 환류 하에 2시간 동안 가열하였다. 이 시간 후, 반응 혼합물을 냉각되도록 하고, 농축시켜 조 산 클로라이드를 수득하였으며, 이를 추가로 정제 없이 사용하였다. THF 10 mL 중 NaHCO₃ (68.8 mg, 0.82 mmol), 2-아미노-2-메틸프로판산 (84 mg, 0.82 mmol) 및 도데실트리메틸암모늄 브로마이드 (2.52 mg, 8.19 μ mol)를 함유하는 용액에 THF (1 mL) 중 산 클로라이드를 첨가하였다. 생성된 혼합물을 환류 하에 18시간 동안 가열하였다. 반응 혼합물을 냉각되도록 하고, 물에 첨가하고, 0.1N HCl을 이용하여 산성으로 만들고, Et₂O로 추출하고 (3x), 염수로 세척하고 (1x), MgSO₄ 상에서 건조시키고, 여과하고, 증발시켜 표제 화합물을 담갈색 발포체 (400 mg, 85%)로서 수득하였다.

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.60 (d, *J* = 1.6 Hz, 1H), 7.59 (d, *J* = 8.0 Hz, 1H), 7.40 (s, 2H), 7.37 (dd, *J* = 8.1, 1.6 Hz, 1H), 6.63 (s, 1H), 6.53 (d, *J* = 15.9 Hz, 1H), 6.38 (dd, *J* = 15.9, 7.9 Hz, 1H), 4.10 (p, *J* = 8.3 Hz, 1H), 1.73 (s, 6H).

이 물질을 추가 정제 없이 사용하였다.

단계 2. (E)-2-(2-브로모-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)페닐)-4,4-디메틸옥사졸-5(4H)-온: 25 mL 둥근 바닥 플라스크에 (E)-2-(2-브로모-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤즈아미도)-2-메틸프로판산 (400 mg, 0.70 mmol), CH₂Cl₂ (10 mL)를 채우고, 0°C에서 교반하였다. EDC · HCl (134 mg, 0.70 mmol)을 고체로서 한 번에 첨가하고 반응 혼합물을 주위 온도로 가온되도록 하고, 1시간 동안 계속 교반하였다. 반응물을 CH₂Cl₂로 희석하고, 염수로 세척하고, MgSO₄ 상에서 건조시키고, 여과하고, 증발시켜 암색 오일을 수득하였다. 조 생성물을 플래쉬 크로마토그래피에 의해 50% 헥산/CH₂Cl₂로 용리시키면서 정제하여 표제 화합물을 회백색 발포체 (220 mg, 57%)로서 수득하였다.

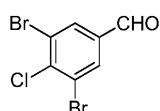
¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.76 (d, *J* = 8.1 Hz, 1H), 7.73 (d, *J* = 1.6 Hz, 1H), 7.42 (d, *J* = 7.8 Hz, 3H), 6.56 (d, *J* = 15.9 Hz, 1H), 6.45 (dd, *J* = 15.9, 7.7 Hz, 1H), 4.12 (p, *J* = 8.5 Hz, 1H), 1.57 (s, 6H); ¹⁹F NMR (376 MHz, CDCl₃) δ -68.55; ESIMS *m/z* 554 ([M-H]).

단계 3. (E)-2-브로모-N-(2-메틸-1-(네오펜틸아미노)-1-옥소프로판-2-일)-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)벤즈아미드: 10 mL 둥근 바닥 플라스크에 (E)-2-(2-브로모-4-(4,4,4-트리플루오로-3-(3,4,5-트리클로로페닐)부트-1-엔-1-일)페닐)-4,4-디메틸옥사졸-5(4H)-온 (90 mg, 0.16 mmol) 및 CH₂Cl₂ (2 mL)를 채웠다. 2,2-디메틸프로판-1-아민 (28.2 mg, 0.324 mmol)을 피펫을 통해 순수한 상태로 첨가하고, 반응물을 주위 온도에서 18시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 증발시켜 오일을 수득하였다. 조 생성물을 플래쉬 크로마토그래피에 의해 20% EtOAc/헥산으로 용리시키면서 정제하여 표제 화합물을 백색 발포체 (90 mg, 86%)로서 수득하였다.

¹H

NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.60 (d, *J* = 1.6 Hz, 1H), 7.51 (d, *J* = 8.0 Hz, 1H), 7.40 (s, 2H), 7.36 (dd, *J* = 8.1, 1.6 Hz, 1H), 6.66 (d, *J* = 10.0 Hz, 2H), 6.53 (d, *J* = 15.9 Hz, 1H), 6.38 (dd, *J* = 15.9, 7.8 Hz, 1H), 4.11 (m, 1H), 3.12 (d, *J* = 6.2 Hz, 2H), 1.72 (s, 6H), 0.93 (s, 9H); 19F NMR (376 MHz, CDCl₃) δ -68.62; ESIMS *m/z* 643.19 ([M+H]⁺).

실시예 143: 3,5-디브로모-4-클로로벤즈알데히드의 제조



단계 1. 메틸 4-아미노-3,5-디브로모벤조에이트: 진한 H₂SO₄ (1.35 mL, 25.48 mmol)를 MeOH (50 mL) 중 4-아미노-3,5-디브로모벤조산 (5.0 g, 16.99 mmol)의 교반 용액에 주위 온도에서 적가한 다음, 반응 혼합물을 80℃에서 8시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 주위 온도로 냉각되도록 하고, 휘발성 물질을 증발시키고, 빙냉수를 잔류물에 첨가한 다음, 이를 EtOAc로 추출하였다. 유기 층을 수성 NaHCO₃ 용액에 이어서 염수 및 물로 세척하였다. 이어서, 용액을 건조 (Na₂SO₄)시키고, 여과하고, 농축시켜 표제 화합물을 회백색 고체 (5.0 g, 95%)로서 수득하였다.

¹H NMR (300 MHz, DMSO-*d*₆) δ 7.91

(s, 2H), 6.20 (bs, 2H), 3.78 (s, 3H); ESIMS *m/z* 307.0 ([M]⁺); IR (박막) 3312, 2953, 1726, 595 cm⁻¹.

단계 2. 메틸 3,5-디브로모-4-클로로벤조에이트: MeCN (30 mL) 중 CuCl₂ (2.82 g, 21.0 mmol)를 80℃에서 30분 동안 교반하였다. 이어서, 이 혼합물에 tert-부틸니트라이트 (2.7 mL, 23 mmol)를 동일한 온도에서 적가하고, 혼합물을 추가 10분 동안 교반하였다. MeCN (30 mL) 중 메틸 4-아미노-3,5-디브로모벤조에이트 (5.0 g, 16 mmol)를 반응 혼합물에 적가한 다음, 80℃에서 30분 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 주위 온도로 냉각되도록 하고, 수성 암모니아 용액 (20 mL)을 반응 혼합물에 첨가하고, 석유 에테르로 추출하였다. 유기 층을 염수에 이어서 물로 세척하고, 건조 (Na₂SO₄)시키고, 여과하고, 농축시켜 표제 화합물을 회백색 고체 (4.5 g, 84%)로서 수득하였다.

¹H NMR (300 MHz, DMSO-*d*₆) δ 8.21 (s,

2H), 3.94 (s, 3H); ESIMS *m/z* 326 ([M]⁺); IR (박막) 1732, 746 cm⁻¹.

단계 3. (3,5-디브로모-4-클로로페닐)메탄올: NaBH₄ (1.53 g, 40.65 mmol)를 MeOH (50 mL) 중 메틸 3,5-디브로모-4-클로로벤조에이트 (4.45 g, 13.6 mmol)의 교반 용액에 0℃에서 조금씩 첨가하였다. 이어서, 반응 혼합물을 주위 온도에서 8시간 동안 교반하였다. 휘발성 물질을 증발시키고, 잔류물을 CH₂Cl₂로 희석하고, 염수에 이어서 물로 세척하였다. 유기 층을 건조 (Na₂SO₄)시키고, 여과하고, 농축시켜 표제 화합물을 회백색 고체 (3.3 g, 80%)로서 수득하였다.

¹H NMR (300

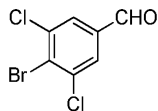
MHz, DMSO-*d*₆) δ 7.71 (s, 2H), 5.49 (bs, 1H), 4.48 (d, *J* = 4.5 Hz, 2H); ESIMS *m/z* 297.9 ([M]⁺); IR (박막) 3460, 747, 534 cm⁻¹.

단계 4. 3,5-디브로모-4-클로로벤즈알데히드: 피리디늄 클로로크로메이트 (PCC, 3.44 g, 15.9 mmol)를 주위 온도에서 CHCl₃ (40 mL) 중 (3,5-디브로모-4-클로로페닐)메탄올 (3.2 g, 11.0 mmol)의 교반 용액에 한 번에 첨가하고, 반응 혼합물을 밤새 교반하였다. 반응 혼합물을 셀라이트®를 통해 여과하고, 셀라이트® 패드를 CHCl₃로 세척하고, 여과물을 농축시켜 표제 화합물을 회백색 고체 (2.0 g, 62%)로서 수득하였다.

mp 110-113 °C; ¹H NMR (300 MHz, DMSO-

*d*₆) δ 9.93 (s, 1H), 8.27 (s, 2H); ESIMS *m/z* 297.0 ([M]⁺).

실시예 144: 4-브로모-3,5-디클로로벤즈알데히드의 제조



단계 1. 메틸 4-아미노-3,5-디클로로벤조에이트: 진한 H₂SO₄ (2.5 mL, 97.04 mmol)를 MeOH (150 mL) 중 4-아미노-3,5-디클로로벤조산 (10.0 g, 48.54 mmol)의 교반 용액에 0°C에서 적가한 다음, 반응 혼합물을 80°C에서 8시간 동안 교반하였다. 휘발성 물질을 증발시키고; 빙냉수를 잔류물에 첨가한 다음, 이를 EtOAc로 추출하였다. 합한 유기 층을 염수로 세척하고, 건조 (Na₂SO₄)시키고, 여과하고, 감압 하에 농축시켜 표제 화합물을 백색 고체 (7.5 g, 70%)로서 수득하였다.

¹H NMR (300 MHz, DMSO-*d*₆) δ 8.05 (s, 2H), 3.96 (s, 3H); ESIMS *m/z* 282

([M]⁺); IR (KBr): 1733, 762, 514 cm⁻¹.

단계 2. 메틸 4-브로모-3,5-디클로로벤조에이트: MeCN (50 mL) 중 CuBr₂ (7.5 g, 34.08 mmol)를 80°C에서 30분 동안 교반하였다. 이 용액에 tert-부틸니트라이트 (6.5 mL, 54.55 mmol)를 동일한 온도에서 적가하고, 혼합물을 추가 10분 동안 교반하였다. MeCN (30 mL) 중 메틸 4-아미노-3,5-디클로로벤조에이트를 반응 혼합물에 적가한 다음, 이를 80°C에서 30분 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 주위 온도로 냉각되도록 하고, 수성 암모니아 용액 (20 mL)을 첨가하고, 석유 에테르로 추출하였다. 유기 층을 염수에 이어서 물로 세척하였다. 유기 용액을 건조 (Na₂SO₄)시키고, 여과하고, 농축시켜 표제 화합물을 회백색 고체 (7.5 g, 77%)로서 수득하였다.

¹H NMR (300 MHz, DMSO-*d*₆) δ 8.02 (s,

2H), 3.94 (s, 3H); ESIMS *m/z* 282 ([M]⁺); IR (박막) 1733, 762, 514 cm⁻¹.

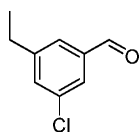
단계 3. (4-브로모-3,5-디클로로페닐)메탄올: DIBAL-H (톨루엔 중 1M, 66 mL, 및 66.0 mmol)를 THF (50 mL) 중 메틸 4-브로모-3,5-디클로로벤조에이트 (7.5 g, 26.0 mmol)의 교반 용액에 -78°C에서 적가하였다. 반응 혼합물을 주위 온도로 되도록 하고, 6시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 빙수에 붓고, CH₂Cl₂로 추출하였다. 유기 층을 염수에 이어서 물로 세척하고, 건조 (Na₂SO₄)시키고, 여과하고, 농축시켜 (4-브로모-3,5-디클로로페닐)메탄올 및 4-브로모-3,5-디클로로벤즈알데히드의 혼합물 (6.0 g)을 회백색 고체로서 수득하였으며, 이를 후속 단계에 정제 없이 사용하였다.

단계 4. 4-브로모-3,5-디클로로벤즈알데히드: PCC (7.5 g, 35.16 mmol)를 CHCl₃ (40 mL) 중 (4-브로모-3,5-디클로로페닐)메탄올 및 4-브로모-3,5-디클로로벤즈알데히드 (6.0 g)의 혼합물을 함유하는 교반 용액에 주위 온도에서 한 번에 첨가하고, 반응 혼합물을 밤새 교반하였다. 반응 혼합물을 셀라이트를 통해 여과하였다. 셀라이트 패드를 CHCl₃로 세척하였다. 여과물을 농축시켜 표제 화합물을 회백색 고체 (3.5 g, 67%)로서 수득하였다.

mp 125-128 °C;

¹H NMR (300 MHz, DMSO-*d*₆) δ 9.96 (s, 1H), 8.10 (s, 2H); ESIMS *m/z* 252 ([M]⁺).

실시예 145: 3-클로로-5-에틸벤즈알데히드



PdCl₂(dppf)(37 mg, 0.046 mmol), 인산칼륨 (1.93 g, 9.11 mmol) 및 트리에틸보란 (헥산 중 1M, 0.45 g, 4.56

mmol)을 THF (20 mL) 중 3-브로모-5-클로로-벤즈알데히드 (1.0 g, 4.56 mmol)의 용액에 주위 온도에서 첨가하고, 혼합물을 12시간 동안 환류하였다. 반응 혼합물을 주위 온도로 되돌고, EtOAc로 희석시키고, 물로 세척하였다. 유기 층을 건조 (Na₂SO₄)시키고, 여과하고, 농축시키고, 잔류물을 실리카 상에서 칼럼 크로마토그래피 (100-200 메쉬)에 의해 석유 에테르 중 2% EtOAc로 용리시키면서 정제하여 표제 화합물 (330 mg, 41%)을 연황색 액체로서 수득하였다.

¹H NMR (400 MHz, DMSO-*d*₆) δ 9.97 (s, 1H), 7.75 (d, *J* = 1.6

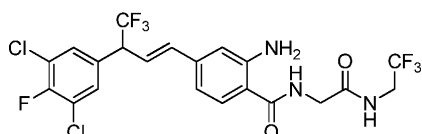
Hz 1H), 7.73 (s, 1H), 7.65 (s, 1H), 2.74 -2.68 (m, 2H), 1.23 (t, *J* = 7.6 Hz, 3H); ESIMS *m/z*

168.0 ([M]⁺); IR (박막) 3071, 1699, 692 cm⁻¹.

[1953]

[1954]

실시예 146: (E)-2-아미노-4-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-에닐)-N-(2-옥소-2-(2,2,2-트리플루오로에틸아미노)에틸)벤즈아미드



[1955]

[1956]

단계 1. (E)-에틸 4-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-에닐)-2-니트로벤조에이트: 5-(1-브로모-2,2,2-트리플루오로에틸)-1,3-디클로로-2-플루오로벤젠 (3.5 g, 10.8 mmol), CuCl (54 mg, 0.54 mmol) 및 2,2-비피리딘 (169 mg, 1.08 mmol)을 1,2-디클로로벤젠 (12 mL) 중 에틸 2-니트로-4-비닐벤조에이트 (1.2 g, 5.42 mmol)의 교반 용액에 주위 온도에서 첨가한 다음, 혼합물을 180℃에서 18시간 동안 교반하였다. 이어서, 반응 혼합물을 주위 온도로 냉각시키고, 실리카 겔 상에 흡착시키고, 칼럼 크로마토그래피에 의해 석유 에테르 중 10% EtOAc로 용리시키면서 정제하여 표제 화합물 (1.3 g, 53%)을 갈색 액체로서 수득하였다.

¹H NMR (DMSO-*d*₆, 300 MHz) δ 8.31 (s, 1H),

8.02 - 7.95 (m, 1H), 7.88 - 7.85 (m, 3H), 7.20 (dd, *J* = 15.9, 9.3 Hz, 1H), 6.91 (d, *J* = 15.6 Hz,

1H), 4.91 - 4.85 (m, 1H), 4.34 - 4.27 (m, 2H), 1.27 (t, *J* = 6.6 Hz, 3H); ESIMS *m/z* 463.8 ([M-

H]⁻); IR (KBr) 3439, 2985, 1731, 1251 cm⁻¹.

[1957]

[1958]

단계 2. (E)-4-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-에닐)-2-니트로벤조산: 진한 HCl (16.0 mL)을 1,4-디옥산 (8.0 mL) 중 (E)-에틸 4-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-에닐)-2-니트로벤조에이트 (800 mg, 1.72 mmol)의 교반 용액에 0℃에서 적가하고, 반응 혼합물을 36시간 동안 환류하였다. 휘발성 물질을 증발시키고; 잔류물을 EtOAc로 희석하고, 염수 및 물로 세척하였다. 유기 층을 건조 (Na₂SO₄)시키고, 여과하고, 농축시키고, 잔류물을 실리카 상에서 칼럼 크로마토그래피 (100-200 메쉬)에 의해 석유 에테르 중 30% EtOAc로 용리시키면서 정제하여 표제 화합물을 황색 고체 (390 mg, 52%)로서 수득하였다.

¹H NMR

(400MHz, DMSO-*d*₆) δ 13.9 (bs, 1H), 8.22 (s, 1H), 7.93 - 7.91 (m, 1H), 7.86 - 7.84 (m, 3H),

7.16 (dd, *J* = 15.6, 9.2 Hz, 1H), 6.89 (d, *J* = 15.6 Hz, 1H), 4.89 - 4.85 (m, 1H). ESIMS *m/z*

435.9 ([M-H]⁻); IR (KBr) 3445, 2924, 1708, 1541, 817 cm⁻¹.

[1959]

[1960]

단계 3. (E)-4-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-에닐)-2-니트로-N-(2-옥소-2-(2,2,2-트리플루오로에틸아미노)에틸)벤즈아미드: 2-아미노-N-(2,2,2-트리플루오로에틸)아세트아미드 히드로클로라이드 (96 mg, 0.35 mmol), PyBOP (165 mg, 0.32 mmol) 및 DIPEA (0.1 mL, 0.57 mmol)를 CH₂Cl₂ (3 mL) 중 (E)-4-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-에닐)-2-니트로벤조산 (130 mg, 0.29 mmol)의 교반 용액에 첨가하고, 반응 혼합물을 주위 온도에서 8시간 동안 교반하였다. 물을 반응 혼합물에 첨가하고, CH₂Cl₂로 추출하였다. 유기 층을 염수로 세척하고, 건조 (Na₂SO₄)시키고, 여과하고, 농축시키고, 잔류물을 실리카 상에서 칼럼 크로마토그래피 (100-200 메쉬)에 의해 석유 에테르 중 30% EtOAc로 용리시키면서 정제하여 표제 화합물을 황색 고체 (120 mg, 74%)로서 수득하였다.

¹H NMR (300 MHz, DMSO-*d*₆)

δ 9.04 (t, *J* = 5.7 Hz, 1H), 8.60 (t, *J* = 6.0 Hz, 1H), 8.25 (s, 1H), 7.97 - 7.94 (m, 1H), 7.87 (d, *J* = 6.3 Hz, 2H), 7.69 (d, *J* = 7.5 Hz, 1H), 7.15 (dd, *J* = 15.9, 9.3 Hz, 1H), 6.89 (d, *J* = 15.9 Hz, 1H), 4.88 - 4.83 (m, 1H), 3.98 - 3.89 (m, 4H); ESIMS *m/z* 575.87 ([M+H]⁺); IR (KBr) 3430, 2925, 1663, 1168, 832 cm⁻¹.

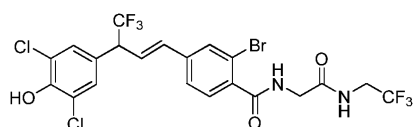
[1961]

[1962]

단계 4. (E)-2-아미노-4-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-에닐)-N-(2-옥소-2-(2,2,2-트리플루오로에틸아미노)에틸)벤즈아미드: 철 분말 (81.8 mg, 1.46 mmol) 및 NH₄Cl (104 mg, 1.94 mmol)을 EtOH: 물 (6 mL, 1:1) 중 (E)-4-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-에닐)-2-니트로-N-(2-옥소-2-(2,2,2-트리플루오로에틸아미노)에틸)벤즈아미드 (280 mg, 0.486 mmol)의 교반 용액에 주위 온도에서 첨가하고, 혼합물을 환류 하에 90분 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 주위 온도로 냉각시키고, 셀라이트를 통해 여과하였다. 여과물을 농축시키고, 잔류물을 EtOAc 중에 용해시키고, 포화 NaHCO₃ 용액, 염수 및 물로 세척하였다. 유기 층을 건조 (Na₂SO₄)시키고, 여과하고, 농축시키고, 잔류물을 실리카 상에서 칼럼 크로마토그래피 (10-200 메쉬)에 의해 석유 에테르 중 35% EtOAc로 용리시키면서 정제하여 표제 화합물을 황색 고체 (215 mg, 81%)로서 수득하였다.

[1963]

실시예 147: (E)-2-브로모-4-(3-(3,5-디클로로-4-히드록시페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-에닐)-N-(2-옥소-2-(2,2,2-트리플루오로에틸아미노)에틸)벤즈아미드



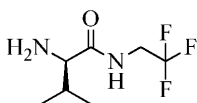
[1964]

[1965]

DIPEA (0.20 mL, 1.26 mmol), PyBOP (245 mg, 0.47 mmol) 및 2-아미노-N-(2,2,2-트리플루오로에틸)아세트아미드 (90 mg, 0.47 mmol)를 주위 온도에서 CH₂Cl₂ (5 mL) 중 (E)-2-브로모-4-(3-(3,5-디클로로-4-히드록시페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-에닐)벤조산 (200 mg, 0.42 mmol, 66% 순도)의 교반 용액에 첨가하였다. 이어서, 생성된 혼합물을 12시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 CH₂Cl₂로 희석하고, 1N HCl에 이어서 포화 중탄산나트륨 용액, 염수 용액 및 물로 세척하였다. 유기 층을 건조 (Na₂SO₄)시키고, 여과하고, 진공 하에 농축시켰다. 잔류물을 실리카 상에서 칼럼 크로마토그래피 (100-200 메쉬)에 의해 석유 에테르 중 30% EtOAc로 용리시키면서 정제하여 표제 화합물을 담녹색 고체 (130 mg, 52%)로서 수득하였다.

[1966]

실시예 148: (R)-2-아미노-3-메틸-N-(2,2,2-트리플루오로에틸)부탄아미드의 제조



[1967]

[1968]

파르 진탕기 플라스크에 EtOAc 100 mL 중 (R)-벤질 (3-메틸-1-옥소-1-((2,2,2-트리플루오로에틸)아미노)-부탄-2-일)카르바메이트 (4.95 g, 14.9 mmol)를 채우고, EtOH 25 mL를 10% Pd/C 175 mg로 처리하였다. 혼합물을 40 psi의 수소 하에 두고, 6시간 동안 진탕시켰다. 추가로 10% Pd/C 65 mg을 반응 혼합물에 첨가하고, 이어서 이를 40 psi의 수소 하에 두고, 3.5시간 동안 진탕시켰다. 이어서, 반응 용액을 셀라이트의 패드를 통해 여과하고, 진공 하에 농축시키고, 승화 (75 내지 85°C, 200-230 밀리바)에 의해 정제하여 표제 화합물을 백색 고체 (1.92 g, 65%)로서 수득하였다.

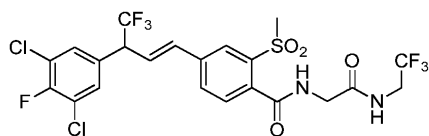
mp 43-47 °C; ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 8.04 - 7.74 (m, 1H), 3.92 (ddd, *J* = 16.0, 9.3, 6.8 Hz, 1H), 3.84 - 3.60 (m, 1H), 3.23 (d, *J* = 3.8 Hz, 1H), 2.23 (ddd, *J* = 10.7, 7.0, 3.5 Hz, 1H), 0.92 (d, *J* = 7.0 Hz, 3H), 0.75 (d, *J* = 6.9 Hz, 3H); ¹⁹F NMR (376 MHz, CDCl₃) δ -72.70.

[1969]

[1970]

실시예 149: (E)-4-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-에닐)-2-(메틸술포닐)-N-

(2-옥소-2-(2,2,2-트리플루오로에틸아미노)에틸)벤즈아미드의 제조



옥손 (320 mg, 0.50 mmol)을 아세톤 -물 (10 mL, 1:1) 중 (E)-4-(3-(3,5-디클로로-4-플루오로페닐)-4,4,4-트리플루오로부트-1-에닐)-2-(메틸티오)-N-(2-옥소-2-(2,2,2-트리플루오로에틸아미노)에틸)벤즈아미드 (150 mg, 0.25 mmol)의 교반 용액에 주위 온도에서 첨가하고, 반응 혼합물을 18시간 동안 교반하였다. 이어서, 반응 혼합물을 CH_2Cl_2 로 추출하였다. 유기 층을 염수 및 물로 세척하고, 건조 (Na_2SO_4)시키고, 여과하고, 농축시키고, 잔류물을 펜탄-Et₂O (1:1)로 연화처리하여 표제 화합물을 회백색 고체 (85 mg, 56%)로서 수득하였다.

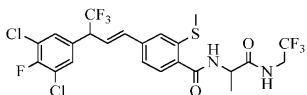
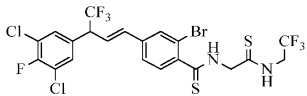
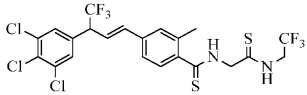
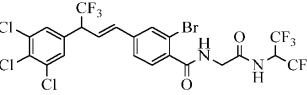
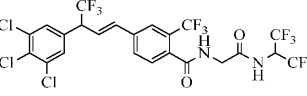
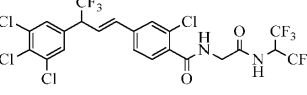
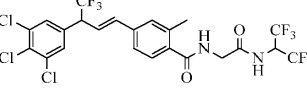
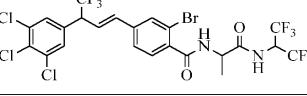
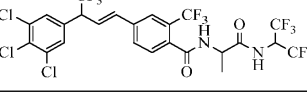
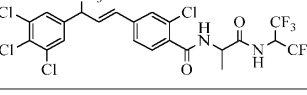
¹H NMR (300 MHz, DMSO-*d*₆) δ 9.01 (t, *J* = 6.0, 1H), 8.37 (t, *J* = 6.4 Hz, 1H), 8.08 (s, 1H), 8.01 - 7.96 (m, 1H), 7.88 - 7.86 (m, 2H), 7.64 (d, *J* = 7.6 Hz, 1H), 7.05 (dd, *J* = 16.4, 8.8 Hz, 1H), 6.91 (d, *J* = 15.6 Hz, 1H), 4.87 - 4.80 (m, 1H), 3.98 - 3.91 (m, 4H), 3.38 (s, 3H); ESIMS *m/z* 608.85 ([M+H]⁺); IR (박막) 337, 416, 721, 164, 768 cm⁻¹.

하기 예측 분자를 본원에 개시된 절차에 따라 제조할 수 있었다:

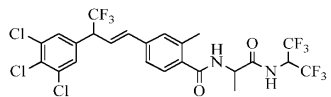
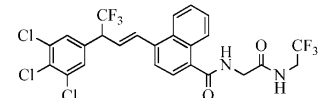
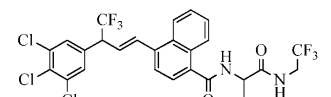
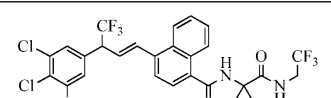
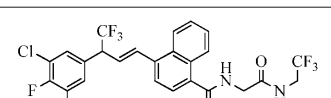
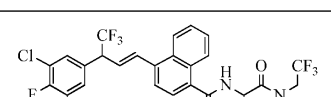
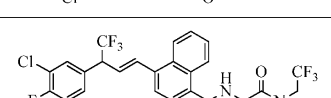
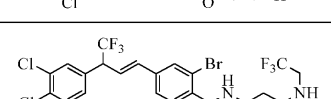
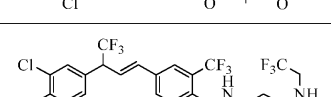
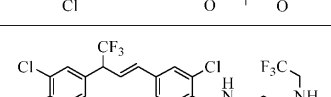
화합물 번호	구조
P1	
P2	

P3	
P4	
P5	
P6	
P7	
P8	
P9	
P10	
P11	
P12	

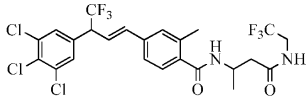
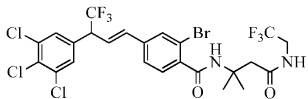
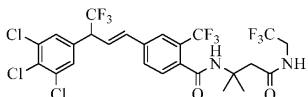
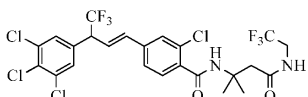
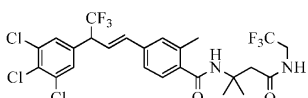
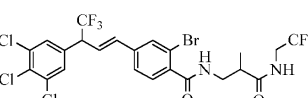
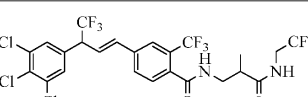
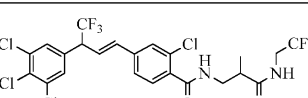
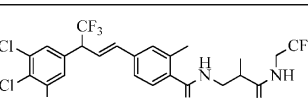
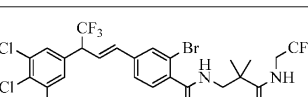
[1976]

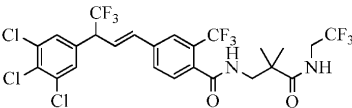
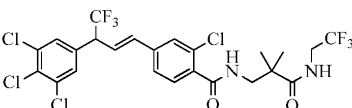
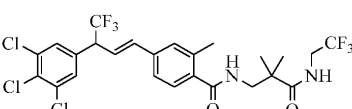
P13	
P14	
P15	
P16	
P17	
P18	
P19	
P20	
P21	
P22	

[1977]

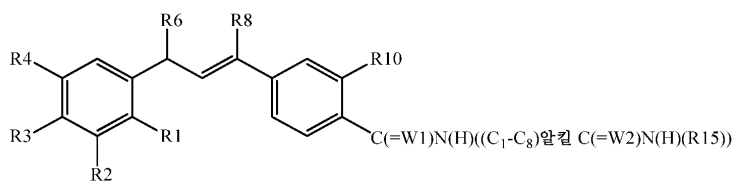
P23	
P24	
P25	
P26	
P27	
P28	
P29	
P30	
P31	
P32	

[1978]

P33	
P34	
P35	
P36	
P37	
P38	
P39	
P40	
P41	
P42	

P43	
P44	
P45	

[1981] 하기 예측 분자를 본원에 개시된 절차에 따라 제조할 수 있었다:



[1982]

화합물 번호	R 1	R2	R3	R4	R6	R8	R10	W 1	(C1-C8)알킬	W 2	R15
P46	F	F	F	H	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P47	F	F	F	H	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P48	F	F	F	H	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P49	F	F	F	H	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P50	F	F	F	H	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P51	F	F	F	H	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P52	F	F	F	H	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P53	F	F	F	H	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P54	F	F	F	H	CF ₃	H	Br	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P55	F	F	F	H	CF ₃	H	Cl	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃

[1983]

P56	F	F	F	H	CF ₃	H	CF ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P57	F	F	F	H	CF ₃	H	CH ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P58	F	F	F	H	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P59	F	F	F	H	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P60	F	F	F	H	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P61	F	F	F	H	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P62	F	F	F	H	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P63	F	F	F	H	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P64	F	F	F	H	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P65	F	F	F	H	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P66	F	F	F	H	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P67	F	F	F	H	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P68	F	F	F	H	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P69	F	F	F	H	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P70	F	F	F	H	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P71	F	F	F	H	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P72	F	F	F	H	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P73	F	F	F	H	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P74	F	F	F	H	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P75	F	F	F	H	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P76	F	F	F	H	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P77	F	F	F	H	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P78	F	F	F	H	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P79	F	F	F	H	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P80	F	F	F	H	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P81	F	F	F	H	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P82	F	F	F	H	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃

[1984]

P83	F	F	F	H	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P84	F	F	F	H	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P85	F	F	F	H	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P86	F	F	F	H	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P87	F	F	F	H	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P88	F	F	F	H	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P89	F	F	F	H	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P90	F	F	F	H	CF ₃	H	Br	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P91	F	F	F	H	CF ₃	H	Cl	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P92	F	F	F	H	CF ₃	H	CF ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P93	F	F	F	H	CF ₃	H	CH ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P94	F	F	F	H	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P95	F	F	F	H	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P96	F	F	F	H	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P97	F	F	F	H	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P98	F	F	F	H	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P99	F	F	F	H	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P100	F	F	F	H	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P101	F	F	F	H	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P102	F	F	F	H	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P103	F	F	F	H	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P104	F	F	F	H	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P105	F	F	F	H	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P106	F	F	F	H	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P107	F	F	F	H	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P108	F	F	F	H	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P109	F	F	F	H	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃

[1985]

P110	F	F	F	H	CF ₃	H	Br	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P111	F	F	F	H	CF ₃	H	Cl	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P112	F	F	F	H	CF ₃	H	CF ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P113	F	F	F	H	CF ₃	H	CH ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P114	F	F	F	H	CF ₃	H	Br	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P115	F	F	F	H	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P116	F	F	F	H	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P117	F	F	F	H	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P118	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P119	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P120	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P121	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P122	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P123	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P124	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P125	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P126	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Br	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P127	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Cl	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P128	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CF ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P129	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CH ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P130	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P131	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P132	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P133	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P134	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P135	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P136	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃

[1986]

P137	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P138	Cl	Cl	H	Cl	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P139	Cl	Cl	H	Cl	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P140	Cl	Cl	H	Cl	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P141	Cl	Cl	H	Cl	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P142	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P143	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P144	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P145	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P146	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P147	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P148	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P149	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P150	Cl	Cl	H	Cl	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P151	Cl	Cl	H	Cl	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P152	Cl	Cl	H	Cl	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P153	Cl	Cl	H	Cl	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P154	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P155	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P156	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P157	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P158	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P159	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P160	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P161	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P162	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Br	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P163	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Cl	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃

[1987]

P164	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CF ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P165	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CH ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P166	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P167	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P168	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P169	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P170	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P171	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P172	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P173	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P174	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P175	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P176	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P177	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P178	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P179	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P180	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P181	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P182	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Br	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P183	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Cl	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P184	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P185	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P186	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P187	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P188	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P189	Cl	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃

[1988]

P190	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P191	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P192	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P193	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P194	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P195	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P196	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P197	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P198	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	Br	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P199	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	Cl	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P200	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	CF ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P201	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	CH ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P202	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P203	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P204	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P205	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P206	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃

[1989]

P207	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P208	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P209	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P210	H	H	H	OC F ₃	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P211	H	H	H	OC F ₃	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P212	H	H	H	OC F ₃	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P213	H	H	H	OC F ₃	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P214	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P215	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P216	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P217	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P218	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P219	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P220	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P221	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P222	H	H	H	OC F ₃	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P223	H	H	H	OC F ₃	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃

[1990]

P224	H	H	H	OC F ₃	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P225	H	H	H	OC F ₃	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P226	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P227	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P228	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P229	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P230	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P231	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P232	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P233	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P234	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	Br	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P235	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	Cl	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P236	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	CF ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P237	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	CH ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P238	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P239	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P240	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂

[1991]

P241	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P242	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P243	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P244	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P245	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P246	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P247	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P248	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P249	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P250	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P251	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P252	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P253	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P254	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	Br	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P255	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	Cl	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P256	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P257	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃

[1992]

P258	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	Br	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P259	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P260	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P261	H	H	H	OC F ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P262	H	F	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P263	H	F	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P264	H	F	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P265	H	F	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P266	H	F	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P267	H	F	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P268	H	F	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P269	H	F	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P270	H	F	H	Br	CF ₃	H	Br	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P271	H	F	H	Br	CF ₃	H	Cl	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P272	H	F	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P273	H	F	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P274	H	F	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P275	H	F	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P276	H	F	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P277	H	F	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P278	H	F	H	Br	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P279	H	F	H	Br	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P280	H	F	H	Br	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P281	H	F	H	Br	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P282	H	F	H	Br	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃

[1993]

P283	H	F	H	Br	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P284	H	F	H	Br	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P285	H	F	H	Br	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P286	H	F	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P287	H	F	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P288	H	F	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P289	H	F	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P290	H	F	H	Br	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P291	H	F	H	Br	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P292	H	F	H	Br	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P293	H	F	H	Br	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P294	H	F	H	Br	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P295	H	F	H	Br	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P296	H	F	H	Br	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P297	H	F	H	Br	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P298	H	F	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P299	H	F	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P300	H	F	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P301	H	F	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P302	H	F	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P303	H	F	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P304	H	F	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P305	H	F	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P306	H	F	H	Br	CF ₃	H	Br	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P307	H	F	H	Br	CF ₃	H	Cl	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P308	H	F	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P309	H	F	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃

[1994]

P310	H	F	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P311	H	F	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P312	H	F	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P313	H	F	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P314	H	F	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P315	H	F	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P316	H	F	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P317	H	F	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P318	H	F	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P319	H	F	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P320	H	F	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P321	H	F	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P322	H	F	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P323	H	F	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P324	H	F	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P325	H	F	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P326	H	F	H	Br	CF ₃	H	Br	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P327	H	F	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P328	H	F	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P329	H	F	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P330	H	F	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P331	H	F	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P332	H	F	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P333	H	F	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P334	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P335	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P336	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃

[1995]

P337	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P338	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P339	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P340	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P341	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P342	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	Br	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P343	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	Cl	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P344	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	CF ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P345	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	CH ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P346	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P347	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P348	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P349	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P350	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P351	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P352	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P353	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P354	H	CH ₃	Cl	H	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P355	H	CH ₃	Cl	H	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P356	H	CH ₃	Cl	H	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P357	H	CH ₃	Cl	H	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P358	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P359	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P360	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P361	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P362	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P363	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃

[1996]

P364	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P365	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P366	H	CH ₃	Cl	H	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P367	H	CH ₃	Cl	H	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P368	H	CH ₃	Cl	H	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P369	H	CH ₃	Cl	H	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P370	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P371	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P372	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P373	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P374	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P375	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P376	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P377	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P378	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	Br	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P379	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	Cl	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P380	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	CF ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P381	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	CH ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P382	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P383	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P384	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P385	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P386	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P387	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P388	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P389	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P390	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃

[1997]

P391	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P392	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P393	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P394	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P395	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P396	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P397	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P398	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	Br	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P399	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	Cl	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P400	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	CF ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P401	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	CH ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P402	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	Br	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P403	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P404	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P405	H	CH ₃	Cl	H	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P406	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P407	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P408	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P409	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P410	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P411	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P412	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P413	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P414	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	Br	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P415	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	Cl	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P416	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	CF ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P417	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	CH ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃

[1998]

P418	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P419	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P420	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P421	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P422	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P423	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P424	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P425	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P426	H	Cl	CH ₃	H	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P427	H	Cl	CH ₃	H	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P428	H	Cl	CH ₃	H	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P429	H	Cl	CH ₃	H	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P430	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P431	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P432	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P433	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P434	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P435	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P436	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P437	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P438	H	Cl	CH ₃	H	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P439	H	Cl	CH ₃	H	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P440	H	Cl	CH ₃	H	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P441	H	Cl	CH ₃	H	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P442	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P443	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P444	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃

[1999]

P445	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P446	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P447	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P448	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P449	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P450	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	Br	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P451	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	Cl	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P452	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	CF ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P453	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	CH ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P454	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P455	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P456	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P457	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P458	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P459	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P460	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P461	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P462	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P463	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P464	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P465	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P466	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P467	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P468	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P469	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P470	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	Br	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P471	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	Cl	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃

[2000]

P472	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	CF ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P473	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	CH ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P474	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	Br	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P475	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P476	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P477	H	Cl	CH ₃	H	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P478	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P479	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P480	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P481	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P482	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P483	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P484	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P485	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P486	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	Br	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P487	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	Cl	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P488	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	CF ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P489	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P490	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P491	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P492	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P493	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P494	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P495	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P496	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P497	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P498	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃

[2001]

P499	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P500	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P501	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P502	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P503	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P504	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P505	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P506	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P507	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P508	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P509	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P510	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P511	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P512	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P513	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P514	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P515	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P516	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P517	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P518	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P519	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P520	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P521	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P522	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	Br	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P523	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	Cl	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P524	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	CF ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P525	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃

[2002]

P526	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P527	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P528	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P529	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P530	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P531	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P532	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P533	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P534	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P535	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P536	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P537	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P538	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P539	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P540	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P541	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P542	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	Br	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P543	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	Cl	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P544	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P545	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P546	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	Br	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P547	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P548	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P549	H	CH ₃	F	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P550	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P551	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P552	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃

[2003]

P553	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P554	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P555	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P556	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P557	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P558	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	Br	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P559	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	Cl	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P560	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P561	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P562	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P563	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P564	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P565	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P566	H	Cl	H	Br	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P567	H	Cl	H	Br	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P568	H	Cl	H	Br	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P569	H	Cl	H	Br	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P570	H	Cl	H	Br	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P571	H	Cl	H	Br	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P572	H	Cl	H	Br	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P573	H	Cl	H	Br	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P574	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P575	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P576	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P577	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P578	H	Cl	H	Br	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P579	H	Cl	H	Br	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃

[2004]

P580	H	Cl	H	Br	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P581	H	Cl	H	Br	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P582	H	Cl	H	Br	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P583	H	Cl	H	Br	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P584	H	Cl	H	Br	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P585	H	Cl	H	Br	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P586	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P587	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P588	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P589	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P590	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P591	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P592	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P593	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P594	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	Br	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P595	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	Cl	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P596	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P597	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P598	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P599	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P600	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P601	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P602	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P603	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P604	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P605	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P606	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃

[2005]

P607	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P608	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P609	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P610	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P611	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P612	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P613	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P614	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	Br	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P615	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P616	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P617	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P618	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P619	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P620	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P621	H	Cl	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P622	H	H	Br	Br	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P623	H	H	Br	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P624	H	H	Br	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P625	H	H	Br	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P626	H	H	Br	Br	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P627	H	H	Br	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P628	H	H	Br	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P629	H	H	Br	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P630	H	H	Br	Br	CF ₃	H	Br	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P631	H	H	Br	Br	CF ₃	H	Cl	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P632	H	H	Br	Br	CF ₃	H	CF ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P633	H	H	Br	Br	CF ₃	H	CH ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃

[2006]

P634	H	H	Br	Br	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P635	H	H	Br	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P636	H	H	Br	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P637	H	H	Br	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P638	H	H	Br	Br	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P639	H	H	Br	Br	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P640	H	H	Br	Br	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P641	H	H	Br	Br	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P642	H	H	Br	Br	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P643	H	H	Br	Br	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P644	H	H	Br	Br	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P645	H	H	Br	Br	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P646	H	H	Br	Br	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P647	H	H	Br	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P648	H	H	Br	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P649	H	H	Br	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P650	H	H	Br	Br	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P651	H	H	Br	Br	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P652	H	H	Br	Br	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P653	H	H	Br	Br	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P654	H	H	Br	Br	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P655	H	H	Br	Br	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P656	H	H	Br	Br	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P657	H	H	Br	Br	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P658	H	H	Br	Br	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P659	H	H	Br	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P660	H	H	Br	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃

[2007]

P661	H	H	Br	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P662	H	H	Br	Br	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P663	H	H	Br	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P664	H	H	Br	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P665	H	H	Br	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P666	H	H	Br	Br	CF ₃	H	Br	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P667	H	H	Br	Br	CF ₃	H	Cl	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P668	H	H	Br	Br	CF ₃	H	CF ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P669	H	H	Br	Br	CF ₃	H	CH ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P670	H	H	Br	Br	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P671	H	H	Br	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P672	H	H	Br	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P673	H	H	Br	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P674	H	H	Br	Br	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P675	H	H	Br	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P676	H	H	Br	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P677	H	H	Br	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P678	H	H	Br	Br	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P679	H	H	Br	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P680	H	H	Br	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P681	H	H	Br	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P682	H	H	Br	Br	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P683	H	H	Br	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P684	H	H	Br	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P685	H	H	Br	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P686	H	H	Br	Br	CF ₃	H	Br	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P687	H	H	Br	Br	CF ₃	H	Cl	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃

[2008]

P688	H	H	Br	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P689	H	H	Br	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P690	H	H	Br	Br	CF ₃	H	Br	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P691	H	H	Br	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P692	H	H	Br	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P693	H	H	Br	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P694	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P695	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P696	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P697	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P698	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P699	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P700	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P701	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P702	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	Br	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P703	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	Cl	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P704	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	CF ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P705	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	CH ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P706	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P707	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P708	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P709	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P710	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P711	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P712	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P713	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P714	H	H	Cl	NO ₂	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃

[2009]

P715	H	H	Cl	NO ₂	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P716	H	H	Cl	NO ₂	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P717	H	H	Cl	NO ₂	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P718	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P719	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P720	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P721	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P722	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P723	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P724	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P725	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P726	H	H	Cl	NO ₂	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P727	H	H	Cl	NO ₂	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P728	H	H	Cl	NO ₂	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P729	H	H	Cl	NO ₂	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P730	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P731	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P732	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P733	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P734	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P735	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P736	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P737	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P738	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	Br	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P739	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	Cl	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P740	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	CF ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P741	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	CH ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃

[2010]

P742	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P743	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P744	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P745	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P746	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P747	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P748	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P749	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P750	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P751	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P752	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P753	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P754	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P755	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P756	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P757	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P758	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	Br	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P759	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	Cl	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P760	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	CF ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P761	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	CH ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P762	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	Br	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P763	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P764	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P765	H	H	Cl	NO ₂	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P766	H	H	F	CN	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P767	H	H	F	CN	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P768	H	H	F	CN	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃

[2011]

P769	H	H	F	CN	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P770	H	H	F	CN	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P771	H	H	F	CN	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P772	H	H	F	CN	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P773	H	H	F	CN	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P774	H	H	F	CN	CF ₃	H	Br	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P775	H	H	F	CN	CF ₃	H	Cl	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P776	H	H	F	CN	CF ₃	H	CF ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P777	H	H	F	CN	CF ₃	H	CH ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P778	H	H	F	CN	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P779	H	H	F	CN	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P780	H	H	F	CN	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P781	H	H	F	CN	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P782	H	H	F	CN	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P783	H	H	F	CN	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P784	H	H	F	CN	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P785	H	H	F	CN	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P786	H	H	F	CN	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P787	H	H	F	CN	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P788	H	H	F	CN	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P789	H	H	F	CN	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P790	H	H	F	CN	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P791	H	H	F	CN	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P792	H	H	F	CN	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P793	H	H	F	CN	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P794	H	H	F	CN	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P795	H	H	F	CN	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃

[2012]

P796	H	H	F	CN	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P797	H	H	F	CN	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P798	H	H	F	CN	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P799	H	H	F	CN	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P800	H	H	F	CN	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P801	H	H	F	CN	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P802	H	H	F	CN	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P803	H	H	F	CN	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P804	H	H	F	CN	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P805	H	H	F	CN	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P806	H	H	F	CN	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P807	H	H	F	CN	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P808	H	H	F	CN	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P809	H	H	F	CN	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P810	H	H	F	CN	CF ₃	H	Br	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P811	H	H	F	CN	CF ₃	H	Cl	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P812	H	H	F	CN	CF ₃	H	CF ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P813	H	H	F	CN	CF ₃	H	CH ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P814	H	H	F	CN	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P815	H	H	F	CN	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P816	H	H	F	CN	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P817	H	H	F	CN	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P818	H	H	F	CN	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P819	H	H	F	CN	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P820	H	H	F	CN	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P821	H	H	F	CN	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P822	H	H	F	CN	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃

[2013]

P823	H	H	F	CN	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P824	H	H	F	CN	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P825	H	H	F	CN	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P826	H	H	F	CN	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P827	H	H	F	CN	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P828	H	H	F	CN	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P829	H	H	F	CN	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P830	H	H	F	CN	CF ₃	H	Br	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P831	H	H	F	CN	CF ₃	H	Cl	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P832	H	H	F	CN	CF ₃	H	CF ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P833	H	H	F	CN	CF ₃	H	CH ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P834	H	H	F	CN	CF ₃	H	Br	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P835	H	H	F	CN	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P836	H	H	F	CN	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P837	H	H	F	CN	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P838	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P839	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P840	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P841	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P842	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P843	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P844	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃

[2014]

P845	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P846	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	Br	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P847	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	Cl	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P848	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	CF ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P849	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	CH ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P850	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P851	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P852	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P853	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P854	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P855	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P856	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P857	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P858	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P859	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P860	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P861	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃

[2015]

P862	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P863	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P864	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P865	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P866	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P867	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P868	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P869	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P870	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P871	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P872	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P873	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P874	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P875	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P876	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P877	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P878	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃

[2016]

P879	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P880	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P881	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P882	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	Br	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P883	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	Cl	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P884	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	CF ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P885	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	CH ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P886	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P887	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P888	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P889	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P890	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P891	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P892	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P893	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P894	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P895	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃

[2017]

P896	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P897	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P898	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P899	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P900	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P901	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P902	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	Br	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P903	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	Cl	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P904	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P905	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P906	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P907	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P908	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P909	H	Cl	OC F ₃	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P910	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P911	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P912	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P913	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P914	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃

[2018]

P915	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P916	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P917	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P918	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	Br	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P919	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	Cl	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P920	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	CF ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P921	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	CH ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P922	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P923	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P924	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P925	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P926	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P927	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P928	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P929	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P930	H	Cl	CN	Cl	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P931	H	Cl	CN	Cl	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P932	H	Cl	CN	Cl	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P933	H	Cl	CN	Cl	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P934	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P935	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P936	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P937	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P938	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P939	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P940	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P941	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃

[2019]

P942	H	Cl	CN	Cl	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P943	H	Cl	CN	Cl	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P944	H	Cl	CN	Cl	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P945	H	Cl	CN	Cl	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P946	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P947	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P948	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P949	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P950	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P951	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P952	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P953	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P954	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	Br	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P955	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	Cl	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P956	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	CF ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P957	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	CH ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P958	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P959	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P960	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P961	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P962	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P963	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P964	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P965	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P966	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P967	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P968	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃

[2020]

P969	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P970	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P971	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P972	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P973	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P974	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	Br	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P975	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	Cl	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P976	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P977	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P978	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P979	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P980	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P981	H	Cl	CN	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P982	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P983	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P984	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P985	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P986	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P987	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P988	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P989	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P990	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	Br	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P991	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	Cl	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P992	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P993	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P994	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P995	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂

[2021]

P996	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P997	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P998	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P999	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1000	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1001	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1002	H	CH ₃	H	Br	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1003	H	CH ₃	H	Br	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1004	H	CH ₃	H	Br	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1005	H	CH ₃	H	Br	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1006	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1007	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1008	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1009	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1010	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1011	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1012	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1013	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1014	H	CH ₃	H	Br	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1015	H	CH ₃	H	Br	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1016	H	CH ₃	H	Br	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1017	H	CH ₃	H	Br	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1018	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1019	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1020	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1021	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1022	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃

[2022]

P1023	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1024	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1025	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1026	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	Br	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1027	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	Cl	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1028	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1029	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1030	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1031	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1032	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1033	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1034	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1035	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1036	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1037	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1038	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1039	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1040	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1041	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1042	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1043	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1044	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1045	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1046	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	Br	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1047	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1048	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1049	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃

[2023]

P1050	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1051	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1052	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1053	H	CH ₃	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1054	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1055	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1056	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1057	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1058	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1059	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1060	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1061	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1062	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	Br	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1063	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	Cl	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1064	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	CF ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1065	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1066	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1067	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1068	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1069	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1070	H	H	F	CH ₃	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1071	H	H	F	CH ₃	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1072	H	H	F	CH ₃	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1073	H	H	F	CH ₃	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1074	H	H	F	CH ₃	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1075	H	H	F	CH ₃	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1076	H	H	F	CH ₃	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃

[2024]

P1077	H	H	F	CH ₃	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1078	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1079	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1080	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1081	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1082	H	H	F	CH ₃	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1083	H	H	F	CH ₃	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1084	H	H	F	CH ₃	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1085	H	H	F	CH ₃	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1086	H	H	F	CH ₃	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1087	H	H	F	CH ₃	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1088	H	H	F	CH ₃	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1089	H	H	F	CH ₃	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1090	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1091	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1092	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1093	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1094	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1095	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1096	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1097	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1098	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	Br	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1099	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	Cl	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1100	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	CF ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1101	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1102	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1103	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂

[2025]

P1104	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1105	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1106	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1107	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1108	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1109	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1110	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1111	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1112	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1113	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1114	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1115	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1116	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1117	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1118	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	Br	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1119	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	Cl	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1120	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1121	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1122	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	Br	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1123	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1124	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1125	H	H	F	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1126	H	H	F	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1127	H	H	F	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1128	H	H	F	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1129	H	H	F	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1130	H	H	F	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃

[2026]

P1131	H	H	F	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1132	H	H	F	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1133	H	H	F	Cl	CF ₃	H	Br	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1134	H	H	F	Cl	CF ₃	H	Cl	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1135	H	H	F	Cl	CF ₃	H	CF ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1136	H	H	F	Cl	CF ₃	H	CH ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1137	H	H	F	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1138	H	H	F	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1139	H	H	F	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1140	H	H	F	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1141	H	H	F	Cl	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1142	H	H	F	Cl	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1143	H	H	F	Cl	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1144	H	H	F	Cl	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1145	H	H	F	Cl	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1146	H	H	F	Cl	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1147	H	H	F	Cl	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1148	H	H	F	Cl	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1149	H	H	F	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1150	H	H	F	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1151	H	H	F	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1152	H	H	F	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1153	H	H	F	Cl	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1154	H	H	F	Cl	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1155	H	H	F	Cl	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1156	H	H	F	Cl	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1157	H	H	F	Cl	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃

[2027]

P1158	H	H	F	Cl	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1159	H	H	F	Cl	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1160	H	H	F	Cl	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1161	H	H	F	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1162	H	H	F	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1163	H	H	F	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1164	H	H	F	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1165	H	H	F	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1166	H	H	F	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1167	H	H	F	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1168	H	H	F	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1169	H	H	F	Cl	CF ₃	H	Br	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1170	H	H	F	Cl	CF ₃	H	Cl	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1171	H	H	F	Cl	CF ₃	H	CF ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1172	H	H	F	Cl	CF ₃	H	CH ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1173	H	H	F	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1174	H	H	F	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1175	H	H	F	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1176	H	H	F	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1177	H	H	F	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1178	H	H	F	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1179	H	H	F	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1180	H	H	F	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1181	H	H	F	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1182	H	H	F	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1183	H	H	F	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1184	H	H	F	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃

[2028]

P1185	H	H	F	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1186	H	H	F	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1187	H	H	F	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1188	H	H	F	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1189	H	H	F	Cl	CF ₃	H	Br	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1190	H	H	F	Cl	CF ₃	H	Cl	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1191	H	H	F	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1192	H	H	F	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1193	H	H	F	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1194	H	H	F	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1195	H	H	F	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1196	H	H	F	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1197	H	F	F	F	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1198	H	F	F	F	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1199	H	F	F	F	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1200	H	F	F	F	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1201	H	F	F	F	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1202	H	F	F	F	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1203	H	F	F	F	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1204	H	F	F	F	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1205	H	F	F	F	CF ₃	H	Br	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1206	H	F	F	F	CF ₃	H	Cl	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1207	H	F	F	F	CF ₃	H	CF ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1208	H	F	F	F	CF ₃	H	CH ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1209	H	F	F	F	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1210	H	F	F	F	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1211	H	F	F	F	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂

[2029]

P1212	H	F	F	F	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1213	H	F	F	F	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1214	H	F	F	F	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1215	H	F	F	F	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1216	H	F	F	F	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1217	H	F	F	F	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1218	H	F	F	F	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1219	H	F	F	F	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1220	H	F	F	F	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1221	H	F	F	F	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1222	H	F	F	F	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1223	H	F	F	F	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1224	H	F	F	F	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1225	H	F	F	F	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1226	H	F	F	F	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1227	H	F	F	F	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1228	H	F	F	F	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1229	H	F	F	F	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1230	H	F	F	F	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1231	H	F	F	F	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1232	H	F	F	F	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1233	H	F	F	F	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1234	H	F	F	F	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1235	H	F	F	F	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1236	H	F	F	F	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1237	H	F	F	F	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1238	H	F	F	F	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃

[2030]

P1239	H	F	F	F	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1240	H	F	F	F	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1241	H	F	F	F	CF ₃	H	Br	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1242	H	F	F	F	CF ₃	H	Cl	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1243	H	F	F	F	CF ₃	H	CF ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1244	H	F	F	F	CF ₃	H	CH ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1245	H	F	F	F	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1246	H	F	F	F	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1247	H	F	F	F	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1248	H	F	F	F	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1249	H	F	F	F	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1250	H	F	F	F	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1251	H	F	F	F	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1252	H	F	F	F	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1253	H	F	F	F	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1254	H	F	F	F	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1255	H	F	F	F	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1256	H	F	F	F	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1257	H	F	F	F	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1258	H	F	F	F	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1259	H	F	F	F	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1260	H	F	F	F	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1261	H	F	F	F	CF ₃	H	Br	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1262	H	F	F	F	CF ₃	H	Cl	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1263	H	F	F	F	CF ₃	H	CF ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1264	H	F	F	F	CF ₃	H	CH ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1265	H	F	F	F	CF ₃	H	Br	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃

[2031]

P1266	H	F	F	F	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1267	H	F	F	F	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1268	H	F	F	F	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1269	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1270	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1271	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1272	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1273	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1274	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1275	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1276	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1277	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	Br	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1278	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	Cl	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1279	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1280	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1281	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1282	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1283	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1284	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1285	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1286	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1287	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1288	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1289	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1290	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1291	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1292	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃

[2032]

P1293	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1294	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1295	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1296	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1297	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1298	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1299	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1300	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1301	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1302	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1303	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1304	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1305	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1306	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1307	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1308	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1309	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1310	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1311	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1312	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	Br	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1313	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	Cl	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1314	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1315	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1316	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1317	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1318	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1319	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂

[2033]

P1320	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1321	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1322	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1323	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1324	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1325	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1326	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1327	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1328	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1329	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1330	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1331	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1332	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1333	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1334	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1335	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1336	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1337	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1338	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1339	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1340	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1341	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1342	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1343	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1344	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1345	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1346	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃

[2034]

P1347	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1348	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	Br	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1349	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	Cl	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1350	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1351	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1352	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1353	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1354	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1355	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1356	H	F	H	CF ₃	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1357	H	F	H	CF ₃	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1358	H	F	H	CF ₃	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1359	H	F	H	CF ₃	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1360	H	F	H	CF ₃	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1361	H	F	H	CF ₃	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1362	H	F	H	CF ₃	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1363	H	F	H	CF ₃	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1364	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1365	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1366	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1367	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1368	H	F	H	CF ₃	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1369	H	F	H	CF ₃	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1370	H	F	H	CF ₃	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1371	H	F	H	CF ₃	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1372	H	F	H	CF ₃	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1373	H	F	H	CF ₃	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃

[2035]

P1374	H	F	H	CF ₃	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1375	H	F	H	CF ₃	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1376	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1377	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1378	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1379	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1380	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1381	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1382	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1383	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	Br	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1384	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	Cl	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1385	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1386	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1387	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1388	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1389	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1390	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1391	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1392	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1393	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1394	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1395	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1396	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1397	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1398	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1399	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1400	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃

[2036]

P1401	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1402	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1403	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1404	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1405	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1406	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1407	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1408	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1409	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1410	H	F	H	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1411	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1412	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1413	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1414	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1415	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1416	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1417	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1418	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1419	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	Br	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1420	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	Cl	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1421	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1422	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1423	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1424	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1425	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1426	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1427	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃

[2037]

P1428	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1429	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1430	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1431	H	Cl	H	CF ₃	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1432	H	Cl	H	CF ₃	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1433	H	Cl	H	CF ₃	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1434	H	Cl	H	CF ₃	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1435	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1436	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1437	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1438	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1439	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1440	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1441	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1442	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1443	H	Cl	H	CF ₃	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1444	H	Cl	H	CF ₃	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1445	H	Cl	H	CF ₃	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1446	H	Cl	H	CF ₃	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1447	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1448	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1449	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1450	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1451	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1452	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1453	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1454	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃

[2038]

P1455	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	Br	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1456	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	Cl	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1457	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1458	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1459	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1460	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1461	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1462	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1463	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1464	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1465	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1466	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1467	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1468	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1469	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1470	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1471	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1472	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1473	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1474	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1475	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1476	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1477	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1478	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1479	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1480	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1481	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃

[2039]

P1482	H	Cl	H	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1483	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1484	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1485	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1486	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1487	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1488	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1489	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1490	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1491	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	Br	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1492	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	Cl	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1493	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1494	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1495	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1496	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1497	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1498	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1499	H	H	F	CF ₃	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1500	H	H	F	CF ₃	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1501	H	H	F	CF ₃	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1502	H	H	F	CF ₃	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1503	H	H	F	CF ₃	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1504	H	H	F	CF ₃	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1505	H	H	F	CF ₃	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1506	H	H	F	CF ₃	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1507	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1508	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃

[2040]

P1509	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1510	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1511	H	H	F	CF ₃	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1512	H	H	F	CF ₃	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1513	H	H	F	CF ₃	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1514	H	H	F	CF ₃	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1515	H	H	F	CF ₃	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1516	H	H	F	CF ₃	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1517	H	H	F	CF ₃	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1518	H	H	F	CF ₃	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1519	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1520	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1521	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1522	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1523	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1524	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1525	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1526	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1527	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	Br	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1528	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	Cl	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1529	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1530	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1531	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1532	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1533	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1534	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1535	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃

[2041]

P1536	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1537	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1538	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1539	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1540	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1541	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1542	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1543	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1544	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1545	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1546	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1547	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1548	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1549	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1550	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1551	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	Br	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1552	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1553	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1554	H	H	F	CF ₃	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1555	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	H	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1556	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1557	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	H	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1558	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1559	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1560	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1561	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	H	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1562	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	Cl	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃

[2042]

P1563	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	CF ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1564	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	CH ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1565	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	H	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1566	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1567	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1568	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	H	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₂ F
P1569	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₂ F
P1570	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₂ F
P1571	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₂ F
P1572	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₂ F
P1573	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	H	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₃
P1574	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₃
P1575	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₃
P1576	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₃
P1577	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₃
P1578	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	CF ₃	H	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1579	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1580	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1581	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1582	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1583	H	Cl	Cl	Cl	CF ₂ CF ₃	H	H	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1584	H	Cl	Cl	Cl	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1585	H	Cl	Cl	Cl	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1586	H	Cl	Cl	Cl	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1587	H	Cl	Cl	Cl	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1588	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	H	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1589	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃

[2043]

P1590	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1591	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1592	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1593	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	CF ₃	H	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1594	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1595	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1596	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1597	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1598	H	Cl	Cl	Cl	CF ₂ CF ₃	H	H	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1599	H	Cl	Cl	Cl	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1600	H	Cl	Cl	Cl	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1601	H	Cl	Cl	Cl	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1602	H	Cl	Cl	Cl	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1603	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	H	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1604	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	H	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1605	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	H	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1606	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	Br	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1607	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	Cl	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1608	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	CF ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1609	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	CH ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1610	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	H	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1611	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1612	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1613	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1614	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1615	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	H	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ F
P1616	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ F

[2044]

P1617	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ F
P1618	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ F
P1619	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ F
P1620	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	H	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₃
P1621	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₃
P1622	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₃
P1623	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₃
P1624	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₃
P1625	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	H	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1626	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1627	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1628	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1629	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1630	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	H	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1631	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1632	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1633	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1634	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1635	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	H	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1636	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	H	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1637	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	H	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1638	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1639	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1640	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1641	H	Cl	Cl	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1642	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	H	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1643	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃

[2045]

P1644	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1645	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	H	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1646	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1647	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1648	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1649	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1650	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	H	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1651	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Br	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1652	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Cl	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1653	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CF ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1654	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CH ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1655	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	H	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1656	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1657	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1658	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1659	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1660	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	H	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₂ F
P1661	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₂ F
P1662	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₂ F
P1663	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₂ F
P1664	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₂ F
P1665	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	H	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₃
P1666	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₃
P1667	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₃
P1668	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₃
P1669	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₃
P1670	H	Cl	H	Cl	CF ₃	CF ₃	H	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃

[2046]

P1671	H	Cl	H	Cl	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1672	H	Cl	H	Cl	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1673	H	Cl	H	Cl	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1674	H	Cl	H	Cl	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1675	H	Cl	H	Cl	CF ₂ CF ₃	H	H	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1676	H	Cl	H	Cl	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1677	H	Cl	H	Cl	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1678	H	Cl	H	Cl	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1679	H	Cl	H	Cl	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1680	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	H	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1681	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1682	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1683	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1684	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1685	H	Cl	H	Cl	CF ₃	CF ₃	H	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1686	H	Cl	H	Cl	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1687	H	Cl	H	Cl	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1688	H	Cl	H	Cl	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1689	H	Cl	H	Cl	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1690	H	Cl	H	Cl	CF ₂ CF ₃	H	H	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1691	H	Cl	H	Cl	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1692	H	Cl	H	Cl	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1693	H	Cl	H	Cl	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1694	H	Cl	H	Cl	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1695	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	H	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1696	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1697	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃

[2047]

P1698	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1699	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1700	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	H	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1701	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1702	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1703	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1704	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1705	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	H	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1706	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Br	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1707	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Cl	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1708	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CF ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1709	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CH ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1710	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	H	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1711	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1712	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1713	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1714	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1715	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	H	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ F
P1716	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ F
P1717	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ F
P1718	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ F
P1719	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ F
P1720	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	H	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₃
P1721	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₃
P1722	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₃
P1723	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₃
P1724	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₃

[2048]

P1725	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	H	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1726	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1727	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1728	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1729	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1730	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	H	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1731	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1732	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1733	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1734	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1735	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	H	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1736	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1737	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1738	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1739	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1740	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	H	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1741	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Br	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1742	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Cl	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1743	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1744	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1745	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	H	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1746	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1747	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1748	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1749	H	Cl	H	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1750	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	H	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1751	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃

[2049]

P1752	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1753	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1754	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1755	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	H	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1756	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1757	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1758	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1759	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1760	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	H	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1761	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	Br	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1762	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	Cl	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1763	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	CF ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1764	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	CH ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1765	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	H	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1766	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1767	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1768	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1769	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1770	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	H	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₂ F
P1771	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₂ F
P1772	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₂ F
P1773	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₂ F
P1774	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₂ F
P1775	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	H	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₃
P1776	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₃
P1777	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₃
P1778	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₃

[2050]

P1779	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₃
P1780	H	H	Cl	Cl	CF ₃	CF ₃	H	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1781	H	H	Cl	Cl	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1782	H	H	Cl	Cl	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1783	H	H	Cl	Cl	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1784	H	H	Cl	Cl	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1785	H	H	Cl	Cl	CF ₂ CF ₃	H	H	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1786	H	H	Cl	Cl	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1787	H	H	Cl	Cl	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1788	H	H	Cl	Cl	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1789	H	H	Cl	Cl	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1790	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	H	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1791	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1792	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1793	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1794	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1795	H	H	Cl	Cl	CF ₃	CF ₃	H	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1796	H	H	Cl	Cl	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1797	H	H	Cl	Cl	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1798	H	H	Cl	Cl	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1799	H	H	Cl	Cl	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1800	H	H	Cl	Cl	CF ₂ CF ₃	H	H	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1801	H	H	Cl	Cl	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1802	H	H	Cl	Cl	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1803	H	H	Cl	Cl	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1804	H	H	Cl	Cl	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1805	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	H	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃

[2051]

P1806	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1807	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1808	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1809	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1810	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	H	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1811	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1812	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1813	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1814	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1815	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	H	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1816	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	Br	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1817	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	Cl	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1818	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	CF ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1819	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	CH ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1820	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	H	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1821	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1822	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1823	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1824	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1825	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	H	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ F
P1826	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ F
P1827	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ F
P1828	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ F
P1829	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ F
P1830	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	H	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₃
P1831	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₃
P1832	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₃

[2052]

P1833	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₃
P1834	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₃
P1835	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	H	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1836	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1837	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1838	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1839	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1840	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	H	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1841	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1842	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1843	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1844	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1845	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	H	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1846	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1847	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1848	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1849	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1850	v	H	Cl	Cl	CF ₃	H	H	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1851	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	Br	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1852	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	Cl	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1853	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1854	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1855	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	H	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1856	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1857	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1858	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1859	H	H	Cl	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃

[2053]

P1860	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	H	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1861	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1862	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1863	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	H	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1864	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1865	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1866	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1867	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1868	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	H	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1869	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	Br	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1870	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	Cl	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1871	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	CF ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1872	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	CH ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1873	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	H	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1874	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1875	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1876	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1877	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1878	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	H	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₂ F
P1879	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₂ F
P1880	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₂ F
P1881	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₂ F
P1882	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₂ F
P1883	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	H	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₃
P1884	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₃
P1885	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₃
P1886	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₃

[2054]

P1887	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₃
P1888	H	Cl	F	Cl	CF ₃	CF ₃	H	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1889	H	Cl	F	Cl	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1890	H	Cl	F	Cl	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1891	H	Cl	F	Cl	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1892	H	Cl	F	Cl	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1893	H	Cl	F	Cl	CF ₂ CF ₃	H	H	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1894	H	Cl	F	Cl	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1895	H	Cl	F	Cl	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1896	H	Cl	F	Cl	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1897	H	Cl	F	Cl	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1898	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	H	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1899	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1900	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1901	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1902	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1903	H	Cl	F	Cl	CF ₃	CF ₃	H	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1904	H	Cl	F	Cl	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1905	H	Cl	F	Cl	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1906	H	Cl	F	Cl	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1907	H	Cl	F	Cl	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1908	H	Cl	F	Cl	CF ₂ CF ₃	H	H	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1909	H	Cl	F	Cl	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1910	H	Cl	F	Cl	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1911	H	Cl	F	Cl	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1912	H	Cl	F	Cl	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1913	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	H	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃

[2055]

P1914	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1915	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1916	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1917	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1918	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	H	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1919	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1920	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1921	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1922	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P1923	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	H	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1924	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	Br	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1925	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	Cl	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1926	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	CF ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1927	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	CH ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1928	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	H	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1929	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1930	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1931	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1932	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P1933	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	H	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ F
P1934	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ F
P1935	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ F
P1936	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ F
P1937	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ F
P1938	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	H	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₃
P1939	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₃
P1940	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₃

[2056]

P1941	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₃
P1942	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₃
P1943	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	H	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1944	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1945	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1946	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1947	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P1948	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	H	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1949	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1950	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1951	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1952	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P1953	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	H	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1954	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1955	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1956	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1957	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P1958	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	H	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1959	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	Br	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1960	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	Cl	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1961	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1962	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1963	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	H	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1964	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	Br	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1965	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1966	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1967	H	Cl	F	Cl	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃

[2057]

P1968	H	Br	H	Br	CF ₃	H	H	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1969	H	Br	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1970	H	Br	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1971	H	Br	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1972	H	Br	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1973	H	Br	H	Br	CF ₃	H	H	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1974	H	Br	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1975	H	Br	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1976	H	Br	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1977	H	Br	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	S	CH ₂ CF ₃
P1978	H	Br	H	Br	CF ₃	H	H	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1979	H	Br	H	Br	CF ₃	H	Br	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1980	H	Br	H	Br	CF ₃	H	Cl	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1981	H	Br	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1982	H	Br	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	S	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1983	H	Br	H	Br	CF ₃	H	H	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1984	H	Br	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1985	H	Br	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1986	H	Br	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1987	H	Br	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CHF ₂
P1988	H	Br	H	Br	CF ₃	H	H	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₂ F
P1989	H	Br	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₂ F
P1990	H	Br	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₂ F
P1991	H	Br	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₂ F
P1992	H	Br	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₂ F
P1993	H	Br	H	Br	CF ₃	H	H	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₃
P1994	H	Br	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₃

[2058]

P1995	H	Br	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₃
P1996	H	Br	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₃
P1997	H	Br	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CH ₃
P1998	H	Br	H	Br	CF ₃	CF ₃	H	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P1999	H	Br	H	Br	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P2000	H	Br	H	Br	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P2001	H	Br	H	Br	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P2002	H	Br	H	Br	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P2003	H	Br	H	Br	CF ₂ CF ₃	H	H	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P2004	H	Br	H	Br	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P2005	H	Br	H	Br	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P2006	H	Br	H	Br	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P2007	H	Br	H	Br	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P2008	H	Br	H	Br	CF ₃	H	H	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P2009	H	Br	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P2010	H	Br	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P2011	H	Br	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P2012	H	Br	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂	O	CH(CH ₃)CF ₃
P2013	H	Br	H	Br	CF ₃	CF ₃	H	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P2014	H	Br	H	Br	CF ₃	CF ₃	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P2015	H	Br	H	Br	CF ₃	CF ₃	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P2016	H	Br	H	Br	CF ₃	CF ₃	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P2017	H	Br	H	Br	CF ₃	CF ₃	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P2018	H	Br	H	Br	CF ₂ CF ₃	H	H	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P2019	H	Br	H	Br	CF ₂ CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P2020	H	Br	H	Br	CF ₂ CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P2021	H	Br	H	Br	CF ₂ CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃

[2059]

P2022	H	Br	H	Br	CF ₂ CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P2023	H	Br	H	Br	CF ₃	H	H	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P2024	H	Br	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P2025	H	Br	H	Br	CF ₃	H	H	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P2026	H	Br	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P2027	H	Br	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P2028	H	Br	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P2029	H	Br	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	S	CH ₂ CF ₃
P2030	H	Br	H	Br	CF ₃	H	H	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P2031	H	Br	H	Br	CF ₃	H	Br	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P2032	H	Br	H	Br	CF ₃	H	Cl	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P2033	H	Br	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P2034	H	Br	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	S	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P2035	H	Br	H	Br	CF ₃	H	H	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P2036	H	Br	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P2037	H	Br	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P2038	H	Br	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P2039	H	Br	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CHF ₂
P2040	H	Br	H	Br	CF ₃	H	H	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ F
P2041	H	Br	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ F
P2042	H	Br	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ F
P2043	H	Br	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ F
P2044	H	Br	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ F
P2045	H	Br	H	Br	CF ₃	H	H	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₃
P2046	H	Br	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₃
P2047	H	Br	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₃
P2048	H	Br	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₃

[2060]

P2049	H	Br	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₃
P2050	H	Br	H	Br	CF ₃	H	H	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P2051	H	Br	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P2052	H	Br	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P2053	H	Br	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P2054	H	Br	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH(CH ₃)CF ₃
P2055	H	Br	H	Br	CF ₃	H	H	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P2056	H	Br	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P2057	H	Br	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P2058	H	Br	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P2059	H	Br	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₃)	O	CH ₂ CH ₂ CF ₃
P2060	H	Br	H	Br	CF ₃	H	H	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P2061	H	Br	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P2062	H	Br	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P2063	H	Br	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P2064	H	Br	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH(CH ₂ CH ₃)	O	CH ₂ CF ₃
P2065	H	Br	H	Br	CF ₃	H	H	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P2066	H	Br	H	Br	CF ₃	H	Br	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P2067	H	Br	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P2068	H	Br	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P2069	H	Br	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	C(CH ₃) ₂	O	CH ₂ CF ₃
P2070	H	Br	H	Br	CF ₃	H	H	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P2071	H	Br	H	Br	CF ₃	H	Br	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P2072	H	Br	H	Br	CF ₃	H	Cl	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P2073	H	Br	H	Br	CF ₃	H	CF ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃
P2074	H	Br	H	Br	CF ₃	H	CH ₃	O	CH ₂ CH ₂	O	CH ₂ CF ₃

[2061]

[2062]

[2063]

실시에 A: 비트 거염벌레 ("BAW") 및 옥수수 이삭벌레 ("CEW") 및 캐비지 루퍼 ("CL")에 대한 생물검정

BAW의 개체수를 낮추는데 효과적인 기생충, 질병 또는 포식자는 거의 없다. BAW는 많은 잡초, 나무, 잔디, 콩과식물 및 농작물에 침입한다. 다양한 장소에서, 다른 식물 중에서도, 아스파라거스, 목화, 옥수수, 대두, 담배, 알팔파, 사탕무, 페퍼, 토마토, 감자, 양파, 완두콩, 해바라기 및 감귤류가 경제적 관심사이다. CEW는 옥수수 및 토마토를 공격하는 것으로 공지되어 있지만, 다른 식물 중에서도, 이는 또한 아티초크, 아스파라거스, 양배추, 칸탈루프, 콜라드, 동부, 오이, 가지, 상추, 리마콩, 멜론, 오크라, 완두콩, 페퍼, 감자, 호박, 강낭콩, 시금치, 애호박, 고구마 및 수박을 공격한다. CEW는 또한 특정 살곤충제에 저항성이 있는 것으로 공지되어 있다. CL은 또한 특정 살곤충제에 저항성이 있는 것으로 공지되어 있다. 결과적으로, 상기한 요인 때문에 이들 해충의 방제는 중요하다. 또한, 이들 해충을 방제하는 분자는 다른 해충을 방제하는데 유용하다.

[2064]

본원에 개시된 특정 분자를 하기 실시예에 기재된 절차를 사용하여 BAW, CEW 및 CL에 대해 시험하였다. 결과의 보고에서, "BAW & CEW & CL 등급 표"를 사용하였다 (표 섹션 참조).

[2065]

BAW (스포도프테라 엑시구아(*Spodoptera exigua*))에 대한 생물검정

[2066]

128-웰 먹이 트레이 검정을 이용하여 BAW에 대한 생물검정을 수행하였다. 시험 화합물 50 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ (90:10 아세

톤-물 혼합물 50 μL 중에 용해됨)를 (8개의 웰 각각에) 적용한 후 건조시킨, 인공 먹이 1 mL로 미리 채워진 먹이 트레이의 각각의 웰 (3 mL)에 1 내지 5마리의 제2령 BAW 유충을 배치하였다. 트레이를 투명한 자기 접착성 커버로 덮고, 5 내지 7일 동안 14:10의 명-암으로 25°C에서 유지하였다. 퍼센트 사충률을 각각의 웰 내의 유충에 대해 기록하였고; 이어서 8개 웰의 활성을 평균내었다. 결과를 "표 3: 검정 결과 부분 1" 및 "표 4: 검정 결과 부분 2"라는 제목으로 표에 나타냈다 (표 섹션 참조).

[2067] CEW (헬리코베르파 제아(*Helicoverpa zea*))에 대한 생물검정

[2068] 128-웰 먹이 트레이 검정을 이용하여 CEW에 대한 생물검정을 수행하였다. 시험 화합물 50 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ (90:10 아세톤-물 혼합물 50 μL 중에 용해됨)를 (8개의 웰 각각에) 적용한 후 건조시킨, 인공 먹이 1 mL로 미리 채워진 먹이 트레이의 각각의 웰 (3 mL)에 1 내지 5마리의 제2령 CEW 유충을 배치하였다. 트레이를 투명한 자기 접착성 커버로 덮고, 5 내지 7일 동안 14:10의 명-암으로 25°C에서 유지하였다. 퍼센트 사충률을 각각의 웰 내의 유충에 대해 기록하였고; 이어서 8개 웰의 활성을 평균내었다. 결과를 "표 3: 검정 결과 부분 1"이라는 제목으로 표에 나타냈다 (표 섹션 참조).

[2069] CL (트리코플루시아 니(*Trichoplusia ni*))에 대한 생물검정

[2070] 128-웰 먹이 트레이 검정을 이용하여 CL에 대한 생물검정을 수행하였다. 시험 화합물 50 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ (90:10 아세톤-물 혼합물 50 μL 중에 용해됨)를 (8개의 웰 각각에) 적용한 후 건조시킨, 인공 먹이 1 mL로 미리 채워진 먹이 트레이의 각각의 웰 (3 mL)에 1 내지 5마리의 제2령 CL 유충을 위치시켰다. 트레이를 투명한 자기 접착성 커버로 덮고, 5 내지 7일 동안 14:10의 명-암으로 25°C에서 유지하였다. 퍼센트 사충률을 각각의 웰 내의 유충에 대해 기록하였고; 이어서 8개 웰의 활성을 평균내었다. 결과는 "표 4: 검정 결과 부분 2"라는 제목으로 표에 나타냈다 (표 섹션 참조).

[2071] 실시예 B: 복숭아혹 진딧물 ("GPA") (미주스 페르시카에(*Myzus persicae*))에 대한 생물검정

[2072] GPA는 감소된 성장, 잎의 시들 및 다양한 조직의 사멸을 유발하는 복숭아 나무의 가장 중요한 진딧물 해충이다. 또한, 이는 식물 바이러스, 예컨대 가지/감자 솔라나세아에(*Solanaceae*) 과의 구성원에 대한 감자 바이러스 Y 및 감자 잎마름병 바이러스, 및 많은 다른 식량 작물에 대한 다양한 모자이크 바이러스의 수송을 위한 벡터로서 작용하기 때문에 유해하다. GPA는 다른 식물 중에서도, 브로콜리, 우엉, 양배추, 당근, 콜리플라워, 무, 가지, 껌질 콩, 상추, 마카다미아, 파파야, 페퍼, 고구마, 토마토, 워터크레스 및 주키니와 같은 식물을 공격한다. GPA는 또한 많은 관상 작물, 예컨대 카네이션, 국화, 꽃 흰양배추, 포인세티아 및 장미를 공격한다. GPA는 많은 살충제에 대한 저항성이 발생되어 왔다.

[2073] 본원에 개시된 특정 분자를 하기 실시예에 기재된 절차를 사용하여 GPA에 대해 시험하였다. 결과의 보고에서, "GPA 등급 표"를 사용하였다 (표 섹션 참조).

[2074] 2 내지 3개의 작은 (3 내지 5 cm) 본엽을 갖는, 3 인치 화분에서 성장시킨 양배추 묘목을 시험 기재로서 사용하였다. 묘목에 화학 적용 하루 전에 20-50 마리의 GPA (날개 없는 성체기 및 약충기)를 침입시켰다. 각 처리에 대해 개별 묘목을 갖는 4개의 화분을 사용하였다. 시험 화합물 (2 mg)을 2 mL의 아세톤/MeOH (1:1) 용매에 용해시켜, 1000 ppm 시험 화합물의 원액을 형성시켰다. 원액을 물 중 0.025% 트윈(Tween) 20으로 5배 희석하여 200 ppm 시험 화합물 용액을 수득하였다. 휴대용 흡인기-유형 분무기를 사용하여 용액이 양배추 잎의 양면으로 흘러넘칠 때까지 분무하였다. 참조 식물 (용매 대조용)에는 단지 20 부피%의 아세톤/MeOH (1:1) 용매를 함유하는 희석제를 분무하였다. 등급을 매기기 전에, 처리된 식물을 대략 25°C 및 주위 상대 습도 (RH)에서 3일 동안 보존실에서 유지하였다. 현미경으로 식물당 생존 진딧물 수를 계수하여 평가를 수행하였다. 하기와 같은 애보트(Abbott) 보정식 (W.S. Abbott, "A Method of Computing the Effectiveness of an Insecticide" J. Econ. Entomol. 18 (1925), pp.265-267)을 사용하여 퍼센트 방제율을 측정하였다.

[2075] 보정된 % 방제율 = $100 * (X - Y) / X$

[2076] 상기 식에서,

[2077] X = 용매 대조용 식물 상의 생존 진딧물 수

[2078] Y = 처리된 식물 상의 생존 진딧물 수

[2079] 결과는 "표 3: 검정 결과 부분 1" 및 "표 4: 검정 결과 부분 2"라는 제목으로 표에 나타냈다 (표 섹션 참조).

- [2080] **살충용으로 허용되는 산부가염, 염 유도체, 용매화물, 에스테르 유도체, 다형체, 동위원소 및 방사성핵종**
- [2081] 화학식 1의 분자는 살충용으로 허용되는 산 부가염으로 제제화될 수 있다. 비제한적 예로, 아민 관능기는 염산, 브로민화수소산, 황산, 인산, 아세트산, 벤조산, 시트르산, 말론산, 살리실산, 말산, 푸마르산, 옥살산, 숙신산, 타르타르산, 락트산, 글루콘산, 아스코르브산, 말레산, 아스파르트산, 벤젠술폰산, 메탄술폰산, 에탄술폰산, 히드록시메탄술폰산 및 히드록시에탄술폰산과 염을 형성할 수 있다. 추가로, 비제한적 예로, 산 관능기는 알칼리 금속 또는 알칼리 토금속으로부터 유래된 것들 및 암모니아 및 아민으로부터 유래된 것들을 포함하는 염을 형성할 수 있다. 바람직한 양이온의 예로는 나트륨, 칼륨 및 마그네슘이 포함된다.
- [2082] 화학식 1의 분자는 염 유도체로 제제화될 수 있다. 비제한적 예로, 염 유도체는 유리 염기를 염이 생성되기에 충분한 양의 목적하는 산과 접촉시킴으로써 제조될 수 있다. 유리 염기는 염을 적합한 묶은 염기 수용액, 예컨대 묶은 수성 NaOH, 탄산칼륨, 암모니아 및 중탄산나트륨으로 처리함으로써 재생될 수 있다. 한 예로서, 많은 경우에, 살충제, 예컨대 2,4-D는 그를 그의 디메틸아민 염으로 전환시킴으로써 보다 수용성으로 만든다.
- [2083] 화학식 1의 분자는 비-작물화 용매의 제거 후에 작물이 무손상으로 남아 있도록, 용매와의 적합한 작물로 제제화될 수 있다. 이들 작물은 종종 "용매화물"로서 지칭된다. 그러나, 이는 용매로서 물과 안정한 수화물을 형성하는 것이 특히 바람직하다.
- [2084] 화학식 1의 분자는 에스테르 유도체로 제조될 수 있다. 이어서, 이들 에스테르 유도체를 본원에 개시된 발명이 적용되는 것과 동일한 방식으로 적용할 수 있다.
- [2085] 화학식 1의 분자는 다양한 결정 다형체로서 제조될 수 있다. 다형성은 동일한 분자의 상이한 결정 다형체 또는 구조가 막대하게 상이한 물리적 특성 및 생물학적 성능을 가질 수 있기 때문에 농약의 개발에 중요하다.
- [2086] 화학식 1의 분자는 상이한 동위 원소를 사용하여 제조될 수 있다. ^1H 대신에 ^2H (중수소로도 공지됨)를 갖는 분자가 특히 중요하다.
- [2087] 화학식 1의 분자는 상이한 방사성핵종을 사용하여 제조될 수 있다. ^{14}C 를 갖는 분자가 특히 중요하다.
- [2088] **입체이성질체**
- [2089] 화학식 1의 분자는 하나 이상의 입체이성질체로 존재할 수 있다. 따라서, 특정 분자는 라세미 혼합물로서 제조될 수 있다. 당업자는 한 입체이성질체가 다른 입체이성질체보다 더 활성일 수 있음을 인식할 것이다. 개별 입체이성질체는 공지된 선택적 합성 절차에 의해, 분해된 출발 물질을 사용하는 통상적인 합성 절차에 의해, 또는 통상적인 분해 절차에 의해 수득될 수 있다. 본원에 개시된 특정 분자는 2개 이상의 이성질체로서 존재할 수 있다. 다양한 이성질체는 기하 이성질체, 부분입체이성질체 및 거울상이성질체를 포함한다. 따라서, 본원에 개시된 분자는 기하 이성질체, 라세미 혼합물, 개별 입체이성질체, 및 광학 활성 혼합물을 포함한다. 당업자는 한 이성질체가 다른 것보다 더 활성일 수 있음을 인식할 것이다. 본 개시내용에 개시된 구조는 명료성을 위해 단지 하나의 기하 형태로 도시되었지만, 분자의 모든 기하 형태를 나타내는 것으로 의도된다.
- [2090] **조합**
- [2091] 화학식 1의 분자는 또한 살진드기, 살조, 살금, 살박테리아, 살진균, 제초, 살곤충, 살연체동물, 살선충, 살서, 또는 살바이러스 특성을 갖는 하나 이상의 화합물과 조합되어 (예컨대, 조성 혼합물, 또는 동시 또는 순차 적용으로) 사용될 수 있다. 추가로, 화학식 1의 분자는 또한 항섭식제, 조류 기피제, 화학불입제, 제초제 완화제, 곤충 유인제, 곤충 기피제, 포유동물 기피제, 교미 교란제, 식물 활성화제, 식물 성장 조절제, 또는 상승작용제인 화합물과 조합되어 (예컨대, 조성 혼합물, 또는 동시 또는 연속 적용으로) 사용될 수 있다. 화학식 1의 분자와 함께 사용될 수 있는 상기 군의 화합물의 예는 (3-에톡시프로필)수은 브로마이드, 1,2-디클로로프로판, 1,3-디클로로프로판, 1-메틸시클로프로판, 1-나프톨, 2-(옥틸티오)에탄올, 2,3,5-트리아이오도벤조산, 2,3,6-TBA, 2,3,6-TBA-디메틸암모늄, 2,3,6-TBA-리튬, 2,3,6-TBA-포타슘, 2,3,6-TBA-소듐, 2,4,5-T, 2,4,5-T-2-부톡시프로필, 2,4,5-T-2-에틸헥실, 2,4,5-T-3-부톡시프로필, 2,4,5-TB, 2,4,5-T-부토메틸, 2,4,5-T-부틸, 2,4,5-T-부틸, 2,4,5-T-이소부틸, 2,4,5-T-이소틸, 2,4,5-T-이소프로필, 2,4,5-T-메틸, 2,4,5-T-펜틸, 2,4,5-T-소듐, 2,4,5-T-트리에틸암모늄, 2,4,5-T-트리아민, 2,4-D, 2,4-D-2-부톡시프로필, 2,4-D-2-에틸헥실, 2,4-D-3-부톡시프로필, 2,4-D-암모늄, 2,4-DB, 2,4-DB-부틸, 2,4-DB-디메틸암모늄, 2,4-DB-이소틸, 2,4-DB-포타슘, 2,4-DB-소듐, 2,4-D-부토틸, 2,4-D-부틸, 2,4-D-디에틸암모늄, 2,4-D-디메틸암모늄, 2,4-D-디올아민, 2,4-D-도데실암모늄, 2,4-DEB, 2,4-DEP, 2,4-D-에틸, 2,4-D-헵틸암모늄, 2,4-D-이소부틸, 2,4-D-이소틸, 2,4-D-이소프

로필, 2,4-D-이소프로필암모늄, 2,4-D-리튬, 2,4-D-펜틸, 2,4-D-메틸, 2,4-D-옥틸, 2,4-D-펜틸, 2,4-D-포타슘, 2,4-D-프로필, 2,4-D-소듐, 2,4-D-테푸릴, 2,4-D-테트라데실암모늄, 2,4-D-트리에틸암모늄, 2,4-D-트리스(2-히드록시프로필)암모늄, 2,4-D-트콜아민, 2iP, 2-메톡시에틸수은 클로라이드, 2-페닐페놀, 3,4-DA, 3,4-DB, 3,4-DP, 4-아미노피리딘, 4-CPA, 4-CPA-포타슘, 4-CPA-소듐, 4-CPB, 4-CPP, 4-히드록시페네틸 알콜, 8-히드록시퀴놀린 술페이트, 8-페닐머큐리옥시퀴놀린, 아바멕틴, 아브시스산, ACC, 아세페이트, 아세퀴노실, 아세타미프리트, 아세티온, 아세토클로르, 아세토포스, 아세토포를, 아시벤졸라르, 아시벤졸라르-S-메틸, 아시플루오르펜, 아시플루오르펜-메틸, 아시플루오르펜-소듐, 아클로니펜, 아크렙, 아크리나트린, 아크롤레인, 아크릴로니트릴, 아시페탁스, 아시페탁스-구리, 아시페탁스-아연, 알라클로르, 알라니카르브, 알벤다졸, 알디카르브, 알디모르프, 알독시카르브, 알드린, 알레트린, 알리신, 알리도클로르, 알로사미딘, 알록시딤, 알록시딤-소듐, 알릴 알콜, 알리시카르브, 알로락, 알파-시페르메트린, 알파-엔도술판, 아메톡트라딘, 아메트리디온, 아메트린, 아미부진, 아미카르바존, 아미카르티아졸, 아미디티온, 아미도플루메트, 아미도술푸론, 아미노카르브, 아미노시클로피라클로르, 아미노시클로피라클로르-메틸, 아미노시클로피라클로르-포타슘, 아미노피랄리드, 아미노피랄리드-포타슘, 아미노피랄리드-트리스(2-히드록시프로필)암모늄, 아미프로포스-메틸, 아미프로포스, 아미술브롬, 아미톤, 아미톤 옥살레이트, 아미트라즈, 아미트룰, 암모늄 술페이트, 암모늄 α-나프탈렌아세테이트, 아모밤, 암프로필포스, 아나바진, 안시미돌, 아닐라진, 아닐로포스, 아니수론, 안트라퀴논, 안투, 아플레이트, 아라마이트, 아비소산 옥시드, 아소메이트, 아스피린, 아술람, 아술람-포타슘, 아술람-소듐, 아티다티온, 아트라톤, 아트라진, 아우레오핀진, 아비글리신, 아비글리신 히드로클로라이드, 아자코나졸, 아자디라크틴, 아자페니딘, 아자메티포스, 아짐술푸론, 아진포스-에틸, 아진포스-메틸, 아지프로트린, 아지티람, 아조벤젠, 아조시클로틴, 아조토에이트, 아족시스트로빈, 바크메데쉬, 바르반, 바륨 헥사플루오로실리케이트, 바륨 폴리술퍼드, 바르트린, BCPC, 베플루부타미드, 베날락실, 베날락실-M, 베나졸린, 베나졸린-디메틸암모늄, 베나졸린-에틸, 베나졸린-포타슘, 벤카르바존, 벤클로티아즈, 벤디오카르브, 벤틀루랄린, 벤틀루카르브, 벤틀레세이트, 베노다닐, 베노밀, 베녹사코르, 베녹사포스, 벤틀록스, 벤틀푸론, 벤틀푸론-메틸, 벤틀리드, 벤틀담, 벤틀루론, 벤틀존, 벤틀존-소듐, 벤틀아발리카르브, 벤틀아발리카르브-이소프로필, 벤틀아졸, 벤틀라닐, 벤자독스, 벤자독스-암모늄, 벤즈알코늄 클로라이드, 벤자마크릴, 벤자마크릴-이소부틸, 벤자모르프, 벤즈펜디존, 벤지프람, 벤조비시클론, 벤조페남, 벤조플루오르, 벤조히드록삼산, 벤조시메이트, 벤조일프로프, 벤조일프로프-에틸, 벤즈티아주론, 벤질 벤조에이트, 벤질아데닌, 베르베린, 베르베린 클로라이드, 베타-시플루트린, 베타-시페르메트린, 베타사진, 비시클로피론, 비페나제이트, 비페록스, 비펜트린, 비푸준치(bifujunzhi), 빌라나포스, 빌라나포스-소듐, 비나파크릴, 빙링시아오(bingqingxiao), 비오알레트린, 비오에타노메트린, 비오페르메트린, 비오레스메트린, 비페닐, 비스아지르, 비스메르티아졸, 비스피리박, 비스피리박-소듐, 비스트리플루론, 비테르타놀, 비티오놀, 빅사펜, 블라스티시딘-S, 보락스, 보르도(Bordeaux) 혼합물, 봉산, 보스칼리드, 브라시놀리드, 브라시놀리드-에틸, 브레비코민, 브로디파콴, 브로펜발레레이트, 브로플루트레네이트, 브로마실, 브로마실-리튬, 브로마실-소듐, 브로마디올론, 브로메탈린, 브로메트린, 브롬펜빈포스, 브로모아세트아미드, 브로모보닐, 브로모부티드, 브로모시클렌, 브로모-DDT, 브로모페록심, 브로모포스, 브로모포스-에틸, 브로모프로필레이트, 브로모탈로닐, 브로목시닐, 브로목시닐 부티레이트, 브로목시닐 헵타노에이트, 브로목시닐 옥타노에이트, 브로목시닐-포타슘, 브롬피라존, 브로무코나졸, 브로노폴, 부카르폴레이트, 부펜카르브, 부미나포스, 부피리메이트, 부프로페진, 버건디(Burgundy) 혼합물, 부술판, 부타카르브, 부타클로르, 부타페나실, 부타미포스, 부타티오포스, 부테나클로르, 부테트린, 부티다졸, 부티오베이트, 부티우론, 부토카르복심, 부토네이트, 부토피로록실, 부톡시카르복심, 부트랄린, 부트록시딤, 부투론, 부틸아민, 부틸레이트, 카코딜산, 카두사포스, 카펜스트룰, 칼슘 아르세네이트, 칼슘 클로레이트, 칼슘 시안아미드, 칼슘 폴리술퍼드, 칼빈포스, 캄벤디클로르, 캄페클로르, 캄포르, 캄타폴, 캄탄, 카르바모르프, 카르바놀레이트, 카르바릴, 카르바술람, 카르벤다짐, 카르벤다짐 벤젠술포네이트, 카르벤다짐 술페이트, 카르베타미드, 카르보푸란, 이황화탄소, 사염화탄소, 카르보페노티온, 카르보술판, 카르복사졸, 카르복시드, 카르복신, 카르펜트라존, 카르펜트라존-에틸, 카르프로파미드, 카르탐, 카르탐 히드로클로라이드, 카르마크롤, 카르본, CDEA, 셀로시딘, CEPC, 세랄루레, 체션트(Cheshunt) 혼합물, 키노메티오나트, 키토산, 클로벤티아존, 클로메톡시펜, 클로랄로스, 클로람벤, 클로람벤-암모늄, 클로람벤-디올아민, 클로람벤-메틸, 클로람벤-메틸암모늄, 클로람벤-소듐, 클로라민 인, 클로람페니콜, 클로라니포르메탄, 클로라닐, 클로라노크릴, 클로란트라닐리프롤, 클로라지포프, 클로라지포프-프로파르길, 클로라진, 클로르벤시드, 클로르벤주론, 클로르비시클렌, 클로르브로무론, 클로르부팜, 클로르단, 클로르데콘, 클로르디메포름, 클로르디메포름 히드로클로라이드, 클로렐펜트린, 클로르에톡시포스, 클로레투론, 클로르페나, 클로르페나-암모늄, 클로르페나-소듐, 클로르페나피르, 클로르페나졸, 클로르페네톨, 클로르펜프로프, 클로르펜손, 클로르펜술퍼드, 클로르펜빈포스, 클로르플루아주론, 클로르플루라졸, 클로르플루렌, 클로르플루렌-메틸, 클로르플루레놀, 클로르플루레놀-메틸, 클로리다존, 클로리무론, 클로리무론-에틸, 클로르메포스, 클로르메퀴트, 클로르메퀴트 클로라

이드, 클로르니딘, 클로르니트로펜, 클로로벤질레이트, 클로로디니트로나프탈렌, 클로로포름, 클로로메부포름, 클로로메티우론, 클로로네브, 클로로파시논, 클로로파시논-소듐, 클로로피크린, 클로로폰, 클로로프로필레이트, 클로로탈로닐, 클로로톨루론, 클로록수론, 클로록시닐, 클로르포늄, 클로르포늄 클로라이드, 클로르폭심, 클로르프라조포스, 클로르프로카르브, 클로르프로팜, 클로르피리포스, 클로르피리포스-메틸, 클로르퀴녹스, 클로르술푸론, 클로르탈, 클로르탈-디메틸, 클로르탈-모노메틸, 클로르티아미드, 클로르티오포스, 클로졸리네이트, 콜린 클로라이드, 크로마페노지드, 시네린 I, 시네린 II, 시네린, 시니돈-에틸, 신메틸린, 시노술푸론, 시오부티드, 시스아닐리드, 시스메트린, 클레토딤, 클림바줄, 클리오디네이트, 클로디나포프, 클로디나포프-프로파르길, 클로에토카르브, 클로펜세트, 클로펜세트-포타슘, 클로펜테진, 클로피브르산, 클로포프, 클로포프-이소부틸, 클로마존, 클로메프로프, 클로프로프, 클로프로시딤, 클로피랄리드, 클로피랄리드-메틸, 클로피랄리드-올아민, 클로피랄리드-포타슘, 클로피랄리드-트리스(2-히드록시프로필)암모늄, 클로퀸토세트, 클로퀸토세트-멕실, 클로란술람, 클로란술람-메틸, 클로산텔, 클로티아니딘, 클로트리마졸, 클록시포낙, 클로시포낙-소듐, CMA, 코들렐루레, 콜로포네이트, 구리 아세테이트, 구리 아세토아르세나이트, 구리 아르세네이트, 구리 카르보네이트, 염기성, 구리 히드록시드, 구리 나프테네이트, 구리 올레에이트, 구리 옥시클로라이드, 구리 실리케이트, 구리 술페이트, 구리 아연 크로메이트, 쿠마클로르, 쿠마푸릴, 쿠마포스, 쿠마테트랄릴, 쿠미토에이트, 쿠목시스트로빈, CPMC, CPMF, CPPC, 크레다진, 크레졸, 크리미딘, 크로타미돈, 크로톡시포스, 크루포메이트, 크리올라이트, 큐-루어(cue-lure), 쿠프라네브, 쿠밀루론, 쿠프로밤, 산화제1구리, 쿠르쿠메놀, 시안아미드, 시아나트린, 시아나진, 시아노펜로스, 시아노포스, 시안토에이트, 시안트라닐리프롤, 시아조파미드, 시부트린, 시클라파라미드, 시클라닐리드, 시클레트린, 시클로에이트, 시클로헥시미드, 시클로프레이트, 시클로프로트린, 시클로술과무론, 시클로사프리트, 시클록시딤, 시클루론, 시에노피라렌, 시플루페나미드, 시플루메토펴, 시플루트린, 시할로포프, 시할로포프-부틸, 시할로트린, 시핵사틴, 시미아줄, 시미아줄 히드로클로라이드, 시목사닐, 시오메트리닐, 시펜다줄, 시페르메트린, 시페르퀴트, 시페르퀴트 클로라이드, 시페노트린, 시프라진, 시프라줄, 시프로코나줄, 시프로디닐, 시프로푸람, 시프로미드, 시프로술파미드, 시로마진, 시티오에이트, 다이무론, 달라폰, 달라폰-칼슘, 달라폰-마그네슘, 달라폰-소듐, 다미노지드, 다요우통(dayoutong), 다조메트, 다조메트-소듐, DBCP, d-감포르, DCIP, DCPTA, DDT, 데바카르브, 데카펜틴, 데카르보푸란, 데히드로아세트산, 델라클로르, 델타메트린, 데메피온, 데메피온-O, 데메피온-S, 데메톤, 데메톤-메틸, 데메톤-O, 데메톤-O-메틸, 데메톤-S, 데메톤-S-메틸, 데메톤-S-메틸술폰, 데스메디팜, 데스메트린, d-판실루퀘빙주치(fanshiluquebingjuzhi), 디아펜티우론, 디알리로스, 디-알레이트, 디아미다포스, 규조토, 디아지논, 디부틸 프탈레이트, 디부틸 숙시네이트, 디캄바, 디캄바-디글리콜아민, 디캄바-디메틸암모늄, 디캄바-디올아민, 디캄바-이소프로필암모늄, 디캄바-메틸, 디캄바-올아민, 디캄바-포타슘, 디캄바-소듐, 디캄바-트올아민, 디캄톤, 디클로베닐, 디클로펜티온, 디클로플루아니드, 디클론, 디클로랄우레아, 디클로르벤주론, 디클로르플루레놀, 디클로르플루레놀-메틸, 디클로르메이트, 디클로르미드, 디클로로펜, 디클로르프로프, 디클로르프로프-2-에틸헥실, 디클로르프로프-부토틸, 디클로르프로프-디메틸암모늄, 디클로르프로프-에틸암모늄, 디클로르프로프-이숙틸, 디클로르프로프-메틸, 디클로르프로프-P, 디클로르프로프-P-2-에틸헥실, 디클로르프로프-P-디메틸암모늄, 디클로르프로프-포타슘, 디클로르프로프-소듐, 디클로르보스, 디클로줄린, 디클로부트라졸, 디클로시메트, 디클로포프, 디클로포프-메틸, 디클로메진, 디클로메진-소듐, 디클로란, 디클로술람, 디코폴, 디쿠마롤, 디크레실, 디크로토포스, 디시클라닐, 디시클로논, 디엘드린, 디에노클로르, 디에탐퀴트, 디에탐퀴트 디클로라이드, 디에타틸, 디에타틸-에틸, 디에토펴카르브, 디에틀레이트, 디에틸 피로카르보네이트, 디에틸톨루아미드, 디페나퀼, 디페노코나줄, 디페노펜텐, 디페노펜텐-에틸, 디페녹수론, 디펜조퀴트, 디펜조퀴트 메틸술페이트, 디페티알론, 디플로비다진, 디플루벤주론, 디플루페니칸, 디플루펜조피르, 디플루펜조피르-소듐, 디플루메토립, 디케굴락, 디케굴락-소듐, 딜로르, 디마티프, 디메플루트린, 디메폭스, 디메푸론, 디메피페레이트, 디메타클론, 디메탄, 디메타카르브, 디메타클로르, 디메타메트린, 디메테나미드, 디메테나미드-P, 디메티핀, 디메티리물, 디메토에이트, 디메토모르프, 디메트린, 디메틸 카르베이트, 디메틸 프탈레이트, 디메틸빈포스, 디메틸란, 디멕사노, 디미다존, 디목시스트로빈, 디넥스, 디넥스-디클렉신, 덩주네주오(dingjunezuo), 디니코나줄, 디니코나줄-M, 디니트라민, 디노부론, 디노캡, 디노캡-4, 디노캡-6, 디녹톤, 디노페네이트, 디노펜톤, 디노프로프, 디노삼, 디노세브, 디노세브 아세테이트, 디노세브-암모늄, 디노세브-디올아민, 디노세브-소듐, 디노세브-트올아민, 디노술폰, 디노테푸란, 디노테르브, 디노테르브 아세테이트, 디노테르본, 디오페놀란, 디옥사벤조포스, 디옥사카르브, 디옥사티온, 디파시논, 디파시논-소듐, 디페나미드, 디페닐 술폰, 디페닐아민, 디프로팔린, 디프로페트린, 디피리티온, 디퀴트, 디퀴트 디브로마이드, 디스파를루레, 디술, 디술퍼람, 디술포톤, 디술-소듐, 디탈립포스, 디티아논, 디티크로포스, 디티오에테르, 디티오피르, 디우론, d-리모넨, DMPA, DNOC, DNOC-암모늄, DNOC-포타슘, DNOC-소듐, 도데모르프, 도데모르프 아세테이트, 도데모르프 벤조에이트, 도디신, 도디신 히드로클로라이드, 도디신-소듐, 도딘, 도페나핀, 도미니칼루레, 도라멕틴, 드라족솔론, DSMA, 두폴린, EBEP, EBP, 엑디스테론, 에디펜로스, 에글리나

진, 에글리나진-에틸, 에마멕틴, 에마멕틴 벤조에이트, EMPC, 엠펜트린, 엔도술판, 엔도탈, 엔도탈-디암모늄, 엔도탈-디포타슘, 엔도탈-디소듐, 엔도티온, 엔드린, 에네스트로부린, EPN, 에포콜레온, 에포페노난, 에폭시코나졸, 에프리로벡틴, 에프로나즈, EPTC, 에르본, 에르고칼시페롤, 에를루지시안카오안(erlujixiancaaoan), 에스데팔레트린, 에스펜발레이트, 에스프로카르브, 에타셀라실, 에타코나졸, 에타포스, 에탐, 에타복삼, 에타클로르, 에탈플루랄린, 에타메트술푸론, 에타메트술푸론-메틸, 에타프로클로르, 에테폰, 에티디무론, 에티오펜카르브, 에티올레이트, 에티온, 에티오진, 에티프롤, 에티리몰, 에토에이트-메틸, 에토푸메세이트, 에토헥사디올, 에토프로포스, 에톡시펜, 에톡시펜-에틸, 에톡시퀸, 에톡시술푸론, 에티클로제이트, 에틸 포르메이트, 에틸 α -나프탈렌아세테이트, 에틸-DDD, 에틸렌, 에틸렌 디브로마이드, 에틸렌 디클로라이드, 에틸렌 옥시드, 에틸리신, 에틸수은 2,3-디히드록시프로필 메르캅티드, 에틸수은 아세테이트, 에틸수은 브로마이드, 에틸수은 클로라이드, 에틸수은 포스페이트, 에티노펜, 에트니프로미드, 에토벤자니드, 에토펜프록스, 에톡사졸, 에트리디아졸, 에트립포스, 유게놀, EXD, 파목사돈, 팜푸르, 페나미돈, 페나미노술풀, 페나미포스, 페나파닐, 페나리몰, 페나솔람, 페나자플로르, 페나자퀸, 펜부코나졸, 펜부타틴 옥시드, 펜클로라졸, 펜클로라졸-에틸, 펜클로르포스, 펜클로림, 페네타카르브, 펜플루트린, 펜푸람, 펜헥사미드, 페니트로판, 페니트로티온, 펜준통(fenjuntong), 페노부카르브, 페노프로프, 페노프로프-3-부톡시프로필, 페노프로프-부토메틸, 페노프로프-부토틸, 페노프로프-부틸, 페노프로프-이소틸, 페노프로프-메틸, 페노프로프-포타슘, 페노티오카르브, 페녹사크림, 페녹사닐, 페녹사프로프, 페녹사프로프-에틸, 페녹사프로프-P, 페녹사프로프-P-에틸, 페녹사술풀, 페녹시카르브, 펜피클로닐, 펜피리트린, 펜프로파트린, 펜프로피딘, 펜프로피모르프, 펜피라자민, 펜피록시메이트, 펜리다존, 펜리다존-포타슘, 펜리다존-프로필, 펜손, 펜술포티온, 펜테라콜, 펜티아프로프, 펜티아프로프-에틸, 펜티온, 펜티온-에틸, 펜틴, 펜틴 아세테이트, 펜틴 클로라이드, 펜틴 히드록시드, 펜트라자미드, 펜트리파닐, 페누론, 페누론 TCA, 펜발레이트, 페르밤, 페림존, 황산제1철, 피프로닐, 플람프로프, 플람프로프-이소프로필, 플람프로프-M, 플람프로프-메틸, 플람프로프-M-이소프로필, 플람프로프-M-메틸, 플라자술풀, 플로쿠마펜, 플로메토퀸, 플로니카미드, 플로라솔람, 플루아크리피림, 플루아지포프, 플루아지포프-부틸, 플루아지포프-메틸, 플루아지포프-P, 플루아지포프-P-부틸, 플루아지남, 플루아줄레이트, 플루아주론, 플루벤디아미드, 플루벤즈이민, 플루카르바존, 플루카르바존-소듐, 플루세토술풀, 플루클로달린, 플루코푸론, 플루시클록수론, 플루시트리네이트, 플루디옥소닐, 플루에네틸, 플루엔술풀, 플루페나세트, 플루페네림, 플루페니칸, 플루페녹수론, 플루펜프록스, 플루펜피르, 플루펜피르-에틸, 플루피프롤, 플루메트린, 플루메토베르, 플루메트랄린, 플루메트솔람, 플루메진, 플루미클로락, 플루미클로락-펜틸, 플루미옥사진, 플루미프로핀, 플루모르프, 플루오메투론, 플루오피콜리드, 플루오피람, 플루오르벤시드, 플루오리다미드, 플루오로아세트아미드, 플루오로디펜, 플루오로글리코펜, 플루오로글리코펜-에틸, 플루오로이미드, 플루오로미딘, 플루오로니트로펜, 플루오티우론, 플루오티리마졸, 플루옥사스트로빈, 플루복삼, 플루프로파실, 플루프로파딘, 플루프로파네이트, 플루프로파네이트-소듐, 플루피라디푸론, 플루피르술풀, 플루피르술풀-메틸, 플루피르술풀-메틸-소듐, 플루퀸코나졸, 플루라졸, 플루레놀, 플루레놀-부틸, 플루레놀-메틸, 플루리돈, 플루로클로리돈, 플루록시피르, 플루록시피르-부토메틸, 플루록시피르-메틸, 플루르프리미돌, 플루르솔라미드, 플루르타몬, 플루실라졸, 플루솔파미드, 플루티아세트, 플루티아세트-메틸, 플루티아닐, 플루톨라닐, 플루트리아폴, 플루발리네이트, 플록사피록사드, 플록소페민, 폴페트, 포메사펜, 포메사펜-소듐, 포노포스, 포람술풀, 포르클로르페누론, 포름알데히드, 포르메타네이트, 포르메타네이트 히드로클로라이드, 포르모티온, 포름파라네이트, 포름파라네이트 히드로클로라이드, 포사민, 포사민-암모늄, 포세틸, 포세틸-알루미늄, 포스메틸란, 포스피레이트, 포스티아제이트, 포스티에탄, 프론탈린, 푸베리다졸, 푸카오징(fucaojing), 푸카오미, 푸나이헤카올링(funaihecaoling), 푸펜티오우레아, 푸랄란, 푸랄락실, 푸라메트린, 푸라메트피르, 푸라티오카르브, 푸르카르바닐, 푸르코나졸, 푸르코나졸-시스, 푸레트린, 푸르푸탈, 푸릴라졸, 푸르메시클록스, 푸로파네이트, 푸릴옥시펜, 감마-시할로트린, 감마-HCH, 게니트, 지베렐산, 지베렐린, 글리프토르, 글루포시네이트, 글루포시네이트-암모늄, 글루포시네이트-P, 글루포시네이트-P-암모늄, 글루포시네이트-P-소듐, 글리오딘, 글리옥심, 글리포세이트, 글리포세이트-디암모늄, 글리포세이트-디메틸암모늄, 글리포세이트-이소프로필암모늄, 글리포세이트-모노암모늄, 글리포세이트-포타슘, 글리포세이트-세스퀴소듐, 글리포세이트-트리메슘, 글리포신, 고시플루레, 그란들루레, 그리세오폴빈, 구아자틴, 구아자틴 아세테이트, 할라크리네이트, 할펜프록스, 할로페노지드, 할로사펜, 할로술풀, 할로술풀-메틸, 할록시딘, 할록시포프, 할록시포프-에토틸, 할록시포프-메틸, 할록시포프-P, 할록시포프-P-에토틸, 할록시포프-P-메틸, 할록시포프-소듐, HCH, 헤멜, 헴파, HEOD, 헵타클로르, 헵테노포스, 헵토파르길, 헵테노포스, 헥사클로로아세톤, 헥사클로로벤젠, 헥사클로로부타디엔, 헥사클로로펜, 헥사코나졸, 헥사플루무론, 헥사플루레이트, 헥살루레, 헥사미드, 헥사지논, 헥실티오포스, 헥시티아족스, HDDN, 홀로술풀, 후안카이위(huancaiwo), 후앙카올링(huangcaoling), 후안준주(huanjunzuo), 히드라메틸논, 히드라르가펜, 수화 석회, 시안화수소, 히드로프렌, 히멕사졸, 히퀸카르브, IAA, IBA, 이카리딘, 이마잘릴, 이마잘릴 니트레이트, 이마잘릴 술페이트, 이마자메타벤즈, 이마자메타벤즈

-메틸, 이마자목스, 이마자목스-암모늄, 이마자픽, 이마자픽-암모늄, 이마자피르, 이마자피르-이소프로필암모늄, 이마자퀸, 이마자퀸-암모늄, 이마자퀸-메틸, 이마자퀸-소듐, 이마제타피르, 이마제타피르-암모늄, 이마조솔푸론, 이미벤코나졸, 이미시아포스, 이미다클로프리드, 이미다클로티즈, 이미녹타딘, 이미녹타딘 트리아세테이트, 이미녹타딘 트리알베실레이트, 이미프로트린, 이나벤피드, 인다노판, 인다지폴람, 인독사카르브, 이네진, 아이오도보닐, 아이오도카르브, 아이오도메탄, 아이오도솔푸론, 아이오도솔푸론-메틸, 아이오도솔푸론-메틸-소듐, 이오펜솔푸론, 이오펜솔푸론-소듐, 이옥시닐, 이옥시닐 옥타노에이트, 이옥시닐-리튬, 이옥시닐-소듐, 이파진, 이프코나졸, 이프펜카르바존, 이프로벤포스, 이프로디온, 이프로발리카르브, 이프리미담, 입스디엔올, 입센올, IPSP, 이사미도포스, 이사조포스, 이소벤잔, 이소카르바미드, 이소카르보포스, 이소실, 이소드린, 이소펜포스, 이소펜포스-메틸, 이솔란, 이소메티오진, 이소노루론, 이소폴리네이트, 이소프로카르브, 이소프로팔린, 이소프로티올란, 이소프로투론, 이소피라잠, 이소피리물, 이소티오네이트, 이소티아닐, 이소우론, 이소발레디온, 이속사벤, 이속사클로르톨, 이속사디펜, 이속사디펜-에틸, 이속사플루톨, 이속사피리포프, 이속사티온, 이베르멕틴, 이조팜포스, 자포닐루레, 자포트린스, 자스몰린 I, 자스몰린 II, 자스몬산, 지아후양충종(jiahuangchongzong), 지아지쟁시아올린(jiajizengxiaolin), 지아시양준치(jiaxiangjunzhi), 지에카오완(jiecaowan), 지에카오시(jiecaoxi), 조드펜포스, 유충 호르몬 I, 유충 호르몬 II, 유충 호르몬 III, 카테트린, 카르부틸레이트, 카레타잔, 카레타잔-포타슘, 카수가마이신, 카수가마이신 히드로클로라이드, 케준린, 켈레반, 케토스피라독스, 케토스피라독스-포타슘, 키네틴, 키노프렌, 크레속심-메틸, 쿠이카옥시, 락토펴, 람다-시할로트린, 라틸루레, 남 아르세네이트, 레나실, 레피멕틴, 랩토포스, 린단, 리네아틴, 리누론, 리림포스, 리틀루레, 루플루레, 루페누론, 르브딩준치(lvdingjunzhi), 르복시안카올린(lvxiancaolin), 리티다티온, MAA, 말라티온, 말레산 히드라지드, 말로노벤, 말토텍스트린, MAMA, 만코피, 만코제브, 만디프로파미드, 마네브, 마트린, 마지독스, MCPA, MCPA-2-에틸헥실, MCPA-부틸, MCPA-부틸, MCPA-디메틸암모늄, MCPA-디올아민, MCPA-에틸, MCPA-이소부틸, MCPA-이속틸, MCPA-이소프로필, MCPA-메틸, MCPA-올아민, MCPA-포타슘, MCPA-소듐, MCPA-티오에틸, MCPA-트롤아민, MCPB, MCPB-에틸, MCPB-메틸, MCPB-소듐, 메베닐, 메카르밤, 메카르빈지드, 메카르폰, 메코프로프, 메코프로프-2-에틸헥실, 메코프로프-디메틸암모늄, 메코프로프-디올아민, 메코프로프-에타닐, 메코프로프-이속틸, 메코프로프-메틸, 메코프로프-P, 메코프로프-P-2-에틸헥실, 메코프로프-P-디메틸암모늄, 메코프로프-P-이소부틸, 메코프로프-포타슘, 메코프로프-P-포타슘, 메코프로프-소듐, 메코프로프-트롤아민, 메디메포름, 메디노테브, 메디노테브 아세테이트, 메들루레, 메페나세트, 메펜피르, 메펜피르-디에틸, 메플루이디드, 메플루이디드-디올아민, 메플루이디드-포타슘, 메가톱산, 메나존, 메파니피림, 메페르플루트린, 메페네이트, 메포스폴란, 메피퀴트, 메피퀴트 클로라이드, 메피퀴트 펜타보레이트, 메프로닐, 뎀틸디노캡, 염화제2수은, 산화제2수은, 염화제1수은, 메르포스, 메소프라진, 메소솔푸론, 메소솔푸론-메틸, 메소트리온, 메솔펜, 메솔펜포스, 메타플루미존, 메탈락실, 메탈락실-M, 메타알데히드, 메탐, 메탐-암모늄, 메타미포프, 메타미트론, 메탐-포타슘, 메탐-소듐, 메타자클로르, 메타조솔푸론, 메타족솔론, 메트코나졸, 메테과, 메트플루라존, 메타벤즈티아주론, 메타크리코스, 메탈프로팔린, 메타미도포스, 메타술포카르브, 메타졸, 메트푸록삼, 메티다티온, 메티오벤카르브, 메티오카르브, 메티오피리솔푸론, 메티오테과, 메티오줄린, 메티우론, 메토크로토포스, 메토메론, 메토밀, 메토프렌, 메토프로트린, 메토킨-부틸, 메토티린, 메톡시클로르, 메톡시페노지드, 메톡시페논, 메틸 아폴레이트, 메틸 브로마이드, 메틸 유게놀, 메틸 아이오다이드, 메틸 이소티오시아네이트, 메틸아세토포스, 메틸클로로포름, 메틸덱론, 메틸렌 클로라이드, 메틸수은 벤조에이트, 메틸수은 디시안디아미드, 메틸수은 펜타클로로페녹시드, 메틸네오데칸아미드, 메티람, 메토벤주론, 메토브로무론, 메토플루트린, 메톨라클로르, 메톨카르브, 메토미노스트로빈, 메토솔람, 메톡사디아존, 메톡수론, 메트라페논, 메트리부진, 메트술포박스, 메트솔푸론, 메트솔푸론-메틸, 메빈포스, 맥사카르베이트, 미에슈안(mieshuan), 밀베멕틴, 밀베마이신 옥심, 밀네브, 미파코스, 미렉스, MNAF, 모구춘(moguchun), 물리네이트, 몰로솔탐, 모날리드, 모니소우론, 모노클로로아세트산, 모노크로토포스, 모노리누론, 모노솔푸론, 모노솔푸론-에스테르, 모누론, 모누론 TCA, 모르팜퀴트, 모르팜퀴트 디클로라이드, 모록시딘, 모록시딘 히드로클로라이드, 모르포티온, 모르지드, 목시텍틴, MSMA, 무스칼루레, 미클로부타닐, 미클로줄린, N-(에틸수은)-p-톨루엔술포아닐리드, 나뎀, 나프탈로포스, 날레드, 나프탈렌, 나프탈렌아세트아미드, 나프탈산 무수물, 나프톡시아세트산, 나프로아닐리드, 나프로파미드, 나프탈람, 나프탈람-소듐, 나타마이신, 네부론, 니클로사미드, 니클로사미드-올아민, 니코솔푸론, 니코틴, 니플루리디드, 니피라클로펜, 니텐피람, 니티아진, 니트랄린, 니트라피린, 니트릴카르브, 니트로펜, 니트로플루오르펜, 니트로스티렌, 니트로탈-이소프로필, 노르보르미드, 노르플루라존, 노르니코틴, 노루론, 노발루론, 노비플루무론, 누아리물, OCH, 옥타클로로디프로필 에테르, 옥틸리논, 오프레이스, 오페토에이트, 오르벤카르브, 오르프탈루레, 오르토-디클로로벤젠, 오르토솔파무론, 오락탈루레, 오리사스트로빈, 오리잘린, 오스톨, 오스트라몬, 옥사베트리닐, 옥사디아르길, 옥사디아존, 옥사디실, 옥사메이트, 옥사밀, 옥사피라존, 옥사피라존-디몰아민, 옥사피라존-소듐, 옥사솔푸론, 옥사지클로메폰, 옥신-구리, 옥솔린산, 옥스포코나졸, 옥스포코나졸

푸마레이트, 옥시카르복신, 옥시데메톤-메틸, 옥시데프로포스, 옥시디술포톤, 옥시플루오르펜, 옥시마트린, 옥시테트라시클린, 옥시테트라시클린 히드로클로라이드, 파클로부트라졸, 파이충딩(paichongding), 파라-디클로로벤젠, 파라플루론, 파라퀴트, 파라퀴트 디클로라이드, 파라퀴트 디메틸술페이트, 파라티온, 파라티온-메틸, 파리놀, 페블레이트, 페푸라조에이트, 펠라르곤산, 펜코나졸, 펜시쿠론, 펜디메탈린, 펜플루엔, 펜플루론, 페녹스숴람, 펜타클로로페놀, 펜타노클로르, 펜티오피라드, 펜트메트린, 펜톡사존, 피플루이돈, 페르메트린, 페톡사미드, 페나마크릴, 페나진 옥시드, 펜이소팜, 펜캅톤, 펜메디팜, 펜메디팜-에틸, 페노벤주론, 페노트린, 펜프록시드, 펜토에이트, 페닐머큐리우레아, 페닐수은 아세테이트, 페닐수은 클로라이드, 피로카테콜의 페닐수은 유도체, 페닐수은 니트레이트, 페닐수은 살리실레이트, 포레이트, 포스아세틸, 포살론, 포스디펜, 포스폴란, 포스폴란-메틸, 포스글리신, 포스메트, 포스니클로르, 포스파미돈, 포스핀, 포스포카르브, 인, 포스틴, 폭심, 폭심-메틸, 프탈리드, 피클로람, 피클로람-2-에틸헥실, 피클로람-이속틸, 피클로람-메틸, 피클로람-올아민, 피클로람-포타슘, 피클로람-트리에틸암모늄, 피클로람-트리스(2-히드록시프로필)암모늄, 피콜리나펜, 피콕시스트로빈, 핀돈, 핀돈-소듐, 피녹사텐, 피페탈린, 피페로닐 부톡시드, 피페로닐 시클로넨, 피페로포스, 피프록타닐, 피프록타닐 브로마이드, 피프로탈, 피리메타포스, 피리미카르브, 피리미옥시포스, 피리미포스-에틸, 피리미포스-메틸, 폴리페네이트, 폴리카르바메이트, 폴리옥신, 폴리옥소림, 폴리옥소림-아연, 폴리티알란, 포타슘 아르세나이트, 포타슘 아지드, 포타슘 시아네이트, 포타슘 지베렐레이트, 포타슘 나프테네이트, 포타슘 폴리숴피드, 포타슘 티오시아네이트, 포타슘 α -나프탈렌아세테이트, pp'-DDT, 프랄레트린, 프레코센 I, 프레코센 II, 프레코센 III, 프레틸라클로르, 프리미도포스, 프리미숴푸론, 프리미숴푸론-메틸, 프로베나졸, 프로클로라즈, 프로클로라즈-망가니즈, 프로클로놀, 프로시아진, 프로시미돈, 프로디아민, 프로페노포스, 프로플루아졸, 프로플루랄린, 프로플루트린, 프로폭시딤, 프로글리나진, 프로글리나진-에틸, 프로헥사디온, 프로헥사디온-칼슘, 프로히드로자스몬, 프로마실, 프로파카르브, 프로메톤, 프로메트린, 프로무리트, 프로파클로르, 프로파미딘, 프로파미딘 디히드로클로라이드, 프로파모카르브, 프로파모카르브 히드로클로라이드, 프로파닐, 프로파포스, 프로파퀴자포프, 프로파르기트, 프로파르트린, 프로파진, 프로페탐포스, 프로팜, 프로피코나졸, 프로피네브, 프로피소클로르, 프로폭수르, 프로폭시카르바존, 프로폭시카르바존-소듐, 프로필 이소메, 프로피리숴푸론, 프로피자미드, 프로퀴나지드, 프로솔레르, 프로솔팔린, 프로솔포카르브, 프로솔푸론, 프로티다티온, 프로티오카르브, 프로티오카르브 히드로클로라이드, 프로티오코나졸, 프로티오포스, 프로토에이트, 프로트리켄부트, 프록산, 프록산-소듐, 프리나클로르, 피다논, 피메트로진, 피라카르볼리드, 피라클로포스, 피라클로닐, 피라클로스트로빈, 피라플루엔, 피라플루엔-에틸, 피라플루팜, 피라마트, 피라메토스트로빈, 피라옥시스트로빈, 피라숴포톨, 피라졸리네이트, 피라조포스, 피라조숴푸론, 피라조숴푸론-에틸, 피라조티온, 피라족시펜, 피레스메트린, 피레트린 I, 피레트린 II, 피레트린, 피리밤벤즈-이소프로필, 피리밤벤즈-프로필, 피리벤카르브, 피리벤족심, 피리부티카르브, 피리클로르, 피리다벤, 피리다폴, 피리달릴, 피리다펜티온, 피리데이트, 피리디니트릴, 피리페녹스, 피리플루퀴나존, 피리프탈리드, 피리메타닐, 피리미디펜, 피리미노박, 피리미노박-메틸, 피리미숴판, 피리미테이트, 피리누론, 피리오페논, 피리프롤, 피리프로판올, 피리프록시펜, 피리티오박, 피리티오박-소듐, 피롤란, 피로퀼론, 피록사숴론, 피록스숴람, 피록시클로르, 피록시푸르, 콰시아, 퀴나세톨, 퀴나세톨 숴페이트, 퀴날포스, 퀴날포스-메틸, 퀴나자미드, 퀴클로락, 퀴코나졸, 퀴메락, 퀴노클라민, 퀴논아미드, 퀴노티온, 퀴녹시펜, 퀴티오포스, 퀴토젠, 퀴잘로포프, 퀴잘로포프-에틸, 퀴잘로포프-P, 퀴잘로포프-P-에틸, 퀴잘로포프-P-테푸릴, 쿠웬치(quwenzhi), 쿠잉딩(quyingding), 라벤자졸, 라폭사니드, 레베미드, 레스메트린, 로데타닐, 로도자포닌-III, 리바비린, 림숴푸론, 로테논, 리아니아, 사플루페나실, 사이준마오(saijunmao), 사이센통(saisentong), 살리실아닐리드, 상귀나린(sanguinarine), 산토닌, 쉬라단, 실리로시드, 세부틸라진, 세크부메톤, 세닥산, 셀라멕틴, 세미아미트라즈, 세미아미트라즈 클로라이드, 세사멕스, 세사몰린, 세톡시딤, 슈양지아안카올린(shuangjiaancaolin), 시두론, 시글루레, 실라플루오펜, 실라트란, 실리카 겔, 실티오팜, 시마진, 시메코나졸, 시메톤, 시메트린, 신토펜, SMA, S-메톨라클로르, 소듐 아르세나이트, 소듐 아지드, 소듐 클로레이트, 소듐 플루오라이드, 소듐 플루오로아세테이트, 소듐 헥사플루오로실리케이트, 소듐 나프테네이트, 소듐 오르토페닐페녹시드, 소듐 펜타클로로페녹시드, 소듐 폴리숴피드, 소듐 티오시아네이트, 소듐 α -나프탈렌아세테이트, 소파미드, 스피네토람, 스피노사드, 스피로디클로펜, 스피로메시펜, 스피로테트라마트, 스피록사민, 스트렙토마이신, 스트렙토마이신 세스퀴숴페이트, 스트리크닌, 숴카톨, 숴코푸론, 숴코푸론-소듐, 숴코트리온, 숴팔레이트, 숴펜트라존, 숴피람, 숴플루라미드, 숴포메투론, 숴포메투론-메틸, 숴포숴푸론, 숴포텡, 숴폭사플로르, 숴폭시드, 숴폭심, 황, 황산, 숴푸릴 플루오라이드, 숴글리카펜, 숴프로포스, 숴트로펜, 스웨프, 타우-플루발리네이트, 타브론, 타짐카르브, TCA, TCA-암모늄, TCA-칼슘, TCA-에타닐, TCA-마그네슘, TCA-소듐, TDE, 테부코나졸, 테부페노지드, 테부펜피라드, 테부플로퀼, 테부피딤포스, 테부탐, 테부티우론, 테클로프탈람, 테크나젠, 테코람, 테플루벤주론, 테플루트린, 테푸릴트리온, 템보트리온, 테메포스, 테파, TEPP, 테프랄록시딤, 테랄레트린, 테르바실, 테르부카르브, 테르부클로르, 테르부포스, 테르부메톤, 테르부틸라진, 테르부트린, 테트시클라시스, 테트라

클로로에탄, 테트라클로르빈포스, 테트라코나졸, 테트라디폰, 테트라플루론, 테트라메트린, 테트라메틸플루트린, 테트라민, 테트라낙틴, 테트라솔, 탈륨 술페이트, 테닐클로르, 세타-시페르메트린, 티아벤다졸, 티아클로프리드, 티아디플루오르, 티아메톡삼, 티아프로닐, 티아자플루론, 티아조피르, 티크로포스, 티시오펜, 티디아지민, 티디아주론, 티엔카르바존, 티엔카르바존-메틸, 티펜솔푸론, 티펜솔푸론-메틸, 티플루자미드, 티오벤카르브, 티오카르복심, 티오클로르펜팜, 티오시클람, 티오시클람 히드로클로라이드, 티오시클람 옥살레이트, 티오디아졸-구리, 티오디카르브, 티오파녹스, 티오플루옥시메이트, 티오헬파, 티오펜살, 티오펜톤, 티오나진, 티오파네이트, 티오파네이트-메틸, 티오킨옥스, 티오세미카르바지드, 티오솔탑, 티오솔탑-디아모늄, 티오솔탑-디소듐, 티오솔탑-모노소듐, 티오테파, 티람, 투린기엔신, 티아디닐, 티아오지에안(tiaojiean), 티오카르바질, 티오클로림, 티옥시미드, 티르페이트, 톨클로포스-메틸, 톨펜피라드, 톨릴플루아니드, 톨릴수은 아세테이트, 토프라메존, 트랄록시딤, 트랄로시트린, 트랄로메트린, 트랄로피릴, 트랜스플루트린, 트랜스페르메트린, 트레타민, 트리아콘탄올, 트리아디메폰, 트리아디메놀, 트리아파몬, 트리아라이트, 트리아미포스, 트리아펜테놀, 트리아라텐, 트리아리몰, 트리아솔푸론, 트리아자메이트, 트리아즈부틸, 트리아지플람, 트리아조포스, 트리아족시드, 트리베누론, 트리베누론-메틸, 트리부포스, 트리부틸틴 옥시드, 트리캄바, 트리클라미드, 트리클로르폰, 트리클로르메타포스-3, 트리클로로나트, 트리클로피르, 트리클로피르-부토틸, 트리클로피르-에틸, 트리클로피르-트리에틸암모늄, 트리시클라졸, 트리데모르프, 트리디판, 트리에타진, 트리펜모르프, 트리페노포스, 트리플록시스트로빈, 트리플록시솔푸론, 트리플록시솔푸론-소듐, 트리플루미졸, 트리플루무론, 트리플루랄린, 트리플루솔푸론, 트리플루솔푸론-메틸, 트리포프, 트리포프-메틸, 트리포프심, 트리포린, 트리히드록시트리아진, 트리메들루레, 트리메타카르브, 트리메투론, 트리넥사파, 트리넥사파-에틸, 트리프렌, 트리프로핀단, 트리프톨리드, 트리탁, 트리티코나졸, 트리토솔푸론, 트렁크-콜(trunc-call), 유니코나졸, 유니코나졸-P, 우르바시드, 우레테파, 발레레이트, 발리다마이신, 발리페날레이트, 발론, 바미도티온, 반가르드, 바닐리프롤, 베르놀레이트, 빈클로졸린, 와파린, 와파린-포타슘, 와파린-소듐, 시아오충리울린(xiaochongliulin), 신주난(xinjunan), 시위주난(xiwojunan), XMC, 크실라클로르, 크실레놀스, 크실릴카르브, 이시징(yishijing), 자릴아미드, 제아틴, 쟁시아오안(zengxiaoan), 제타-시페르메트린, 아연 나프테네이트, 아연 포스피드, 아연티아졸, 지네브, 지람, 줄라프로포스, 족사미드, 주오미후양롱(zuomihuanglong), α -클로로히드린, α -엑디손, α -멀티스트리아틴, 및 α -나프탈렌아세트산이다. 추가 정보는 <http://www.alanwood.net/pesticides/index.html>에 있는 "Compendium of Pesticide Common Names"를 참고한다. 또한 문헌 ["The Pesticide Manual" 14th Edition, edited by C D S Tomlin, copyright 2006 by British Crop Production Council], 또는 그 이전 또는 보다 최신판을 참고한다.

[2092]

생물살충제

[2093]

화학적 1의 분자는 또한 하나 이상의 생물살충제와 조합되어 (예컨대, 조성 혼합물, 또는 동시 또는 연속 적용으로) 사용될 수 있다. 용어 "생물살충제"는 화학 살충제와 유사한 방식으로 적용되는 미생물 생물학적 해충 방제제에 대해 사용된다. 통상적으로 이들은 박테리아이지만, 또한 트리코더마(*Trichoderma*) 종 및 암펠로미세스 퀴스쿠알리스(*Ampelomyces quisqualis*) (포도 흰가루병의 방제제)를 비롯한, 진균 방제제의 예가 있다. 바실루스 서브틸리스(*Bacillus subtilis*)가 식물 병원체를 방제하기 위해 사용된다. 잡초 및 설치류가 또한 미생물제를 사용하여 방제되어 왔다. 널리-공지된 살균충제의 한 예는 인시목, 딱정벌레목 및 파리목의 박테리아성 질병인 바실루스 투링기엔시스(*Bacillus thuringiensis*)이다. 이는 다른 유기체에 대해서는 효과가 거의 없기 때문에, 이는 합성 살충제보다 더 친환경적인 것으로 간주된다. 생물학적 살균충제는 다음을 기재로 하는 생성물을 포함한다:

[2094]

1. 곤충병원성 진균 (예를 들어 메타리지움 아니소플리아에(*Metarhizium anisopliae*));

[2095]

2. 곤충병원성 선충 (예를 들어 스테이너네르마 펠티아에(*Steinernema feltiae*)); 및

[2096]

3. 곤충병원성 바이러스 (예를 들어 시디아 포모넬라(*Cydia pomonella*) 그라놀로바이러스).

[2097]

곤충병원성 유기체의 다른 예로는 바칼로바이러스, 박테리아 및 다른 원핵 유기체, 진균, 원충 및 미포자충이 포함되지만, 이에 제한되지 않는다. 생물학적으로 유래된 살균충제로는 로테논, 베라트리딘, 뿐만 아니라 미생물 독소; 곤충 내성 또는 저항성 식물 변종; 및 살균충제를 생산하거나 유전자 변형 유기체에 곤충 저항성 특성을 전달하도록 재조합 DNA 기술에 의해 변형된 유기체가 포함되지만, 이에 제한되지 않는다. 한 실시양태에서, 화학식 1의 분자를 하나 이상의 생물살충제와 함께 종자 처리 및 토양 개량의 영역에서 사용할 수 있다. 문헌 [The Manual of Biocontrol Agents]은 이용가능한 생물학적 살균충제 (및 다른 생물계 방제) 생성물의 검토를 제공한다. Copping L.G. (ed.) (2004). The Manual of Biocontrol Agents (formerly the Biopesticide

Manual) 3rd Edition. British Crop Production Council (BCPC), Farnham, Surrey UK.

[2098] 다른 활성 화합물

[2099] 화학식 1의 분자는 또한 다음 중 하나 이상과 조합되어 (예컨대, 조성 혼합물, 또는 동시 또는 연속 적용으로) 사용될 수 있다:

- [2100] 1. 3-(4-클로로-2,6-디메틸페닐)-4-히드록시-8-옥사-1-아자스피로[4,5]데스-3-엔-2-온;
- [2101] 2. 3-(4'-클로로-2,4-디메틸[1,1'-비페닐]-3-일)-4-히드록시-8-옥사-1-아자스피로[4,5]데스-3-엔-2-온;
- [2102] 3. 4-[(6-클로로-3-피리디닐)메틸]메틸아미노-2(5H)-푸라논;
- [2103] 4. 4-[(6-클로로-3-피리디닐)메틸]시클로프로필아미노-2(5H)-푸라논;
- [2104] 5. 3-클로로-N²-[(1S)-1-메틸-2-(메틸술포닐)에틸]-N¹-[2-메틸-4-[1,2,2,2-테트라플루오로-1-(트리플루오로메틸)에틸]페닐]-1,2-벤젠디카르복사미드;
- [2105] 6. 2-시아노-N-에틸-4-플루오로-3-메톡시-벤젠술포나미드;
- [2106] 7. 2-시아노-N-에틸-3-메톡시-벤젠술포나미드;
- [2107] 8. 2-시아노-3-디플루오로메톡시-N-에틸-4-플루오로-벤젠술포나미드;
- [2108] 9. 2-시아노-3-플루오로메톡시-N-에틸-벤젠술포나미드;
- [2109] 10. 2-시아노-6-플루오로-3-메톡시-N,N-디메틸-벤젠술포나미드;
- [2110] 11. 2-시아노-N-에틸-6-플루오로-3-메톡시-N-메틸-벤젠술포나미드;
- [2111] 12. 2-시아노-3-디플루오로메톡시-N,N-디메틸벤젠술포나미드;
- [2112] 13. 3-(디플루오로메틸)-N-[2-(3,3-디메틸부틸)페닐]-1-메틸-1H-피라졸-4-카르복사미드;
- [2113] 14. N-에틸-2,2-디메틸프로피온아미드-2-(2,6-디클로로- α , α , α -트리플루오로-p-톨릴)히드라존;
- [2114] 15. N-에틸-2,2-디클로로-1-메틸시클로프로판카르복사미드-2-(2,6-디클로로- α , α , α -트리플루오로-p-톨릴)히드라존 니코틴;
- [2115] 16. O-{(E)-[2-(4-클로로-페닐)-2-시아노-1-(2-트리플루오로메틸페닐)-비닐]} S-메틸 티오카르보네이트;
- [2116] 17. (E)-N¹-[(2-클로로-1,3-티아졸-5-일메틸)]-N²-시아노-N¹-메틸아세트아미딘;
- [2117] 18. 1-(6-클로로피리딘-3-일메틸)-7-메틸-8-니트로-1,2,3,5,6,7-헥사히드로-이미다조[1,2-a]피리딘-5-올;
- [2118] 19. 4-[4-클로로페닐-(2-부틸리딘-히드라조노)메틸]페닐 메실레이트; 및
- [2119] 20. N-에틸-2,2-디클로로-1-메틸시클로프로판카르복사미드-2-(2,6-디클로로-알파, 알파, 알파-트리플루오로-p-톨릴)히드라존.

[2120] 상승작용적 혼합물

[2121] 화학식 1의 분자는 특정 활성 화합물과 함께 사용되어 상승작용적 혼합물 (여기서 화학식 1의 분자의 작용 방식과 비교하여 상기 화합물의 작용 방식은 동일하거나 유사하거나 상이함)을 형성할 수 있다. 작용 방식의 예로는 아세틸콜린에스테라제 억제제; 나트륨 채널 조절제; 키틴 생합성 억제제; GABA 및 글루타메이트-게이팅 클로라이드 채널 길항제; GABA 및 글루타메이트-게이팅 클로라이드 채널 효능제; 아세틸콜린 수용체 효능제; 아세틸콜린 수용체 길항제; MET I 억제제; Mg-자극 ATPase 억제제; 니코틴성 아세틸콜린 수용체; 중장 막 붕괴제; 산화성 인산화 붕괴제 및 리아노딘 수용체 (RyRs)가 포함되지만, 이에 제한되지 않는다. 일반적으로, 상승작용적 혼합물 중 화학식 1의 분자와 또 다른 화합물의 중량비는 약 10:1 내지 약 1:10, 또 다른 실시양태에서 약 5:1 내지 약 1:5, 및 또 다른 실시양태에서 약 3:1, 및 또 다른 실시양태에서 약 1:1이다.

[2122] 제제

[2123] 살충제는 순수한 형태로 적용하기에 별로 적합하지 않다. 통상적으로, 살충제가 적용, 취급, 수송, 저장의 용이성 및 최대 살충제 활성을 허용하는데 필요한 농도 및 적절한 형태로 사용될 수 있도록 다른 물질을 첨가하는 것이 필요하다. 따라서, 살충제는 예를 들어 미기, 농축 에멀전, 분진, 유화성 농축물, 혼중제, 겔, 과립, 마

이크로캡슐화제, 종자 처리제, 현탁 농축물, 유현탁액, 정제, 수용성 액체, 수분산성 과립 또는 건조 액상수화제, 습윤성 분말 및 초저부피 용액으로 제제화된다. 제제 유형에 관한 추가 정보는 문헌 ["Catalogue of Pesticide Formulation Types and International Coding System" Technical Monograph n° 2, 5th Edition by CropLife International (2002)]을 참조한다.

- [2124] 살충제는 매우 종종 이러한 살충제의 농축 제제로부터 제조된 수성 현탁액 또는 에멀전으로서 적용된다. 이러한 수용성, 수현탁성 또는 유화성 제제는, 통상적으로 습윤성 분말 또는 수분산성 과립으로 공지된 고체, 또는 통상적으로 유화성 농축물 또는 수성 현탁액으로 공지된 액체이다. 압축되어 수분산성 과립을 형성할 수 있는 습윤성 분말은 살충제, 담체 및 계면활성제의 친밀한 혼합물을 포함한다. 살충제의 농도는 통상적으로 약 10 중량% 내지 약 90 중량%이다. 담체는 통상적으로 아타폴라이트 점토, 몬모릴로나이트 점토, 규조토 또는 정제된 실리카이트 중에서 선택된다. 습윤성 분말의 약 0.5% 내지 약 10%를 구성하는 효과적인 계면활성제로는 숄론화 리그닌, 축합 나프탈렌술포네이트, 나프탈렌술포네이트, 알킬벤젠술포네이트, 알킬 술폰이트 및 비이온성 계면활성제, 예컨대 알킬 페놀의 에틸렌 옥사이드 부가물이 있다.
- [2125] 살충제의 유화성 농축물은, 편리한 농도의 살충제, 예컨대 수혼화성 용매이거나 수불혼화성 유기 용매와 유화제의 혼합물인 담체에 용해된 액체 1 리터당 약 50 내지 약 500 그램을 포함한다. 유용한 유기 용매는 방향족, 특히 크실렌 및 석유 분획, 특히 중질 방향족 나프타와 같은 석유의 고비점 나프탈렌 및 올레핀 부분을 포함한다. 또한, 다른 유기 용매, 예컨대 로진 유도체를 비롯한 테르펜계 용매, 지방족 케톤, 예컨대 시클로헥산, 및 복합 알콜, 예컨대 2-에톡시에탄올을 사용할 수 있다. 유화성 농축물에 적합한 유화제는 통상적인 음이온성 계면활성제 및 비이온성 계면활성제로부터 선택된다.
- [2126] 수성 현탁액은 수성 담체에 약 5 중량% 내지 약 50 중량% 범위의 농도로 분산된 수불용성 살충제의 현탁액을 포함한다. 현탁액은 살충제를 미세하게 분쇄하고, 이를 물 및 계면활성제로 구성된 담체 내로 격렬하게 혼합함으로써 제조된다. 또한, 무기 염 및 합성 또는 천연 검과 같은 성분을 첨가하여 수성 담체의 밀도 및 점도를 증가시킬 수 있다. 종종, 수성 혼합물을 제조하고 이를 샌드 밀, 볼 밀, 또는 피스톤-유형 균질화와 같은 도구로 균질화시킴으로써 살충제를 동시에 분쇄 및 혼합하는 것이 가장 효과적이다.
- [2127] 또한, 살충제는 토양에 적용하기에 특히 유용한 과립상 조성물로서 적용될 수 있다. 과립상 조성물은 통상적으로, 점토 또는 유사 물질을 포함하는 담체에 분산된 살충제를 약 0.5 중량% 내지 약 10 중량% 함유한다. 이러한 조성물은 통상적으로, 살충제를 적합한 용매에 용해시키고, 이를 약 0.5 내지 약 3 mm 범위의 적절한 입자 크기로 예비형성된 과립상 담체에 적용함으로써 제조된다. 또한, 이러한 조성물은, 담체 및 화합물의 도우 또는 페이스트를 제조하고 파쇄하고 건조시켜 목적하는 과립상 입자 크기를 얻음으로써 제제화될 수 있다.
- [2128] 살충제를 함유하는 분진은, 분말화된 형태의 살충제를 카울린 점토, 분쇄 화산암 등과 같은 적합한 분진성 농업용 담체와 친밀 혼합함으로써 제조된다. 분진은 적합하게는 약 1% 내지 약 10%의 살충제를 함유할 수 있다. 이는 분진 송풍 기계를 사용하여 종자 드레싱 또는 경엽 적용으로서 적용될 수 있다.
- [2129] 살충제를 적절한 유기 용매, 통상적으로 석유 오일, 예컨대 농업 화학에 널리 사용되는 분무 오일 중의 용액의 형태로 적용하는 것이 동등하게 실용적이다.
- [2130] 또한, 살충제는 에어로졸 조성물의 형태로 적용될 수 있다. 이러한 조성물에서, 살충제는, 압력-발생 추진제 혼합물인 담체에 용해되거나 분산된다. 에어로졸 조성물은, 혼합물이 분무화 밸브를 통해 분배되는 용기에 포장된다.
- [2131] 살충제 미끼는 살충제를 식품 또는 유인제 또는 둘 다와 혼합하는 경우에 형성된다. 해충이 미끼를 섭취하는 경우 해충은 살충제도 소비한다. 미끼는 과립, 젤, 액상수화제 분말, 액체 또는 고체의 형태를 취할 수 있다. 이들은 해충 은신처에 사용될 수 있다.
- [2132] 훈증제는 상대적으로 높은 증기압을 갖는 살충제이며, 따라서 토양 또는 폐쇄 공간에서 해충을 사멸시키기에 충분한 농도의 기체로서 존재할 수 있다. 훈증제의 독성은 그의 농도 및 노출 시간에 비례한다. 이들은 우수한 확산 능력을 특징으로 하며, 해충의 호흡기계에 침투하거나 또는 해충의 각피를 통해 흡수됨으로써 작용한다. 훈증제는 기체 차단 시트 하에, 기체 밀폐된 공간 또는 건물 내에서, 또는 특수 챔버 내에서 저장 산물 해충을 방제하기 위해 적용된다.
- [2133] 살충제는, 살충제 입자 또는 액적을 다양한 유형의 플라스틱 중합체에 현탁시킴으로써 마이크로캡슐화될 수 있다. 중합체의 화학을 변경시키거나 가공에서의 인자를 변화시킴으로써 다양한 크기, 용해도, 벽 두께 및 침투성 정도의 마이크로캡슐이 형성될 수 있다. 이들 인자는 활성 성분이 방출되는 속도를 좌우하고, 이는 다시 잔

류 성능, 작용 속도 및 제품 냄새에 영향을 미친다.

[2134] 오일 용액 농축물은, 용액 중에 살충제를 보유할 용매에 살충제를 용해시킴으로써 제조된다. 통상적으로, 살충제의 오일 용액은 용매 자체가 살충 작용을 갖고 외피의 왁스상 피복을 용해시켜 살충제의 흡수 속도를 증가시키기 때문에 다른 제제보다 빠르게 해충을 압도하고, 사멸시킨다. 오일 용액의 다른 이점으로는 보다 우수한 저장 안정성, 보다 우수한 틈새 침투성 및 지방성 표면에 대한 보다 우수한 부착성이 포함된다.

[2135] 또 다른 실시양태는 수중유 에멀전이며, 여기서 에멀전은 층상 액정 코팅이 각각 제공되고 수성 상에 분산되어 있는 유성 지방구를 포함하고, 여기서 각각의 유성 지방구는 농업상 활성인 하나 이상의 화합물을 포함하며, 개별적으로 (1) 하나 이상의 비이온성 친지성 표면-활성제, (2) 하나 이상의 비이온성 친수성 표면-활성제 및 (3) 하나 이상의 이온성 표면-활성제를 포함하는 단층 또는 소층으로 코팅되어 있고, 여기서 지방구는 평균 입자 직경이 800 나노미터 미만이다. 상기 실시양태에 대한 추가 정보는 미국 특허 공개 20070027034 (2007년 2월 1일 공개, 특허 출원 일련 번호 11/495,228)에 개시되어 있다. 사용의 용이성을 위해, 상기 실시양태는 "OIWE"로서 지칭될 것이다.

[2136] 추가 정보는 문헌 ["Insect Pest Management" 2nd Edition by D. Dent, copyright CAB International (2000)]을 참고한다. 추가로, 보다 상세한 정보는 문헌 ["Handbook of Pest Control - The Behavior, Life History, and Control of Household Pests" by Arnold Mallis, 9th Edition, copyright 2004 by GIE Media Inc.]을 참고한다.

[2137] **다른 제제 성분**

[2138] 일반적으로, 화학식 1에 개시된 분자가 제제에 사용되는 경우, 이러한 제제는 다른 성분을 또한 함유할 수 있다. 이들 성분으로는 습윤제, 산포제, 접착제, 침투제, 완충제, 격리제, 표류 감소제, 상용화제, 소포제, 세정제 및 유화제가 포함되지만, 이에 제한되지 않는다 (이는 비-포괄적이고 상호 비-배타적인 열거임). 몇몇 성분이 하기에 기재되어 있다.

[2139] 습윤제는, 액체에 첨가되었을 때 액체와 그가 산포된 표면 사이의 계면 장력을 감소시킴으로써 액체의 산포 또는 침투 능력을 증가시키는 물질이다. 습윤제는 농약 제제에서 하기 2가지 주요 기능을 위해 사용된다: 가공 및 제조 동안에 분말이 물에 습윤되는 속도를 증가시켜 가용성 액체를 위한 농축물 또는 현탁 농축물을 제조하는 기능; 및 제품을 분무 탱크에서 물과 혼합하는 동안 습윤성 분말의 습윤 시간을 감소시키고 물이 수분산성 과립 내로 침투하는 것을 개선시키는 기능. 습윤성 분말, 현탁 농축물 및 수분산성 과립 제제에 사용되는 습윤제의 예는 소듐 라우릴 술페이트; 소듐 디옥틸 술포숙시네이트; 알킬 페놀 에톡실레이트; 및 지방족 알콜 에톡실레이트이다.

[2140] 분산제는, 입자 표면 상에 흡착되어 입자의 분산 상태를 보존하고 입자들이 재응집되는 것을 방지하는 것을 보조하는 물질이다. 제조 동안 분산 및 현탁을 용이하게 하고, 분무 탱크에서 입자가 물에 재분산되는 것을 보장하기 위해, 농약 제제에 분산제를 첨가한다. 분산제는 습윤성 분말, 현탁 농축물 및 수분산성 과립에 널리 사용된다. 분산제로서 사용되는 계면활성제는, 입자 표면 상에 강하게 흡착되어 입자의 재응집에 대한 하전 또는 입체 장벽을 제공하는 능력을 갖는다. 가장 통상적으로 사용되는 계면활성제는 음이온성, 비이온성 또는 이들 두 유형의 혼합물이다. 습윤성 분말 제제의 경우, 가장 통상적인 분산제는 소듐 리그노술포네이트이다. 현탁 농축물의 경우, 소듐 나프탈렌 술포네이트 포름알데히드 축합물과 같은 다가 전해질을 사용하여 매우 우수한 흡착 및 안정화가 달성된다. 또한, 트리스티릴페놀 에톡실레이트 포스페이트 에스테르가 사용된다. 알킬아릴에틸렌 옥시드 축합물 및 EO-PO 블록 공중합체와 같은 비이온성 물질은 때때로 현탁 농축물을 위한 분산제로서 음이온성 물질과 조합된다. 최근에, 신규 유형의 매우 높은 분자량의 중합체 계면활성제가 분산제로서 개발된 바 있다. 이들은, '빗살형' 계면활성제의 '이'를 형성하는 수많은 에틸렌 옥시드 쇄 및 매우 긴 소수성 '백본'을 갖고 있다. 이들 고분자량 중합체는 소수성 백본이 입자 표면 상에 다수의 고정 지점을 갖고 있기 때문에 현탁 농축물에 매우 우수한 장기안정성을 제공할 수 있다. 농약 제제에 사용되는 분산제의 예로는 소듐 리그노술포네이트; 소듐 나프탈렌 술포네이트 포름알데히드 축합물; 트리스티릴페놀 에톡실레이트 포스페이트 에스테르; 지방족 알콜 에톡실레이트; 알킬 에톡실레이트; EO-PO 블록 공중합체; 및 그래프트 공중합체가 있다.

[2141] 유화제는 한 액체 상의 액적들의 또 다른 액체 상 중의 현탁을 안정화시키는 물질이다. 유화제가 없다면 두 액체는 2개의 불혼화성 액체 상으로 분리될 것이다. 가장 통상적으로 사용되는 유화제 블렌드는 12개 이상의 에틸렌 옥시드 단위를 갖는 지방족 알콜 또는 알킬페놀, 및 도데실벤젠술포산의 유용성 칼슘 염을 함유한다. 통상적으로, 8 내지 18의 친수성기-친지성기 균형 ("HLB") 값 범위가 우수한 안정 에멀전을 제공할 것이다. 에멀전

안정성은 때때로 소량의 EO-PO 블록 공중합체 계면활성제를 첨가함으로써 개선될 수 있다.

- [2142] 가용화제는 임계 미셀 농도 초과 농도에서 물 중에 미셀을 형성하는 계면활성제이다. 이어서, 미셀은 미셀의 소수성 부분 내부의 수불용성 물질을 용해시키거나 가용화시킬 수 있다. 가용화를 위해 통상적으로 사용되는 계면활성제의 유형은 비이온성 물질, 소르비탄 모노올레에이트, 소르비탄 모노올레에이트 에톡실레이트, 및 메틸 올레에이트 에스테르이다.
- [2143] 계면활성제는 때때로 단독으로, 또는 분무-탱크 믹스에 대한 보조제로서의 미네랄 또는 식물성 오일과 같은 다른 첨가제와 함께 사용되어 표적에 대한 살충제의 생물학적 성능을 개선시킨다. 생물증진을 위해 사용되는 계면활성제의 유형은 일반적으로 살충제의 특성 및 작용 방식에 따라 달라진다. 그러나, 이들은 종종 비이온성 물질, 예컨대 알킬 에톡실레이트; 선형 지방족 알콜 에톡실레이트; 지방족 아민 에톡실레이트이다.
- [2144] 농업 제제에서의 담체 또는 희석제는, 살충제에 첨가되어 필요한 농도의 생성물을 제공하는 물질이다. 담체는 통상적으로 흡수 능력이 높은 물질인 반면, 희석제는 통상적으로 흡수 능력이 낮은 물질이다. 담체 및 희석제는 분진, 습윤성 분말, 과립 및 수분산성 과립의 제제에 사용된다.
- [2145] 유기 용매는 주로 유화성 농축물, 수중유 에멀전, 유현탁액, 및 초저부피 제제에, 및 보다 낮은 정도로 과립상 제제에 사용된다. 때때로 용매의 혼합물이 사용된다. 용매의 제1 주요 군은 지방족 파라핀계 오일, 예컨대 케로센 또는 정제 파라핀이다. 제2 주요 군 (및 가장 통상적인 것)은 방향족 용매, 예컨대 크실렌 및 C9 및 C10 방향족 용매의 고분자량 분획을 포함한다. 제제가 물 중에 유화되는 경우, 살충제의 결정화를 방지하기 위해 염소화 탄화수소가 공용매로서 유용하다. 용해력을 증가시키기 위해 알콜이 때때로 공용매로서 사용된다. 다른 용매는 식물성 오일, 종자 오일, 및 식물성 및 종자 오일의 에스테르를 포함할 수 있다.
- [2146] 액체의 레올로지 또는 유동 특성을 개질하고, 분산된 입자 또는 액적의 분리 및 침강을 방지하기 위해, 현탁 농축물, 에멀전 및 유현탁액의 제제에서 주로 증점제 또는 겔화제가 사용된다. 증점제, 겔화제 및 침강방지제는 일반적으로 두 카테고리, 즉 수불용성 미립자 및 수용성 중합체에 속한다. 점토 및 실리카를 사용하여 현탁 농축물 제제를 제조할 수 있다. 이들 유형의 물질의 예로는 몬모릴로나이트, 벤토나이트, 규산알루미늄마그네슘 및 아타풀라이트가 포함되지만, 이에 제한되지 않는다. 다년간 수용성 폴리사카라이드가 증점제-겔화제로 사용되어 왔다. 가장 통상적으로 사용되는 폴리사카라이드의 유형은, 종자 및 해초의 천연 추출물, 또는 셀룰로스의 합성 유도체이다. 이들 유형의 물질의 예로는 구아 검; 로커스트빈 검; 카라기난; 알기네이트; 메틸 셀룰로스; 소듐 카르복시메틸 셀룰로스 (SCMC); 히드록시에틸 셀룰로스 (HEC)가 포함되지만, 이에 제한되지 않는다. 다른 유형의 침강방지제는 개질된 전분, 폴리아크릴레이트, 폴리비닐 알콜 및 폴리에틸렌 옥시드를 기재로 하는 것이다. 또 다른 우수한 침강 방지제는 크산탄 검이다.
- [2147] 미생물은 제제화된 생성물의 변질을 야기할 수 있다. 따라서, 그의 영향을 제거하거나 감소시키기 위해 보존제가 사용된다. 이러한 작용제의 예로는 프로피온산 및 그의 나트륨 염; 소르브산 및 그의 나트륨 또는 칼륨 염; 벤조산 및 그의 나트륨 염; p-히드록시벤조산 나트륨 염; 메틸 p-히드록시벤조에이트; 및 1,2-벤즈이소티아졸린-3-온 (BIT)이 포함되지만, 이에 제한되지 않는다.
- [2148] 계면활성제의 존재는 종종 제조 및 분무 탱크를 통한 적용시에 혼합 작업 동안 수계 제제에 거품형성을 야기한다. 거품형성 경향을 감소시키기 위해, 종종 제조 단계 동안 또는 병에 충전하기 전에 소포제를 첨가한다. 일반적으로, 두 유형의 소포제, 즉 실리콘 및 비-실리콘이 존재한다. 실리콘은 통상적으로 디메틸 폴리실록산의 수성 에멀전이며, 한편 비-실리콘 소포제는 수-불용성 오일, 예컨대 옥탄올 및 노난올 또는 실리카이다. 두 경우 모두에서, 소포제의 기능은 공기-물 계면에서 계면활성제를 제거하는 것이다.
- [2149] "그린" 작용제 (예를 들어, 보조제, 계면활성제, 용매)는 작물 보호 제제의 전체 환경 발자국을 감소시킬 수 있다. 그린 작용제는 생분해성이고 일반적으로 천연 및/또는 지속가능한 공급원, 예를 들어 식물 및 동물 공급원으로부터 유래된다. 구체적 예는 식물성 오일, 종자 오일 및 그의 에스테르, 또한 알콕실화 알킬 폴리글루코시드이다.
- [2150] 추가 정보에 대해서는, 문헌 ["Chemistry and Technology of Agrochemical Formulations" edited by D.A. Knowles, copyright 1998 by Kluwer Academic Publishers]을 참조한다. 또한, 문헌 ["Insecticides in Agriculture and Environment - Retrospects and Prospects" by A.S. Perry, I. Yamamoto, I. Ishaaya, and R. Perry, copyright 1998 by Springer-Verlag]을 참조한다.
- [2151] **해충**

- [2152] 일반적으로, 화학식 1의 분자는 해충, 예를 들어 딱정벌레, 집게벌레, 바퀴벌레, 파리, 진딧물, 깍지벌레, 가루이, 매미충, 개미, 말벌, 흰개미, 나방, 나비, 이, 방아깨비, 메뚜기, 귀뚜라미, 벼룩, 총채벌레, 좀, 응애, 진드기, 선충 및 결합류를 방제하는데 사용될 수 있다.
- [2153] 또 다른 실시양태에서, 화학식 1의 분자는 **선형동물문** 및/또는 **절지동물문**의 해충을 방제하는데 사용될 수 있다.
- [2154] 또 다른 실시양태에서, 화학식 1의 분자는 **협각아문**, **다시아문** 및/또는 **육각아문**의 해충을 방제하는데 사용될 수 있다.
- [2155] 또 다른 실시양태에서, 화학식 1의 분자는 **거미강**, **결합강** 및/또는 **곤충강**의 해충을 방제하는데 사용될 수 있다.
- [2156] 또 다른 실시양태에서, 화학식 1의 분자는 **이아목**의 해충을 방제하는데 사용될 수 있다. 특정한 속의 비-포괄적 목록에는 헤마토피누스(*Haematopinus*) 종, 호플로플레우라(*Hoplopleura*) 종, 리노그나투스(*Linognathus*) 종, 페디쿨루스(*Pediculus*) 종 및 폴리플락스(*Polyplax*) 종이 포함되지만, 이에 제한되지 않는다. 특정한 종의 비-포괄적 목록에는 헤마토피누스 아시니(*Haematopinus asini*), 헤마토피누스 수이스(*Haematopinus suis*), 리노그나투스 세토수스(*Linognathus setosus*), 리노그나투스 오빌루스(*Linognathus ovillus*), 페디쿨루스 휴마누스 카피티스(*Pediculus humanus capitis*), 페디쿨루스 휴마누스 휴마누스(*Pediculus humanus humanus*) 및 프티루스 푸비스(*Pthirus pubis*)가 포함되지만, 이에 제한되지 않는다.
- [2157] 또 다른 실시양태에서, 화학식 1의 분자는 **딱정벌레목**의 해충을 방제하는데 사용될 수 있다. 특정한 종의 비-포괄적 목록에는 아칸토셀리데스(*Acanthoscelides*) 종, 아그리오테스(*Agriotes*) 종, 안토노무스(*Anthonomus*) 종, 아피온(*Apion*) 종, 아포고니아(*Apogonia*) 종, 아울라코포라(*Aulacophora*) 종, 브루쿠스(*Bruchus*) 종, 세로스테르나(*Cerosterna*) 종, 세로토마(*Cerotoma*) 종, 세우토린쿠스(*Ceutorhynchus*) 종, 카에톡네마(*Chaetocnema*) 종, 콜라스피스(*Colaspis*) 종, 크테니세라(*Ctenicera*) 종, 쿠르쿨리오(*Curculio*) 종, 시클로세팔라(*Cyclocephala*) 종, 디아브로티카(*Diabrotica*) 종, 히페라(*Hypera*) 종, 이프스(*Ips*) 종, 릭투스(*Lyctus*) 종, 메가셀리스(*Megascelis*) 종, 멜리게테스(*Meligethes*) 종, 오티오린쿠스(*Otiorhynchus*) 종, 판토모루스(*Pantomorus*) 종, 필로파가(*Phyllophaga*) 종, 필로트레타(*Phyllotreta*) 종, 리조트로구스(*Rhizotrogus*) 종, 린키테스(*Rhynchites*) 종, 린코포루스(*Rhynchophorus*) 종, 스콜리투스(*Scolytus*) 종, 스펜오포루스(*Sphenophorus*) 종, 시토피루스(*Sitophilus*) 종 및 트리볼리움(*Tribolium*) 종이 포함되지만, 이에 제한되지 않는다. 특정한 종의 비-포괄적 목록에는 아칸토셀리데스 오브텍투스(*Acanthoscelides obtectus*), 아그릴루스 플라니펜니스(*Agrilus planipennis*), 아노플로포라 글라브리펜니스(*Anoplophora glabripennis*), 안토노무스 그란디스(*Anthonomus grandis*), 아타에니우스 스프레틀루스(*Ataenius spretulus*), 아토마리아 리네아리스(*Atomaria linearis*), 보티노테레스 폰크티벤트리스(*Bothynoderes punctiventris*), 브루쿠스 피소룸(*Bruchus pisorum*), 칼로소브루쿠스 마쿨라투스(*Callosobruchus maculatus*), 카르포필루스 헤미프테루스(*Carpophilus hemipterus*), 카시다 비타타(*Cassida vittata*), 세로토마 트리푸르카타(*Cerotoma trifurcata*), 세우토린쿠스 아시밀리스(*Ceutorhynchus assimilis*), 세우토린쿠스 나피(*Ceutorhynchus napi*), 코노테루스 스칼라리스(*Conoderus scalaris*), 코노테루스 스티그모수스(*Conoderus stigmosus*), 코노트라켈루스 네누파르(*Conotrachelus nenuphar*), 코티니스 니티다(*Cotinis nitida*), 크리오세리스 아스파라기(*Crioceris asparagi*), 크립토레스테스 페루기네우스(*Cryptolestes ferrugineus*), 크립토레스테스 푸실루스(*Cryptolestes pusillus*), 크립토레스테스 투르시쿠스(*Cryptolestes turcicus*), 실린드로코프투루스 아드스페르수스(*Cylindrocopturus adspersus*), 데포라우스 마르기나투스(*Deporaus marginatus*), 데르메스테스 라르다리우스(*Dermestes lardarius*), 데르메스테스 마쿨라투스(*Dermestes maculatus*), 에필라크나 바리베스티스(*Epilachna varivestis*), 파우스티누스 쿠바에(*Faustinus cubae*), 힐로비우스 팔레스(*Hylobius pales*), 히페라 포스티카(*Hypera postica*), 히포테네무스 함페이(*Hypothenemus hampei*), 라시오더마 세리코르네(*Lasioderma serricorne*), 렙티노타르사 데셈리네아타(*Leptinotarsa decemlineata*), 리오게니스 푸스쿠스(*Liogenys fuscus*), 리오게니스 수투랄리스(*Liogenys suturalis*), 리소로프트루스 오리조필루스(*Lissorhoptrus oryzophilus*), 마에콜라스피스 줄리베티(*Maecolaspis jolivetii*), 멜라노투스 콤무니스(*Melanotus communis*), 멜리게테스 아에네우스(*Meligethes aeneus*), 멜로론타 멜로론타(*Melolontha melolontha*), 오베레아 브레비스(*Oberea brevis*), 오베레아 리네아리스(*Oberea linearis*), 오리테스 리노세로스(*Oryctes rhinoceros*), 오리자에필루스 메르카토르(*Oryzaephilus mercator*), 오리자에필루스 수리나멘시스(*Oryzaephilus surinamensis*), 오울레마 멜라노푸스(*Oulema melanopus*), 오울레마 오리자에(*Oulema oryzae*), 필로파가 쿠야바나(*Phyllophaga cuyabana*), 포필리아 자포니카(*Popillia japonica*), 프로스테파누스 트룬카투스(*Prostephanus truncatus*), 리조페르타 도미니카(*Rhyzopertha dominica*), 시토나 리

네아투스(*Sitona lineatus*), 시토피루스 그라나리우스(*Sitophilus granarius*), 시토피루스 오리자에(*Sitophilus oryzae*), 시토피루스 제아마이스(*Sitophilus zeamais*), 스테고비움 파니세움(*Stegobium paniceum*), 트리볼리움 카스타네움(*Tribolium castaneum*), 트리볼리움 콘푸숨(*Tribolium confusum*), 트로고더마 바리아빌레(*Trogoderma variabile*) 및 자브루스 테네브리오이데스(*Zabrus tenebrioides*)가 포함되지만, 이에 제한되지 않는다.

[2158] 또 다른 실시양태에서, 화학식 1의 분자는 **집계벌레목**의 해충을 방제하는데 사용될 수 있다.

[2159] 또 다른 실시양태에서, 화학식 1의 분자는 **바퀴목**의 해충을 방제하는데 사용될 수 있다. 특정한 종의 비-포괄적 목록에는 블라텔라 게르마니카(*Blattella germanica*), 블라타 오리엔탈리스(*Blatta orientalis*), 파르코블라타 펜실바니카(*Parcoblatta pennsylvanica*), 페리플라네타 아메리카나(*Periplaneta americana*), 페리플라네타 아우스트랄라시아에(*Periplaneta australasiae*), 페리플라네타 브룬네아(*Periplaneta brunnea*), 페리플라네타 풀리지노사(*Periplaneta fuliginosa*), 피크노셀루스 수리나멘시스(*Pycnoscelus surinamensis*) 및 수펠라 롱기팔파(*Supella longipalpa*)가 포함되지만, 이에 제한되지 않는다.

[2160] 또 다른 실시양태에서, 화학식 1의 분자는 **파리목**의 해충을 방제하는데 사용될 수 있다. 특정한 속의 비-포괄적 목록에는 아에데스(*Aedes*) 종, 아그로미자(*Agromyza*) 종, 아나스트레파(*Anastrepha*) 종, 아노펠레스(*Anopheles*) 종, 박트로세라(*Bactrocera*) 종, 세라티티스(*Ceratitis*) 종, 크리썅스(*Chrysops*) 종, 코클리오미아(*Cochliomyia*) 종, 콘타리니아(*Contarinia*) 종, 쿨렉스(*Culex*) 종, 다시네우라(*Dasineura*) 종, 델리아(*Delia*) 종, 드로소필라(*Drosophila*) 종, 판니아(*Fannia*) 종, 힐레미아(*Hylemyia*) 종, 리리오미자(*Liriomyza*) 종, 무스카(*Musca*) 종, 포르비아(*Phorbia*) 종, 타바누스(*Tabanus*) 종, 및 티풀라(*Tipula*) 종이 포함되지만, 이에 제한되지 않는다. 특정한 종의 비-포괄적 목록에는 아그로미자 프론텔라(*Agromyza frontella*), 아나스트레파 수스펜사(*Anastrepha suspensa*), 아나스트레파 루덴스(*Anastrepha ludens*), 아나스트레파 오블리카(*Anastrepha obliqua*), 박트로세라 쿠쿠르비타에(*Bactrocera cucurbitae*), 박트로세라 도르살리스(*Bactrocera dorsalis*), 박트로세라 인바덴스(*Bactrocera invadens*), 박트로세라 조나타(*Bactrocera zonata*), 세라티티스 카피타타(*Ceratitis capitata*), 다시네우라 브라시카에(*Dasineura brassicae*), 델리아 플라투라(*Delia platura*), 판니아 카니쿨라리스(*Fannia canicularis*), 판니아 스칼라리스(*Fannia scalaris*), 가스테로필루스 인테스티날리스(*Gasterophilus intestinalis*), 그라실리아 페르세아에(*Gracillia perseae*), 헤마토비아 이리탄스(*Haematobia irritans*), 히포더마 리네아툼(*Hypoderma lineatum*), 리리오미자 브라시카에(*Liriomyza brassicae*), 멜로파구스 오비누스(*Melophagus ovinus*), 무스카 아우툼날리스(*Musca autumnalis*), 무스카 도메스티카(*Musca domestica*), 오에스트루스 오비스(*Oestrus ovis*), 오시넬라 프리트(*Oscinella frit*), 페고미아 베타에(*Pegomya betae*), 프실라 로사(*Psila rosae*), 라골레티스 세라시(*Rhagoletis cerasi*), 라골레티스 포모넬라(*Rhagoletis pomonella*), 라골레티스 멘다스(*Rhagoletis mendax*), 시토디플로시스 모셀라나(*Sitodiplosis mosellana*) 및 스토목시스 칼시트란스(*Stomoxys calcitrans*)가 포함되지만, 이에 제한되지 않는다.

[2161] 또 다른 실시양태에서, 화학식 1의 분자는 **노린재목**의 해충을 방제하는데 사용될 수 있다. 특정한 속의 비-포괄적 목록에는 아델게스(*Adelges*) 종, 아울라카스피스(*Aulacaspis*) 종, 아프로포라(*Aphrophora*) 종, 아피스(*Aphis*) 종, 베미시아(*Bemisia*) 종, 세로플라스테스(*Ceroplastes*) 종, 키오나스피스(*Chionaspis*) 종, 크리썅팔루스(*Chrysomphalus*) 종, 코쿠스(*Coccus*) 종, 엠포아스카(*Empoasca*) 종, 레피도사페스(*Lepidosaphes*) 종, 라기노토무스(*Lagynotomus*) 종, 리구스(*Lygus*) 종, 마크로시퐁(*Macrosiphum*) 종, 네포테티스(*Nephotettix*) 종, 네자라(*Nezara*) 종, 필라에누스(*Philaenus*) 종, 피토코리스(*Phytocoris*) 종, 피에조도루스(*Piezodorus*) 종, 플라노코쿠스(*Planococcus*) 종, 슈도코쿠스(*Pseudococcus*) 종, 로팔로시퐁(*Rhopalosiphum*) 종, 사이세티아(*Saissetia*) 종, 테리오아피스(*Therioaphis*) 종, 토크메엘라(*Toumeyella*) 종, 톡소프테라(*Toxoptera*) 종, 트리알레우로데스(*Trialeurodes*) 종, 트리아토마(*Triatoma*) 종 및 우나스피스(*Unaspis*) 종이 포함되지만, 이에 제한되지 않는다. 특정한 종의 비-포괄적 목록에는 아크로스테르눔 힐라레(*Acrosternum hilare*), 아시르토시퐁 피썸(*Acyrtosiphon pisum*), 알레이로데스 프롤레텔라(*Aleyrodes proletella*), 알레우로디쿠스 디스페르수스(*Aleurodicus dispersus*), 알레우로트릭수스 플로코쿠스(*Aleurothrixus floccosus*), 암라스카 비구툴라 비구툴라(*Amrasca biguttula biguttula*), 아오니디엘라 아우란티아(*Aonidiella aurantii*), 아피스 고시피이(*Aphis gossypii*), 아피스 글리시네스(*Aphis glycines*), 아피스 포미(*Aphis pomi*), 아울라코르툼 솔라니(*Aulacorthum solani*), 베미시아 아르겐티폴리이(*Bemisia argentifolii*), 베미시아 타바시(*Bemisia tabaci*), 블리수스 류코프테루스(*Blissus leucopterus*), 브라키코리넬라 아스파라기(*Brachycorynella asparagi*), 브레베니아 레히(*Brevinnia rehi*), 브레비코리네 브라시카에(*Brevicoryne brassicae*), 칼로코리스 노르베기쿠스(*Calocoris*

norvegicus), 세로플라스테스 루벤스(*Ceroplastes rubens*), 시멕스 헤미프테루스(*Cimex hemipterus*), 시멕스 렉툴라리우스(*Cimex lectularius*), 다그베르투스 파시아투스(*Dagbertus fasciatus*), 디켈롭스 푸르카투스(*Dichelops furcatus*), 디우라피스 녹시아(*Diuraphis noxia*), 디아포리나 시트리(*Diaphorina citri*), 디사피스 플란타기네아(*Dysaphis plantaginea*), 디스테르쿠스 수투렐루스(*Dysdercus suturellus*), 에데사 메디타분다(*Edessa mediatunda*), 에리오소마 라니게룸(*Eriosoma lanigerum*), 유리가스터 마우라(*Eurygaster maura*), 유쉬스투스 헤로스(*Euschistus heros*), 유쉬스투스 세르부스(*Euschistus servus*), 헬로펠티스 안토니이(*Helopeltis antonii*), 헬로펠티스 테이보라(*Helopeltis theivora*), 이세리아 푸르카시(*Icerya purchasi*), 이디오스코푸스 니티둘루스(*Idioscopus nitidulus*), 라오델팍스 스트리아텔루스(*Laodelphax striatellus*), 랩토코리사 오라토리우스(*Leptocoris oratorius*), 랩토코리사 바리코르니스(*Leptocoris varicornis*), 리구스 헤스페루스(*Lygus hesperus*), 마코넬리코쿠스 히르수투스(*Macronellus hirsutus*), 마크로시폼 유포르비아에(*Macrosiphum euphorbiae*), 마크로시폼 그라나리움(*Macrosiphum granarium*), 마크로시폼 로사에(*Macrosiphum rosae*), 마크로스테레스 쿼드릴리네아투스(*Macrostelus quadrilineatus*), 마하나르바 프림비올라타(*Mahanarva frimbiolata*), 메토폴로피움 디로둠(*Metopolophium dirhodum*), 믹티스 롱기코르니스(*Mictis longicornis*), 미주스 페르시아에(*Myzus persicae*), 네포테티스 신크티페스(*Nephotettix cinctipes*), 뉴로콜푸스 롱기로스트리스(*Neurocolpus longirostris*), 네자라 비리둘라(*Nezara viridula*), 닐라파르바타 루겐스(*Nilaparvata lugens*), 파를라토리아 페르간디이(*Parlatoria pergandii*), 파를라토리아 지지피(*Parlatoria ziziphi*), 페레그리누스 마이디스(*Peregrinus maidis*), 필록세라 비티폴리아에(*Phylloxera vitifoliae*), 피소케르메스 피세아에(*Physokermes piceae*), 피토코리스 칼리포르니쿠스(*Phytocoris californicus*), 피토코리스 렐라티부스(*Phytocoris relativus*), 피에조도루스 구일디니이(*Piezodorus guildinii*), 포에실로카프수스 리네아투스(*Poecilocus lineatus*), 프살루스 바시니콜라(*Psallus vaccinicola*), 슈다시스타 페르세아에(*Pseudacysta perseae*), 슈도코쿠스 브레비페스(*Pseudococcus brevipes*), 쿼드라스피디오투스 페르니시오수스(*Quadrastidiotus perniciosus*), 로팔로시폼 마이디스(*Rhopalosiphum maidis*), 로팔로시폼 파디(*Rhopalosiphum padi*), 사이세티아 올레아에(*Saissetia oleae*), 스캅토코리스 카스타네아(*Scaptocoris castanea*), 쉬자피스 그라미눔(*Schizaphis graminum*), 시토비온 아베나에(*Sitobion avenae*), 소가텔라 푸르시페라(*Sogatella furcifera*), 트리알레우로데스 바포라리오룸(*Trialetrodes vaporariorum*), 트리알레우로데스 아부틸로네우스(*Trialetrodes abutiloneus*), 우나스피스 야노넨시스(*Unaspis yanonensis*) 및 줄리아 엔트레리리아나(*Zulia entrerriana*)가 포함되지만, 이에 제한되지 않는다.

[2162]

또 다른 실시양태에서, 화학식 1의 분자는 **막시목**의 해충을 방제하는데 사용될 수 있다. 특정한 속의 비-포괄적 목록에는 아크로미르멕스(*Acromyrmex*) 종, 아타(*Atta*) 종, 캄포노투스(*Camponotus*) 종, 디프리콘(*Diprion*) 종, 포르미카(*Formica*) 종, 모노모리움(*Monomorium*) 종, 네오디프리콘(*Neodiprion*) 종, 포고노미르멕스(*Pogonomyrmex*) 종, 폴리스테스(*Polistes*) 종, 솔레놉시스(*Solenopsis*) 종, 베스푸라(*Vespula*) 종 및 크실로코파(*Xylocopa*) 종이 포함되지만, 이에 제한되지 않는다. 특정한 종의 비-포괄적 목록에는 아탈리아 로사에(*Athalia rosae*), 아타 텍사나(*Atta texana*), 이리도미르멕스 휴밀리스(*Iridomyrmex humilis*), 모노모리움 미니움(*Monomorium minimum*), 모노모리움 파라오니스(*Monomorium pharaonis*), 솔레놉시스 인빅타(*Solenopsis invicta*), 솔레놉시스 게미니타(*Solenopsis geminata*), 솔레놉시스 몰레스타(*Solenopsis molesta*), 솔레놉시스 리크테리(*Solenopsis richteri*), 솔레놉시스 크실로니(*Solenopsis xyloni*) 및 타피노마 세실레(*Tapinoma sessile*)가 포함되지만, 이에 제한되지 않는다.

[2163]

또 다른 실시양태에서, 화학식 1의 분자는 **원개미목**의 해충을 방제하는데 사용될 수 있다. 특정한 속의 비-포괄적 목록에는 코프토테르메스(*Coptotermes*) 종, 코르니테르메스(*Cornitermes*) 종, 크립토테르메스(*Cryptotermes*) 종, 헤테로테르메스(*Heterotermes*) 종, 칼로테르메스(*Kaloterme*) 종, 인시시테르메스(*Incisitermes*) 종, 마크로테르메스(*Macrotermes*) 종, 마르기니테르메스(*Marginitermes*) 종, 마이크로세로테르메스(*Microcerotermes*) 종, 프로코르니테르메스(*Procornitermes*) 종, 레티쿨리테르메스(*Reticulitermes*) 종, 슈도리노테르메스(*Schedorhinotermes*) 종 및 주테르몹시스(*Zootermopsis*) 종이 포함되지만, 이에 제한되지 않는다. 특정한 종의 비-포괄적 목록에는 코프토테르메스 쿠르비그나투스(*Coptotermes curvignathus*), 코프토테르메스 프렌키(*Coptotermes frenchi*), 코프토테르메스 포르모사누스(*Coptotermes formosanus*), 헤테로테르메스 아우레우스(*Heterotermes aureus*), 마이크로테르메스 오베시(*Microtermes obesi*), 레티쿨리테르메스 바니올렌시스(*Reticulitermes banyulensis*), 레티쿨리테르메스 그라세이(*Reticulitermes grassei*), 레티쿨리테르메스 플라비페스(*Reticulitermes flavipes*), 레티쿨리테르메스 하게니(*Reticulitermes hageni*), 레티쿨리테르메스 헤스페루스(*Reticulitermes hesperus*), 레티쿨리테르메스 산토넨시스(*Reticulitermes santonensis*), 레티쿨리테르메스 스페라투스(*Reticulitermes speratus*), 레티쿨리테르메스 티비알리스(*Reticulitermes tibialis*) 및

레티쿨리테르메스 비르기니쿠스(*Reticulitermes virginicus*)가 포함되지만, 이에 제한되지 않는다.

[2164]

또 다른 실시양태에서, 화학식 1의 분자는 **인시목의** 해충을 방제하는데 사용될 수 있다. 특정한 속의 비-포괄적 목록에는 아독소피에스(*Adoxophyes*) 종, 아그로티스(*Agrotis*) 종, 아르기로타에니아(*Argyrotaenia*) 종, 카코에시아(*Cacoecia*) 종, 칼로프틸리아(*Caloptilia*) 종, 킬로(*Chilo*) 종, 크리소데익시스(*Chrysodeixis*) 종, 콜리아스(*Colias*) 종, 크람부스(*Crambus*) 종, 디아파니아(*Diaphania*) 종, 디아트라에아(*Diatraea*) 종, 에아리아스(*Earias*) 종, 에페스티아(*Ephestia*) 종, 에피메시스(*Epimecis*) 종, 펠티아(*Feltia*) 종, 고르티나(*Gortyna*) 종, 헬리코베르파(*Helicoverpa*) 종, 헬리오티스(*Heliothis*) 종, 인다르벨라(*Indarbela*) 종, 리토콜레티스(*Lithocolletis*) 종, 록사그로티스(*Loxagrotis*) 종, 말라코소마(*Malacosoma*) 종, 페리드로마(*Peridroma*) 종, 필로노릭테르(*Phyllonorycter*) 종, 슈달레티아(*Pseudaletia*) 종, 세사미아(*Sesamia*) 종, 스포도프테라(*Spodoptera*) 종, 시난테돈(*Synanthedon*) 종 및 이포노메우타(*Yponomeuta*) 종이 포함되지만, 이에 제한되지 않는다. 특정한 종의 비-포괄적 목록에는 아카에아 자나타(*Achaea janata*), 아독소피에스 오라나(*Adoxophyes orana*), 아그로티스 입실론(*Agrotis ipsilon*), 알라바마 아르길라세아(*Alabama argillacea*), 아모르비아 쿠네아나(*Amorbia cuneana*), 아미엘로이스 트란시텔라(*Amyelois transitella*), 아나캄프토데스 테펙타리아(*Anacamptodes defectaria*), 아나르시아 리네아텔라(*Anarsia lineatella*), 아노미스 사불리페라(*Anomis sabulifera*), 안티카르시아 겐마탈리스(*Anticarsia gemmatilis*), 아르킵스 아르기로스펠라(*Archips argyrospila*), 아르킵스 로사나(*Archips rosana*), 아르기로타에니아 시트라나(*Argyrotaenia citrana*), 아우토그라파 감마(*Autographa gamma*), 보나고타 크라나오데스(*Bonagota cranaodes*), 보르보 신나라(*Borbo cinnara*), 부쿨라트릭스 투르베리엘라(*Bucculatrix thurberiella*), 카푸아 레티쿨라나(*Capua reticulana*), 카르포시나 니폰넨시스(*Carposina niponensis*), 클루메티아 트란스베르사(*Chlumetia transversa*), 코리스토네우라 로사세아나(*Choristoneura rosaceana*), 크나팔로크로시스 메디날리스(*Cnaphalocrocis medinalis*), 코노포모르파 크라멜렐라(*Conopomorpha cramerella*), 코수스 코수스(*Cossus cossus*), 시디아 카리아나(*Cydia caryana*), 시디아 푸네브라나(*Cydia funebrana*), 시디아 몰레스타(*Cydia molesta*), 시디아 니그리카나(*Cydia nigricana*), 시디아 포모넬라, 다르나 디둑타(*Darna diducta*), 디아트라에아 사카랄리스(*Diatraea saccharalis*), 디아트라에아 그란디오셀라(*Diatraea grandiosella*), 에아리아스 인술라나(*Earias insulana*), 에아리아스 비텔라(*Earias vittella*), 엑디톨로파 아우란티아눔(*Ecdytolopha aurantianum*), 엘라스모팔푸스 리그노셀루스(*Elasmopalpus lignosellus*), 에페스티아 카우텔라(*Ephestia cautella*), 에페스티아 엘루텔라(*Ephestia elutella*), 에페스티아 쿠에니엘라(*Ephestia kuehniella*), 에피노티아 아포레마(*Epinotia aporema*), 에피피아스 포스트비타나(*Epiphyas postvittana*), 에리오노타 트락스(*Erionota thrax*), 유포에실리아 암비구엘라(*Eupoecilia ambiguella*), 욱소아 아옥실리아리스(*Euxoa auxiliaris*), 그라폴리타 몰레스타(*Grapholita molesta*), 헤딜렐타 인디카타(*Hedylepta indicata*), 헬리코베르파 아르미게라(*Helicoverpa armigera*), 헬리코베르파 제아(*Helicoverpa zea*), 헬리오티스 비레센스(*Heliothis virescens*), 헬룰라 운달리스(*Hellula undalis*), 케이페리아 리코페르시셀라(*Keiferia lycopersicella*), 류시노데스 오르보날리스(*Leucinodes orbonalis*), 류코프테라 코페엘라(*Leucoptera coffeella*), 류코프테라 말리폴리엘라(*Leucoptera malifoliella*), 로베시아 보트라나(*Lobesia botrana*), 록사그로티스 알비코스타(*Loxagrotis albicosta*), 리만트리아 디스파르(*Lymantria dispar*), 리오네티아 클레르켈라(*Lyonetia clerkella*), 마하세나 코르베티(*Mahasena corbeti*), 마메스트라 브라시카에(*Mamestra brassicae*), 마루카 테스트랄리스(*Maruca testulalis*), 메티사 플라나(*Metisa plana*), 미뎀나 유니퐁크타(*Mythimna unipuncta*), 네오류시노데스 엘레간탈리스(*Neoleucinodes elegantalis*), 님폴라 데퐁크탈리스(*Nymphula depunctalis*), 오페로프테라 브루마타(*Operophtera brumata*), 오스트리니아 누빌랄리스(*Ostrinia nubilalis*), 옥시디아 베술리아(*Oxydia vesulia*), 판데미스 세라사나(*Pandemis cerasana*), 판데미스 헤파라나(*Pandemis heparana*), 파필리오 데모도쿠스(*Papilio demodocus*), 펙티노포라 고시오펠라(*Pectinophora gossypiella*), 페리드로마 사우시아(*Peridroma saucia*), 페리류코프테라 코페엘라(*Perileucoptera coffeella*), 프토리마에아 오페르쿨렐라(*Phthorimaea operculella*), 필록니스티스 시트렐라(*Phyllocnistis citrella*), 피에리스 라파에(*Pieris rapae*), 플라티페나 스카브라(*Plathypena scabra*), 플로디아 인테르퐁크텔라(*Plodia interpunctella*), 플루텔라 크실로스텔라(*Plutella xylostella*), 폴리크로시스 비테아나(*Polychrosis viteana*), 프라이스 엔도카르파(*Prays endocarpa*), 프라이스 올레아에(*Prays oleae*), 슈달레티아 유니퐁크타(*Pseudaletia unipuncta*), 슈도플루시아 인클루덴스(*Pseudoplusia includens*), 라키펠루시아 누(*Rachiplusia nu*), 시르포파가 인세르툴라스(*Scirpophaga incertulas*), 세사미아 인페렌스(*Sesamia inferens*), 세사미아 노나그리오이데스(*Sesamia nonagrioides*), 세토라 니텐스(*Setora nitens*), 시토티로가 세레알렐라(*Sitotroga cerealella*), 스파르가노티스 필레리아나(*Sparganothis pilleriana*), 스포도프테라 엑시구아(*Spodoptera exigua*), 스포도프테라 프루기페르다(*Spodoptera frugiperda*), 스포도프테라 에리다니아(*Spodoptera*

eridania), 테클라 바실리데스(*Thecla basilides*), 티네올라 비셀리엘라(*Tineola bisselliella*), 트리코플루시아 니(*Trichoplusia ni*), 투타 압솔루타(*Tuta absoluta*), 제우제라 코페아에(*Zeuzera coffeae*) 및 제우제라 피리나(*Zeuzera pyrina*)가 포함되지만, 이에 제한되지 않는다.

[2165]

또 다른 실시양태에서, 화학식 1의 분자는 **털이목**의 해충을 방제하는데 사용될 수 있다. 특정한 속의 비-포괄적 목록에는 아나티콜라(*Anaticola*) 종, 보비콜라(*Bovicola*) 종, 켈로피스테스(*Chelopistes*) 종, 고니오데스(*Goniodes*) 종, 메나칸투스(*Menacanthus*) 종 및 트리코덱테스(*Trichodectes*) 종이 포함되지만, 이에 제한되지 않는다. 특정한 종의 비-포괄적 목록에는 보비콜라 보비스(*Bovicola bovis*), 보비콜라 카프라에(*Bovicola caprae*), 보비콜라 오비스(*Bovicola ovis*), 켈로피스테스 멜레아그리디스(*Chelopistes meleagridis*), 고니오데스 디시밀리스(*Goniodes dissimilis*), 고니오데스 기가스(*Goniodes gigas*), 메나칸투스 스트라미네우스(*Menacanthus stramineus*), 메노폰 갈리나에(*Menopon gallinae*) 및 트리코덱테스 카니스(*Trichodectes canis*)가 포함되지만, 이에 제한되지 않는다.

[2166]

또 다른 실시양태에서, 화학식 1의 분자는 **메뚜기목**의 해충을 방제하는데 사용될 수 있다. 특정한 속의 비-포괄적 목록에는 멜라노플루스(*Melanoplus*) 종 및 프테로필라(*Pterophylla*) 종이 포함되지만, 이에 제한되지 않는다. 특정한 종의 비-포괄적 목록에는 아나브루스 심플렉스(*Anabrus simplex*), 그릴로탈파 아프리카나(*Gryllotalpa africana*), 그릴로탈파 아우스트랄리스(*Gryllotalpa australis*), 그릴로탈파 브라키프레타(*Gryllotalpa brachyptera*), 그릴로탈파 헥사닥틸라(*Gryllotalpa hexadactyla*), 로쿠스타 미그라토리아(*Locusta migratoria*), 마이크로센트룸 레티네르베(*Microcentrum retinerve*), 쉬스토세르카 그레가리아(*Schistocerca gregaria*) 및 스쿠데리아 푸르카타(*Scudderia furcata*)가 포함되지만, 이에 제한되지 않는다.

[2167]

또 다른 실시양태에서, 화학식 1의 분자는 **벼룩목**의 해충을 방제하는데 사용될 수 있다. 특정한 종의 비-포괄적 목록에는 세라토피루스 갈리나에(*Ceratophyllus gallinae*), 세라토피루스 니거(*Ceratophyllus niger*), 크테노세팔리데스 카니스(*Ctenocephalides canis*), 크테노세팔리데스 펠리스(*Ctenocephalides felis*) 및 풀렉스 이리탄스(*Pulex irritans*)가 포함되지만, 이에 제한되지 않는다.

[2168]

또 다른 실시양태에서, 화학식 1의 분자는 **총채벌레목**의 해충을 방제하는데 사용될 수 있다. 특정한 속의 비-포괄적 목록에는 칼리오텍스(*Caliothrips*) 종, 프란클리니엘라(*Frankliniella*) 종, 시르토텍스(*Scirtothrips*) 종 및 트립스(*Thrips*) 종이 포함되지만, 이에 제한되지 않는다. 특정한 종의 비-포괄적 목록에는 프란클리니엘라 푸스카(*Frankliniella fusca*), 프란클리니엘라 옥시덴탈리스(*Frankliniella occidentalis*), 프란클리니엘라 스클트제이(*Frankliniella schultzei*), 프란클리니엘라 윌리엄시(*Frankliniella williamsi*), 헬리오텍스 헤모로이달리스(*Heliothrips haemorrhoidalis*), 리피포르트립스 크루엔타투스(*Rhipiphorothrips cruentatus*), 시르토텍스 시트리(*Scirtothrips citri*), 시르토텍스 도르살리스(*Scirtothrips dorsalis*), 및 타에니오텍스 로팔란텐날리스(*Taeniothrips rhopalantennalis*), 트립스 하와이이엔시스(*Thrips hawaiiensis*), 트립스 니그로필로수스(*Thrips nigropilosus*), 트립스 오리엔탈리스(*Thrips orientalis*), 트립스 타바시(*Thrips tabaci*)가 포함되지만, 이에 제한되지 않는다.

[2169]

또 다른 실시양태에서, 화학식 1의 분자는 **쥬목**의 해충을 방제하는데 사용될 수 있다. 특정한 속의 비-포괄적 목록에는 레피스마(*Lepisma*) 종 및 테르모비아(*Thermobia*) 종이 포함되지만, 이에 제한되지 않는다.

[2170]

또 다른 실시양태에서, 화학식 1의 분자는 **응애목**의 해충을 방제하는데 사용될 수 있다. 특정한 속의 비-포괄적 목록에는 아카루스(*Acarus*) 종, 아쿨롭스(*Aculops*) 종, 부필루스(*Boophilus*) 종, 데모덱스(*Demodex*) 종, 더마센토르(*Dermacentor*) 종, 에피트리메루스(*Epiptimerus*) 종, 에리오피에스(*Eriophyes*) 종, 익소데스(*Ixodes*) 종, 올리고니쿠스(*Oligonychus*) 종, 파노니쿠스(*Panonychus*) 종, 리조글리푸스(*Rhizoglyphus*) 종 및 테트라니쿠스(*Tetranychus*) 종이 포함되지만, 이에 제한되지 않는다. 특정한 종의 비-포괄적 목록에는 아카라피스 우디(*Acarapis woodi*), 아카루스 시로(*Acarus siro*), 아세리아 만기페라에(*Aceria mangiferae*), 아쿨롭스 리코페르시시(*Aculops lycopersici*), 아쿨루스 펠레카시(*Aculus pelekassi*), 아쿨루스 스클레크텐달리(*Aculus schlechtendali*), 암블리움마 아메리카눔(*Amblyomma americanum*), 브레비팔푸스 오보바투스(*Brevipalpus obovatus*), 브레비팔푸스 포에니시스(*Brevipalpus phoenicis*), 더마센토르 바리아빌리스(*Dermacentor variabilis*), 더마토파고이데스 프테로니시누스(*Dermatophagoides pteronyssinus*), 에오텍트라니쿠스 카르피니(*Eotetranychus carpini*), 노토에드레스 카티(*Notoedres cati*), 올리고니쿠스 코페아에(*Oligonychus coffeae*), 올리고니쿠스 일리시스(*Oligonychus ilicis*), 파노니쿠스 시트리(*Panonychus citri*), 파노니쿠스 울미(*Panonychus ulmi*), 필로코프트루타 올레이보라(*Phyllocoptruta oleivora*), 폴리파고타르소네무스 라투스(*Polyphagotarsonemus latus*), 리피세팔루스 산구이네우스(*Rhipicephalus sanguineus*), 사르코프테스 스카비에

이(*Sarcoptes scabiei*), 테골로푸스 페르세아플로라에(*Tegolophus perseafloae*), 테트라니쿠스 우르티카에(*Tetranychus urticae*) 및 바로아 데스트룩토르(*Varroa destructor*)가 포함되지만, 이에 제한되지 않는다.

[2171] 또 다른 실시양태에서, 화학식 1의 분자는 **흡작은지네목**의 해충을 방제하는데 사용될 수 있다. 특정한 종의 비-포괄적 목록에는 스쿠티게렐라 임마쿨라타(*Scutigerella immaculata*)가 포함되지만, 이에 제한되지 않는다.

[2172] 또 다른 실시양태에서, 화학식 1의 분자는 **선형동물문**의 해충을 방제하는데 사용될 수 있다. 특정한 속의 비-포괄적 목록에는 아펠렌코이데스(*Aphelenchoides*) 종, 벨로놀라이무스(*Belonolaimus*) 종, 크리코네멜라(*Criconemella*) 종, 디틸렌쿠스(*Ditylenchus*) 종, 헤테로데라(*Heterodera*) 종, 히르쉬만니엘라(*Hirschmanniella*) 종, 호플롤라이무스(*Hoplolaimus*) 종, 멜로이도기네(*Meloidogyne*) 종, 프라틸렌쿠스(*Pratylenchus*) 종 및 라도폴루스(*Radopholus*) 종이 포함되지만, 이에 제한되지 않는다. 특정한 종의 비-포괄적 목록에는 디로필라리아 임미티스(*Dirofilaria immitis*), 헤테로데라 제아에(*Heterodera zae*), 멜로이도기네 인코그니타(*Meloidogyne incognita*), 멜로이도기네 자바니카(*Meloidogyne javanica*), 온코세르카 볼볼루스(*Onchocerca volvulus*), 라도폴루스 시밀리스(*Radopholus similis*) 및 로틸렌쿨루스 레니포르미스(*Rotylenchulus reniformis*)가 포함되지만, 이에 제한되지 않는다.

[2173] 추가의 정보에 대해서는 문헌 ["**Handbook of Pest Control - The Behavior, Life History, and Control of Household Pests**" by Arnold Mallis, 9th Edition, copyright 2004 by GIE Media Inc.]을 참고한다.

[2174] **적용**

[2175] 화학식 1의 분자는 일반적으로 방제를 제공하기 위해 헥타르당 약 0.01 그램 내지 헥타르당 약 5000 그램의 양으로 사용된다. 헥타르당 약 0.1 그램 내지 헥타르당 약 500 그램의 양이 일반적으로 바람직하고, 헥타르당 약 1 그램 내지 헥타르당 약 50 그램의 양이 일반적으로 보다 바람직하다.

[2176] 화학식 1의 분자가 적용되는 영역은 해충이 서식하는 (또는 서식할 수 있거나, 횡단할 수 있는) 임의의 영역, 예를 들어 작물, 나무, 과일, 곡류, 사료 종, 포도나무, 잔디 및 관상 식물이 성장하는 영역; 가축이 거주하는 영역; 건물의 내부 또는 외부 표면 (예컨대 곡물이 저장되는 장소), 건물에 사용되는 건축 자재 (예컨대 주입 목재) 및 건물 주위 토양일 수 있다. 화학식 1의 분자를 사용하는 특정한 작물 영역은 사과, 옥수수, 해바라기, 목화, 대두, 카놀라, 밀, 벼, 소르굼, 보리, 귀리, 감자, 오렌지, 알팔파, 상추, 딸기, 토마토, 페퍼, 크루시퍼, 배, 담배, 아몬드, 사탕무, 콩 및 다른 유익한 작물이 성장하거나 그의 종자가 식재될 영역을 포함한다. 또한, 다양한 식물의 성장시 황산암모늄을 화학식 1의 분자와 함께 사용하는 것이 유리하다.

[2177] 해충 방제는 일반적으로 해충 개체수, 해충 활성 또는 둘 다를 영역에서 감소시키는 것을 의미한다. 이는 해충 개체수가 영역으로부터 격퇴되는 경우; 해충이 영역 내에서 또는 영역 주위에서 무력화되는 경우; 또는 해충이 영역 내에서 또는 영역 주위에서 전체적으로 또는 부분적으로 구제되는 경우에 일어날 수 있다. 물론, 이들 결과의 조합이 일어날 수 있다. 일반적으로, 해충 개체수, 활성 또는 둘 다는 50 퍼센트 초과, 바람직하게는 90 퍼센트 초과로 바람직하게 감소된다. 일반적으로, 영역은 인간 내의 것 또는 인간에 대한 것이 아니고; 따라서, 생육지는 일반적으로 비-인간 영역이다.

[2178] 화학식 1의 분자는 혼합물로 사용될 수 있고, 동시에 또는 순차적으로, 단독으로 또는 다른 화합물과 함께 적용되어 식물 활력을 증진시킬 수 있다 (예를 들어 보다 우수한 뿌리계로 성장시키고, 스트레스성 성장 조건에 보다 잘 견디게 함). 이러한 다른 화합물은, 예를 들어 식물 에틸렌 수용체를 조절하는 화합물, 가장 특히 1-메틸시클로프로펜 (1-MCP로도 공지됨)이다. 또한, 이러한 분자는 해충 활성이 낮은 시기에, 예컨대 성장하는 식물이 유익한 농산물을 생산하기 시작하기 전에, 사용될 수 있다. 이러한 시기는 해충 압박이 통상적으로 낮은 초기 식재 시기를 포함한다.

[2179] 화학식 1의 분자를 식물의 잎 및 열매 부분에 적용하여 해충을 방제할 수 있다. 분자는 해충에 직접 접촉하게 되거나, 또는 해충은 살충제를 함유하는 잎, 과일 덩어리를 섭취하거나 또는 수액을 추출할 경우에 살충제를 소비하게 될 것이다. 화학식 1의 분자는 또한 토양에 적용될 수 있고, 이러한 방식으로 적용될 경우 뿌리 및 줄기를 섭식하는 해충을 방제할 수 있다. 뿌리는 분자를 흡수하여 이것을 식물의 잎 부분 내로 전달함으로써, 지상에서 저작하고 수액을 섭취하는 해충을 방제할 수 있다.

[2180] 일반적으로, 미끼를 사용하는 경우에 미끼는, 예를 들어 흰개미가 미끼와 접촉할 수 있고/거나 미끼에 유인될 수 있는 지면에 배치된다. 또한, 미끼는 예를 들어 개미, 흰개미, 바퀴벌레 및 파리가 미끼와 접촉할 수 있고/거나 미끼에 유인될 수 있는 건물의 표면 (수평, 수직 또는 경사 표면)에 적용될 수 있다. 미끼는 화학식 1의

분자를 포함할 수 있다.

- [2181] 화학식 1의 분자는 캡슐의 내부로 캡슐화되거나, 또는 캡슐의 표면 상에 배치될 수 있다. 캡슐의 크기는 나노미터 크기 (약 100-900 나노미터 직경) 내지 마이크로미터 크기 (약 10-900 마이크로미터 직경)의 범위일 수 있다.
- [2182] 특정 살충제에 저항하는 일부 해충 알의 특유의 능력 때문에, 새롭게 출현된 유충을 방제하기 위해 화학식 1의 분자의 반복된 적용이 바람직할 수 있다.
- [2183] 식물의 한 부분 상의 해충을 방제하기 위해, 식물의 다른 부분에 화학식 1의 분자를 적용함으로써 (예를 들어, 영역에 분무함으로써) 식물에서의 살충제의 침투성 이동을 이용할 수 있다. 예를 들어, 잎-섭식 곤충의 방제는 점적 관개 또는 고랑 적용에 의해, 예를 들어 식재 전 또는 후의 토양 관주로 토양을 처리함으로써, 또는 식재 전에 식물의 종자를 처리함으로써 달성될 수 있다.
- [2184] 종자 처리는, 특수화 형질을 발현하도록 유전자 변형된 식물이 발아될 종자를 비롯한 모든 유형의 종자에 적용될 수 있다. 대표적인 예로는, 무적추동물 해충, 예컨대 바실루스 투링기엔시스에 대해 독성인 단백질 또는 다른 살곤충 독소를 발현하는 것들, 제초제 저항성을 발현하는 것들, 예컨대 "라운드업 레디(Roundup Ready)" 종자, 또는 살곤충 독소, 제초제 저항성, 영양-증진, 가뭄 저항성 또는 임의의 다른 유익한 형질을 발현하는 "스택킹된" 외래 유전자를 갖는 것들이 포함된다. 또한, 화학식 1의 분자를 사용한 이러한 종자 처리는, 식물이 스트레스성 성장 조건을 보다 잘 견디는 능력을 추가로 증진시킬 수 있다. 그 결과, 보다 건강하고 보다 활력 있는 식물을 생성하며, 이는 수확시에 보다 높은 수확량을 유도할 수 있다. 일반적으로, 100,000개의 종자당 화학식 1의 분자 약 1 그램 내지 약 500 그램이 우수한 이익을 제공할 것으로 예상되고, 100,000개의 종자당 약 10 그램 내지 약 100 그램의 양은 보다 우수한 이익을 제공할 것으로 예상되고, 100,000개의 종자당 약 25 그램 내지 약 75 그램의 양은 보다 더 우수한 이익을 제공할 것으로 예상된다.
- [2185] 화학식 1의 분자가 바실루스 투링기엔시스 또는 다른 살곤충 독소와 같은 특수화 형질을 발현하도록 유전자 변형된 식물, 또는 제초제 저항성을 발현하는 것들, 또는 살곤충 독소, 제초제 저항성, 영양-증진, 가뭄 내성 또는 임의의 다른 유익한 형질을 발현하는 "스택킹된" 외래 유전자를 갖는 것들 상에, 내에 또는 주위에 사용될 수 있음이 용이하게 명백해야 한다.
- [2186] 화학식 1의 분자는 수의학 부문 또는 비-인간 동물 사육 분야에서 내부기생충 및 외부기생충을 방제하는데 사용될 수 있다. 화학식 1의 분자는 예를 들어 정제, 캡슐, 드링크제, 과립의 형태로 예컨대 경구 투여에 의해, 예를 들어 침지, 분무, 붓기, 스폿팅 및 살분의 형태로 피부 적용에 의해, 및 예를 들어 주사의 형태로 비경구 투여에 의해 적용된다.
- [2187] 또한, 화학식 1의 분자는 가축, 예를 들어 소, 양, 돼지, 닭 및 거위를 사육하는데 유리하게 사용될 수 있다. 이들은 또한 애완동물, 예컨대 말, 개 및 고양이에 유리하게 사용될 수 있다. 방제하기 위한 특정한 해충은 이러한 동물에 유해한 벼룩 및 진드기일 것이다. 적합한 제제가 음용수 또는 사료와 함께 동물에게 경구로 투여된다. 적합한 투여량 및 제제는 종에 따라 달라진다.
- [2188] 화학식 1의 분자는 또한 상기 나열된 동물에서, 특히 장내 기생충을 방제하는데 사용할 수 있다.
- [2189] 화학식 1의 분자는 또한 인간 건강 관리를 위한 치료 방법에서 사용될 수 있다. 이러한 방법으로는 예를 들어 정제, 캡슐, 드링크제, 과립의 형태로의 경구 투여, 및 피부 적용에 의한 것이 포함되지만, 이에 제한되지 않는다.
- [2190] 전세계의 해충은 (이러한 해충에 대한) 새로운 환경으로 이동하고 있고 그 후에 이러한 새로운 환경에서 새로운 침습 종이 된다. 화학식 1의 분자를 또한 이러한 새로운 침습 종에 대해 사용하여 이러한 새로운 환경에서 이들을 방제할 수 있다.
- [2191] 화학식 1의 분자는 또한 식물, 예컨대 작물이 성장하는 (예를 들어 식재전, 식재, 수확전) 영역에서 및 이러한 식물을 상업적으로 손상시킬 수 있는 해충이 낮은 수준으로 존재하는 (심지어 실제 존재하지 않는) 영역에서 사용될 수 있다. 이러한 영역에서의 상기 분자의 사용은 그 영역에서 성장하는 식물에 이점을 제공하기 위한 것이다. 이러한 이점은 식물 건강의 개선, 식물 수확량의 개선 (예를 들어 바이오매스의 증가 및/또는 유익한 성분 함량의 증가), 식물 활력의 개선 (예를 들어 개선된 식물 성장 및/또는 보다 푸른 잎), 식물 품질의 개선 (예를 들어 특정 성분의 함량 또는 조성의 개선), 및 식물의 비생물적 및/또는 생물적 스트레스에 대한 내성의 개선을 포함할 수 있지만, 이에 제한되지 않는다.

[2192] 살충제를 상업적으로 사용 또는 시판하기 전에, 이러한 살충제는 다양한 정부 기관 (지역, 지방, 주, 국가 및 국제)에 의해 긴 평가 과정을 거친다. 방대한 데이터 요건이 규제 기관에 의해 명시되어 있고, 종종 월드 와이드 웹에 연결되는 컴퓨터를 사용하여 제품 등록자 또는 제품 등록자를 대신하는 제3자에 의한 데이터 생성 및 제출을 통해 신청되어야 한다. 이어서, 이들 정부 기관은 이러한 데이터를 검토하고, 안정성의 결정이 결론이 나면, 잠재적 사용자 또는 판매자에게 제품 등록을 승인한다. 그 후, 제품 등록이 승인 및 지지되는 지역에서, 이러한 사용자 또는 판매자는 상기 살충제를 사용 또는 판매할 수 있다.

[2193] 화학식 1에 따른 분자는 해충에 대한 그의 효능을 결정하기 위해 시험될 수 있다. 또한, 작용 방식 연구를 수행하여 상기 분자가 다른 살충제와 상이한 작용 방식을 갖는지를 결정할 수 있다. 그 후, 그러한 획득된 데이터는, 예컨대 인터넷에 의해 제3자에게 전파될 수 있다.

[2194] 본원에서 제목은 단지 편의를 위한 것이고, 그의 임의의 부분을 해석하는데 사용되어서는 안된다.

[2195] 표 섹션

BAW & CEW & CL 등급 표	
% 방제율 (또는 사충률)	등급
50-100	A
0 초과 – 50 미만	B
시험되지 않음	C
본 생물검정에서 어떠한 활성도 나타나지 않음	D

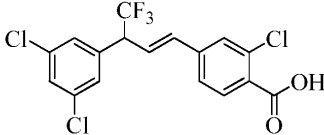
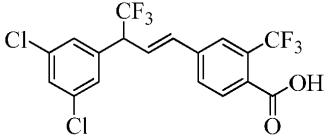
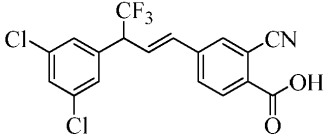
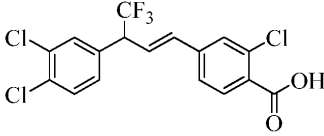
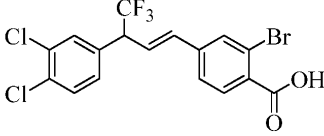
[2196]

GPA 등급 표	
% 방제율 (또는 사충률)	등급
80-100	A
0 초과 – 80 미만	B
시험되지 않음	C
본 생물검정에서 어떠한 활성도 나타나지 않음	D

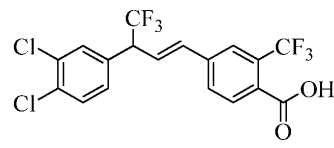
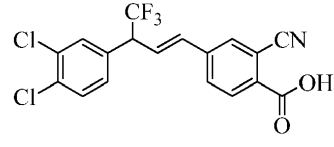
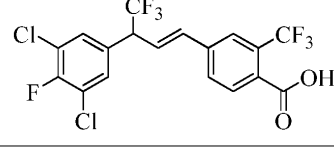
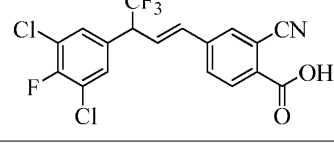
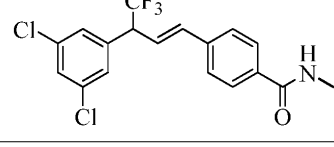
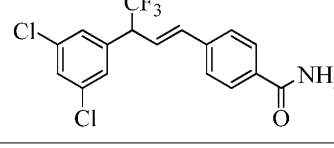
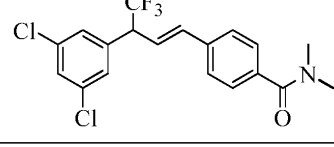
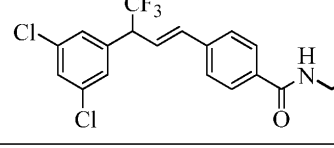
[2197]

[2198]

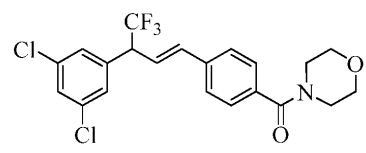
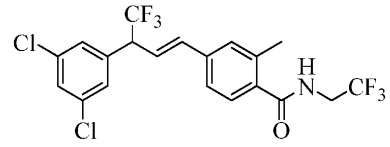
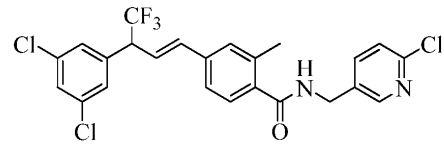
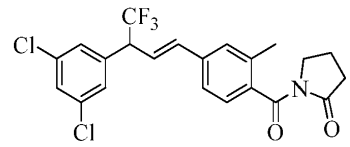
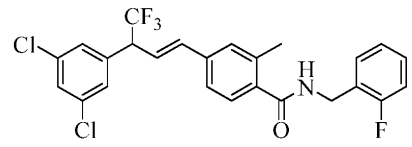
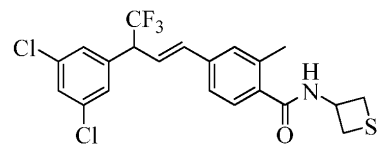
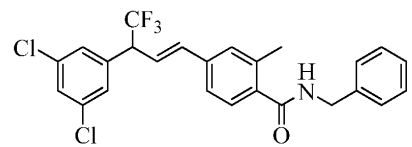
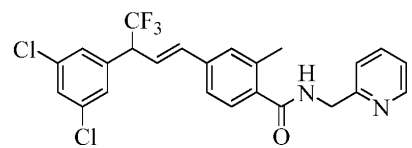
표 1: 화합물에 대한 구조

화합물 번호	구조
AI34	
AI36	
AI37	
AI38	
AI39	

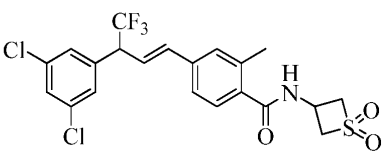
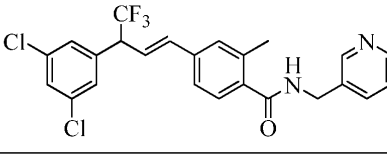
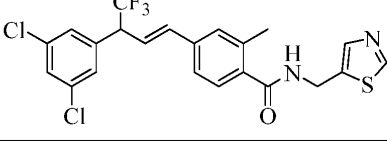
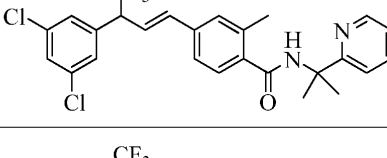
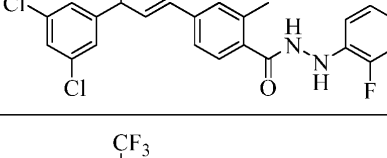
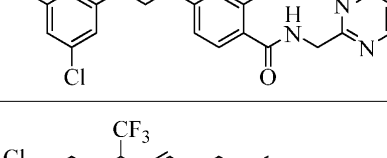
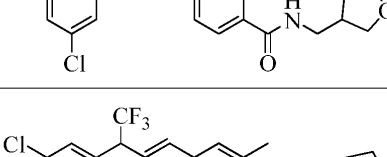
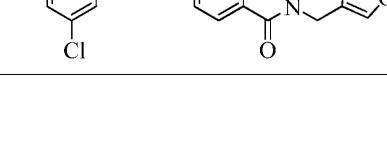
[2199]

AI40	
AI41	
AI44	
AI45	
AC1	
AC2	
AC3	
AC4	

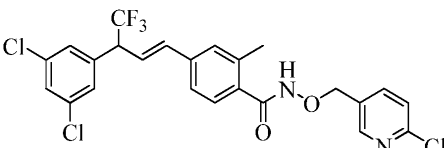
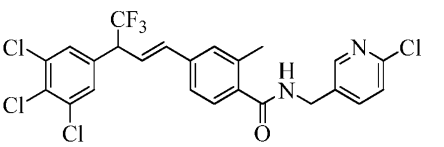
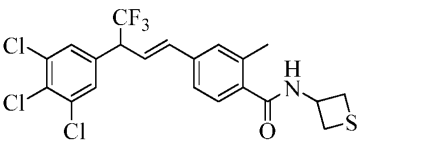
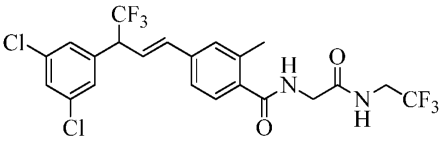
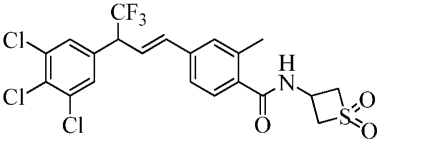
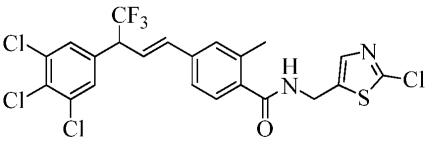
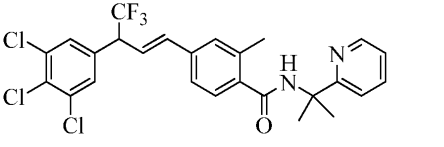
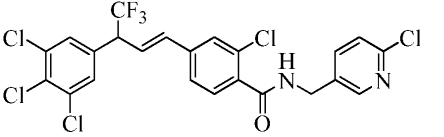
[2200]

AC5	
AC6	
AC7	
AC8	
AC9	
AC10	
AC11	
AC12	

[2201]

AC13	
AC14	
AC15	
AC16	
AC17	
AC18	
AC19	
AC20	

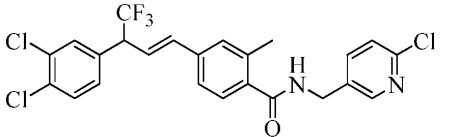
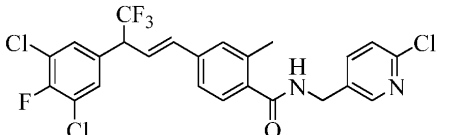
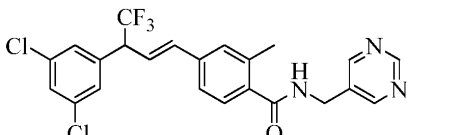
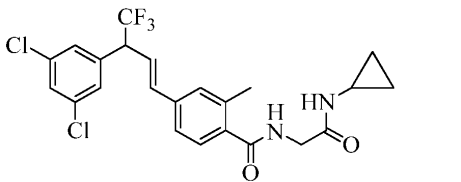
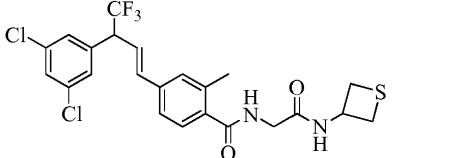
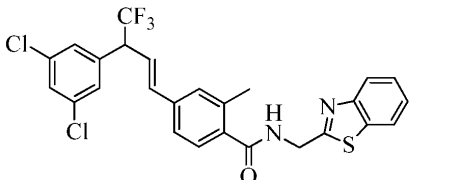
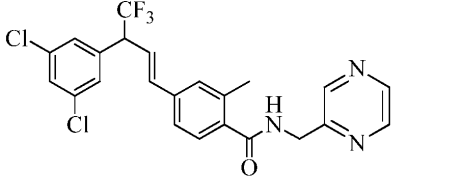
[2202]

AC21	
AC22	
AC23	
AC24	
AC25	
AC26	
AC27	
AC28	

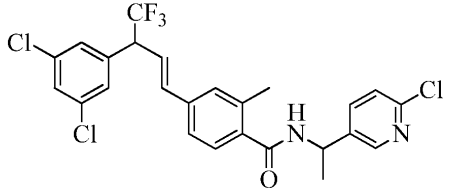
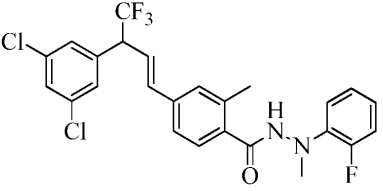
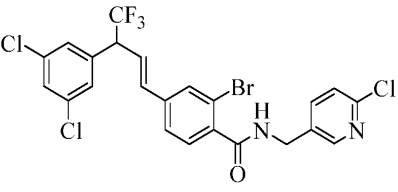
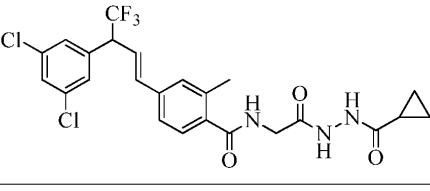
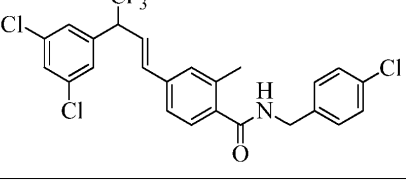
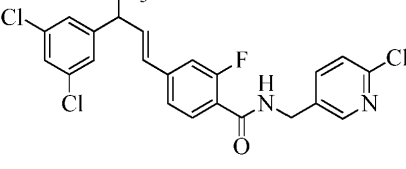
[2203]

AC29	
AC30	
AC31	
AC32	
AC33	
AC34	
AC35	
AC36	

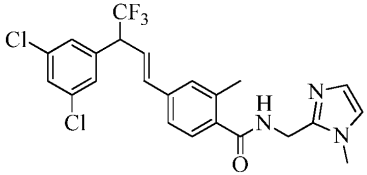
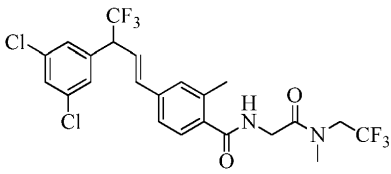
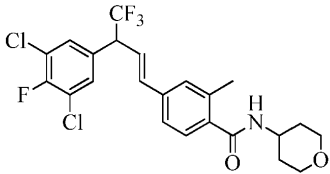
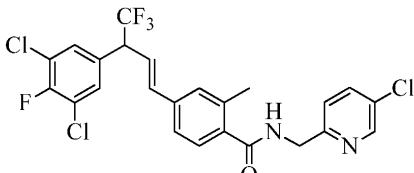
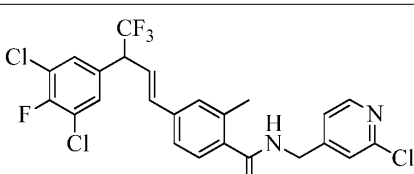
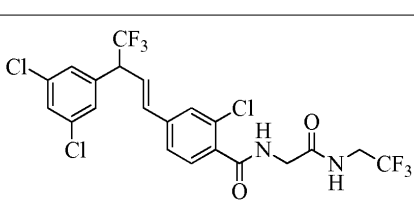
[2204]

AC37	
AC38	
AC39	
AC40	
AC41	
AC42	
AC43	

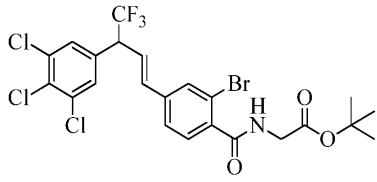
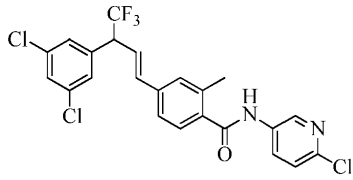
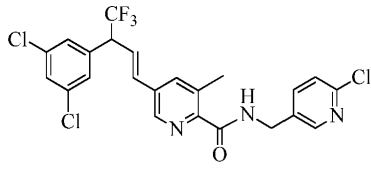
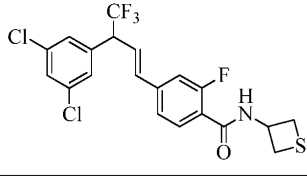
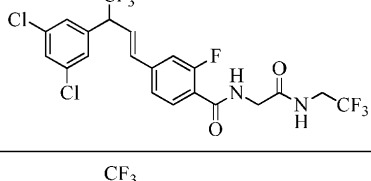
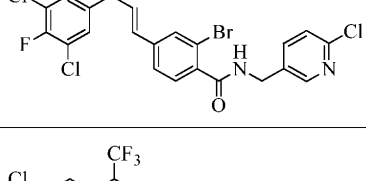
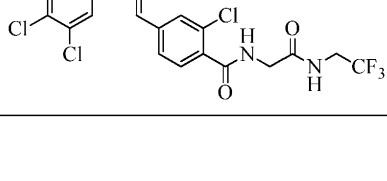
[2205]

AC44	
AC45	
AC46	
AC47	
AC48	
AC49	

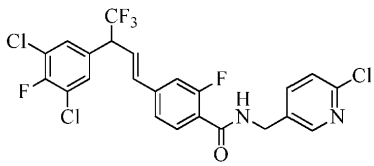
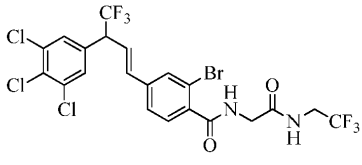
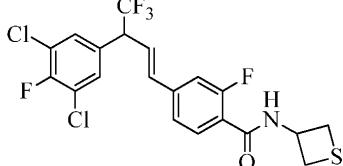
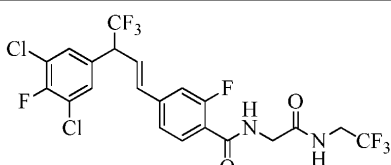
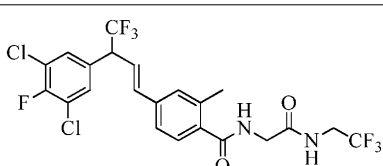
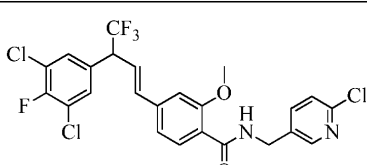
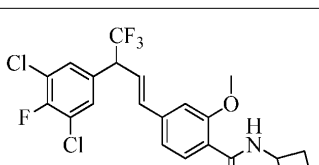
[2206]

AC50	
AC51	
AC52	
AC53	
AC54	
AC57	

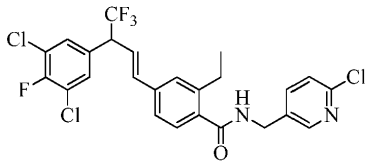
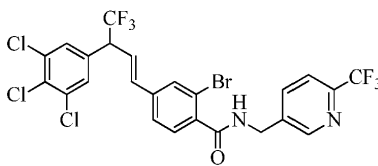
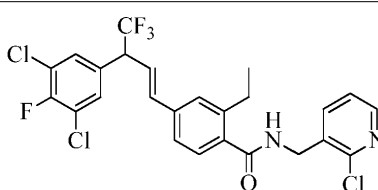
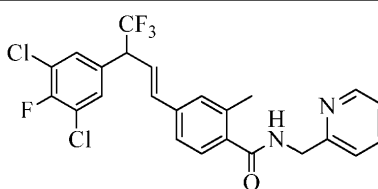
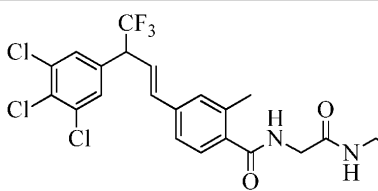
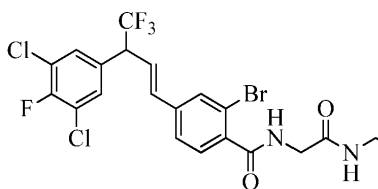
[2207]

AC58	
AC59	
AC60	
AC61	
AC62	
AC63	
AC64	

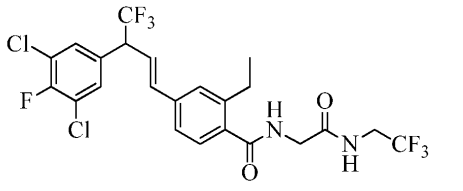
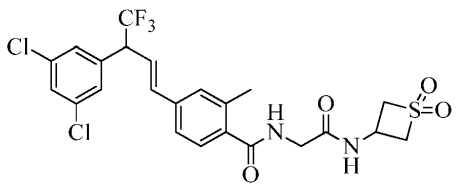
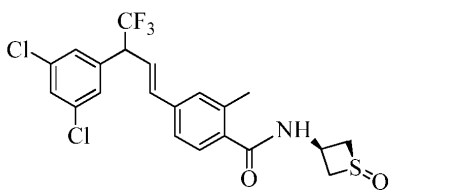
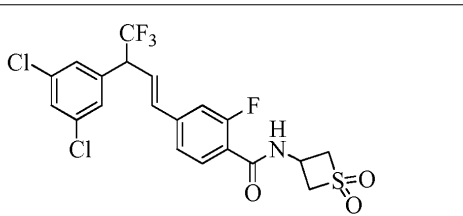
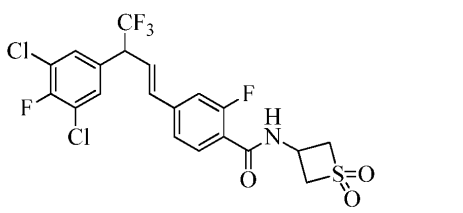
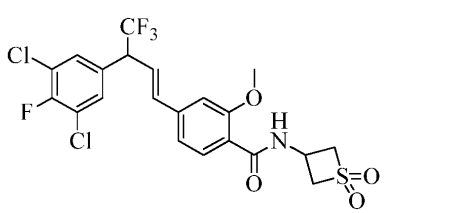
[2208]

AC65	
AC66	
AC67	
AC68	
AC69	
AC70	
AC71	

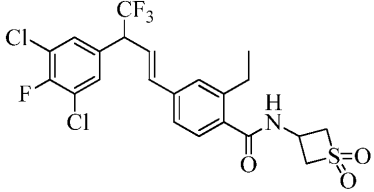
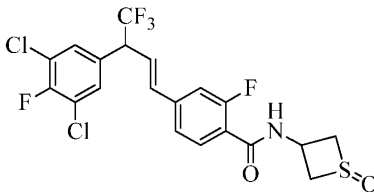
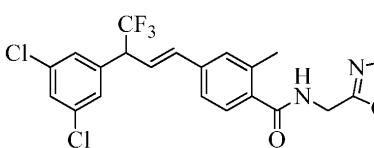
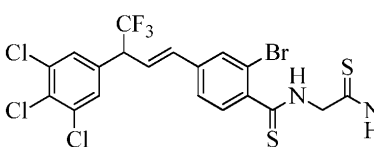
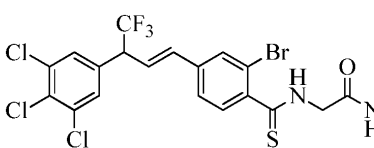
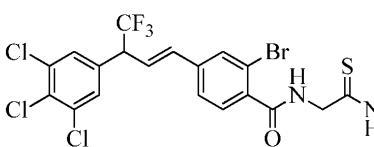
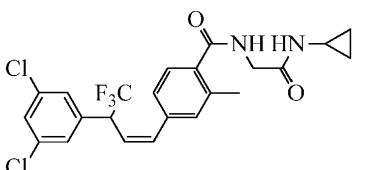
[2209]

AC72	
AC75	
AC76	
AC77	
AC78	
AC79	

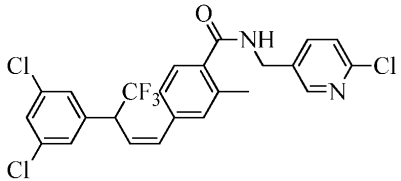
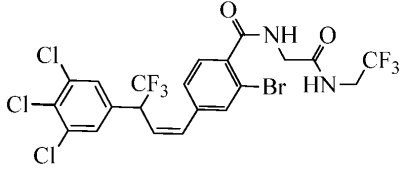
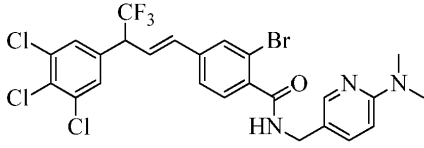
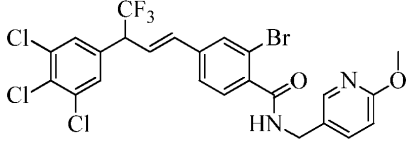
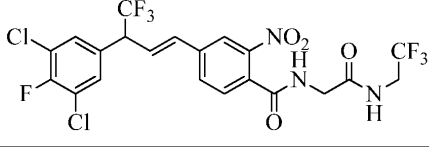
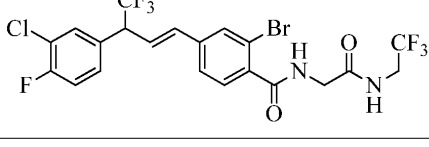
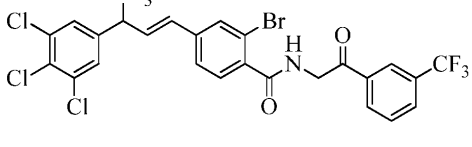
[2210]

AC80	
AC81	
AC82	
AC83	
AC84	
AC85	

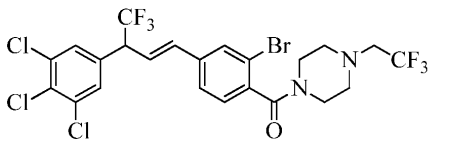
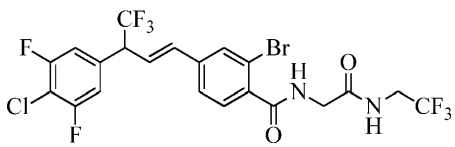
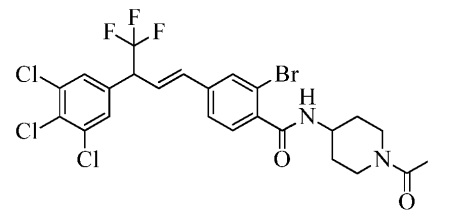
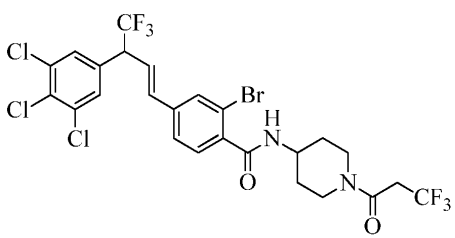
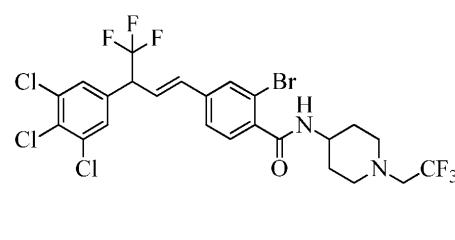
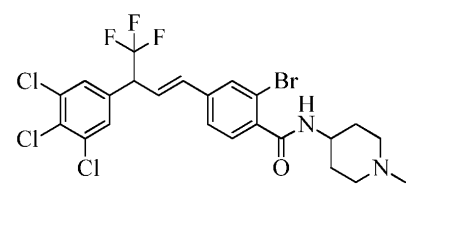
[2211]

AC86	
AC87	
AC89	
AC90	
AC91	
AC92	
AC93	

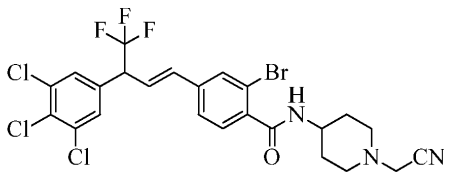
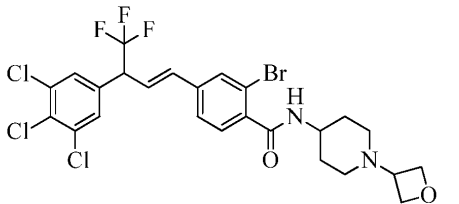
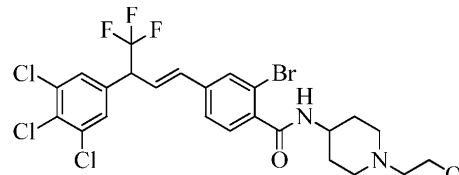
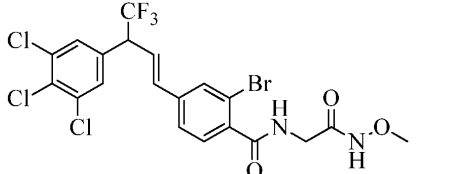
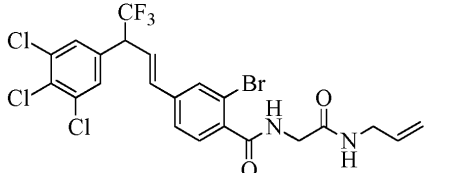
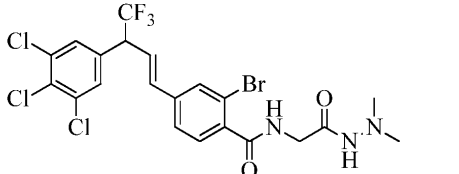
[2212]

AC94	
AC95	
AC96	
AC97	
AC98	
AC99	
AC100	

[2213]

AC101	
AC102	
AC103	
AC104	
AC105	
AC106	

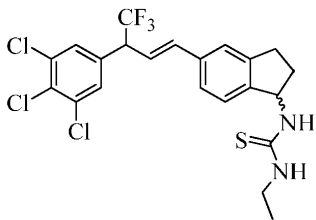
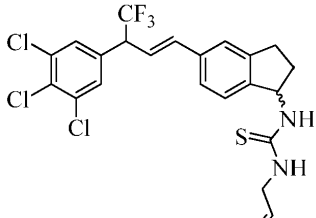
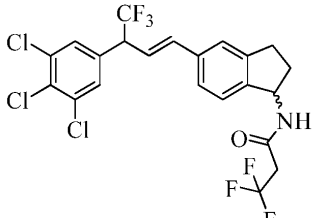
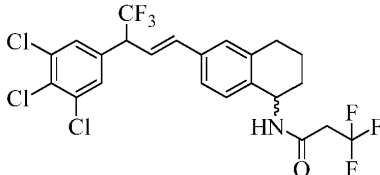
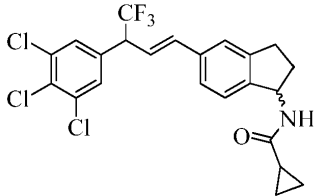
[2214]

AC107	
AC108	
AC109	
AC110	
AC111	
AC112	

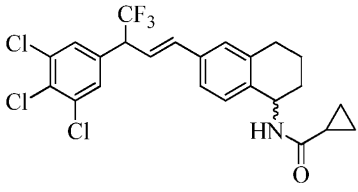
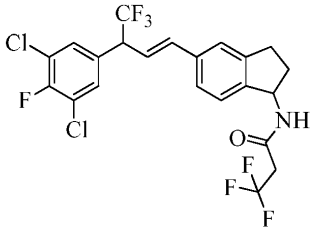
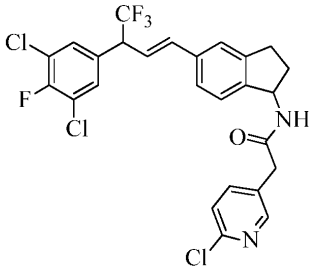
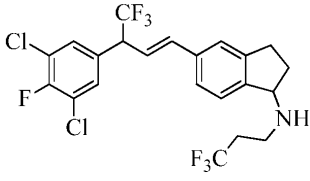
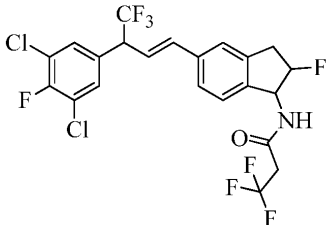
[2215]

AC113	
AC114	
AC115	
AC116	
AC117	
AC118	
BC1	

[2216]

BC2	
BC3	
BC4	
BC5	
BC6	

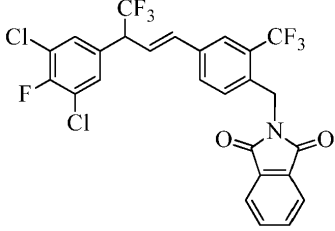
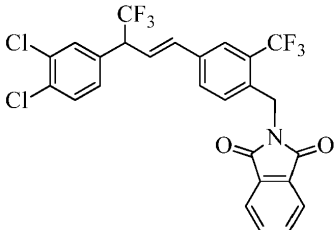
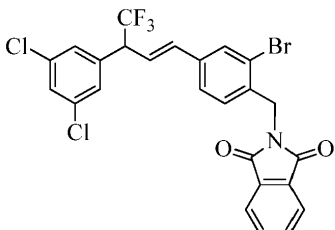
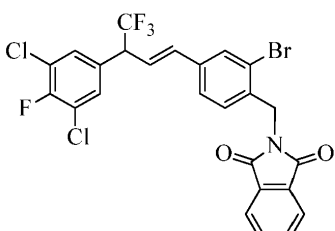
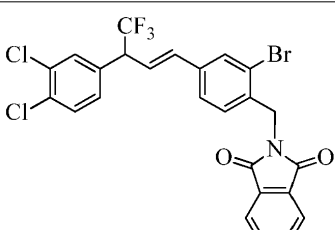
[2217]

BC7	
BC8	
BC9	
BC10	
BC11	

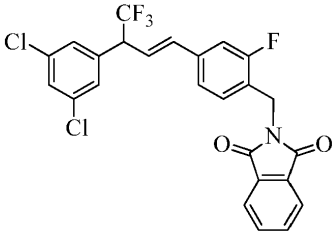
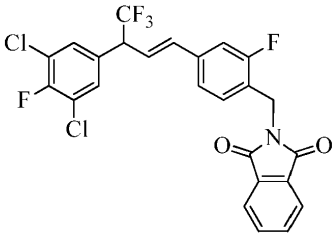
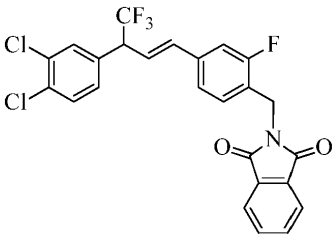
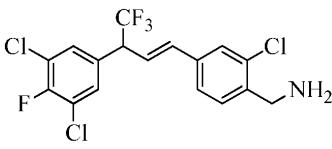
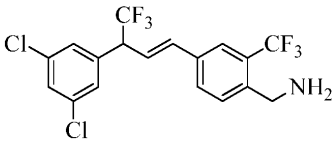
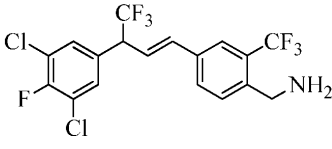
[2218]

BC12	
BC13	
BC14	
CI4	
CI5	
CI8	
CI9	

[2219]

CI34	
CI35	
CI36	
CI37	
CI38	

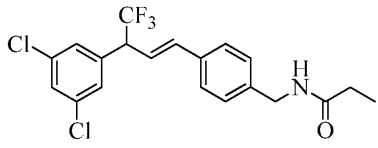
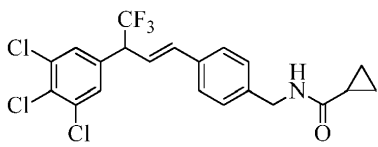
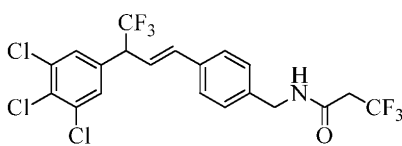
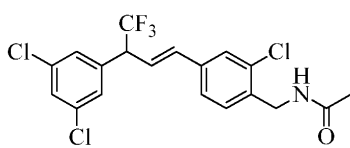
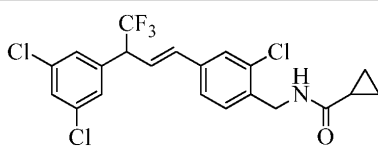
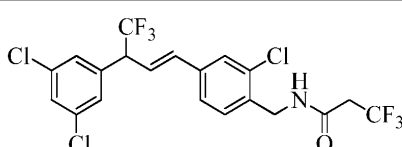
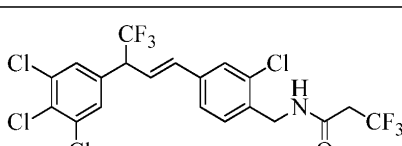
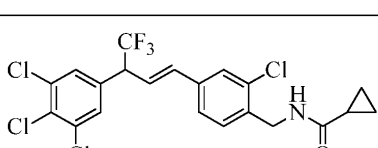
[2220]

CI39	
CI40	
CI41	
CI49	
CI50	
CI51	

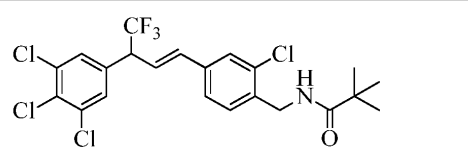
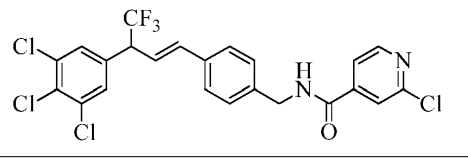
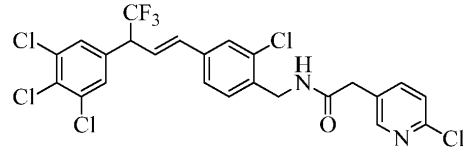
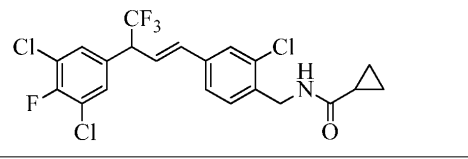
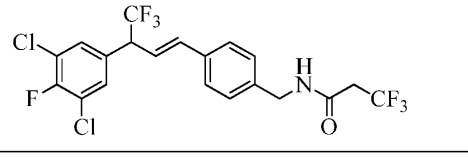
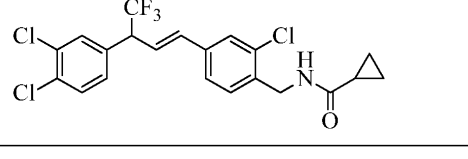
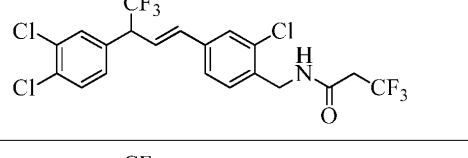
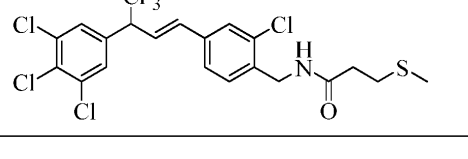
[2221]

CI52	
CI53	
CI54	
CI55	
CI56	
CI57	
CC1	
CC2	
CC3	

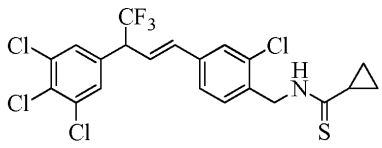
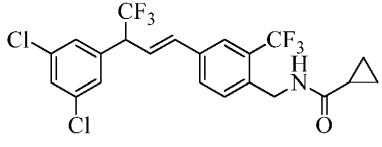
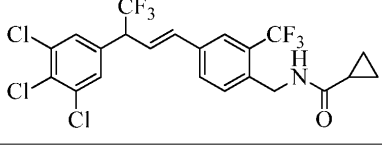
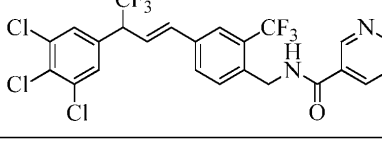
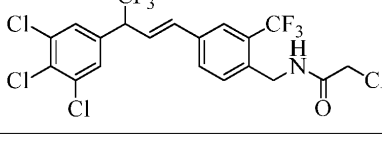
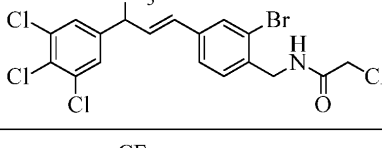
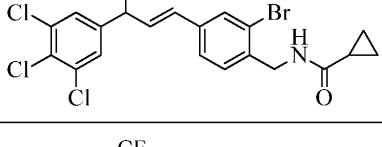
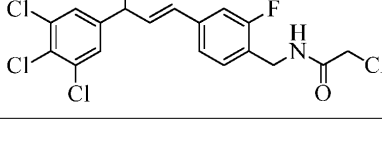
[2222]

CC4	
CC5	
CC6	
CC7	
CC8	
CC9	
CC10	
CC11	

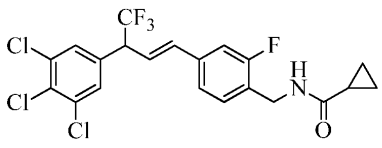
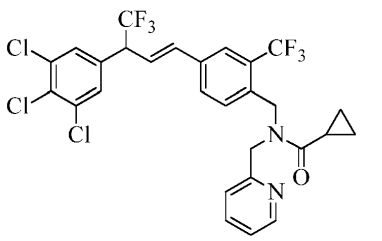
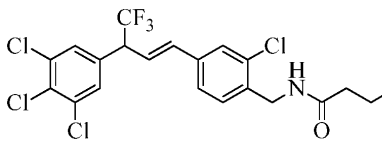
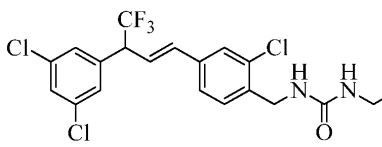
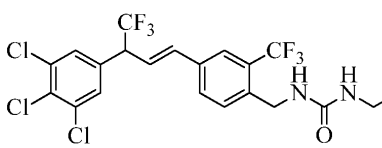
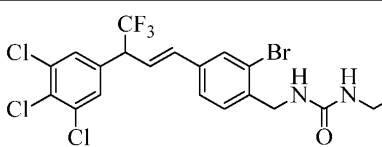
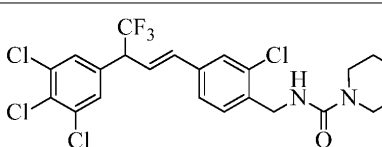
[2223]

CC12	
CC13	
CC14	
CC15	
CC16	
CC17	
CC18	
CC19	

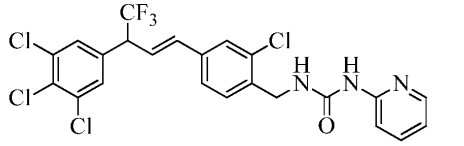
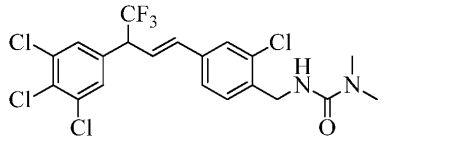
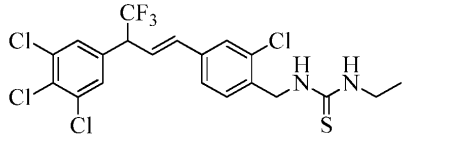
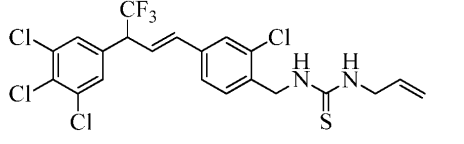
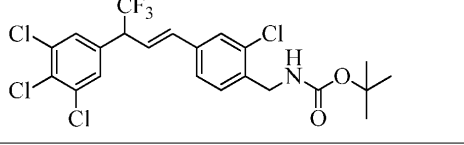
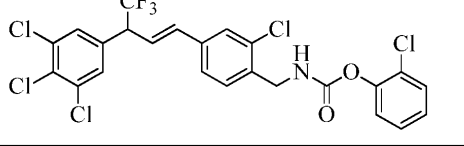
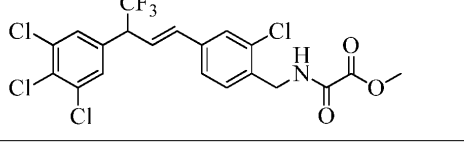
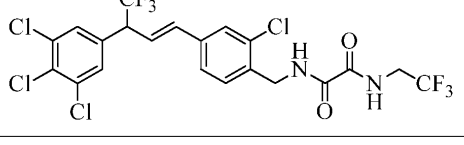
[2224]

CC20	
CC21	
CC22	
CC23	
CC24	
CC25	
CC26	
CC27	

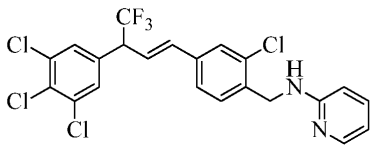
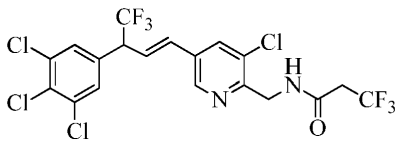
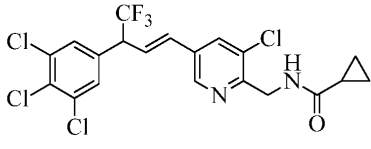
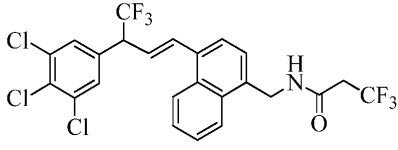
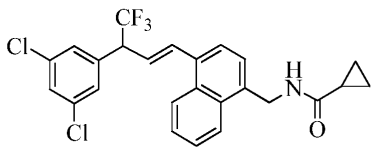
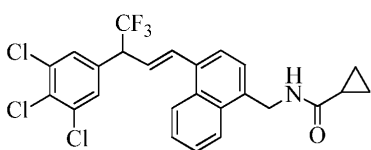
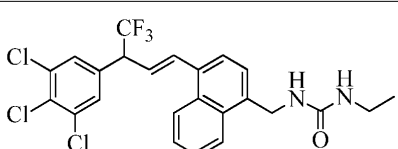
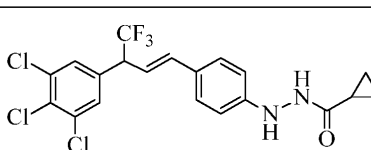
[2225]

CC28	
CC29	
CC30	
CC31	
CC32	
CC33	
CC34	

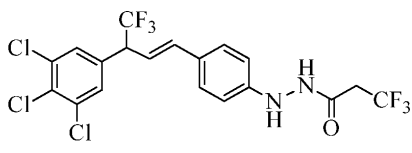
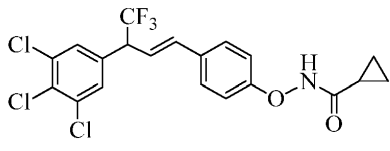
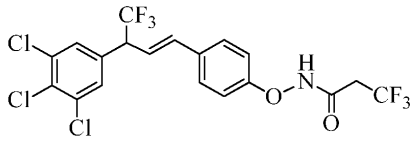
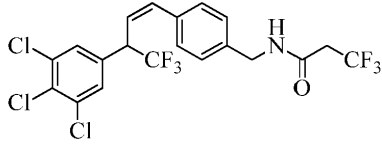
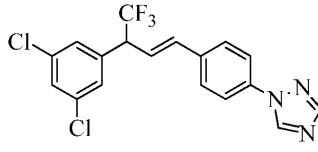
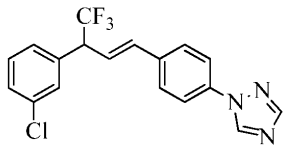
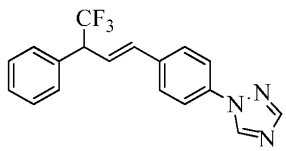
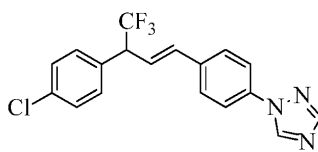
[2226]

CC35	
CC36	
CC37	
CC38	
CC39	
CC40	
CC41	
CC42	

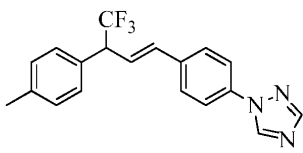
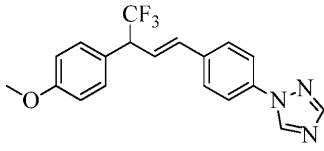
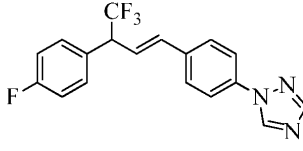
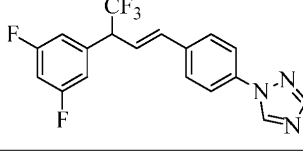
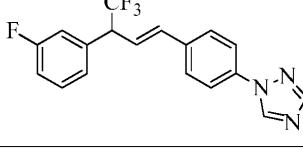
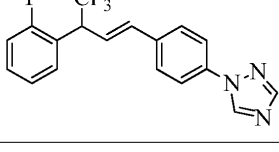
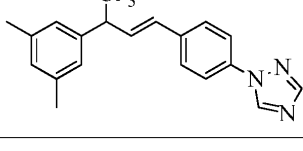
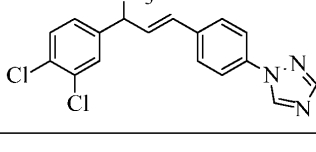
[2227]

CC43	
CC44	
CC45	
CC46	
CC47	
CC48	
CC49	
CC50	

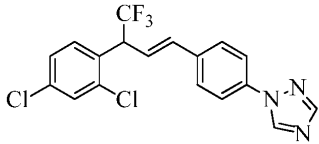
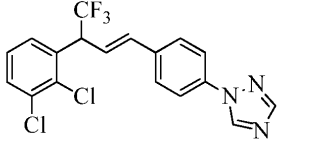
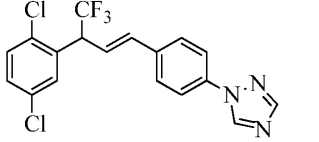
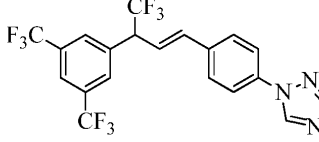
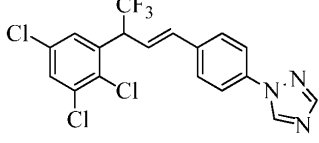
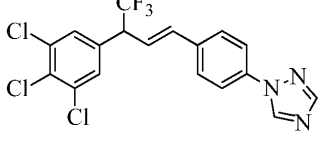
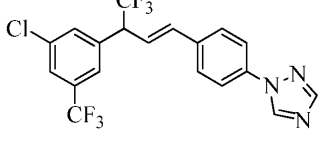
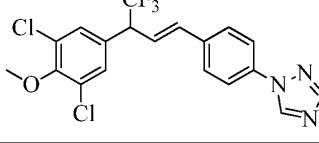
[2228]

CC51	
CC52	
CC53	
CC54	
DC1	
DC2	
DC3	
DC4	

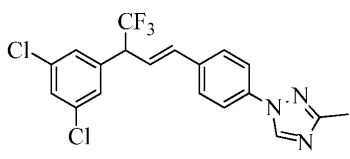
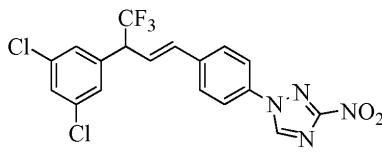
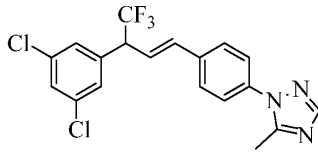
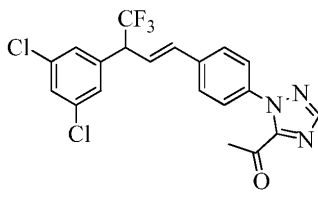
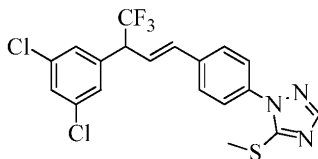
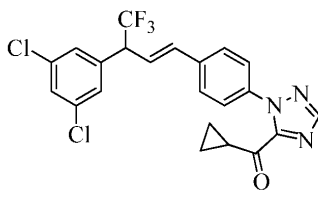
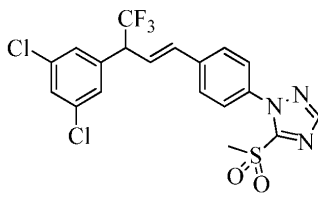
[2229]

DC5	
DC6	
DC7	
DC8	
DC9	
DC10	
DC11	
DC12	

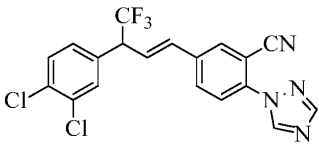
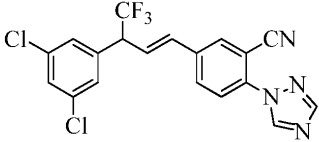
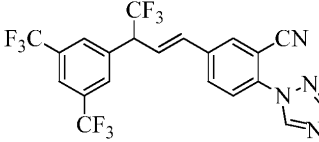
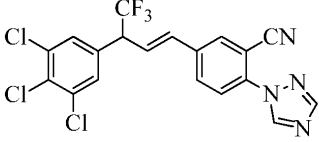
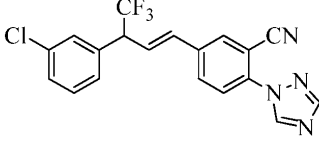
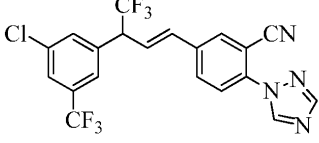
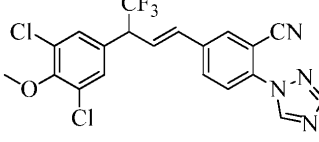
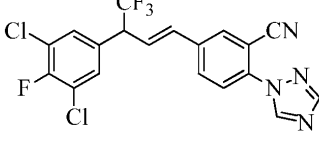
[2230]

DC13	
DC14	
DC15	
DC16	
DC17	
DC18	
DC19	
DC20	

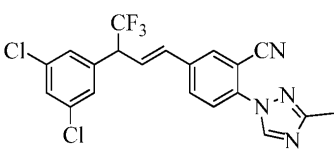
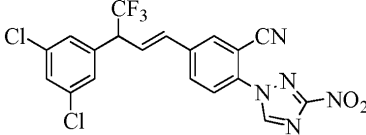
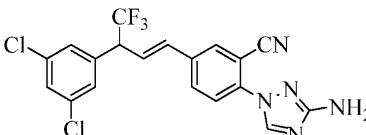
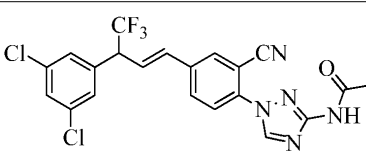
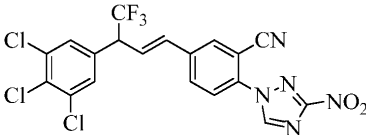
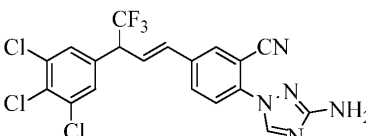
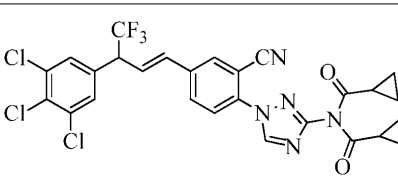
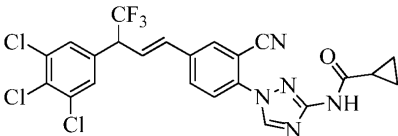
[2231]

DC21	
DC22	
DC23	
DC24	
DC25	
DC26	
DC27	

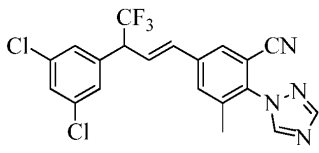
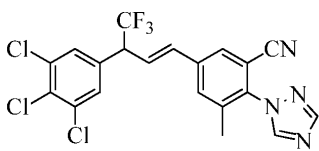
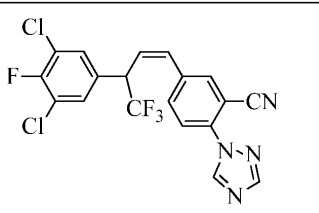
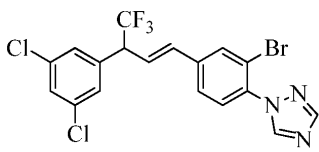
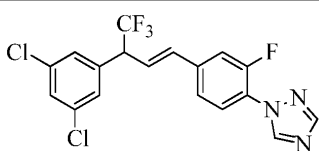
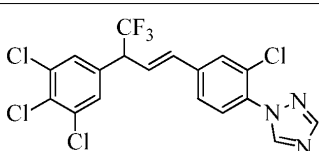
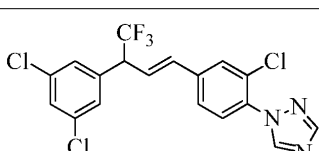
[2232]

DC28	
DC29	
DC30	
DC31	
DC32	
DC33	
DC34	
DC35	

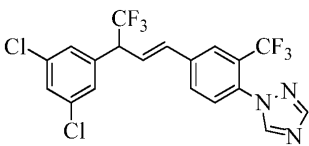
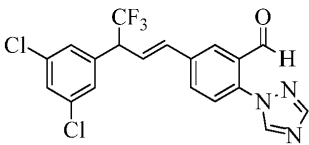
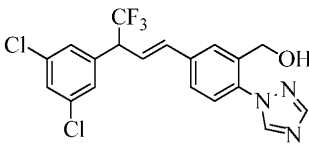
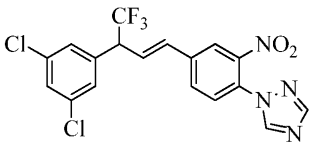
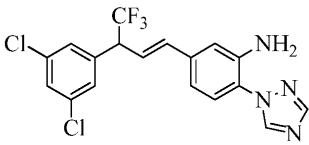
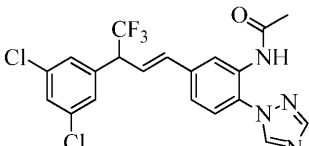
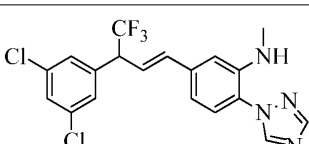
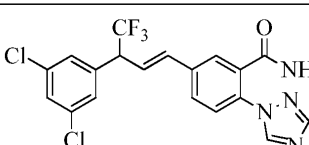
[2233]

DC36	
DC37	
DC38	
DC39	
DC40	
DC41	
DC42	
DC43	

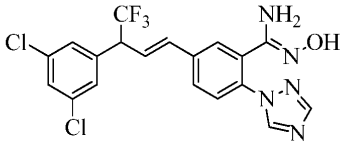
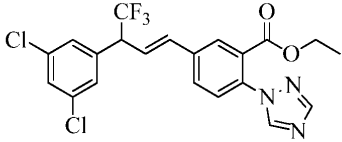
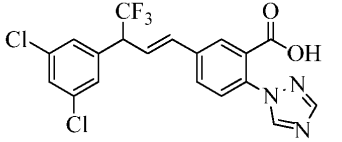
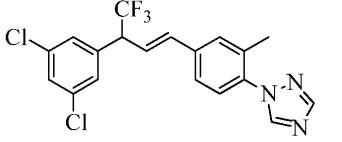
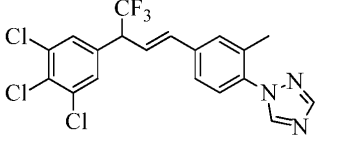
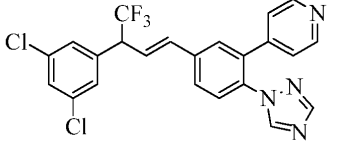
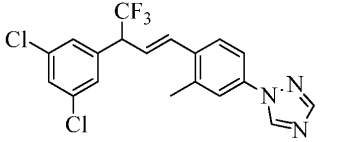
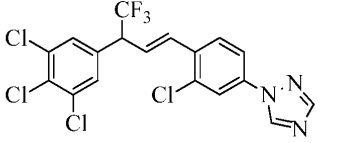
[2234]

DC44	
DC45	
DC46	
DC47	
DC48	
DC49	
DC50	

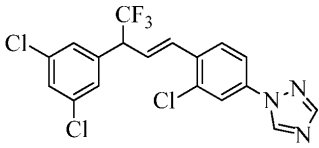
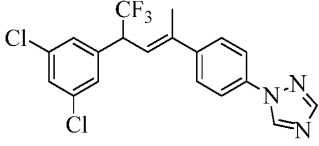
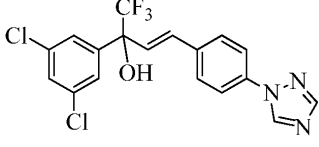
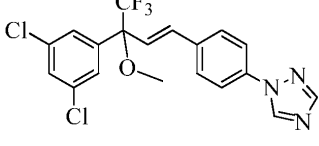
[2235]

DC51	
DC52	
DC53	
DC54	
DC55	
DC56	
DC57	
DC58	

[2236]

DC59	
DC60	
DC61	
DC62	
DC63	
DC64	
DC65	
DC66	

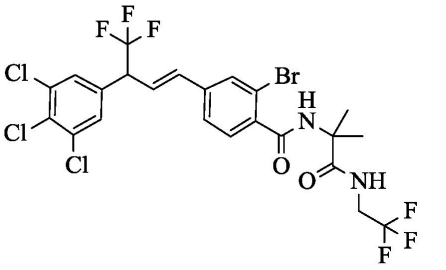
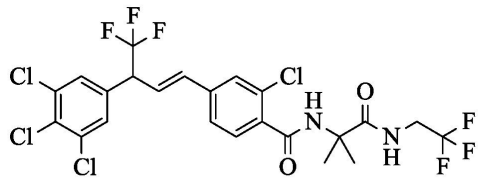
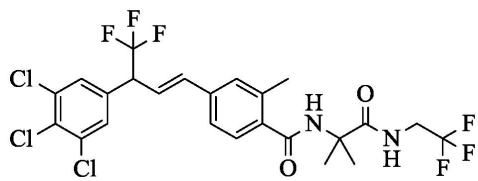
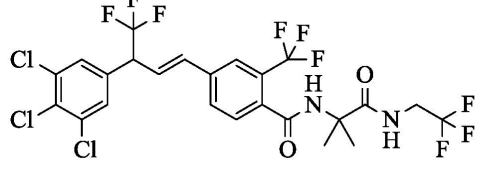
[2237]

DC67	
DC68	
DC69	
DC70	

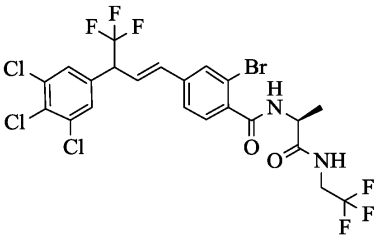
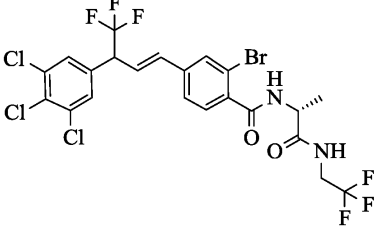
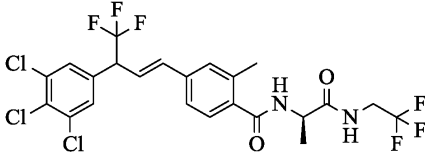
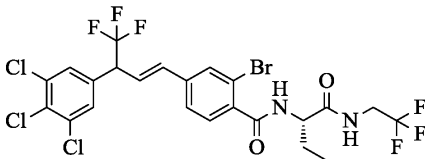
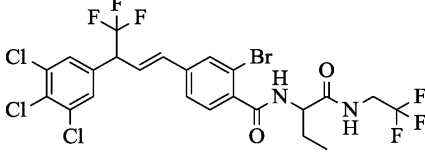
[2238]

[2239]

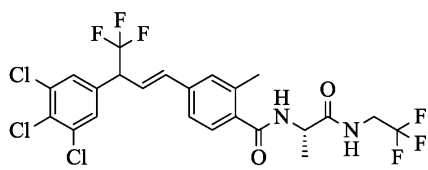
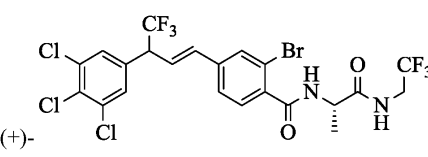
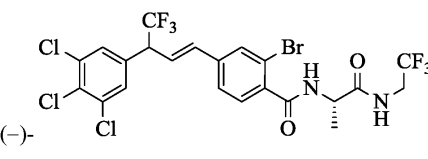
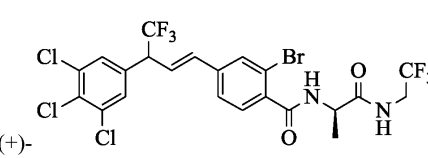
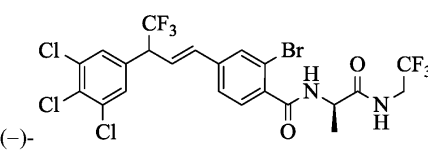
표 1A: F 화합물에 대한 구조

화합물 번호	구조	외관	다음 실시예와 같이 제조함:
F1		백색 말포체	135
F2		갈색 검	15
F3		연황색 검	15
F4		황색 고체	15

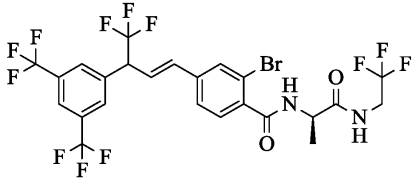
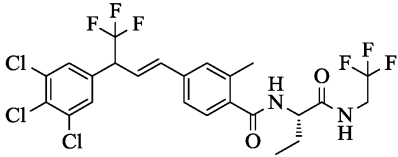
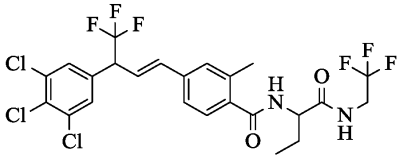
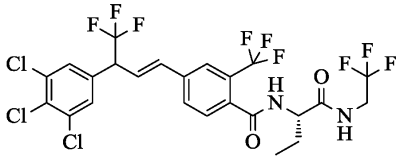
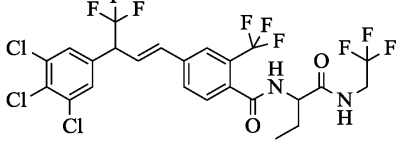
[2240]

F5			108
F6			108
F7		황색 고체	15
F8		회백색 고체	15
F8A		연황색 고체	15

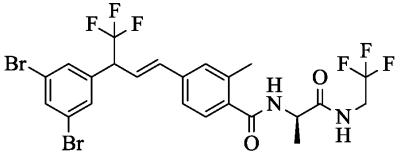
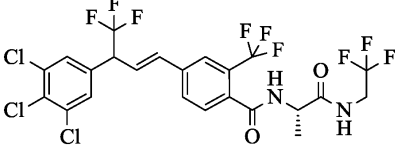
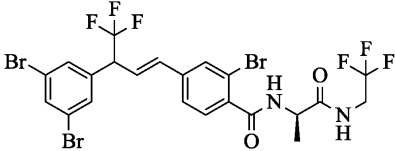
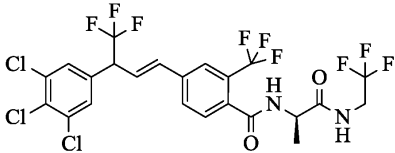
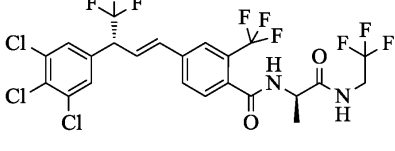
[2241]

F9		황색 고체	15
F10		회백색 고체	132
F11		회백색 고체	132
F12		회백색 고체	133
F13		회백색 고체	133

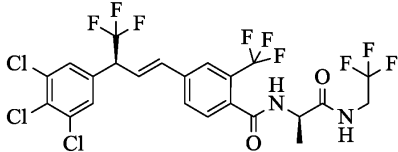
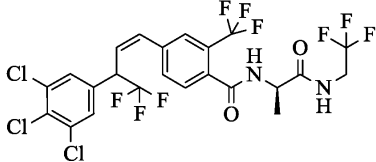
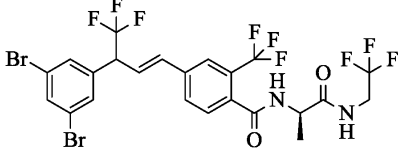
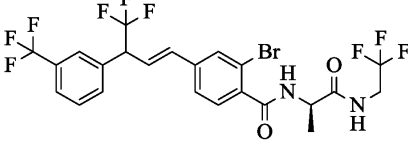
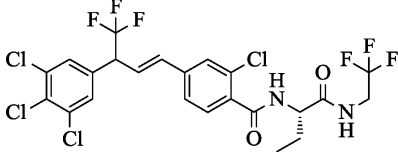
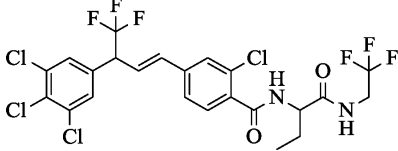
[2242]

F14		연황색 고체	15
F15		황색 고체	15
F15A		황색 고체	15
F16		연황색 고체	15
F16A		황색 고체	15

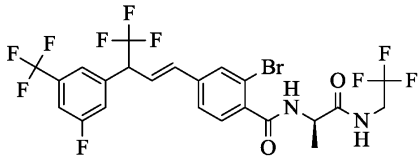
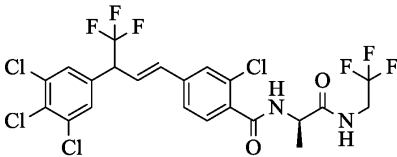
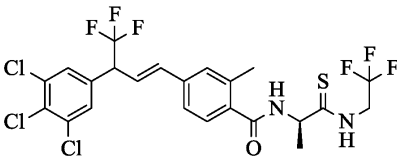
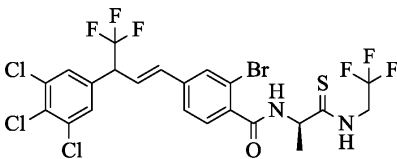
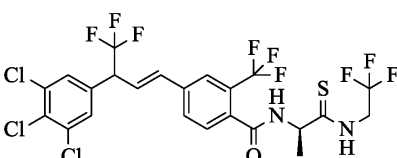
[2243]

F17		회백색 고체	15
F18		황색 고체	15
F19		황색 검	15
F20		황색 고체	15
F20A		회백색 고체	133

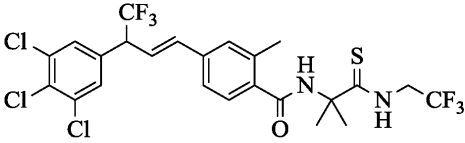
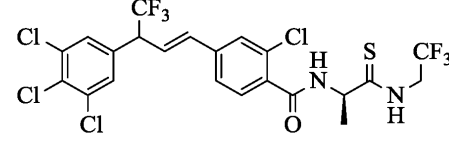
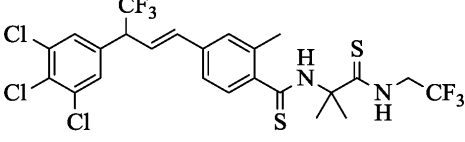
[2244]

F20B		회백색 고체	133
F20C		백색 고체	88
F21		황색 검	15
F22		담갈색 검	15
F23		연황색 액체	15
F23A		황색 고체	15

[2245]

F24		연황색 액체	15
F25		황색 고체	15
F26		갈색 검	15
F27		연황색 검	15
F28		갈색 검	15

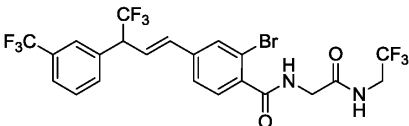
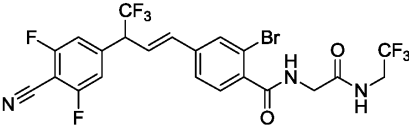
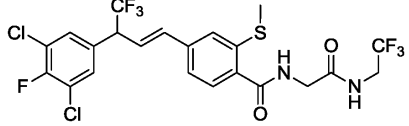
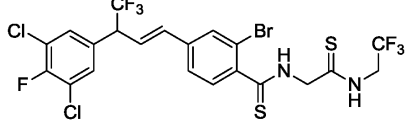
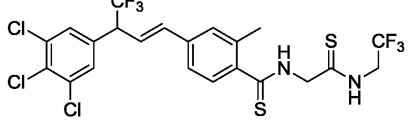
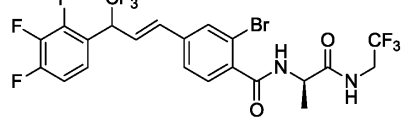
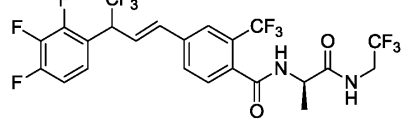
[2246]

F29		연 황색 검	19
F30		갈색 검	15
F31		연 황색 검	134

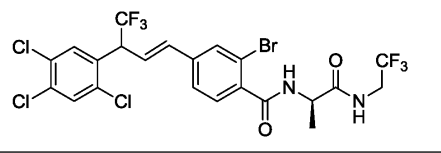
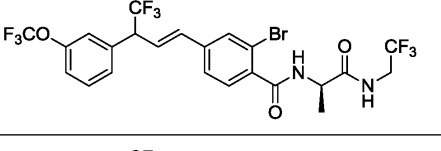
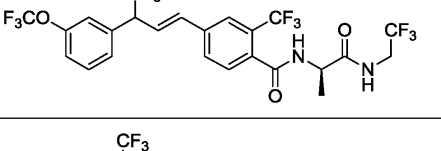
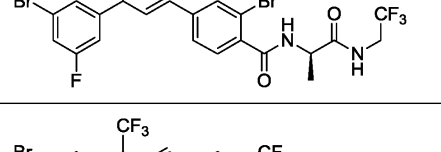
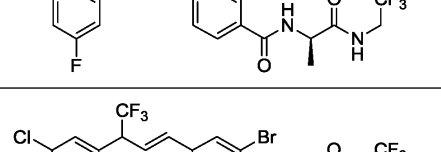
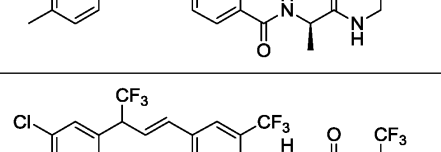
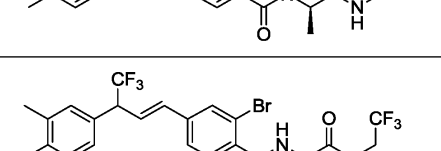
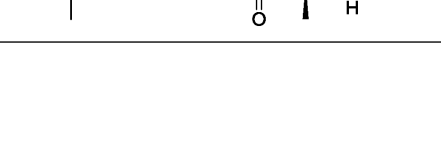
[2247]

[2248]

표 1B: 후속적으로 예시된 예측 화합물에 대한 구조

화합물 번호	구조	외관	다음 실시예와 같이 제조함:
P1		황색 고체	15
P2		갈색 검	15
P12		회백색 고체	15
P14		담황색 검	19
P15		담황색 검	19
P82		갈색 반고체	15
P84		연황색 고체	15

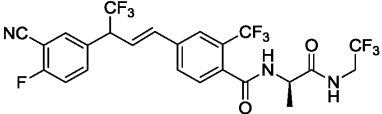
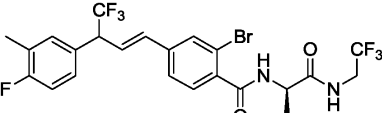
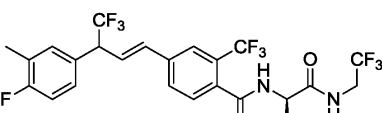
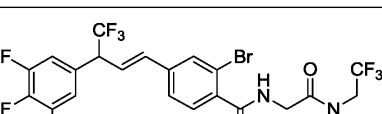
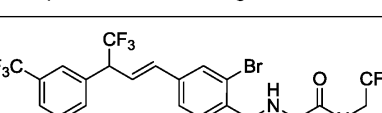
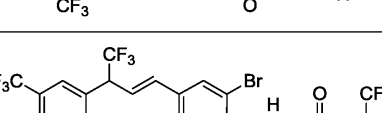
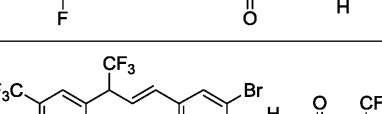
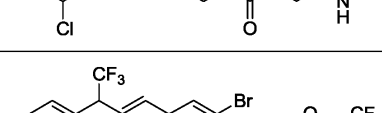
[2249]

P156		녹색 액체	15
P226		갈색 반고체	15
P228		갈색 반고체	15
P298		황색 고체	15
P300		갈색 검	15
P442		연황색 고체	15
P444		연황색 고체	15
P514		회백색 고체	15

[2250]

P516		갈색 고체	15
P568		갈색 반고체	15
P586		갈색 반고체	15
P588		갈색 반고체	15
P660		연황색 고체	15
P730		황색 고체	15
P732		갈색 반고체	15
P802		갈색 검	15

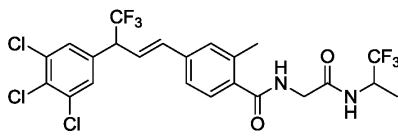
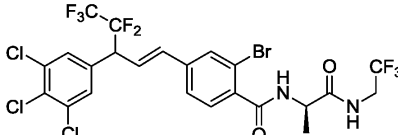
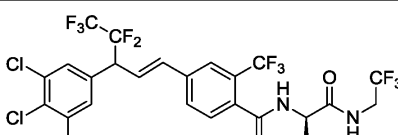
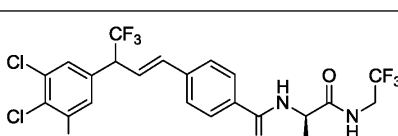
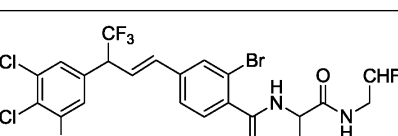
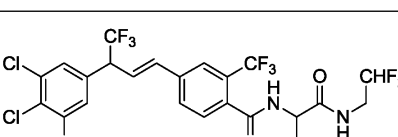
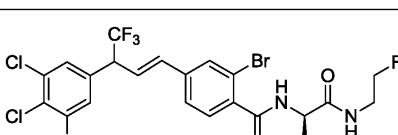
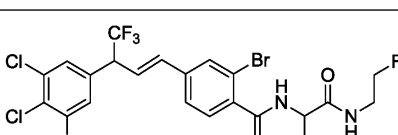
[2251]

P804		갈색 겹	15
P1090		담갈색 고체	15
P1092		갈색 반고체	15
P1197		회백색 고체	15
P1269		연황색 고체	15
P1340		연황색 액체	15
P1411		연황색 액체	15
P1483		회백색 고체	15

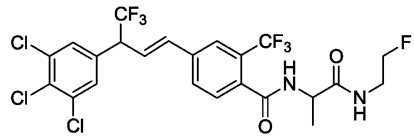
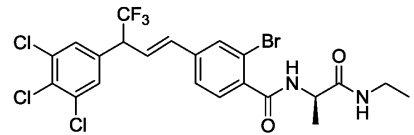
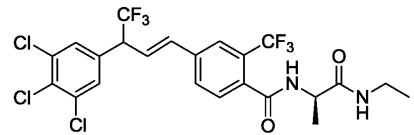
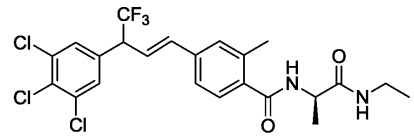
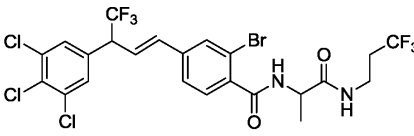
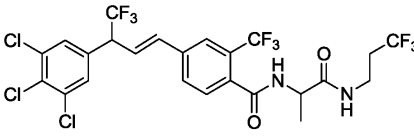
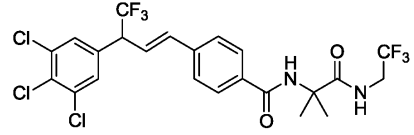
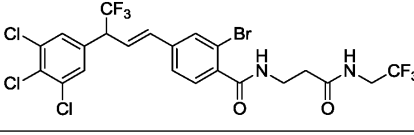
[2252]

P1556		갈색 고체	15
P1558		갈색 고체	134
P1559		갈색 검	134
P1560		회백색 고체	19
P1564		황색 고체	19
P1566		갈색 고체	15
P1589		연황색 검	15
P1591		갈색 검	15

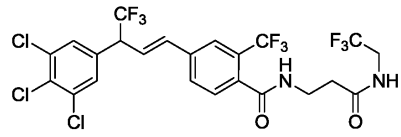
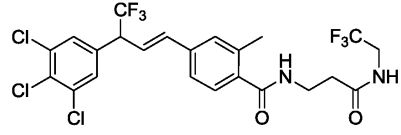
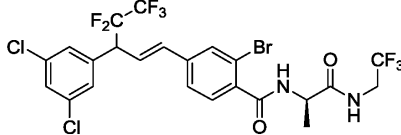
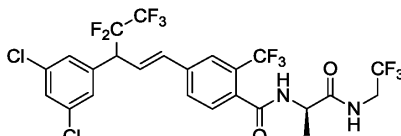
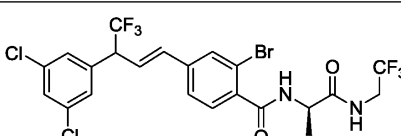
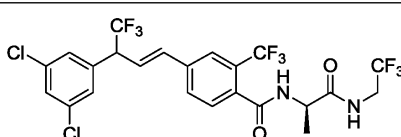
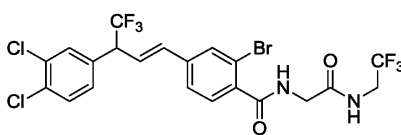
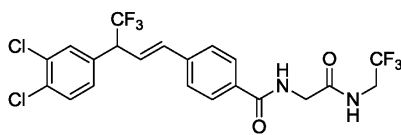
[2253]

P1592		연황색 겜	15
P1599		갈색 반고체	12
P1601		갈색 점성 액체	15
P1603		회백색 고체	135
P1611A		연황색 고체	137
P1613A		갈색 고체	137
P1616		갈색 겜	15
P1616A		연황색 반고체	137

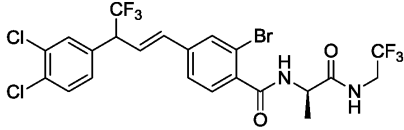
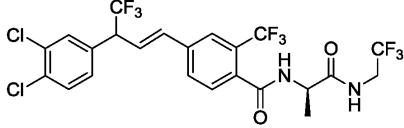
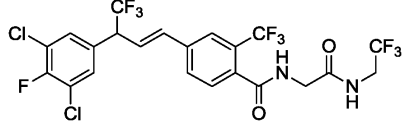
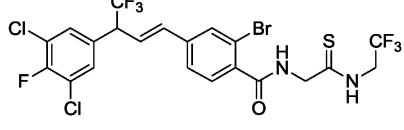
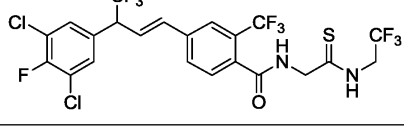
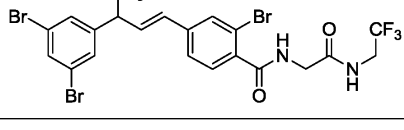
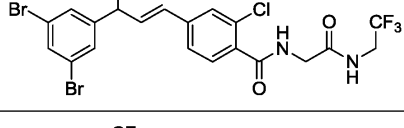
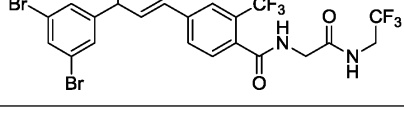
[2254]

P1618A		갈색 고체	137
P1621		갈색 점성 액체	12
P1623		갈색 액체	12
P1624		갈색 반고체	12
P1631A		갈색 점성 액체	137
P1633A		갈색 고체	137
P1636		회백색 고체	135
P1638		연황색 고체	15

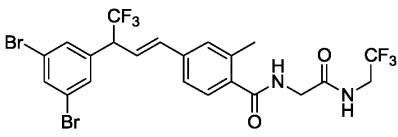
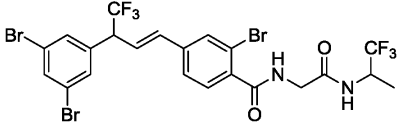
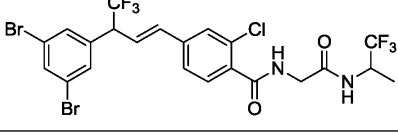
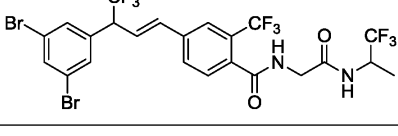
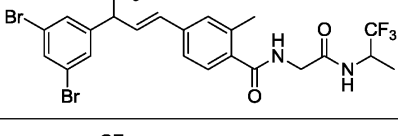
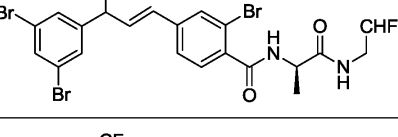
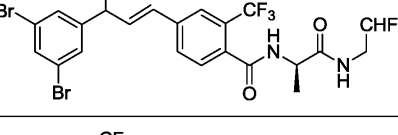
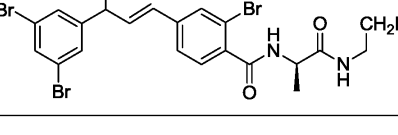
[2255]

P1640		갈색 반고체	15
P1641		갈색 고체	15
P1691		갈색 검	15
P1693		연황색 반고체	15
P1696		황색 고체	15
P1698		황색 반고체	15
P1776		백색 고체	15
P1781		백색 고체	15

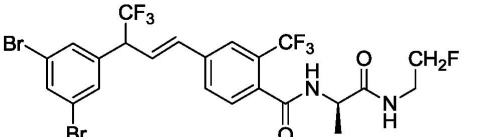
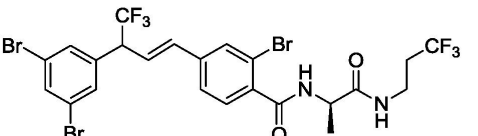
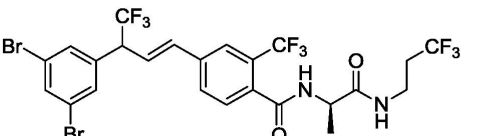
[2256]

P1806		갈색 검	15
P1808		연황색 검	15
P1862		회백색 검	15
P1864		갈색 검	19
P1866		갈색 액체	19
P1969		갈색 고체	15
P1970		갈색 검	15
P1971		연황색 고체	15

[2257]

P1972		담갈색 고체	15
P2009		황색 고체	15
P2010		황색 검	15
P2011		황색 고체	15
P2012		회백색 고체	15
P2036		갈색 고체	15
P2038		황색 액체	15
P2041		갈색 고체	15

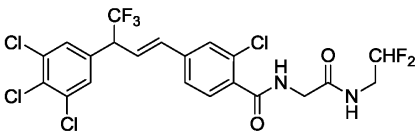
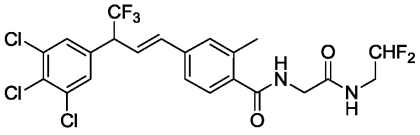
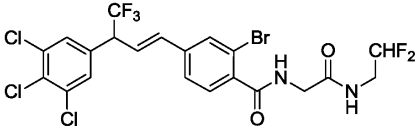
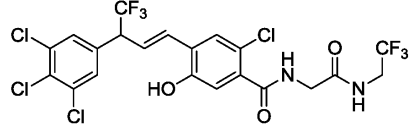
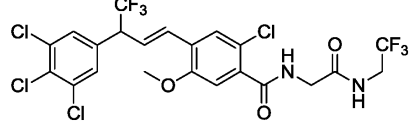
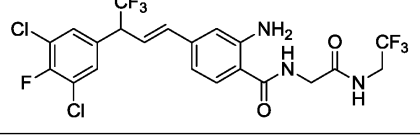
[2258]

P2043		암녹색 고체	15
P2056		갈색 고체	15
P2058		연황색 반고체	15

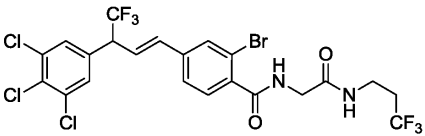
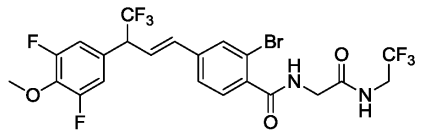
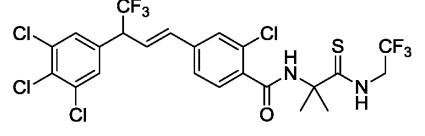
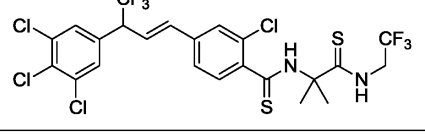
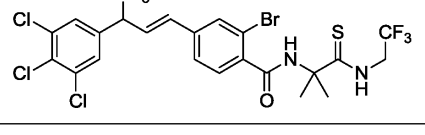
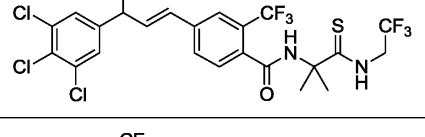
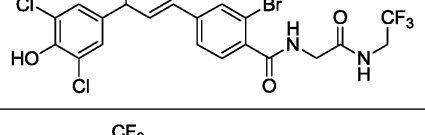
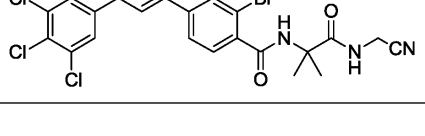
[2259]

[2260]

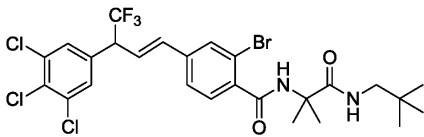
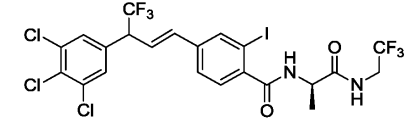
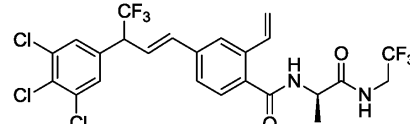
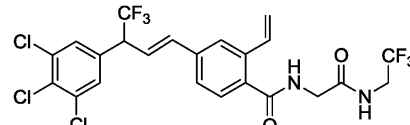
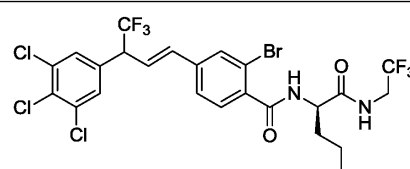
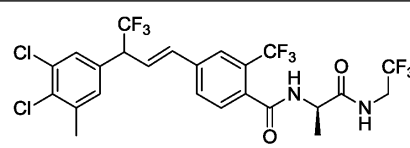
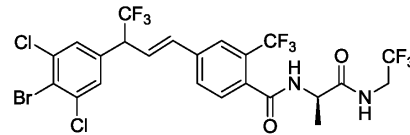
표 1C: FA 화합물에 대한 구조

화합물 번호	구조	외관	다음 실시예와 같이 제조함:
FA1		연황색 검	15
FA2		담녹색 액체	15
FA3		갈색 검	15
FA4		백색 발포체	138
FA5		백색 발포체	138
FA6		황색 고체	146

[2261]

FA7		연황색 고체	137
FA8		연황색 검	15
FA9		황색 검	134
FA10		황색 검	134
FA11		갈색 반고체	134
FA12		갈색 반고체	134
FA13		담녹색 고체	147
FA14		백색 발포체	142

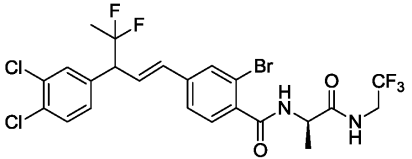
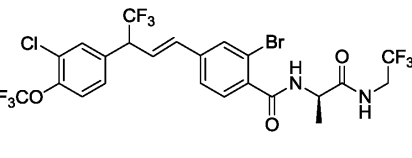
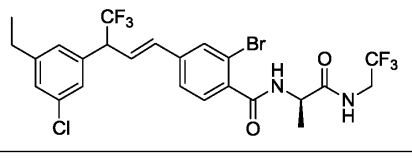
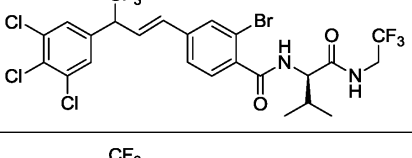
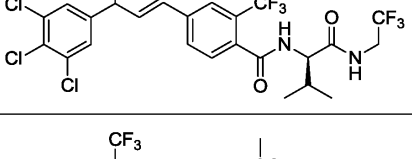
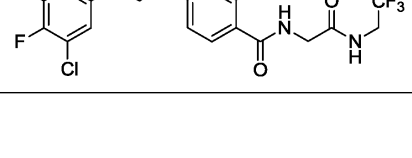
[2262]

FA15		백색 발포체	142
FA16		연 황색 고체	15
FA17		회 백색 고체	15
FA18		황색 반고체	15
FA19		연 황색 고체	15
FA20		연 황색 고체	15
FA21		갈색 검	15

[2263]

FA22		황색 검	15
FA23		담황색 오일	142
FA24		회백색 고체	15
FA25		황색 고체	15
FA26		담녹색 고체	12
FA27		연녹색 고체	12
FA28		갈색 고체	15

[2264]

FA29		갈색 액체	15
FA30		갈색 겔	12
FA31		연황색 고체	12
FA32		황색 고체	15
FA33		황색 고체	135
FA34		회백색 고체	149

[2265]

[2266]

표 2: 표 1의 화합물에 대한 분석 데이터.

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
AC1	156– 161	386.09 ([M-H] ⁻)	7.83 (m, 2H), 7.68-7.63 (m, 5H), 6.93 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.0 Hz, 1H), 6.81 (d <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.15 (m, 1H), 2.80 (s, 3H)	
AC2	110– 112	374 ([M+H] ⁺)	7.80 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 2H), 7.48 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 2H), 7.38 (m, 1H), 7.30 (s, 2H), 6.65 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.46 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.15 (m, 1H)	
AC3	162– 166	402.24 ([M+H] ⁺)	7.42 (m, 4H), 7.37 (t, <i>J</i> = 1.8 Hz, 1H), 7.28 (s, 2H), 6.63 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.41 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.4 Hz, 1H), 4.15 (m, 1H), 3.20 (s, 3H), 3.00 (s, 3H)	
AC4	122– 126	454 ([M-H] ⁻)	7.79 (d, <i>J</i> = 1.2 Hz, 2H), 7.48 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 2H), 7.38 (t, <i>J</i> = 1.8 Hz, 1H), 7.30 (s, 2H), 6.64 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 6.40 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.0 Hz, 1H), 6.30 (m, 1H), 4.15 (m, 3H)	
AC5		444.12 ([M+H] ⁺)	7.67 (s, 3H), 7.64 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 2H), 7.42 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 2H), 6.91 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.0 Hz, 1H), 6.80 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.80 (m, 1H), 3.60 (br s, 8H)	
AC6		468.40 ([M-H] ⁻)	7.40 (m, 2H), 7.26 (m, 3H), 6.56 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.48 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 5.82 (br s, 1H), 4.08 (m, 3H), 2.52 (s, 3H)	1657, 1113, 804

[2267]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
AC7		511.02 ([M-H] ⁻)	8.39 (s, 1H), 7.74 (m, 1H), 7.39 (m, 3H), 7.24 (m, 4H), 6.58 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.38 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 6.16 (br s, 1H), 4.63 (m, 2H), 4.12 (m, 1H), 2.41 (s, 3H)	3276, 1645, 1111, 801
AC8		454.11 ([M-H] ⁻)	7.39 (s, 1H), 7.22 (m, 2H), 7.19 (m, 3H), 6.53 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.39-6.34 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.22 (m, 1H), 3.95 (t, <i>J</i> = 7.0 Hz, 2H), 2.62 (t, <i>J</i> = 8.0 Hz, 2H), 2.30 (s, 3H), 2.18 (m, 2H)	1748, 1112, 801
AC9		494.02 ([M-H] ⁻)	7.45 (t, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 7.36 (m, 2H), 7.21 (m, 3H), 7.15 (m, 4H), 6.56 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.38 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.4 Hz, 1H), 6.08 (br s, 1H), 4.68 (d, <i>J</i> = 5.6 Hz, 2H), 4.11 (m, 1H), 2.44 (s, 3H)	3276, 1645, 1112, 801
A10	140–143	458.00 ([M-H] ⁻)	7.38 (t, <i>J</i> = 1.6 Hz, 1H), 7.34 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 7.27 (m, 2H), 7.24 (m, 2H), 6.57 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.40 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 6.16 (m, 1H), 5.44 (m, 1H), 4.12 (m, 1H), 3.51 (m, 2H), 3.40 (m, 2H), 2.44 (s, 3H)	
AC11		476.17 ([M-H] ⁻)	7.39-7.29 (m, 9H), 7.24 (m, 2H), 6.56 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.38 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 5.99 (br s, 1H), 4.63 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 4.11 (m, 1H), 2.47 (s, 3H)	3287, 1644, 1112, 801

[2268]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
AC12		479.30 ([M+H] ⁺)	8.63 (d, <i>J</i> = 4.4 Hz, 1H), 7.71 (m, 1H), 7.47 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.37 (m, 2H), 7.32 (m, 2H), 7.23 (m, 2H), 7.13 (m, 1H), 6.58 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.40 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.75 (d, <i>J</i> = 4.8 Hz, 2H), 4.12 (m, 1H), 2.49 (s, 3H)	3293, 1653, 1112, 800
AC13	75–78	490.04 ([M-H] ⁻)	7.38 (m, 2H), 7.27 (m, 3H), 7.23 (br s, 1H), 6.58 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.45 (m 1H), 6.42 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.4 Hz, 1H), 4.91 (m 1H), 4.64 (m, 2H), 4.14 (m, 1H), 4.04 (m, 2H), 2.46 (s, 3H)	
AC14		480.99 ([M+2H] ⁺)	8.63 (s, 2H), 7.76 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.36 (m, 3H), 7.22 (m, 1H), 7.13 (m, 2H), 6.57 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.39 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 6.13 (br s, 1H), 4.66 (d, <i>J</i> = 5.6 Hz, 2H), 4.11 (m, 1H), 2.46 (s, 3H)	3293, 1645, 1113, 800
AC15	59–61	516.86 ([M-H] ⁻)	7.45 (s, 1H), 7.37 (m, 1H), 7.34 (m, 1H), 7.26 (m, 3H), 7.22 (m, 1H), 6.57 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.40 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 6.18 (m, 1H), 4.71 (d, <i>J</i> = 6.4 Hz, 2H), 4.11 (m, 1H), 2.46 (s, 3H)	3246, 1635, 1112, 801

[2269]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
AC16		506.93 ([M+H] ⁺)	8.47 (m, 1H), 8.19 (s, 1H), 7.76 (m, 1H), 7.47 (m, 2H), 7.37 (m, 1H), 7.28 (m, 2H), 7.24 (m, 1H), 7.21 (m, 1H), 6.59 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.39 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.4 Hz, 1H), 4.12 (m, 1H), 2.48 (s, 3H), 1.88 (s, 6H)	1657, 1113, 801
AC17	70–73	494.98 ([M-H] ⁻)	7.49 (m, 2H), 7.38 (m, 1H), 7.29 (m, 4H), 7.08 (m, 3H), 6.91 (m, 1H), 6.61 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.48 (m, 1H), 6.43 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.13 (m, 1H), 2.49 (s, 3H)	
AC18	155–158	480.44 ([M+H] ⁺)	8.73 (d, <i>J</i> = 4.8 Hz, 2H), 7.53 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.37 (m, 1H), 7.27 (m, 4H), 7.23 (m, 1H), 7.11 (m, 1H), 6.60 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.41 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.90 (d, <i>J</i> = 4.8 Hz, 2H), 4.13 (m, 1H), 2.52 (s, 3H)	
AC19	55–57	471.66 ([M+H] ⁺)	7.37 (m, 1H), 7.33 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 7.27 (m, 2H), 7.22 (m, 2H), 6.57 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.39 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 6.10 (brs, 1H), 4.13 (m, 2H), 3.94 (m, 1H), 3.79 (m, 2H), 3.35 (m, 1H), 2.45 (s, 3H), 2.14 (m, 1H), 1.71 (m, 2H), 1.65 (m, 1H).	

[2270]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
AC20		467.68 ([M+H] ⁺)	7.37 (m, 2H), 7.27 (m, 2H), 7.23 (m, 2H), 6.57 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.38 (m, 3H), 6.01 (m, 1H), 4.63 (d, <i>J</i> = 5.6 Hz, 2H), 4.13 (m, 1H), 2.45 (s, 3H)	3437, 1664, 1265, 1114, 746
AC21	61–64	528.78 ([M+H] ⁺)	8.44 (s, 1H), 8.18 (s, 1H), 7.83 (br s, 1H), 7.38 (m, 2H), 7.27 (m, 2H), 7.25 (m, 2H), 7.21 (m, 1H), 6.57 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.40 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 5.01 (s, 2H), 4.11 (m, 1H), 2.43 (s, 3H)	
AC22		545.08 ([M-H] ⁻)	8.39 (s, 1H), 7.73 (m, 1H), 7.40 (s, 1H), 7.35 (m, 2H), 7.22 (m, 3H), 6.57 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.38 (dd, <i>J</i> = 16.0, 7.6 Hz, 1H), 6.14 (br s, 1H), 4.62 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 2H), 4.13 (m, 1H), 2.45 (s, 3H)	3270, 1642, 1111, 809
AC23		492.35 ([M-H] ⁻)	7.42 (s, 2H), 7.36 (m, 1H), 7.24 (m, 2H), 6.59 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.40 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 6.20 (br s, 1H), 5.46 (m, 1H), 4.15 (m, 1H), 3.52 (m, 2H), 3.41 (m, 2H), 2.45 (s, 3H)	3273, 1641, 1250, 1113, 807
AC24	129–132	526.98 ([M+H] ⁺)	7.40 (m, 2H), 7.27 (m, 2H), 7.25 (m, 2H), 6.92 (br s, 2H), 6.60 (m, 1H), 6.48 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.19 (d, <i>J</i> = 5.2, 2H), 4.08 (m, 1H), 3.99 (m, 2H), 2.46 (s, 3H)	3298, 1664, 1113, 803

[2271]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
AC25		542.24 ([M-H] ⁺)	7.41 (m, 3H), 7.27 (m, 2H), 6.58 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 6.42 (m, 2H), 4.92 (m, 1H), 4.65 (m, 2H), 4.14 (m, 1H), 4.09 (m, 2H), 2.46 (s, 3H)	3257, 1652, 1316, 1109, 807
AC26		550.69 ([M-H] ⁺)	7.45 (s, 1H), 7.40 (s, 2H), 7.34 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.22 (m, 2H), 6.54 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.38 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.71 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 2H), 4.11 (m, 1H), 2.46 (s, 3H)	3255, 1638, 1113, 809
AC27		541.00 ([M-H] ⁺)	8.46 (d, <i>J</i> = 4.0 Hz, 1H), 8.20 (s, 1H), 7.76 (m, 1H), 7.47 (m, 2H), 7.41 (s, 2H), 7.23 (m, 2H), 7.21 (m, 1H), 6.59 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.37 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.4 Hz, 1H), 4.11 (m, 1H), 2.48 (s, 3H), 1.88 (s, 6H)	1653, 1113, 809
AC28	65–67	564.84 ([M-H] ⁺)	8.40 (s, 1H), 7.74 (m, 2H), 7.42 (m, 3H), 7.36 (m, 2H), 6.72 (br s, 1H), 6.52 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.43 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.66 (d, <i>J</i> = 6.4 Hz, 2H), 4.12 (m, 1H)	3267, 1650, 1112, 809
AC29	75–78	511.78 ([M-H] ⁺)	7.71 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.42 (m, 3H), 7.35 (m, 1H), 6.75 (br s, 1H), 6.56 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.43 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 5.49 (m, 1H), 4.14 (m, 1H), 3.50 (m, 4H)	

[2272]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
AC30	110–113	543.72 ([M-H] ⁻)	7.42 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.44 (s, 1H), 7.40 (s, 1H), 7.38 (m, 1H), 7.06 (br s, 1H), 6.58 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 6.45 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.0 Hz, 1H), 4.93 (m, 1H), 4.65 (m, 2H), 4.13 (m, 3H)	
AC31	68–70	610.73 ([M+H] ⁺)	8.42 (s, 1H), 7.76 (m, 1H), 7.61 (m, 2H), 7.39 (m, 4H), 6.54–6.39 (m, 3H), 4.66 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 2H), 4.12 (m, 1H)	
AC32	78–80	555.89 ([M-H] ⁻)	7.61 (m, 2H), 7.40 (m, 3H), 6.54 (m, 2H), 6.40 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 5.46 (m, 1H), 4.14 (m, 1H), 3.50 (m, 4H)	
AC33	182–184	587.68 ([M-H] ⁻)	7.62 (s, 1H), 7.58 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.40 (m, 3H), 6.84 (br s, 1H), 6.55 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 6.45 (dd, <i>J</i> = 15.6, 7.6 Hz, 1H), 4.93 (m, 1H), 4.65 (m, 2H), 4.13 (m, 4H)	
AC34	151–153	545.83 ([M-H] ⁻)	7.67 (s, 1H), 7.61 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 7.53 (m, 1H), 7.41 (s, 2H), 6.64 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.40 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 6.18 (br s, 1H), 5.44 (m, 1H), 4.14 (m, 1H), 3.50 (m, 2H), 3.40 (m, 2H)	
AC35	100–102	577.71 ([M-H] ⁻)	7.70 (s, 1H), 7.63 (m, 1H), 7.53 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 7.41 (s, 2H), 6.53 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.49 (m, 2H), 4.93 (m, 1H), 4.64 (m, 2H), 4.13 (m, 1H), 4.03 (m, 2H)	3257, 1655, 1113, 808

[2273]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
AC36	81–83	600.83 ([M+H] ⁺)	8.40 (s, 1H), 7.73 (m, 2H), 7.61 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.52 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.40 (s, 2H), 7.35 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 6.63 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.46 (dd, <i>J</i> = 16.0, 7.6 Hz, 1H), 6.14 (m, 1H), 4.63 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 2H), 4.14 (m, 1H)	
AC37		512.68 ([M+H] ⁺)	8.39 (s, 1H), 7.73 (m, 1H), 7.48 (m, 2H), 7.34 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 7.24 (m, 3H), 6.55 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.41 (dd, <i>J</i> = 16.0, 7.6 Hz, 1H), 6.12 (m, 1H), 4.62 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 2H), 4.13 (m, 1H), 2.45 (s, 3H)	3268, 1644, 1109, 820
AC38	79–80	528.85 ([M-H] ⁻)	8.46 (m, 1H), 7.73 (m, 1H), 7.35 (m, 4H), 7.22 (m, 2H), 6.56 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.38 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.62 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 2H), 4.10 (m, 1H), 2.45 (s, 3H)	
AC39	141–144	477.83 ([M-H] ⁻)	9.19 (s, 1H), 8.79 (s, 2H), 7.37 (m, 2H), 7.23 (m, 2H), 7.21 (m, 1H), 6.57 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.40 (dd, <i>J</i> = 16.0, 7.6 Hz, 1H), 6.21 (m, 1H), 4.65 (s, 2H), 4.11 (m, 1H), 2.46 (s, 3H)	

[2274]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
AC40	69-72	484.67 ([M+H] ⁺)	8.33 (t, <i>J</i> = 5.6 Hz, 1H), 8.61 (m, 1H), 7.68 (m, 3H), 7.48 (m, 2H), 6.86 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.2 Hz 1H), 6.74 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.44 (m, 1H), 3.76 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 2H), 2.54 (m, 1H), 2.67 (s, 3H), 0.59 (m, 2H), 0.54 (m, 2H)	
AC41	196- 199	515.00 ([M-H] ⁻)	8.66 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 8.39 (t, <i>J</i> = 5.6 Hz, 1H), 7.65 (s, 3H), 7.45 (m, 3H), 6.86 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.8 Hz, 1H), 6.74 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 5.01 (m, 1H), 4.99 (m, 1H), 3.78 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 2H), 3.40 (m, 2H), 3.22 (m, 2H), 2.37 (m, 3H)	
AC42	79-82	534.72 ([M+H] ⁺)	7.99 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.89 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.51 (m, 2H), 7.44 (m, 2H), 7.27 (m, 4H), 6.71 (t, <i>J</i> = 5.2 Hz, 1H), 6.59 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.41 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 5.05 (d, <i>J</i> = 1.6 Hz, 2H), 4.12 (m, 1H), 2.52 (m, 3H)	
AC43		481.75 ([M+H] ⁺)	8.69 (s, 1H), 8.52 (s, 2H), 7.45 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 7.37 (d, <i>J</i> = 2.0 Hz, 1H), 7.26 (m, 2H), 7.21 (m, 1H), 6.83 (s, 1H), 6.58 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.40 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.4 Hz, 1H), 4.81 (d, <i>J</i> = 5.6 Hz, 2H), 4.12 (t, <i>J</i> = 8.4 Hz 1H), 2.45 (s, 3H)	1663, 1608, 1168, 1114, 801

[2275]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
AC44		528.01 ([M+H] ⁺)	8.44 (d, <i>J</i> = 2.4 Hz, 1H), 7.69 (d, <i>J</i> = 2.4 Hz, 1H), 7.37 (m, 1H), 7.33 (s, 1H), 7.31 (s, 1H), 7.26 (m, 1H), 7.24 (m, 3H), 6.57 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.39 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 5.96 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 5.32 (t, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 4.11 (t, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 2.41 (s, 3H), 1.61 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 3H)	1640, 1166, 1112, 800
AC45		512.88 ([M+H] ⁺)	7.66 (s, 1H), 7.37 (d, <i>J</i> = 6.8 Hz, 2H), 7.26 (m, 3H), 7.18 (m, 1H), 7.11 (m, 2H), 6.99 (m, 1H), 6.57 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 6.39 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.0 Hz, 1H), 4.11 (t, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 3.36 (s, 3H), 2.43 (s, 3H)	1657, 1167, 1106, 800
AC46	61-64	575.93 ([M+H] ⁺)	8.42 (d, <i>J</i> = 2.0 Hz, 1H), 7.76 (d, <i>J</i> = 2.4 Hz, 1H), 7.61 (m, 2H), 7.39 (m, 3H), 7.26 (s, 2H), 6.54 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.42 (dd, <i>J</i> = 16.0, 7.6 Hz, 1H), 4.65 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 2H), 4.14 (m, 1H)	
AC47		525.89 ([M-H] ⁻)	10.02 (s, 1H), 9.87 (s, 1H), 8.47 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 7.66 (s, 3H), 7.44 (s, 1H), 7.40 (d, <i>J</i> = 3.6 Hz, 2H), 6.86 (dd, <i>J</i> = 15.6, 9.2 Hz, 1H), 6.74 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.82 (t, <i>J</i> = 9.6 Hz, 2H), 3.88 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 2H), 2.36 (s, 3H), 1.63 (m, 1H), 0.76 (m, 4H)	3280, 1640

[2276]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
AC48		509.96 ([M-H] ⁻)	7.37 (m, 7H), 7.34 (m, 3H), , 6.57 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.39 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 6.01 (m, 1H), 4.60 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 2H), 4.13 (m, 1H), 2.46 (s, 3H)	3275, 1642
AC49		518.85 ([M+H] ⁺)	8.39 (d, <i>J</i> = 2.0 Hz, 1H), 8.11 (m, 1H), 7.71 (d, <i>J</i> = 2.4 Hz, 1H), 7.41 (m, 3H), 7.17 (m, 3H), 6.59 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.47 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.66 (d, <i>J</i> = 5.6 Hz, 2H), 4.14 (m, 1H)	1658, 1112, 1025, 2219
AC50		481.88 ([M+H] ⁺)	8.72 (m, 1H), 7.67 (s, 3H), 7.46 (s, 1H), 7.40 (m, 2H), 7.08 (s, 1H), 6.82 (m, 2H), 6.55 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 4.82 (m, 1H), 4.48 (s, 2H), 3.65 (s, 3H), 2.38 (s, 3H)	1654, 1112, 800, 3069
AC51		540.83 ([M+H] ⁺)	7.45 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 7.38 (m, 1H), 7.27 (m, 2H), 7.22 (m, 2H), 6.85 (m, 1H), 6.58 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.40 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.33 (m, 2H), 4.14 (m, 3H), 3.18 (s, 3H), 2.48 (s, 3H)	1652, 1571, 802, 1114, 2926
AC52		488.29 ([M-H] ⁻)	7.33 (m, 2H), 7.25 (m, 3H), 6.56 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 6.37 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.0 Hz, 1H), 5.61 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 4.21 (m, 1H), 4.01 (m, 1H), 4.08 (m, 2H), 3.56 (t, <i>J</i> = 10.0 Hz, 2H), 2.48 (m, 2H), 2.08 (m, 2H), 1.5 (m, 3H)	1635, 11134, 813, 2927

[2277]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
AC53		532.92 ([M+H] ⁺)	8.49 (d, <i>J</i> = 2.0 Hz, 1H), 7.69 (d, <i>J</i> = 2.4 Hz, 1H), 7.43 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.34 (m, 3H), 7.26 (m, 2H), 6.95 (m, 1H), 6.58 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.38 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.72 (d, <i>J</i> = 5.2 Hz, 2H), 4.09 (m, 1H), 2.47 (s, 3H)	1651, 3027, 815, 1113
AC54		529.06 ([M-H] ⁻)	8.37 (d, <i>J</i> = 5.2 Hz, 1H), 7.41 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.36 (m, 3H), 7.31 (m, 1H), 7.26 (m, 2H), 6.58 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.40 (dd, <i>J</i> = 16.0, 7.6 Hz, 1H), 5.20 (t, <i>J</i> = 5.6 Hz, 1H), 4.63 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 2H), 4.13 (m, 1H), 2.18 (s, 3H)	1654, 3434, 814, 1112
AC57		464.96 ([M+H] ⁺)	8.69 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 8.58 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 7.92 (s, 1H), 7.87 (d, <i>J</i> = 6.4 Hz, 2H), 7.62 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.45 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.0 (m, 1H), 6.76 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 6.76 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.0 Hz, 1H), 4.01 (m, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 3.71 (m, 2H), 3.49 (m, 2H)	3417, 1658, 1165, 817
AC58	124.4- 126.9	599.76 ([M+H] ⁺)	7.62 (m, 2H), 7.40 (s, 2H), 7.37 (d, <i>J</i> = 1.6 Hz, 1H), 6.61 (t, <i>J</i> = 4.8 Hz, 1H), 6.55 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.41 (dd, <i>J</i> = 16.0, 7.6 Hz, 1H), 4.16 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 2H), 4.01 (m, 1H), 1.56 (s, 9H)	

[2278]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
AC59	80-83	497.40 ([M-H] ⁻)	8.42 (d, <i>J</i> = 2.1 Hz, 1H), 8.29 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 7.51 (m, 2H), 7.39 (m, 1H), 7.36 (m, 4H), 7.28 (m, 1H), 6.61 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 6.45 (dd, <i>J</i> = 15.9, 7.8 Hz 1H), 4.14 (t, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 2.51 (s, 3H)	
AC60		515.09 ([M+H] ⁺)	8.52 (s, 1H), 8.39 (d, <i>J</i> = 1.8 Hz, 2H), 7.70 (d, <i>J</i> = 2.1 Hz, 1H), 7.62 (s, 1H), 7.43 (s, 1H), 7.35 (m, 3H), 6.62 (d, <i>J</i> = 16.2 Hz, 1H), 6.52 (dd, <i>J</i> = 16.2, 7.5 Hz, 1H), 4.62 (d, <i>J</i> = 6.3 Hz, 2H), 4.19 (m, 1H), 2.76 (s, 3H)	1668, 1589, 1167, 1113, 802
AC61		461.90 ([M-H] ⁻)	8.07 (t, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.39 (t, <i>J</i> = 2.0 Hz, 1H), 7.28 (d, <i>J</i> = 1.2 Hz, 3H), 7.17 (d, <i>J</i> = 1.6 Hz, 1H), 7.11 (m, 1H), 6.59 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 6.47 (dd, <i>J</i> = 15.6, 7.6 Hz, 1H), 5.49 (m, 1H), 4.14 (t, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 3.48 (m, 4H)	1658, 1114, 801
AC62	105- 108	528.88 ([M-H] ⁻)	8.62 (t, <i>J</i> = 6.4 Hz, 1H), 8.46 (m, 1H), 7.73 (m, 5H), 7.48 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 7.03 (dd, <i>J</i> = 15.6, 9.2 Hz, 1H), 6.81 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.86 (m, 1H), 3.97 (m, 4H)	

[2279]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
AC63	77-80	594.67 ([M+H] ⁺)	8.43 (s, 1H), 7.76 (d, <i>J</i> = 2.4 Hz, 1H), 7.60 (m, 2H), 7.38 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 7.33 (d, <i>J</i> = 6.4 Hz, 3H), 6.54 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.46 (m, 1H), 6.41 (dd, <i>J</i> = 16.0 8.0 Hz, 1H), 4.65 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 2H), 4.15 (m, 1H)	3257, 1653
AC64	83-85	580.72 ([M-H] ⁻)	7.72 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.44 (s, 1H), 7.40 (s, 2H), 7.36 (d, <i>J</i> = 6.8 Hz, 1H), 7.05 (t, <i>J</i> = 5.2 Hz, 1H), 6.70 (t, <i>J</i> = 5.2 Hz, 1H), 6.57 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 6.44 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.0 Hz, 1H), 4.23 (d, <i>J</i> = 5.6 Hz, 2H), 4.15 (m, 1H), 4.01 (m, 2H)	
AC65		534.72 ([M-H] ⁻)	8.39 (d, <i>J</i> = 2.0 Hz, 1H), 8.12 (t, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.71 (d, <i>J</i> = 2.4 Hz, 1H), 7.34 (m, 3H), 7.26 (m, 1H), 7.11 (m, 2H), 6.59 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.46 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.66 (d, <i>J</i> = 5.2 Hz, 2H), 4.13 (m, 1H)	1658, 1113, 817, 2925
AC66	73-75	624.61 ([M-H] ⁻)	7.88 (s, 1H), 7.63 (d, <i>J</i> = 1.6 Hz, 1H), 7.57 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.40 (m, 2H), 6.80 (t, <i>J</i> = 5.6 Hz, 1H), 6.70 (t, <i>J</i> = 5.6 Hz, 1H), 6.56 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.44 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.22 (m, 2H), 4.12 (m, 1H), 4.01 (m, 2H)	

[2280]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
AC67		479.82 ([M-H] ⁻)	8.07 (t, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.34 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 2H), 7.28 (s, 1H), 7.17(s, 2H), 6.59 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 6.46 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.0 Hz, 1H), 5.49 (m, 1H), , 4.12 (m, 1H), 3.49 (m, 4H).	3272, 1644
AC68	90-93	546.80 ([M-H] ⁻)	8.6 (t, <i>J</i> = 6.4 Hz, 1H), 8.45 (m, 1H), 7.86 (d, <i>J</i> = 6.4 Hz, 2H), 7.75 (t, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.63 (d, <i>J</i> = 12.0 Hz, 1H), 7.48 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.03 (dd, <i>J</i> = 15.6, 9.6 Hz, 1H), 6.80 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.88 (m, 1H), 3.96 (m, 4H)	3315, 1684
AC69		542.82 ([M-H] ⁻)	7.41 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.34 (d, <i>J</i> = 5.6 Hz, 2H), 7.26 (m, 1H), 7.23 (m, 1H), 6.81 (s, 1H), 6.57 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 6.55 (s, 1H), 6.39 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.0 Hz, 1H), 4.18 (m, 2H), 4.13 (m, 1H), 3.97 (m, 2H), 2.46 (s, 3H)	3294, 1685
AC70	176- 178	545.23 ([M-H] ⁻)	8.38 (d, <i>J</i> = 2.4 Hz, 1H), 8.22 (d, <i>J</i> = 6.8 Hz, 2H), 7.71 (d, <i>J</i> = 2.4 Hz, 1H), 7.35 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 2H), 7.30 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 7.15 (d, <i>J</i> = 1.6 Hz, 1H), 6.93 (d, <i>J</i> = 1.2 Hz, 1H), 6.60 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 6.43 (dd, <i>J</i> = 15.6, 7.6 Hz, 1H), 4.66 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 2H), 4.13 (m, 1H), 3.98 (s, 3H)	

[2281]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
AC71		492.20 ([M-H] ⁻)	8.24 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 8.15 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.35 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 2H), 7.13 (d, <i>J</i> = 1.2 Hz, 1H), 6.92 (s, 1H), 6.61 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.43 (dd, <i>J</i> = 16.0, 7.6 Hz, 1H), 5.48 (m, 1H), 4.13 (m, 1H), 4.03 (s, 3H), 3.48 (m, 4H)	1639, 3079, 858
AC72		543.05 ([M-H] ⁻)	8.42 (d, <i>J</i> = 2.4 Hz, 1H), 7.75 (d, <i>J</i> = 2.4 Hz, 1H), 7.34 (m, 4H), 7.20 (m, 2H), 6.60 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.36 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 6.12 (t, <i>J</i> = 5.6 Hz, 1H), 4.62 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 2H), 4.20 (m, 1H), 2.82 (m, 2H), 1.45 (t, <i>J</i> = 5.6 Hz, 3H)	1642, 3246, 814, 1113
AC75		644.78 ([M+H] ⁺)	8.72 (s, 1H), 7.97 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 7.70 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.61 (m, 2H), 7.40 (m, 2H), 6.55 (m, 2H), 6.42 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.76 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 2H), 4.12 (m, 1H)	3431, 1652, 1171, 809
AC76		531.34 ([M+H] ⁺)	8.87 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 8.34 (d, <i>J</i> = 2.1 Hz, 1H), 7.85 (d, <i>J</i> = 6.3 Hz, 3H), 7.48 (m, 4H), 6.57 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 6.45 (dd, <i>J</i> = 15.6, 9.0 Hz, 1H), 4.84 (m, 1H), 4.49 (d, <i>J</i> = 5.7 Hz, 2H), 2.82 (m, 2H), 2.36 (t, <i>J</i> = 5.6 Hz, 3H)	3120, 1708, 1171

[2282]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
AC77		531.1 ([M+H] ⁺)	8.87 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 8.34 (d, <i>J</i> = 2.1 Hz, 1H), 7.85 (d, <i>J</i> = 6.3 Hz, 3H), 7.48 (m, 4H), 6.57 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 6.45 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.0 Hz, 1H), 4.84 (m, 1H), 4.49 (d, <i>J</i> = 5.7 Hz, 2H), 2.36 (s, 3H)	3444, 1648, 1114, 814
AC78		561.06 ([M+H] ⁺)	8.59 (t, <i>J</i> = 6.4 Hz, 1H), 8.47 (t, <i>J</i> = 5.6 Hz, 1H), 7.89 (s, 2H), 7.45 (m, 3H), 6.87 (m, 1H), 6.75 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.85 (t, <i>J</i> = 8.0 Hz 1H), 3.98 (m, 4H), 2.58 (s, 3H)	3432, 1631, 1161, 840
AC79		610.97 ([M+H] ⁺)	8.69 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 8.58 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 7.92 (s, 1H), 7.87 (d, <i>J</i> = 6.4 Hz, 2H), 7.62 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.45 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.0 (m, 1H), 6.76 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H) 4.83 (t, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 3.98 (m, 4H)	3303, 1658, 1166, 817
AC80		561.06 ([M+H] ⁺)	7.37 (m, 3H), 7.26 (m, 1H), 7.24 (m, 1H), 6.59 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 6.39 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.0 Hz, 1H), 4.24 (m, 4H), 3.90 (m, 1H), 2.83 (m, 2H), 1.26 (m, 3H)	3412, 1624, 1157, 825
AC81	9-92	546.93 ([M-H] ⁻)	8.73 (d, <i>J</i> = 5.6 Hz, 1H), 8.45 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 7.76 (s, 3H), 7.45 (m, 3H), 6.86 (dd, <i>J</i> = 16.0, 9.2 Hz, 1H), 4.83 (m, 1H), 4.56 (m, 2H), 4.51 (m, 1H), 4.10 (m, 2H), 3.85 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 2H), 2.50 (m, 3H)	

[2283]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
AC82		477.69 ([M+H] ⁺)	7.38 (d, <i>J</i> = 1.8 Hz, 2H), 7.33 (s, 1H), 7.27 (s, 3H), 6.58 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.42 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 6.36 (dd, <i>J</i> = 16.0, 7.8 Hz, 1H), 4.71 (m, 1H), 4.23 (m, 3H), 3.26 (m, 2H), 2.45 (s, 3H)	1646, 1353, 1196, 1112, 800
AC83		493.83 ([M-H] ⁻)	8.07 (t, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.39 (t, <i>J</i> = 1.6 Hz, 1H), 7.31 (d, <i>J</i> = 1.2 Hz, 1H), 7.26 (m, 2H), 7.23 (m, 1H), 7.19 (d, <i>J</i> = 1.6 Hz, 1H), 6.60 (d, <i>J</i> = 16.8 Hz, 1H), 6.49 (dd, <i>J</i> = 16.8, 7.6 Hz, 1H), 4.90 (m, 1H), 4.64 (m, 2H), 4.14 (m, 2H), 4.10 (m, 1H)	1527, 1113, 801, 1167, 1321
AC84		511.75 ([M-H] ⁻)	8.07 (t, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.34 (m, 3H), 7.19 (d, <i>J</i> = 13.2 Hz, 1H), 6.60 (d, <i>J</i> = 16.4 Hz, 1H), 6.48 (dd, <i>J</i> = 16.4, 8.0 Hz, 1H), 4.88 (m, 1H), 4.62 (m, 2H), 4.12 (m, 3H)	1645, 1113, 804, 3030, 1245
AC85		523.83 ([M-H] ⁻)	8.60 (d, <i>J</i> = 6.8 Hz, 1H), 8.15 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.35 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 7.15 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 6.94 (s, 1H), 6.60 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 6.44 (dd, <i>J</i> = 7.6, 7.6 Hz, 1H), 4.93 (m, 1H), 4.62 (m, 2H), 4.13 (m, 6H)	1652, 3039, 802, 1114

[2284]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
AC86		524.36 ([M+H] ⁺)	7.35 (d, <i>J</i> = 6.3 Hz, 3H), 7.26 (m, 2H), 7.20 (m, 1H), 6.60 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 6.47 (dd, <i>J</i> = 15.9, 6.6 Hz, 1H), 4.86 (m, 1H), 4.65 (m, 2H), 4.13 (m, 3H), 2.84 (q, 2.8 Hz, 2H), 1.26 (m, 3H)	3333, 1651, 815
AC87		495.82 ([M-H] ⁻)	8.07 (t, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.52 (m, 3H), 7.19 (d, <i>J</i> = 13.2 Hz, 1H), 6.59 (d, <i>J</i> = 16.4 Hz, 1H), 6.47 (dd, <i>J</i> = 16.4, 8.0 Hz, 1H), 4.69 (m, 1H), 4.23 (m, 3H), 3.29 (m, 2H)	1623, 1114, 816
AC89		509.89 ([M+H] ⁺)	7.43 (m, 2H), 7.27 (m, 2H), 7.23 (m, 2H), 6.58 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.41 (dd, <i>J</i> = 16.0, 7.6 Hz, 1H), 4.79 (d, <i>J</i> = 5.6 Hz, 2H), 4.14 (m, 1H), 2.48 (s, 3H), 2.18 (m, 1H), 1.16 (m, 4H)	1666, 1166, 1112, 800
AC90		656.9 ([M-H] ⁻)	8.34 (m, 1H), 8.27 (m, 1H), 7.60 (d, <i>J</i> = 1.6 Hz, 1H), 7.49 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 2H), 7.40 (s, 2H), 7.36 (dd, <i>J</i> = 8.2, 1.7 Hz, 1H), 6.53 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.38 (dd, <i>J</i> = 15.9, 7.9 Hz, 1H), 4.89 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 2H), 4.48 (d, <i>J</i> = 9.0 Hz, 2H), 4.11 (m, 1H)	

[2285]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
AC91		640.9 ([M-H] ⁻)	8.18 (t, <i>J</i> = 5.0 Hz, 1H), 7.58 (d, <i>J</i> = 1.6 Hz, 1H), 7.47 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.40 (s, 2H), 7.34 (dd, <i>J</i> = 8.1, 1.6 Hz, 1H), 6.52 (m, 2H), 6.37 (dd, <i>J</i> = 15.9, 7.9 Hz, 1H), 4.54 (d, <i>J</i> = 4.9 Hz, 2H), 4.12 (m, 1H), 3.99 (qd, <i>J</i> = 8.9, 6.5 Hz, 2H)	
AC92		640.9 ([M-H] ⁻)	9.16 (d, <i>J</i> = 6.1 Hz, 1H), 7.65 (d, <i>J</i> = 1.6 Hz, 1H), 7.57 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.41 (m, 3H), 7.21 (t, <i>J</i> = 5.6 Hz, 1H), 6.55 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 6.41 (dd, <i>J</i> = 15.9, 7.8 Hz, 1H), 4.59 (d, <i>J</i> = 5.6 Hz, 2H), 4.45 (qd, <i>J</i> = 9.0, 6.0 Hz, 2H), 4.12 (q, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H)	
AC93		485.5 ([M+H] ⁺)	7.52-7.41 (d, <i>J</i> = 8.2 Hz, 1H), 7.39-7.34 (m, 1H), 7.24-7.17 (d, <i>J</i> = 1.8 Hz, 2H), 7.02-6.92 (m, 2H), 6.90-6.83 (d, <i>J</i> = 11.4 Hz, 1H), 6.71 (br s, 1H), 6.17 (br s, 1H), 6.12-6.01 (dd, <i>J</i> = 11.4, 10.3 Hz, 1H), 4.44-4.38 (d, <i>J</i> = 4.2 Hz, 1H), 4.35-4.27 (m, 1H), 4.10-3.99 (d, <i>J</i> = 5.1 Hz, 2H), 2.78-2.67 (m, 1H), 2.44 (s, 3H), 0.88-0.78 (m, 2H), 0.60-0.45 (m, 2H)	¹³ C NMR (δ) ³ 169.91, 169.84, 138.23, 137.41, 136.84, 134.79, 134.69, 131.07, 128.69, 127.49, 127.43, 126.72, 126.61 (q, <i>J</i> = 212.10 Hz), 125.61, 123.76, 47.89 (q, <i>J</i> = 28.28 Hz), 43.46, 22.65, 19.97, 8.21

[2286]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
AC94		511.6 ([M] ⁺)	8.36 - 8.24 (d, <i>J</i> = 2.4 Hz, 1H), 7.75 - 7.64 (m, 1H), 7.38 - 7.24 (m, 3H), 7.24 - 7.09 (d, <i>J</i> = 1.8 Hz, 2H), 6.99 - 6.90 (m, 2H), 6.89 - 6.74 (d, <i>J</i> = 11.4 Hz, 1H), 6.63 - 6.43 (m, 1H), 6.14 - 5.98 (m, 1H), 4.69 - 4.51 (d, <i>J</i> = 6.1 Hz, 2H), 4.37 - 4.20 (m, 1H), 2.46 - 2.31 (s, 3H)	3262, 1607, 1247, 1164, 1111
AC95	48-61	626.9 ([M+H] ⁺)	7.58 (d, <i>J</i> = 7.9 Hz, 1H), 7.44 - 7.29 (m, 3H), 7.14 (dd, <i>J</i> = 7.9, 1.6 Hz, 1H), 6.86 (d, <i>J</i> = 11.4 Hz, 1H), 6.76 (t, <i>J</i> = 5.9 Hz, 1H), 6.59 (br s, 1H), 6.21 - 6.04 (m, 1H), 4.23 (d, <i>J</i> = 5.5 Hz, 1H), 3.98 (qd, <i>J</i> = 9.0, 6.5 Hz, 2H)	
AC96		61 9.6 ([M+H] ⁺)	8.83 (s, 1H), 8.06 (br, 1H), 7.90 (s, 2H), 7.63 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 2H), 7.53 (m, 1H), 6.94 (m, 1H), 6.77 (d, <i>J</i> = 15.3 Hz, 1H), 6.63 (d, <i>J</i> = 9.3 Hz, 1H), 4.84 (m, 1H), 4.30 (d, <i>J</i> = 5.6 Hz, 2H), 2.99 (s, 6H)	1616, 1114
AC97		606.6 ([M+H] ⁺)	8.20 (d, <i>J</i> = 2.1 Hz, 1H), 7.73 (d, <i>J</i> = 2.7 Hz, 1H), 7.60 (m, 2H), 7.39 (s, 2H), 7.29 (m, 1H), 6.79 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 6.55 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 6.40 (m, 2H), 4.60 (d, <i>J</i> = 2.7 Hz, 2H), 4.13 (m, 1H), 3.95 (s, 3H)	1644, 1113

[2287]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
AC98		577.87 ([M+H] ⁺)	9.04 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 8.60 (t, <i>J</i> = 6.6 Hz, 1H), 8.25 (s, 1H), 7.97 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.87 (d, <i>J</i> = 6.3 Hz, 2H), 7.69 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 7.15 (dd, <i>J</i> = 15.9, 9.3 Hz, 1H), 6.89 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 4.86 (m, 1H), 3.98 (m, 4H).	1663, 1168
AC99		574.81 ([M+H] ⁺)	8.69 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 8.58 (t, <i>J</i> = 6.6 Hz, 1H), 7.91 (s, 1H), 7.85 (m, 1H), 7.61 (m, 2H), 7.52 (m, 2H), 6.98 (dd, <i>J</i> = 15.3, 9.0 Hz, 1H), 6.76 (d, <i>J</i> = 15.3 Hz, 1H), 4.81 (m, 1H), 4.01 (m, 4H)	1650, 1164
AC100		673.80 ([M+H] ⁺)	8.29 (s, 1H), 8.22 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.93 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 7.72 (m, 1H), 7.65 (m, 2H), 7.40 (s, 2H), 7.18 (br, 1H), 6.59 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.43 (dd, <i>J</i> = 16.0, 7.6 Hz, 1H), 5.02 (d, <i>J</i> = 1.2 Hz, 2H), 4.12 (m, 1H)	3403, 1659
AC101		636.83 ([M+H] ⁺)	7.56 (d, <i>J</i> = 9.0 Hz, 1H), 7.39 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 2H), 7.26 (m, 2H), 6.54 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 6.37 (dd, <i>J</i> = 8.0, 15.9 Hz, 1H), 4.01 (m, 1H), 3.84 (m, 2H), 3.33 (m, 2H), 3.04 (m, 2H), 2.84 (m, 3H), 2.62 (m, 1H)	1637, 1113

[2288]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
AC102		592.84 ([M+H] ⁺)	7.60 (m, 2H), 7.32 (m, 1H), 7.03 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 2H), 6.74 (br, 1H), 6.62 (br, 1H), 6.56 (d, <i>J</i> = 16.2 Hz, 1H), 6.41 (dd, <i>J</i> = 16.2, 7.8 Hz, 1H), 4.22 (d, <i>J</i> = 5.4 Hz, 2H), 4.14 (m, 1H), 4.01 (m, 2H)	1668, 1167
AC103	99.2- 105.0	612.7 ([M+H] ⁺)	8.40 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.92 (d, <i>J</i> = 5.2 Hz, 1H), 7.59 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.35 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 6.99 (dd, <i>J</i> = 16.0, 7.6 Hz, 1H), 6.76 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 4.84 (m, 1H), 4.23 (d, <i>J</i> = 13.2 Hz, 1H), 3.97 (m, 1H), 3.79 (d, <i>J</i> = 13.6 Hz, 1H), 3.16 (t, <i>J</i> = 11.2 Hz, 1H), 2.77 (t, <i>J</i> = 11.2 Hz, 1H), 1.99 (s, 3H), 1.88 (m, 2H), 1.45 (m, 2H)	1634, 1113, 809
AC104		680.97 ([M+H] ⁺)	7.60 (m, 2H), 7.40 (m, 3H), 6.55 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 6.41 (dd, <i>J</i> = 15.6, 7.8 Hz, 1H), 4.24 (m, 1H), 3.34 (m, 2H), 2.90 (m, 1H), 2.24 (m, 2H), 1.52 (m, 2H), 1.34 (m, 4H)	3437, 1644, 1113, 807, 511
AC105		609.9 ([M+H] ⁺)	7.59 (s, 1H), 7.55 (m, 1H), 7.50 (m, 1H), 7.40 (m, 2H), 6.54 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.50 (<i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.14 (m, 2H), 3.08 (m, 4H), 2.67 (m, 2H), 2.12 (m, 2H), 1.70 (m, 2H).	3303, 1649, 1115, 2242, 809, 506

[2289]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
AC106		584.95 ([M+H] ⁺)	7.59 (s, 1H), 7.51 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.40 (s, 2H), 7.36 (d, <i>J</i> = 6.8 Hz, 1H), 6.54 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.40 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 6.03 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 4.11 (m, 2H), 3.10 (m, 2H), 2.50 (m, 2H), 2.50 (s, 3H) (m, 2H), 1.94 (m, 2H)	3417, 1648, 1112, 805, 555
AC107		609.9 ([M+H] ⁺)	8.41 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 7.90 (s, 2H), 7.62 (m, 2H), 7.51 (m, 1H), 6.92 (dd, <i>J</i> = 15.9, 9.0 Hz, 1H), 6.77 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 4.81 (m, 1H), 3.73 (s, 2H), 3.31 (m, 1H), 3.28 (m, 1H), 2.82 (t, <i>J</i> = 11.4 Hz, 2H), 2.82 (m, 2H), 2.30 (m, 2H), 1.88 (m, 2H), 1.57 (m, 2H)	3303, 1645, 1115, 2243, 810, 507
AC108		626.9 ([M+H] ⁺)	7.60 (m, 2H) 7.39 (s, 2H), 7.28 (m, 1H), 6.56 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 6.40 (dd, <i>J</i> = 15.6, 7.8 Hz, 1H), 5.91 (m, 1H), 4.65 (m, 2H), 4.10 (m, 1H), 4.07 (m, 2H), 3.59 (m, 1H), 2.74 (m, 2H), 2.13 (m, 4H), 2.07 (m, 1H)	3420, 1649, 1113, 809, 554
AC109		614.6 ([M+H] ⁺)	7.56 (m, 2H), 7.39 (s, 2H), 7.29 (s, 1H), 6.50 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 6.41 (dd, <i>J</i> = 15.9, 8.0 Hz, 1H), 4.09 (m, 1H), 3.88 (m, 2H), 3.49 (m, 2H), 2.92 (m, 2H), 2.81 (m, 1H), 2.74 (m, 2H), 2.25 (m, 4H)	1647, 1113

[2290]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
AC110		572.6 ([M+H] ⁺)	11.20 (s, 1H), 8.66 (br, 1H), 7.92 (m, 3H), 7.62 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.45 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 6.77 (dd, <i>J</i> = 15.6, 9.2 Hz, 1H), 6.77 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.85 (m, 1H), 3.74 (d, <i>J</i> = 5.2 Hz, 2H), 3.61 (s, 3H)	3412, 1690, 1114, 846, 559
AC111		582.79 ([M+H] ⁺)	8.63 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 8.04 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 7.92 (m, 3H), 7.62 (d, <i>J</i> = 1.2 Hz, 1H), 7.47 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 7.00 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.8 Hz, 1H), 6.77 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 5.19 (d, <i>J</i> = 1.6 Hz, 1H), 5.01 (d, <i>J</i> = 1.2 Hz, 1H), 4.85 (m, 1H), 3.86 (d, <i>J</i> = 5.6 Hz, 2H), 3.75 (t, <i>J</i> = 5.6 Hz, 2H)	3419, 1659, 843, 557
AC112		582.79 ([M+H] ⁺)	8.84 (br, 1H), 8.58 (m, 1H), 8.30 (m, 1H), 7.91 (s, 2H), 7.61 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.42 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 7.00 (dd, <i>J</i> = 15.6, 9.3 Hz, 1H), 6.77 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.85 (m, 1H), 4.11 (d, <i>J</i> = 5.6 Hz, 1H), 3.73 (d, <i>J</i> = 5.6 Hz, 1H), 3.04 (s, 6H)	3399, 1662, 1114, 807, 582
AC113		626.88 ([M+H] ⁺)	8.48 (t, <i>J</i> = 5.2 Hz, 1H), 8.3 (s, 1H), 7.90 (s, 2H), 7.79 (dd, <i>J</i> = 2.0, 2.0 Hz, 2H), 7.58 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.46 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 7.26 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 6.98 (m, 1H), 6.75 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.85 (m, 1H), 3.49 (d, <i>J</i> = 6.4 Hz, 2H), 2.87 (t, <i>J</i> = 6.4 Hz, 2H)	3431, 1651, 1113, 808, 554

[2291]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
AC114	113.7- 117.5	570.7 ([M+H] ⁺)	8.77 (s, 1H), 8.58 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 2H), 7.93 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 2H), 7.60 (dd, <i>J</i> = 1.2, 0.8 Hz, 1H), 7.37 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 6.99 (m, 1H), 6.77 (d, <i>J</i> = 16 Hz, 1H), 4.85 (m, 1H), 4.10 (m, 1H) 3.29 (m, 2H), 3.05 (m, 2H), 2.0 (m, 2H), 1.76 (m, 2H)	
AC115		529.00 ([M+H] ⁺)	8.43 (s, 1H), 7.79 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.51 (m, 1H), 7.36 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 3H), 7.21 (m, 3H), 6.55 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 6.36 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.0 Hz, 1H), 5.04 (d, <i>J</i> = 5.6 Hz, 2H), 4.10 (m, 1H), 2.35 (s, 3H)	1589, 3459, 801, 1110
AC116		614.87 ([M+H] ⁺)	7.99 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.46 (d, <i>J</i> = 1.6 Hz, 1H), 7.34 (d, <i>J</i> = 6.4 Hz, 2H), 7.28 (m, 2H), 6.62 (m, 2H), 6.47 (dd, <i>J</i> = 16.0, 7.2 Hz, 1H), 4.23 (m, 2H), 4.12 (m, 1H), 4.00 (m, 2H)	3424, 1657, 1165
AC117		525.42 ([M-H] ⁻)	8.39 (br, 1H), 7.85 (br, 1H), 7.62 (m, 3H), 7.53 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.46 (s, 1H), 7.40 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.17 (m, 1H), 6.78 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.8 Hz, 1H), 6.70 (m, 1H), 4.77 (m, 1H), 4.66 (s, 1H), 4.32 (s, 1H), 2.97 (s, 3H), 2.16 (s, 3H)	3401, 1636, 1113, 750

[2292]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
AC118		471.79 ([M+H] ⁺)	7.36 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 2H), 7.27 (m, 2H), 7.22 (m, 2H), 6.57 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.38 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 6.10 (br, 1H), 4.15 (m, 2H), 3.89 (m, 1H), 3.80 (m, 2H), 3.35 (m, 1H), 2.46 (s, 3H), 2.06 (s, 1H), 1.96 (m, 2H), 1.65 (m, 1H)	3437, 1655, 1262, 1105, 802
BC1		492.17 ([M+H] ⁺)	7.39 (s, 2H), 7.25 – 7.18 (m, 3H), 6.58 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.30 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.4 Hz, 1H), 5.91 – 5.70 (br, 2H), 4.05 (m, 1H), 3.05 – 2.80 (m, 6H), 2.70 (m, 1H), 1.81 (m, 1H)	3211, 1569, 1113, 806
BC2		506.4 ([M+H] ⁺)	8.80 (s, 1H), 8.20 (s, 1H), 7.82 (m, 3H), 7.4 (s, 2H), 6.62 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.52 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.18(m, 1H), 3.38 (m, 2H), 2.98 (m, 2H), 2.71 (m, 1H), 2.04 (m, 2H), 1.54 (s, 3H).	2923, 1542, 1033, 805
BC3		518.04 ([M-H] ⁻)	7.40 (s, 2H), 7.33 – 7.22 (m, 3H), 6.61 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.34 – 6.28 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 5.96 – 5.80 (m, 3H), 5.22 (m, 4H), 4.01 (m, 2H), 2.84 – 2.99 (m, 2H), 2.71 (m, 1H), 1.86 (m, 1H)	3120, 1592, 1146, 895

[2293]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
BC4		529.02 ([M+H] ⁺)	7.39 (s, 2H), 7.25-7.20 (m, 3H), 6.34 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.30 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 5.81 (br, 1H), 5.48 (m, 1H), 4.10 (m, 1H), 3.10 (m, 2H), 2.86-3.07 (m, 2H), 2.86 (m, 1H), 1.81 (m, 1H);	3283, 1652, 1241, 811
BC5		544.25 ([M-H] ⁻)	7.40 (s, 2H), 7.21 (s, 1H), 7.12 (m, 1H), 6.56 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.32 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.4 Hz, 1H), 5.85 (br s, 1H), 5.23 (br s, 1H), 4.12 (m, 1H), 3.18 (m, 3H), 2.80 (m, 3H), 2.08 (m, 2H), 1.83 (m, 5H), 1.25 (m, 2H), 1.01 (m, 3H), 0.78 (m, 2H)	3489, 3291, 1655, 1112, 808
BC6		485.96 ([M-H] ⁻)	7.40 (s, 2H), 7.31 – 7.18 (m, 3H), 6.58 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.24 – 6.28 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 5.40 (br, 1H), 4.01 (m, 2H), 2.78 – 3.01 (m, 2H), 2.51 (s, 1H), 1.86 (m, 1H), 1.20 (m, 2H), 1.01 (m, 2H), 0.78 (m, 2H)	3429, 1114, 804
BC7		500.01 ([M-H] ⁻)	7.40 (s, 2H), 7.31 (s, 1H), 7.18 (m, 1H), 7.18 (s, 1H), 6.58 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.32 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 5.78 (br s, 1H), 5.21 (br s, 1H), 4.01 (m, 1H), 2.78 (m, 2H), 2.01 (m, 1H), 1.86 (m, 4H), 1.25 (m, 2H), 1.01 (m, 3H), 0.78 (m, 2H)	3296, 1115, 806

[2294]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
BC8		511.88 ([M-H] ⁻)	7.38-7.20 (m, 5H), 6.62 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.34 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 5.83 (br, 1H), 5.52 (m, 1H), 4.12 (m, 1H), 3.12 (m, 2H), 3.06-2.82 (m, 2H), 2.75 (m, 1H), 1.85 (m, 1H)	1657, 1113, 855
BC9	179-181	556.83 ([M-H] ⁻)	8.30 (s, 1H), 7.68 (d, <i>J</i> = 6.4 Hz, 1H), 7.38-7.20 (m, 5H), 6.60 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.34 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 5.63 (br, 1H), 5.52 (m, 1H), 4.12 (m, 1H), 3.56 (s, 2H), 3.06-2.82 (m, 2H), 2.70 (m, 1H), 1.82 (m, 1H)	
BC10		497.98 ([M-H] ⁻)	7.38-7.20 (m, 5H), 6.62 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.34 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 5.83 (br, 1H), 5.52 (m, 1H), 4.12 (m, 1H), 3.02 (m, 3H), 2.82 (m, 1H), 2.50 (m, 3H), 1.82 (m, 1H), 1.42 (m, 1H)	3027, 1654, 815
BC11		530.09 ([M-H] ⁻)	7.80 (m, 1H), 7.48 (m, 2H), 7.32 6.65 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.54 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 5.38 (m, 1H), 4.18 (m, 1H), 3.62 (m, 1H), 3.32 (m, 1H), 2.86 (m, 1H), 1.81 (m, 1H)	1715, 1113, 816

[2295]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
BC12		514.86 ([M+H] ⁺)	7.32, (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 2H) 7.28 (m, 1H), 7.20 (d, <i>J</i> = 8.0, 1H), 7.14 (d, <i>J</i> = 8.8, 1H), 6.70 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 6.60 (m, 2H), 4.15 (m, 1H), 3.85 (m, 1H), 3.65 (m, 1H), 3.46 (m, 2H), 3.19 (m, 2H);	3428, 1112, 857
BC13	121-126	553.06 ([M-H] ⁻)	8.33 (br, 1H), 7.59 (s, 1H), 7.45 (m, 3H), 6.72 (d, <i>J</i> = 3.6, 1H), 6.39 (m, 1H), 4.71 (t, <i>J</i> = 7.2 Hz, 2H), 4.15 (m, 2H)	
BC14	172-175	554.0 ([M-H] ⁻)	8.83 (t, <i>J</i> = 6.6 Hz, 1H), 8.42 (t, <i>J</i> = 14.7 Hz, 1H), 8.22 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 8.13 (t, <i>J</i> = 6.3 Hz, 1H), 7.98-7.86 (m, 2H), 7.16 - 7.07 (m, 1H), 7.01 - 6.93 (m, 1H), 4.96 - 4.81 (m, 3H), 4.00 - 3.88 (m, 2H)	
CC1	107-109	402.00 ([M+H] ⁺)	7.37 (m, 3H), 7.28 (m, 4H), 6.60 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.36 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 5.75 (br s, 1H), 4.46 (d, <i>J</i> = 6 Hz, 2H), 4.01 (m, 1H), 2.11 (s, 3H)	
CC2	118-120	428.11 ([M+H] ⁺)	7.37 (m, 3H), 7.28 (m, 4H), 6.60 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.35 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 5.83 (br s, 1H), 4.46 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 2H), 4.11 (m, 1H), 1.40 (m, 1H), 1.02 (m, 2H), 0.77 (m, 2H)	

[2296]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
CC3	119– 122	468.20 ([M-H] ⁻)	7.38 (m, 3H), 7.27 (m, 3H), 6.60 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.36 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.4 Hz, 1H), 5.00 (br s, 1H), 4.48 (d, <i>J</i> = 5.6 Hz, 2H), 4.11 (m, 1H), 3.15 (q, <i>J</i> = 10.4 Hz, 2H)	
CC4		414.16 ([M-H] ⁻)	7.37 (m, 3H), 7.28 (m, 3H), 6.60 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.35 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 5.69 (br s, 1H), 4.46 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 2H), 4.21 (m, 1H), 2.29 (q, <i>J</i> = 5.8 Hz, 2H), 1.30 (t, <i>J</i> = 7.2 Hz, 3H)	
CC5		460.28 ([M-H] ⁻)	7.40 (m, 3H), 7.28 (m, 2H), 6.60 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 6.33 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.0 Hz, 1H), 5.84 (br s, 1H), 4.46 (d, <i>J</i> = 5.6 Hz, 2H), 4.10 (m, 1H), 1.36 (m, 1H), 1.02 (m, 2H), 0.77 (m, 2H)	
CC6	106– 108	504.08 ([M-H] ⁻)	7.40 (m, 3H), 7.26 (m, 1H), 6.60 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.34 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 5.96 (br s, 1H), 4.49 (d, <i>J</i> = 5.6 Hz, 2H), 4.10 (m, 1H), 3.15 (q, <i>J</i> = 10.8 Hz, 2H)	
CC7	127– 128	436.03 ([M+H] ⁺)	7.42 (m, 4H), 7.24 (m, 2H), 6.53 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.36 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 5.86 (br s, 1H), 4.51 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 2H), 4.05 (m, 1H), 2.02 (s, 3H)	

[2297]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
CC8	129– 131	462.15 ([M+H] ⁺)	8.58 (t, <i>J</i> = 5.6 Hz, 1H), 7.72 (m, 1H), 7.66 (m, 3H), 7.49 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.30 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 6.90 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 6.73 (d, <i>J</i> = 16 Hz, 1H), 4.81 (m, 1H), 4.33 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 1.64 (m, 1H), 0.68 (m, 4H)	
CC9	132– 134	504.25 ([M+H] ⁺)	7.41 (m, 3H), 7.26 (m, 3H), 6.54 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.37 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 6.13 (br s, 1H), 4.56 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 2H), 4.11 (m, 1H), 3.13 (m, 2H)	
CC10		538.03 ([M+2H] ⁺)	7.38 (m, 4H), 6.56 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.38 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 6.18 (m, 1H), 4.58 (m, 2H), 4.08 (m, 1H), 3.08 (m, 2H)	1651, 1112, 807
CC11	111– 112	494.12 ([M-H] ⁻)	7.42 (m, 3H), 7.24 (m, 1H), 6.54 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 6.34 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 6.03 (m, 1H), 4.53 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 4.10 (m, 1H), 1.39 (m, 1H), 1.00 (m, 2H), 0.77 (m, 2H)	
CC12	76–78	510.07 ([M-H] ⁻)	7.39 (s, 4H), 7.34 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.26 (m, 1H), 6.57 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.35 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 6.10 (br s, 1H), 4.49 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 2H), 4.10 (m, 1H), 1.20 (s, 9H)	

[2298]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
CC13	73–76	563.37 ([M-H] ⁻)	8.51 (d, <i>J</i> = 5.2 Hz, 1H), 7.63 (s, 1H), 7.51 (m, 1H), 7.45 (m, 2H), 7.39 (s, 2H), 7.28 (m, 1H), 6.58 (m, 2H), 6.37 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.71 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 4.11 (m, 1H)	
CC14		581.45 ([M+1H] ⁺)	8.51 (m, 1H), 8.30 (d, <i>J</i> = 2.4 Hz, 1H), 7.73 (m, 1H), 7.61 (s, 2H), 7.51 (s, 1H), 7.32 (m, 3H), 6.66 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.56 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.4 Hz, 1H), 4.50 (m, 1H), 4.45 (d, <i>J</i> = 5.6 Hz, 1H), 3.56 (s, 2H)	3430, 1656, 1109, 806
CC15		480.24 ([M+H] ⁺)	7.40 (m, 3H), 7.33 (m, 1H), 7.22 (m, 2H), 6.54 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 6.34 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 6.03 (br s, 1H), 4.53 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 2H), 4.13 (m, 1H), 1.41 (m, 1H), 1.00 (m, 2H), 0.77 (m, 2H)	3293, 1651, 1543, 1114, 812
CC16		520.33 ([M-H] ⁻)	7.42 (s, 1H), 7.37 (m, 3H), 7.22 (m, 1H), 6.54 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.36 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 6.19 (br s, 1H), 4.51 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 2H), 4.21 (m, 1H), 3.33 (m, 2H)	3307, 1665, 1114, 813
CC17	117– 119	459.83 ([M-H] ⁻)	7.51 (m, 2H), 7.39 (m, 2H), 7.24 (m, 2H), 6.52 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 6.38 (dd, <i>J</i> = 15.6, 7.6 Hz, 1H), 6.02 (br s, 1H), 4.53 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 2H), 4.14 (m, 1H), 1.38 (m, 1H), 1.00 (m, 2H), 0.77 (m, 2H)	3293, 1633, 1110, 820

[2299]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
CC18	119–123	501.88 ([M-H] ⁻)	7.48 (m, 2H), 7.41 (s, 1H), 7.36 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.23 (m, 2H), 6.52 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.39 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 6.13 (br s, 1H), 4.56 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 2H), 4.15 (m, 1H), 3.13 (m, 2H)	3435, 1644, 1111, 817
CC19		530 ([M+H] ⁺)	7.41 (m, 2H), 7.24 (m, 1H), 6.53 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.35 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.53 (m, 2H), 4.10 (m, 1H), 3.42 (m, 2H), 2.97 (s, 3H), 2.78 (m, 2H)	3435, 1644, 1111, 817
CC20		512 ([M+H] ⁺)	7.42 (m, 3H), 7.24 (m, 1H), 6.54 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 6.34 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.0 Hz, 1H), 6.03 (m, 1H), 4.53 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 4.10 (m, 1H), 1.19 (m, 1H), 1.00 (m, 2H), 0.77 (m, 2H)	3293, 1633, 1110, 820
CC21	55–58	493.99 ([M-H] ⁻)	(DMSO- <i>d</i> ₆) 8.62 (m, 1H), 7.95 (s, 1H), 7.85 (m, 1H), 7.66 (m, 3H), 7.47 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 6.98 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 6.84 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 4.83 (m, 1H), 4.44 (s, 2H), 1.68 (m, 1H), 0.71 (m, 4H)	
CC22	67–69	530.01 ([M+H] ⁺)	8.62 (m, 1H), 7.90 (s, 3H), 7.82 (m, 1H), 7.45 (m, 1H), 6.98 (m, 1H), 6.84 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 4.82 (m, 1H), 4.4 (s, 2H), 1.66 (m, 1H), 0.72 (m, 4H)	

[2300]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
CC23	69–71	564.99 ([M-H] ⁻)	9.02 (br s, 1H), 8.54 (br s, 1H), 8.26 (br s, 1H), 7.48 – 7.54 (m, 3H), 7.22 – 7.42 (m, 3H), 6.59 – 6.62 (m, 2H), 6.38 – 6.42 (m, 1H), 4.82 (m, 2H), 4.19 (s, 1H)	
CC24	125–127	570.26 ([M-H] ⁻)	7.64 (s, 1H), 7.54 (s, 2H), 7.46 (s, 2H), 6.62 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.41 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.4 Hz, 1H), 6.03 (m, 1H), 4.65 (d, <i>J</i> = 6.4 Hz, 2H), 4.14 (m, 1H), 3.13 (q, <i>J</i> = 10.6 Hz, 2H)	
CC25		579.86 ([M-H] ⁻)	7.60 (s, 1H), 7.40 (s, 2H), 7.37 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.31 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 6.53 (d, 1H, <i>J</i> = 16.0 Hz), 6.35 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 6.17 (br s, 1H), 4.56 (d, <i>J</i> = 6.4 Hz, 2H), 4.12 (m, 1H), 3.15 (q, <i>J</i> = 10.6 Hz, 2H)	3297, 1663, 1114, 809
CC26	129–131	539.89 ([M+H] ⁺)	7.59 (s, 1H), 7.39 (m, 2H), 7.30 (s, 1H), 6.53 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.35 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 6.06 (br s, 1H), 4.42 (d, <i>J</i> = 4.4 Hz, 2H), 4.12 (m, 1H), 1.35 (br s, 1H), 0.95 (br s, 2H), 0.75 (m, 2H)	

[2301]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
CC27		519.95 ([M-H] ⁺)	7.39 (s, 2H), 7.33 (t, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 7.14 (m, 2H), 6.56 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.35 (dd, <i>J</i> = 16.0, 7.6 Hz, 1H), 6.06 (br s, 1H), 4.52 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 2H), 4.08 (m, 1H), 3.90 (s, 2H), 3.13 (m, 2H)	3306, 1786
CC28		477.93 ([M-H] ⁺)	7.39 (s, 2H), 7.35 (m, 1H), 7.14 (m, 2H), 6.55 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 6.33 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.0 Hz, 1H), 5.93 (br s, 1H), 4.49 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 2H), 4.10 (m, 1H), 1.36 (m, 1H), 1.00 (m, 2H), 0.77 (m, 2H)	3625, 1747
CC29		620.86 ([M-H] ⁺)	8.58 (d, <i>J</i> = 4.6 Hz, 1H), 7.74 (m, 1H), 7.62 (m, 2H), 7.52 (m, 1H), 7.4 (s, 2H), 7.3 (m, 1H), 7.2 (m, 2H), 6.60 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.38 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 5.02 (s, 1H), 4.8 (s, 1H), 4.8 (d, <i>J</i> = 10 Hz, 2H), 4.10 (m, 1H), 1.8 (m, 1H), 1.2 (m, 2H), 0.6 (m, 2H)	1645, 1115, 808
CC30	101–104	559.75 ([M-H] ⁺)	7.41 (m, 4H), 7.24 (m, 1H), 6.53 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.35 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 6.12 (br s, 1H), 4.53 (m, 2H), 4.10 (m, 1H), 3.42 (m, 2H), 2.91 (s, 3H), 2.78 (m, 2H)	

[2302]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
CC31	177– 178	463 ([M-H] ⁻)	7.58 (m, 2H), 7.41 (m, 3H), 7.24 (m, 1H), 6.53 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.35 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.70 (br s, 1H), 4.43 (s, 2H), 4.08 (m, 1H), 3.21 (m, 2H), 1.25 (m, 3H);	
CC32	141– 142	532.99 ([M+H] ⁺)	7.66 (m, 2H), 7.54 (m, 1H), 7.41 (s, 2H), 6.62 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.40 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.59 (s, 3H), 4.19 (m, 1H), 3.25 (m, 2H), 1.15 (m, 2H)	
CC33		540.88 ([M-H] ⁻)	7.57 (s, 1H), 7.40 (m, 2H), 7.30 (s, 1H), 7.20 (br s, 1H), 6.53 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.33 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 6.06 (br s, 1H), 4.75 (br s, 1H), 4.42 (s, 2H), 4.20 (br s, 1H), 4.15 (m, 2H), 3.20 (m, 2H), 1.15 (m, 3H)	3338, 1631, 1578, 1114, 809
CC34	118– 120	541.40 ([M+H] ⁺)	7.42 (m, 3H), 7.28 (m, 2H), 6.54 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.36 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.96 (m, 1H), 4.51 (d, <i>J</i> = 5.6 Hz, 2H), 4.12 (m, 1H), 3.69 (t, <i>J</i> = 4.8 Hz, 4H), 3.35 (t, <i>J</i> = 4.8 Hz, 1H)	

[2303]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
CC35	78–79	547.82 ([M+H] ⁺)	9.95 (br s, 1H), 8.17 (d, <i>J</i> = 4.8 Hz, 1H), 7.61 (d, <i>J</i> = 6.4 Hz), 7.43 (m, 3H), 7.24 (m, 2H), 6.90 (t, <i>J</i> = 5.6 Hz, 1H), 6.66 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 6.54 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.33 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.65 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 4.09 (m, 1H)	
CC36		497 ([M-H] ⁻)	7.39 (m, 4H), 7.28 (m, 1H), 6.54 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.34 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.97 (br s, 1H), 4.38 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 2H), 4.10 (m, 1H), 2.9 (s, 3H), 2.7 (s, 3H)	3350, 1705, 1114, 808
CC37	88–91	515.01 ([M+H] ⁺)	7.49 (d, <i>J</i> = 8 Hz, 1H), 7.41 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 2H), 7.26 (m, 2H), 6.50 (d, <i>J</i> = 16 Hz, 1H), 6.35 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 6.0 (brs, 1H), 5.73 (br s, 1H), 4.80 (br s, 2H), 4.09 (m, 1H), 1.23 (m, 3H)	
CC38	63–66	526.97 ([M+H] ⁺)	7.48 (d, <i>J</i> = 8 Hz, 1H), 7.39 (m, 3H), 7.27 (m, 1H), 6.54 (d, <i>J</i> = 16 Hz, 1H), 6.33 (dd, <i>J</i> = 6.0, 8.0 Hz, 1H), 6.17 (br s, 1H), 5.92 (br s, 1H), 5.83 (m, 2H), 5.29 (t, <i>J</i> = 15.4 Hz, 2H), 4.80 (br s, 2H), 4.12 (m, 1H), 4.02 (br s, 2H)	

[2304]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
CC39		526.09 ([M-H] ⁻)	7.39 (m, 4H), 7.28 (m, 1H), 6.54 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.34 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.97 (br s, 1H), 4.38 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 2H), 4.10 (m, 1H), 1.53 (s, 9H)	3350, 1705, 1114, 808
CC40	159–160	580.25 ([M-H] ⁻)	7.46 (m, 5H), 7.29 (m, 1H), 7.20 (m, 3H), 6.55 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.37 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 5.62 (br s, 1H), 4.55 (d, <i>J</i> = 6.4 Hz, 2H), 4.11 (m, 1H)	
CC41		512.22 ([M-H] ⁻)	7.48 (m, 1H), 7.43 (m, 3H), 7.38 (m, 1H), 7.23 (s, 1H), 6.55 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.36 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 4.60 (d, 2H), 4.18 (m, 1H), 3.85 (s, 3H)	1740, 1701, 1114, 808
CC42	161–163	578.96 ([M-H] ⁻)	(DMSO- <i>d</i> ₆) 9.45 (br s, 2H), 7.90 (s, 2H), 7.75 (s, 1H), 7.46 (br s, 1H), 7.28 (br s, 1H), 6.93 (m, 1H), 6.75 (br s, 1H), 4.80 (m, 1H), 4.40 (br s, 2H), 3.90 (br s, 2H)	
CC43	140–142	505.39 ([M+H] ⁺)	8.11 (d, <i>J</i> = 4.0 Hz, 1H), 7.40 (m, 5H), 7.22 (m, 1H), 6.61 (m, 2H), 6.35 (m, 2H), 4.94 (br s, 1H), 4.61 (d, <i>J</i> = 6.4 Hz, 2H), 4.11 (m, 1H)	
CC44		536.88 ([M-H] ⁻)	8.41 (s, 1H), 7.77 (s, 1H), 7.47 (br s, 1H), 7.40 (s, 2H), 6.58 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.45 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.68 (d, <i>J</i> = 4.0 Hz, 2H), 4.14 (m, 1H), 3.24 (q, <i>J</i> = 10.8 Hz, 2H)	3320, 1674, 1114, 808

[2305]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
CC45		494.88 ([M-H] ⁻)	8.41 (s, 1H), 7.76 (s, 1H), 7.40 (s, 2H), 7.15 (br s, 1H), 6.58 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.44 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.67 (d, <i>J</i> = 4.4 Hz, 2H), 4.16 (m, 1H), 1.57 (m, 1H), 1.04 (m, 2H), 0.87 (m, 2H)	3309, 1659, 1115, 808
CC46	151–153	554.04 ([M-H] ⁻)	8.06 (m, 1H), 7.61 (m, 4H), 7.48 (s, 2H), 7.44 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.38 (m, 1H), 6.42 (m, 1H), 5.92 (br s, 1H), 4.92 (m, 2H), 4.24 (m, 1H), 3.12 (m, 2H)	
CC47		478.09 ([M+H] ⁺)	8.06 (m, 2H), 7.61 (m, 4H), 7.48 (s, 2H), 7.44 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.38 (m, 2H), 6.42 (m, 1H), 4.92 (s, 2H), 1.36 (m, 1H), 1.00 (m, 2H), 0.77 (m, 2H)	3309, 1659, 1115, 808
CC48		511.05 ([M+H] ⁺)	8.06 (m, 2H), 7.61 (m, 3H), 7.48 (s, 2H), 7.44 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.38 (m, 2H), 6.42 (m, 1H), 4.92 (s, 2H), 1.36 (m, 1H), 1.00 (m, 2H), 0.77 (m, 2H)	3309, 1659, 1115, 808
CC49	84–87	515.33 ([M+H] ⁺).	8.06 (m, 1H), 7.98 (m, 1H), 7.61 (m, 3H), 7.48 (s, 2H), 7.44 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.38 (m, 2H), 6.42 (m, 1H), 4.92 (s, 2H), 4.6 (br s, 1H), 4.24 (m, 1H), 3.21 (m, 2H), 1.2 (t, <i>J</i> = 4.6 Hz, 3H)	

[2306]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
CC50	138– 140	461.32 ([M-1H] ⁻)	9.81 (s, 1H), 7.90 (s, 1H), 7.84 (s, 2H), 7.34 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 2H), 6.65 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 6.61 (m, 1H), 6.57 (s, 1H), 6.48 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.8 Hz, 1H), 4.74 (m, 1H), 1.64 (m, 1H), 0.75 (m, 4H);	
CC51	149– 150	505.31 ([M-H] ⁻)	7.56 (br s, 1H), 7.4 (s, 3H), 7.3 (m, 3H), 7.05 (br s, 1H), 6.8 (d, <i>J</i> = 6 Hz, 2H), 6.57 (m, 2H), 6.20 (m, 2H), 4.05 (m, 1H), 3.2 (q, <i>J</i> = 10.4 Hz, 2H)	
CC52		464.87 ([M-H] ⁻)	7.40 (s, 2H), 7.18 (s, 1H), 7.08 (s, 1H), 6.85 (m, 1H), 6.45 (m, 1H), 6.20 (m, 1H), 5.55 (s, 1H), 4.08 (m, 1H), 1.30 – 1.10 (m, 4H), 1.90 (m, 1H)	3309, 1659, 1115, 808
CC53		506 ([M+H] ⁺)	7.40 (s, 2H), 7.18 (s, 1H), 7.08 (s, 1H), 6.85 (m, 1H), 6.45 (m, 1H), 6.20 (m, 1H), 5.55 (s, 1H), 4.08 (m, 1H), 3.21 (m, 2H)	3309, 1659, 1115, 808
CC54		504 ([M+H] ⁺)	7.28 (s, 2H), 7.25 (m, 2H), 7.10 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 2H), 6.89 (d, <i>J</i> = 11.4 Hz, 1H), 6.07 (br s, 1H), 6.01 (m, 1H), 4.51 (d, <i>J</i> = 5.8 Hz, 2H), 4.34 (m, 1H), 3.12 (q, <i>J</i> = 7.5 Hz, 2H)	

[2307]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
DC1	93–97	398.05 ([M+H] ⁺)	8.56 (s, 1H), 8.11 (s, 1H), 7.68 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 2H), 7.54 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 2H), 7.38 (t, <i>J</i> = 1.8 Hz, 1H), 7.29 (s, 2H), 6.62 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 6.42 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.2 Hz, 1H), 4.15 (m, 1H)	
DC2		363.0746 (363.075)	8.59 (s, 1H), 8.13 (s, 1H), 7.69 (d, <i>J</i> = 8.5 Hz, 2H), 7.55 (d, <i>J</i> = 8.5 Hz, 2H), 7.41 – 7.29 (m, 4H), 6.64 (d, <i>J</i> = 15.7 Hz, 1H), 6.47 (dd, <i>J</i> = 15.9, 8.0 Hz, 1H), 4.17 (m, 1H)	3121, 1524, 1251, 1165, 1119
DC3		329.1144 (329.114)	8.56 (s, 1H), 8.11 (s, 1H), 7.65 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 2H), 7.52 (d, <i>J</i> = 8.3 Hz, 2H), 7.40 (m, 5H), 6.61 (d, <i>J</i> = 15.8 Hz, 1H), 6.51 (dd, <i>J</i> = 15.9, 7.7 Hz, 1H), 4.18 (m, 1H)	1521, 1246, 1219, 1162, 1152, 1107
DC4		364.11 ([M+H] ⁺)	8.56 (s, 1H), 8.10 (s, 1H), 7.66 (d, <i>J</i> = 2.0 Hz, 2H), 7.52 (d, <i>J</i> = 8.8 Hz, 2H), 7.38 (d, <i>J</i> = 2.4 Hz, 2H), 7.34 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 2H), 6.61 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.40 (dd, <i>J</i> = 16.0, 7.6 Hz, 1H), 4.15 (m, 1H)	3147, 1528, 1494, 1246, 1165, 1108
DC5		344.25 ([M+H] ⁺)	8.54 (s, 1H), 8.10 (s, 1H), 7.62 (d, <i>J</i> = 8.3 Hz, 2H), 7.50 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 2H), 7.25 (d, <i>J</i> = 8.3 Hz, 2H), 7.20 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 2H), 6.60 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.51 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.15 (m, 1H), 2.37 (s, 3H)	3122, 3047, 1523, 1252, 1160, 1107

[2308]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
DC6		360.28 ([M+H] ⁺)	8.55 (s, 1H), 8.10 (s, 1H), 7.65 (d, <i>J</i> = 8.8 Hz, 2H), 7.52 (d, <i>J</i> = 8.8 Hz, 2H), 7.32 (d, <i>J</i> = 8.8 Hz, 2H), 6.95 (d, <i>J</i> = 8.8 Hz, 2H), 6.60 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.56 (dd, <i>J</i> = 16.0, 7.4 Hz, 1H), 4.15 (m, 1H), 3.82 (s, 3H)	3124, 2936, 1522, 1249, 1160
DC7		348 ([M+H] ⁺)	8.55 (s, 1H), 8.10 (s, 1H), 7.62 (d, <i>J</i> = 8.8 Hz, 2H), 7.5 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 2H), 7.38 (m, 2H), 7.12 (m, 2H), 6.61 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.40 (dd, <i>J</i> = 16.0, 7.6 Hz, 1H), 4.15 (m, 1H)	3141, 1512, 1246, 1118
DC8		366.13 ([M+H] ⁺)	8.57 (s, 1H), 8.11 (s, 1H), 7.65 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 2H), 7.52 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 2H), 6.95 (m, 2H), 6.82 (m, 1H), 6.65 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.50 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.15 (m, 1H)	3116, 1628, 1524, 1252, 1168, 1118
DC9		348.11 ([M+H] ⁺)	8.71 (s, 1H), 8.20 (s, 1H), 7.70 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 2H), 7.57 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 2H), 7.40 (m, 1H), 7.19 (m, 3H), 6.60 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.40 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.4 Hz, 1H), 4.15 (m, 1H)	3115, 1525, 1248, 1174
DC10		348.11 ([M+H] ⁺)	8.75 (s, 1H), 8.20 (s, 1H), 7.72 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 2H), 7.6 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 2H), 7.20 – 7.40 (m, 4H), 6.60 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.40 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.60 (m, 1H)	3114, 1526, 1259, 1238, 1193, 1114

[2309]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
DC11	75.5– 78.5	358.14 ([M+H] ⁺)	8.55 (s, 1H), 8.10 (s, 1H), 7.65 (d, <i>J</i> = 8.8 Hz, 2H), 7.52 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 2H), 7.01 (s, 3H), 6.60 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.51 (dd, <i>J</i> = 16.0, 7.8 Hz, 1H), 4.15 (m, 1H), 2.34 (s, 6H)	
DC12		398.05 ([M+H] ⁺)	8.58 (s, 1H), 8.10 (s, 1H), 7.68 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 2H), 7.53 (m, 4H), 7.2 (s, 1H) 6.62 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 6.44 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.0 Hz, 1H), 4.15 (m, 1H)	3055, 2930, 1523, 1250, 1165
DC13		396.16 ([M+H] ⁺)	8.58 (s, 1H), 8.10 (s, 1H), 7.62 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 2H), 7.55 (m, 4H), 7.25 (m, 1H), 6.64 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.40 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.90 (m, 1H)	3108, 1523, 1249, 1166, 1127
DC14		398.05 ([M+H] ⁺)	8.58 (s, 1H), 8.10 (s, 1H), 7.62 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 2H), 7.55 (m, 4H), 7.25 (m, 1H), 6.67 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.40 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 5.00 (m, 1H)	3117, 2925, 1526, 1246, 1172, 1117
DC15		397.95 ([M+H] ⁺)	8.58 (s, 1H), 8.10 (s, 1H), 7.66 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 2H), 7.52 (m, 3H), 7.40 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.30 (dd, <i>J</i> = 8.4, 2.9 Hz, 1H), 6.64 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.40 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.90 (m, 1H)	3120, 1524, 1267, 1176, 1112

[2310]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
DC16		466 ([M+H] ⁺)	8.61 (s, 1H), 8.13 (s, 1H), 7.92 (s, 1H), 7.86 (s, 2H), 7.70 (d, <i>J</i> = 7.0 Hz, 2H), 7.54 (d, <i>J</i> = 7.0 Hz, 2H), 6.67 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.46 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.35 (m, 1H)	
DC17		430.06 ([M+H] ⁺)	8.58 (s, 1H), 8.1 (s, 1H), 7.68 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 2H), 7.54 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 2H), 7.51 (s, 1H), 7.42 (s, 1H), 6.68 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.35 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.98 (m, 1H)	3122, 3076, 2929, 1523, 1250, 1168, 1114
DC18	92–95	429.91 ([M+H] ⁺)	8.57 (s, 1H), 8.11 (s, 1H), 7.69 (d, <i>J</i> = 8.8 Hz, 2H), 7.54 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 2H), 7.42 (s, 2H), 6.65 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.40 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.10 (m, 1H)	
DC19	97–99	430.321 ([M+H] ⁺)	8.58 (s, 1H), 8.12 (s, 1H), 7.68 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 2H), 7.64 (s, 1H), 7.59 (s, 1H), 7.55 (m, 3H), 6.60 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.40 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.22 (m, 1H)	
DC20		427.0463 (427.0466)	8.58 (s, 1H), 8.15 (s, 1H), 7.70 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 2H), 7.58 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 2H), 7.36 (s, 2H), 6.62 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.43 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.12 (m, 1H), 3.88 (s, 3H)	2937, 1524, 1482, 1278, 1249, 1166, 1112

[2311]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
DC21		412.04 ([M+H] ⁺)	8.42 (s, 1H), 7.60 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 2H), 7.50 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 2H), 7.40 (s, 1H), 7.22 (s, 2H), 6.60 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.42 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.15 (m, 1H), 2.5 (s, 3H)	3108, 1572, 1531, 1242, 1172, 1104
DC22	147–149	441.01 ([M-H] ⁻)	8.62 (s, 1H), 7.78 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 2H), 7.60 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 2H), 7.40 (s, 1H), 7.30 (s, 2H), 6.67 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.48 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.15 (m, 1H)	
DC23		412.05 ([M+H] ⁺)	7.95 (s, 1H), 7.35 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 2H), 7.46 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 2H), 7.39 (s, 1H), 7.29 (s, 2H), 6.67 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.45 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.12 (m, 1H), 2.51 (s, 3H)	1112, 799
DC24	133–134	440.03 ([M+H] ⁺)	8.10 (s, 1H), 7.52 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 2H), 7.42–7.38 (m, 3H), 7.28 (s, 2H), 6.67 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.45 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.16 (m, 1H), 2.79 (s, 3H)	
DC25		442.02 ([M-H] ⁻)	7.97 (s, 1H), 7.59 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 2H), 7.53 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 2H), 7.38 (m, 1H), 7.29 (s, 2H), 6.65 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.42 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.17 (m, 1H), 2.74 (s, 3H)	1167, 1114, 800

[2312]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
DC26		464.03 ([M-H] ⁻)	8.12 (s, 1H), 7.49 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 2H), 7.40-7.37 (m 3H), 7.28 (s, 2H), 6.66 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.44 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.14 (m, 1H), 3.22 (m, 1H), 1.09 – 1.16 (m, 4H)	1689, 1253, 1166, 1114, 979, 964
DC27		473.94 ([M-H] ⁻)	8.19 (s, 1H), 7.64 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 2H), 7.55 (d, 7.2 Hz, 2H), 7.39 (s, 1H), 7.30 (s, 2H), 6.62 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.42 (dd, <i>J</i> = 8.0, 16.0 Hz, 1H), 4.18 (m, 1H), 3.58 (s, 3H)	1571, 1331, 1170, 1113, 764
DC28		421.22 ([M+H] ⁺)	8.79 (s, 1H), 8.18 (s, 1H), 7.80 (m, 3H), 7.52 (m, 2H), 7.24 (m, 1H), 6.63 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.54 (d, <i>J</i> = 16.0, 7.6 Hz, 1H), 4.19 (m, 1H)	3126, 2233, 1516, 1250, 1165, 1109
DC29		421.22 ([M+H] ⁺)	8.80 (s, 1H), 8.2 (s, 1H), 7.75 – 7.82 (m, 3H), 7.41 (t, <i>J</i> = 2 Hz, 1H), 7.26 (m, 2H), 6.65 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.52 (dd, <i>J</i> = 16.0, 7.6 Hz, 1H), 4.16 (m, 1H)	3005, 1716, 1363, 1223
DC30		489.17 ([M+H] ⁺)	8.81 (s, 1H), 8.20 (s, 1H), 7.94 (s, 1H), 7.85 (m, 3H), 7.79 (m, 2H), 6.70 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.58 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.35 (m, 1H)	2964, 2234, 1289, 1166, 1136

[2313]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
DC31	117– 118	455.27 ([M+H] ⁺)	8.80 (s, 1H), 8.20 (s, 1H), 7.82 (m, 3H), 7.4 (s, 2H), 6.62 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.52 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.18 (m, 1H)	
DC32		388.0705 (388.0703)	8.82 (s, 1H), 8.22 (s, 1H), 7.82-7.78 (m, 3H), 7.38-7.30 (m, 3H), 6.62 (d, <i>J</i> = 16.1 Hz, 1H), 6.56 (dd, <i>J</i> = 16.1, 6.8 Hz, 1H), 4.18 (m, 1H)	3126, 2234, 1520, 1280, 1164, 1112
DC33		455.22 ([M-H] ⁻)	8.80 (s, 1H), 8.20 (s, 1H), 7.82-7.80 (m, 3H), 7.70-7.50 (m, 3H), 6.65 (d, <i>J</i> = 16.9 Hz, 1H), 6.54 (dd, <i>J</i> = 16.9, 6.8 Hz, 1H), 4.25 (m, 1H)	3122, 3086, 2234, 1517, 1327, 1168, 1113
DC34		452.0412 (452.0419)	8.85 (s, 1H), 8.23 (br s, 1H), 7.83-7.78 (m, 3H), 7.33 (s, 2H), 6.69 (d, <i>J</i> = 14.9 Hz, 1H), 6.50 (dd, <i>J</i> = 14.9, 7.2 Hz, 1H), 4.15 (m, 1H), 3.90 (s, 3H)	3122, 2934, 2231, 1516, 1480, 1248, 1211, 1165, 1111
DC35		439.01 ([M-H] ⁻)	8.60 (s, 1H), 8.20 (s, 1H), 7.82 (m, 3H), 7.28 (m, 2H), 6.65 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.48 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.20 (m, 1H)	2233, 1518, 1250, 1169, 1035, 817
DC36		437.25 ([M+H] ⁺)	8.70 (s, 1H), 7.80 (m, 3H), 7.40 (s, 1H), 7.28 (s, 2H), 6.63 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.50 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.18 (m, 1H), 2.50 (s, 1H)	2927, 2233, 1572, 1531, 1248, 1166, 1112

[2314]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
DC37	109– 111	466.10 ([M-H] ⁻)	8.86 (s, 1H), 7.89 (m, 3H), 7.40 (s, 1H), 7.30 (s, 2H), 6.68 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.57 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.18 (m, 1H)	
DC38	96–98	436.11 ([M-H] ⁻)	8.58 (s, 1H), 7.75 (m, 3H), 7.40 (s, 1H), 7.28 (s, 2H), 6.61 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.42 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.2 Hz, 1H), 4.40 (br s, 2H), 4.15 (m, 1H)	
DC39	224– 226	480.30 ([M+H] ⁺)	8.65 (s, 1H), 8.18 (br s, 1H), 7.80-7.70 (m, 3H), 7.40 (s, 1H), 7.27 (s, 2H), 7.36 (m, 1H), 7.28 (m, 2H), 6.60 (d, <i>J</i> = 16.8 Hz, 1H), 6.47 (m, 1H), 4.16 (m, 1H), 2.40 (br s, 3H)	3352, 2237, 1707, 1163, 841
DC40	70–73	436.11 ([M-2H] ⁻)	8.86 (s, 1H), 7.88 (m, 3H), 7.44 (s, 2H), 6.67 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.56 (dd, <i>J</i> = 16.0 7.6 Hz, 1H), 4.19 (m, 1H)	
DC41	72–75	469.95 ([M-H] ⁻)	(DMSO- <i>d</i> ₆) 8.72 (s, 1H), 8.26 (s, 1H), 8.01 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.91 (s, 2H), 7.77 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 6.42 (dd, <i>J</i> = 15.6, 9.2 Hz, 1H), 6.83 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 5.87 (s, 2H), 4.89 (m, 1H)	
DC42	104– 107	609.98 ([M+H] ⁺)	8.78 (s, 2H), 7.83 (s, 1H), 7.80 (m, 2H), 7.42 (s, 2H), 6.65 (d, <i>J</i> = 16.4 Hz, 1H), 6.51 (dd, <i>J</i> = 16.4, 7.8 Hz, 1H), 4.17 (m, 1H), 4.2.16 (m, 2H), 1.25 (m, 4H), 1.00 (m, 4H),	2234, 1714, 1114, 807

[2315]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
DC43	109–112	540.04 ([M+H] ⁺)	(DMSO- <i>d</i> ₆) 10.94 (br s, 1H), 8.36 (s, 1H), 8.08 (m, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.91 (s, 2H), 7.84 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.13 (dd, <i>J</i> = 15.6, 9.2 Hz, 1H), 6.87 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.92 (m, 1H), 1.99 (br s, 1H), 0.82 (s, 4H)	3233, 2233, 1699, 1114, 807
DC44		435.26 [M-H] ⁻	8.33 (s, 1H), 8.23 (s, 1H), 7.66 (s, 1H), 7.60 (s, 1H), 7.41 (m, 1H), 7.28 (m, 2H), 6.62 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.51 (dd, <i>J</i> = 16.0, 7.8 Hz, 1H), 4.16 (m, 1H), 2.20 (s, 3H)	2236, 1510, 1114, 801
DC45	75-78	468.87 [M-H] ⁻	8.36 (s, 1H), 8.23 (s, 1H), 7.66 (s, 1H), 7.60 (s, 1H), 7.41 (s, 2H), 6.62 (d, <i>J</i> = 16.4 Hz, 1H), 6.51 (dd, <i>J</i> = 16.4, 7.6 Hz, 1H), 4.16 (m, 1H), 2.20 (s, 3H)	
DC46		411.4 ([M] ⁺)	8.83 (s, 1H), 8.21 (s, 1H), 7.83 (d, <i>J</i> = 8.5 Hz, 1H), 7.61 (d, <i>J</i> = 1.9 Hz, 1H), 7.52 (dd, <i>J</i> = 8.4, 1.9 Hz, 1H), 7.28 (d, <i>J</i> = 3.8 Hz, 2H), 6.93 (d, <i>J</i> = 11.5 Hz, 1H), 6.26 - 6.20 (m, 1H), 4.22 (m, 1H)	¹³ C NMR (δ) ³ 155.63, 153.27, 153.12, 143.01, 137.89, 136.25, 134.03, 133.88, 132.23, 131.23, 131.18, 129.20, 126.17, 125.04, 124.99

[2316]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
DC47	139– 141	474.16 ([M-H] ⁺)	8.51 (s, 1H), 8.14 (s, 1H), 7.75 (s, 1H), 7.5 (m, 2H), 7.4 (s, 1H), 7.30 (m, 2H), 6.60 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.50 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.15 (m, 1H)	
DC48	124– 126	414.05 [M-H] ⁺	8.69 (s, 1H), 8.14 (s, 1H), 7.96 (d, <i>J</i> = 4.8 Hz, 1H), 7.39-7.27 (m, 5H), 6.95 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.51 (dd, <i>J</i> = 16.0, 7.6 Hz, 1H), 4.13 (m, 1H)	
DC49	81-83	463.96 [M-H] ⁺	8.57 (s, 1H), 8.14 (s, 1H), 7.60 (m, 2H), 7.44 (m, 3H), 6.95 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.51 (dd, <i>J</i> = 16.0, 7.6 Hz, 1H), 4.13 (m, 1H)	
DC50	140– 143	430.07 [M-H] ⁺)	8.56 (s, 1H), 8.13 (s, 1H), 7.59 (d, <i>J</i> = 1.2 Hz, 2H), 7.44 (m, 2H), 7.28 (m, 2H), 6.61 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.47 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.15 (m, 1H)	1110, 803
DC51	118– 121	464.22 ([M-H] ⁺)	8.32 (s, 1H), 8.15 (s, 1H), 7.82 (s, 1H), 7.73 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.53 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.41 (s, 1H), 7.29 (s, 2H), 6.70 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 6.50 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.0 Hz, 1H), 4.20 (m, 1H)	

[2317]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
DC52			9.99 (s, 1H), 8.42 (s, 1H), 8.12 (s, 1H), 8.01 (s, 1H), 7.68 (m, 1H), 7.44 (m, 1H), 7.33 (m, 1H), 7.22 (s, 2H), 6.62 (d, <i>J</i> = 16.7 Hz, 1H), 6.45 (dd, <i>J</i> = 16.7, 9.3 Hz, 1H), 4.10 (m, 1H)	3123, 3079, 2925, 1692, 1571, 1512, 1253, 1164, 1111
DC53			8.30 (m, 1H), 8.00 (br s, 1H), 7.75 (m, 1H), 7.68 (m, 1H), 7.55 (m, 1H), 7.36 (m, 1H), 7.28 (m, 2H), 6.70 (m, 1H), 6.58 (br s, 1H), 6.33 (m, 1H), 5.88 (m, 2H), 4.10 (m, 1H)	3250, 3043, 1683, 1116
DC54	56–58	441.07 ([M-H] ⁻)	8.40 (s, 1H), 8.13 (s, 1H), 8.02 (s, 1H), 7.76 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.59 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.4 (s, 1H), 7.29 (m, 2H), 6.69 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 6.57 (dd, <i>J</i> = 15.6, 7.8 Hz, 1H), 4.15 (m, 1H)	
DC55		412.97 ([M+H] ⁺)	8.37 (s, 1H), 8.18 (s, 1H), 7.39 (s, 1H), 7.30 (m, 2H), 7.19 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 6.90 (m, 2H), 6.55 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 6.38 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.2 Hz, 1H), 4.20 (m, 1H), 2.50 (br s, 2H)	
DC56	175–177	453 ([M-H] ⁻)	9.59 (br s, 1H), 8.55 (s, 1H), 8.47 (s, 2H), 8.23 (s, 1H), 7.30 (m, 4H), 6.62 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.40 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.15 (m, 1H), 2.20 (s, 3H)	

[2318]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
DC57		426.0627 (426.0626)	8.33 (s, 1H), 8.16 (s, 1H), 7.38 (s, 1H), 7.29 (s, 2H), 7.15 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 6.80 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 6.74 (m, 1H), 6.60 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 6.35 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.4 Hz, 1H), 5.40 (br s, 1H), 4.15 (m, 1H), 2.90 (s, 3H)	3342, 3112, 2931, 1606, 1583, 1574, 1528, 1153
DC58	94–97	440.0424 (440.0419)	(DMSO- <i>d</i> ₆) 8.76 (s, 1H), 8.16 (s, 1H), 7.90 (br s, 1H), 7.83 (s, 1H), 7.70 (d, <i>J</i> = 7.9 Hz, 1H), 7.71–7.67 (m, 3H), 7.58 (d, <i>J</i> = 7.9 Hz, 1H), 7.52 (br s, 1H), 7.00 (dd, <i>J</i> = 15.8, 8.7 Hz, 1H), 6.85 (d, <i>J</i> = 15.8 Hz, 1H), 4.85 (m, 1H)	3403, 3304, 3178, 1674, 1571, 1169, 1108
DC59	87–90		(DMSO- <i>d</i> ₆) 9.00 (s, 1H), 8.63 (s, 1H), 8.17 (s, 1H), 7.70–7.59 (m, 5H), 7.00 (dd, <i>J</i> = 16.2, 9.7 Hz, 1H), 6.85 (d, <i>J</i> = 16.2 Hz, 1H), 5.90 (br s, 2H), 4.83 (m, 1H)	
DC60		469.0577 (469.0572)	8.32 (s, 1H), 8.10 (s, 1H), 7.97 (s, 1H), 7.65 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.47 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.40 (m, 1H), 7.28 (s, 2H), 6.62 (d, <i>J</i> = 16.5 Hz, 1H), 6.49 (dd, <i>J</i> = 16.5, 7.7 Hz, 1H), 4.23–4.04 (m, 3H), 1.15 (t, <i>J</i> = 8.0 Hz, 3H)	2987, 1725, 1518, 1275, 1166, 1113

[2319]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
DC61	130–132	442.15 ([M+H] ⁺)	(DMSO- <i>d</i> ₆) 9.90 (s, 1H), 8.17 (s, 1H), 8.15 (m, 1H), 7.90 (m, 1H), 7.71 (m, 2H), 7.67 (m, 1H), 7.62 (d, <i>J</i> = 7.3 Hz, 1H), 7.03 (dd, <i>J</i> = 16.5, 8.3 Hz, 1H), 6.62 (d, <i>J</i> = 16.5 Hz, 1H), 4.87 (m, 1H)	
DC62		412.10 ([M+H] ⁺)	8.27 (s, 1H), 8.23 (s, 1H), 7.40 (m, 3H), 7.30 (m, 3H), 6.64 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.45 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.19 (m, 1H), 2.21 (s, 3H)	1513, 1252, 1166, 1112, 801
DC63		446.01 ([M+H] ⁺)	8.26 (s, 1H), 8.12 (s, 1H), 7.42 (s, 2H), 7.18–7.28 (m, 3H), 6.62 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 6.39 (dd, <i>J</i> = 15.6, 9.4 Hz, 1H), 4.10 (m, 1H), 2.25 (s, 3H)	2928, 2525, 1249, 1169, 1114, 809
DC64		475.03 ([M+H] ⁺)	8.84 (d, <i>J</i> = 5.8 Hz, 2H), 8.33 (s, 1H), 8.20 (s, 1H), 7.75 (m, 1H), 7.60 (d, <i>J</i> = 28.6 Hz, 1H), 7.58–7.48 (m, 3H), 7.42 (m, 1H), 7.28 (s, 2H), 6.71 (d, <i>J</i> = 16.9 Hz, 1H), 6.39 (dd, <i>J</i> = 16.9, 8.2 Hz, 1H), 4.15 (m, 1H)	1683, 1167, 650, 479
DC65		412.05 ([M+H] ⁺)	8.55 (s, 1H), 8.12 (s, 1H), 7.55 (m, 3H), 7.39 (m, 1H), 7.30 (d, <i>J</i> = 1.6 Hz, 1H), 6.85 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.41 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.17 (m, 1H), 2.40 (s, 3H)	722, 111

[2320]

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹)
DC66	60–61	468.26 ([M+H] ⁺)	8.59 (s, 1H), 8.14 (s, 1H), 7.94 (s, 1H), 7.70 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.61 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.43 (s, 2H), 7.23 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.41 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.20 (m, 1H)	
DC67	133–134	432.30 ([M+H] ⁺)	8.59 (s, 1H), 8.12 (s, 1H), 7.78 (br s, 1H), 7.71 (m, 1H), 7.62 (m, 1H), 7.39 (s, 1H), 7.32 (s, 2H), 7.03 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.43 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 0.21 (m, 1H)	800, 114
DC68		412.03 ([M+H] ⁺)	8.71 (s, 1H), 8.18 (s, 1H), 7.71 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 2H), 7.55 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 2H), 7.37 (s, 1H), 7.28 (m, 2H), 6.08 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 4.26 (m, 1H), 2.05 (s, 3H)	
DC69	162–168	414.03 ([M+H] ⁺)	8.56 (s, 1H), 8.11 (s, 1H), 7.70 (d, <i>J</i> = 8.5 Hz, 2H), 7.56 (d, <i>J</i> = 8.5 Hz, 2H), 7.54 (m, 2H), 7.40 (m, 1H), 6.91 (d, <i>J</i> = 16.5 Hz, 1H), 6.66 (d, <i>J</i> = 16.5 Hz, 1H)	
DC70	99–103	428.05 ([M+H] ⁺)	8.58 (s, 1H), 8.13 (s, 1H), 7.73 (d, <i>J</i> = 8.7 Hz, 2H), 7.60 (d, <i>J</i> = 8.7 Hz, 2H), 7.46 (m, 2H), 7.42 (m, 1H), 6.85 (d, <i>J</i> = 16.2 Hz, 1H), 6.40 (d, <i>J</i> = 16.2 Hz, 1H), 3.42 (s, 3H)	

[2321]

[2322]

^a ¹H NMR 스펙트럼 데이터는 언급된 경우를 제외하고는 CDCl₃ 중에서 400 MHz 기기를 이용하여 획득하였다.
HRMS 데이터는 관찰치 (이론치)로 나타냈다.

[2323]

표 2A: 표 1A의 화합물에 대한 분석 데이터.

화합물 번호	mp (°C); [α] _D ²⁵	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹); ¹⁹ F NMR (δ)
F1	53-64	655 ([M+H] ⁺)	회전이성질체 δ 7.61 (d, <i>J</i> = 1.6 Hz, 1H), 7.50 (d, <i>J</i> = 7.9 Hz, 1H), 7.45 (dd, <i>J</i> = 6.4, 3.0 Hz, 0.5H), 7.41 (s, 2H), 7.37 (dd, <i>J</i> = 8.0, 1.6 Hz, 1H), 7.33 (t, <i>J</i> = 6.2 Hz, 0.5H), 6.53 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 6.45 (s, 1H), 6.39 (dd, <i>J</i> = 15.9, 7.8 Hz, 1H), 4.21 - 4.01 (m, 1H), 3.96 (qd, <i>J</i> = 9.1, 6.4 Hz, 1.5H), 3.85 (td, <i>J</i> = 9.2, 6.5 Hz, 0.5 H) 1.69 (s, 6H)	
F2		608.92 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, CDCl ₃) δ 7.65 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 7.43-7.40 (m, 2H), 7.36 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.29 (m, 1H), 6.56 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 6.43 (dd, <i>J</i> = 15.6, 7.2 Hz, 1H), 4.12-4.08 (m, 1H), 3.97-3.94 (m, 2H), 1.70 (s, 6H)	3368, 1682, 1162, 808
F3		588.90 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.23 (s, 1H), 8.17 (넓은 s, 1H), 7.89 (s, 2H), 7.48-7.38 (m, 3H), 6.82 (dd, <i>J</i> = 15.6, 7.8 Hz, 1H), 6.74 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.90-4.80 (m, 1H), 3.89-3.84 (m, 2H), 2.30 (s, 3H), 1.42 (s, 6H)	3394, 1678, 1163, 807

[2324]

화합물 번호	mp (°C); [α] _D ²⁵	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹); ¹⁹ F NMR (δ)
F4		642.99 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.58 (s, 1H), 8.20 (t, <i>J</i> = 6.6 Hz, 1H), 7.98-7.89 (m, 4H), 7.80 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.04 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.7 Hz, 1H), 6.88 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.88-4.78 (m, 1H), 3.89-3.82 (m, 2H), 1.40 (s, 6H)	3460, 1677, 1165, 557
F5		640.9 ([M+H] ⁺)	7.62 (d, <i>J</i> = 1.7 Hz, 1H), 7.53 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 7.42 - 7.29 (m, 3H), 6.91 (t, <i>J</i> = 6.7 Hz, 1H), 6.54 (bs, 1H) 6.53 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 6.39 (dd, <i>J</i> = 15.9, 7.8 Hz, 1H), 4.74 (q, <i>J</i> = 7.1 Hz, 1H), 4.10 (m, 1H), 4.05 - 3.72 (m, 2H), 1.53 (d, <i>J</i> = 7.0 Hz, 3H)	3288, 1644, 1162
F6		640.9 ([M+H] ⁺)	7.62 (d, <i>J</i> = 1.6 Hz, 1H), 7.53 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.41 (s, 2H), 7.38 (dd, <i>J</i> = 8.0, 1.7 Hz, 1H), 6.86 (t, <i>J</i> = 6.2 Hz, 1H), 6.57 - 6.49 (m, 2H), 6.40 (dd, <i>J</i> = 15.9, 7.8 Hz, 1H), 4.74 (m, 1H), 4.15 - 4.04 (m, 1H), 4.00 - 3.81 (m, 2H), 1.53 (d, <i>J</i> = 7.1 Hz, 3H)	3288, 1645, 1164

[2325]

화합물 번호	mp (°C); [α] _D ²⁵	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹); ¹⁹ F NMR (δ)
F7		574.92 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.56 (t, <i>J</i> = 6.3 Hz, 1H), 8.43 (d, <i>J</i> = 4.5 Hz, 1H), 7.89 (s, 2H), 7.44-7.34 (m, 3H), 6.88 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.4 Hz, 1H), 6.75 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.85-4.79 (m, 1H), 4.49-4.44 (m, 1H), 3.99-3.83 (m, 2H), 2.33 (s, 3H), 1.34 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 3H)	3412, 1685, 1163, 809
F8		652.95 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.62 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 8.59 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 7.92-7.91 (m, 3H), 7.60 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 7.38 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 6.99 (dd, <i>J</i> = 15.6, 9.2 Hz, 1H), 6.77 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.85-4.80 (m, 1H), 4.41-4.36 (m, 1H), 4.05-3.99 (m, 1H), 3.91-3.84 (m, 1H), 1.73-1.63 (m, 2H), 0.99 (t, <i>J</i> = 7.6 Hz, 3H)	3291, 1647, 1165, 808, 565
F8A		650.99 ([M-H] ⁻)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.64-8.57 (m, 2H), 7.92-7.91 (m, 3H), 7.60 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 7.38 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 7.01 (dd, <i>J</i> = 15.6, 9.0 Hz, 1H), 6.78 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.86-4.80 (m, 1H), 4.42-4.35 (m, 1H), 4.06-3.84 (m, 2H), 1.76-1.62 (m, 2H), 0.93 (t, <i>J</i> = 7.2 Hz, 3H).	3289, 1646, 1164, 808, 725, 649

[2326]

화합물 번호	mp (°C); [α] _D ²⁵	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹); ¹⁹ F NMR (δ)
F9		575.04 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.56 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 8.44 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 7.89 (s, 2H), 7.45 (s, 1H), 7.41-7.35 (m, 2H), 6.87 (dd, <i>J</i> = 16.0, 9.2 Hz, 1H), 6.74 (d, <i>J</i> = 15.2 Hz, 1H), 4.85-4.80 (m, 1H), 4.48-4.44 (m, 1H), 4.03-3.85 (m, 2H), 2.33 (s, 3H), 1.31 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 3H)	3407, 1685, 1161, 808
F10		638.84 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.61 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 8.52 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 7.88-7.87 (m, 3H), 7.56 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 7.38 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 6.96 (dd, <i>J</i> = 16.6, 9.2 Hz, 1H), 6.73 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.81-4.77 (m, 1H), 4.46-4.42 (m, 1H), 4.00-3.81 (m, 2H), 1.27 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 3H)	3415, 1652, 1162, 807, 561
F11		638.90 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.61 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 8.52 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 7.88-7.87 (m, 3H), 7.56 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 7.38 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 6.96 (dd, <i>J</i> = 16.6, 9.2 Hz, 1H), 6.73 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.81-4.77 (m, 1H), 4.46-4.42 (m, 1H), 4.00-3.81 (m, 2H), 1.27 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 3H)	3415, 1652, 1162, 807, 561

[2327]

화합물 번호	mp (°C); [α] _D ²⁵	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹); ¹⁹ F NMR (δ)
F12		638.90 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.65 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 8.56 (t, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.92 (s, 1H), 7.91 (s, 2H), 7.60-7.58 (m, 1H), 7.42 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 6.99 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.0 Hz, 1H), 6.77 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.83-4.76 (m, 1H), 4.52-4.45 (m, 1H), 4.06-3.82 (m, 2H), 1.33 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 3H)	3418, 1646, 1163, 808, 564
F13		638.96 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.65 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 8.56 (t, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.92 (s, 1H), 7.91 (s, 2H), 7.60-7.58 (m, 1H), 7.42 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 6.99 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.0 Hz, 1H), 6.77 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.83-4.76 (m, 1H), 4.52-4.45 (m, 1H), 4.06-3.82 (m, 2H), 1.33 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 3H)	3418, 1646, 1163, 808, 564
F14		673.31 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, CDCl ₃) δ 7.91 (s, 1H), 7.82 (s, 2H), 7.62 (s, 1H), 7.53 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 7.40 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 6.80 (bs, 1H), 6.62 (s, 1H), 6.55 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.50 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 4.73-4.70 (m, 1H), 4.40-4.25 (m, 1H), 3.95-3.92 (m, 2H), 1.56 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 3H)	3422, 1640, 1169, 528

[2328]

화합물 번호	mp (°C); [α] _D ²⁵	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹); ¹⁹ F NMR (δ)
F15		589.00 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.58 (t, <i>J</i> = 8.8 Hz, 1H), 8.32 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.85 (s, 2H), 7.42 (s, 1H), 7.37 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.31 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 6.83 (dd, <i>J</i> = 15.6 Hz, 8.8 Hz, 1H), 6.71 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.77-4.81 (m, 1H), 4.30-4.35 (m, 1H), 3.94-4.00 (m, 1H), 3.80-3.86 (m, 1H), 2.29 (s, 3H), 1.71-1.60 (m, 2H), 0.88 (t, <i>J</i> = 7.6 Hz, 3H)	3295, 1682, 1164, 80
F15A		588.9 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.61 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 8.35 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 7.89 (s, 2H), 7.45 (s, 1H), 7.41 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.34 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 6.88 (dd, <i>J</i> = 15.9, 8.7 Hz, 1H), 6.75 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 4.85-4.79 (m, 1H), 4.40-4.32 (m, 1H), 4.04-3.82 (m, 2H), 2.33 (s, 3H), 1.76-1.62 (m, 2H), 0.91 (t, <i>J</i> = 7.5 Hz, 3H)	3290, 1646, 1165, 808. 725, 651

[2329]

화합물 번호	mp (°C); [α] _D ²⁵	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹); ¹⁹ F NMR (δ)
F16		643.06 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.65-8.60 (m, 2H), 7.95 (s, 1H), 7.89-7.82 (m, 3H), 7.47 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.04 (dd, <i>J</i> = 15.6, 9.2 Hz, 1H), 6.85 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 4.85-4.80 (m, 1H), 4.38-4.33 (m, 1H), 4.01 (m, 2H), 1.72-1.58 (m, 2H), 0.86 (t, <i>J</i> = 7.6 Hz, 3H)	3292, 1652, 1167, 809
F16A		640.9 ([M-H] ⁻)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.66-8.62 (m, 2H), 7.98 (s, 1H), 7.92-7.87 (m, 3H), 7.51 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 7.04 (dd, <i>J</i> = 15.6, 9.0 Hz, 1H), 6.89 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.86-4.79 (m, 1H), 4.41-4.37 (m, 1H), 4.05-3.87 (m, 2H), 1.72-1.63 (m, 2H), 0.90 (t, <i>J</i> = 6.9 Hz, 3H)	3290, 1651, 1166, 809
F17		628.95 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.55 (t, <i>J</i> = 6.4 Hz, 1H), 8.42 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 7.89 (s, 1H), 7.82 (s, 2H), 7.45 (s, 1H), 7.41-7.35 (m, 2H), 6.85 (dd, <i>J</i> = 16.0 Hz, 8.8 Hz, 1H), 6.74 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.81- 4.76 (m, 1H), 4.48-4.44 (m, 1H), 3.99-3.84 (m, 2H), 2.33 (s, 3H), 1.30 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 3H)	3299, 1686, 1165, 568

[2330]

화합물 번호	mp (°C); [α] _D ²⁵	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹); ¹⁹ F NMR (δ)
F18		629.0 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.76 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 8.61 (t, <i>J</i> = 12.9 Hz, 1H), 7.98 (s, 1 H), 7.92-7.88 (m, 3H), 7.56 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.10 (dd, <i>J</i> = 16.2, 9.3 Hz, 1H), 6.89 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 4.89-4.83 (m, 1H), 4.51-4.47 (m, 1H), 4.01-3.88 (m, 2H), 1.29 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 3H)	3407, 1713, 1160, 807
F19		692.88 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.61 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 8.52 (t, <i>J</i> = 12.8 Hz, 1H), 7.88 (s, 1H), 7.85 (s, 1H), 7.80 (s, 2H), 7.56 (d, <i>J</i> = 6.8 Hz, 1H), 7.38 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 6.95 (dd, <i>J</i> = 15.6, 9.2 Hz, 1H), 6.72 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.77-4.72 (m, 1H), 4.46-4.42 (m, 1H), 3.98-3.82 (m, 2H), 1.27 (d, <i>J</i> = 6.8 Hz, 3H)	3404, 1646, 1165, 565
F20		629.29 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.75 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 8.59 (t, <i>J</i> = 6.6 Hz, 1H), 7.98-7.88 (m, 4H), 7.56 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.09 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.7 Hz, 1H), 6.89 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 4.89-4.83 (m, 1H), 4.52-4.47 (m, 1H), 4.01-3.88 (m, 2H), 1.30 (d, <i>J</i> = 6.9 Hz, 3H)	3407, 1679, 1165, 808

[2331]

화합물 번호	mp (°C); [α] _D ²⁵	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹); ¹⁹ F NMR (δ)
F20A	[α] _D ²⁵ = +49.2 (c, CH ₂ Cl ₂ 중 1%)	628.89 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.74 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 7.98 (s, 1H), 7.92 - 7.89 (m, 3H), 7.56 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.08 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.8 Hz, 1H), 6.88 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.88 - 4.83 (m, 1H), 4.51 - 4.48 (m, 1H), 3.99 - 3.86 (m, 2H), 1.49 (d, <i>J</i> = 6.8 Hz, 3H)	3315, 1657, 1167, 700
F20B	[α] _D ²⁵ = -38.8 (c, CH ₂ Cl ₂ 중 1%)	628.89 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.74 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 7.98 (s, 1H), 7.92 - 7.89 (m, 3H), 7.56 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.08 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.8 Hz, 1H), 6.88 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.88 - 4.83 (m, 1H), 4.51 - 4.48 (m, 1H), 3.99 - 3.86 (m, 2H), 1.49 (d, <i>J</i> = 6.8 Hz, 3H)	3315, 1657, 1167, 700
F20C	61- 70	629 ([M+H] ⁺)	7.64 (t, <i>J</i> = 6.4 Hz, 1H), 7.52 (d, <i>J</i> = 7.9 Hz, 1H), 7.42 (s, 1H), 7.34 (d, <i>J</i> = 2.9 Hz, 3H), 6.64 (m, 1H), 6.91 (d, <i>J</i> = 11.4 Hz, 1H), 6.19 (dd, <i>J</i> = 11.4, 10.3 Hz, 1H), 4.94 (p, <i>J</i> = 7.1 Hz, 1H), 4.18 (q, <i>J</i> = 8.8 Hz, 1H), 3.95 - 3.71 (m, 2H), 1.52 (d, <i>J</i> = 6.9 Hz, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ - 59.22, 아미드 회전이성질체 - 69.43 및 - 69.45, -72.60

[2332]

화합물 번호	mp (°C); [α] _D ²⁵	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹); ¹⁹ F NMR (δ)
F21		682.98 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.70 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 8.55 (t, <i>J</i> = 6.4 Hz, 1H), 7.94 (s, 1H), 7.87-7.81 (m, 4H), 7.52 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.04 (dd, <i>J</i> = 15.6, 9.2 Hz, 1H), 6.84 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.80-4.75 (m, 1H), 4.47-4.44 (m, 1H), 3.97-3.78 (m, 2H), 1.29 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 3H)	3302, 1656, 1166, 557
F22		605.32 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.65 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 8.55 (t, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.93-7.87 (m, 3H), 7.78 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.71-7.66 (m, 1H), 7.61 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.41 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 7.03 (dd, <i>J</i> = 15.6, 9.2 Hz, 1H), 6.79 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 4.93-4.86 (m, 1H), 4.50-4.45 (m, 1H), 4.00-3.85 (m, 2H), 1.33 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 3H)	3412, 1645, 1164, 597
F23		609.00 ([M+H] ⁺)	7.66 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.43 (s, 1H), 7.40 (s, 2H), 7.34 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 6.79 (s, 1H), 6.73 (s, 1H), 6.56 (d, <i>J</i> = 16.4 Hz, 1H), 6.43 (dd, <i>J</i> = 16.4, 8.0 Hz, 1H), 4.64-4.60 (m, 1H), 4.13-4.06 (m, 1H), 4.00-3.85 (m, 2H), 2.09 (m, 1H), 1.87 -1.78 (m, 2H), 1.37 (t, <i>J</i> = 7.2 Hz, 3H)	3291, 1645, 1165, 749

[2333]

화합물 번호	mp (°C); [α] _D ²⁵	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹); ¹⁹ F NMR (δ)
F23A		608.99 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.63 (t, <i>J</i> = 6.4 Hz, 1H), 8.59 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.91 (s, 2H), 7.77 (s, 1H), 7.56 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.42 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.00 (dd, <i>J</i> = 15.6, 9.2 Hz, 1H), 6.78 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.86 - 4.81 (m, 1H), 4.42 - 4.37 (m, 1H), 4.05 - 3.84 (m, 2H), 1.75 - 1.61 (m, 2H), 0.92 (t, <i>J</i> = 7.2 Hz, 3H)	3292, 1646, 1165, 808
F24		622.97 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.65 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 8.56 (bs, 1H), 7.92-7.85 (m, 3H), 7.76-7.73 (m, 1H), 7.61 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 7.42 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 7.04 (dd, <i>J</i> = 15.6, 9.0 Hz, 1H), 6.08 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 4.98-4.92 (m, 1H), 4.50-4.46 (m, 1H), 4.00-3.88 (m, 2H), 1.31 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 3H)	3421, 1646, 1168
F25		594.94 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.66 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 8.57 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 7.91 (s, 2H), 7.77 (s, 1H), 7.57 (d, <i>J</i> = 6.9 Hz, 1H), 7.46 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 7.02 (dd, <i>J</i> = 15.6, 9.0 Hz, 1H), 6.78 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.87-4.80 (m, 1H), 4.51-4.47 (m, 1H), 4.04-3.88 (m, 2H), 1.31 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 3H)	3299, 1687, 1164, 808

[2334]

화합물 번호	mp (°C); [α] _D ²⁵	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹); ¹⁹ F NMR (δ)
F26		588.96 ([M-H] ⁻)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 10.54 (bs, 1H), 8.53 (d, <i>J</i> = 6.9 Hz, 1H), 7.89 (s, 2H), 7.45-7.38 (m, 3H), 6.88 (dd, <i>J</i> = 15.9, 8.4 Hz, 1H), 6.75 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 4.87-4.79 (m, 2H), 4.67-4.65 (m, 1H), 4.53-4.50 (m, 1H), 2.33 (s, 3H), 1.37 (d, <i>J</i> = 6.9 Hz, 3H)	3429, 1645, 1165, 750
F27		655.27 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 10.52 (bs, 1H), 8.74 (d, <i>J</i> = 5.7 Hz, 1H), 7.93-7.91 (m, 3H), 7.62 (d, <i>J</i> = 8.7 Hz, 1H), 7.48 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 6.98 (dd, <i>J</i> = 15.0, 6.3 Hz, 1H), 6.77 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.88- 4.80 (m, 2H), 4.52-4.43 (m, 2H), 1.37 (d, <i>J</i> = 6.9 Hz, 3H)	3422, 1657, 1161, 806, 557
F28		644.94 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 10.57 (bs, 1H), 8.85 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 7.99-7.70 (m, 4H), 7.65 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.07 (dd, <i>J</i> = 15.9, 6.9 Hz, 1H), 6.89 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.88-4.84 (m, 2H), 4.67-4.50 (m, 2H), 1.36 (d, <i>J</i> = 6.9 Hz, 3H)	3257, 1663, 1170, 809, 552

[2335]

화합물 번호	mp (°C); [α] _D ²⁵	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹); ¹⁹ F NMR (δ)
F29		602.94 ([M-H] ⁻)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 9.87 (bs, 1H), 8.40 (bs, 1H), 7.89 (s, 2H), 7.54 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.45 (s, 1H), 7.41 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 6.88 (dd, <i>J</i> = 15.9, 8.7 Hz, 1H), 6.75 (d, <i>J</i> = 15.3 Hz, 1H), 4.85-4.79 (m, 1H), 4.55-4.50 (m, 2H), 2.32 (s, 3H), 1.60 (s, 6H)	3420, 1645, 1164, 750
F30		611.0 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 10.65 (bs, 1H), 8.75 (d, <i>J</i> = 6.9 Hz, 1H), 7.90 (s, 2H), 7.78 (s, 1H), 7.58-7.49 (m, 2H), 6.98 (dd, <i>J</i> = 14.7 Hz, 8.0 Hz, 1H), 6.78 (d, <i>J</i> = 15.3 Hz, 1H), 4.89- 4.84 (m, 2H), 4.78-4.60 (m, 1H), 4.59-4.49 (m, 1H), 1.37 (d, <i>J</i> = 6.9 Hz, 3H)	3432, 1651, 1259, 750
F31		618.87 ([M-H] ⁻)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 10.14 (s, 1H), 9.72 (넓은 s, 1H), 7.88 (s, 2H), 7.40-7.34 (m, 2H), 7.24 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 6.81 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.0 Hz, 1H) 6.69 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 4.84-4.78 (m, 1H), 4.55-4.50 (m, 2H), 2.29 (s, 3H), 1.76 (s, 6H)	3436, 1261, 750

[2336]

[2337]

^a ¹H NMR 스펙트럼 데이터는 언급된 경우를 제외하고는 CDCl₃ 중에서 400 MHz 기기를 이용하여 획득하였다.
HRMS 데이터는 관찰치 (이론치)로 나타냈다.

[2338]

표 2B: 표 1B의 화합물에 대한 분석 데이터.

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹); ¹⁹ F NMR (δ)
P1		590.91 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.69 (t, <i>J</i> = 5.6 Hz, 1H), 8.56 (t, <i>J</i> = 6.4 Hz, 1H), 7.93-7.88 (m, 3H), 7.77- 7.75 (m, 1H), 7.70-7.66 (m, 1H), 7.62-7.60 (m, 1H), 7.45 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.03 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.8 Hz, 1H), 6.78 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.92-4.87 (m, 1H), 3.97- 3.90 (m, 4H)	3327, 1703, 1164, 595
P2		581.91 ([M-H] ⁻)	7.63-7.62 (m, 1H), 7.58 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.39-7.37 (m, 1H), 7.12 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 2H), 6.78 (t, <i>J</i> = 4.8 Hz, 1H), 6.65 (bs, 1H), 6.59 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.39 (dd, <i>J</i> = 15.6, 7.6 Hz, 1H), 4.24-4.20 (m, 3H), 4.00- 3.92 (m, 2H)	3280, 2243, 1637, 1166
P12		577.07 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.61-8.54 (m, 2H), 7.86 (d, <i>J</i> = 6.4 Hz, 2H), 7.53 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.45-7.42 (m, 2H), 6.95 (dd, <i>J</i> = 15.6, 9.6 Hz, 1H), 6.80 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.86-4.76 (m, 1H), 3.98-3.89 (m, 4H), 2.43 (s, 3H)	3311, 1646, 1164, 714

[2339]

P14		638.80 ([M-H] ⁻)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 10.55 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 10.53 (t, <i>J</i> = 5.2 Hz, 1H), 7.90 (s, 1H), 7.87 (d, <i>J</i> = 8.8 Hz, 2H), 7.59-7.56 (m, 1H), 7.37-7.35 (m, 1H), 6.98 (dd, <i>J</i> = 15.6, 9.0 Hz, 1H), 6.76 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 4.84-4.77 (m, 1H), 4.70-4.58 (m, 4H)	3435, 1166, 749, 597
P15		590.8 ([M-H] ⁻)	(400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 10.62 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 10.54 (t, <i>J</i> = 5.2 Hz, 1H), 7.89 (s, 2H), 7.42 (s, 1H), 7.39-7.37 (m, 1H), 7.24 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 6.84 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.8 Hz, 1H), 6.74 (d, <i>J</i> = 15.6, 1H), 4.84-4.80 (m, 1H), 4.71 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 2H), 4.65-4.56 (m, 2H), 2.35 (s, 3H)	3243, 2923, 1106, 614
P82		590.9 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.65 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 8.56 (t, <i>J</i> = 6.6 Hz, 1H), 7.88 (s, 1H), 7.59 - 7.56 (m, 2H), 7.47 - 7.40 (m, 2H), 6.90 - 6.88 (m, 2H), 4.97 - 4.94 (m, 1H), 4.50 - 4.46 (m, 1H), 4.00 - 3.88 (m, 2H), 1.31 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 3H)	3298, 1643, 1162
P84	82-85	581.1 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.74 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 8.59 (t, <i>J</i> = 6.6 Hz, 1H), 7.96 (s, 1H), 7.89 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 7.61 - 7.44 (m, 3H) 6.99 (m, 2H), 4.98 - 4.95 (m, 1H), 4.51 - 4.47 (m, 1H), 3.99 - 3.88 (m, 2H), 1.29 (d, <i>J</i> = 6.8 Hz, 3H)	

[2340]

P156		639.0 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.66 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 8.56 (t, <i>J</i> = 5.6 Hz, 1H), 7.95 - 7.93 (m, 2H), 7.60 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 7.42 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.03 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.8 Hz, 1H), 6.94 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 5.09 - 5.04 (m, 1H), 4.53 - 4.43 (m, 1H), 4.02 - 3.86 (m, 2H), 1.31 (t, <i>J</i> = 6.8 Hz, 3H)	3436, 2924, 1662, 1162, 750
P226		620.95 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.65 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz 1H), 8.57 (t, <i>J</i> = 6.3 Hz, 1H), 7.90 (s, 1H), 7.60-7.55 (m, 4H), 7.41(d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 2H), 6.99 (dd, <i>J</i> = 15.6, 9.0 Hz, 1H), 6.78 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 4.85-4.79 (m, 1H), 4.50- 4.43 (m, 1H), 4.00-3.85 (m, 2H), 1.33 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 3H)	3413, 1668, 1161
P228		610.94 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.74 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 8.61 (t, <i>J</i> = 6.6 Hz, 1H), 7.96 (s, 1H), 7.91 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.63 - 7.53 (m, 4H), 7.41 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 7.08 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.7 Hz, 1H), 6.89 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.84 - 4.81 (m, 1H), 4.51 - 4.43 (m, 1H), 3.99 - 3.85 (m, 2H), 1.29 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 3H)	3413, 1668, 1161, 564

[2341]

P298		634.8 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.65 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 8.55 (t, <i>J</i> = 6.4 Hz, 1H), 7.92 - 7.91 (d, <i>J</i> = 1.6 Hz, 1H), 7.67 (s, 1H), 7.62 - 7.58 (m, 2H), 7.54 (d, <i>J</i> = 9.6 Hz, 1H), 7.41 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 6.97 (dd, <i>J</i> = 15.6, 9.2 Hz, 1H), 6.77 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.82 - 4.77 (m, 1H), 4.50 - 4.46 (m, 1H), 4.00 - 3.82 (m, 2H), 1.31 (t, <i>J</i> = 7.2 Hz, 3H)	3307, 2925, 1652, 1164
P300		623.2 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.74 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 8.60 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 7.97 (s, 1H), 7.90 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.68 (s, 1H), 7.62 - 7.59 (m, 1H), 7.56 - 7.53 (m, 2H), 7.06 (dd, <i>J</i> = 15.6, 9.2 Hz, 1H), 6.88 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.84 - 4.80 (m, 1H), 4.51 - 4.47 (m, 1H), 4.03 - 3.85 (m, 2H), 1.29 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 3H)	3296, 1652, 1167
P442		584.87 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.64 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 8.57 (t, <i>J</i> = 12.8 Hz, 1H), 7.87 (d, <i>J</i> = 1.2 Hz, 1H), 7.58 - 7.52 (m, 2H), 7.48 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.41 - 7.37 (m, 2H), 6.90 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.8 Hz, 1H), 6.74 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.68 - 4.63 (m, 1H), 4.49 - 4.46 (m, 1H), 3.99 - 3.86 (m, 2H), 2.35 (s, 3H), 1.28 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 3H)	3410, 1692, 1163, 769, 565

[2342]

P444		574.98 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.73 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 8.60 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 7.92 (s, 1H), 7.88 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.55 - 7.53 (m, 2H), 7.48 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.40 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 6.98 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.8 Hz, 1H), 6.86 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.70 - 4.66 (m, 1H), 4.50 - 4.47 (m, 1H), 3.99 - 3.82 (m, 2H), 2.35 (s, 3H), 1.27 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 3H)	3292, 1661, 1158, 741
P514		583.0 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.64 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 8.57 (t, <i>J</i> = 6.3 Hz, 1H), 7.86 (s, 1H), 7.58 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 7.41 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.26 (d, <i>J</i> = 6.6 Hz, 2H), 6.88 (dd, <i>J</i> = 15.9, 8.4 Hz, 1H), 6.73 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 4.58 - 4.46 (m, 2H), 4.00 - 3.85 (m, 2H) , 2.24 (s, 6H), 1.31 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 3H)	3276 , 1638, 1167, 598
P516		573.37 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.73 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 8.61 (t, <i>J</i> = 6.3 Hz, 1H), 7.88 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 2H), 7.55 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.27 (d, <i>J</i> = 6.9 Hz, 2H), 6.98 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.4 Hz, 1H), 6.85 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.57 - 4.46 (m, 2H), 3.99 - 3.85 (m, 2H), 2.24 (s, 6H), 1.29 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 3H)	3299, 1654, 1165

[2343]

P568		692.88 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.65 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 8.55 (t, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 7.98 (s, 1H), 7.90 (s, 1H), 7.85 (d, <i>J</i> = 8.7 Hz, 1H), 7.60 - 7.57 (m, 1H), 7.51-7.48 (m, 1H), 7.41 - 7.39 (m, 1H), 6.96 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.7 Hz, 1H), 6.76 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 4.81 - 4.72 (m, 1H), 4.50 - 4.46 (m, 1H), 4.01 - 3.82 (m, 2H), 1.31 (d, <i>J</i> = 6.9 Hz, 3H)	3306, 1646, 1164
P586		646.9 ([M-H] ⁻)	7.64 (s, 1H), 7.56 - 7.54 (m, 2H), 7.43 - 7.39 (m, 2H), 7.33 (s, 1H), 6.81 (bs, 1H), 6.57 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.50 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 6.45 (dd, <i>J</i> = 16.0, 7.6 Hz, 1H), 4.75 - 4.72 (m, 1H), 4.14 - 4.10 (m, 1H), 4.00 - 3.90 (m, 2H), 1.30 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 3H)	3384, 1647, 1164, 749, 566
P588		638.84 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, CDCl ₃) δ 7.69 (s, 1H), 7.62-7.59 (m, 1H), 7.55 - 7.49 (m, 2H), 7.42 (s, 1H), 7.32 (s, 1H), 6.88 (bs, 1H), 6.65 (d, <i>J</i> = 16.2 Hz, 1H), 6.49 (dd, <i>J</i> = 16.2, 8.1 Hz, 1H), 6.34 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 4.76 - 4.71 (m, 1H), 4.15 - 4.12 (m, 1H), 3.96 - 3.89 (m, 2H), 1.49 (d, <i>J</i> = 7.3 Hz, 3H)	3304, 2928, 1650, 1165, 673, 558

[2344]

P660		682.8 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.74 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 8.60 (t, <i>J</i> = 8.8 Hz, 1H), 7.99 - 7.96 (m, 2H), 7.90 (d, <i>J</i> = 8.3 Hz, 1H), 7.85 (d, <i>J</i> = 8.3 Hz, 1H), 7.55-7.50 (m, 2H), 7.04 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.8 Hz, 1H), 6.86 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 4.83 - 4.78 (m, 1H), 4.51 - 4.47 (m, 1H), 3.99 - 3.86 (m, 2H), 1.29 (d, <i>J</i> = 5.1 Hz, 3H)	3310, 1650, 1166, 558
P730		615.85 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.67 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 8.55 (t, <i>J</i> = 6.6 Hz, 1H), 8.31 (s, 1H), 7.90 - 7.86 (m, 3H), 7.60 (d, <i>J</i> = 9.2 Hz, 1H), 7.42 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 6.98 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.7 Hz, 1H), 6.79 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.96 - 4.95 (m, 1H), 4.50 - 4.45 (m, 1H), 3.96 - 3.88 (m, 2H), 1.31 (d, <i>J</i> = 9.3 Hz, 3H)	3299, 1651, 1166, 739
P732		605.96 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, CDCl ₃) δ 7.91 (s, 1H), 7.69 (s, 1H), 7.64 - 7.50 (m, 4H), 6.71 (bs, 1H), 6.67 (d, <i>J</i> = 16.2 Hz, 1H), 6.52 (dd, <i>J</i> = 15.9, 7.8 Hz, 1H), 6.30 (d, <i>J</i> = 6.9 Hz, 1H), 4.73 - 4.69 (m, 1H), 4.30 - 4.24 (m, 1H), 3.96 - 3.91 (m, 2H), 1.49 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 3H)	3297, 1651, 1167, 749

[2345]

P802		578.1 ([M-H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.65 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 8.56 (t, <i>J</i> = 6.3 Hz, 1H), 8.20 - 8.18 (m, 1H), 8.00 - 7.90 (m, 2H), 7.66 - 7.54 (m, 2H), 7.42 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 6.99 (dd, <i>J</i> = 15.9, 9.3 Hz, 1H), 6.77 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 4.88 - 4.82 (m, 1H), 4.51 - 4.46 (m, 1H), 4.00 - 3.88 (m, 2H), 1.29 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 3H)	3307, 2927, 2238, 1659, 1166
P804		570.3 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.74 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 8.59 (t, <i>J</i> = 6.6 Hz, 1H), 8.21 - 8.19 (m, 1H), 8.01 - 7.96 (m, 2H), 7.90 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.66 - 7.60 (m, 1H), 7.56 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.08 (dd, <i>J</i> = 15.9, 8.7 Hz, 1H), 6.88 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.91 - 4.85 (m, 1H), 4.52 - 4.47 (m, 1H), 3.99 - 3.88 (m, 2H), 1.29 (d, <i>J</i> = 6.9 Hz, 3H)	3301, 3078, 2239, 1657, 1167
P1090		569.89 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.64 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 8.55 (t, <i>J</i> = 6.3 Hz, 1H), 7.86 (s, 1H), 7.58 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 7.47 (d, <i>J</i> = 6.9 Hz, 1H), 7.41 - 7.36 (m, 3H), 7.21 - 7.15 (m, 1H), 6.91 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.7 Hz, 1H), 6.74 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 4.66 - 4.60 (m, 1H), 4.50 - 4.45 (m, 1H), 4.03 - 3.85 (m, 2H), 2.26 (s, 3H), 1.31 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 3H)	3277, 1698, 1167, 518

[2346]

P1092		559.05 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.74 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 8.59 (t, <i>J</i> = 6.3 Hz, 1H), 7.92 (s, 1H), 7.89 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.56 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.48 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 7.42 - 7.38 (m, 1H), 7.19 (t, <i>J</i> = 9.3 Hz, 1H), 7.00 (dd, <i>J</i> = 15.9, 8.7 Hz, 1H), 6.85 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 4.69 - 4.62 (m, 1H), 4.51 - 4.47 (m, 1H), 4.02 - 3.85 (m, 2H), 2.26 (s, 3H), 1.29 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 3H)	3437, 1643, 1165
P1197		576.83 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, CDCl ₃) δ 7.62-7.56 (m, 2H), 7.40- 7.37 (m, 1H), 7.05-7.00 (m, 2H), 6.72 (bs, 1H), 6.56 (bs, 1H), 6.51 (d, <i>J</i> = 16.2 Hz, 1H), 6.52 (dd, <i>J</i> = 15.9, 7.5 Hz, 1H), 4.21 (d, <i>J</i> = 5.4 Hz, 2H), 4.13-4.08 (m, 1H), 4.02-3.91 (m, 2H)	3311, 1655, 1166
P1269		659.07 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, CDCl ₃) δ 7.91 (s, 1H), 7.83 (s, 2H), 7.64-7.56 (m, 2H), 7.42-7.39 (m, 1H), 6.74 (bs, 1H), 6.62 (bs, 1H), 6.61 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 6.50 (dd, <i>J</i> = 15.7, 7.8 Hz, 1H), 4.35-4.30 (m, 1H), 4.21 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 2H), 4.02-3.90 (m, 2H)	3317, 1706, 1175, 559

[2347]

P1340		607.00 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.68 (t, <i>J</i> = 5.7 Hz, 1H), 8.56 (t, <i>J</i> = 6.3 Hz, 1H), 7.93 (s, 1H), 7.87-7.83 (m, 2H), 7.76-7.75 (m, 1H), 7.62-7.55 (m, 1H), 7.45 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 7.05 (dd, <i>J</i> = 15.6, 9.0 Hz, 1H), 6.88 (d, <i>J</i> - 15.3 Hz, 1H), 4.99-4.92 (m, 1H), 4.01-3.90 (m, 4H)	3411, 1652, 1166
P1411		624.92 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, CDCl ₃) δ 7.64 (s, 1H), 7.58-7.55 (m, 3H), 7.51 (s, 1H), 7.41-7.38 (m, 1H), 6.77 (bs, 1H), 6.72 (bs, 1H), 6.59 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 6.48 (dd, <i>J</i> = 15.9, 7.5 Hz, 1H), 4.24-4.19 (m, 4H), 4.01-3.90 (m, 1H)	3098, 1721, 1214, 723, 513
P1483		608.78 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, CDCl ₃) δ 7.62-7.54 (m, 3H), 7.39 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.29-7.24 (m, 1H), 6.84- 6.82 (m, 1H), 6.56 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 6.49 (dd, <i>J</i> = 15.6, 6.6 Hz, 1H), 4.23-4.19 (m, 2H), 4.01-3.93 (m, 3H)	3300, 1657, 1164, 560
P1556		614.84 ([M+H] ⁺)	7.70 (s, 1H), 7.63 - 7.61 (m, 1H), 7.56 - 7.51 (m, 1H), 7.41 (s, 2H), 6.65 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 6.60 (bs, 2H), 6.50 (dd, <i>J</i> = 15.2, 6.8 Hz, 1H), 4.19 - 4.13 (m, 3H), 3.98 - 3.94 (m, 2H)	3369, 1719, 1164, 807.

[2348]

P1558		595.00 ([M-H] ⁺)	(300 MHz, CDCl ₃) δ 8.89 (bs, 1H), 7.72-7.69 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.45-7.35 (m, 4H), 7.25- 7.19 (m, 1H), 6.58 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 6.45 (dd, <i>J</i> = 15.9, 7.8 Hz, 1H), 4.57 (d, <i>J</i> = 5.7 Hz, 2H), 4.49-4.38 (m, 2H), 4.16-4.03 (m, 1H)	3351, 1660, 1161, 700
P1559		628.95 ([M-H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 10.45 (t, <i>J</i> = 6.4 Hz, 1H), 8.97 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 8.02-7.92 (m, 4H), 7.77 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 7.10 (dd, <i>J</i> = 15.6, 9.0 Hz, 1H), 6.90 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.90-4.82 (m, 1H), 4.63-4.58 (m, 2H), 4.23 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 2H)	3398, 1664, 1163, 808
P1560		574.88 ([M-H] ⁺)	(400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 10.38 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 8.65 (t, <i>J</i> = 5.6 Hz, 1H), 7.88 (s, 2H), 7.50- 7.42 (m, 3H), 6.88 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.8 Hz, 1H), 6.75 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.85-4.81 (m, 1H), 4.63-4.54 (m, 2H), 4.24 (d, <i>J</i> = 6.2 Hz, 2H), 2.36 (s, 3H)	3246, 1646, 1161, 808
P1564		576.6 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 10.48 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 8.74 (t, <i>J</i> = 6.2 Hz, 1H), 7.89 (s, 2H), 7.41- 7.36 (m, 2H), 7.19 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 6.84 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.8 Hz, 1H), 6.73 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.84-4.79 (m, 1H), 4.42 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 2H), 3.98-3.92 (m, 2H), 2.32 (s, 3H)	3351, 1684, 1163, 808

[2349]

P1566		597.00 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.74 (t, <i>J</i> = 5.6 Hz, 1H), 8.30 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 8.03 - 7.84 (m, 4H), 7.61 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.09 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.8 Hz, 1H), 6.89 (d, <i>J</i> = 16.4 Hz, 1H), 4.88 -4.81 (m, 1H), 3.89 (d, <i>J</i> - 5.6 Hz, 2H), 3.59 - 3.48 (m, 3H)	3323, 1654, 1115, 808
P1589		638.9 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.63 (t, <i>J</i> = 5.7 Hz, 1H), 8.50 (d, <i>J</i> = 9.0 Hz, 1H), 7.93-7.91 (m, 3H), 7.62- 7.60 (m, 1H), 7.42 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 7.01 (dd, <i>J</i> = 15.6, 9.6 Hz, 1H), 6.77 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.88-4.80 (m, 1H), 4.66-4.60 (m, 1H), 4.00- 3.97 (m, 1H), 3.87-3.80 (m, 1H), 1.27 (d, <i>J</i> = 6.9 Hz, 3H)	3412, 1657, 1169, 749, 565
P1591		628.95 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.74 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 8.51 (d, <i>J</i> = 8.7 Hz, 1H), 7.99 (s, 1H), 7.92-7.90 (m, 3H), 7.58 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.10 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.7 Hz, 1H), 6.89 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 4.89-4.86 (m, 1H), 4.66- 4.58 (m, 1H), 4.00-3.92 (m, 1H), 3.88-3.80 (m, 1H), 1.27 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 3H)	3436, 1667, 1261, 749

[2350]

P1592		574.98 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.51 (d, <i>J</i> = 8.7 Hz, 1H), 8.41 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 7.89 (s, 2H), 7.45-7.35 (m, 3H), 6.83 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.5 Hz, 1H), 6.75 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.86-4.79 (m, 1H), 4.65- 4.60 (m, 1H), 3.98-3.91 (m, 1H), 3.85-3.78 (m, 1H), 2.36 (s, 3H), 1.26 (d, <i>J</i> = 6.9 Hz, 3H)	3418, 1651, 1163, 748
P1599		689.9 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.67 (bs, 1H), 8.60 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 7.95 (d, <i>J</i> = 9.9 Hz, 2H), 7.91 (s, 1H), 7.78 (d, <i>J</i> = 6.6 Hz, 1H), 7.42 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H) 7.12 (dd, <i>J</i> = 15.6, 9.9 Hz, 1H), 6.78 (d, <i>J</i> = 15.3 Hz, 1H), 4.94 - 4.91 (m, 1H), 4.52 - 4.45 (m, 1H), 4.00 - 3.85 (m, 2H), 1.33 (d, <i>J</i> = 6.9 Hz, 3H)	3415, 1599, 1162, 748
P1601		678.6 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.73 (bs, 1H), 8.59 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 7.95 (d, <i>J</i> = 9.9 Hz, 2H), 7.88 - 7.83 (m, 2H), 7.56 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 7.12 (dd, <i>J</i> = 15.6, 10.5 Hz, 1H), 6.78 (d, <i>J</i> = 15.3 Hz, 1H), 4.94 - 4.91 (m, 1H), 4.51 - 4.43 (m, 1H), 3.99 - 3.88 (m, 2H), 1.31 (d, <i>J</i> = 6.9 Hz, 3H)	3423, 1646, 1141, 807

[2351]

P1603	113-117	563 ([M+H] ⁺)	7.80 – 7.72 (m, 2H), 7.48 – 7.44 (m, 2H), 7.42 (s, 2H), 6.92 (t, <i>J</i> = 6.4 Hz, 1H), 6.62 (m, 1H), 6.42 (dd, <i>J</i> = 15.9, 8.0 Hz, 1H), 4.75 (p, <i>J</i> = 7.1 Hz, 1H), 4.11 (p, <i>J</i> = 8.5 Hz, 1H), 4.07 – 3.79 (m, 2H), 1.54 (d, <i>J</i> = 7.0 Hz, 3H)	¹⁹F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ - 68.66, -72.52
P1611A		621.0 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.60 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 8.28 (t, <i>J</i> = 5.7 Hz, 1H), 7.91 (s, 3H), 7.61 - 7.58 (m, 1H), 7.43 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.01 (dd, <i>J</i> = 15.6, 9.0 Hz, 1H), 6.77 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 4.86 - 4.79 (m, 1H), 4.49 - 4.44 (m, 1H), 3.55 - 3.31 (m, 2H), 1.30 (d, <i>J</i> = 6.9 Hz, 3H)	3410, 2925, 1645, 1115, 748, 561
P1613A		611.1 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.70 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 8.31 (t, <i>J</i> = 5.7 Hz, 1H), 7.98 (s, 1H), 7.92 - 7.88 (m, 3H), 7.57 - 7.55 (m, 1H), 7.09 (dd, <i>J</i> = 15.3, 9.0 Hz, 1H), 6.89 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 4.89 - 4.82 (m, 1H), 4.52 - 4.43 (m, 1H), 3.57 - 3.47 (m, 2H), 1.29 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 3H)	3297, 1651, 1115, 808

[2352]

P1616		602.8 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.64 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 8.11 (t, <i>J</i> = 5.4 Hz, 1H), 7.91 (s, 3H), 7.60 - 7.58 (m, 1H), 7.43 (d, <i>J</i> = 8.2 Hz, 1H), 7.00 (dd, <i>J</i> = 15.6, 9.0 Hz, 1H), 6.77 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 4.86 - 4.53 (m, 1H), 4.51 - 4.42 (m, 2H), 4.35 (t, <i>J</i> = 5.1 Hz, 1H), 3.45 - 3.31 (m, 2H), 1.31 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 3H)	3305, 1650, 1169, 749, 559
P1616A		602.8 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.53 (d, <i>J</i> = 7.60 Hz, 1H), 8.08 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 7.91 - 7.90 (m 3H), 7.59 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 7.43 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 6.98 (dd, <i>J</i> = 16.0, 9.2 Hz, 1H), 6.77 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 4.84 - 4.80 (m, 1H), 4.50 - 4.36 (m, 3H), 3.44 - 3.24 (m, 2H), 1.30 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 3H)	3407, 1651, 1169, 744, 559
P1618A		593.1 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.64 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 8.17 (t, <i>J</i> = 5.4 Hz, 1H), 8.03 - 7.87 (m, 3H), 7.60 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 7.09 (dd, <i>J</i> = 15.9, 9.0 Hz, 1H), 6.89 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 4.89 - 4.53 (m, 1H), 4.53 - 4.42 (m, 2H), 4.35 (t, <i>J</i> = 5.1 Hz, 1H), 3.44 - 3.42 (m, 2H), 1.28 (d, <i>J</i> = 6.9 Hz, 3H)	3411, 1651, 1115, 809

[2353]

P1621		585.0 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.50 (bs, 1H), 7.91 (s, 3H), 7.83 - 7.81 (m, 1H), 7.60 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.43. (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.00 (dd, <i>J</i> = 15.9, 9.9 Hz, 1H), 6.77 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 4.86 - 4.80 (m, 1H), 4.40 - 4.36 (m, 1H), 3.14 - 3.06 (m, 2H), 1.28 (d, <i>J</i> = 6.9 Hz, 3H), 1.03 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 3H)	3411, 1649, 1168, 806, 559
P1623		575.1 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.59 (bs, 1H), 7.97 (s, 1H), 7.92 - 7.85 (m, 4H), 7.57 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 7.09 (dd, <i>J</i> = 16.2, 9.3 Hz, 1H), 6.88 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 4.89 - 4.82 (m, 1H), 4.43 - 4.36 (m, 1H), 3.12 - 3.05 (m, 2H), 1.26 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 3H), 1.05 (t, <i>J</i> = 7.5 Hz, 3H)	3412, 1645, 1115, 749
P1624		521.2 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.26 (bs, 1H), 7.89 (s, 1H), 7.85-7.81 (m, 2H), 7.47 - 7.37 (m, 2H), 7.34 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 6.88 (dd, <i>J</i> = 15.9, 8.7 Hz, 1H), 6.75 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 4.85 - 4.79 (m, 1H), 4.39 - 4.34 (m, 1H), 3.13 - 3.04 (m, 2H), 2.48 (s, 3H), 1.28 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 3H), 1.04 (t, <i>J</i> = 7.5 Hz, 3H)	3307, 1642, 1114, 749

[2354]

P1631A		652.8 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.54 (d, <i>J</i> = 7.60 Hz, 1H), 8.07 (t, <i>J</i> = 5.4 Hz, 1H), 7.91 - 7.90 (m, 3H), 7.60 (d, <i>J</i> = 9.2 Hz, 1H), 7.43 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 6.98 (dd, <i>J</i> = 16.0, 9.0 Hz, 1H), 6.77 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 4.85 - 4.80 (m, 1H), 4.41 - 4.37 (m, 1H), 3.40 - 3.26 (m, 2H), 2.50 - 2.38 (m, 2H), 1.28 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 3H)	3297, 1646, 1161, 742, 555
P1633A		640.7 ([M-H] ⁻)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.66 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 8.13 (t, <i>J</i> = 5.4 Hz, 1H), 7.97 (s, 1H), 7.92 - 7.88 (m, 3H), 7.58 (d, <i>J</i> = 8.2 Hz, 1H), 7.09 (dd, <i>J</i> = 16.3, 9.0 Hz, 1H), 6.89 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 4.89 - 4.82 (m, 1H), 4.42 - 4.37 (m, 1H), 3.38 - 3.24 (m, 2H), 2.44 - 2.36 (m, 2H), 1.27 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 3H)	3299, 1651, 1139, 808
P1636	176-184	575 ([M-H] ⁻)	7.76 - 7.72 (m, 2H), 7.48 - 7.44 (m, 2H), 7.42 (s, 2H), 6.62 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 6.54 (s, 1H), 6.42 (dd, <i>J</i> = 15.9, 7.9 Hz, 1H), 4.89 (s, 1H), 4.11 (p, <i>J</i> = 8.7 Hz, 1H), 3.92 (dq, <i>J</i> = 22.9, 9.0, 6.5 Hz, 2H), 1.71 (s, 6H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) 회전이성결체 δ - 68.65, -72.57, -73.24

[2355]

P1638		638.64 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.60 (bs, 1H), 8.44 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 7.90 (s, 3H), 7.59 (d, <i>J</i> = 6.9 Hz, 1H), 7.33 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 7.00 (dd, <i>J</i> = 16.2, 9.6 Hz, 1H), 6.76 (d, <i>J</i> = 15.3 Hz, 1H), 4.88 - 4.4.80 (m, 1H), 3.92 - 3.87 (m, 2H), 3.42 - 3.40 (m, 2H), 2.50 - 2.49 (m, 2H)	3427, 2924, 1651, 1162, 680
P1640		628.9 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.61 (bs, 1H), 8.53 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 7.96 (s, 1H), 7.92 - 7.86 (m, 3H), 7.47 (d, <i>J</i> = 9.0 Hz, 1H), 7.18 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.1 Hz, 1H), 6.88 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.91 - 4.78 (m, 1H), 3.96 - 3.84 (m, 2H), 3.45 - 3.38 (m, 2H), 2.50 - 2.43 (m, 2H)	3445, 1644, 1163, 749
P1641		574.8 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.61 (bs, 1H), 8.27 (t, <i>J</i> = 5.4 Hz, 1H), 7.89 (s, 2H), 7.47 - 7.37 (m, 2H), 7.28 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 6.88 (dd, <i>J</i> = 15.6, 9.0 Hz, 1H), 6.74 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 4.88 - 4.81 (m, 1H), 3.92 - 3.86 (m, 2H), 3.45 - 3.38 (m, 2H), 2.51 - 2.44 (m, 2H), 2.32 (s, 3H)	3427, 2926, 1645, 1162, 809

[2356]

P1691		654.8 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.64 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 8.57 (t, <i>J</i> = 6.3 Hz, 1H), 7.91 (s, 1H), 7.71 (s, 2H), 7.66 (s, 1H), 7.57 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.41 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 7.03 (dd, <i>J</i> = 15.6, 9.6 Hz, 1H), 6.78 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.91 - 4.71 (m, 1H), 4.50 - 4.45 (m, 1H), 4.02 - 3.82 (m, 2H), 1.30 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 3H)	3301, 1647, 1164, 746
P1693		645.1 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.73 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 8.61 (d, <i>J</i> = 6.3 Hz, 1H), 7.96 (s, 1H), 7.86 - 7.80 (m, 1H), 7.71 (s, 2H), 7.67 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.56 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 7.00 (dd, <i>J</i> = 15.6, 9.3 Hz, 1H), 6.90 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 4.92 - 4.71 (m, 1H), 4.51 - 4.49 (m, 1H), 3.99 - 3.85 (m, 2H), 1.29 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 3H)	3309, 1650, 1165, 677
P1696		604.2 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.65 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 8.55 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 7.92 (d, <i>J</i> = 1.5 Hz, 1H), 7.68 (t, <i>J</i> = 3.3 Hz, 3H), 7.60 (d, <i>J</i> = 6.9Hz, 1H), 7.42 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 7.00 (dd, <i>J</i> = 15.3, 8.7 Hz, 1H), 6.76 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.83 (t, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 4.51 (t, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 4.01 - 3.88 (m, 2H), 1.29 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 3H)	3418, 1645, 1165, 750, 562

[2357]

P1698		595.1 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.74 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 8.59 (t, <i>J</i> = 6.6 Hz, 1H), 7.98 (s, 1H), 7.91 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.69 - 7.62 (m, 2H), 7.56 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 7.09 (dd, <i>J</i> = 15.3, 8.7 Hz, 1H), 6.88 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.83 - 4.80 (m, 1H), 4.51 - 4.47 (m, 1H), 3.99 - 3.86 (m, 2H), 1.29 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 3H)	3294, 2928, 1646, 1166, 750
P1776		593.2 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.69 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 8.57 (t, <i>J</i> = 6.4 Hz, 1H), 7.90 (dd, <i>J</i> = 13.3, 1.8 Hz, 2H), 7.72 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.58 (ddd, <i>J</i> = 18.0, 8.2, 1.8 Hz, 2H), 7.44 (d, <i>J</i> = 7.9 Hz, 1H), 6.94 (dd, <i>J</i> = 15.7, 9.0 Hz, 1H), 6.74 (d, <i>J</i> = 15.7 Hz, 1H), 4.81 (p, <i>J</i> = 9.4 Hz, 1H), 4.02 - 3.87 (m, 4H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ - 67.98, -70.71
P1781		513.2 ([M+H] ⁺)	7.85 - 7.74 (m, 2H), 7.53 - 7.41 (m, 4H), 7.30 (t, <i>J</i> = 6.2 Hz, 1H), 7.23 (dd, <i>J</i> = 8.4, 2.0 Hz, 1H), 7.19 (t, <i>J</i> = 5.2 Hz, 1H), 6.61 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 6.46 (dd, <i>J</i> = 15.9, 7.8 Hz, 1H), 4.26 (d, <i>J</i> = 5.1 Hz, 2H), 4.21 - 4.07 (m, 1H), 3.95 (qd, <i>J</i> = 9.1, 6.4 Hz, 2H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ - 68.78, -72.44

[2358]

P1806		605.0 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.67 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 8.57 (t, <i>J</i> = 6.3 Hz, 1H), 7.91 - 7.88 (m, 2H), 7.74 (d, <i>J</i> = 8.7 Hz, 1H), 7.64 - 7.59 (m, 2H), 7.41 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 6.98 (dd, <i>J</i> = 15.9, 9.3 Hz, 1H), 6.76 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 4.83 - 4.77 (m, 1H), 4.52 - 4.43 (m, 1H), 4.05 - 3.83 (m, 2H), 1.30 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 3H)	3411, 2925, 1650, 1163, 747
P1808		695.1 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.74 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 8.59 (s, 1H), 7.96 - 7.89 (m, 3H), 7.73 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.55 (t, <i>J</i> = 8.8 Hz, 2H), 7.05 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.8 Hz, 1H), 6.87 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 4.85 - 4.80 (m, 1H), 4.51 - 4.47 (m, 1H), 3.99 - 3.88 (m, 2H), 1.28 (d, <i>J</i> = 6.8 Hz, 3H)	3297, 1652, 1165, 745
P1862		598.89 ([M+H] ⁺)	7.70 (s, 1H), 7.62-7.60 (m, 1H), 7.55-7.53 (m, 1H), 7.35 (d, <i>J</i> = 5.6 Hz, 2H), 7.89 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 6.67 (t, <i>J</i> = 5.6 Hz, 1H), 6.64 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 6.48 (dd, <i>J</i> = 16.4, 8.0 Hz, 1H), 4.23 (d, <i>J</i> = 5.6 Hz, 2H), 4.17-4.08 (m, 1H), 3.97- 3.89 (m, 2H)	3324, 1673, 1164, 772

[2359]

P1864		622.88 ([M-H] ⁻)	(400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 10.39 (bs, 1H), 8.85 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 7.94 (s, 1H), 7.87 (d, <i>J</i> = 6.4 Hz, 2H), 7.64 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.58 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.00 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.8 Hz, 1H), 6.77 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.81-4.79 (m, 1H), 4.63-4.59 (m, 2H), 4.24 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 2H)	3256, 1657, 1166, 749, 591
P1866		614.91 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 10.43 (bs, 1H), 8.96 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 8.00 (s, 1H), 7.94 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 7.88 (d, <i>J</i> = 6.4 Hz, 2H), 7.76 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.09 (dd, <i>J</i> = 15.6, 9.2 Hz, 1H), 6.88 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 4.86-4.78 (m, 1H), 4.62-4.58 (m, 2H), 4.23 (d, <i>J</i> = 5.6 Hz, 2H)	3447, 1655, 1167, 816
P1969		678.77 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.65 (t, <i>J</i> = 5.4 Hz, 1H), 8.54 (t, <i>J</i> = 6.3 Hz, 1H), 7.90-7.86 (m, 2H), 7.82 (s, 2H), 7.60 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 7.43 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 6.99 (dd, <i>J</i> = 15.6, 9.0 Hz, 1H), 6.75 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.83-4.76 (m, 1H), 4.01-3.91 (m, 4H)	3296, 1697, 1164, 596
P1970		634.87 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.68 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 8.57 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 7.89 - 7.78 (m, 4H), 7.59 - 7.56 (m, 1H), 7.49 - 7.46 (m, 1H), 7.02 (dd, <i>J</i> = 15.9, 8.1 Hz, 1H), 6.78 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.83 - 4.76 (m, 1H), 4.01 - 3.91 (m, 4H)	3299, 1658, 1164, 745, 543

[2360]

P1971		668.87 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.77 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 8.59 (t, <i>J</i> = 6.3 Hz, 1H), 7.99 (s, 1H), 7.93-7.85 (m, 4H), 7.60 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.10 (dd, <i>J</i> = 15.9, 9.3 Hz, 1H), 6.89 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 4.85-4.79 (m, 1H), 3.98- 3.90 (m, 4H)	3351, 1705, 1165, 551
P1972		614.84 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.57 (t, <i>J</i> = 6.4 Hz, 1H), 8.47 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 7.88-7.80 (m, 3H), 7.45 (s, 1H), 7.43-7.37 (m, 2H), 6.86 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.8 Hz, 1H), 6.74 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.83-4.74 (m, 1H), 3.98-3.88 (m, 4H), 2.37 (s, 3H)	3311, 1650, 1163, 543
P2009		692.88 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.62 (t, <i>J</i> = 5.7 Hz, 1H), 8.50 (d, <i>J</i> = 8.7 Hz, 1H), 7.93 - 7.92 (m, 1H), 7.89 - 7.88 (m, 1H), 7.84 (s, 2H), 7.62-7.59 (m, 1H), 7.42 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.01 (dd, <i>J</i> = 15.9, 9.2 Hz, 1H), 6.77 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.82 - 4.76 (m, 1H), 4.65 -4.58 (m, 1H), 4.00 - 3.92 (m, 1H), 3.87 - 3.80 (m, 1H), 1.27 (d, <i>J</i> = 6.9 Hz, 3H)	3402, 1659, 1165, 560

[2361]

P2010		646.84 ([M-H] ⁻)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.63 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 8.50 (d, <i>J</i> = 8.7 Hz, 1H), 7.89 - 7.88 (m, 1H), 7.84 (s, 2H), 7.78 (s, 1H), 7.59 - 7.56 (m, 1H), 7.46 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 7.00 (dd, <i>J</i> = 15.6, 9.0 Hz, 1H), 6.78 (d, <i>J</i> = 15.3 Hz, 1H), 4.79 - 4.76 (m, 1H), 4.63 - 4.60 (m, 1H), 3.95 - 3.86 (m, 2H), 1.27 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 3H)	3406, 1658, 1165, 746, 583
P2011		682.93 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.73 (t, <i>J</i> = 5.6 Hz, 1H), 8.50 (d, <i>J</i> = 8.8 Hz, 1H), 7.98 (s, 1H), 7.90 - 7.89 (m, 2H), 7.85 (s, 2H), 7.57 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.09 (dd, <i>J</i> = 15.6, 9.2 Hz, 1H), 6.88 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.84 - 4.79 (m, 1H), 4.65 - 4.59 (m, 1H), 4.03 - 3.95 (m, 1H), 3.87 - 3.81 (m, 1H), 1.25 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 3H)	3417, 1666, 1115, 558
P2012		628.89 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.51 (d, <i>J</i> = 8.7 Hz, 1H), 8.41 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 7.88 (s, 1H), 7.82 (s, 1H), 7.45-7.34 (m, 3H), 6.87 (dd, <i>J</i> = 15.9, 8.7 Hz, 1H), 6.74 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.82-4.75 (m, 1H), 4.65-4.57 (m, 1H), 3.98-3.78 (m, 2H), 2.36 (s, 3H), 1.26 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 3H)	3406, 1643, 1163, 583

[2362]

P2036		674.7 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.61 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 8.26 (t, <i>J</i> = 5.7 Hz, 1H), 7.92 - 7.88 (m, 2H), 7.84 (s, 2H), 7.61 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 7.42 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 7.00 (dd, <i>J</i> = 15.9, 9.3 Hz, 1H), 6.77 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 6.20 - 5.80 (m, 1H), 4.83 - 4.74 (m, 1H), 4.51 - 4.42 (m, 1H), 3.61 - 3.31 (m, 2H), 1.31 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 3H)	3296, 1651, 1113, 534
P2038		662.7 ([M-H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.69 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 8.30 (bs, 1H), 7.98 (s, 1H), 7.89 - 7.85 (m, 4H), 7.57 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.42 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 7.09 (dd, <i>J</i> = 15.9, 9.6 Hz, 1H), 6.88 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 6.18 - 5.81 (m, 1H), 4.84 - 4.78 (m, 1H), 4.50 - 4.45 (m, 1H), 3.50 - 3.45 (m, 2H), 1.29 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 3H)	3292, 1650, 1115, 747, 681
P2041		656.6 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.56 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 8.10 (t, <i>J</i> = 5.2 Hz, 1H), 7.92 - 7.88 (m, 2H), 7.84 (s, 2H), 7.60 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.42 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 6.99 (dd, <i>J</i> = 16.0, 9.6 Hz, 1H), 6.76 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 4.81 - 4.74 (m, 1H), 4.50 - 4.36 (m, 3H), 3.56 - 3.36 (m, 2H), 1.29 (d, <i>J</i> = 6.8 Hz, 3H)	3305, 1645, 1167, 559

[2363]

P2043		646.9 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.64 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 8.15 (t, <i>J</i> = 5.7 Hz, 1H), 7.97 (s, 1H) 7.90 - 7.85 (m, 4H), 7.57 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.09 (dd, <i>J</i> = 15.9, 9.3 Hz, 1H), 6.88 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.84 - 4.78 (m, 1H), 4.51 - 4.42 (m, 2H), 4.37 - 4.33 (m, 1H), 3.45 - 3.42 (m, 2H), 1.28 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 3H)	3291, 1651, 1115, 588
P2056	91-94	706.8 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.57 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 8.09 (t, <i>J</i> = 5.2 Hz, 1H), 7.92 - 7.88 (m, 2H), 7.84 (s, 2H), 7.60 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 7.43 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 6.99 (dd, <i>J</i> = 15.6, 9.1 Hz, 1H), 6.76 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.81 - 4.77 (m, 1H), 4.40 - 4.36 (m, 1H), 3.40 - 3.25 (m, 2H) 2.44 - 2.32 (m, 2H), 1.28 (d, <i>J</i> = 6.8 Hz, 3H)	
P2058		696.8 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.66 (s, 1H), 8.14 (s, 2H), 7.97 (s, 1H), 7.89 - 7.85 (m, 3H) 7.57 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz), 7.06 (dd, <i>J</i> = 16.2, 9.0 Hz, 1H), 6.88 (d, <i>J</i> = 16.2 Hz, 1H), 4.82 - 4.81 (m, 1H), 4.41 - 4.37 (m, 1H) 3.38 - 2.99 (m, 2H), 2.44 - 2.36 (m, 2H) 1.27 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 3H)	3309, 1650, 1141

[2364]

[2365]

^a ¹H NMR 스펙트럼 데이터는 언급된 경우를 제외하고는 CDCl₃ 중에서 400 MHz 기기를 이용하여 획득하였다.
HRMS 데이터는 관찰치 (이론치)로 나타냈다.

[2366]

표 2C: 표 1C의 화합물에 대한 분석 데이터.

화합물 번호	mp (°C)	ESIMS	¹ H NMR (δ) ^a	IR (cm ⁻¹); ¹⁹ F NMR (δ)
FA1		562.89 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, DMSO-d ₆) δ 8.65 (t, <i>J</i> = 5.2 Hz, 1H), 8.28 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 7.91 (s, 2H), 7.78 (s, 1H), 7.58 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.50 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.01 (dd, <i>J</i> = 15.6, 9.2 Hz, 1H), 6.78 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.86 - 4.79 (m, 1H), 3.90 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 2H), 3.59 - 3.48 (m, 3H)	3418, 1658, 1114, 749
FA2		542.93 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, DMSO-d ₆) δ 8.45 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 8.29 (t, <i>J</i> = 4.5 Hz, 1H), 7.89 (s, 2H), 7.45 - 7.34 (m, 3H), 6.87 (dd, <i>J</i> = 15.7, 6.9 Hz, 1H), 6.75 (d, <i>J</i> = 15.8 Hz, 1H), 4.85 - 4.80 (m, 1H), 3.87 (d, <i>J</i> = 4.8 Hz, 2H), 3.57 - 3.47 (m, 3H), 2.42 (s, 3H)	3430, 1646, 1113, 749
FA3		606.78 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, DMSO-d ₆) δ 8.65 (t, <i>J</i> = 5.6 Hz, 1H), 8.27 (t, <i>J</i> = 5.6 Hz, 1H), 7.93 - 7.91 (m, 2H), 7.62 - 7.58 (m, 2H), 7.46 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.00 (dd, <i>J</i> = 15.2, 9.2 Hz, 1H), 6.77 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.85 - 4.81 (m, 1H), 3.89 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 3.59 - 3.48 (m, 2H), 3.17 - 3.08 (m, 2H)	3420, 1654, 1114, 749, 558

[2367]

FA4		599.00 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, CDCl ₃) δ 9.81 (s, 1H), 8.06 (d, <i>J</i> = 7.1 Hz, 1H), 7.70 (d, <i>J</i> = 5.5 Hz, 1H), 7.44 (s, 1H), 7.37 (t, <i>J</i> = 2.7 Hz, 2H), 7.20 (s, 1H), 6.82 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 6.50 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.5 Hz, 1H), 4.14 (m, 3H), 3.89 (m, 2H)	
FA5		613.10 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, CDCl ₃) δ 7.45 (s, 1H), 7.41 (s, 2H), 7.29 (s, 1H), 7.28 (s, 1H), 6.84 (m, 2H), 6.43 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.3 Hz, 1H), 4.25 (d, <i>J</i> = 5.4 Hz, 2H), 4.10 (m, 1H), 3.97 (qd, <i>J</i> = 9.0, 6.4 Hz, 2H), 3.87 (s, 3H)	
FA6		545.92 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, DMSO-d ₆) δ 8.56 (t, <i>J</i> = 6.4 Hz, 1H), 8.51 (t, <i>J</i> = 5.6 Hz, 1H), 7.82 (d, <i>J</i> = 6.4 Hz, 2H), 7.56 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 6.81 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 6.75 (s, 1H), 6.72 (dd, <i>J</i> = 15.6, 6.8 Hz, 1H), 6.62 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 6.51 (bs, 2H), 4.82 - 4.78 (m, 1H), 3.96 - 3.85 (m, 4H)	3369, 1694, 1164, 713
FA7		638.78 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, CDCl ₃) δ 7.62-7.56 (m, 2H), 7.46-7.37 (m, 2H), 6.77-6.76 (m, 1H), 6.56 (d, <i>J</i> = 14.1 Hz, 1H), 6.43 (dd, <i>J</i> = 15.9, 7.8 Hz, 1H), 4.14-4.07 (m, 3H), 3.61-3.54 (m, 2H), 2.42-2.34 (m, 2H)	3284, 1667, 1166, 744, 591

[2368]

FA8		588.87 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO-d ₆) δ 8.68 (t, <i>J</i> = 5.7 Hz, 1H), 8.56 (t, <i>J</i> = 6.6 Hz, 1H), 7.91 (s, 1H), 7.61-7.58 (m, 1H), 7.45-7.39 (m, 3H), 6.95 (dd, <i>J</i> = 15.9, 9.3 Hz, 1H), 6.75 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 4.76- 4.64 (m, 1H), 4.06-3.92 (m, 4H), 3.90 (s, 3H)	3297, 1658, 1165
FA9		624.92 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO-d ₆) δ 9.81 (bs, 1H), 8.69 (s, 1H), 7.90 (s, 2H), 7.78 (s, 1H), 7.59 - 7.58 (m, 2H), 7.02 (dd, <i>J</i> = 15.8, 9.3 Hz, 1H), 6.78 (d, <i>J</i> = 15.8 Hz, 1H), 4.86 - 4.79 (m, 1H), 4.57 - 4.52 (m, 2H), 1.60 (s, 6H)	3430, 1651, 1166, 750
FA10		640.9 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO-d ₆) δ 10.41 (s, 1H), 9.68 (bs, 1H), 7.90 (s, 2H), 7.76 - 7.67 (m, 1H), 7.53 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.42 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 6.97 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.7 Hz, 1H), 6.77 (d, <i>J</i> = 15.6, 1H), 4.86 (t, <i>J</i> = 9.3 Hz, 1H), 4.55 - 4.47 (m, 2H), 1.75 (s, 6H)	3434, 1260, 750
FA11		668.8 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO-d ₆) δ 9.80 (bs, 1H), 8.69 (s, 1H), 7.92 - 7.90 (m, 3H), 7.60 - 7.55 (m, 2H), 7.01 (dd, <i>J</i> = 15.5, 9.1 Hz, 1H), 6.77 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.84 - 4.30 (m, 1H), 4.57 - 4.52 (m, 2H), 1.60 (s, 6H)	3425, 1651, 1261, 750

[2369]

FA12		660.8 ([M+2H] ⁺)	(300 MHz, DMSO-d ₆) δ 9.87 (bs, 1H), 8.76 (bs, 1H), 7.98 (s, 1H), 7.95 - 7.91 (m, 3H), 7.83 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.09 (dd, <i>J</i> = 15.9, 9.3 Hz, 1H), 6.89 (d, <i>J</i> = 15.9, 1H), 4.89 (t, <i>J</i> = 9.6 Hz, 1H), 4.57 - 4.51 (m, 2H), 1.58 (s, 6H)	3430, 1651, 1261, 750
FA13		606.8 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO-d ₆) δ 10.36 (s, 1H), 8.67 (bs, 1H), 8.56 (bs, 1H), 7.92 (s, 1H), 7.61 - 7.58 (m, 3H), 7.44 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 6.96 (dd, <i>J</i> = 15.4, 8.8 Hz, 1H), 6.74 (d, <i>J</i> = 15.7 Hz, 1H), 4.61 - 4.70 (m, 1H), 4.04 - 3.90 (m, 4H)	3418, 1651, 1164, 749
FA14		611.9 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, CDCl ₃) δ 7.69 (s, 1H), 7.62 (d, <i>J</i> = 1.6 Hz, 1H), 7.53 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.39 (m, 3H), 6.54 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 6.40 (dd, <i>J</i> = 15.9, 7.8 Hz, 1H), 6.28 (s, 1H), 4.21 (d, <i>J</i> = 5.7 Hz, 2H), 4.12 (m, 1H), 1.69 (s, 6H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ - 68.59
FA15		643.19 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, CDCl ₃) δ 7.60 (d, <i>J</i> = 1.6 Hz, 1H), 7.51 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.40 (s, 2H), 7.36 (dd, <i>J</i> = 8.1, 1.6 Hz, 1H), 6.66 (d, <i>J</i> = 10.0 Hz, 2H), 6.53 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 6.38 (dd, <i>J</i> = 15.9, 7.8 Hz, 1H), 4.11 (m, 1H), 3.12 (d, <i>J</i> = 6.2 Hz, 2H), 1.72 (s, 6H), 0.93 (s, 9H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ - 68.62

[2370]

FA16		687.0 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO-d ₆) δ 8.61 - 8.53 (m, 2H), 8.11 (s, 1H), 7.91 (s, 2H), 7.62 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.36 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 6.98 (dd, <i>J</i> = 15.9, 9.3 Hz, 1H), 6.74 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 4.85 - 4.82 (m, 1H), 4.50 - 4.45 (m, 1H), 4.00 - 3.88 (m, 2H), 1.36 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 3H)	3433, 1640, 1163, 749
FA17		587.1 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO-d ₆) δ 8.60 - 8.53 (m, 2H), 7.91 - 7.85 (m, 3H), 7.54 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.40 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.02 (dd, <i>J</i> = 17.4, 11.1 Hz, 1H), 6.92 (dd, <i>J</i> = 15.9, 9.0 Hz, 1H), 6.81 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 5.95 (d, <i>J</i> = 17.1 Hz, 1H), 5.33 (d, <i>J</i> = 11.7 Hz, 1H), 4.87 - 4.80 (m, 1H), 4.47 - 4.43 (m, 1H), 4.01 - 3.87 (m, 2H), 1.31 (d, <i>J</i> = 6.9 Hz, 3H)	3419, 1644, 1162, 748
FA18		573.2 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO-d ₆) δ 8.62 - 8.56 (m, 2H), 7.91 - 7.86 (m, 3H), 7.56 (d, <i>J</i> = 9.3 Hz, 1H), 7.42 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.11 (dd, <i>J</i> = 17.4, 11.1 Hz, 1H), 6.98 (dd, <i>J</i> = 15.9, 9.3 Hz, 1H), 6.82 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 5.96 (d, <i>J</i> = 16.8 Hz, 1H), 5.34 (d, <i>J</i> = 12.0 Hz, 1H), 4.87 - 4.81 (m, 1H), 4.01 - 3.89 (m, 4H)	3422, 1649, 1164, 809

[2371]

FA19		667.0 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO-d ₆) δ 8.64 - 8.58 (m, 2H), 7.92 - 7.89 (m, 3H), 7.60 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.37 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 7.00 (dd, <i>J</i> = 15.3, 8.7 Hz, 1H), 6.77 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.86 - 4.79 (m, 1H), 4.49 - 4.42 (m, 1H), 4.07 - 3.81 (m, 2H), 1.65 - 1.59 (m, 2H), 1.40 - 1.30 (m, 2H), 0.89 (t, <i>J</i> = 6.9 Hz, 3H)	3288, 1645, 1164, 743, 563
FA20		609.1 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, DMSO-d ₆) δ 8.74 (d <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 8.59 (t, <i>J</i> = 6.4 Hz, 1H), 7.95 (s, 1H), 7.89 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 7.72 (s, 1H), 7.55 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 2H), 7.02 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.8 Hz, 1H), 6.87 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.76 - 4.72 (m, 1H), 4.51 - 4.47 (m, 1H), 3.99 - 3.88 (m, 2H), 2.42 (s, 3H), 1.29 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 3H)	3422, 2926, 1651, 1165, 783
FA21		673.0 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO-d ₆) δ 8.74 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 8.59 (t, <i>J</i> = 6.3 Hz, 1H), 7.98 (s, 1H), 7.91 - 7.85 (m, 3H), 7.56 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.09 (dd, <i>J</i> = 15.9, 9.3 Hz, 1H), 6.88 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.88 - 4.81 (m, 1H), 4.52 - 4.57 (m, 1H), 4.04 - 3.85 (m, 2H), 1.29 (t, <i>J</i> = 6.9 Hz, 3H)	3429, 1650, 1165, 804

[2372]

FA22		681.0 ([M-H] ⁺)	(300 MHz, DMSO-d ₆) δ 8.65 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 8.55 (t, <i>J</i> = 5.7 Hz, 1H), 7.91 - 7.85 (m, 2H), 7.48 - 7.39 (m, 2H), 7.31 - 7.26 (m, 1H), 7.00 (dd, <i>J</i> = 15.9, 9.3 Hz, 1H), 6.77 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.86 - 4.82 (m, 1H), 4.50 - 4.46 (m, 1H), 4.00 - 3.88 (m, 2H), 1.31 (t, <i>J</i> = 7.2 Hz, 3H)	3298, 1651, 1164, 689, 536
FA23		651.2 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, CDCl ₃) δ 7.61 (d, <i>J</i> = 1.6 Hz, 1H), 7.51 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.40 (s, 2H), 7.37 (dd, <i>J</i> = 8.1, 1.6 Hz, 1H), 6.85 (t, <i>J</i> = 6.2 Hz, 1H), 6.53 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 6.42 (s, 1H), 6.38 (dd, <i>J</i> = 15.9, 7.8 Hz, 1H), 4.11 (m, 1H), 3.70 (td, <i>J</i> = 13.3, 6.3 Hz, 2H), 1.67 (m, 9H)	¹⁹F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ - 68.61, -96.22
FA24		672.9 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, DMSO-d ₆) δ 8.49 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 8.42 (t, <i>J</i> = 6.4 Hz, 1H), 7.98 (s, 1H), 7.76 (s, 2H), 7.49 - 7.47 (m, 1H), 7.24 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 6.82 (dd, <i>J</i> = 15.6, 9.2 Hz, 1H), 6.59 (d, <i>J</i> = 16.4 Hz, 1H), 4.70 - 4.65 (m, 1H), 3.89 - 3.75 (m, 4H)	3410, 1653, 1164, 812

[2373]

FA25		603.0 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, DMSO-d ₆) δ 8.61 (t, <i>J</i> = 6.4 Hz, 1H), 8.37 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.89 (s, 2H), 7.45 (s, 1H), 7.40 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.33(d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 6.86 (dd, <i>J</i> = 16.0, 8.8 Hz, 1H), 6.75 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.85 - 4.80 (m, 1H), 4.47 - 4.41(m, 1H), 4.02 - 3.96 (m, 1H), 3.90 - 3.83 (m, 1H), 2.32 (s, 3H), 1.67 - 1.61 (m, 2H), 1.42 - 1.28 (m, 2H), 0.89 (t, <i>J</i> = 7.6 Hz, 3H)	3288, 1676, 1164, 809
FA26	108-111	726.9 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO-d ₆) δ 8.65 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 8.55 (t, <i>J</i> = 6.3 Hz, 1H), 8.04 (s, 1H), 7.92 (s, 1H), 7.84 - 7.76 (m, 1H), 7.61 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 7.42 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 7.01 (dd, <i>J</i> = 15.6, 9.0 Hz, 1H), 6.77 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 4.84 - 4.78 (m, 1H), 4.51 - 4.46 (m, 1H), 4.00 - 3.88 (m, 2H), 1.31 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 3H)	
FA27	103-107	717.1 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO-d ₆) δ 8.74 (d, <i>J</i> = 6.9 Hz, 1H), 8.59 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 8.06 (s, 1H), 7.91-7.79 (m, 3H), 7.56 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.09 (dd, <i>J</i> = 15.9, 8.6 Hz, 1H), 6.88 (d, <i>J</i> = 15.3 Hz, 1H), 4.84 - 4.81 (m, 1H), 4.52 - 4.47 (m, 1H), 3.99 - 3.88 (m, 2H), 1.29 (d, <i>J</i> = 6.9 Hz, 3H)	

[2374]

FA28		588.9 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO-d ₆) δ 8.59 (t, <i>J</i> = 6.6 Hz, 1H), 8.51 (d, <i>J</i> = 6.9 Hz, 1H), 7.88 (s, 2H), 7.22 (s, 2H), 6.75 - 6.63 (m, 2H), 4.83 - 4.77 (m, 1H), 4.50 - 4.49 (m, 1H), 4.00 - 3.87 (m, 2H), 2.21 (s, 6H), 1.33 - 1.22 (m, 3H)	3361, 2960, 1690, 1166, 819
FA29		600.8 ([M+H] ⁺)	(400 MHz, DMSO-d ₆) δ 8.63 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 8.55 (t, <i>J</i> = 6.4 Hz, 1H), 7.86 (s, 2H), 7.77 (d, <i>J</i> = 2.0 Hz, 1H), 7.66 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.54 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 7.47 (dd, <i>J</i> = 10.0, 8.0 Hz, 1H), 7.39 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 6.94 (dd, <i>J</i> = 15.6, 9.3 Hz, 1H), 6.63 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.48 - 4.43 (m, 1H), 4.05 - 3.92 (m, 2H), 1.64 (t, <i>J</i> = 19.2 Hz, 3H), 1.30 (d, <i>J</i> = 6.8 Hz, 3H)	3288, 1687, 1164, 748, 568
FA30		655.0 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO-d ₆) δ 8.64 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 8.58 (t, <i>J</i> = 6.3 Hz, 1H), 7.95 - 7.91 (m, 2H), 7.66 (s, 2H), 7.60 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.42 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 6.99 (dd, <i>J</i> = 15.9, 9.3 Hz, 1H), 6.78 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 4.88 - 4.82 (m, 1H), 4.50 - 4.46 (m, 1H), 4.00 - 3.85 (m, 2H), 1.31 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 3H)	3418, 1717, 1165, 748, 525

[2375]

FA31		598.9 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO-d ₆) δ 8.65 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 8.55 (t, <i>J</i> = 5.7 Hz, 1H), 7.89 (s, 1H), 7.60 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.46 (s, 1H), 7.41 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 2H), 7.31 (s, 1H), 6.96 (dd, <i>J</i> = 15.9, 8.7 Hz, 1H), 6.76 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 4.71 (t, <i>J</i> = 9.3 Hz, 1H), 4.50 (t, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 4.00 - 3.88 (m, 2H), 2.67 - 2.60 (m, 2H), 1.31 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 3H), 1.21 (t, <i>J</i> = 7.5 Hz, 3H)	3406, 1645, 1163, 749, 597
FA32		666.9 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO-d ₆) δ 8.68 (s, 1H), 8.54 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.96 - 7.91 (m, 3H), 7.59 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.33 (d, <i>J</i> = 6.6 Hz, 1H), 6.98 (dd, <i>J</i> = 15.6, 8.0 Hz, 1H), 6.77 (d, <i>J</i> = 15.9, 1H), 4.88 - 4.72 (m, 1H), 4.36 - 4.31 (m, 1H), 4.07 - 3.81 (m, 2H), 2.06 - 1.99 (m, 1H), 0.95 - 0.85 (m, 6H)	3288, 1645, 1165, 750
FA33		656.9 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO-d ₆) δ 8.71 (d, <i>J</i> = 6.3 Hz, 1H), 8.65 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.98 (s, 1H), 7.92-7.87 (m, 3H), 7.45 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.03 (dd, <i>J</i> = 16 Hz, 8.0 Hz, 1H), 6.89 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 4.88 - 4.82 (m, 1H), 4.35 - 4.10 (m, 1H), 4.07 - 3.81 (m, 2H), 2.06 - 1.99 (m, 1H), 0.95 - 0.85 (m, 6H)	3294, 1650, 1165, 810

[2376]

FA34		608.85 ([M+H] ⁺)	(300 MHz, DMSO-d ₆) δ 9.01 (t, <i>J</i> = 6.0, 1H), 8.37 (t, <i>J</i> = 6.4 Hz, 1H), 8.08 (s, 1H), 8.01 - 7.96 (m, 1H), 7.88 - 7.86 (m, 2H), 7.64 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 7.05 (dd, <i>J</i> = 16.4, 8.8 Hz, 1H), 6.91 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 4.87 - 4.80 (m, 1H), 3.98 - 3.91 (m, 4H), 3.38 (s, 3H)	768, 721, 416, 337, 164

[2377]

[2378]

^a ¹H NMR 스펙트럼 데이터는 언급된 경우를 제외하고는 CDCl₃ 중에서 400 MHz 기기를 이용하여 획득하였다.
HRMS 데이터는 관찰치 (이론치)로 나타냈다.

[2379]

표 3: 검증 결과 부분 1

화합물 번호	BAW 등급	CEW 등급	GPA 등급
AC1	D	D	B
AC2	C	C	C
AC3	D	D	B
AC4	D	A	B
AC5	D	D	B
AC6	D	A	B
AC7	A	A	B
AC8	D	B	B
AC9	A	A	B
AC10	A	A	B
AC11	A	A	D
AC12	A	A	D
AC13	A	A	B
AC14	A	B	D

[2380]

AC15	A	A	B
AC16	A	A	C
AC17	A	A	B
AC18	A	A	B
AC19	D	D	B
AC20	A	A	C
AC21	D	D	C
AC22	A	A	D
AC23	A	A	B
AC24	A	A	D
AC25	A	A	D
AC26	A	A	B
AC27	A	A	B
AC28	A	A	B
AC29	A	A	B
AC30	A	A	B
AC31	A	A	B
AC32	A	A	B
AC33	A	A	B
AC34	A	A	B
AC35	A	A	C
AC36	A	A	B
AC37	A	A	B
AC38	A	A	C
AC39	A	A	C
AC40	A	A	D

[2381]

AC41	A	D	D
AC42	A	D	D
AC43	A	A	B
AC44	A	A	B
AC45	A	A	D
AC46	A	A	D
AC47	D	D	B
AC48	A	A	B
AC49	A	A	B
AC50	A	D	B
AC51	A	A	B
AC52	A	A	B
AC53	A	A	B
AC54	A	A	B
AC57	A	A	B
AC58	A	A	B
AC59	A	A	B
AC60	A	A	B
AC61	A	A	B
AC62	A	A	D
AC63	A	A	B
AC64	A	A	B
AC65	A	A	B
AC66	A	A	B
AC67	A	A	B
AC68	A	A	D

[2382]

AC69	A	A	A
AC70	D	D	B
AC71	A	A	B
AC72	A	A	B
AC75	A	A	B
AC76	A	A	D
AC77	A	A	B
AC78	A	A	A
AC79	A	A	A
AC80	A	A	B
AC81	A	D	D
AC82	A	A	B
AC83	A	A	B
AC84	A	A	D
AC85	A	A	B
AC86	A	A	D
AC87	A	A	B
AC89	A	A	B
AC90	A	A	C
AC91	A	A	C
AC92	A	A	C
AC93	A	D	C
AC94	D	B	B
AC95	A	A	C
AC96	D	D	C
AC97	D	D	C

[2383]

AC98	A	A	C
AC99	A	A	C
AC100	C	C	C
AC101	D	D	C
AC102	D	A	C
AC103	A	A	D
AC104	A	A	B
AC105	A	A	D
AC106	A	A	B
AC107	B	A	D
AC108	B	D	D
AC109	D	D	C
AC110	A	A	C
AC111	A	A	C
AC112	A	A	C
AC113	B	A	D
AC114	A	B	D
AC115	A	A	D
AC116	C	C	C
AC117	A	D	B
AC118	A	D	D
BC1	A	A	D
BC2	A	A	D
BC3	A	A	D
BC4	A	A	B
BC5	A	A	B

[2384]

BC6	A	A	D
BC7	A	A	D
BC8	A	A	B
BC9	A	A	D
BC10	A	A	B
BC11	C	C	C
BC12	C	C	C
BC13	A	A	D
BC14	A	D	D
CC1	D	D	D
CC2	A	A	B
CC3	A	A	D
CC4	A	B	B
CC5	A	A	B
CC6	A	A	B
CC7	A	A	B
CC8	A	A	D
CC9	A	A	B
CC10	A	A	B
CC11	A	A	B
CC12	D	D	B
CC13	A	A	B
CC14	A	D	D
CC15	A	A	B
CC16	A	A	B
CC17	A	A	B

[2385]

CC18	A	A	B
CC19	A	A	B
CC20	A	A	D
CC21	A	A	D
CC22	A	A	B
CC23	A	A	B
CC24	A	A	D
CC25	A	A	B
CC26	A	D	B
CC27	A	A	D
CC28	A	A	D
CC29	A	A	B
CC30	A	A	D
CC31	B	D	C
CC32	A	A	B
CC33	A	A	B
CC34	A	A	B
CC35	D	D	D
CC36	A	A	D
CC37	A	A	D
CC38	A	A	D
CC39	D	D	B
CC40	D	A	D
CC41	D	D	B
CC42	D	D	D
CC43	A	B	B

[2386]

CC44	A	A	B
CC45	A	A	D
CC46	D	A	C
CC47	D	D	C
CC48	D	D	C
CC49	D	D	D
CC50	A	A	D
CC51	A	A	D
CC52	A	D	D
CC53	D	D	B
CC54	A	A	C
DC1	A	A	D
DC2	D	D	C
DC3	B	D	C
DC4	A	D	C
DC5	D	D	C
DC6	D	D	C
DC7	A	D	C
DC8	A	D	C
DC9	D	D	C
DC10	D	D	C
DC11	A	D	C
DC12	A	A	B
DC13	A	A	C
DC14	D	D	C
DC15	D	D	C

[2387]

DC16	A	A	C
DC17	A	A	C
DC18	A	A	C
DC19	A	A	C
DC20	A	D	C
DC21	D	D	C
DC22	D	D	C
DC23	D	A	C
DC24	D	D	C
DC25	D	D	C
DC26	D	D	C
DC27	D	D	C
DC28	A	A	B
DC29	A	A	C
DC30	A	A	C
DC31	A	A	B
DC32	D	D	C
DC33	A	A	C
DC34	A	A	B
DC35	A	A	B
DC36	D	D	C
DC37	A	A	C
DC38	A	A	C
DC39	A	A	C
DC40	A	A	C
DC41	A	A	C

[2388]

DC42	A	A	C
DC43	A	A	C
DC44	A	A	C
DC45	A	A	C
DC46	A	A	C
DC47	A	A	C
DC48	A	A	C
DC49	A	A	C
DC50	A	A	C
DC51	A	A	C
DC52	D	D	C
DC53	D	A	C
DC54	D	D	C
DC55	D	D	C
DC56	D	D	C
DC57	A	A	C
DC58	D	D	C
DC59	D	D	C
DC60	A	A	C
DC61	D	D	C
DC62	A	A	C
DC63	A	A	C
DC64	D	D	C
DC65	D	A	C
DC66	A	A	C
DC67	A	A	C

[2389]

DC68	A	A	C
DC69	D	D	C
DC70	A	A	C

[2390]

[2391]

표 4: F 화합물에 대한 검정 결과

화합물 번호	BAW 등급	CL 등급	GPA 등급
F1	A	A	B
F2	A	A	C
F3	A	A	C
F4	A	A	C
F5	A	A	C
F6	C	C	C
F7	A	A	C
F8	A	A	C
F8A	A	A	C
F9	A	A	C
F10	A	A	C
F11	A	A	C
F12	A	A	C
F13	A	A	C
F14	A	A	C
F15	A	A	C
F15A	A	A	C
F16	A	A	C
F16A	A	A	C
F17	A	A	C

[2392]

F18	A	A	C
F19	A	A	C
F20	A	A	C
F20A	A	A	A
F20B	A	A	C
F20C	A	A	C
F21	A	A	C
F22	A	A	C
F23	D	A	C
F23A	A	A	C
F24	A	A	C
F25	A	A	C
F26	A	A	C
F27	A	A	C
F28	A	A	C
F29	A	A	C
F30	A	A	C
F31	A	A	C

[2393]

[2394]

표 5: 후속적으로 예시된 예측 화합물에 대한 검정 결과

화합물 번호	BAW 등급	CL 등급	GPA 등급
P1	A	A	C
P2	D	A	C
P12	A	A	C
P14	B	A	C
P15	A	A	C

[2395]

P82	A	A	C
P84	A	A	C
P156	A	A	C
P226	A	A	C
P228	A	A	C
P298	D	A	B
P300	A	A	C
P442	A	A	C
P444	A	A	C
P514	A	A	C
P516	A	A	C
P568	A	A	C
P586	A	A	C
P588	A	A	C
P660	A	A	C
P730	A	A	C
P732	A	A	C
P802	A	A	C
P804	A	A	C
P1090	A	A	C
P1092	A	A	C
P1197	A	A	C
P1269	A	A	C
P1340	A	A	C
P1411	A	A	B
P1483	A	A	C

[2396]

P1556	A	A	C
P1558	A	A	C
P1559	A	A	C
P1560	A	A	C
P1564	A	A	C
P1566	A	A	A
P1589	A	A	C
P1591	A	A	C
P1592	A	A	C
P1599	A	A	C
P1601	A	A	B
P1603	A	A	C
P1611A	A	A	C
P1613A	A	A	C
P1616	A	A	C
P1616A	A	A	C
P1618A	A	A	C
P1621	A	A	C
P1623	A	A	C
P1624	A	A	A
P1631A	A	A	B
P1633A	A	A	C
P1636	A	A	C
P1638	A	A	C
P1640	D	A	D
P1641	A	A	C

[2397]

P1691	A	A	C
P1693	A	A	C
P1696	A	A	C
P1698	A	A	C
P1776	A	A	C
P1781	A	A	C
P1806	A	A	C
P1808	A	A	C
P1862	A	A	C
P1864	A	A	C
P1866	A	A	C
P1969*	A	A	C
P1970	A	A	C
P1971	A	A	C
P1972	A	A	C
P2009	A	A	C
P2010	A	A	C
P2011	A	A	C
P2012	A	A	C
P2036	A	A	C
P2038	A	A	C
P2041	A	A	C
P2043	A	A	C
P2056	A	A	C
P2058	A	A	C

[2398]

[2399]

* 12.5 ug/cm²에서 수행함

[2400]

표 6: FA 화합물에 대한 검정 결과

화합물 번호	BAW 등급	CL 등급	GPA 등급
FA1	A	A	C
FA2	A	A	C
FA3	A	A	C
FA4	A	A	C
FA5	A	A	C
FA6	A	A	C
FA7	A	A	C
FA8	B	A	C
FA9	A	A	C
FA10	B	B	C
FA11	B	A	D
FA12	A	A	C
FA13	D	A	C
FA14	A	A	C
FA15	A	A	C
FA16	A	A	A
FA17	A	A	C
FA18	A	A	C
FA19	A	A	C
FA20	A	A	C
FA21	A	A	C
FA22	A	A	C
FA23	A	A	C

[2401]

FA24	A	A	C
FA25	A	A	C
FA26	A	A	C
FA27	A	A	C
FA28	A	A	C
FA29	A	A	C
FA30	A	A	C
FA31	A	A	C
FA32	A	A	C
FA33	A	A	C
FA34	D	A	C

[2402]