

[19] 中华人民共和国国家知识产权局

[51] Int. Cl⁷

C07C251/60

C07C251/24 C07C255/64

C07C249/02 C07C239/08



[12] 发明专利说明书

[21] ZL 专利号 96198811.8

[43] 授权公告日 2003 年 6 月 11 日

[11] 授权公告号 CN 1111155C

[22] 申请日 1996.11.26 [21] 申请号 96198811.8

[30] 优先权

[32] 1995.12.7 [33] CH [31] 3464/1995

[86] 国际申请 PCT/EP96/05215 1996.11.26

[87] 国际公布 WO97/20808 英 1997.6.12

[85] 进入国家阶段日期 1998.6.5

[71] 专利权人 拜耳公开股份有限公司

地址 德国 莱沃库森

[72] 发明人 塞勒姆·法罗科 斯蒂芬·特拉

休戈·齐格勒 勒内·泽弗鲁

[56] 参考文献

WO9521154A 1995.08.10

审查员 刘桂明

[74] 专利代理机构 北京市柳沈律师事务所

代理人 巫肖南

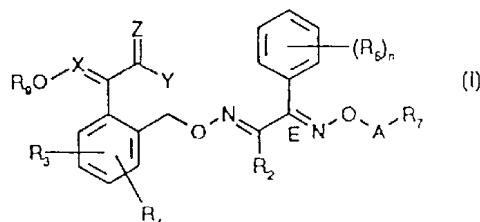
权利要求书 6 页 说明书 52 页

[54] 发明名称 农药的制备方法

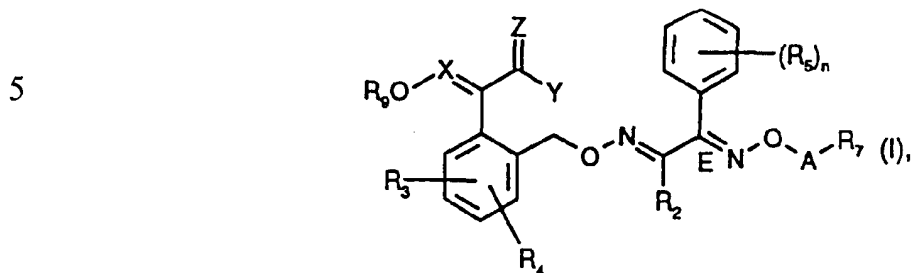
[57] 摘要

本发明涉及式(I)化合物或者如果合适为其互变异构体的制备方法,其在各种情况下均呈游离形式或盐的形式,其中A、X、Y、Z、R₂、R₃、R₄、R₅、R₇、R₉和n的定义如在权利要求1中所示,且标有E的C=N双键具有E构型,此方法包含:a1)将说明书中提到的式(II)化合物与说明书中提到的式(III)化合物反应,其中X₁是一个离去基团;或者a2)将说明书中提到的式(IV)化合物,如果合适在一种碱的存在下,与说明书中提到的式(V)化合物反应;或者b1)将说明书中提到的式(IV)化合物与式R₇-A-X₂(VII)的化合物反应,其中X₂是一个离去基团,并且或者例如根据方法a2)将如此所得的式(IV)化合物进一步反应;或者也可以b2)将其与羟胺或其盐反应,如果合适在一种碱性或酸性催化剂的存在下,并且例如根据方法a1)将如此所得的式(II)化合物进一步反应;或者c)将说明书中提到

的式(VIII)化合物与C₁-C₆烷基亚硝酸酯反应,并且例如根据方法b)将如此所得的式(VI)化合物进一步反应,本发明还涉及式(II),(IV)和(VI)化合物的E型异构体,它们的制备方法以及它们在制备式(I)化合物中的使用。



1. 一种制备式(I)化合物和如果合适为其互变异构体的方法, 在各种情况下均呈游离形式或盐的形式,



其中

10 或者 X 是 CH 或 N, Y 是 OR₁, Z 是 O,

或者 X 是 N, Y 是 NHR_8 , Z 是 O, S 或 $\text{S}(=\text{O})$;

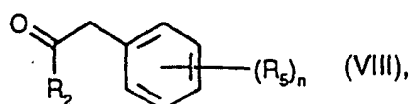
R₁ 是 C₁-C₄ 烷基;

R₂ 是 H、C₁-C₄ 烷基、卤代-C₁-C₄ 烷基, C₃-C₆ 环烷基或 C₁-C₄ 烷氧基甲基;

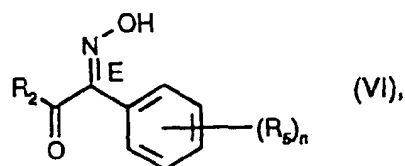
15 R_3 和 R_4 各自独立的是 H、 C_1 - C_4 烷基， C_1 - C_4 烷氧基，OH，CN， NO_2 ，一个 $(C_1$ - C_4 烷基) $_3$ -Si 基，其中的烷基可相同也可不同，卤素， $(C_1$ - C_4 烷基) $S(=O)_m$ ，(卤代- C_1 - C_4 烷基) $S(=O)_m$ ，卤代- C_1 - C_4 烷基或者卤代- C_1 - C_4 烷氧基；

R₅ 是 C₁-C₆ 烷基, 卤代-C₁-C₆ 烷基, C₁-C₆ 烷氧基, 卤代-C₁-C₆ 烷氧基, C₁-C₆ 烷基硫代, 卤代-C₁-C₆ 烷基硫代, C₁-C₆ 烷基亚磺酰基, 卤代-C₁-C₆ 烷基亚磺酰基, C₁-C₆ 烷基磺酰基, 卤代-C₁-C₆ 烷基磺酰基, C₁-C₆ 烷氧基-C₁-C₆ 烷基, 卤代-C₁-C₆ 烷氧基-C₁-C₆ 烷基, C₁-C₆ 烷基硫代-C₁-C₆ 烷基, 卤代-C₁-C₆ 烷基硫代-C₁-C₆ 烷基, C₁-C₆ 烷基亚磺酰基-C₁-C₆ 烷基, 卤代-C₁-C₆ 烷基亚磺酰基-C₁-C₆ 烷基, C₁-C₆ 烷基磺酰基-C₁-C₆ 烷基, 卤代-C₁-C₆ 烷基磺酰基-C₁-C₆ 烷基, C₁-C₆ 烷基羰基, 卤代-C₁-C₆ 烷基羰基, C₁-C₆ 烷氧基羰基, 卤代-C₁-C₆ 烷氧基羰基, C₁-C₆ 烷基氨基羰基, C₁-C₄ 烷氧基亚氨基甲基; 二(C₁-C₆ 烷基)-氨基羰基, 其中的烷基可以相同也可不同; C₁-C₆ 烷基氨基硫代羰基; 二(C₁-C₆ 烷基)-氨基硫代羰基, 其中的烷基可以相同也可不同; C₁-C₆ 烷基氨基, 二(C₁-C₆ 烷基)-氨基, 其中的烷基可以相同也可不同; 卤素, NO₂, CN, SF₅, 硫代酰胺基, 氰硫基甲基; 未取代或单至四取代的 C₁-C₄ 亚烷基二氧基, 其中取代基选自 C₁-C₄ 烷基和卤素; 或者 QR₆, 其中若 n 大于 1 时, 基团 R₅ 可相同也可不同;

- R_6 是未取代或被 1-3 个卤素原子取代的 C_2-C_6 链烯基或 C_2-C_6 炔基; $(C_1-C_4 \text{ 烷基})_3Si$, 其中的烷基可相同可不相同; CN ; 未取代的或单至五取代的 C_3-C_6 环烷基, 芳基或杂环基, 其中取代基可选自卤素, C_1-C_6 烷基, 卤代- C_1-C_6 烷基, C_1-C_6 烷氧基, 卤代- C_1-C_6 烷氧基、苯氧基, 萘氧基和 CN ;
- 5 A 或者为直接键, C_1-C_{10} 亚烷基, $-C(=O)-$, $-C(=S)-$, 或卤代- C_1-C_{10} 亚烷基, 并且
- R_7 是基团 R_{10} ,
或者是 C_1-C_{10} 亚烷基, $-C(=O)-$, $-C(=S)-$, 或卤代- C_1-C_{10} 亚烷基, 并且
- 10 R_7 是基团 OR_{10} , $N(R_{10})_2$, 其中的基团 R_{10} 可相同可不相同, 或者 $-S(=O)_q-R_{10}$;
- R_8 是 H 或 C_1-C_4 烷基;
- R_9 是甲基, 氟甲基或二氟甲基;
- R_{10} 是 H ; 未取代或卤素取代的 C_1-C_6 烷基, C_2-C_6 链烯基或 C_2-C_6 炔基; $(C_1-C_4 \text{ 烷基})_3Si$, 其中的烷基可相同也可不相同; 未取代的或卤素取代的 C_3-C_6 环烷基, 未取代的或卤素取代的 C_1-C_6 烷氧基羰基; 未取代的或取代的芳基, 其中取代基可选自卤素, 卤代- C_1-C_4 烷基和 CN ; $(C_1-C_4 \text{ 烷基})_3Si$, 其中的烷基可相同可不相同; 未取代的或卤素取代的 C_3-C_6 环烷基; 未取代的或卤素取代的 C_1-C_6 烷氧基羰基; 或未取代的或取代的芳基或杂
- 15 环基, 其中取代基选自卤素或卤代- C_1-C_4 烷基;
- 20 Q 是直接键, C_1-C_8 亚烷基, C_2-C_6 亚烯基, C_2-C_6 亚炔基, O , $O(C_1-C_6 \text{ 亚烷基})$, $(C_1-C_6 \text{ 亚烷基})O$, $S(=O)_p$, $S(=O)_p(C_1-C_6 \text{ 亚烷基})$ 或 $(C_1-C_6 \text{ 亚烷基})S(=O)_p$;
- m 是 0, 1 或 2;
- 25 n 是 0, 1, 2, 3, 4 或 5;
- p 是 0, 1 或 2; 和
- q 是 0, 1 或 2,
- 并且标有 E 的 $C=N$ 双键具有 E 构型,
- 其包括
- 30 a) 将式(VIII)化合物,



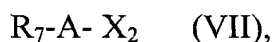
- 5 其中 R_2 , R_5 和 n 的定义如上述式(I), 与 C_1 - C_6 烷基亚硝酸盐在碱和惰性溶剂存在下, 在 0 - 80°C 反应以得到式(VI)化合物



10

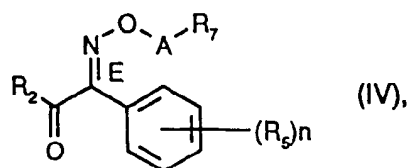
其中 R_2 , R_5 和 n 与上述式(I)中所定义的相同;

b₁)将得到的式(VI)化合物与式(VII)化合物



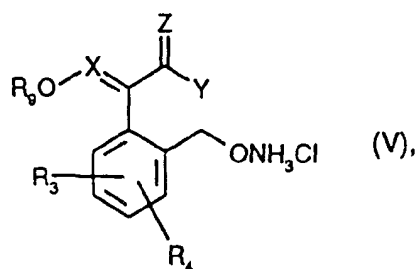
其中 R_7 和 A 如上述(I)中所定义, X_2 表示卤素, 在碱和惰性稀释液存在下,

- 15 在 10 - 80°C 反应以得到式(IV)化合物



- 20 其中 A , R_2 , R_5 , R_7 和 n 如上述(I)中所定义, 和

a₂)将得到的式(IV)化合物与式(V)化合物,

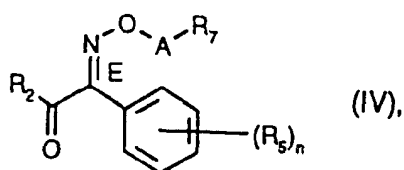


25

其中 X , Y , Z , R_3 , R_4 和 R_9 如上述(I)中所定义, 在碱和惰性稀释液存在下, 在 10 - 80°C 反应以得到上面鉴定的式(I)化合物,

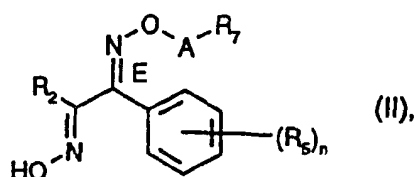
- 30 或者

b₂)将式(IV)化合物



5

其中 A, R_2 , R_5 , R_7 和 n 如上述(I)中所定义, 与羟胺或其盐在碱和惰性稀
释液存在下, 在 10-80°C 反应
以得到式(II)化合物,



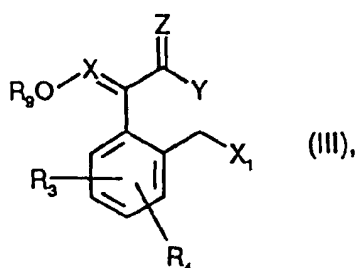
10

其中

A, R_2 , R_5 , R_7 和 n 如上述(I)中所定义,

15 并且

a₁) 将得到的式(II)化合物与式(III)化合物,



20

其中 X, Y, Z, R_3 , R_4 和 R_9 如上述(I)中所定义, X_1 表示卤素, 在碱和惰
性稀释液存在下, 在 10-80°C 反应以得到上述已鉴定的式(I)化合物。

25 2. 权利要求 1 制备式(I)化合物的方法, 其包括将式(II)化合物与式(III)
化合物反应。

3. 权利要求 2 的方法, 其中使用式(III)化合物中 X_1 是卤素。

4. 权利要求 1 制备式(I)化合物的方法, 其包括将式(IV)化合物与式(V)
化合物反应。

30 5. 权利要求 1 制备式(I)化合物的方法, 其包括将式(VI)化合物与式(VII)
化合物反应, 并且或者将由此得到的式(IV)化合物根据权利要求 4 的方法反

应, 或者将它与羟胺或其盐反应, 如果合适在碱或酸催化剂的存在下, 将由此得到的式(II)化合物根据权利要求 2 的方法进一步反应。

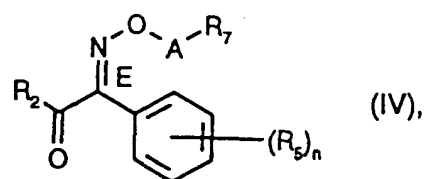
6. 权利要求 5 的方法, 其中使用式(VII)的化合物中 X_2 是卤素。

7. 权利要求 5 的方法, 其中使用式(VII)的化合物中 X_2 是氯。

5 8. 权利要求 1 制备式(I)化合物的方法, 其包括将式(VIII)化合物与 C_1 - C_6 烷基亚硝酸盐反应, 并根据权利要求 5 的方法将由此得到的式(VI)化合物进一步的反应。

9. 制备式(IV)化合物的方法,

10



其中 A, R_2 , R_5 , R_7 和 n 如上述权利要求 1 式(I)中所定义, 并且标有 E 的 $C=N$ 双键具有 E 构型,

15 其包括

a) 将如权利要求 1 定义的式(VIII)化合物, 与 C_1 - C_6 烷基亚硝酸盐反应以得到权利要求 1 定义的式(VI)化合物; 和

b) 通过如权利要求 1 所定义的式(VI)化合物与式(VII)化合物反应将如上所定义的所述的式(VI)化合物转换成式(IV)。

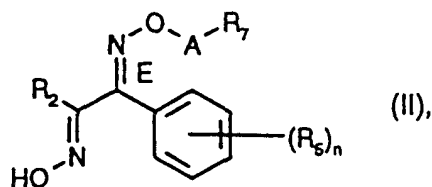
20

10. 权利要求 9 的方法, 其中使用式(VII)的化合物中 X_2 是卤素。

11. 权利要求 10 的方法, 其中使用式(VII)的化合物中 X_2 是氯。

12. 制备式(II)化合物的方法,

25



其中 A, R_2 , R_5 , R_7 和 n 如上述权利要求 1 式(I)中所定义, 并且标有 E 的 $C=N$ 双键具有 E 构型,

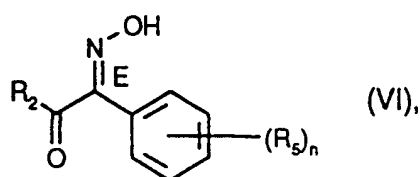
其包括

- a) 将权利要求 1 定义的式(VIII)化合物, 与 C_1 - C_6 烷基亚硝酸盐反应以得到权利要求 1 定义的式(VI)化合物; 和
- b) 如权利要求 1 所定义的, 通过式(VI)化合物与式(VII)化合物反应, 如权利要求 1 所定义的, 将所述的式(VI)化合物转换成式(IV)化合物; 和
- 5 c) 通过式(IV)与羟胺或其盐反应将所述的式(IV)化合物转换成式(II)化合物。

13. 权利要求 12 的方法, 其中反应在盐酸羟胺中进行。

14. 制备式(VI)化合物的方法,

10



- 其中 R_2 , R_5 , 和 n 如上述权利要求 1 式(I)中所定义, 并且标有 E 的 $C=N$ 双键具有 E 构型, 其包括将权利要求 1 定义的式(VIII)化合物, 与 C_1 - C_6 烷基亚硝酸盐反应。
- 15

15. 权利要求 14 的方法, 其中反应在碱存在下得以实施。

16. 权利要求 15 的方法, 其中反应在选自碱金属, 碱土金属氢氧化物, 氢化物, 氯化物, 烷醇盐, 乙酸盐, 碳酸盐, 二烷基氯化物, 烷基甲硅烷基氯化物的碱存在下得以实施。

20

17. 权利要求 16 的方法, 其中的碱是甲醇钠。

18. 权利要求 14 的方法, 其中反应是在溶剂或稀释液或它们的混合物存在下实施的。

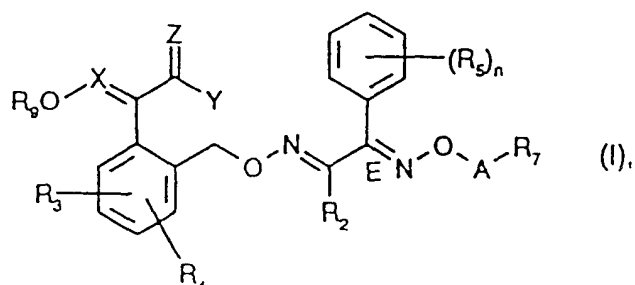
19. 权利要求 18 的方法, 其中的溶剂选自甲醇, 乙醇, 甲醇, 异丙醇, 丁醇, 乙二醇和甘油。

25

20. 权利要求 19 的方法, 其中反应是在甲醇中实施的。

农药的制备方法

5 本发明涉及式(I)化合物和(如果合适),



其互变异构体的制备方法, 其在各种情况下均呈游离形式或盐的形式, 其中或者 X 是 CH 或 N, Y 是 OR₁, Z 是 O,

或者 X 是 N, Y 是 NHR₈, 而 Z 是 O, S 或 S(=O);

15 R₁ 是 C₁ - C₄ 烷基;

R₂ 是 H, C₁ - C₄ 烷基, 卤代 - C₁ - C₄ 烷基, C₃ - C₆ 环烷基或 C₁ - C₄ 烷氧甲基;

R₃ 和 R₄ 各自独立地为 H, C₁ - C₄ 烷基, C₁ - C₄ 烷氧基, OH, CN, NO₂, (C₁ - C₄ 烷基)₃ - Si 基团(其中的烷基可以相同也可以不同), 卤素, (C₁ - C₄ 烷基)S(=O)_m, (卤代 - C₁ - C₄ 烷基)S(=O)_m, 卤代 - C₁ - C₄ 烷基或卤代 C₁ - C₄ 烷氧基;

20 - C₄ 烷基)S(=O)_m, (卤代 - C₁ - C₄ 烷基)S(=O)_m, 卤代 - C₁ - C₄ 烷基或卤代 C₁ - C₄ 烷氧基;

R₅ 是 C₁ - C₆ 烷基, 卤代 - C₁ - C₆ 烷基, C₁ - C₆ 烷氧基, 卤代 - C₁ - C₆ 烷氧基, C₁ - C₆ 烷基硫代, 卤代 - C₁ - C₆ 烷基硫代, C₁ - C₆ 烷基亚磺酰基, 卤代 - C₁ - C₆ - 烷基烷基亚磺酰基, C₁ - C₆ 烷基磺酰基, 卤代 - C₁ - C₆ 烷基磺酰基, C₁ - C₆ 烷氧基 - C₁ - C₆ 烷基, 卤代 - C₁ - C₆ 烷氧基 - C₁ - C₆ 烷基, C₁ - C₆ 烷基硫代 - C₁ - C₆ 烷基, 卤代 - C₁ - C₆ 烷基硫代 - C₁ - C₆ 烷基, C₁ - C₆ 烷基亚磺酰基 - C₁ - C₆ 烷基, 卤代 C₁ - C₆ 烷基烷基亚磺酰基 - C₁ - C₆ 烷基, C₁ - C₆ - 烷基磺酰基 - C₁ - C₆ 烷基, 卤代 - C₁ - C₆ 烷基磺酰基 - C₁ - C₆ 烷基, C₁ - C₆ 烷基羰基, 卤代 - C₁ - C₆ - 烷基羰基, C₁ - C₆ 烷氧基羰基, 卤代 - C₁ - C₆ 烷氧基羰基, C₁ - C₆ - 烷基氨基羰基, C₁ - C₄ - 烷氧基亚

氨基甲基; 二($C_1 - C_6$ 烷基)-氨基羰基, 其中的烷基可以相同, 也可不同; $C_1 - C_6$ 烷基氨基硫代羰基; 二($C_1 - C_6$ 烷基)-氨基硫代羰基, 其中的烷基可相同, 也可不同; $C_1 - C_6$ 烷基氨基, 二($C_1 - C_6$ 烷基)-氨基, 其中的烷基可相同, 也可不同; 卤素, NO_2 , CN , SF_5 , 硫代酰氨基, 5 硫代酰基; 未取代或一至四取代的 $C_1 - C_4$ 亚烷基二氧基, 其取代基选自 $C_1 - C_4$ 烷基和卤素; 或 QR_6 , 其中, 如果 n 大于 1, 则基团 R_5 可以相同, 也可不同。

R_6 是未取代或被 1 - 3 个卤素原子取代的 $C_2 - C_6$ 链烯基或 $C_2 - C_6$ 炔基; ($C_1 - C_4$ 烷基) $_3Si$, 其中的烷基可相同, 也可不同; CN ; 或未取代或一至五取代的 $C_3 - C_6$ 环烷基, 芳基或杂环基, 其中取代基选自卤素, $C_1 - C_6$ 烷基, 卤代- $C_1 - C_6$ 烷基, $C_1 - C_6$ 烷氧基, 卤代- $C_1 - C_6$ 烷氧基, 10 苯氧基, 萘氧基和 CN ;

A 或者为直接键, $C_1 - C_{10}$ 亚烷基, $-C(=O)-$, $-C(=S)-$, 或者卤代- $C_1 - C_{10}$ 亚烷基, 并且

15 R_7 是基团 R_{10} ,

或者为 $C_1 - C_{10}$ 亚烷基, $-C(=O)-$, $-C(=S)-$ 或卤代- $C_1 - C_{10}$ 亚烷基, 并且

R_7 是 OR_{10} , $N(R_{10})_2$, 其中的基团 R_{10} 可以是相同的, 也可以是不同的, 或者为 $-S(=O)_qR_{10}$;

20 R_8 是 H 或 $C_1 - C_4$ 烷基;

R_9 是甲基, 氟甲基或二氟甲基;

R_{10} 是 H; 未取代或取代的 $C_1 - C_6$ 烷基、 $C_2 - C_6$ 链烯基或 $C_2 - C_6$ 炔基, 其中取代基选自卤素; ($C_1 - C_4$ 烷基) $_3Si$, 其中的烷基可相同, 也可不同; 未取代或卤素取代的 $C_3 - C_6$ 环烷基; 未取代或卤素取代的 $C_1 - C_6$ 烷氧基羰基; 未取代或取代芳基, 其中取代基选自卤素; 卤代- $C_1 - C_4$ 烷基和 CN ; ($C_1 - C_4$ 烷基) $_3Si$, 其中烷基可以是相同的, 也可以是不同的; 未取代或卤素取代的 $C_3 - C_6$ 环烷基; 未取代或卤素取代的 $C_1 - C_6$ 烷氧基羰基; 或者未取代或取代的芳基或杂环基, 其中的取代基选自卤素或者卤代- $C_1 - C_4$ 烷基;

30 Q 是直接键, $C_1 - C_8$ 亚烷基, $C_2 - C_6$ 亚烯基, $C_2 - C_6$ 亚炔基, O, $O(C_1 - C_6$ 亚烷基), $(C_1 - C_6$ 亚烷基)O, $S(=O)_p$, $S(=O)_p(C_1 - C_6$ 亚烷基)或 $(C_1$

- C₆ 亚烷基)S(=O)_p;

m 是 0, 1 或 2;

n 是 0, 1, 2, 3, 4 或 5;

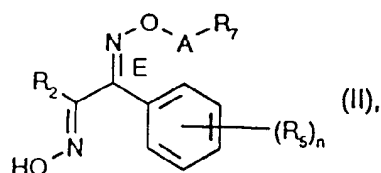
p 是 0, 1 或 2; 以及

5 q 是 0, 1 或 2,

并且标有 E 的 C = N 双键具有 E 构型,

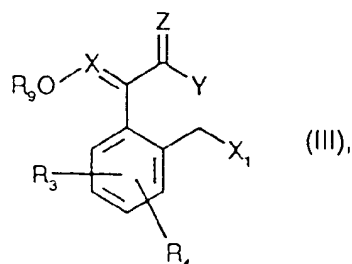
其包含 a1) 或者是将式(II)化合物

10



其中 A、R₂、R₅、R₇ 或 n 的定义如式 I, 并且标有 E 的 C = N 双键具有 E 构型, 或者是其互变异构体, 在各种情况下以游离或盐的形式, 如果合适在一种碱的存在下, 与式(III)化合物反应,

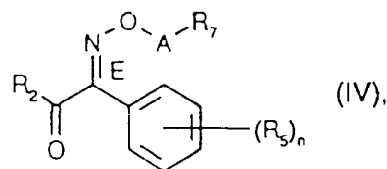
15



20 式(III)化合物为已知化合物或可用已知方法制备, 而且 X、Y、Z、R₃、R₄ 和 R₉ 的定义如式 I 中, X₁ 是离去基团, 或者其互变异构体, 在各种情况下均呈游离形式或以盐的形式, 或者

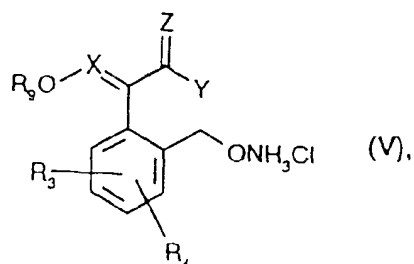
a2) 将式(IV)化合物

25

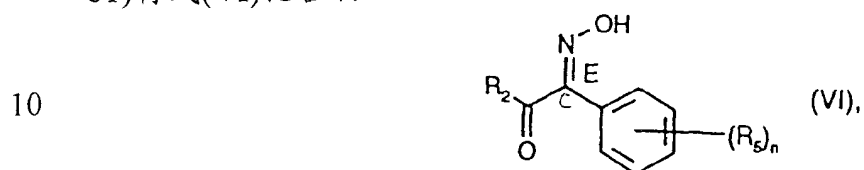


其中 A、R₂、R₅、R₇ 和 n 的定义如式 I, 且标有 E 的 C = N 双键具有 E 构型, 或其互变异构体, 在各种情况下均呈游离或盐的形式, 如果合适, 在一种碱的存在下, 与式(V)化合物

30



- 5 反应,该式(V)化合物为已知的或可用已知的方法制备,且其中 X、Y、Z、
R₃、R₄和R₉的限定如式 I,或者为其互变异构体,在各种情况下均呈游离
或盐的形式,或者
b1)将式(VI)化合物

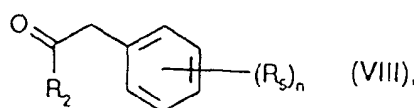


其中 R₂、R₅和 n 的定义如式 I,并且标有 E 的 C = N 双键具有 E 构型,或
者其互变异构体,在各种情况下均呈游离或盐的形式,如果合适,在一种碱
的存在下,与式(VII)化合物反应,



该式(VII)化合物是已知的或可用已知方法制备,且其中 A 和 R₇的定义如式
I, X₂是一个离去基团,或者,例如可根据方法 a2)将如此得到的式(IV)化合
物进一步反应,或者

- b2)将其与羟胺或其盐反应,如果合适,在一种碱性或酸性催化剂的存在下,
20 并且,或者例如根据方法 a1)将如此得到的式(II)化合物进一步反应,或者
c)将式(VIII)化合物



- 其是已知化合物或可根据已知的方法制备,并且其中 R₂、R₅和 n 的定义如
25 式 I,或者其互变异构体,在各种情况下均呈游离或盐的形式,如果合适在
一种碱的存在下,与 C₁-C₆烷基亚硝酸酯反应,并且例如可根据方法 b)进
一步将如此得到的式(VI)化合物反应,

本发明还涉及式 II, IV 和 VI 化合物的 E 型异构体或其互变异构体(在各种情
况下均呈游离或盐的形式)制备方法,以及其在制备式 I 化合物中的应用。

- 30 式 I 化合物是已知的农药。根据制备方法的不同,目前已知的它们的制
备方法给出不同组成的 E 和 Z 型异构体的混合物,其中 E、Z 异构体系针对

式 I 中标有 E 的 C = N 双键而言。因为发现在各种情况下, E 型异构体的生物学特性优于其混合物或 Z 型异构体的生物学特性, 因此需要研制具有纯 E 型异构体的式 I 化合物的制备方法。本发明的制备方法已达到此目的。

除非另外定义, 在以上和以下通用的术语如下定义。

- 5 含碳基团和化合物在各种情况下均包括 1 - 8(包含在内), 优选 1 - 6(包含在内), 特别是 1 - 4(包含在内), 尤其是 1 或 2 个碳原子。

烷基——本身为一个基团并可作为其它基团和化合物的结构元素, 如在卤代烷基, 烷氧基, 烷基硫代, 烷基磺酰基, 烷基磺酰基, 烷基羰基, 烷氧基羰基, 卤代烷氧基羰基, 烷基氨基羰基, 烷氧基亚氨基甲基, 烷基氨基硫代羰基和烷基氨基中——可以是直链的, 例如甲基、乙基、丙基、丁基、戊基和己基, 或是支链的, 例如异丙基, 异丁基, 仲丁基, 叔丁基, 异戊基, 新戊基或异己基, 在各种情况下, 均应——考虑对应基团或化合物中所含碳原子的个数。

10

链烯基——本身为一个基团并可作为其它基团和化合物的结构元素, 例如在卤代链烯基中——可以是直链的, 例如乙烯基、1 - 甲基乙烯基、烯丙基、1 - 丁烯基或 2 - 己烯基, 或者是支链的, 例如异丙烯基, 在各种情况下, 均应——考虑对应基团或化合物中所含碳原子的个数。

15

炔基——本身为一个基团并可作为其它基团或化合物的结构元素, 如在卤代炔基中——可以是直链的, 如炔丙基, 2 - 丁炔基或 5 - 己炔基, 也可以是支链的, 例如 2 - 乙炔基正丙基或 2 - 炔丙基异丙基。在各种情况下, 均应——考虑对应基团或化合物中所含碳原子的个数。

20

C₃ - C₆ 环烷基是环丙基, 环丁基, 环戊基或环己基。

亚烷基——本身为一个基团, 可作为其它基团和化合物的结构元素, 如在 O(亚烷基)、(亚烷基)O, (S = O)_p(亚烷基)、(亚烷基)S(= O)_p 或亚烷基二氧基中——可以是直链的, 例如 - CH₂CH₂ -, CH₂CH₂CH₂ - 或 - CH₂CH₂CH₂CH₂ -, 或是支链的, 例如 - CH(CH₃) -, - CH(C₂H₅) -, - C(CH₃)₂ -, - CH(CH₃)CH₂ - 或 - CH(CH₃)CH(CH₃) -, 在各种情况下均应——考虑对应基团或化合物中所含碳原子的个数。

25

亚烯基可以是直链的, 例如乙 - 1, 2 - 亚烯基, 烯丙 - 1, 3 - 亚烯基, 丁 - 1 - 烯 - 1, 4 - 亚基或己 - 2 - 烯 - 1, 6 - 亚基, 或者是支链的, 例如 1 - 甲基乙 - 1, 2 - 亚烯基, 在各种情况下均应——考虑对应化合物中所含

30

碳原子的个数。

亚炔基可以是直链的,例如亚炔丙基,2-亚丁炔基或5-亚己炔基,也可以是支链的,例如2-乙炔基-1,2-亚丙基或2-炔丙基异亚丙基,在各种情况下均应一一考虑对应化合物中所含碳原子的个数。

5 芳基是苯基或芳基,尤其是苯基。

杂环是有1-3个杂原子的五元至七元芳香或非芳香环,该杂原子可选自N、O或S。优选含有一个N杂原子,如果合适,还可有含一个杂原子优选N或S,尤其是N的五元和六元环。

10 卤素——本身为一个基团并可作为其它基团和化合物的结构元素,如在卤代烷基、卤代链烯基和卤代炔基中——是氟、氯、溴或碘,特别是氟、氯或溴,尤其是氟或氯,非常特别的是氟。

15 卤素取代的含碳基团和化合物,例如卤代烷基,卤代链烯基或卤代炔基,可以是部分卤代的,也可从是全卤代的,并且对于多卤代作用,其卤素取代基可以相同,也可不同。卤代烷基的实例——本身为一个基团并可作为其它基团或化合物的结构元素,如在卤代链烯基中——是被氟、氯和/或溴单至三取代的甲基,如 CHF_2 或 CF_3 ;被氟、氯和/或溴单至五取代的乙基,如 CH_2CF_3 、 CF_2CF_3 、 CF_2CCl_3 、 CF_2CHCl_2 、 CF_2CHF_2 、 CF_2CFCl_2 、 CF_2CHBr_2 、 CF_2CHClF 、 CF_2CHBrF 或 CClFCHClF ;被氟、氯和/或溴单至七取代的丙基或异丙基,如 $\text{CH}_2\text{CHBrCH}_2\text{Br}$ 、 $\text{CF}_2\text{CHFCH}_2\text{F}$ 、 $\text{CH}_2\text{CF}_2\text{CF}_3$ 或
20 $\text{CH}(\text{CF}_3)_2$;被氟、氯和/或溴单至九取代的丁基或其异构体之一,如 $\text{CF}(\text{CF}_3)\text{CH}_2\text{CF}_3$ 或 $\text{CH}_2(\text{CF}_2)_2\text{CF}_3$ 。卤代链烯基例如可以是 $\text{CH}_2\text{CH}=\text{CHCl}$ 、 $\text{CH}_2\text{CH}=\text{CCl}_2$ 、 $\text{CH}_2\text{CF}=\text{CF}_2$ 或 $\text{CH}_2\text{CH}=\text{CHCH}_2\text{Br}$ 。卤代炔基例如可以是 $\text{CH}_2\text{C}\equiv\text{CF}$ 、 $\text{CH}_2\text{C}\equiv\text{CCH}_2\text{Cl}$ 或 $\text{CF}_2\text{CF}_2\text{C}\equiv\text{CCH}_2\text{F}$ 。

25 化合物I至VI和VIII中的一些可以互变异构体形式存在,对于内行而言这是常见的,若 AR_7 是H时,尤其如此。因此,在各种情况下,即使未特别提到其互变异构体,上述和下述的化合物I也可被理解为对应的互变异构体。

30 至少含有一个碱性中心的化合物I至VI和VIII例如可以形成酸性加成盐。这些盐的形成例如是与强无机酸作用,这些无机酸例如高氯酸、硫酸、硝酸、亚硝酸、磷酸或氢卤酸;是与强无机羧酸作用,如未取代或(例如卤素)取代的 C_1-C_4 烷烃羧酸,例如乙酸,如饱和或不饱和的二羧酸,例如草酸、

丙二酸、琥珀酸、马来酸、富马酸、苯二甲酸，如羟基羧酸，例如抗坏血酸、乳酸、苹果酸、酒石酸或柠檬酸或者如苯甲酸；或者是与有机磺酸作用，如未取代或例如卤素取代的 $C_1 - C_4$ 烷烃或芳基磺酸，例如甲基或对甲苯磺酸。具有至少一个酸性基团的化合物 I 可与碱进一步形成盐。与碱形成的合适的盐例如可以是金属盐如碱金属或碱土金属盐，例如钠、钾或镁盐，或者是与氨或有机胺形成的盐，该氨或有机胺如吗啉，哌啶，吡咯烷，单、双、三低级烷基胺例如乙基、二乙基、三乙基或二甲基丙基胺，或者单、双、三羟基低级烷基胺例如单、双、三乙醇胺。而且，在合适时可形成对应的内盐。在本发明的内容中优选对农业化学有利的盐；然而，本发明也包括对农业化学用途有害的盐，例如对蜜蜂或鱼有毒性的盐，例如可用于分离和纯化游离的化合物 I 和其在农业化学中有用的盐。以游离形式或其盐的形式存在的式 I 至 VI 和 VIII 化合物在以上和以下也要理解为该化合物 I 至 VI 和 VIII 的对应盐或其游离形式。同样适用于式 I 至 VI 和 VIII 化合物和其盐的互变异构体。通常，在各种情况下优选游离形式。

以上和以下描述的反应以已知的方式进行，例如在不存在或通常是存在一种合适的溶剂或稀释剂或其混合物的情况下进行该反应，如果需要，可在冷却、室温或加热的条件下，例如在约 $-80\text{ }^{\circ}\text{C}$ 到反应介质沸点的温度范围内，优选大约为 $0 - 150\text{ }^{\circ}\text{C}$ ，并且若有必要，可在密闭容器中、加压、惰性气体氛围中和/或无水条件下进行该反应。特别有利的反应条件可从实施例 20 中看出。

以上和以下提到的用于制备化合物 I 的起始原料，在各种情况下均呈游离或盐的形式，是已知的或可以通过众所周知的方法，例如根据以下说明来制备。

变形 a1/a2)

在化合物 III 中合适的离去基团例如是羟基、 $C_1 - C_8$ 烷氧基、卤代- $C_1 - C_8$ 烷氧基、 $C_1 - C_8$ 烷醇氧基、巯基、 $C_1 - C_8$ 烷基硫代、卤代- $C_1 - C_8$ 烷基硫代、 $C_1 - C_8$ 烷烃磺酰氧基，卤代- $C_1 - C_8$ 烷烃磺酰氧基，苯磺酰氧基、甲苯磺酰氧基和卤素，优选甲苯磺酰氧基、三氟甲烷磺酰氧基和卤素，尤其是卤素。

可对反应起到促进作用的合适的碱例如是碱金属或碱土金属氢氧化物，氢化物，氮化物，烷醇盐，乙酸盐，碳酸盐，二烷基氮化物或烷基甲硅

烷基氯化物, 烷基胺, 亚烷基二胺, N-烷基化或非烷基化的、饱和的或不饱和的环烷胺, 碱性杂环化合物, 氢氧化铵和碳环胺。实例是氢氧化钠、氯化钠、氯化钾、甲醇钠、乙酸钠和碳酸钠, 叔丁醇钾、氢氧化钾、碳酸钾和氯化钾, 二异丙基氯化锂、双(三甲基甲硅烷基)氯化钾、氯化钙、三乙胺、
5 二异丙基乙基胺、三乙烯基二胺、环己胺、N-环己基-N,N-二甲基胺, N,N-二乙基苯胺, 吡啶, 4-(N,N-二甲基氨基)吡啶, 奎宁环、N-甲基吗啉、苯甲基三甲基铵氢氧化物和 1,5-二氮杂双环[5,4,0]十一碳-5-烯(DBU)。

该反应中的各成分可在不添加溶剂或稀释剂的情况下, 例如在熔融状态下相互反应。但是, 通常添加惰性溶剂或稀释剂或其混合物有利于反应的进行, 这样的溶剂或稀释剂的实例是芳香族、脂肪族和脂环烃和卤代烃, 如苯、甲苯、二甲苯, 1,3,5-三甲基苯、1,2,3,4-四氢化萘、氯苯、二氯苯、溴苯、石油醚、己烷、环己烷、二氯甲烷、氯仿、四氯化碳、二氯乙烷、三氯乙烯或四氯乙烯; 酯, 如乙酸乙酯; 醚, 如二乙醚、二丙醚、二异丙醚、
15 二丁醚、叔丁基甲基醚、乙二醇单甲基醚、乙二醇单乙醚、乙二醇二甲醚、二甲氧基二乙醚、四氢呋喃或二 烷; 酮, 如丙酮、甲基乙基酮或甲基异丁基酮; 醇, 如甲醇、乙醇、丙醇、异丙醇、丁醇、乙二醇或甘油; 酰胺, 如 N,N-二甲基甲酰胺、N,N-二乙基甲酰胺, N,N-二甲基乙酰胺, N-甲基吡咯烷酮或六甲基磷酰三胺; 腈, 如乙腈或丙腈; 以及亚砷, 如二甲基
20 亚砷。若在碱的存在下进行该反应, 所用的过量的碱, 如三乙胺, 吡啶, N-甲基吗啉或 N,N-二乙基苯胺, 也可用作溶剂或稀释剂。

进行该反应有利的温度范围是大约 0 °C - 180 °C, 优选大约 10 °C - 80 °C, 在很多情况下, 应在室温和反应混合物的回流温度之间。

优选该反应在常压下进行。

25 该反应可不在惰性气体氛围下进行; 然而, 优选在惰性气体氛围下进行该反应, 惰性气体例如是氮气或氩气, 优选氮气。

反应时间不是关键; 优选反应时间大约为 0.1 - 24 小时, 尤其优选大约为 0.5 - 2 小时。

30 可通过通常方法, 例如过滤、结晶、蒸馏或色谱或这些方法任意合适的组合, 分离出产品。

在优选的变形 a1/a2) 的实施方案中, 化合物 II 与化合物 III 在 0 °C - 80

℃, 优选 10℃ - 30℃ 温度, 在一种惰性溶剂优选酰胺, 尤其是 N,N - 二甲基甲酰胺中, 以及一种金属氢化物优选氢氧化钠的存在下反应。

对该反应而言, 特别优选的反应条件在实施例 H1d) 和 H3f) 中叙述。

式 III 化合物是已知的, 或者可用与制备已知化合物的类似方法制备。

- 5 式 I 化合物也是已知的, 但是其根据在先技术的制备方法具有大量严重的工业、生态、经济和其它缺陷。

因此, 在已有技术的制备方法中, 根据规则得到式 I 化合物中关于用 E 标记的 C = N 双键的 E/Z 异构体混合物。因为发现在各种情况下 E 型异构体的生物特性均优于 Z 型异构体或其混合物, 所以已有技术的方法具有显著缺陷, 即制备出的产品或如 E/Z 混合物一样活性非常低, 或者必须从中除去 Z 型异构体以提高其生物活性, 这就意味着必须采取许多不必要的操作步骤分离异构体, 其效果是非常耗时, 阻碍有价值的生产线很长时间, 并且还提高另外的能量消耗。另外低活性 Z 型异构体的去除也会导致另外的产率的大量损失, 这不仅仅是成问题的, 并且具有生态上的缺点, 而且也使得已有技术的方法更昂贵, 因此在经济上没有利益。已有技术的方法的工业、生态、经济和其他的缺点并不仅限于上述那些, 后面这些仅是作为已有技术方法的大量缺陷的几个实例。根据已有技术的这些方法的缺点即使是在实验室规模实施, 也会产生严重问题。当大规模实施这些方法时, 这些缺点也会显著地增强。但是, 如果一种特殊方法适于制备农用化学目的的产品时, 目标是在工业规模上实施此方法。

10
15
20

根据本发明, 化合物 I 可通过化合物 II 和化合物 III 反应制备, 或通过化合物 IV 与化合物 V 反应制备。本发明的这些方法与已有技术的方法相比, 具有非常令人惊奇的工业、生态、经济和其它方面的优点。因为化合物 II 或 IV 在本发明的制备方法中分别是以标有 E 的 C = N 双键的纯 E 构型存在, 所以在本发明中只制备出化合物 I 的 E 构型, 其效果是节约了大量时间, 同时大大地降低了成本和能耗。因为不会阻塞有价值的生产线很长时间以分离异构体, 以及同时与已有技术方法相比, 每单位时间生产出的在生物学上更有效的 E 型异构体的量更多, 因此资源如起始产品和能量, 在本发明中得到了最佳使用, 其不仅是大大地简化了该方法而且使得其在生态上有利, 结果使其更便宜, 因而有更大的经济效果。这就意味着避免了所有已有技术方法的归因于形成 E/Z 异构体的缺点。本发明方法的工业、生态、经济和其它方

25
30

面的优点不只限于以上所述这些，后面这些仅是作为本方法中固有的大量优点的几个实例。由于本方法的所有上述的优点，在实验室阶段已避免了在已有技术方法中出现的严重问题。若更大规模使用本方法，结果表明这些优点更为显著，其作用是这些优点首先允许该方法用于工业规模。

- 5 由于这个原因，已有技术方法的所有工业、生态、经济和其它缺点都已在根据本发明制备化合物 I 的方法中惊人地有益地被克服了。

变形 b)

- 10 实施变形 b) 的方法首先是将化合物 VI 与化合物 VII 反应，如果合适的话，(如果合适，在分离后)进一步将得到的产品 IV 与羟胺或其盐反应，然后将得到的产品 II 或 IV(如果合适，在分离后)根据变形 a1/a2)，例如以上述方式进一步反应给出化合物 I。

化合物 II 中合适的离去基团例如可以是在变形 a1/a2) 中提到的 X_1 的实例。

对反应起促进作用的合适的碱例如是在变形 a1/a2) 中提到的那些。

- 15 该反应中的各成分可在不添加溶剂或稀释剂的情况下，例如在熔融状态下相互反应。但是，添加一种惰性溶剂或稀释剂或其混合物通常是有利的。这样的溶剂或稀释剂的实例是变形 a1/a2) 中提到的那些。

对本反应有利的实施温度是大约 $0\text{ }^{\circ}\text{C} - 80\text{ }^{\circ}\text{C}$ ，优选大约 $10\text{ }^{\circ}\text{C} - 80\text{ }^{\circ}\text{C}$ ，在许多情况下，在室温和反应混合物的回流温度之间。

- 20 该反应优选在常压下实施。

该反应可不在惰性气体氛围下实施；但是优选在惰性气体氛围下进行，例如氮气或氩气，尤其是氮气。

反应时间不是关键；优选反应时间大约为 0.1 - 24 小时，尤其是大约 0.5 - 5 小时。

- 25 可采用通常的方法，例如过滤、结晶、蒸馏或色谱或者这些方法中任意合适的组合分离出产品。

在变形 b) 的优选实施方案中，化合物 VI 与化合物 VII 在 $0\text{ }^{\circ}\text{C} - 80\text{ }^{\circ}\text{C}$ ，优选 $10\text{ }^{\circ}\text{C} - 60\text{ }^{\circ}\text{C}$ 的温度，在惰性溶剂优选腈尤其是乙腈中，在金属碳酸盐优选碳酸钾的存在下反应，并且然后将如此得到的化合物 IV 优选根据方法

- 30 a2) 进一步反应。

对该反应特别优选的反应条件在实施例 H1b) 至 1d) 和 H3d) 至 3f) 中叙

述。

式 VII 化合物是已知物，可用类似于已知化合物的制备方法制备。

本发明变形 b)的方法原则上是 O - 烷基化反应与本发明变形 a1/a2)方法的有利结合，其与前述在本发明变形 a1/a2)方法中已讨论过的已有技术相比具有显著的优越性。特别是变形 b)的方法确保了在化合物 VI 中保留标有 E 的 C - N 双键的 E 构型，然而，本发明变形 b)的方法也还具有与其特殊性能有关的工业、生态、经济和其它优点，最初形成的中间产物 IV 在分离中间产品的情况下，或者如果不分离，其可以在混合物的原地，不纯化直接以潮湿粗品的形式进一步进行。省掉上述中间产品纯化这一步是有利的，例如，由于不必干燥，不但节约了能量和资源，而且大大地提高了制备方法的安全性，原因是完全避免了干燥中间产品过程中，粉尘爆炸危险的可能性。如果中间产品不经纯化继续反应，例如，由于不在重结晶中不消耗额外溶剂，则资源的节省将更大。与实施的变形 a1/a2)烷基化反应单独的操作步骤相比，变形 b)的方法特别有利，因为在变形 b)的方法中总反应时间更短，其最终导致了每单位时间反应产物 I 的更高的生产能力，并因此使有价值的生产线的利用更有效。而且，当采用变形 b)的方法时，反应产物 I 的总产率惊人地好，并且与单独反应步骤的烷基化反应和变形 a1/a2)的结合产率相比，产物 I 的总产率是在相同的百分数量范围或更好。本发明变形 b)的工业、生态、经济和其它方面的优点，并不仅限于上述这些，后面这些仅是本发明变形 b)方法固有的大量优点的几个例子。

通过使用本发明变形 b)的方法制备化合物 I，大量工业、生态、经济和其它方面的优点可因此而惊人地被有效利用。

变形 c)

实施变形 c)的方法首先是将化合物 VIII 与烷基亚硝酸酯反应，然后将得到产物 VI(如果合适，在分离后)根据变形 b)，例如以上述方式，进一步反应给出化合物 I。

对反应起促进作用的合适碱，例如，是在变形 a1/a2)中提到的那些。

该反应中各成分可在不添加溶剂或稀释剂的情况下，例如在熔融态下相互反应。但是，添加惰性溶剂或稀释剂或其混合物通常是有利于反应的。这样的溶剂或稀释剂的实例是变形 a1/a2)中提到的那些。

实施反应有利的温度范围是大约 0 °C - 180 °C，优选大约 0 °C - 60 °C，

在许多情况下是在室温和反应混合物的回流温度之间。

优选在常压下实施反应。

该反应可不在惰性气体氛围中实施；但是优选在惰性气体氛围下实施，该惰性气体例如可为氮气或氩气，尤其是氮气。

- 5 反应时间不是关键；优选反应时间约为 0.1 - 24 小时，尤其是约 0.5 - 3 小时。

产品用通常的方法分离，例如过滤、结晶、蒸馏或色谱或者这些方法任意合适的组合。

- 10 在变形 c) 优选的实施方式中，化合物 VIII 与一种烷基亚硝酸酯在 0 °C - 80 °C，优选 0 °C - 40 °C，在惰性溶剂优选一种醇，尤其是甲醇中，在金属醇盐优选甲醇钠的存在下反应，并且将如此得到的化合物 VI 优选根据方法 b) 进一步反应。

对反应特别优选的条件描述在实施例 H3d) 至 3f) 中。

式 VIII 化合物为已知化合物，可用与制备已知化合物类似的方法制备。

- 15 本发明变形 c) 的方法原则上是脞化反应与本发明变形 a1/a2) 和 b) 的有利结合，其与上述在本发明变形 a1/a2) 和 b) 中讨论的已有技术相比具有所有很大的优越性。并且在制备化合物 VI 的该脞化过程毫无例外地只产生式 VI 化合物中标有 E 的 C = N 双键的 E 构型。因此确保在根据本发明制备化合物 I 的接下来的过程中，例如在变形 a1/a2) 和 b) 方法中，特定的起始产品 II、IV
20 或 VI 分别都是纯 E 型异构体。

采用本发明变形 c) 的方法制备式 I 化合物，则可惊人地有效地利用了其大量的工业、生态、经济和其它优点。

在各种情况下均呈游离或其盐的形式式 II、IV 和 VI 化合物的 E 型构体及其互变异构体是新化合物，并且本发明同样也涉及它们。

- 25 本发明还涉及根据上述方法 c) 制备式 VI 化合物 E 型异构体或其互变异构体的方法，其在各种情况下都是以游离形式或盐的形式存在，

本发明还涉及根据上述方法 b1) 的式 IV 化合物的 E 型异构体或其互变异构体的制备方法，其在各种情况下均以游离形式或盐的形式存在，且

- 30 本发明还涉及根据上述方法 b2) 的式 II 化合物的 E 型异构体或其互变异构体的制备方法，其在各种情况下均以游离形式或盐的形式存在，且
制备这些中间产品的反应条件可从上述方法 a), b) 和 c) 中看出。

制备实施例

实施例 H1: 2 - [[(1 - 甲基 - 2 - 苯基 - 2 - E - [(2 - 丙炔基)氧亚氨基] - 亚乙基)氨基]氧]甲基] - α - (甲氧基亚甲基) - 苯基乙酸甲酯(化合物 1 - 16)

5 H1a) 1 - 苯基 - 1, 2 - 丙二酮 1 - E - 肟

将 69.7g 30 % 的甲醇钠的甲醇溶液在 20 - 25 °C、冷却下逐滴加入到溶于 460ml 甲醇中的 40.2g 1 - 苯基 - 2 - 丙酮和 36.1g 亚硝酸异戊酯溶液中, 然后将反应混合物在室温下搅拌 1 小时。该溶液在真空下浓缩后, 剩余物溶于 600ml 水中, 该溶液用 10 % 盐酸酸化, 过滤出析出的产品且将其溶于乙酸乙酯中, 并将有机相用水清洗两次, 用硫酸钠干燥, 然后在真空下蒸发。剩
10 余物在己烷中搅拌, 过滤。如此得到标题化合物, 熔点为 168 - 170 °C。

H1b) 1 - 苯基 - 1, 2 - 丙二酮 1 - E - [(2 - 丙炔基)肟]

将 14g 1 - 苯基 - 1, 2 - 丙二酮 1 - E - 肟, 11.9g 1 - 溴 - 2 - 丙炔, 13.8g 碳酸钾和 0.5g 碘化钾于 170ml 乙腈中形成混合物。将该混合物在 50 °C
15 搅拌 2 小时, 在真空下蒸发掉溶剂, 并将剩余物再溶于乙酸乙酯中。有机相用水清洗两次, 并用饱和氯化钠溶液清洗两次, 用硫酸钠干燥后, 在真空下蒸发。剩余物从己烷中重结晶, 得到 1 - 苯基 - 1, 2 - 丙二酮 1 - E - [(2 - 丙炔基)肟], 熔点 54 - 56 °C。

H1d) 1 - 苯基 - 1, 2 - 丙二酮 1 - E - [(2 - 丙炔基)肟] - 2 - 肟

20 14.3g 1 - 苯基 - 1, 2 - 丙二酮 1 - E - [(2 - 丙炔基)肟], 10.3g 盐酸羟胺和 11.7g 吡啶溶于 230ml 乙醇中形成混合物, 将该混合物在回流下沸腾 1 小时, 然后在真空下浓缩, 然后向剩余物中加入 800ml 水。过滤出析出的产品并溶于乙酸乙酯中, 并将该溶液用水清洗三次, 用硫酸钠干燥以及真空下蒸发。剩余物悬浮于己烷中, 并将其过滤出来。这样得到的标题产品的熔点
25 为 163 - 165 °C。

H1e) 2 - [[(1 - 甲基 - 2 - 苯基 - 2 - E - [(2 - 丙炔基)氧亚氨基]亚乙基)氨基]氧]甲基] - α - (甲氧基亚甲基) - 苯基乙酸甲酯。

将 5g 1 - 苯基 - 1, 2 - 丙二酮 1 - E - [(2 - 丙炔基)肟] - 2 - 肟溶于 24ml N, N - 二甲基甲酰胺中, 将此溶液在室温下逐滴加入到 1.16g 氢化钠(在油中, 大约 55 %)在 45ml N, N - 二甲基甲酰胺中形成的悬浮液中, 且将该混
30 合物继续搅拌 10 分钟。然后逐滴加入溶于 24ml N, N - 二甲基甲酰胺中的

6.5g 2-(溴甲基)- α -(甲氧基亚甲基)-苯基乙酸甲酯, 在室温下将该反应混合物继续搅拌 1 小时。此后, 该混合物用乙酸酸化并在真空下蒸发, 剩余物溶于乙酸乙酯中, 且该溶液用水清洗三次, 用饱和氯化钠溶液清洗两次, 用硫酸钠干燥, 然后在真空下蒸发。剩余物用己烷/乙酸乙酯重结晶后, 得到

5 标题化合物, 熔点 82 - 84 °C。

实施例 H2: 2-[[[(1-甲基-2-(4-氟苯基)-2-E-[(2-丙炔基)氧亚氨基]亚乙基)氨基]氧]甲基]- α -(甲氧基亚甲基)-苯基乙酸甲酯(化合物 1.44)

熔点为 91 - 93 °C 的标题化合物可用类似实施例 H1 所述的方法制备, 起始

10 原料为 1-(4-氟苯基)-2-丙酮。

实施例 H3: 2-[[[(1-甲基-2-(4-(3-三氟甲基苯基甲氧基)-苯基)-2-E-[(2-丙炔基)氧亚氨基]亚乙基)氨基]氧]甲基]- α -(甲氧基亚甲基)-苯基乙酸甲酯。(化合物 1.240)

H3a) 1-(4-羟基苯基)-2-丙酮

15 82g 1-(4-甲氧基苯基)-2-丙酮, 500ml 乙酸和 500ml 氢溴酸水溶液形成的混合物在回流下沸腾 2 小时, 然后在真空下蒸发。每次用 700ml 己烷/乙醚(5:2)将油性剩余物提取, 共提取四次, 蒸发提取液, 并将剩余物用己烷/乙酸乙酯(3:1)经硅胶用色层法分离。这样得到 1-(4-羟基苯基)-2-丙酮, 熔点 40 - 41 °C。

20 H3b) 1-[4-(3-三氟甲基苯基甲氧基)-苯基]-2-丙酮

5.8g 1-(4-羟基苯基)-2-丙酮, 61.6g 碳酸钾, 72.3g 1-(氯甲基)-3-(三氟甲基)-苯和 1g 碘化钾溶于 800ml 丙酮中, 该混合物在回流下沸腾 5 小时。然后, 过滤该反应混合物且滤液在真空下蒸发。然后将剩余物溶于二乙醚中, 醚相用水清洗三次, 用硫酸钠干燥并蒸发。如此得到的 1-[4-

25 -(3-三氟甲基苯基甲氧基)-苯基]-2-丙酮不经纯化直接用于下一步反应中。

H3c) 1-[4-(3-三氟甲基苯基甲氧基)-苯基]-1,2-丙二酮 1-E-肟

将 45g 30 % 甲醇钠的甲醇溶液慢慢地逐滴加入到 59.6g 1-[4-(3-三氟甲基苯基甲氧基)-苯基]-2-丙酮和 23.4g 亚硝酸异戊酯在 300ml 甲醇

30 中形成的溶液中, 以使温度不超过 20 - 25 °C。然后将反应混合物在室温下继续搅拌 1 小时, 在真空下蒸发。剩余物溶于 600ml 水中并用 10 % 的盐酸

将该溶液酸化。过滤出分出的沉淀物，并将其溶于乙酸乙酯中，用水清洗有机相两次，用硫酸钠干燥及蒸发。粗产品悬浮于己烷中后，过滤，得到 1 - [4 - (3 - 三氟甲基苯基甲氧基) - 苯基] - 1,2 - 丙二酮 1 - E - 肟，熔点 134 - 136 °C。

- 5 H3d) 1 - [4 - (3 - 三氟甲基苯基甲氧基) - 苯基] - 1,2 - 丙二酮 1 - E - [(2 - 丙炔基)肟]

将 6g 1 - [4 - (3 - 三氟甲基苯基甲氧基) - 苯基] - 1,2 - 丙二酮 1 - E - 肟，2.4g 1 - 溴 - 2 - 丙炔，2.6g 碳酸钾和 0.5g 的碘化钾溶于 40ml 乙腈中，形成的混合物在回流下沸腾 1 小时，然后在真空下蒸发，将剩余物溶于
10 乙酸乙酯中。有机相用水洗两次及用饱和氯化钠溶液洗一次，用硫酸钠干燥后蒸发。如此得到的粗品 1 - [4 - (3 - 三氟甲基苯基甲氧基) - 苯基] - 1,2 - 丙二酮 1 - E - [(2 - 丙炔基)肟]可不经进一步纯化直接进行反应。

H3e) 1 - [4 - (3 - 三氟甲基苯基甲氧基) - 苯基] - 1,2 - 丙二酮 1 - E - [(2 - 丙炔基)肟] - 2 - 肟

15 将 5.9g 1 - [4 - (3 - 三氟甲基苯基甲氧基) - 苯基] - 1,2 - 丙二酮 1 - E - [(2 - 丙炔基)肟]，2.3g 盐酸胍和 2.6g 吡啶溶于 60ml 乙酸中，形成的混合物在回流下沸腾 1 小时，然后在真空下浓缩，向剩余物中加入 200ml 水。过滤沉淀出的产品并将其溶于乙酸乙酯中，并将该溶液用水洗二次和用饱和氯化钠洗一次，用硫酸钠干燥后在真空下蒸发。剩余物在乙烷中被悬浮出来，将其过滤，如此得到 1 - [4 - (3 - 三氟甲基苯基甲氧基) - 苯基] - 1,2 - 丙二酮 1 - E - [(2 - 丙炔基)肟] - 2 - 肟，熔点 114 - 115 °C。

H3f) 2 - [[[(1 - 甲基 - 2 - (4 - (3 - 三氟代甲基苯基甲氧基) - 苯基) - 2 - E - [(2 - 丙炔基)氧亚氨基]亚乙基)氨基]氧]甲基] - α - (甲氧基亚甲基) - 苯基乙酸甲酯

25 将 5.5g 1 - [4 - (3 - 三氟甲基苯基甲氧基) - 苯基] - 1,2 - 丙二酮 1 - E - [(2 - 丙炔基)肟] - 2 - 肟溶于 25ml N, N - 二甲基甲酰胺中形成的溶液逐滴加入到 0.7g 氢化钠(大约 55 %，在油中)在 25ml N, N - 二甲基甲酰胺中形成的悬浮液中，且该混合物在室温下继续搅拌 10 分钟。将 4g 2 - (溴甲基) - α - (甲氧基亚甲基) - 苯基乙酸甲酯溶于 15ml N, N - 二甲基甲酰胺中形成的溶液逐滴加入到上述混合物中，且将该反应混合物在室温下继续搅拌
30 1 小时。此后用乙酸酸化该混合物，并在 50 °C 真空下蒸发。剩余物溶于乙酸

酯中，将该溶液用水洗两次，用饱和氯化钠溶液洗一次，用硫酸钠干燥后，在真空下蒸发。经色谱(硅胶，乙酸乙酯/己烷 1: 3)纯化后，得到标题化合物为一种树脂。

5 实施例 H4: 2 - [[(1 - 甲基 - 2 - (4 - (4 - 氯苯氧基) - 苯基) - 2 - E - [(2 - 乙基)氧亚氨基]亚乙基)氨基]氧]甲基] - α - (甲氧基亚甲基) - 苯基乙酸甲酯(化合物 1.366)

H4a) 1 - [4 - (4 - 氯苯氧基) - 苯基] - 1, 2 - 丙二酮 1 - E - 肟

10 将 16.7g 30 % 甲醇钠的甲醇溶液在 20 - 25 °C，冷却下逐滴加入到一溶液中，该溶液是 22.5g 1 - [4 - (4 - 氯苯氧基) - 苯基] - 2 - 丙酮和 10.3g 亚硝酸异戊酯溶于 120ml 甲醇中形成的。然后将该反应混合物在室温下继续搅拌 1 小时，在该溶液在真空下浓缩后，剩余物溶于 300ml 水中，并用 10 % 的盐酸溶液酸化，过滤出沉淀出的产品并溶于乙酸乙酯中。有机相用水清洗二次，硫酸钠干燥后，真空下蒸发。剩余物在己烷中搅拌，然后过滤。得到标题化合物，熔点 154 - 155 °C。

15 H4b) 1 - [4 - (4 - 氯苯氧基) - 苯基] - 1, 2 - 丙二酮 1 - E - [(2 - 乙基)肟]

6g 1 - [4 - (4 - 氯苯氧基) - 苯基] - 1, 2 - 丙二酮 1 - E - 肟，3.3g 溴乙烷，3.5g 碳酸钾和 0.5g 碘化钾在 30ml 乙腈中形成的混合物，在 50 °C 搅拌 2 小时，然后在真空下蒸发掉溶剂，并将剩余物再溶于乙酸乙酯中。有机相用水清洗两次后，再用饱和氯化钠溶液清洗两次，硫酸钠干燥后在真空下蒸

20 发。剩余物用己烷重结晶后，得到标题化合物，熔点 77 - 78 °C。

H4c) 1 - [4 - (4 - 氯苯氧基) - 苯基] - 1, 2 - 丙二酮 1 - E - [(2 - 乙基)肟] - 2 - 肟

5.5g 1 - [4 - (4 - 氯苯氧基) - 苯基] - 1, 2 - 丙二酮 1 - E - [(2 - 乙基)肟]，2.4g 盐酸羟胺和 2.7g 吡啶在 50ml 乙醇中形成的混合物在回流下沸腾 1

25 小时，然后在真空下浓缩，并向剩余物中加入 800ml 水。过滤沉淀出的产品，将其溶于乙酸乙酯中，并将得到的溶液用水清洗三次，用硫酸钠干燥后并在真空下蒸发。剩余物在乙烷中悬浮出，过滤。如此得到的标题产物为纯物质，熔点 176 - 177 °C。

30 H4d) 2 - [[(1 - 甲基 - 2 - (4 - (4 - 氯苯氧基) - 苯基) - 2 - E - [(2 - 乙基)氧亚氨基]亚乙基)氨基]氧]甲基] - α - (甲氧基亚甲基) - 苯基乙酸甲酯

将 4.7g 1 - [4 - (4 - 氯苯氧基) - 苯基] - 1, 2 - 丙二酮 1 - E - [(2 - 丙

丙炔基)-肟]-2-肟溶于25ml N,N-二甲基甲酰胺中形成溶液,将该溶液逐滴加入一悬浮液中,该悬浮液是由0.65g 氢化钠(在油中大约55%)在20ml N,N-二甲基甲酰胺中形成的。上述混合物进一步在室温下搅拌10分钟,将15ml N,N-二甲基甲酰胺中溶有4g 2-(溴甲基)- α -(甲氧基亚甲基)-5-苯基乙酯甲酯的溶液逐滴加入到上述混合物中,然后将反应混合物继续在室温下搅拌1小时。此后用乙酸酸化该混合物,并将其在50℃真空下蒸发。将剩余物溶于乙酸乙酯中,并用水清洗二次后,用饱和氯化钠溶液清洗一次,用硫酸钠干燥并在真空下蒸发。用快速色谱(硅胶,乙酸乙酯/己烷1:3)纯化后得到标题化合物,熔点87-89℃。

- 10 实施例 H5: 2-[[[(1-甲基-2-(4-(4-氯苯氧基)-苯基)-2-E-[(2-乙基)氧亚氨基]亚乙基)氨基]氧]甲基]- α -(甲氧基亚氨基)-苯基乙酸甲酯(化合物 2.366)

熔点为90-93℃的标题化合物根据实施例 H4 中所述的类似的方式从1-[4-(4-氯苯氧基)-苯基]-1,2-丙二酮1-E-[(2-丙炔基)肟]-2-肟和2-(溴甲基)- α -(甲氧基亚氨基)-苯基乙酸甲酯得到。

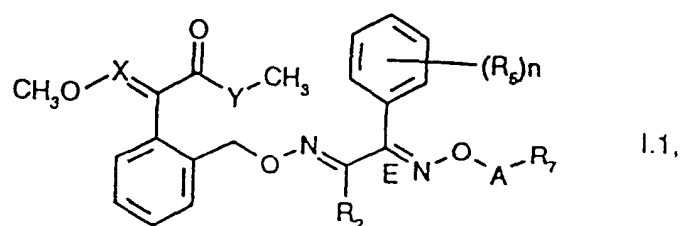
实施例 H6: 2-[[[(1-甲基-2-(4-(4-氯苯氧基)-苯基)-2-E-[(2-乙基)氧亚氨基]亚乙基)氨基]氧]甲基]- α -(甲氧基亚氨基)-苯基乙酸甲酯(化合物 3.366)

将13.3g 2-[[[(1-甲基-2-(4-(4-氯苯氧基)-苯基)-2-E-[(2-乙基)氧亚氨基]亚乙基)氨基]氧]甲基]- α -(甲氧基亚氨基)-苯基乙酸甲酯与80ml 二甲基甲酰胺和9.2ml 的8M 甲基胺的乙醇溶液一起在室温下放置两天。在50℃浓缩该混合物,加入正己烷,然后将此混合物冷却到室温并过滤。将剩余物在高真空下干燥,得到标题化合物,熔点126-129℃。

25 实施例 H7: 其它列于表1-3中的化合物也可以类似实施例 H1-H6 中所述的方法制备。表中“物理数据”这一栏中表示的温度在各种情况下均指所讨论化合物的熔点。c.propyl 是指环丙基。

表 1

通式 1.1 的化合物



5

其中 X 是 CH, Y 是氧, 在所有情况下, 一个化合物的取代基 R_2 , $(R_5)_n$ 和 $A-R_7$ 对应于表 A 中的一行, 下列表中的化合物号对应于表 A 中的特定的号。

化合物号	物理数据(熔点, °C)
1.14	75-77°
1.16	82-84°
1.22	111-113°
1.42	树脂
1.44	91-93°
1.50	树脂
1.70	树脂
1.72	树脂
1.78	树脂
1.225	102-103°
1.226	81-83°
1.227	树脂
1.233	树脂
1.234	73-75°
1.238	树脂
1.240	树脂
1.241	树脂
1.242	树脂
1.244	树脂
1.245	树脂
1.294	树脂
1.296	112-114°
1.366	87-89°

表 2

通式为 1.1 的化合物, 其中

X 是氮, 且

5 Y 是氧, 并且

在各种情况下一个化合物的取代基 R_2 , $(R_5)_n$ 和 $A - R_7$ 对应表 A 中的一行。

化合物号	熔点(°C)
2.198	75-77
2.254	80-82
2.309	106-108
2.310	102-104
2.366	90-93

表 3

通式为 1.1 的化合物, 其中

10 X 是氮, 并且

Y 是 NH, 并且

一个化合物的取代基 R_2 , $(R_5)_n$ 和 $A - R_7$ 在每种情况下对应于表 A 中的一行。

化合物号	熔点(°C)
3.198	75-77
3.254	112-114
3.309	89-91
3.310	88-90
3.366	126-129

表 A

化合物号	R_2	$(R_5)_n$	$A - R_7$
1	CH ₃	H	CH ₃
2	CH ₃	H	C ₂ H ₅
3	CH ₃	H	n-C ₃ H ₇

化合物号	R ₂	(R ₅) _n	A-R ₇
4	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
5	CH ₃	H	n-C ₄ H ₉
6	CH ₃	H	n-C ₆ H ₁₃
7	CH ₃	H	CH ₂ F
8	CH ₃	H	CHF ₂
9	CH ₃	H	CH ₂ CF ₃
10	CH ₃	H	CH ₂ CH=CH ₂
11	CH ₃	H	CH ₂ CH=CHCH ₃
12	CH ₃	H	CH ₂ CH=C(CH ₃) ₂
13	CH ₃	H	CH ₂ CH=CHCl
14	CH ₃	H	CH ₂ CH=CCl ₂
15	CH ₃	H	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂
16	CH ₃	H	CH ₂ C≡CH
17	CH ₃	H	CH ₂ Si(CH ₃) ₃
18	CH ₃	H	CH ₂ -c.propyl-2,2-Cl ₂
19	CH ₃	H	CH ₂ CN
20	CH ₃	H	CH ₂ COOC ₂ H ₅
21	CH ₃	H	CH(CH ₃)COOC ₂ H ₅
22	CH ₃	H	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃
23	CH ₃	H	CH ₂ C ₆ H ₄ -4-F
24	CH ₃	H	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-F
25	CH ₃	H	CH ₂ C ₆ H ₄ -2-F
26	CH ₃	H	C(=O)OC ₂ H ₅
27	CH ₃	H	C(=O)NHCH ₃
28	CH ₃	H	C(=O)C(=O)OC ₂ H ₅
29	CH ₃	4-F	CH ₃
30	CH ₃	4-F	C ₂ H ₅
31	CH ₃	4-F	n-C ₃ H ₇
32	CH ₃	4-F	i-C ₃ H ₇
33	CH ₃	4-F	n-C ₄ H ₉

化合物号	R ₂	(R ₅) _n	A-R ₇
34	CH ₃	4-F	n-C ₆ H ₁₃
35	CH ₃	4-F	CH ₂ F
36	CH ₃	4-F	CHF ₂
37	CH ₃	4-F	CH ₂ CF ₃
38	CH ₃	4-F	CH ₂ CH=CH ₂
39	CH ₃	4-F	CH ₂ CH=CHCH ₃
40	CH ₃	4-F	CH ₂ CH=C(CH ₃) ₂
41	CH ₃	4-F	CH ₂ CH=CHCl
42	CH ₃	4-F	CH ₂ CH=CCl ₂
43	CH ₃	4-F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂
44	CH ₃	4-F	CH ₂ C≡CH
45	CH ₃	4-F	CH ₂ Si(CH ₃) ₃
46	CH ₃	4-F	CH ₂ -c.propyl-2,2-Cl ₂
47	CH ₃	4-F	CH ₂ CN
48	CH ₃	4-F	CH ₂ COOC ₂ H ₅
49	CH ₃	4-F	CH(CH ₃)COOC ₂ H ₅
50	CH ₃	4-F	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃
51	CH ₃	4-F	CH ₂ C ₆ H ₄ -4-F
52	CH ₃	4-F	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-F
53	CH ₃	4-F	CH ₂ C ₆ H ₄ -2-F
54	CH ₃	4-F	C(=O)OC ₂ H ₅
55	CH ₃	4-F	C(=O)NHCH ₃
56	CH ₃	4-F	C(=O)C(=O)OC ₂ H ₅
57	CH ₃	4-OCH ₃	CH ₃
58	CH ₃	4-OCH ₃	C ₂ H ₅
59	CH ₃	4-OCH ₃	n-C ₃ H ₇
60	CH ₃	4-OCH ₃	i-C ₃ H ₇
61	CH ₃	4-OCH ₃	n-C ₄ H ₉
62	CH ₃	4-OCH ₃	n-C ₆ H ₁₃
63	CH ₃	4-OCH ₃	CH ₂ F

化合物号	R ₂	(R ₅) _n	A-R ₇
64	CH ₃	4-OCH ₃	CHF ₂
65	CH ₃	4-OCH ₃	CH ₂ CF ₃
66	CH ₃	4-OCH ₃	CH ₂ CH=CH ₂
67	CH ₃	4-OCH ₃	CH ₂ CH=CHCH ₃
68	CH ₃	4-OCH ₃	CH ₂ CH=C(CH ₃) ₂
69	CH ₃	4-OCH ₃	CH ₂ CH=CHCl
70	CH ₃	4-OCH ₃	CH ₂ CH=CCl ₂
71	CH ₃	4-OCH ₃	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂
72	CH ₃	4-OCH ₃	CH ₂ C≡CH
73	CH ₃	4-OCH ₃	CH ₂ Si(CH ₃) ₃
74	CH ₃	4-OCH ₃	CH ₂ -c.propyl-2,2-Cl ₂
75	CH ₃	4-OCH ₃	CH ₂ CN
76	CH ₃	4-OCH ₃	CH ₂ COOC ₂ H ₅
77	CH ₃	4-OCH ₃	CH(CH ₃)COOC ₂ H ₅
78	CH ₃	4-OCH ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃
79	CH ₃	4-OCH ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -4-F
80	CH ₃	4-OCH ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-F
81	CH ₃	4-OCH ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -2-F
82	CH ₃	4-OCH ₃	C(=O)OC ₂ H ₅
83	CH ₃	4-OCH ₃	C(=O)NHCH ₃
84	CH ₃	4-OCH ₃	C(=O)C(=O)OC ₂ H ₅
85	CH ₃	4-OC ₂ H ₅	CH ₃
86	CH ₃	4-OC ₂ H ₅	C ₂ H ₅
87	CH ₃	4-OC ₂ H ₅	n-C ₃ H ₇
88	CH ₃	4-OC ₂ H ₅	i-C ₃ H ₇
89	CH ₃	4-OC ₂ H ₅	n-C ₄ H ₉
90	CH ₃	4-OC ₂ H ₅	n-C ₆ H ₁₃
91	CH ₃	4-OC ₂ H ₅	CH ₂ F
92	CH ₃	4-OC ₂ H ₅	CHF ₂
93	CH ₃	4-OC ₂ H ₅	CH ₂ CF ₃

化合物号	R ₂	(R ₅) _n	A-R ₇
94	CH ₃	4-OC ₂ H ₅	CH ₂ CH=CH ₂
95	CH ₃	4-OC ₂ H ₅	CH ₂ CH=CHCH ₃
96	CH ₃	4-OC ₂ H ₅	CH ₂ CH=C(CH ₃) ₂
97	CH ₃	4-OC ₂ H ₅	CH ₂ CH=CHCl
98	CH ₃	4-OC ₂ H ₅	CH ₂ CH=CCl ₂
99	CH ₃	4-OC ₂ H ₅	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂
100	CH ₃	4-OC ₂ H ₅	CH ₂ C≡CH
101	CH ₃	4-OC ₂ H ₅	CH ₂ Si(CH ₃) ₃
102	CH ₃	4-OC ₂ H ₅	CH ₂ -c.propyl-2,2-Cl ₂
103	CH ₃	4-OC ₂ H ₅	CH ₂ CN
104	CH ₃	4-OC ₂ H ₅	CH ₂ COOC ₂ H ₅
105	CH ₃	4-OC ₂ H ₅	CH(CH ₃)COOC ₂ H ₅
106	CH ₃	4-OC ₂ H ₅	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃
107	CH ₃	4-OC ₂ H ₅	CH ₂ C ₆ H ₄ -4-F
108	CH ₃	4-OC ₂ H ₅	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-F
109	CH ₃	4-OC ₂ H ₅	CH ₂ C ₆ H ₄ -2-F
110	CH ₃	4-OC ₂ H ₅	C(=O)OC ₂ H ₅
111	CH ₃	4-OC ₂ H ₅	C(=O)NHCH ₃
112	CH ₃	4-OC ₂ H ₅	C(=O)C(=O)OC ₂ H ₅
113	CH ₃	4-O-n-C ₃ H ₇	CH ₃
114	CH ₃	4-O-n-C ₃ H ₇	C ₂ H ₅
115	CH ₃	4-O-n-C ₃ H ₇	n-C ₃ H ₇
116	CH ₃	4-O-n-C ₃ H ₇	i-C ₃ H ₇
117	CH ₃	4-O-n-C ₃ H ₇	n-C ₄ H ₉
118	CH ₃	4-O-n-C ₃ H ₇	n-C ₆ H ₁₃
119	CH ₃	4-O-n-C ₃ H ₇	CH ₂ F
120	CH ₃	4-O-n-C ₃ H ₇	CHF ₂
121	CH ₃	4-O-n-C ₃ H ₇	CH ₂ CF ₃
122	CH ₃	4-O-n-C ₃ H ₇	CH ₂ CH=CH ₂
123	CH ₃	4-O-n-C ₃ H ₇	CH ₂ CH=CHCH ₃

化合物号	R ₂	(R ₅) _n	A-R ₇
124	CH ₃	4-O-n-C ₃ H ₇	CH ₂ CH=C(CH ₃) ₂
125	CH ₃	4-O-n-C ₃ H ₇	CH ₂ CH=CHCl
126	CH ₃	4-O-n-C ₃ H ₇	CH ₂ CH=CCl ₂
127	CH ₃	4-O-n-C ₃ H ₇	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂
128	CH ₃	4-O-n-C ₃ H ₇	CH ₂ C≡CH
129	CH ₃	4-O-n-C ₃ H ₇	CH ₂ Si(CH ₃) ₃
130	CH ₃	4-O-n-C ₃ H ₇	CH ₂ -c.propyl-2,2-Cl ₂
131	CH ₃	4-O-n-C ₃ H ₇	CH ₂ CN
132	CH ₃	4-O-n-C ₃ H ₇	CH ₂ COOC ₂ H ₅
133	CH ₃	4-O-n-C ₃ H ₇	CH(CH ₃)COOC ₂ H ₅
134	CH ₃	4-O-n-C ₃ H ₇	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃
135	CH ₃	4-O-n-C ₃ H ₇	CH ₂ C ₆ H ₄ -4-F
136	CH ₃	4-O-n-C ₃ H ₇	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-F
137	CH ₃	4-O-n-C ₃ H ₇	CH ₂ C ₆ H ₄ -2-F
138	CH ₃	4-O-n-C ₃ H ₇	C(=O)OC ₂ H ₅
139	CH ₃	4-O-n-C ₃ H ₇	C(=O)NHCH ₃
140	CH ₃	4-O-n-C ₃ H ₇	C(=O)C(=O)OC ₂ H ₅
141	CH ₃	2-CH ₃	CH ₃
142	CH ₃	2-CH ₃	C ₂ H ₅
143	CH ₃	2-CH ₃	n-C ₃ H ₇
144	CH ₃	2-CH ₃	i-C ₃ H ₇
145	CH ₃	2-CH ₃	n-C ₄ H ₉
146	CH ₃	2-CH ₃	n-C ₆ H ₁₃
147	CH ₃	2-CH ₃	CH ₂ F
148	CH ₃	2-CH ₃	CHF ₂
149	CH ₃	2-CH ₃	CH ₂ CF ₃
150	CH ₃	2-CH ₃	CH ₂ CH=CH ₂
151	CH ₃	2-CH ₃	CH ₂ CH=CHCH ₃
152	CH ₃	2-CH ₃	CH ₂ CH=C(CH ₃) ₂
153	CH ₃	2-CH ₃	CH ₂ CH=CHCl

化合物号	R ₂	(R ₅) _n	A-R ₇
154	CH ₃	2-CH ₃	CH ₂ CH=CCl ₂
155	CH ₃	2-CH ₃	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂
156	CH ₃	2-CH ₃	CH ₂ C≡CH
157	CH ₃	2-CH ₃	CH ₂ Si(CH ₃) ₃
158	CH ₃	2-CH ₃	CH ₂ -c.propyl-2,2-Cl ₂
159	CH ₃	2-CH ₃	CH ₂ CN
160	CH ₃	2-CH ₃	CH ₂ COOC ₂ H ₅
161	CH ₃	2-CH ₃	CH(CH ₃)COOC ₂ H ₅
162	CH ₃	2-CH ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃
163	CH ₃	2-CH ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -4-F
164	CH ₃	2-CH ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-F
165	CH ₃	2-CH ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -2-F
166	CH ₃	2-CH ₃	C(=O)OC ₂ H ₅
167	CH ₃	2-CH ₃	C(=O)NHCH ₃
168	CH ₃	2-CH ₃	C(=O)C(=O)OC ₂ H ₅
169	CH ₃	4-OCH ₂ Si(CH ₃) ₃	CH ₃
170	CH ₃	4-OCH ₂ Si(CH ₃) ₃	C ₂ H ₅
171	CH ₃	4-OCH ₂ Si(CH ₃) ₃	n-C ₃ H ₇
172	CH ₃	4-OCH ₂ Si(CH ₃) ₃	i-C ₃ H ₇
173	CH ₃	4-OCH ₂ Si(CH ₃) ₃	n-C ₄ H ₉
174	CH ₃	4-OCH ₂ Si(CH ₃) ₃	n-C ₆ H ₁₃
175	CH ₃	4-OCH ₂ Si(CH ₃) ₃	CH ₂ F
176	CH ₃	4-OCH ₂ Si(CH ₃) ₃	CHF ₂
177	CH ₃	4-OCH ₂ Si(CH ₃) ₃	CH ₂ CF ₃
178	CH ₃	4-OCH ₂ Si(CH ₃) ₃	CH ₂ CH=CH ₂
179	CH ₃	4-OCH ₂ Si(CH ₃) ₃	CH ₂ CH=CHCH ₃
180	CH ₃	4-OCH ₂ Si(CH ₃) ₃	CH ₂ CH=C(CH ₃) ₂
181	CH ₃	4-OCH ₂ Si(CH ₃) ₃	CH ₂ CH=CHCl
182	CH ₃	4-OCH ₂ Si(CH ₃) ₃	CH ₂ CH=CCl ₂
183	CH ₃	4-OCH ₂ Si(CH ₃) ₃	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂

化合物号	R ₂	(R ₅) _n	A-R ₇
184	CH ₃	4-OCH ₂ Si(CH ₃) ₃	CH ₂ C≡CH
185	CH ₃	4-OCH ₂ Si(CH ₃) ₃	CH ₂ Si(CH ₃) ₃
186	CH ₃	4-OCH ₂ Si(CH ₃) ₃	CH ₂ -c.propyl-2,2-Cl ₂
187	CH ₃	4-OCH ₂ Si(CH ₃) ₃	CH ₂ CN
188	CH ₃	4-OCH ₂ Si(CH ₃) ₃	CH ₂ COOC ₂ H ₅
189	CH ₃	4-OCH ₂ Si(CH ₃) ₃	CH(CH ₃)COOC ₂ H ₅
190	CH ₃	4-OCH ₂ Si(CH ₃) ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃
191	CH ₃	4-OCH ₂ Si(CH ₃) ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -4-F
192	CH ₃	4-OCH ₂ Si(CH ₃) ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-F
193	CH ₃	4-OCH ₂ Si(CH ₃) ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -2-F
194	CH ₃	4-OCH ₂ Si(CH ₃) ₃	C(=O)OC ₂ H ₅
195	CH ₃	4-OCH ₂ Si(CH ₃) ₃	C(=O)NHCH ₃
196	CH ₃	4-OCH ₂ Si(CH ₃) ₃	C(=O)C(=O)OC ₂ H ₅
197	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-CF ₃	CH ₃
198	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-CF ₃	C ₂ H ₅
199	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-CF ₃	n-C ₃ H ₇
200	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-CF ₃	i-C ₃ H ₇
201	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-CF ₃	n-C ₄ H ₉
202	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-CF ₃	n-C ₆ H ₁₃
203	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-CF ₃	CH ₂ F
204	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-CF ₃	CHF ₂
205	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-CF ₃	CH ₂ CF ₃
206	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-CF ₃	CH ₂ CH=CH ₂
207	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-CF ₃	CH ₂ CH=CHCH ₃
208	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-CF ₃	CH ₂ CH=C(CH ₃) ₂
209	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-CF ₃	CH ₂ CH=CHCl
210	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-CF ₃	CH ₂ CH=CCl ₂
211	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-CF ₃	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂
212	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-CF ₃	CH ₂ C≡CH
213	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-CF ₃	CH ₂ Si(CH ₃) ₃

化合物号	R ₂	(R ₅) _n	A-R ₇
214	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-CF ₃	CH ₂ -c.propyl-2,2-Cl ₂
215	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-CF ₃	CH ₂ CN
216	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-CF ₃	CH ₂ COOC ₂ H ₅
217	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-CF ₃	CH(CH ₃)COOC ₂ H ₅
218	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-CF ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃
219	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-CF ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -4-F
220	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-CF ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-F
221	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-CF ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -2-F
222	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-CF ₃	C(=O)OC ₂ H ₅
223	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-CF ₃	C(=O)NHCH ₃
224	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-CF ₃	C(=O)C(=O)OC ₂ H ₅
225	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₃
226	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	C ₂ H ₅
227	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	n-C ₃ H ₇
228	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	i-C ₃ H ₇
229	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	n-C ₄ H ₉
230	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	n-C ₆ H ₁₃
231	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ F
232	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	CHF ₂
233	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ CF ₃
234	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ CH=CH ₂
235	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ CH=CHCH ₃
236	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ CH=C(CH ₃) ₂
237	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ CH=CHCl
238	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ CH=CCl ₂
239	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂
240	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ C≡CH
241	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ Si(CH ₃) ₃
242	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ -c.propyl-2,2-Cl ₂
243	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ CN

化合物号	R ₂	(R ₅) _n	A-R ₇
244	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ COOC ₂ H ₅
245	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH(CH ₃)COOC ₂ H ₅
246	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃
247	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -4-F
248	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-F
249	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -2-F
250	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	C(=O)OC ₂ H ₅
251	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	C(=O)NHCH ₃
252	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	C(=O)C(=O)OC ₂ H ₅
253	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -2-CF ₃	CH ₃
254	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -2-CF ₃	C ₂ H ₅
255	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -2-CF ₃	n-C ₃ H ₇
256	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -2-CF ₃	i-C ₃ H ₇
257	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -2-CF ₃	n-C ₄ H ₉
258	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -2-CF ₃	n-C ₆ H ₁₃
259	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -2-CF ₃	CH ₂ F
260	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -2-CF ₃	CHF ₂
261	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -2-CF ₃	CH ₂ CF ₃
262	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -2-CF ₃	CH ₂ CH=CH ₂
263	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -2-CF ₃	CH ₂ CH=CHCH ₃
264	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -2-CF ₃	CH ₂ CH=C(CH ₃) ₂
265	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -2-CF ₃	CH ₂ CH=CHCl
266	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -2-CF ₃	CH ₂ CH=CCl ₂
267	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -2-CF ₃	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂
268	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -2-CF ₃	CH ₂ C≡CH
269	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -2-CF ₃	CH ₂ Si(CH ₃) ₃
270	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -2-CF ₃	CH ₂ -c.propyl-2,2-Cl ₂
271	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -2-CF ₃	CH ₂ CN
272	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -2-CF ₃	CH ₂ COOC ₂ H ₅
273	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -2-CF ₃	CH(CH ₃)COOC ₂ H ₅

化合物号	R ₂	(R ₅) _n	A-R ₇
274	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -2-CF ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃
275	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -2-CF ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -4-F
276	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -2-CF ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-F
277	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -2-CF ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -2-F
278	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -2-CF ₃	C(=O)OC ₂ H ₅
279	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -2-CF ₃	C(=O)NHCH ₃
280	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -2-CF ₃	C(=O)C(=O)OC ₂ H ₅
281	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-F	CH ₃
282	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-F	C ₂ H ₅
283	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-F	n-C ₃ H ₇
284	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-F	i-C ₃ H ₇
285	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-F	n-C ₄ H ₉
286	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-F	n-C ₆ H ₁₃
287	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-F	CH ₂ F
288	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-F	CHF ₂
289	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-F	CH ₂ CF ₃
290	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-F	CH ₂ CH=CH ₂
291	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-F	CH ₂ CH=CHCH ₃
292	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-F	CH ₂ CH=C(CH ₃) ₂
293	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-F	CH ₂ CH=CHCl
294	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-F	CH ₂ CH=CCl ₂
295	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂
296	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-F	CH ₂ C≡CH
297	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-F	CH ₂ Si(CH ₃) ₃
298	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-F	CH ₂ -c.propyl-2,2-Cl ₂
299	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-F	CH ₂ CN
300	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-F	CH ₂ COOC ₂ H ₅
301	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-F	CH(CH ₃)COOC ₂ H ₅
302	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-F	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃
303	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-F	CH ₂ C ₆ H ₄ -4-F

化合物号	R ₂	(R ₅) _n	A-R ₇
304	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-F	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-F
305	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-F	CH ₂ C ₆ H ₄ -2-F
306	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-F	C(=O)OC ₂ H ₅
307	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-F	C(=O)NHCH ₃
308	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-F	C(=O)C(=O)OC ₂ H ₅
309	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₃
310	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-CF ₃	C ₂ H ₅
311	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-CF ₃	n-C ₃ H ₇
312	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-CF ₃	i-C ₃ H ₇
313	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-CF ₃	n-C ₄ H ₉
314	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-CF ₃	n-C ₆ H ₁₃
315	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ F
316	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-CF ₃	CHF ₂
317	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ CF ₃
318	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ CH=CH ₂
319	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ CH=CHCH ₃
320	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ CH=C(CH ₃) ₂
321	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ CH=CHCl
322	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ CH=CCl ₂
323	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂
324	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ C≡CH
325	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ Si(CH ₃) ₃
326	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ -c.propyl-2,2-Cl ₂
327	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ CN
328	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ COOC ₂ H ₅
329	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH(CH ₃)COOC ₂ H ₅
330	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃
331	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -4-F
332	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-F
333	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -2-F

化合物号	R ₂	(R ₅) _n	A-R ₇
334	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-CF ₃	C(=O)OC ₂ H ₅
335	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-CF ₃	C(=O)NHCH ₃
336	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-CF ₃	C(=O)C(=O)OC ₂ H ₅
337	C ₂ H ₅	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₃
338	C ₂ H ₅	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	C ₂ H ₅
339	C ₂ H ₅	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	n-C ₃ H ₇
340	C ₂ H ₅	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	i-C ₃ H ₇
341	C ₂ H ₅	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	n-C ₄ H ₉
342	C ₂ H ₅	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	n-C ₆ H ₁₃
343	C ₂ H ₅	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ F
344	C ₂ H ₅	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	CHF ₂
345	C ₂ H ₅	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ CF ₃
346	C ₂ H ₅	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ CH=CH ₂
347	C ₂ H ₅	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ CH=CHCH ₃
348	C ₂ H ₅	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ CH=C(CH ₃) ₂
349	C ₂ H ₅	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ CH=CHCl
350	C ₂ H ₅	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ CH=CCl ₂
351	C ₂ H ₅	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂
352	C ₂ H ₅	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ C≡CH
353	C ₂ H ₅	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ Si(CH ₃) ₃
354	C ₂ H ₅	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ -c.propyl-2,2-Cl ₂
355	C ₂ H ₅	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ CN
356	C ₂ H ₅	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ COOC ₂ H ₅
357	C ₂ H ₅	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH(CH ₃)COOC ₂ H ₅
358	C ₂ H ₅	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃
359	C ₂ H ₅	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -4-F
360	C ₂ H ₅	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-F
361	C ₂ H ₅	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -2-F
362	C ₂ H ₅	4-OC ₆ H ₄ -3-CF ₃	C(=O)OC ₂ H ₅
363	C ₂ H ₅	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	C(=O)NHCH ₃

化合物号	R ₂	(R ₅) _n	A-R ₇
364	C ₂ H ₅	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃	C(=O)C(=O)OC ₂ H ₅
365	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Cl	CH ₃
366	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Cl	C ₂ H ₅
367	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Cl	n-C ₃ H ₇
368	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Cl	i-C ₃ H ₇
369	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Cl	n-C ₄ H ₉
370	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Cl	n-C ₆ H ₁₃
371	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Cl	CH ₂ F
372	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Cl	CHF ₂
373	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Cl	CH ₂ CF ₃
374	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Cl	CH ₂ CH=CH ₂
375	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Cl	CH ₂ CH=CHCH ₃
376	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Cl	CH ₂ CH=C(CH ₃) ₂
377	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Cl	CH ₂ CH=CHCl
378	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Cl	CH ₂ CH=CCl ₂
379	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂
380	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Cl	CH ₂ C≡CH
381	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Cl	CH ₂ Si(CH ₃) ₃
382	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Cl	CH ₂ -c.propyl-2,2-Cl ₂
383	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Cl	CH ₂ CN
384	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Cl	CH ₂ COOC ₂ H ₅
385	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Cl	CH(CH ₃)COOC ₂ H ₅
386	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Cl	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃
387	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Cl	CH ₂ C ₆ H ₄ -4-F
388	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Cl	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-F
389	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Cl	CH ₂ C ₆ H ₄ -2-F
390	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Cl	C(=O)OC ₂ H ₅
391	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Cl	C(=O)NHCH ₃
392	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Cl	C(=O)C(=O)OC ₂ H ₅
393	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Cl	CH ₃

化合物号	R ₂	(R ₅) _n	A-R ₇
394	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Cl	C ₂ H ₅
395	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Cl	n-C ₃ H ₇
396	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Cl	i-C ₃ H ₇
397	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Cl	n-C ₄ H ₉
398	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Cl	n-C ₆ H ₁₃
399	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Cl	CH ₂ F
400	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Cl	CHF ₂
401	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Cl	CH ₂ CF ₃
402	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Cl	CH ₂ CH=CH ₂
403	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Cl	CH ₂ CH=CHCH ₃
404	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Cl	CH ₂ CH=C(CH ₃) ₂
405	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Cl	CH ₂ CH=CHCl
406	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Cl	CH ₂ CH=CCl ₂
407	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂
408	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Cl	CH ₂ C≡CH
409	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Cl	CH ₂ Si(CH ₃) ₃
410	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Cl	CH ₂ -c.propyl-2,2-Cl ₂
411	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Cl	CH ₂ CN
412	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Cl	CH ₂ COOC ₂ H ₅
413	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Cl	CH(CH ₃)COOC ₂ H ₅
414	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Cl	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃
415	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Cl	CH ₂ C ₆ H ₄ -4-F
416	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Cl	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-F
417	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Cl	CH ₂ C ₆ H ₄ -2-F
418	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Cl	C(=O)OC ₂ H ₅
419	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Cl	C(=O)NHCH ₃
420	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Cl	C(=O)C(=O)OC ₂ H ₅
421	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Cl	CH ₃
242	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Cl	C ₂ H ₅
423	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Cl	n-C ₃ H ₇

化合物号	R ₂	(R ₅) _n	A-R ₇
424	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Cl	i-C ₃ H ₇
425	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Cl	n-C ₄ H ₉
426	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Cl	n-C ₆ H ₁₃
427	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Cl	CH ₂ F
428	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Cl	CHF ₂
429	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Cl	CH ₂ CF ₃
430	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Cl	CH ₂ CH=CH ₂
431	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Cl	CH ₂ CH=CHCH ₃
432	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Cl	CH ₂ CH=C(CH ₃) ₂
433	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Cl	CH ₂ CH=CHCl
434	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Cl	CH ₂ CH=CCl ₂
435	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂
436	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Cl	CH ₂ C≡CH
437	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Cl	CH ₂ Si(CH ₃) ₃
438	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Cl	CH ₂ -c.propyl-2,2-Cl ₂
439	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Cl	CH ₂ CN
440	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Cl	CH ₂ COOC ₂ H ₅
441	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Cl	CH(CH ₃)COOC ₂ H ₅
442	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Cl	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃
443	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Cl	CH ₂ C ₆ H ₄ -4-F
444	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Cl	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-F
445	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Cl	CH ₂ C ₆ H ₄ -2-F
446	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Cl	C(=O)OC ₂ H ₅
447	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Cl	C(=O)NHCH ₃
448	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Cl	C(=O)C(=O)OC ₂ H ₅
449	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-F	CH ₃
450	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-F	C ₂ H ₅
451	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-F	n-C ₃ H ₇
452	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-F	i-C ₃ H ₇
453	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-F	n-C ₄ H ₉

化合物号	R ₂	(R ₅) _n	A-R ₇
454	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-F	n-C ₆ H ₁₃
455	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-F	CH ₂ F
456	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-F	CHF ₂
457	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-F	CH ₂ CF ₃
458	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-F	CH ₂ CH=CH ₂
459	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-F	CH ₂ CH=CHCH ₃
460	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-F	CH ₂ CH=C(CH ₃) ₂
461	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-F	CH ₂ CH=CHCl
462	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-F	CH ₂ CH=CCl ₂
463	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂
464	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-F	CH ₂ C≡CH
465	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-F	CH ₂ Si(CH ₃) ₃
466	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-F	CH ₂ -c.propyl-2,2-Cl ₂
467	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-F	CH ₂ CN
468	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-F	CH ₂ COOC ₂ H ₅
469	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-F	CH(CH ₃)COOC ₂ H ₅
470	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-F	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃
471	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-F	CH ₂ C ₆ H ₄ -4-F
472	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-F	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-F
473	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-F	CH ₂ C ₆ H ₄ -2-F
474	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-F	C(=O)OC ₂ H ₅
475	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-F	C(=O)NHCH ₃
476	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-F	C(=O)C(=O)OC ₂ H ₅
477	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-F	CH ₃
478	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-F	C ₂ H ₅
479	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-F	n-C ₃ H ₇
480	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-F	i-C ₃ H ₇
481	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-F	n-C ₄ H ₉
482	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-F	n-C ₆ H ₁₃
483	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-F	CH ₂ F

化合物号	R ₂	(R ₅) _n	A-R ₇
484	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-F	CHF ₂
485	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-F	CH ₂ CF ₃
486	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-F	CH ₂ CH=CH ₂
487	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-F	CH ₂ CH=CHCH ₃
488	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-F	CH ₂ CH=C(CH ₃) ₂
489	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-F	CH ₂ CH=CHCl
490	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-F	CH ₂ CH=CCl ₂
491	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂
492	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-F	CH ₂ C≡CH
493	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-F	CH ₂ Si(CH ₃) ₃
494	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-F	CH ₂ -c.propyl-2,2-Cl ₂
495	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-F	CH ₂ CN
496	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-F	CH ₂ COOC ₂ H ₅
497	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-F	CH(CH ₃)COOC ₂ H ₅
498	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-F	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃
499	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-F	CH ₂ C ₆ H ₄ -4-F
500	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-F	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-F
501	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-F	CH ₂ C ₆ H ₄ -2-F
502	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-F	C(=O)OC ₂ H ₅
503	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-F	C(=O)NHCH ₃
504	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-F	C(=O)C(=O)OC ₂ H ₅
505	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-F	CH ₃
506	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-F	C ₂ H ₅
507	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-F	n-C ₃ H ₇
508	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-F	i-C ₃ H ₇
509	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-F	n-C ₄ H ₉
510	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-F	n-C ₆ H ₁₃
511	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-F	CH ₂ F
512	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-F	CHF ₂
513	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-F	CH ₂ CF ₃

化合物号	R ₂	(R ₅) _n	A-R ₇
514	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-F	CH ₂ CH=CH ₂
515	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-F	CH ₂ CH=CHCH ₃
516	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-F	CH ₂ CH=C(CH ₃) ₂
517	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-F	CH ₂ CH=CHCl
518	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-F	CH ₂ CH=CCl ₂
519	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂
520	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-F	CH ₂ C≡CH
521	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-F	CH ₂ Si(CH ₃) ₃
522	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-F	CH ₂ -c.propyl-2,2-Cl ₂
523	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-F	CH ₂ CN
524	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-F	CH ₂ COOC ₂ H ₅
525	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-F	CH(CH ₃)COOC ₂ H ₅
526	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-F	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃
527	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-F	CH ₂ C ₆ H ₄ -4-F
528	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-F	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-F
529	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-F	CH ₂ C ₆ H ₄ -2-F
530	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-F	C(=O)OC ₂ H ₅
531	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-F	C(=O)NHCH ₃
532	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-F	C(=O)C(=O)OC ₂ H ₅
533	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Br	CH ₃
534	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Br	C ₂ H ₅
535	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Br	n-C ₃ H ₇
536	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Br	i-C ₃ H ₇
537	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Br	n-C ₄ H ₉
538	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Br	n-C ₆ H ₁₃
539	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Br	CH ₂ F
540	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Br	CHF ₂
541	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Br	CH ₂ CF ₃
542	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Br	CH ₂ CH=CH ₂
543	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Br	CH ₂ CH=CHCH ₃

化合物号	R ₂	(R ₅) _n	A-R ₇
544	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Br	CH ₂ CH=C(CH ₃) ₂
545	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Br	CH ₂ CH=CHCl
546	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Br	CH ₂ CH=CCl ₂
547	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Br	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂
548	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Br	CH ₂ C≡CH
549	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Br	CH ₂ Si(CH ₃) ₃
550	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Br	CH ₂ -c.propyl-2,2-Cl ₂
551	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Br	CH ₂ CN
552	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Br	CH ₂ COOC ₂ H ₅
553	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Br	CH(CH ₃)COOC ₂ H ₅
554	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Br	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃
555	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Br	CH ₂ C ₆ H ₄ -4-F
556	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Br	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-F
557	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Br	CH ₂ C ₆ H ₄ -2-F
558	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Br	C(=O)OC ₂ H ₅
559	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Br	C(=O)NHCH ₃
560	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-Br	C(=O)C(=O)OC ₂ H ₅
561	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Br	CH ₃
562	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Br	C ₂ H ₅
563	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Br	n-C ₃ H ₇
564	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Br	i-C ₃ H ₇
565	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Br	n-C ₄ H ₉
566	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Br	n-C ₆ H ₁₃
567	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Br	CH ₂ F
568	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Br	CHF ₂
569	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Br	CH ₂ CF ₃
570	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Br	CH ₂ CH=CH ₂
571	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Br	CH ₂ CH=CHCH ₃
572	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Br	CH ₂ CH=C(CH ₃) ₂
573	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Br	CH ₂ CH=CHCl

化合物号	R ₂	(R ₅) _n	A-R ₇
574	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Br	CH ₂ CH=CCl ₂
575	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Br	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂
576	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Br	CH ₂ C≡CH
577	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Br	CH ₂ Si(CH ₃) ₃
578	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Br	CH ₂ -c.propyl-2,2-Cl ₂
579	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Br	CH ₂ CN
580	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Br	CH ₂ COOC ₂ H ₅
581	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Br	CH(CH ₃)COOC ₂ H ₅
582	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Br	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃
583	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Br	CH ₂ C ₆ H ₄ -4-F
584	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Br	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-F
585	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Br	CH ₂ C ₆ H ₄ -2-F
586	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Br	C(=O)OC ₂ H ₅
587	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Br	C(=O)NHCH ₃
588	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -3-Br	C(=O)C(=O)OC ₂ H ₅
589	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Br	CH ₃
590	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Br	C ₂ H ₅
591	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Br	n-C ₃ H ₇
592	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Br	i-C ₃ H ₇
593	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Br	n-C ₄ H ₉
594	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Br	n-C ₆ H ₁₃
595	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Br	CH ₂ F
596	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Br	CHF ₂
597	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Br	CH ₂ CF ₃
598	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Br	CH ₂ CH=CH ₂
599	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Br	CH ₂ CH=CH:CH ₃
600	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Br	CH ₂ CH=C(CH ₃) ₂
601	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Br	CH ₂ CH=CHCl
602	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Br	CH ₂ CH=CCl ₂
603	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Br	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂

化合物号	R ₂	(R ₅) _n	A-R ₇
604	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Br	CH ₂ C≡CH
605	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Br	CH ₂ Si(CH ₃) ₃
606	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Br	CH ₂ -c.propyl-2,2-Cl ₂
607	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Br	CH ₂ CN
608	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Br	CH ₂ COOC ₂ H ₅
609	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Br	CH(CH ₃)COOC ₂ H ₅
610	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Br	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃
611	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Br	CH ₂ C ₆ H ₄ -4-F
612	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Br	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-F
613	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Br	CH ₂ C ₆ H ₄ -2-F
614	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Br	C(=O)OC ₂ H ₅
615	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Br	C(=O)NHCH ₃
616	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-Br	C(=O)C(=O)OC ₂ H ₅
617	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2,4-Cl ₂	CH ₃
618	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2,4-Cl ₂	C ₂ H ₅
619	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2,4-Cl ₂	n-C ₃ H ₇
620	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2,4-Cl ₂	i-C ₃ H ₇
621	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2,4-Cl ₂	n-C ₄ H ₉
622	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2,4-Cl ₂	n-C ₆ H ₁₃
623	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2,4-Cl ₂	CH ₂ F
624	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2,4-Cl ₂	CHF ₂
625	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2,4-Cl ₂	CH ₂ CF ₃
626	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2,4-Cl ₂	CH ₂ CH=CH ₂
627	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2,4-Cl ₂	CH ₂ CH=CHCH ₃
628	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2,4-Cl ₂	CH ₂ CH=C(CH ₃) ₂
629	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2,4-Cl ₂	CH ₂ CH=CHCl
630	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2,4-Cl ₂	CH ₂ CH=CCl ₂
631	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2,4-Cl ₂	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂
632	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2,4-Cl ₂	CH ₂ C≡CH
633	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2,4-Cl ₂	CH ₂ Si(CH ₃) ₃

化合物号	R ₂	(R ₅) _n	A-R ₇
634	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2,4-Cl ₂	CH ₂ -c.propyl-2,2-Cl ₂
635	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2,4-Cl ₂	CH ₂ CN
636	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2,4-Cl ₂	CH ₂ COOC ₂ H ₅
637	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2,4-Cl ₂	CH(CH ₃)COOC ₂ H ₅
638	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2,4-Cl ₂	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃
639	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2,4-Cl ₂	CH ₂ C ₆ H ₄ -4-F
640	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2,4-Cl ₂	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-F
641	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2,4-Cl ₂	CH ₂ C ₆ H ₄ -2-F
642	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2,4-Cl ₂	C(=O)OC ₂ H ₅
643	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2,4-Cl ₂	C(=O)NHCH ₃
644	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2,4-Cl ₂	C(=O)C(=O)OC ₂ H ₅
645	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	CH ₃
646	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	C ₂ H ₅
647	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	n-C ₃ H ₇
648	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	i-C ₃ H ₇
649	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	n-C ₄ H ₉
650	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	n-C ₆ H ₁₃
651	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	CH ₂ F
652	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	CHF ₂
653	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	CH ₂ CF ₃
654	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	CH ₂ CH=CH ₂
655	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	CH ₂ CH=CHCH ₃
656	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	CH ₂ CH=C(CH ₃) ₂
657	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	CH ₂ CH=CHCl
658	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	CH ₂ CH=CCl ₂
659	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂
660	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	CH ₂ C≡CH
661	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	CH ₂ Si(CH ₃) ₃
662	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	CH ₂ -c.propyl-2,2-Cl ₂
663	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	CH ₂ CN

化合物号	R ₂	(R ₅) _n	A-R ₇
664	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	CH ₂ COOC ₂ H ₅
665	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	CH(CH ₃)COOC ₂ H ₅
666	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃
667	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	CH ₂ C ₆ H ₄ -4-F
668	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-F
669	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	CH ₂ C ₆ H ₄ -2-F
670	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	C(=O)OC ₂ H ₅
671	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	C(=O)NHCH ₃
672	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	C(=O)C(=O)OC ₂ H ₅
673	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2-Cl,4-Br	CH ₃
674	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2-Cl,4-Br	C ₂ H ₅
675	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2-Cl,4-Br	n-C ₃ H ₇
676	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2-Cl,4-Br	i-C ₃ H ₇
677	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2-Cl,4-Br	n-C ₄ H ₉
678	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2-Cl,4-Br	n-C ₆ H ₁₃
679	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2-Cl,4-Br	CH ₂ F
680	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2-Cl,4-Br	CHF ₂
681	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2-Cl,4-Br	CH ₂ CF ₃
682	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2-Cl,4-Br	CH ₂ CH=CH ₂
683	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2-Cl,4-Br	CH ₂ CH=CHCH ₃
684	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2-Cl,4-Br	CH ₂ CH=C(CH ₃) ₂
685	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2-Cl,4-Br	CH ₂ CH=CHCl
686	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2-Cl,4-Br	CH ₂ CH=CCl ₂
687	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2-Cl,4-Br	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂
688	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2-Cl,4-Br	CH ₂ C≡CH
689	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2-Cl,4-Br	CH ₂ Si(CH ₃) ₃
690	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2-Cl,4-Br	CH ₂ -c.propyl-2,2-Cl ₂
691	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2-Cl,4-Br	CH ₂ CN
692	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2-Cl,4-Br	CH ₂ COOC ₂ H ₅
693	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2-Cl,4-Br	CH(CH ₃)COOC ₂ H ₅

化合物号	R ₂	(R ₅) _n	A-R ₇
694	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2-Cl,4-Br	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃
695	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2-Cl,4-Br	CH ₂ C ₆ H ₄ -4-F
696	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2-Cl,4-Br	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-F
697	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2-Cl,4-Br	CH ₂ C ₆ H ₄ -2-F
698	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2-Cl,4-Br	C(=O)OC ₂ H ₅
699	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2-Cl,4-Br	C(=O)NHCH ₃
700	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -2-Cl,4-Br	C(=O)C(=O)OC ₂ H ₅
701	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-(-OCH ₂ O-)	CH ₃
702	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-(-OCH ₂ O-)	C ₂ H ₅
703	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-(-OCH ₂ O-)	n-C ₃ H ₇
704	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-(-OCH ₂ O-)	i-C ₃ H ₇
705	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-(-OCH ₂ O-)	n-C ₄ H ₉
706	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-(-OCH ₂ O-)	n-C ₆ H ₁₃
707	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-(-OCH ₂ O-)	CH ₂ F
708	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-(-OCH ₂ O-)	CHF ₂
709	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-(-OCH ₂ O-)	CH ₂ CF ₃
710	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-(-OCH ₂ O-)	CH ₂ CH=CH ₂
711	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-(-OCH ₂ O-)	CH ₂ CH=CHCH ₃
712	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-(-OCH ₂ O-)	CH ₂ CH=C(CH ₃) ₂
713	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-(-OCH ₂ O-)	CH ₂ CH=CHCl
714	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-(-OCH ₂ O-)	CH ₂ CH=CCl ₂
715	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-(-OCH ₂ O-)	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂
716	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-(-OCH ₂ O-)	CH ₂ C≡CH
717	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-(-OCH ₂ O-)	CH ₂ Si(CH ₃) ₃
718	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-(-OCH ₂ O-)	CH ₂ -c.propyl-2,2-Cl ₂
719	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-(-OCH ₂ O-)	CH ₂ CN
720	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-(-OCH ₂ O-)	CH ₂ COOC ₂ H ₅
721	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-(-OCH ₂ O-)	CH(CH ₃)COOC ₂ H ₅
722	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-(-OCH ₂ O-)	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃
723	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-(-OCH ₂ O-)	CH ₂ C ₆ H ₄ -4-F

化合物号	R ₂	(R ₅) _n	A-R ₇
724	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-(-OCH ₂ O-)	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-F
725	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-(-OCH ₂ O-)	CH ₂ C ₆ H ₄ -2-F
726	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-(-OCH ₂ O-)	C(=O)OC ₂ H ₅
727	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-(-OCH ₂ O-)	C(=O)NHCH ₃
728	CH ₃	4-OC ₆ H ₃ -3,4-(-OCH ₂ O-)	C(=O)C(=O)OC ₂ H ₅
729	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-SCH ₃	CH ₃
730	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-SCH ₃	C ₂ H ₅
731	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-SCH ₃	n-C ₃ H ₇
732	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-SCH ₃	i-C ₃ H ₇
733	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-SCH ₃	n-C ₄ H ₉
734	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-SCH ₃	n-C ₆ H ₁₃
735	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-SCH ₃	CH ₂ F
736	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-SCH ₃	CHF ₂
737	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-SCH ₃	CH ₂ CF ₃
738	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-SCH ₃	CH ₂ CH=CH ₂
739	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-SCH ₃	CH ₂ CH=CHCH ₃
740	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-SCH ₃	CH ₂ CH=C(CH ₃) ₂
741	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-SCH ₃	CH ₂ CH=CHCl
742	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-SCH ₃	CH ₂ CH=CCl ₂
743	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-SCH ₃	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂
744	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-SCH ₃	CH ₂ C≡CH
745	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-SCH ₃	CH ₂ Si(CH ₃) ₃
746	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-SCH ₃	CH ₂ -c.propyl-2,2-Cl ₂
747	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-SCH ₃	CH ₂ CN
748	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-SCH ₃	CH ₂ COOC ₂ H ₅
749	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-SCH ₃	CH(CH ₃)COOC ₂ H ₅
750	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-SCH ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃
751	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-SCH ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -4-F
752	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-SCH ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-F
753	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-SCH ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -2-F

化合物号	R ₂	(R ₅) _n	A-R ₇
754	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-SCH ₃	C(=O)OC ₂ H ₅
755	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-SCH ₃	C(=O)NHCH ₃
756	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-SCH ₃	C(=O)C(=O)OC ₂ H ₅
757	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-OCH ₃	CH ₃
758	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-OCH ₃	C ₂ H ₅
759	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-OCH ₃	n-C ₃ H ₇
760	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-OCH ₃	i-C ₃ H ₇
761	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-OCH ₃	n-C ₄ H ₉
762	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-OCH ₃	n-C ₆ H ₁₃
763	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-OCH ₃	CH ₂ F
764	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-OCH ₃	CHF ₂
765	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-OCH ₃	CH ₂ CF ₃
766	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-OCH ₃	CH ₂ CH=CH ₂
767	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-OCH ₃	CH ₂ CH=CHCH ₃
768	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-OCH ₃	CH ₂ CH=C(CH ₃) ₂
769	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-OCH ₃	CH ₂ CH=CHCl
770	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-OCH ₃	CH ₂ CH=CCl ₂
771	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-OCH ₃	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂
772	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-OCH ₃	CH ₂ C≡CH
773	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-OCH ₃	CH ₂ Si(CH ₃) ₃
774	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-OCH ₃	CH ₂ -c.propyl-2,2-Cl ₂
775	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-OCH ₃	CH ₂ CN
776	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-OCH ₃	CH ₂ COOC ₂ H ₅
777	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-OCH ₃	CH(CH ₃)COOC ₂ H ₅
778	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-OCH ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃
779	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-OCH ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -4-F
780	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-OCH ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-F
781	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-OCH ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -2-F
782	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-OCH ₃	C(=O)OC ₂ H ₅
783	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-OCH ₃	C(=O)NHCH ₃

化合物号	R ₂	(R ₅) _n	A-R ₇
784	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-OCH ₃	C(=O)C(=O)OC ₂ H ₅
785	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-叔丁基	CH ₃
786	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-叔丁基	C ₂ H ₅
787	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-叔丁基	n-C ₃ H ₇
788	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-叔丁基	i-C ₃ H ₇
789	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-叔丁基	n-C ₄ H ₉
790	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-叔丁基	n-C ₆ H ₁₃
791	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-叔丁基	CH ₂ F
792	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-叔丁基	CHF ₂
793	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-叔丁基	CH ₂ CF ₃
794	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-叔丁基	CH ₂ CH=CH ₂
795	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-叔丁基	CH ₂ CH=CHCH ₃
796	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-叔丁基	CH ₂ CH=C(CH ₃) ₂
797	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-叔丁基	CH ₂ CH=CHCl
798	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-叔丁基	CH ₂ CH=CCl ₂
799	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-叔丁基	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂
800	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-叔丁基	CH ₂ C≡CH
801	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-叔丁基	CH ₂ Si(CH ₃) ₃
802	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-叔丁基	CH ₂ -c.propyl-2,2-Cl ₂
803	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-叔丁基	CH ₂ CN
804	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-叔丁基	CH ₂ COOC ₂ H ₅
805	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-叔丁基	CH(CH ₃)COOC ₂ H ₅
806	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-叔丁基	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃
807	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-叔丁基	CH ₂ C ₆ H ₄ -4-F
808	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-叔丁基	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-F
809	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-叔丁基	CH ₂ C ₆ H ₄ -2-F
810	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-叔丁基	C(=O)OC ₂ H ₅
811	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-叔丁基	C(=O)NHCH ₃
812	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-叔丁基	C(=O)C(=O)OC ₂ H ₅
813	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-CF ₃	CH ₃

化合物号	R ₂	(R ₅) _n	A-R ₇
814	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-CF ₃	C ₂ H ₅
815	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-CF ₃	n-C ₃ H ₇
816	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-CF ₃	i-C ₃ H ₇
817	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-CF ₃	n-C ₄ H ₉
818	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-CF ₃	n-C ₆ H ₁₃
819	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-CF ₃	CH ₂ F
820	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-CF ₃	CHF ₂
821	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-CF ₃	CH ₂ CF ₃
822	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-CF ₃	CH ₂ CH=CH ₂
823	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-CF ₃	CH ₂ CH=CHCH ₃
824	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-CF ₃	CH ₂ CH=C(CH ₃) ₂
825	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-CF ₃	CH ₂ CH=CHCl
826	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-CF ₃	CH ₂ CH=CCl ₂
827	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-CF ₃	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂
828	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-CF ₃	CH ₂ C≡CH
829	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-CF ₃	CH ₂ Si(CH ₃) ₃
830	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-CF ₃	CH ₂ -c.propyl-2,2-Cl ₂
831	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-CF ₃	CH ₂ CN
832	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-CF ₃	CH ₂ COOC ₂ H ₅
833	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-CF ₃	CH(CH ₃)COOC ₂ H ₅
834	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-CF ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃
835	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-CF ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -4-F
836	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-CF ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-F
837	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-CF ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -2-F
838	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-CF ₃	C(=O)OC ₂ H ₅
839	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-CF ₃	C(=O)NHCH ₃
840	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -4-CF ₃	C(=O)C(=O)OC ₂ H ₅
841	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-CF ₃	CH ₃
842	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-CF ₃	C ₂ H ₅
843	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-CF ₃	n-C ₃ H ₇

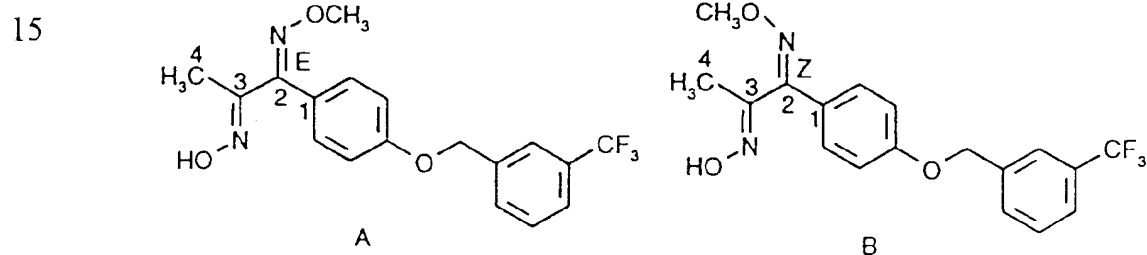
化合物号	R ₂	(R ₅) _n	A-R ₇
844	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-CF ₃	i-C ₃ H ₇
845	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-CF ₃	n-C ₄ H ₉
846	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-CF ₃	n-C ₆ H ₁₃
847	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-CF ₃	CH ₂ F
848	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-CF ₃	CHF ₂
849	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-CF ₃	CH ₂ CF ₃
850	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-CF ₃	CH ₂ CH=CH ₂
851	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-CF ₃	CH ₂ CH=CHCH ₃
852	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-CF ₃	CH ₂ CH=C(CH ₃) ₂
853	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-CF ₃	CH ₂ CH=CHCl
854	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-CF ₃	CH ₂ CH=CCl ₂
855	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-CF ₃	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂
856	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-CF ₃	CH ₂ C≡CH
857	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-CF ₃	CH ₂ Si(CH ₃) ₃
858	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-CF ₃	CH ₂ -c.propyl-2,2-Cl ₂
859	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-CF ₃	CH ₂ CN
860	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-CF ₃	CH ₂ COOC ₂ H ₅
861	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-CF ₃	CH(CH ₃)COOC ₂ H ₅
862	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-CF ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃
863	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-CF ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -4-F
864	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-CF ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-F
865	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-CF ₃	CH ₂ C ₆ H ₄ -2-F
866	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-CF ₃	C(=O)OC ₂ H ₅
867	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-CF ₃	C(=O)NHCH ₃
868	CH ₃	4-OC ₆ H ₄ -2-CF ₃	C(=O)C(=O)OC ₂ H ₅
869	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-Cl	CH ₃
870	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-Cl	C ₂ H ₅
871	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-Cl	n-C ₃ H ₇
872	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-Cl	i-C ₃ H ₇
873	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-Cl	n-C ₄ H ₉

化合物号	R ₂	(R ₅) _n	A-R ₇
874	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-Cl	n-C ₆ H ₁₃
875	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-Cl	CH ₂ F
876	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-Cl	CHF ₂
877	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-Cl	CH ₂ CF ₃
878	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-Cl	CH ₂ CH=CH ₂
879	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-Cl	CH ₂ CH=CHCH ₃
880	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-Cl	CH ₂ CH=C(CH ₃) ₂
881	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-Cl	CH ₂ CH=CHCl
882	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-Cl	CH ₂ CH=CCl ₂
883	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂
884	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-Cl	CH ₂ C≡CH
885	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-Cl	CH ₂ Si(CH ₃) ₃
886	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-Cl	CH ₂ -c.propyl-2,2-Cl ₂
887	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-Cl	CH ₂ CN
888	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-Cl	CH ₂ COOC ₂ H ₅
889	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-Cl	CH(CH ₃)COOC ₂ H ₅
890	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-Cl	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃
891	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-Cl	CH ₂ C ₆ H ₄ -4-F
892	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-Cl	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-F
893	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-Cl	CH ₂ C ₆ H ₄ -2-F
894	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-Cl	C(=O)OC ₂ H ₅
895	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-Cl	C(=O)NHCH ₃
896	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₄ -4-Cl	C(=O)C(=O)OC ₂ H ₅
797	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	CH ₃
898	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	C ₂ H ₅
899	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	n-C ₃ H ₇
900	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	i-C ₃ H ₇
901	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	n-C ₄ H ₉
902	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	n-C ₆ H ₁₃
903	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	CH ₂ F

化合物号	R ₂	(R ₅) _n	A-R ₇
904	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	CHF ₂
905	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	CH ₂ CF ₃
906	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	CH ₂ CH=CH ₂
907	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	CH ₂ CH=CHCH ₃
908	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	CH ₂ CH=C(CH ₃) ₂
909	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	CH ₂ CH=CHCl
910	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	CH ₂ CH=CCl ₂
911	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂
912	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	CH ₂ C≡CH
913	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	CH ₂ Si(CH ₃) ₃
914	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	CH ₂ -c.propyl-2,2-Cl ₂
915	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	CH ₂ CN
916	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	CH ₂ COOC ₂ H ₅
917	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	CH(CH ₃)COOC ₂ H ₅
918	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-CF ₃
919	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	CH ₂ C ₆ H ₄ -4-F
920	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	CH ₂ C ₆ H ₄ -3-F
921	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	CH ₂ C ₆ H ₄ -2-F
922	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	C(=O)OC ₂ H ₅
923	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	C(=O)NHCH ₃
924	CH ₃	4-OCH ₂ C ₆ H ₃ -3,4-Cl ₂	C(=O)C(=O)OC ₂ H ₅

在表 2.1 和 2.2 中, 也分别表示出化合物 1 - [4 - (3 - 三氟甲基苯基甲氧基) - 苯基] - 1, 2 - 丙二酮 1 - E - [甲基肼] - 2 - 肼和 1 - [4 - (3 - 三氟甲基苯基甲氧基) - 苯基] - 1, 2 - 丙二酮 1 - Z - [甲基肼] - 2 - 肼(根据已知一种方法制备出, 并分离制备中形成 E/Z 异构体混合物), 或者 2 - [[(1 - 甲基 - 2 - (4 - (3 - 三氟甲基苯基甲氧基) - 苯基) - 2 - E - [(甲氧基亚氨基)亚乙基)氨基]氧]甲基] - α - (甲氧基亚氨基) - 苯基乙酸甲酯(表 1 中化合物 A225)的 ^{13}C - 核磁共振数据。表 2.1 中化合物 A 的 1 位和 4 位原子的化学位移和表 2.2 中对应位置原子的化学位移相似, 这就肯定了式 I 化合物的 E 构型。

表 2.1: 1 - [4 - (3 - 三氟甲基苯基甲氧基) - 苯基] - 1, 2 - 丙二酮 1 - E - [甲基肼] - 2 - 肼(A)和 1 - [4 - (3 - 三氟甲基苯基甲氧基) - 苯基] - 1, 2 - 丙二酮 1 - Z - [甲基肼] - 2 - 肼(B)的 ^{13}C - 核磁共振位移和 $^1\text{J}_{\text{CC}}$ 偶合常数。

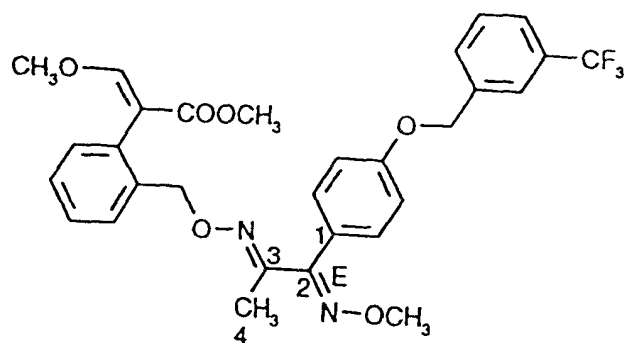


20

化合物	原子标号	位移 δ (ppm)	偶合 $^1\text{J}_{\text{CC}}$ (Hz)
A	1	125.6	$\text{J}_{12}=56.0$
	3	155.0	$\text{J}_{23}=72.0$
	4	10.1	$\text{J}_{34}=43.0$
B	1	127.8	$\text{J}_{12}=69.0$
	3	152.1	$\text{J}_{23}=56.5$
	4	14.4	$\text{J}_{34}=41.5$

表 2.2: 2 - [[(1 - 甲基 - 2 - (4 - (3 - 三氟甲基苯基甲氧基) - 苯基) - 2 - E - [甲氧基亚基]亚乙基)氨基]氧]甲基] - α - (甲氧基亚甲基) - 苯基乙酸甲酯(化合物 1.225)的 ^{13}C - 核磁共振位移。

5



原子标号	位移 δ (ppm)
1	124.9
2	155.1
3	155.0
4	11.1