

(19)



(10) **LT IP866 A**

(12) **PARAIŠKOS APRAŠYMAS**

- (21) Paraiškos numeris: **IP866** (51) Int. Cl. (2006): **A01N 31/00**
A01N 33/00
A01N 37/10
A01N 43/34
A01N 43/48
A01N 43/64
- (22) Paraiškos padavimo data: **1993 08 17** **C07C 67/00**
C07C 69/00
C07D 213/00
C07D 215/00
C07D 239/00
C07D 241/00
C07D 249/00
- (41) Paraiškos paskelbimo data: **1995 03 27**
- (62) Paraiškos, iš kurios dokumentas išskirtas, numeris: —
- (86) Tarptautinės paraiškos numeris: —
- (86) Tarptautinės paraiškos padavimo data: —
- (85) Nacionalinio PCT lygio procedūros pradžios data: —
- (30) Prioritetas: **8721706, 1987 09 15, GB**
8801485, 1988 01 22, GB
8806317, 1988 03 17, GB
8814734, 1988 06 21, GB
4743319, 1990 03 12, SU
- (71) Pareiškėjas:
IMPERIAL CHEMICAL INDUSTRIES PLC, Imperial Chemical House, Millbank,
London SW1P 3JF, GB
- (72) Išradėjas:
Vivienne Margaret ANTHONY, GB
Stephen Paul HEANEY, GB
Kevin BEAUMENT, GB
John Martin CLOUGH, GB
Patrick Jelf CROWLEY, GB
Christopher Richard Ayles GODFREY, GB
Paul John DEFRAINE, GB
Alan John BUCKLEY, GB
Michael Gordon HUTCHINGS, GB
Ian FERGUSON, GB
- (74) Patentinis patikėtinis/atstovas:
Marius JAKULIS - JASON, AAA Baltic Service Company, Jasinskio g. 16B,
Biurų centras Victoria, LT-01112 Vilnius, LT

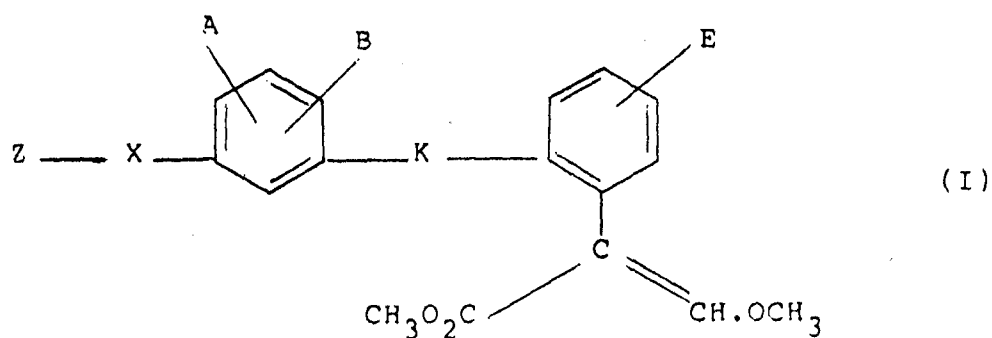
- (54) Pavadinimas:
Akrilo rūgšties dariniai, jų gavimo būdai ir panaudojimas
- (57) Referatas:
—

AKRILO RŪGŠTIES DARINIAI,
JŲ GAVIMO BŪDAI IR
PANAUDOJIMAS

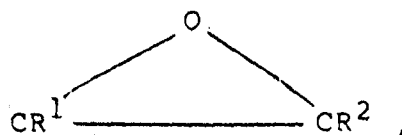
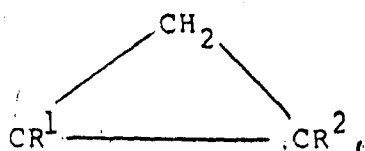
Šis išradimas skirtas akrilo rūgšties dariniams, naudojamiems kaip fungicidai, jų gavimo būdams, fungicidinėms kompozicijoms, kurių sudėtyje yra šių darinių, ir jų panaudojimo kovai su grybeliais, ypač grybelinėmis augalų infekcijomis, būdams.

EP-A-0178826 aprašyti akrilo rūgšties fungicidiniai dariniai ir paminėtas junginys (E)-metilo 2-[2-(3-fenoksifenoksi)-fenil]-3-metoksipropenoatas.

Šiame išradime siūlomas junginys, kurio formulė (I):



ir jo stereoizomerai, kur K yra deguonis arba siera; Z yra gali - mai pakeistas arilas arba galimai pakeistas heteroarilas; X yra O, $S(O)_n$, NR^4 , CR^1R^2 , CHR^5 , CO, $CR^1(OR^2)$, $C=CR^1R^2$, CHR^1CHR^2 , $CR^1=CR^2$, $CHR^1CR^2=CH$, $C\equiv C$, $OCHR^1$, CHR^1O , $OCHR^1O$, $S(O)_nCHR^1$, $S(O)_nCHR^1O$, $CHR^1S(O)_n$, CHR^1OSO_2 , NR^4CHR^1 , CHR^1NR^4 , CO_2 , O_2C , SO_2O , OSO_2 , $CO.CO$, $COCHR^1$, $COCHR^1O$, CHR^1CO , $CHOH.CHR^1$, $CHR^1.CHOH$,



CONR^4 , OCONR^4 , NR^4CO , CSNR^4 , OCS.NR^4 , SCO.NR^4 , NR^4CO_2 , NR^4CS ,
 NR^4COS , NR^4CONR^4 , $\text{S(O)}_n\text{NR}^4$, $\text{NR}^4\text{S(O)}_n$, CS_2 , S_2C , CO.S , SCO.N=N ,
 N=CR^1 , $\text{CR}^1=\text{N}$, $\text{CHR}^1\text{CHR}^2\text{CH(OH)}$, CHR^1OCO , CHR^1SCO , $\text{CHR}^1\text{NR}^4\text{CO}$,
 $\text{CHR}^1\text{NR}^4\text{COR}^4$, $\text{CHR}^1\text{CHR}^2\text{CO}$, O.N=CR^1 , $\text{CHR}^1\text{O.N=CR}^2$, $\text{CO.OCR}^1\text{R}^2$,
 $\text{CHR}^1\text{CHR}^2\text{CHR}^3$, $\text{OCHR}^1\text{CHR}^2$, $(\text{CH}_2)_m\text{O}$, $\text{CHR}^1\text{OCHR}^2$, $\text{CHR}^1\text{CHR}^2\text{O}$,
 $\text{OCHR}^1\text{CHR}^2\text{O}$, $\text{S(O)}_n\text{CHR}^1\text{CHR}^2$, $\text{CHR}^1\text{S(O)}_n\text{CHR}^2$, $\text{CHR}^1\text{CHR}^2\text{S(O)}_n$,
 $\text{CR}^1=\text{NNR}^4$, $\text{NR}^4\text{N=CR}^1$, $\text{CHR}^1\text{CONR}^2$, $\text{CHR}^1\text{OCO.NR}^2$, $\text{CH=CHCH}_2\text{O}$,
 $\text{COCHR}^1\text{CHR}^2\text{O}$, arba $(\text{R}^5)_2\text{P}^+\text{CHR}^2\text{Q}^-$; A, B ir E gali būti vienodi
 arba skirtingi, yra H, hidroksilas, halogenas, C_{1-4} alkilas,
 C_{1-4} alkoksi, C_{1-4} halogenalkilas, C_{1-4} halogenalkoksi, C_{1-4} al-
 kilkarbonilas, C_{1-4} alkoksikarbonilas, fenoksi, nitro arba cia-
 no; R^1 , R^2 ir R^3 , kurie gali būti tokie patys arba skirtingi,
 yra H, C_{1-4} alkilas arba fenilas; R^4 yra H, C_{1-4} alkilas arba
 COR^1 ; R^5 yra galimai pakeistas fenilas; Q^- yra halogeno anijonas;
 n yra 0,1 arba 2, o m yra 3, 4 arba 5; su sąlyga, jei Z yra ne-
 pakeistas fenilas, o X ir K yra deguonis, A, B ir E visi vienu
 metu negali būti vandenilis.

Ypatingai geri yra tie junginiai, kuriuose X yra O, ypač,
 kai Z yra galimai pakeistas heteroarilas, S, SO_2 , NH, NCH_3 ,
 NCOCH_3 , $\text{CH(C}_6\text{H}_5)$, CH(OH) , CH=CH , OCH_2 , CH_2O , $\text{CH(CH}_3)\text{O}$, S(O)CH_2 ,
 $\text{S(O)}_2\text{CH}_2$, SO_2O , $\text{CO.CH}_2\text{O}$ arba CO_2CH_2 ir ypatingai, O,
 CH_2O , OCH_2 , SO_2O arba CH(OH) .

Išradimo junginiuose yra bent viena dviguba anglis-anglis
 jungtis, ir kartais jie gaunami, kaip geometrinių izomerų miš-
 niai. Tačiau šiuos mišinius galima atskirti į atskirus izomeras,
 ir šis išradimas apima tokius izomeras, o taip pat jų mišinius
 bet kuriuo santykiu, įskaitant tuos, kurie daugiausia susideda iš
 iš (Z)-izomero ir tuos, kuriuose daugiausia yra (E)-izomero.

Atskiri izomerai, kurie gaunami nesimetriškai pakeičiant

dvigubą propenoato grupės jungtį, paprastai pagal Kano-Ingoldo-Prelogo sistemą, pilnai aprašytą literatūroje (J. March, "Advanced Organic Chemistry", 3 leid., Wiley-Interscience, p. 109 ir toliau) yra žymimi "E" ir "Z".

Paprastai vienas iš izomerų yra efektyvesnis, kaip fungi - cidas, už kitą, kaip taisyklė, efektyvesnis yra tas izomeras, kurio grupės $-CO_2CH_3$ ir $-OCH_3$ yra skirtingose propenoato grupės olefininės jungties pusėse ((E)-izomeras). Tokie (E)-izomerai sudaro rekomenduojamų išradimo junginių grupę.

Pakaitas Z (I) formulės junginiuose yra galimai pakeistas arilu arba galimai pakeistas heteroarilu. Jei leidžia valentinumas, galimai pakeistas arilo arba heteroarilo grupės gali turėti iki 5 pakaitų. Terminas "arilas" apima fenilą ir ypač nafilą. Terminas "heteroarilas" apima 5- ir 6-nares heterociklinės grupės, turinčias vieną arba keletą iš tokių heteroatomų: O, S ir N (geriau S arba N), kondensuotas su benzoinėmis ir heteroaromatinėmis ciklinėmis sistemomis, o taip pat kiekvienu atveju atitinkamus N-oksidas. Z atitinkančių heteroarilo grupių pavyzdžiai apima piridinilą, pirimidinilą, pirazinilą, piridazinilą, 1,2,3-, 1,2,4- ir 1,3,5-triazinilą, 1,2,4,5-tetrazinilą, 1,2,3- ir 1,2,4-triazolilą, tienilą, furilą, pirolilą, tiazolilą, oksadiazolilą, chinolinilą, izochinolinilą, chinoksalinilą, benzotienilą, benzoksazolilą ir benzotiazolilą ir kur galima atitinkamus N-oksidas. Pakaitai, kurie gali būti galimai pakeistose arilo ir heteroarilo dalyse apima vieną ar daugiau iš tokių grupių: halogeno, okso, merkaptio, C_{1-4} alkilo (ypač metilo ir etilo), C_{2-4} alkenilo (ypač alilo), C_{2-4} alkinilo (ypač propargilo), C_{1-4} alkoksi (ypač metoksi), C_{2-4} alkeniloksi (ypač aliloksi), C_{2-4} alkiniloksi (ypač propargiloksi), halogen(C_{1-4})alkilo (ypač tri-

fluormetilo), halogen(C_{1-4})alkoksi (ypač trifluormetoksi), C_{1-4} alkiltio (ypač metiltio), oks(C_{1-4})alkilo, C_{1-4} alkoksi(C_{1-4})alkilo, C_{3-6} cikloalkilo, C_{3-6} cikloalkil(C_{1-4})alkilo, galimai pakeisto arilo (ypač galimai pakeisto fenilo), galimai pakeisto heteroarilo (ypač galimai pakeisto piridinilo arba pirimidinilo), galimai pakeisto ariloksi (ypač galimai pakeisto fenoksi), galimai pakeisto heteroariloksi (ypač galimai pakeisto piridiniloksi arba pirimidiniloksi), galimai pakeisto aril(C_{1-4})alkilo (ypač galimai pakeisto benzilo, galimai pakeisto fenetilo ir galimai pakeisto fenil-n-propilo), kuriame alkilo dalis yra galimai pakeista oks, galimai pakeisto heteroaril(C_{1-4})alkilo (ypač galimai pakeisto piridinil- arba pirimidinil(C_{1-4})alkilo), galimai pakeisto aril(C_{2-4})alkenilo (ypač galimai pakeisto feniletlenilo), galimai pakeisto heteroaril(C_{2-4})alkenilo (ypač galimai pakeisto piridiniletlenilo arba pirimidiniletlenilo), galimai pakeisto aril(C_{1-4})alkoksi (ypač galimai pakeisto benziloksi), galimai pakeisto heteroaril(C_{1-4})alkoksi (ypač galimai pakeisto piridinil- arba pirimidinil(C_{1-4})alkoksi), galimai pakeisto ariloksi(C_{1-4})alkilo (ypač fenoksimetilo), galimai pakeisto heteroariloksi(C_{1-4})alkilo (ypač galimai pakeisto piridiniloksi- arba pirimidiniloksi- (C_{1-4})alilo), aciloksi, įskaitant C_{1-4} alkanoiloksi (ypač acetiloksi) ir benzoiloksi, ciano, tiocianato, nitro, $-NR'R''$, $-NHCOR'$, $-NHCONR'R''$, $-CONR'R''$, $-COOR'$, $-OSO_2R'$, $-SO_2R'$, $-COR'$, $-CR'=NR''$ arba $-N=CR'R''$, kur R' ir R'' yra nepriklausomai vandenilis, C_{1-4} alkilas, C_{1-4} alkoksi, C_{1-4} alkiltio, C_{3-6} cikloalkilas, C_{3-6} cikloalkil(C_{1-4})alkilas, fenilas arba benzilas, be to, fenilo ir benzilo grupės galimai pakeistos, C_{1-4} alkilu arba C_{1-4} alkoksi.

Pakaitai, kurie gali būti bet kurių iš aukščiau užrašytų arilo arba heteroarilo žieduose arba R^5 fenilo žiede apima vieną arba kelias grupes iš tokių: halogeno, oks, merkaptio, C_{1-4} alki-

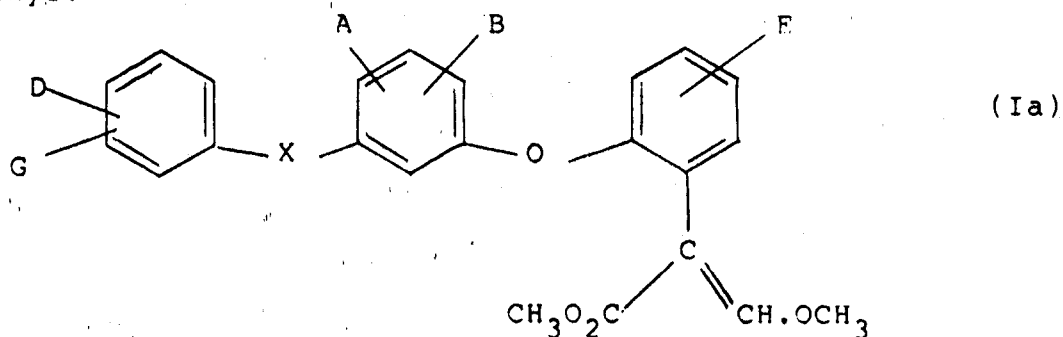
5

lo, C_{2-4} alkenilo, C_{2-4} alkinilo, C_{1-4} alkoksi, C_{2-4} alkeniloksi, C_{2-4} alkiniloksi, halogen(C_{1-4}) alkilo, halogen(C_{1-4}) alkoksi, C_{1-4} alkiltio, oksi(C_{1-4}) alkilo, C_{1-4} alkoksi(C_{1-4}) alkilo, C_{3-6} cikloalkilo, C_{3-6} cikloalkil(C_{1-4}) alkilo, alkanoiloksi, benziloksi, ciano, tiocianato, nitro, $-NR'R''$, $-NHCOR'$, $-NHCONR'R''$, $-CONR'R''$, $-COOR'$, $-OSO_2R'$, $-SO_2R'$, $-COR'$, $-CR'=NR''$ arba $-N=CR'R''$, kur R' ir R'' pažymėti aukščiau.

Kai bet kuriš iš A, B ir E pakaitų yra C_{1-4} alkilas arba C_{1-4} alkoksi, alkilo dalis gali būti tiesios arba šakotos grandinės, t.y. gali būti metilas, etilas, n- arba izo-propilas, arba n-, sek-, izo- arba t-butilas. Kitos nuorodos į C_{1-4} alkilo ir C_{1-4} alkoksi grupės turi tas pačias reikšmes. C_{2-4} alkenilo grupės gali būti tiesios ar šakotos grandinės ir, kur tinka, gali būti (E)- arba (Z)- konfigūracijos. Tokios grupės yra vinilo, alilo, $-C(CH_3):CH_2$, ir (E)- ir (Z)-krotilo.

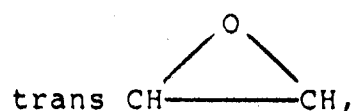
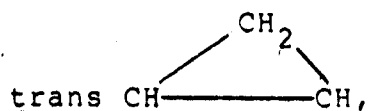
Geriau kai A ir B pakaitai yra 4- ir 5-oje fenilo žiedo pozicijose, o pakaitas E yra maža grupė arba vienintelis atomas, toks kaip vandenilis arba halogenas. Paprastai, E ir vienas arba abu iš A ir B yra vandenilis.

Pagal vieną iš išradimo aspektų pateikiamas (Ia) formulės junginys:



kur X yra O, $S(O)_n$, kur n yra 0, 1 arba 2, NH, NCH_3 , NCH_2CH_3 , $NCOCH_3$, $NCH(CH_3)_2$, CH_2 , $CH(CH_3)$, $C(CH_3)_2$, CO, $C=CH_2$, $C=C(CH_3)_2$, CH_2CH_2 , $CH(CH_3)CH_2$, $CH_2CH(CH_3)$, (E)- $CH=CH$, (Z)- $CH=CH$,

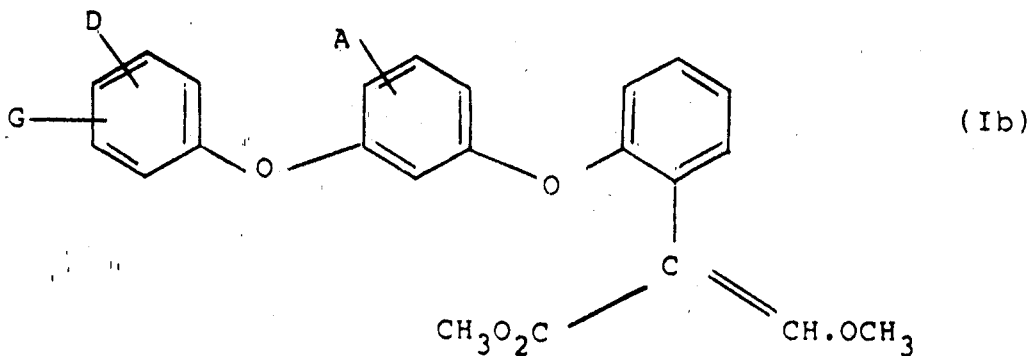
(E)-C(CH₃)=C(CH₃), C≡C, OCH₂, OCH(CH₃), (CH₂)_pO, kur p yra nuo 1 iki 5, CH(CH₃)O, SCH₂, SCH(CH₃), S(O)CH₂, S(O)CH(CH₃), S(O)₂CH₂, S(O)₂CH(CH₃), CH₂S, CH(CH₃)S, CH₂S(O), CH(CH₃)S(O), CH₂S(O)₂, CH(CH₃)S(O)₂, NHCH₂, N(CH₃)CH₂, N(COCH₃)CH₂, NHCH(CH₃), N(COCH₃)CH(CH₃), CH₂NH, CH₂N(CH₃), CH₂N(COCH₃), CH(CH₃)NH, CH(CH₃)N(CH₃), CH(CH₃)N(COCH₃), CO₂, O₂C, SO₂O, OSO₂, CO.CO, COCH₂, COCH(CH₃), CH₂CO, CH(CH₃)CO, CH(OH)CH₂, CH(OH)CH(CH₃), CH₂CH(OH), CH(CH₃)CH(OH), CONH, CON(CH₃), CON(CH₂CH₂CH₃), CON(CHO), CON(COCH₃), NHCO, N(CH₃)CO, N(CH₂CH₃)CO, N(CHO)CO, N(COCH₃)CO, CSN(CH₃), CSNH, NHCS, N(CH₃)CS, SO₂NH, SO₂N(CH₃), NHSO₂, N(CH₃)SO₂, N(CH₂CH₃)SO₂, CS₂, S₂C, COS, SCO, (E)-N=CH, (E)-N=C(CH₃), (E)-CH₂=N, (E)-C(CH₃)=N, CH₂CH₂CH₂, CH(CH₃)CH₂CH₂, CH₂CH(CH₃)CH₂, CH₂CH₂CH(CH₃), OCH₂CH₂, CH₂OCH₂, SCH₂CH₂, S(O)CH₂CH₂, S(O)₂CH₂CH₂, CH₂SCH₂, CH₂S(O)CH₂, CH₂S(O)₂CH₂, CH₂CH₂S, CH₂CH₂S(O), CH₂CH₂S(O)₂, (E)-CH=NNH, (E)-C(CH₃)=NNH, (E)-CH=NN(CH₃), (E)-NHN=CH, (E)-NHN=C(CH₃), (E)-N(CH₃)N=CH, CH₂CONH, CH(CH₃)CON(CH₃), CH(CH₃)CON(CH₃), (E)-CH=CHCH₂O, COCH₂CH₂O,



CH(C₆H₅), COCH₂O, CH(OH), CO₂CH₂, (C₆H₅)₂P⁺CH₂Br⁻, CH₂OCO, CH₂NHCO, CH₂SCO, OCH₂O, OCH₂CH₂O, S(O)CH₂O, COCH(CH₃)O, (E)-CH₂ON=CH, (Z)-CH₂ON=CH, CH₂CH₂CH(OH), (E)-CH₂CH=CH, C(CH₃)(OH), CH₂OSO₂, CH₂NHCO.NH, OCO.NH, NHCO.NH arba CH₂OCO.NH; A yra H, oksis, halogenas, C₁₋₄ alkilas, C₁₋₄ alkoksi, trifluormetilas, nitro, ciano, acetilas arba fenoksi; B ir E yra H arba halogenas; D yra H, oksis, halogenas, C₁₋₄ alkilas, C₁₋₄ alkoksi, nitro, ciano, halogen(C₁₋₄) alkilas (ypač trifluormetilas), halogen(C₁₋₄) alkoksi (ypač trifluormetoksi), fenilas, fenoksi, NHCOR⁶, NHSO₂R⁶, NR⁷R⁸, CO₂R⁷, kur R⁶ yra C₁₋₄ alkilas (ypač metilas) arba fenilas, o R⁷ ir R⁸ yra nepriklausomai H arba C₁₋₄ alkilas, arba CH₃O₂C.C=CH.OCH₃; o

G yra H, halogenas, C_{1-4} alkilas, C_{1-4} alkoksi arba nitro; arba D ir G, kai jie gretutiniai, susijungia, sudarydami benzolo arba piridino žiedą, su sąlyga, jei A, B, D, E ir G visi yra vandenilis, tai X nėra deguonis. Konkrečiau, šis aspektas apima tuos (I) formulės junginius, kur X yra O, $S(O)_n$, kur n yra 0, 1 arba 2, $CH_2 \cdot CH_2CH_2$, OCH_2 , $(CH_2)_pO$, kur p yra sveikas skaičius nuo 1 iki 5, OCH_2O , OCH_2CH_2O , $CH(OH)$, CO, CO_2 , O_2C , COS, SCO, CO_2CH_2 , SO_2O , (E)-CH=CH, (Z)-CH=CH, (E)-CH=CHCH₂O, $CH(CH_3)O$, SCH₂, SCH₂O, S(O)CH₂, S(O)CH₂O, S(O)₂CH₂, CONH, NH, NCH₃, CH₂NH, N(CH₃)CH₂, NHCO, CH₂OCO.NH, NCOCH₃, NHSO₂, (E)-N=N, (Z)-N=N, (E)-N=CH, (E)-N(CH₃)N=CH, (E)-CH₂ON=N, (Z)-CH₂ON=CH, $CH(C_6H_5)$, COCH₂O, COCH(CH₃)O, CH₂OCO, CH₂NHCO, CH₂SCO arba $(C_6H_5)_2P^+CH_2Br^-$; A yra H, oksis, halogenas, C_{1-4} alkilas, C_{1-4} alkoksi, acetilas arba fenoksi; B ir E abu yra H; D yra H, oksis, halogenas, C_{1-4} alkilas, C_{1-4} alkoksi, nitro, ciano trifluormetilas, fenilas, fenoksi, amino arba $CH_3O_2C \cdot C=CH \cdot OCH_3$; o G yra H, halogenas, C_{1-4} alkilas, nitro; arba, kai D ir G yra gretutiniai, jie susijungia, sudarydami benzolo arba piridino žiedą, su sąlyga, jei A, B, D, E ir G visi yra H, X nėra deguonis.

Pagal dar vieną iš išradimo aspektų pateikiami junginiai, kurių formulė (Ib):

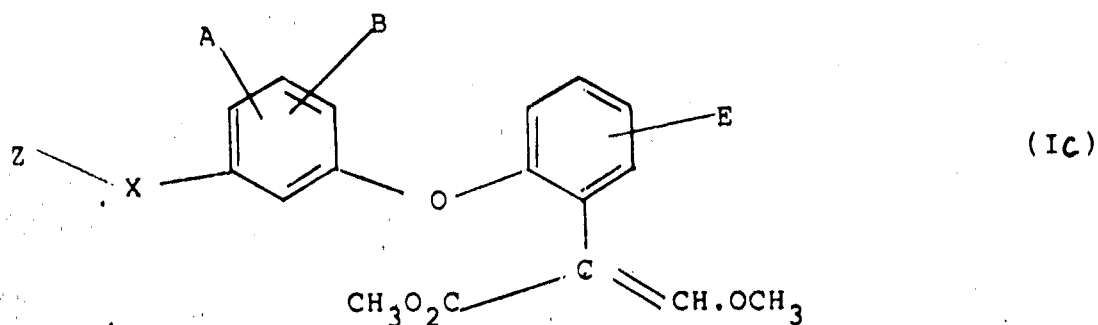


kur D ir G yra nepriklausomai halogenas, C_{1-4} alkilas, C_{1-4} alkoksi, trifluormetilas, nitro, ciano, fenilas, fenoksi, $NHCOR^6$,

NHCOR^6 , NHSO_2R^6 ir NR^7R^8 , kur $\text{R}^6 - \text{R}^8$ yra pažymėti aukščiau; o A yra halogenas, C_{1-4} alkilas, C_{1-4} alkoksi, trifluormetilas, nitro, ciano, acetilas arba fenoksi.

Ypač geri yra tie (Ib) formulės junginiai, kur D yra vandenilis, G yra 2- arba 3-chloro, 3-bromo, 2- arba 4-metoksi, 3- arba 4-nitro, 2- arba 3-ciano arba 3- ar 4-fenoksi, o A yra vandenilis arba D ir G abu yra vandenilis, o A yra 4- arba 6-bromas arba 4- ar 6-acetilas.

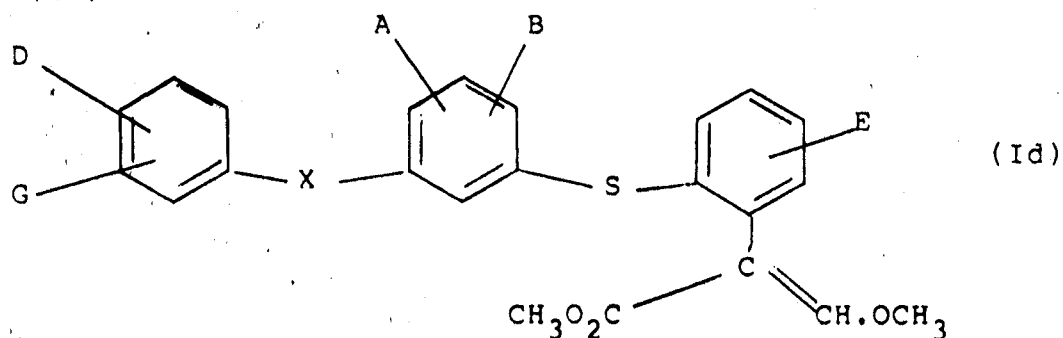
Pagal dar vieną iš išradimo aspektų, pateikiami (Ic) formulės junginiai:



kur Z yra piridinilas, pirimidinilas, triazinilas, pirazinilas, piridazinilas, chinolinilas, benzoksazolilas, benztiazolilas, tienilas, chinoksalinilas, tiazolilas, izochinolinilas, chinazolinilas, purinilas, oksazolilas, tiadiazolilas, oksadiazolilas, furilas, pirolilas arba tienopirimidinilas, kiekvienas galimai pakeistas halogenu, C_{1-4} alkilu, C_{1-4} alkoksi, C_{1-4} alkiltio, halogen(C_{1-4})alkilu (ypač trifluormetilu), ciano, nitro, COOR^7 , fenilu, fenoksi, C_{1-4} alkanoilu ir CONR^7R^8 , kur R^7 ir R^8 yra nepriklausomai H arba C_{1-4} alkilas; ir jų N-oksidas; X yra O, S, NH, $\text{N}(\text{CH}_3)$, SO_2O , CH_2 , CH_2CH_2 , OCH_2 , CH_2O , $\text{CH}(\text{OH})$, CONH arba CO; A ir B yra nepriklausomai H, halogenas, C_{1-4} alkilas, C_{1-4} alkoksi, ciano, nitro, halogen(C_{1-4})alkilas (ypač trifluormetilas) arba halogen(C_{1-4})alkoksi (ypač trifluormetoksi); o E ir H yra halogenas.

Konkrečiau, šis aspektas apima tuos (Ic) formulės junginius, kur X yra O, S, OCH₂, SO₂O, CH₂, CH₂O, CONH arba CON(CH₃); Z yra piridin-2-ilas, pirimidin-2-ilas, pirimidin-4-ilas, pirimidin-5-ilas, pirazin-2-ilas, piridazin-3-ilas, 1,3,5-triazin-2-ilas, tien-2-ilas, pirol-2-ilas, chinolin-2-ilas, chinoksalin-2-ilas, 1,2,4-tiazol-1-ilas, tiazol-4-ilas, benztiazol-2-ilas, arba benzoksazol-2-ilas, kiekvienas galimai pakeistas halogenu, trifluormetilu, C₁₋₄alkilu, C₁₋₄alkoksigrupe, ciano arba nitro, ir jų N-oksidas, o A, B ir E visi yra vandenilis.

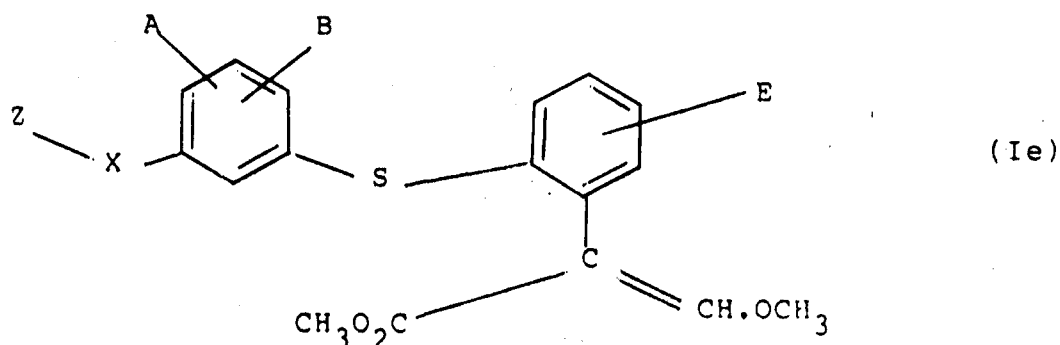
Pagal dar vieną iš aspektų pateikiami junginiai, kurių formulė (Id):



kur X, A, B, D, E ir G yra pažymėti (Ia) formulės junginiams, o taipogi X yra O, o A, B, D ir E visi yra vandenilis.

Ypač geri yra tie (Id) formulės junginiai, kur X yra O, CH₂O arba SO₂O, o A, B, D, E ir G visi yra H arba D yra 2- arba 4-nitro.

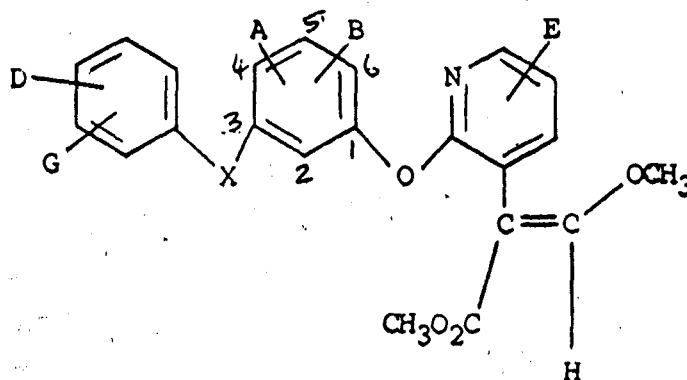
Ir dar pagal vieną iš išradimo aspektų pateikiami junginiai, kurių formulė (Ie):



kur Z, X, A, B ir E yra pažymėti (Ic) formulės junginiams. Ypat-
ingai geri yra tie (Ie) formulės junginiai, kur Z yra pirimidin-
2-ilas arba pirimidin-5-ilas, X yra O, o A, B ir E visi yra van-
denilis.

Išradimas iliustruojamas junginiais, užrašytais žemiau 1,
2, 3 ir 4 lentelėse. Visose 1, 2, 3 ir 4 lentelėse metil-3-metok-
sipropenoato grupė yra (E)-konfigūracijos.

1 lentelė



Junginio No.	X	D	G	A	B	E	Olefininis ⁺	Lyd. temp. (°C)
1	S	H	H	H	H	H	7,42	Derva
2	SO	H	H	H	H	H	nematomas	Derva
3	SO ₂	H	H	H	H	H	nematomas	Vaškas
4	NH	H	H	H	H	H	7,44	Vaškas
5	NCH ₃	H	H	H	H	H	7,44	Derva
6	NCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	H		
7	NCOCH ₃	H	H	H	H	H	7,39	50-54
8	NCH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	H		
9	CH ₂	H	H	H	H	H	7,47	Derva
10	CH(CH ₃)	H	H	H	H	H		
11	C(CH ₃) ₂	H	H	H	H	H		
12	CO	H	H	H	H	H	7,47	Derva
13	C:CH ₂	H	H	H	H	H		
14	C:C(CH ₃) ₂	H	H	H	H	H		
15	CH ₂ CH ₂	H	H	H	H	H	7,49	Derva
16	CH(CH ₃)CH ₂	H	H	H	H	H		
17	CH ₂ CH(CH ₃)	H	H	H	H	H		
18	(E)-CH:CH	H	H	H	H	H	7,49	Derva

1 lentelė (tesinys)

Junginio No.	X	D	G	A	B	E	Olefininis +	Lyd. temp. (°C)
19	(E)-C(CH ₃):C(CH ₃)	H	H	H	H	H		
20	C:C	H	H	H	H	H		
21	OCH ₂	H	H	H	H	H	7,46	Derva
22	OCH(CH ₃)	H	H	H	H	H		
23	CH ₂ O	H	H	H	H	H	7,44	84
24	CH(CH ₃)O	H	H	H	H	H	7,39	99-102
25	SCH ₂	H	H	H	H	H	7,47	Derva
26	SCH(CH ₃)	H	H	H	H	H		
27	S(O)CH ₂	H	H	H	H	H	7,48	82-86
28	S(O)CH(CH ₃)	H	H	H	H	H		
29	S(O) ₂ CH ₂	H	H	H	H	H	7,48	140-144
30	S(O) ₂ CH(CH ₃)	H	H	H	H	H		
31	CH ₂ S	H	H	H	H	H		
32	CH(CH ₃)S	H	H	H	H	H		
33	CH ₂ S(O)	H	H	H	H	H		
34	CH(CH ₃)S(O)	H	H	H	H	H		
35	CH ₂ S(O) ₂	H	H	H	H	H		
36	CH(CH ₃)S(O) ₂	H	H	H	H	H		
37	NHCH ₂	H	H	H	H	H		
38	N(CH ₃)CH ₂	H	H	H	H	H	7,44	Derva
39	N(COOCH ₃)CH ₂	H	H	H	H	H		
40	NHCH(CH ₃)	H	H	H	H	H		
41	N(CH ₃)CH(CH ₃)	H	H	H	H	H		
42	N(COOCH ₃)CH(CH ₃)	H	H	H	H	H		
43	CH ₂ NH	H	H	H	H	H		
44	CH ₂ N(CH ₃)	H	H	H	H	H		
45	CH ₂ N(COOCH ₃)	H	H	H	H	H		
46	CH(CH ₃)NH	H	H	H	H	H		
47	CH(CH ₃)N(CH ₃)	H	H	H	H	H		

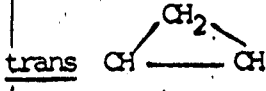
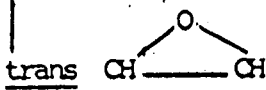
1 lentelė (tęsinys)

Junginio No.	X	D	G	A	B	E	Olefininis ⁺	Lyd. temp.(°C)
48	$\text{CH}(\text{CH}_3)\text{N}(\text{COCH}_3)$	H	H	H	H	H		
49	CO_2	H	H	H	H	H	7,46	94-95
50	O_2C	H	H	H	H	H	7,47	Aliejus
51	SO_2O	H	H	H	H	H	7,40	Derva
52	OSO_2	H	H	H	H	H		
53	CO.CO	H	H	H	H	H		
54	COCH_2	H	H	H	H	H		
55	$\text{COCH}(\text{CH}_3)$	H	H	H	H	H		
56	CH_2CO	H	H	H	H	H		
57	$\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CO}$	H	H	H	H	H		
58	$\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_2$	H	H	H	H	H		
59	$\text{CH}(\text{OH})\text{CH}(\text{CH}_3)$	H	H	H	H	H		
60	$\text{CH}_2\text{CH}(\text{OH})$	H	H	H	H	H		
61	$\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}(\text{OH})$	H	H	H	H	H		
62	CONH	H	H	H	H	H	7,46	Derva
63	$\text{CON}(\text{CH}_3)$	H	H	H	H	H		
64	$\text{CON}(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3)$	H	H	H	H	H		
65	$\text{CON}(\text{CHO})$	H	H	H	H	H		
66	$\text{CON}(\text{COCH}_3)$	H	H	H	H	H		
67	NHCO	H	H	H	H	H	7,40	Derva
68	$\text{N}(\text{CH}_3)\text{CO}$	H	H	H	H	H	7,43	Derva
69	$\text{N}(\text{CH}_2\text{CH}_3)\text{CO}$	H	H	H	H	H		
70	$\text{N}(\text{CHO})\text{CO}$	H	H	H	H	H		
71	$\text{N}(\text{COCH}_3)\text{CO}$	H	H	H	H	H		
72	$\text{OSN}(\text{CH}_3)$	H	H	H	H	H		
73	OSNH	H	H	H	H	H		

1 lentelė (tęsinys)

Junginio No.	X	D	G	A	B	E	Olefininis ⁺	Lyd. temp. (°C)
74	NHCS	H	H	H	H	H		
75	N(CH ₃)CS	H	H	H	H	H		
76	SO ₂ NH	H	H	H	H	H		
77	SO ₂ N(CH ₃)	H	H	H	H	H		
78	NHSO ₂	H	H	H	H	H	7,43	Aliejus
79	N(CH ₃)SO ₂	H	H	H	H	H		
80	N(CH ₂ CH ₃)SO ₂	H	H	H	H	H		
81	CS ₂	H	H	H	H	H		
82	S ₂ C	H	H	H	H	H		
83	COS	H	H	H	H	H	7,38	87-91
84	SCO	H	H	H	H	H	7,50	Derva
85	(E)-N:N	H	H	H	H	H		
86	(E)-N:CH	H	H	H	H	H	7,49 or 7,50	Derva
87	(E)-N:C(CH ₃)	H	H	H	H	H		
88	(E)-CH:N	H	H	H	H	H		
89	(E)-C(CH ₃):N	H	H	H	H	H		
90	CH ₂ CH ₂ CH ₂	H	H	H	H	H		
91	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂	H	H	H	H	H		
92	CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂	H	H	H	H	H		
93	CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)	H	H	H	H	H		
94	OCH ₂ CH ₂	H	H	H	H	H		
95	CH ₂ OCH ₂	H	H	H	H	H		
96	CH ₂ CH ₂ O	H	H	H	H	H	7,48	Aliejus
97	SCH ₂ CH ₂	H	H	H	H	H		
98	S(O)CH ₂ CH ₂	H	H	H	H	H		
99	S(O) ₂ CH ₂ CH ₂	H	H	H	H	H		

1 lentelė (tęsinys)

Junginio No.	X	D	G	A	B	E	Olefininis temp. + (°C)	Lyd. temp. (°C)
100	CH_2SCH_2	H	H	H	H	H		
101	$\text{CH}_2\text{S(O)CH}_2$	H	H	H	H	H		
102	$\text{CH}_2\text{S(O)}_2\text{CH}_2$	H	H	H	H	H		
103	$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{S}$	H	H	H	H	H		
104	$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{S(O)}$	H	H	H	H	H		
105	$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{S(O)}_2$	H	H	H	H	H		
106	(E)-CH:NNH	H	H	H	H	H		
107	(E)-C(CH ₃):NNH	H	H	H	H	H		
108	(E)-CH:NN(CH ₃)	H	H	H	H	H		
109	(E)-NHN:CH	H	H	H	H	H		
110	(E)-NHN:C(CH ₃)	H	H	H	H	H		
111	(E)-N(CH ₃)N:CH	H	H	H	H	H	7,50	121,5-123,5
112	CH_2CONH	H	H	H	H	H		
113	$\text{CH(CH}_3\text{)CON(CH}_3\text{)}$	H	H	H	H	H		
114	$\text{CH(CH}_3\text{)CON(CH}_3\text{)}$	H	H	H	H	H		
115	(E)-CH:CHCH ₂ O	H	H	H	H	H	7,47	Derva
116	$\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{O}$	H	H	H	H	H		
117		H	H	H	H	H		
118		H	H	H	H	H		
119	O	2-Cl	H	H	H	H	7,48	51-54
120	O	3-Cl	H	H	H	H	7,48	Derva
121	O	4-Cl	H	H	H	H		
122	O	2-F	H	H	H	H	7,50	Derva

1 lentelė (tęsinys)

Junginio No.	X	D	G	A	B	E	Olefininis ⁺	Lyd. temp. (°C)
123	O	3-F	H	H	H	H	7,51	Derva
124	O	4-F	H	H	H	H	7,35	Derva
125	O	2-CH ₃	H	H	H	H	7,51	Derva
126	O	3-CH ₃	H	H	H	H	7,49	Derva
127	O	4-CH ₃	H	H	H	H	7,49	Derva
128	O	2-CH ₃ O	H	H	H	H	7,46	Derva
129	O	3-CH ₃ O	H	H	H	H	7,48	Derva
130	O	4-CH ₃ O	H	H	H	H	7,48	Derva
131	O	2-NO ₂	H	H	H	H	7,47	Derva
132	O	3-NO ₂	H	H	H	H	7,49	Derva
133	O	4-NO ₂	H	H	H	H	7,44	67-71
134	O	2-CN	H	H	H	H	7,51	108-110
135	O	3-CN	H	H	H	H	7,51	Derva
136	O	4-CN	H	H	H	H		
137	O	2-Br	H	H	H	H		
138	O	3-Br	H	H	H	H	7,48	Derva
139	O	4-Br	H	H	H	H		
140	O	2-CF ₃	H	H	H	H		
141	O	3-CF ₃	H	H	H	H	7,49	Aliejus
142	O	4-CF ₃	H	H	H	H		
143	O	2-C ₆ H ₅ O	H	H	H	H	7,46	Derva
144	O	3-C ₆ H ₅ O	H	H	H	H	7,48	Derva
145	O	4-C ₆ H ₅ O	H	H	H	H	7,50	Derva
146	O	2-CH ₃ CH ₂ O	H	H	H	H		
147	O	3-CH ₃ CH ₂ O	H	H	H	H		
148	O	4-CH ₃ CH ₂ O	H	H	H	H		

1 lentelė (tęsinys)

Junginio No.	X	D	G	A	B	E	Olefininis +	Lyd. temp. (°C)
149	O	2-C ₆ H ₅	H	H	H	H	7,50	Derva
150	O	3-C ₆ H ₅	H	H	H	H		
151	O	4-C ₆ H ₅	H	H	H	H		
152	O	2-Cl	3-Cl	H	H	H		
153	O	2-Cl	4-Cl	H	H	H		
154	O	2-Cl	5-Cl	H	H	H		
155	O	2-Cl	6-Cl	H	H	H		
156	O	3-Cl	4-Cl	H	H	H	7,53	Derva
157	O	3-Cl	5-Cl	H	H	H		
158	O	2-Cl	3-CH ₃ O	H	H	H		
159	O	2-Cl	4-CH ₃ O	H	H	H		
160	O	2-Cl	5-CH ₃ O	H	H	H		
161	O	2-Cl	6-CH ₃ O	H	H	H		
162	O	3-Cl	4-CH ₃ O	H	H	H		
163	O	3-Cl	5-CH ₃ O	H	H	H		
164	O	2-CH ₃ O	3-Cl	H	H	H		
165	O	2-CH ₃ O	4-Cl	H	H	H		
166	O	2-CH ₃ O	5-Cl	H	H	H		
167	O	3-CH ₃ O	4-Cl	H	H	H		
168	O	⊕	⊕	H	H	H	7,51	Derva
169	O	⊕	⊕	H	H	H		
170	O	H	H	2-F	H	H		
171	O	H	H	4-F	H	H		
172	O	H	H	5-F	H	H		
173	O	H	H	6-F	H	H		
174	O	H	H	4-Cl	H	H		

1 lentelė (tęsinys)

Junginio No.	X	D	G	A	B	E	Olefininis ⁺	Lyd. temp. (°C)
175	O	H	H	5-Cl	H	H	7,41	Derva
176	O	H	H	4-CH ₃	H	H		
177	O	H	H	5-CH ₃	H	H	7,47	Derva
178	O	H	H	4-CH ₃ O	H	H		
179	O	H	H	5-CH ₃ O	H	H	7,42	Derva
180*	O	H	H	4-Br	H	H	7,47	Derva
181	O	H	H	5-Br	H	H		
182	O	H	H	4-CF ₃	H	H		
183	O	H	H	5-CF ₃	H	H		
184	O	H	H	4-NO ₂	H	H		
185	O	H	H	5-NO ₂	H	H		
186	O	H	H	4-CN	H	H		
187	O	H	H	5-CN	H	H		
188	O	H	H	4-F	5-F	H		
189	O	H	H	4-Cl	5-Cl	H		
190	O	H	H	4-F	5-Cl	H		
191	O	H	H	4-Cl	5-F	H		
192	O	H	H	4-CH ₃ O	5-Cl	H		
193	O	H	H	4-CH ₃ O	5-F	H		
194	O	H	H	H	H	5-F		
195	O	H	H	H	H	6-Cl		
196	(E)-N:N	H	H	4-CH ₃ O	H	H		
197	(E)-N:N	H	H	4-CH ₃ CH ₂ O	H	H		
198	CH ₂ O	2-Cl	H	H	H	H		
199	CH ₂ O	3-Cl	H	H	H	H		
200	CH ₂ O	4-Cl	H	H	H	H		

1 lentelė (tęsinys)

Junginio No.	X	D	G	A	B	E	+ Olefininis	Lyd. temp. (°C)
201	CH ₂ O	2-F	H	H	H	H		
202	CH ₂ O	3-F	H	H	H	H		
203	CH ₂ O	4-F	H	H	H	H		
204	CH ₂ O	2-CH ₃	H	H	H	H	7,25	108-110
205	CH ₂ O	3-CH ₃	H	H	H	H	7,24	Derva
206	CH ₂ O	4-CH ₃	H	H	H	H	7,40	88_90
207	CH ₂ O	2-CH ₃ O	H	H	H	H		
208	CH ₂ O	3-CH ₃ O	H	H	H	H	7,39	Derva
209	CH ₂ O	4-CH ₃ O	H	H	H	H		
210	CH ₂ O	2-NO ₂	H	H	H	H		
211	CH ₂ O	3-NO ₂	H	H	H	H		
212	CH ₂ O	4-NO ₂	H	H	H	H	7,42	109
213	CH ₂ O	2-CN	H	H	H	H		
214	CH ₂ O	3-CN	H	H	H	H	7,41	89-92,5
215	CH ₂ O	4-CN	H	H	H	H		
216	CH ₂ O	2-Br	H	H	H	H	7,41	78-80
217	CH ₂ O	3-Br	H	H	H	H	7,45	Derva
218	CH ₂ O	4-Br	H	H	H	H	7,4	86-88,5
219	CH ₂ O	2-CF ₃	H	H	H	H		
220	CH ₂ O	3-CF ₃	H	H	H	H		nematomas Derva
221	CH ₂ O	4-CF ₃	H	H	H	H		
222	CH ₂ O	2-C ₆ H ₅ O	H	H	H	H		
223	CH ₂ O	3-C ₆ H ₅ O	H	H	H	H		
224	CH ₂ O	4-C ₆ H ₅ O	H	H	H	H		
225	CH ₂ O	2-CH ₃ CH ₂ O	H	H	H	H		

1. lentelė (tęsinys)

Junginio No.	X	D	G	A	B	E	Olefininis + temp. (°C)	Lyd. temp. (°C)
226	CH ₂ O	3-CH ₃ CH ₂ O	H	H	H	H	nematomas	Derva
227	CH ₂ O	4-CH ₃ CH ₂ O	H	H	H	H		
228	CH ₂ O	2-C ₆ H ₅	H	H	H	H		
229	CH ₂ O	3-C ₆ H ₅	H	H	H	H		
230	CH ₂ O	4-C ₆ H ₅	H	H	H	H		
231	CH ₂ O	2-Cl	3-Cl	H	H	H		
232	CH ₂ O	2-Cl	4-Cl	H	H	H		
233	CH ₂ O	2-Cl	5-Cl	H	H	H		
234	CH ₂ O	2-Cl	6-Cl	H	H	H		
235	CH ₂ O	3-Cl	4-Cl	H	H	H		
236	CH ₂ O	3-Cl	5-Cl	H	H	H		
237	CH ₂ O	2-Cl	3-CH ₃ O	H	H	H		
238	CH ₂ O	2-Cl	4-CH ₃ O	H	H	H		
239	CH ₂ O	2-Cl	5-CH ₃ O	H	H	H		
240	CH ₂ O	2-Cl	6-CH ₃ O	H	H	H		
241	CH ₂ O	3-Cl	4-CH ₃ O	H	H	H		
242	CH ₂ O	3-Cl	5-CH ₃ O	H	H	H		
243	CH ₂ O	2-CH ₃ O	3-Cl	H	H	H		
244	CH ₂ O	2-CH ₃ O	4-Cl	H	H	H		
245	CH ₂ O	2-CH ₃ O	5-Cl	H	H	H		
246	CH ₂ O	3-CH ₃ O	4-Cl	H	H	H		
247	CH ₂ O	⊕	⊕	H	H	H	7,42	100 -102,5
248	CH ₂ O	⊕	⊕	H	H	H	7,42	102-106
249	CH ₂ O	H	H	2-F	H	H		
250	CH ₂ O	H	H	4-F	H	H		

1 lentelė (Tęsinys)

Junginio No.	X	D	G	A	B	E	Olefininis ⁺	Lyd. temp. (°C)
251	CH ₂ O	H	H	5-F	H	H		
252	CH ₂ O	H	H	6-F	H	H		
253	CH ₂ O	H	H	4-Cl	H	H		
254	CH ₂ O	H	H	5-Cl	H	H		
255	CH ₂ O	H	H	4-CH ₃	H	H		
256	CH ₂ O	H	H	5-CH ₃	H	H		
257	CH ₂ O	H	H	4-CH ₃ O	H	H		
258	CH ₂ O	H	H	5-CH ₃ O	H	H		
259	CH ₂ O	H	H	4-Br	H	H		
260	CH ₂ O	H	H	5-Br	H	H		
261	CH ₂ O	H	H	4-CF ₃	H	H		
262	CH ₂ O	H	H	5-CF ₃	H	H		
263	CH ₂ O	H	H	4-NO ₂	H	H		
264	CH ₂ O	H	H	5-NO ₂	H	H		
265	CH ₂ O	H	H	4-CN	H	H		
266	CH ₂ O	H	H	5-CN	H	H		
267	CH ₂ O	H	H	4-F	5-F	H		
268	CH ₂ O	H	H	4-Cl	5-Cl	H		
269	CH ₂ O	H	H	4-F	5-Cl	H		
270	CH ₂ O	H	H	4-Cl	5-F	H		
271	CH ₂ O	H	H	4-CH ₃ O	5-Cl	H		
272	CH ₂ O	H	H	4-CH ₃ O	5-F	H		
273	CH ₂ O	H	H	H	H	5-F		
274	CH ₂ O	H	H	H	H	6-Cl		
275	O	4-NH.COCH ₃	H	H	H	H		

1 lentelė (tęsinys)

Junginio No.	X	D	G	A	B	E	Olefininis +	Lyd. temp. (°C)
276	O	4-NH.SO ₂ C ₆ H ₅	H	H	H	H		
277	O	4-NH.COC ₆ H ₅	H	H	H	H		
278	O	4-NH.SO ₂ CH ₃	H	H	H	H		
279	O	4-N(CH ₃) ₂	H	H	H	H		
280	SO ₂ O	4-NH.COCH ₃	H	H	H	H		
281	SO ₂ O	3-NO ₂	4-Cl	H	H	H		
282	(E)-N:N	4-Cl	H	4-HO	H	H	7,38	143-144
283	SO ₂ O	2-Cl	H	H	H	H	7,37	Derva
284	SO ₂ O	3-Cl	H	H	H	H	7,45	Derva
285	SO ₂ O	4-Cl	H	H	H	H	7,45	53-59
286	SO ₂ O	2-F	H	H	H	H		
287	SO ₂ O	3-F	H	H	H	H		
288	SO ₂ O	4-F	H	H	H	H	7,45	Derva
289	SO ₂ O	2-CH ₃	H	H	H	H		
290	SO ₂ O	3-CH ₃	H	H	H	H	7,34	Derva
291	SO ₂ O	4-CH ₃	H	H	H	H	7,38	70-76
292	SO ₂ O	2-CH ₃ O	H	H	H	H		
293	SO ₂ O	3-CH ₃ O	H	H	H	H		
294	SO ₂ O	4-CH ₃ O	H	H	H	H	7,39	96-97
295	SO ₂ O	2-NO ₂	H	H	H	H	7,40	Derva
296	SO ₂ O	3-NO ₂	H	H	H	H	7,41	90-93,5
297	SO ₂ O	4-NO ₂	H	H	H	H		
298	SO ₂ O	2-CN	H	H	H	H		
299	SO ₂ O	3-CN	H	H	H	H		
300	SO ₂ O	4-CN	H	H	H	H		
301	SO ₂ O	2-Br	H	H	H	H		

1 lentelė (tesinys)

Junginio No.	X	D	G	A	B	E	Olefininis ⁺	Lyd. temp. (°C)
302	SO ₂ O	3-Br	H	H	H	H		
303	SO ₂ O	4-Br	H	H	H	H		
304	SO ₂ O	2-CF ₃	H	H	H	H		
305	SO ₂ O	3-CF ₃	H	H	H	H		
306	SO ₂ O	4-CF ₃	H	H	H	H		
307	SO ₂ O	2-C ₆ H ₅ O	H	H	H	H		
308	SO ₂ O	3-C ₆ H ₅ O	H	H	H	H		
309	SO ₂ O	4-C ₆ H ₅ O	H	H	H	H		
310	SO ₂ O	2-CH ₃ CH ₂ O	H	H	H	H		
311	SO ₂ O	3-CH ₃ CH ₂ O	H	H	H	H		
312	SO ₂ O	4-CH ₃ CH ₂ O	H	H	H	H		
313	SO ₂ O	2-C ₆ H ₅	H	H	H	H		
314	SO ₂ O	3-C ₆ H ₅	H	H	H	H		
315	SO ₂ O	4-C ₆ H ₅	H	H	H	H		
316	SO ₂ O	2-Cl	3-Cl	H	H	H		
317	SO ₂ O	2-Cl	4-Cl	H	H	H		
318	SO ₂ O	2-Cl	5-Cl	H	H	H	7,53	Derva
319	SO ₂ O	2-Cl	6-Cl	H	H	H		
320	SO ₂ O	3-Cl	4-Cl	H	H	H		
321	SO ₂ O	3-Cl	5-Cl	H	H	H		
322	SO ₂ O	2-Cl	3-CH ₃ O	H	H	H		
323	SO ₂ O	2-Cl	4-CH ₃ O	H	H	H		
324	SO ₂ O	2-Cl	5-CH ₃ O	H	H	H		
325	SO ₂ O	2-Cl	6-CH ₃ O	H	H	H		
326	SO ₂ O	3-Cl	4-CH ₃ O	H	H	H		
327	SO ₂ O	3-Cl	5-CH ₃ O	H	H	H		
328	SO ₂ O	2-CH ₃ O	3-Cl	H	H	H		

1 lentelė (tęsinys)

Junginio No.	X	D	G	A	B	E	Olefininis ⁺	Lydim. temp. (°C)
329	SO ₂ O	2-CH ₃ O	4-Cl	H	H	H		
330	SO ₂ O	2-CH ₃ O	5-Cl	H	H	H		
331	SO ₂ O	3-CH ₃ O	4-Cl	H	H	H		
332	SO ₂ O	⊕	⊕	H	H	H	7,34	Derva 98-100
333	SO ₂ O	⊕	⊕	H	H	H	7,35	
334	SO ₂ O	H	H	2-F	H	H		
335	SO ₂ O	H	H	4-F	H	H		
336	SO ₂ O	H	H	5-F	H	H		
337	SO ₂ O	H	H	6-F	H	H		
338	SO ₂ O	H	H	4-Cl	H	H		
339	SO ₂ O	H	H	5-Cl	H	H		
340	SO ₂ O	H	H	4-CH ₃	H	H		
341	SO ₂ O	H	H	5-CH ₃	H	H		
342	SO ₂ O	H	H	4-CH ₃	H	H		
343	SO ₂ O	H	H	5-CH ₃	H	H		
344	SO ₂ O	H	H	4-Br	H	H		
345	SO ₂ O	H	H	5-Br	H	H		
346	SO ₂ O	H	H	4-CF ₃	H	H		
347	SO ₂ O	H	H	5-CF ₃	H	H		
348	SO ₂ O	H	H	4-NO ₂	H	H		
349	SO ₂ O	H	H	5-NO ₂	H	H		
350	SO ₂ O	H	H	4-CN	H	H		
351	SO ₂ O	H	H	5-CN	H	H		
352	SO ₂ O	H	H	4-F	5-F	H		
353	SO ₂ O	H	H	4-Cl	5-Cl	H		
354	SO ₂ O	H	H	4-F	5-Cl	H		

1 lentelė (tęsinys)

Junginio No.	X	D	G	A	B	E	Olefininis +	Lyd. temp. (°C)
355.	SO ₂ O	H	H	4-Cl	5-F	H		
356	SO ₂ O	H	H	4-CH ₃ O	5-Cl	H		
357	SO ₂ O	H	H	3-CH ₃ O	5-F	H		
358	SO ₂ O	H	H	H	H	5-F		
359	SO ₂ O	H	H	H	H	6-Cl		
360	CH(C ₆ H ₅)	H	H	H	H	H	7,44	Derva
361	O	3-Cl	H	4-Cl	H	H		
362	O	3-CH ₃ O	4-Cl	5-F	H	H		
363	CH ₂ O	4-F	H	5-CH ₃ O	H	H		
364	SO ₂ O	3-CH ₃	H	4-F	H	H		
365+	O	H	H	4-CH ₃ CO	H	H	7,43	90-92
366+	O	H	H	6-CH ₃ CO	H	H	7,48	82-85
367*	O	H	H	6-Br	H	H	7,45	Derva
368	O	H	H	5-C ₆ H ₅ O	H	H	7,46	Derva
369	SO ₂ O	3-NH ₂	H	H	H	H	7,43	88-92
370	COCH ₂ O	H	H	H	H	H	7,47	49-52
371	OCH ₂	4-CH ₃ O	H	H	H	H	7,49	66-69
372	OCH ₂	3-CH ₃ O	H	H	H	H	7,47	Derva
373	OCH ₂	3-CN	H	H	H	H	7,48	71-75
374	OCH ₂	4-CN	H	H	H	H	7,48	Derva
375	OCH ₂	4-NO ₂	H	H	H	H	7,48	108-110
376	OCH ₂	2-Cl	H	H	H	H	7,46	83-87
377	OCH ₂	2-CH ₃ O	H	H	H	H	7,48	Derva
378	OCH ₂	2-CN	H	H	H	H	7,47	95-10
379	(E)-N:N	4-Cl	H	4-CH ₃ O	H	H	nematomas	61
380	CH(OH)	H	H	H	H	H	7,45	Derva

1 lentelė (tęsinys)

Junginio No.	X	D	G	A	B	E	+ Olefininis	Lyd. temp. (°C)
381	OCH ₂	2-NO ₂	H	H	H	H	7,48	Derva
382	OCH ₂	3-NO ₂	H	H	H	H	7,48	Derva
383	OCH ₂	3-Br	H	H	H	H	7,47	Aliejus
384	OCH ₂	3-Cl	H	H	H	H	7,40	Aliejus
385	OCH ₂	3-C ₆ H ₅ O	H	H	H	H	7,47	Aliejus
386	OCH ₂	4-Cl	H	H	H	H	7,47	72-76
387	S(O)CH ₂	4-Cl	H	H	H	H	7,42	105-11
388	S(O) ₂ CH ₂	4-Cl	H	H	H	H	7,47	126-130,5
389	OCH ₂	2-Br	H	H	H	H	7,46	87,5-9
390	O	2-NO ₂	4-NO ₂	H	H	H	7,46	54-57
391	O	2-Me	3-Me	H	H	H	7,50	Derva
392	O	2-Me	4-Me	H	H	H	7,51	Derva
393	O	2-Me	5-Me	H	H	H	7,50	Derva
394	O	2-Me	6-Me	H	H	H	7,50	Derva
395	O	3-Me	4-Me	H	H	H	7,50	Derva
396	O	3-Me	5-Me	H	H	H	7,51	Vaškas
397	OCH ₂	4-Br	H	H	H	H	7,47	Aliejus
398	CO ₂ CH ₂	H	H	H	H	H	7,47	Aliejus
399	SCH ₂	2-Cl	H	H	H	H	7,47	74-78
400	SCH ₂	4-NO ₂	H	H	H	H	7,48	Derva
401	S(O)CH ₂	2-Cl	H	H	H	H	7,60	Derva
402	S(O) ₂ CH ₂	2-Cl	H	H	H	H	7,59	Derva
403	(E/Z)-CH=CH	4-NO ₂	H	H	H	H	7,49	Derva
404	Ph ₂ ⁺ PCH ₂ Br ⁻	H	H	H	H	H	7,40	176-177
405	CH ₂ O	4-tert-C ₄ H ₉	H	H	H	H	7,31	Derva
406	CH ₂ OOO	H	H	H	H	H	7,46	Derva

1 lentelė (tęsinys)

Junginio No.	X	D	G	A	B	E	+ Olefininis	Lyd. temp. (°C)
407	CH_2NHCO	H	H	H	H	H	7,41	Derva
408	CH_2SCO	H	H	H	H	H	7,45	Derva
409	O_2C	3- NO_2	H	H	H	H	7,50	Derva
410	OCH_2O	4-Cl	H	H	H	H	7,47	Aliejus
411	$\text{S(O)CH}_2\text{O}$	H	H	H	H	H	7,47	Aliejus
412	$\text{OOCH(CH}_3\text{)O}$	H	H	H	H	H	7,45	Aliejus
413	(E)- $\text{CH}_2\text{ON:CH}$	H	H	H	H	H	7,49	Derva
414	(Z)- $\text{CH}_2\text{ON:CH}$	H	H	H	H	H	7,46	Derva
415	$(\text{CH}_2)_3\text{O}$	H	H	H	H	H	7,48	Aliejus
416	$(\text{CH}_2)_4\text{O}$	H	H	H	H	H	7,47	Aliejus
417	$(\text{CH}_2)_5\text{O}$	H	H	H	H	H	7,48	Aliejus
418	(E)-N:N	4-OH	H	H	H	H	7,50	Aliejus
419	(E)-N:N	4- CH_3O	H	H	H	H	7,49	Derva
420	CO.NH	2-Br	H	H	H	H	7,49	Puta
421	CO.NH	3-Br	H	H	H	H	7,47	Puta
422	CO.NH	3- CH_3O	H	H	H	H	7,48	Puta
423	$\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{O}$	H	H	H	H	H	7,45	Puta
424	SO_2O	O	O	H	H	H	7,29	Aliejus
425	SCH_2O	H	H	H	H	H	7,47	Aliejus
426	CH_2O	2-($\text{CH}_3\text{O}_2\text{C}-$ OCH.OCH_3)	H	H	H	H	7,40 arba 7,52	Derva
427	SO_2O	4- CF_3O	H	H	H	H	Nematomas	Derva
428	SO_2O	2- $\text{CH}_3\text{O}_2\text{C}$	H	H	H	H	7,41	Derva
429	$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH(OH)}$	H	H	H	H	H		
430	(E)- $\text{CH}_2\text{CH=CH}$	H	H	H	H	H		

1 lentelė (tęsinys)

Junginio No.	X	D	G	A	B	E	Olefininis temp. (°C)	Lyd. temp. (°C)
431	$C(CH_3)(OH)$	H	H	H	H	H		
432	$CH(OH)$	2-Cl	H	H	H	H		
433	$CH(OH)$	4-Cl	H	H	H	H		
434	$CH(OH)$	2- CH_3O	H	H	H	H		
435	$CH(OH)$	3- CF_3	H	H	H	H		
436	$CH(OH)$	3-CN	H	H	H	H		
437	$CH(OH)$	4- NO_2	H	H	H	H		
438	CH_2OSO_2	H	H	H	H	H		
439	$CH_2NHCO.NH$	H	H	H	H	H		
440	CH_2NH	H	H	H	H	H		
441	$COO.NH$	H	H	H	H	H		
442	$NHCO.NH$	H	H	H	H	H		
443	$CH_2COO.NH$	H	H	H	H	H	7,47	Derva
444	SO_2NH	4-Br	H	H	H	H		
445	CH_2NH	3- CH_3	H	H	H	H		
446			H	H	H	H		
447			H	H	H	H		

1 lentelė (tęsinys)

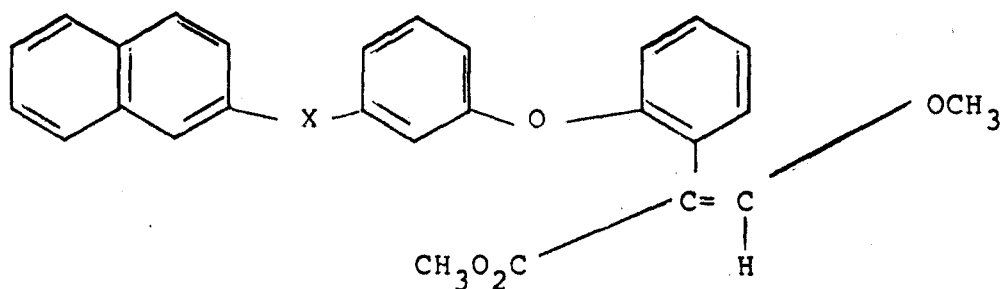
Junginio Nr.	X	D	G	A	B	E	Olefininis ⁺	Lyd. temp. (°C)
433	CH(OH)	4-Cl	H	H	H	H	7.40	Derva 64-65
446	SO ₂ NH	3-NO ₂	H	H	H	H	7.46	55-57
447	NH	2-Cl	4-Cl	H	H	H	7.47	Derva
448	NH	4-CH ₃ O	H	H	H	H	7.45	Derva
449	SO ₂ NH	4-CH ₃	H	H	H	H	7.45	Derva
450	NHCO	2-CH ₃ O	H	H	H	H	7.48	110-114
451	NHCO	3-Cl	H	H	H	H	7.40	Derva
452	NHCO	4-Cl	H	H	H	H	7.40	164-165.5
453	CH(OH)	4-CH ₃	H	H	H	H	7.45	Derva
454	CH(OH)	2-CH ₃	H	H	H	H	7.45	Derva
455	CO	2-CH ₃	H	H	H	H	7.49	Derva
456	CH(CH)	4-F	H	H	H	H	7.45	Derva
457	CO	4-F	H	H	H	H	7.48	Derva
458	NHCO	2-OH	H	H	H	H	7.41	138-138.5
459	NHCO	2-CN	H	H	H	H	7.49	Derva
460	O	2-CN	6-CN	H	H	H	7.59	Derva
461	NHCO	2-Cl	H	H	H	H	7.47	134.5-136

Išnašos 1 lentelei:

+ cheminis singleto poslinkis nuo beta-metoksipropenoato grupės olefininio protono (m. d. nuo tetrametilsilano).

Tirpiklis : CDCl_3 , jei nėra kitaip nurodyta.

+ D ir G pakaitai sudaro kondensuotą žiedą. Junginių 168, 169, 247, 248, 332 ir 333 formulė:

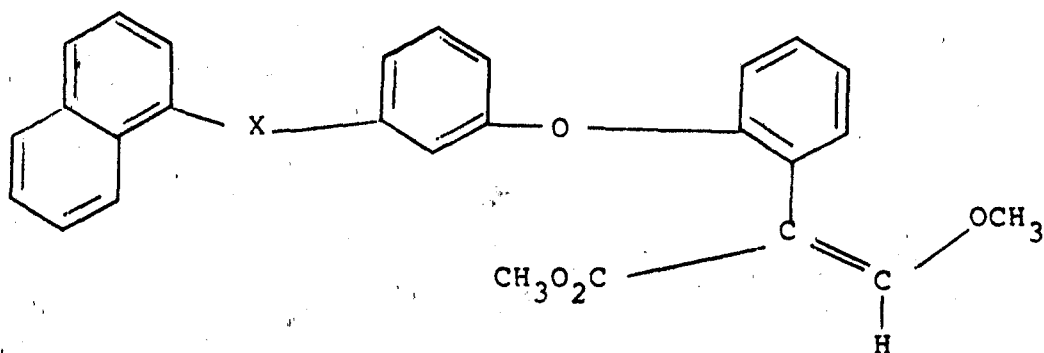


X Junginio Nr.

O 168

CH_2 247

CO_2O 332



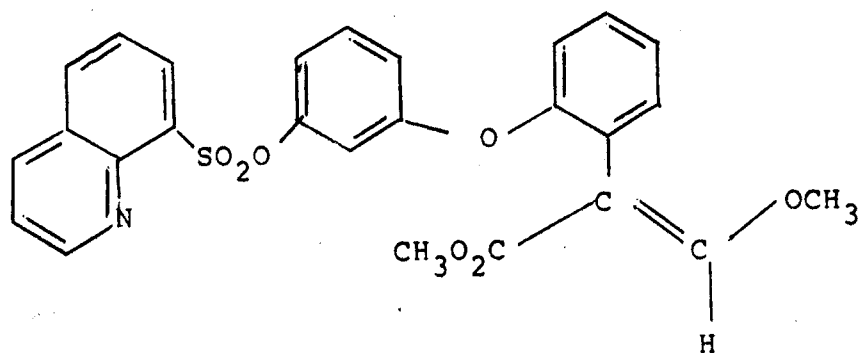
X Junginio Nr.

O 169

CH_2O 248

SO_2O 333

Junginio 424 formulė:

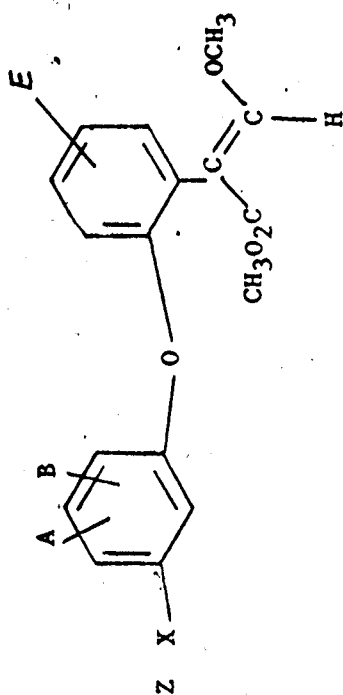


*, ⊕ kiekvienu atveju rodo, kad junginio struktūra gali būti priešinga. Pavyzdžiui, junginį 180 charakterizuojantys duomenys iš esmės gali apibūdinti junginį 367 ir atvirkščiai. Tas pats tinka junginiams 365 ir 366.

‡ (E):(Z) santykis = 85:15 (žiūrėti 20 pavyzdį).

Ph yra fenilas.

2 lentelė



Junginio No.	Z	X	A	B	E	Olefininis + temp.	Lydimosi temp. (°C)
1	Piridin-2-ilas	O	H	H	H	7,48	Derva
2	Piridin-2-ilas	S	H	H	H		
3	Piridin-2-ilas	N(CH ₃)	H	H	H		
4	Piridin-2-ilas	SO ₂ O	H	H	H		
5	Piridin-2-ilas	CH ₂ CH ₂	H	H	H		
6	Piridin-2-ilas	OCH ₂	H	H	H	7,48	Derva
7	Piridin-2-ilas	CH ₂ O	H	H	H	7,47	Derva
8	Piridin-3-ilas	O	H	H	H	7,48	Derva
9	Piridin-3-ilas	S	H	H	H		

2 lentelė (tęsinys)

Junginio No.	Z	X	A	B	E	Olefininis + temp. (°C)	Lyd. temp. (°C)
10	Piridin-3-ilas	N(CH ₃)	H	H	H	7,49	Derva
11	Piridin-3-ilas	SO ₂ O	H	H	H		
12	Piridin-3-ilas	CH ₂ CH ₂	H	H	H	7,48	Derva
13	Piridin-3-ilas	OCH ₂	H	H	H		
14	Piridin-3-ilas	CH ₂ O	H	H	H	7,48	Derva
15	Piridin-4-ilas	O	H	H	H		
16	Piridin-4-ilas	S	H	H	H	7,48	Derva
17	Piridin-4-ilas	N(CH ₃)	H	H	H		
18	Piridin-4-ilas	SO ₂ O	H	H	H	7,48	Derva
19	Piridin-4-ilas	CH ₂ CH ₂	H	H	H		
20	Piridin-4-ilas	OCH ₂	H	H	H	7,48	Derva
21	Piridin-4-ilas	CH ₂ O	H	H	H		
22	Pirimidin-2-ilas	O	H	H	H	7,38	Derva
23	Pirimidin-2-ilas	S	H	H	H	7,49	Derva
24	Pirimidin-4-ilas	N(CH ₃)	H	H	H	7,49	Derva
25	Pirimidin-4-ilas	SO ₂ O	H	H	H		
26	Pirimidin-5-ilas	CH ₂ CH ₂	H	H	H	7,49	Derva
27	Pirimidin-5-ilas	CH ₂ O	H	H	H		

2. Pentele (Hesings)

Junginio No.	Z	X	A	B	E	Olefininis temp.	Lydimosi temp. (°C)
28	1,2,4-Triazin-3-ilas	OCH ₂	H	H	H	7,49	Derva
29	1,3,5-Triazin-2-ilas	O	H	H	H		
30	Pirazin-2-ilas	S	H	H	H		
31	Pirazin-2-ilas	N(CH ₃)	H	H	H	7,49	Derva
32	Pirazin-2-ilas	SO ₂ O	H	H	H		
33	Pirazin-2-ilas	CH ₂ O	H	H	H		
34	Piridin-3-ilas	O	H	H	H	7,43	109-110
35	Piridin-3-ilas	S	H	H	H		
36	Piridin-3-ilas	SO ₂ O	H	H	H		
37	Piridin-3-ilas	O	H	H	H	7,43	109-110
38	Chinolin-2-ilas	CH ₂ O	H	H	H		
39	Chinolin-2-ilas	O	H	H	H		
40	Chinolin-3-ilas	SO ₂ O	H	H	H	7,43	109-110
41	Chinolin-3-ilas	O	H	H	H		
42	Benzokazol-2-ilas	S	H	H	H		
43	Benzokazol-2-ilas	N(CH ₃)	H	H	H	7,43	109-110
44	Benzokazol-2-ilas	SO ₂ O	H	H	H		
45	Benzokazol-2-ilas	O	H	H	H		

35

2 lentelė (tęsinys)

Junginio No.	Z	X	A	B	E	Olefininis †	Lydimosi temp. (°C)
46	Benzthiazol-2-ilas	CH ₂ CH ₂	H	H	H	7,49	Derva
47	Benzthiazol-2-ilas	OCH ₂	H	H	H		
48	Benzthiazol-2-ilas	CH ₂ O	H	H	H		
49	Thien-2-ilas	CH ₂ O	H	H	H		
50	Thien-2-ilas	CH ₂ CH ₂	H	H	H		
51	Thien-3-ilas	O	H	H	H	7,40	Derva
52	Thien-2-ilas	SO ₂ O	H	H	H	7,49	Alyva
53	5-CF ₃ -Piridin-2-ilas	O	H	H	H		
54	5-CF ₃ -Piridin-2-ilas	S	H	H	H		
55	5-CF ₃ -Piridin-2-ilas	CH ₂ O	H	H	H		
56	3-F-Piridin-2-ilas	O	H	H	H	7,48	84-87
57	3-Cl-Piridin-2-ilas	O	H	H	H		
58	4-Br-Piridin-2-ilas	O	H	H	H		
59	5-CH ₃ -Piridin-2-ilas	O	H	H	H	7,48	Derva
60	6-CH ₃ -Piridin-2-ilas	O	H	H	H		
61	2-F-Piridin-3-ilas	O	H	H	H		
62	3-CF ₃ -Piridin-4-ilas	O	H	H	H		
63	4,6-di-F-Piridin-2-ilas	O	H	H	H		

2 lentelė (tęsinys)

Junginio No.	Z	X	A	B	E	Olefininis	+ Lydimosi temp(°C)
64	3-NO ₂ -5-CF ₃ - Piridin-2-ilas	0	H	H	H		
65	5-(CH ₃ O ₂ C)- Piridin-2-ilas	0	H	H	H	7,49	Derva
66	3-CH ₃ -Piridin-2-ilas	0	H	H	H		
67	4-CH ₃ -Piridin-2-ilas	0	H	H	H		
68	6-CH ₃ -Piridin-2-ilas	0	H	H	H		
69	5-(CN)-Piridin-2-ilas	0	H	H	H	7,49	Derva
70	3-Cl-5-(C ₆ H ₅ O)-1, 3,5-triazin-2-ilas	0	H	H	H		
71	Piridin-2-ilas	0	2-F	H	H		
72	Piridin-2-ilas	0	4-Cl	H	H		
73	Piridin-4-ilas	0	5-CH ₃	H	H		
74	Piridin-4-ilas	0	4-CH ₃ O	H	H		
75	5-CF ₃ -Piridin-2-ilas	0	5-CN	H	H		
76	5-CF ₃ -Piridin-2-ilas	0	4-F	5-CH ₃ O	H		
77	Primidin-2-ilas	0	H	H	5-Cl		
78	Primidin-2-ilas	0	H	H	6-F		

2 lentelė (tęsinys)

Jurginio No.	Z	X	A	B	E	Olefininis ⁺	Lydimosi temp. (°C)
79	Benzotriazol-2-ilas	O	4-CF ₃ O	H	5-F		
80	Benzotriazol-2-ilas	O	5-NO ₂	H	H	7,48	Derva
81	1,2,4-Triazol-1-ilas	CH ₂	H	H	H		
82	1,2,3-Triazol-1-ilas	CH ₂	H	H	H	7,38	Derva
83	Benzthiazol-2-ilas	O	H	H	H	7,50	117-119
84	3-Chloro-4-nitrobenzotriazin-2-ilas	O	H	H	H	7,49	Alyva
85	Primidin-2-ilas	OCH ₂	H	H	H	7,52	Derva
86	3,5-di-Cl-1,3,5-triazin-2-ilas	O	H	H	H		
87	Primidin-5-ilas	O	H	H	H	7,47	Alyva
88	3-Cl,5-(CH ₃ O)-1,3,5-triazin-2-ilas	O	H	H	H	7,50	Derva
89	6-Cl-Primidin-4-ilas	O	H	H	H	7,49	Alyva
90	5-Br-Primidin-2-ilas	O	H	H	H	7,48	Derva
91	5-Cl-Primidin-2-ilas	O	H	H	H	7,48	Alyva
92	Primidin-4-ilas	O	H	H	H	7,48	Alyva
93	2,6-Di-CH ₃ O-ilas Primidin-4-ilas	O	H	H	H	7,48	Alyva

2 lentelė (tęsinys)

Junginio No.	Z	X	A	B	E	Olefininis temp. (°C)	Lydimosi temp. (°C)
94	2-Cl-6-CH ₃ -Primidin-4-ilas	O	H	H	H	7,50	113-118
95	2,6-Di-Cl-Primidin-4-ilas	O	H	H	H	7,50	113-115
96	2,5,6-Tri-Cl-Primidin-4-ilas	O	H	H	H	7,49	Derva
97	2-Cl-Primidin-4-ilas	O	H	H	H	*	Alyva
98	2-CH ₃ -Thiazol-4-ilas	CH ₂ O	H	H	H	7,48	Alyva
99	Benzotiazol-2-ilas	OCH ₂	H	H	H	7,50	Derva
100	Pirazin-2-ilas	OCH ₂	H	H	H	7,49	Derva
101	6-Cl-Pirazin-2-ilas	OCH ₂	H	H	H	7,49	Derva
102	Chinolin-2-ilas	OCH ₂	H	H	H	7,49	Derva
103	6-Cl-Piridazin-3-ilas	OCH ₂	H	H	H	7,49	Put
104	Piridin-4-ilasN-oksidas	OCH ₂	H	H	H	7,48	Derva
105	5-CF ₃ -Piridin-2-ilas	OCH ₂	H	H	H	7,48	Derva
106	3-Cyanopiridin-2-ilas	O	H	H	H	7,48	Derva
107	5-NO ₂ -Piridin-2-ilas	O	H	H	H	7,49	Derva
108	Pirimidin-2-ilas	CH ₂ O	H	H	H		

2 lentelė (tęsinys)

Junginio No.	Z	X	A	B	E	Olefininis +	Lydimosi temp. (°C)
109	Pirimidin-2-ilas	SO ₂ O	H	H	H		
110	Pirimidin-2-ilas	NH	H	H	H	7,50	Derva
111	Pirimidin-2-ilas	N(CH ₃)	H	H	H	7,50	Derva
112	Pirimidin-2-ilas	CH ₂	H	H	H		
113	Pirimidin-2-ilas	CH(OH)	H	H	H	7,47	Derva
114	Pirimidin-2-ilas	CH ₂ CH ₂	H	H	H		
115	Pirimidin-4-ilas	O	H	H	H		
116	Pirimidin-4-ilas	CH ₂ O	H	H	H		
117	Pirimidin-4-ilas	OCH ₂	H	H	H		
118	Pirimidin-4-ilas	NH	H	H	H		
119	Pirimidin-4-ilas	S	H	H	H		
120	Pirimidin-4-ilas	CH ₂	H	H	H		
121	Pirimidin-4-ilas	CH(OH)	H	H	H		
122	Pirimidin-4-ilas	CH ₂ CH ₂	H	H	H		
123	Pirimidin-5-ilas	SO ₂ O	H	H	H		
124	Pirimidin-5-ilas	OCH ₂	H	H	H		
125	Pirimidin-5-ilas	NH	H	H	H		
126	Pirimidin-5-ilas	N(CH ₃)	H	H	H		

2 lentelė (tęsinys)

Junginio No.	Z	X	A	B	E	Olefininis + Lydimosi temperatūra (°C)
127	Pyrimidin-5-ilas	S	H	H	H	Derva
128	Pyrimidin-5-ilas	CH ₂	H	H	H	
129	Pyrimidin-5-ilas	CH(OH)	H	H	H	
130	6-Chloropiridazin-3-ilas	O	H	H	H	
131	6-Chloropiridazin-3-ilas	CH ₂ O	H	H	H	Derva
132	6-Chloropiridazin-3-ilas	NH	H	H	H	
133	6-Chloropiridazin-3-ilas	N(CH ₃)	H	H	H	
134	6-Chloropiridazin-3-ilas	CH(OH)	H	H	H	
135	Piridazin-4-ilas	O	H	H	H	Derva
136	Piridazin-4-ilas	OCH ₂	H	H	H	
137	Piridazin-4-ilas	NH	H	H	H	
138	Piridazin-4-ilas	SO ₂ O	H	H	H	
139	1,3,5-Triazin-2-ilas	NH	H	H	H	

2 lentelė (tęsinys)

Junginio No.	Z	X	A	B	E	Olefininis †	Lydimosi temp. (°C)
140	1,3,5-Triazin-2-ilas	N(CH ₃)	H	H	H		
141	1,2,4-Triazin-3-ilas	O	H	H	H		
142	1,2,4-Triazin-3-ilas	NH	H	H	H		
143	1,2,4-Triazin-3-ilas	N(CH ₃)	H	H	H		
144	1,2,4-Triazin-5-ilas	O	H	H	H		
145	1,2,4-Triazin-5-ilas	NH	H	H	H		
146	1,2,4-Triazin-6-ilas	O	H	H	H		
147	1,2,4-Triazin-6-ilas	N(CH ₃)	H	H	H		
148	Primidin-2-ilas	O	H	H	H		
149	N-oksidas Primidin-4-ilas 1-	O	H	H	H		
150	N-oksidas Primidin-4-ilas 3-	O	H	H	H		
151	N-oksidas Piridin-2-ilas N-oksidas	O	H	H	H		
152	Piridin-3-ilas N-oksidas	O	H	H	H		
153	Pirazin-2-ilas 1-N-oksidas	O	H	H	H		
154	Pirazin-2-ilas 4-N-oksidas	O	H	H	H		

2 lentelė (tęsinys)

Junginio No.	Z	X	A	B	E	Olefininis ⁺	Lydimosi temp. (°C)
155	Piridazin-3-ilas 1-N- oksidas	O	H	H	H		
156	Piridazin-3-ilas 2-N- oksidas	O	H	H	H		
157	Isochinolin-1-ilas	O	H	H	H		
158	Isochinolin-1-ilas	NH	H	H	H		
159	Isochinolin-1-ilas	CH ₂ O	H	H	H		
160	Isochinolin-1-ilas	OCH ₂	H	H	H		
161	Isochinolin-1-ilas	CH(OH)	H	H	H		
162	Isochinolin-1-ilas	S	H	H	H		
163	Isochinolin-1-ilas	SO ₂ O	H	H	H		
164	Chinolin-4-ilas	O	H	H	H		
165	Chinolin-4-ilas	NH	H	H	H		
166	Chinolin-4-ilas	CH ₂ O	H	H	H		
167	Chinolin-4-ilas	OCH ₂	H	H	H		
168	Chinolin-4-ilas	CH(OH)	H	H	H		
169	Chinolin-4-ilas	S	H	H	H		
170	Chinolin-4-ilas	SO ₂ O	H	H	H		

2 lentelė (tęsinys)

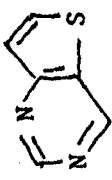
Jurginio No.	Z	X	A	B	E	Olefinai ⁺ nis	Lydimosi temp. (°C)
171	Kinazolin-4-ilas	O	H	H	H		
172	Kinazolin-4-ilas	NH	H	H	H		
173	Kinazolin-4-ilas	CH ₂ O	H	H	H		
174	Kinazolin-4-ilas	OCH ₂	H	H	H		
175	Kinazolin-4-ilas	CH(OH)	H	H	H		
176	Kinazolin-4-ilas	S	H	H	H		
177	Kinazolin-4-ilas	SO ₂ O	H	H	H		
178	7-ChloroKinazolin-4-ilas	O	H	H	H		
179	7-ChloroKinazolin-4-ilas	S	H	H	H		
180	7-ChloroKinazolin-4-ilas	NH	H	H	H		
181	Purin-6-ilas	O	H	H	H		
182	2-Chloropurin-6-ilas	S	H	H	H		
183	2-Chloropurin-6-ilas	NH	H	H	H		
184	5-NO ₂ -Thien-2-ilas	OCH ₂	H	H	H		
185	5-NO ₂ -Thien-2-ilas	O	H	H	H		
186	Thiazol-2-ilas	CH ₂ O	H	H	H		
187	Thiazol-2-ilas	O	H	H	H		
188	Thiazol-2-ilas	NH	H	H	H		

2 lentelė (tęsinys)

Junginio No.	Z	X	A	B	E	Olefininis ↑	Lydimosi temp. (°C)
189	Thiazol-4-ilas	CH ₂ O	H	H	H		
190	Thiazol-4-ilas	O	H	H	H		
191	Thiazol-4-ilas	NH	H	H	H		
192	Thiazol-5-ilas	CH ₂ O	H	H	H		
193	Thiazol-5-ilas	O	H	H	H		
194	Thiazol-5-ilas	NH	H	H	H		
195	Thiazol-2-ilas	CH ₂ O	H	H	H		
196	Thiazol-4-ilas	O	H	H	H		
197	Thiazol-5-ilas	NH ₂	H	H	H		
198	5-CF ₃ -1,3,4-Thia- diazol-2-ilas	O	H	H	H		
199	5-CF ₃ -1,3,4-Thia- diazol-2-ilas	OCH ₂	H	H	H		
200	4-Cl-1,2,5-Thia- diazol-3-ilas	O	H	H	H	7,49	115-116
201		O	H	H	H		

45

2 lentelė (tesinys)

įunginio No.	Z	X	A	B	E	Olefininis + Olefininis	Lydimosi temperatūra (°C)
202		NH	H	H	H		
203		N(CH ₃)	H	H	H		
204	4-Cl-pyrimidin-2-ilas	O	H	H	H	7,49	77-79,5
205	4-Br-pyrimidin-2-ilas	O	H	H	H		
206	4-F-pyrimidin-2-ilas	O	H	H	H		
207	4-CH ₃ -pyrimidin-2-ilas	O	H	H	H	7,49	95
208	4-CH ₃ O-pyrimidin-2-ilas	O	H	H	H	7,49	90
209	4-CH ₃ CH ₂ O-pyrimidin-2-ilas	O	H	H	H		
210	4-NO ₂ -pyrimidin-2-ilas	O	H	H	H		
211	4-Cyano-pyrimidin-2-ilas	O	H	H	H	7,49	46
212	4-CF ₃ -pyrimidin-2-ilas	O	H	H	H	7,50	Aliejus
213	4-C ₆ H ₅ -pyrimidin-2-ilas	O	H	H	H		
214	4-C ₆ H ₅ O-pyrimidin-2-ilas	O	H	H	H		

2 lentelė (tesinys)

Junginio No.	Z	X	A	B	E	Olefininis ⁺	Lydimosi temp. (°C)
215	5-F-Pirimidin-2-ilas	0	H	H	H	7,49	96-100
216	5-CH ₃ -Pirimidin-2-ilas	0	H	H	H		
217	5-CH ₃ O-Pirimidin-2-ilas	0	H	H	H		
218	5-CH ₃ CH ₂ O-Pirimidin-2-ilas	0	H	H	H		
219	5-NO ₂ -Pirimidin-2-ilas	0	H	H	H	7,49	Derva
220	5-Cyano-Pirimidin-2-ilas	0	H	H	H		
221	5-CF ₃ -Pirimidin-2-ilas	0	H	H	H		
222	5-C ₆ H ₅ -Pirimidin-2-ilas	0	H	H	H		
223	5-C ₆ H ₅ O-Pirimidin-2-ilas	0	H	H	H		
224	4,5-Di-Cl-Pirimidin-2-ilas	0	H	H	H		
225	4,6-Di-Cl-Pirimidin-2-ilas	0	H	H	H		
226	4-Cl-6-CH ₃ -Pirimidin-2-ilas	0	H	H	H		
227	4-Cl-5-CH ₃ O-Pirimidin-2-ilas	0	H	H	H		

2 lentelė (tęsinys)

Junginio No.	Z	X	A	B	E	Olefininis	Lydimosi temp. (°C)
228	2-F-Pirimidin-4-ilas	O	H	H	H		
229	2-Br-Pirimidin-4-ilas	O	H	H	H		
230	2-CH ₃ -Pirimidin-4-ilas	O	H	H	H		
231	2-CH ₃ O-Pirimidin-4-ilas	O	H	H	H		
232	2-CH ₃ CH ₂ O-Pirimidin-4-ilas	O	H	H	H		
233	2-NO ₂ -Pirimidin-4-ilas	O	H	H	H		
234	2-CH ₃ S-Pirimidin-4-ilas	O	H	H	H		
235	2-Ciano-Pirimidin-4-ilas	SO	H	H	H		
236	2-CF ₃ -Pirimidin-4-ilas	O	H	H	H		
237	2-C ₆ H ₅ O-Pirimidin-4-ilas	SO	H	H	H		
238	2-C ₆ H ₅ -Pirimidin-4-ilas	O	H	H	H		
239	6-F-Pirimidin-4-ilas	O	H	H	H		
240	6-Br-Pirimidin-4-ilas	O	H	H	H		
241	6-CH ₃ -Pirimidin-4-ilas	O	H	H	H		
242	6-CH ₃ O-Pirimidin-4-ilas	O	H	H	H		
243	6-CH ₃ CH ₂ O-Pirimidin-4-ilas	O	H	H	H		

2 lentelė (tęsinys)

Junginio No.	Z	X	A	B	E	+ Olefininis	Lydimosi temp. (°C)
244	6-NO ₂ -Pirimidin-4-ilas	O	H	H	H		
245	6-Ciano-Pirimidin-4-ilas	O	H	H	H		
246	6-CF ₃ -Pirimidin-4-ilas	O	H	H	H		
247	6-C ₆ H ₅ O-Pirimidin-4-ilas	O	H	H	H		
248	5-C ₆ H ₅ -Pirimidin-4-ilas	O	H	H	H		
249	5-F-Pirimidin-4-ilas	O	H	H	H		
250	5-Cl-Pirimidin-4-ilas	O	H	H	H		
251	5-Br-Pirimidin-4-ilas	O	H	H	H		
252	5-CH ₃ -Pirimidin-4-ilas	O	H	H	H		
253	5-CH ₃ O-Pirimidin-4-ilas	O	H	H	H		
254	5-CH ₃ CH ₂ O-Pirimidin-4-ilas	O	H	H	H		
255	5-NO ₂ -Pirimidin-4-ilas	O	H	H	H		
256	5-Ciano-Pirimidin-4-ilas	O	H	H	H		
257	5-CF ₃ -Pirimidin-4-ilas	O	H	H	H		
258	5-C ₆ H ₅ O-Pirimidin-4-ilas	O	H	H	H		
259	5-C ₆ H ₅ -Pirimidin-4-ilas	O	H	H	H		

2 lentelė (tęsinys)

Junginio No.	Z	X	A	B	E	Olefininis + temper.	Lydimosi temper. (°C)
260	2-Cl-Pirimidin-5-ilas	O	H	H	H		
261	2-CH ₃ -Pirimidin-5-ilas	O	H	H	H		
262	2-F-Pirimidin-5-ilas	O	H	H	H		
263	2-CH ₃ O-Pirimidin-5-ilas	O	H	H	H		
264	2-Cyano-Pirimidin-5-ilas	O	H	H	H		
265	4-CH ₃ -Pirimidin-5-ilas	O	H	H	H		
266	4-CH ₃ O-Pirimidin-5-ilas	O	H	H	H		
267	4-CF ₃ -Pirimidin-5-ilas	O	H	H	H		
268	2,4-di-CH ₃ -Pirimidin-5-ilas	O	H	H	H		
269	2-CH ₃ S-4-CH ₃ O-Pirimidin-5-ilas	O	H	H	H		
270	Pirrol-2-ilas	CONH	H	H	H	7,48	Put
271	6-Cl-3-NO ₂ -Piridin-2-ilas	O	H	H	H	7,50	Derva
272	6-Cl-5-NO ₂ -Piridin-2-ilas, 1:1 mišinys 3,6-Di-CH ₃ -Pirazin-2-ilas	O	H	H	H	7,49	Derva

2 lentelė (tęsinys)

Junginio No.	Z	X	A	B	E	Olefininis temp.	Lydimosi temp. (°C)
273	6-Cl-Pirazin-2-ilas	0	H	H	H	7,50	Derva
274	6-CH ₃ O-Piridazin-3-ilas	0	H	H	H	7,50	Derva
275	6-Cl-4-CH ₃ -Piridazin-3-ilas	0	H	H	H		
276	6-Cl-5-CH ₃ -Piridazin-3-ilas	0	H	H	H		
277	4-CF ₃ -Piridin-2-ilas	0	H	H	H	7,49	Derva
278	6-Cianopiridin-2-ilas	0	H	H	H	7,50	113,5-116
279	4-Cianopiridin-2-ilas	0	H	H	H	7,49	Derva
280	4-Acetilpiridin-2-ilas	0	H	H	H		
281	6-C ₆ H ₅ -Piridazin-3-ilas	0	H	H	H	7,49	50-54
282	2-(CH ₃ O ₂ C)-Piridin-2-ilas	0	H	H	H	2,82	95-98
283	5-(CH ₃ O ₂ C)-Piridin-3-ilas	0	H	H	H		
284	4-CF ₂ Cl-Piridin-2-ilas	0	H	H	H	7,49	Derva
285	3,5-Di-CF ₃ -Piridin-2-ilas	0	H	H	H		
286	6-CF ₃ -Piridin-2-ilas	0	H	H	H	7,49	72-74

2 lentelė (tęsinys)

Junginio No.	Z	X	A	B	E	Olefininis +	Lydimosi temp. (°C)
287	5-CF ₃ -Piridin-3-ilas	O	H	H	H		
288	2-Cl-Piridin-3-ilas	O	H	H	H		
289	2-CH ₃ O-Piridin-3-ilas	O	H	H	H		
290	2-Cl-Piridin-4-ilas	O	H	H	H		
291	2-CH ₃ O-Piridin-4-ilas	O	H	H	H		
292	2-Cl-Piridin-5-ilas	O	H	H	H		
293	2-CH ₃ O-Piridin-5-ilas	O	H	H	H		
294	3-CH ₃ S-Piridin-2-ilas	O	H	H	H		
295	4-CF ₃ O-Piridin-2-ilas	O	H	H	H		
296	4-CON(CH ₃) ₂ -Piridin- 2-ilas	O	H	H	H		
297	3-Cl-1,2,4-oksaz- diazol-5-ilas	O	H	H	H		
298	3-Cl-1,2,4-oksaz- diazol-5-ilas	S	H	H	H		
299	5-CH ₃ S-1,2,4-oksaz- diazol-3-ilas	O	H	H	H		
300	Piridin-2-ilas	CH(OH)	H	H	H	7,47	Derva

2 lentelė (tęsinys)

Junginio No.	Z	X	A	B	E	Olefininis +	Lydimosi temp. (°C)
301	Piridin-3-ilas	CH(OH)	H	H	H	7,50	101-102
302	Piridin-4-ilas	CH(OH)	H	H	H		
303	Piridin-2-ilas	CO	H	H	H		
304	Piridin-3-ilas	CO	H	H	H		
305	Piridin-4-ilas	CO	H	H	H	7,45	Derva
306	Thien-2-ilas	CH(OH)	H	H	H		
307	Purain-2-ilas	CH(OH)	H	H	H	7,47 7,49	Derva <i>Alyva</i>
308	N-CH ₃ -Pirrol-2-ilas	CH(OH)	H	H	H		
309	N-CH ₃ -Pirrol-2-ilas	CO	H	H	H		
310	6-Br-Piridin-2-ilas	OCH ₂	H	H	H		

2 lentelė (tęsinys)

Junginio No.	Z	X	A	B	E	Olefininis [†]	Lydimosi temp. (°C)
311	4-Cl-Pirimidin-2-ilas ir 2-Cl-Pirimidin-4-ilas (mišinys 3:1 ne- būtinai nurodytu santykiu)	OCH ₂	H	H	H	7.49	Alyva
312	2,6-Di-F-Pirimidin-4-ilas	O	H	H	H		
313	2-CH ₃ S-6-CH ₃ - Pirimidin-4-ilas	O	H	H	H	7.48	Derva
314	2-CH ₃ S-Pirimidin-4-ilas	O	H	H	H		
315	N-CH ₃ -Pirrol-2-ilas	CON- (CH ₃)	H	H	H	7.47	Derva
316	5-CF ₃ -Piridin-2-ilas	NH	H	H	H	7.49	Aliejus
317	2-Cl-Pirimidin-4-ilas	NH	H	H	H		
318	4-Cl-Pirimidin-2-ilas	NH	H	H	H	7.48	Derva
319	5-NO ₂ -6-(CH ₃) ₂ N- Piridin-2-ilas	O	H	H	H	7.48	Derva
320	6-Cl-4-CH ₃ -P ridazin- 3-ilas 6-Cl-5-CH ₃ -P ridazin-3-ilas (mišinys 3:2 nebūtinai nurodytu santykiu);	O	H	H	H	7.50	Derva

2 lentelė (tęsinys)

Junginio Nr	Z	X	A	B	E	Olefininis ⁺	Lydimosi temp. (°C)
321	6-(CH ₃ O ₂ C)- Piridin-3-ilas	O	H	H	H	7.49	Aliejus
322	Piridin-3-ilas	CONH	H	H	H	7.46	Aliejus
323	2-Cl-6-CH ₂ Cl- Pirimidin-4- ilas	O	H	H	H	7.50	Derva
324	3,5-di-CH ₃ -Izoksa- azol-4- ilas	O	H	H	H	7.47	Derva
325	2,4,6-tri-Cl- Pirimidin-5-ilas 5-CH ₂ Br-Pirimidin- 4-ila(2:1mišinys)	CH ₂ O	H	H	H	7.51	Derva
326	Pirimidin-2-ilas	NHSO ₂	H	H	H	7.47	165
327	6-Br-Piridin-2-ilas	O	H	H	H	7.49	111.5- 113
328	5-Br-Piridin-3-ilas	O	H	H	H	7.49	Derva
329	6-F-Piridin-2-ilas	SO ₂ NH	H	H	H	7.49	Derva

55

2 lentelė (tęsinys)

Junginio Nr	Z	X	A	B	E	Olefininis ⁺	Lydimosi temp. (°C)
330	Thiazol-2-ilas	NHCO	H	H	H	7.47	52-56
331	1,3,4-Thiadia- zol-2-ilas	NHCO	H	H	H	7.49	177-180
332	Piridin-2-ilas	NHCO	H	H	H	7.48	Derva
333	5-Br-Piridin-ilas 2-ilas	O	H	H	H	7.49	Derva
334	3,6-di-Cl-Pirid- azin-4-ilas 4,6-di-Cl-Pirid- azin-3-ilas (16%)	O	H	H	H	7.48	132- 135.5
335	1,3-di-CH ₃ -5-Cl- Pirazol-4-ilas	SO ₂ O	H	H	H	7.46	Derva
336	3,5-di-CH ₃ - Izoksazol-4-ilas	SO ₂ O	H	H	H	7.48	Derva
337	5-(1-CH ₃ -5-CF ₃ - Pirazol-3-ilas)- Thien-2-ilas	SO ₂ O	H	H	H	7.45	Derva
338	2-Cl-Piridin-3- ilas	CONH	H	H	H	7.44	Derva

2 lentelė (tęsinys)

Junginio Nr.	Z	X	A	B	E	Olefininis ⁺	Lydimosi temp. (°C)
339	Piridin-2-ilas	NH	H	H	H	7.48	Derva
340	5,6-di-Cl-	O	H	H	H	7.48	Derva
341	Pirimidin-4-ilas 5-(Piridin-2-ilas	SO ₂ O	H	H	H	7.55	Derva
342	Thien-2-ilas 2,4-di-CH ₃ -	SO ₂ O	H	H	H	7.47	Derva
343	Thiazol-5-ilas 4,5-di-Br-	SO ₂ O	H	H	H	7.45	Derva
344	Thien-2-ilas 5-C ₆ H ₅ -Pirimid- in-2-ilas	O	H	H	H	7.49	Derva
345	3-Cianopiridin- 2-ilas	OCH ₂	H	H	H	7.50	Derva
346	1H-Pirrol-2-ilas	CO	H	H	H	7.49	Derva
347	5-C ₆ H ₅ -1,2,4- Triazin-3-ilas	O	H	H	H	7.50	Derva

2 lentelė (tęsinys)

Junginio Nr.	Z	X	A	B	E	Olefininis ⁺	Lydimosi temp. (°C)
348	2,5-di-Cl- Thien-3-ilas	SO ₂ O	H	H	H	7.46	Derva
349	3-CF ₃ -Piridin- 2-ilas	O	H	H	H	7.49	Derva
350	3-NO ₂ -Piridin-2-ilas Thien-2-ilas	O	H	H	H	7.48	103- 104.5
351	6-(NH ₂ CO)- Piridazin-3-ilas	O	H	H	H	7.49	135- 139
352	4-(CH ₃ SO ₂)-Pirim- idin-2-ilas	O	H	H	H	7.49	Derva
353	2-(CH ₃ SO ₂)-Pirim- idin-4-ilas	O	H	H	H	7.49	Derva
354	3-NH ₂ -Piridin- 2-ilas	O	H	H	H	7.49	Derva
355	3-Ciano-4,6- di-CH ₃ -Piridin-2-ilas	O	H	H	H	7.48	145- 148
356	4-(HO ₂ C)-Pirimid- in-2-ilas	O	H	H	H	7.49	65

2 lentelė (tęsinys)

Junginio Nr.	Z	X	A	B	E	Olefininis ⁺	Lydimosi temp. (°C)
357	Piridin-2-ilas	CONH	H	H	H	7.48	Aliejus
358	Thien-2-ilas	CO	H	H	H	7.48	Derva
359	4-Cl-Pirimidin- 2-ilas	OCH ₂	H	H	H	7.49	Derva
360	Thiazol-2-ilas	CO	H	H	H	7.50	Derva
361	Thieno[2,3-d]- pirimidin-4- ilas	NH	H	H	H	7.48	70
362	3-NO ₂ -6-CH O- Piridin-2- ilas	O	H	H	H	7.48	Derva
363	3-Cianopiridin- 2-ilas	NH	H	H	H	7.49	139- 141
364	Pirazin-2- ilas	CH(OH)	H	H	H	7.46	Derva
365	3-Cianopiridin- 2-ilas	N(CH ₃)	H	H	H	7.53	Derva
366	6-Cl-Pirimidin- 4-ilas	OCH ₂	H	H	H	7.49	66.5- 68

2 lentelė (tęsinys)

Junginio Nr.	Z	X	A	B	E	Olefininis ⁺	Lydimosi temp. (°C)
367	4-Cianopiridin- 2-ilas	NH	H	H	H	7.49	60
368	3,5-di-CF ₃ - Piridin-2-ilas	O	H	H	H	7.49	Derva
369	3-NH ₂ -6-CH ₃ O- Piridin-2-ilas	O	H	H	H	7.44	Derva
370	3-I-Piridin-2-ilas	O	H	H	H	7.49	Derva
371	4-(CH ₃ O ₂ C)- Pirimidin-2-ilas	O	H	H	H	7.49	84-85
372	Pirazin-2-ilas	CO	H	H	H	7.50	Derva
373	2,6-di-F-Pirim- idin-4-ilas	OCH ₂	H	H	H	7.49	Derva
374	2,6-di-Cl- Pirimidin-4-ilas ir 4,6-di-Cl- Pirimidin-2-ilas (3:1 mišinys)	OCH ₂	H	H	H	7.49	Derva

2 lentelė (tęsinys)

Junginio Nr.	Z	X	A	B	E	Olefininis ⁺	Lydimosi temp. (°C)
375	4-CH ₃ S-Primidin- 2-ilas	O	H	H	H	7.49	94-96
376	3-NO ₂ -Piridin-2- ilas	NH	H	H	H	7.50	Aliejus
377	3-(CH ₃ CONH)- Piridin-2- ilas	O	H	H	H	7.49	54
378	3-(CH ₃ SO ₂) ₂ N- Piridin-2- ilas	O	H	H	H	7.50	167- 169
379	3-NH ₂ -6-Cl- Piridin-2- ilas	O	H	H	H	7.50	Derva
380	5-NH ₂ -6-Cl- Piridin-2- ilas	O	H	H	H	7.49	99- 100
381	3-(CHONH)- Piridin-2- ilas	O	H	H	H	7.49	75
382	5-Cianopiridin- 2-ilas	N(CH ₃)	H	H	H	7.48	Aliejus
383	3-Ciano-5-NO ₂ - Piridin-2- ilas	O	H	H	H	7.48	Derva

2 lentelė (tęsinys)

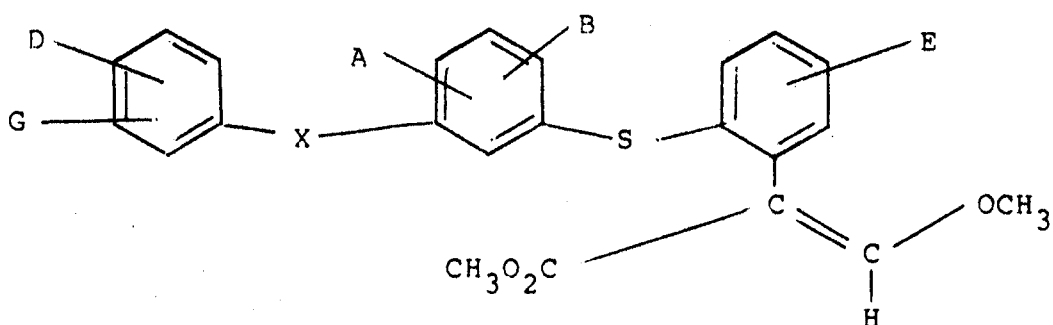
Junginio Nr.	Z	X	A	B	E	Olefininis ⁺	Lydimosi temp. (°C)
384	3-Ciano-5-NH ₂ Piridin-2-ilas	O	H	H	H	7.48	Derva
385	4,6-di-Ciano- piridin-2-ilas	O	H	H	H	7.50	Derva
386	4-Cianopiridin- 3-ilas	O	H	H	H	7.48	97-99
387	3-NO ₂ -Piridin- 2-ilas	N(CH ₃)	H	H	H	7.51	Put
388	2-Cianopiridin- 3-ilas	O	H	H	H	7.46	93-95
389	3-Cianopirazin- 2-ilas	O	H	H	H	7.49	91-93
390	5-NO ₂ -Thiazol- 2-ilas	O	H	H	H	7.48	Derva
391	2-F-Piridin- 4-ilas	O	H	H	H	7.48	Derva
392	6-Ciano- pirazin-2-ilas	O	H	H	H	7.50	Aliejus

"+" -Cheminis singleto poslinkis nuo beta -metoksipropenoato

olifininio protono (m.d. nuo tetrametiksilano). Tirpiklis:CDCl₃, jei nenurodyt

"*" - BMR¹³C duomenys pateikti 5 lentelėje

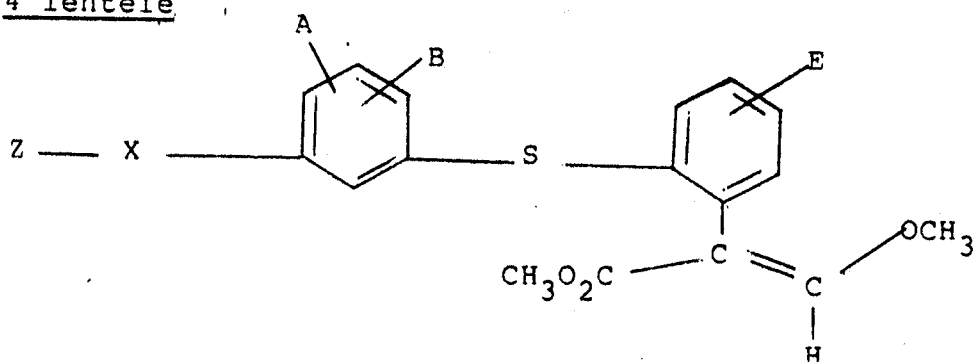
3 lentelė



3 lentelė apima 446 aukščiau pateiktos bendros struktūros junginius. Pirmų 445 junginių visos X, D, G, A, B ir E reikšmės pateiktos 1 lentelėje. Tai yra, junginiai 1 - 445 3 lentelėje yra tokie patys, kaip ir 1 lentelėje, išskyrus tai, kad 1 lentelėje K yra deguonis, o 3 lentelėje - nėra. Junginio 446 struktūra yra aukščiau pažymėta, kur X yra deguonis, o A, B, D, E ir G visi yra vandenilis. Junginio 446 gavimas pateiktas 11 pavyzdyje.

Junginys Nr.	X	D	G	A	B	E	Olefininis	Lyd.temp. (°C)
23	CH ₂ O	H	H	H	H	H	7.49	Derva
51	SO ₂ O	H	H	H	H	H	7.46	Derva
131	O	2-NO ₂	H	H	H	H	7.48	Derva
212	CH ₂ O	4-NO ₂	H	H	H	H	7.49	Derva
446	O	H	H	H	H	H	7.48	48-51.5

4 lentelė



4 lentelėje pateikiama 320 aukščiau užrašytos struktūros

junginių, kur visos Z, X, A, B ir E reikšmės nurodytos 2 lentelėje. Tuo būdu 1 - 320 junginiai 4 lentelėje yra tokie patys, kaip ir 2 lentelėje, tik K yra deguonis 2 lentelėje, o 4 lentelėje - nėra.

Junginys Nr.	Z	X	A	B	E	Olefini- nis ⁺	Lyd.temp. (°C)
22	Pirimidin-2-ilas	O	H	H	H	7.49	Derva
87	Pirimidin-5-ilas	O	H	H	H	7.48	Derva

5 lentelė : ¹H-BMR spektrų duomenys

5 lentelėje pateikti atskiri ¹H-BMR spektro duomenys kai kuriems 1, 2, 3 ir 4 lentelėse pateiktiems junginiams. Cheminis poslinkis matuojamas milijoninėmis dalimis nuo tetrametilsilano ir visur tirpikliu naudojamas deuteruotas chloroformas. Stulpelyje "dažnumas" pateiktas darbinis BMR spektrometro dažnis. Naudojami tokie sutrumpinimai:

br = platus

s = singletas

d = dubletas

t = tripletas

q = kvartetas

m = multiplotas

LENTELES NO.	JUNGUNIO NO.	DAŽNIS (MHz)	
I	2	60	3.36 (3H, s), 3.46 (3H, s), 6.6-7.6 (14H, m) m.d.
I	7	60	1.98 (3H, s), 3.48 (3H, s), 3.59 (3H, s), 6.6-7.3 (13H, m), 7.39 (1H, s) m.d.
I	15	270	2.88 (4H, s), 3.60 (3H, s), 3.77 (3H, s), 6.76-3.93 (4H, m), 7.07-7.33 (9H, m), 7.49 (1H, s) m.d.
I	25	270	3.59 (3H, s), 3.74 (3H, s), 4.05 (2H, s), 6.80-7.32 (13H, m), 7.47 (1H, s) m.d.
I	27	270	3.60 (3H, s), 3.77 (3H, s), 3.98 (2H, q), 6.60-6.90 (4H, m), 7.10-7.30 (4H, m), 7.39-7.50 (5H, m), 7.48 (1H, s) m.d.
I	29	400	3.59 (3H, s), 3.77 (3H, s), 4.26 (2H, s), 6.70-6.90 (4H, m), 7.10-7.30 (5H, m), 7.45-7.52 (1H, m), 7.48 (1H, s), 7.60-7.70 (3H, m) m.d.
I	38	270	2.99 (3H, s), 3.56 (3H, s), 3.69 (3H, s), 4.46 (2H, s),

65

LENTELES NO.	JUNGINIO NO.	DAŽNIS (MHz)	
I	62	270	6.65-6.73 (3H, t), 6.79 (1H, d), 6.85-6.95 (3H, t), 7.10 (1H, t), 7.16-7.29 (5H, m), 7.44 (1H, s) m.d.
I	67	270	3.61 (3H, s), 3.78 (3H, s), 6.7-7.6 (11H, m), 7.46 (1H, s), 7.8 (3H, m) m.d.
I	84	270	3.59 (3H, s), 3.79 (3H, s), 7.02-7.40 (10H, m), 7.40 (1H, s), 7.70 (2H, d), 8.32 (1H, s) m.d.
I	86	400	3.60 (3H, s), 3.75 (3H, s), 6.97 (1H, d), 7.14-7.53 (11H, m), 7.50 (1H, s), 7.59 (1H, d), 7.70 (1H, d) m.d.
I	96	400	3.60 (3H, s), 3.74 (3H, s), 6.99 (1H, d), 7.09 (1H, d), 7.12-7.41 (9H, m), 7.49 (1H, s), 7.50 (1H, s), 7.59 (1H, d), 8.38 (1H, s) m.d.
I		400	3.07 (2H, t), 3.60 (3H, s), 3.75 (3H, s), 4.10 (2H, t), 6.5-7.4 (13H, m), 7.48 (1H, s) m.d.

LENTELES NO.	JUNGINIO NO.	DAŽNIS (MHz)	
I	115	270	3.60 (3H, s), 3.75 (3H, s), 4.63 (2H, d), 6.3-7.4 (15H, m), 7.47 (1H, s) m.d.
I	119	270	3.60 (3H, s), 3.76 (3H, s), 6.58-6.72 (3H, m), 6.96- 7.32 (8H, m), 7.41-7.50 (1H, m), 7.48 (1H, s) m.d.
I	120	270	3.60 (3H, s), 3.76 (3H, s), 6.62-7.36 (12H, m), 7.48 (1H, s) m.d.
I	122	90	3.61 (3H, s), 3.77 (3H, s), 6.5-6.8 (3H, m), 6.9-7.4 (9H, m), 7.50 (1H, s) ppm.d.
I	123	90	3.64 (3H, s), 3.79 (3H, s), 6.6-6.9 (2H, m), 6.9-7.5 (10H, m), 7.51 (1H, s) ppm.d.
I	125	90	2.23 (3H, s), 3.61 (3H, s), 3.77 (3H, s), 6.5-6.8 (3H, m), 6.8 (3H, m), 6.8-7.5 (9H, m), 7.51 (1H, s) m.d.
I	126	400	2.33 (3H, s), 3.61 (3H, s), 3.76 (3H, s), 6.62-7.3 (12H, m), 7.49 (1H, s) m.d.

LENTELES NO.	JUNGINIO NO.	DAŽNIS (MHZ)	
I	127	90	2.32 (3H, s), 3.60 (3H, s), 3.75 (3H, s), 6.62-7.40 (12H, m), 7.49 (1H, s) m.d.
I	128	270	3.58 (3H, s), 3.74 (3H, s), 3.82 (3H, s), 6.56-6.65 (3H, m), 6.84-7.00 (4H, m), 7.06-7.28 (5H, m), 7.46 (1H, s) m.d.
I	130	60	3.6 (3H, s), 3.75 (3H, s), 3.8 (3H, s), 6.57-7.3 (12H, m), 7.48 (1H, s) m.d.
I	131	270	3.61 (3H, s), 3.76 (3H, s), 6.62-6.79 (3H, m), 6.97- 7.34 (7H, m), 7.47 (1H, s), 7.48-7.56 (1H, m), 7.94 (1H, d) m.d.
I	135	90	3.62 (3H, s), 3.78 (3H, s), 6.6-6.9 (3H, m), 6.9-7.6 (9H, m), 7.51 (1H, s) m.d.
I	138	270	3.60 (3H, s), 3.76 (3H, s), 6.62-6.76 (3H, m), 6.90- 7.02 (2H, m), 7.12-7.38 (7H, m), 7.48 (1H, s) m.d.

LENTELES NO.	JUNGINIO NO.	DAŽNIS (MHz)	
I	141	250	3.59 (3H, s), 3.70 (3H, s), 6.6-6.8 (3H, m), 6.9-7.1 (1H, m), 7.1-7.5 (8H, m), 7.49 (1H, s) m.d.
I	143	90	3.56 (3H, s), 3.68 (3H, s), 6.54-7.36 (17H, m), 7.46 (1H, s) m.d.
I	144	400	3.60 (3H, s), 3.75 (3H, s), 6.65-6.76 (5H, m), 6.97 (1H, d), 7.02 (2H, d), 7.10-7.38 (9H, m), 7.48 (1H, s).
I	145	90	3.62 (3H, s), 3.77 (3H, s), 6.64-7.49 (17H, m), 7.50 (1H, s) m.d.
I	150	90	3.59 (3H, s), 3.74 (3H, s), 6.6-6.9 (3H, m), 6.9-7.7 (14H, m), 7.50 (1H, s) m.d.
I	157	90	3.64 (3H, s), 3.79 (3H, s), 6.6-7.5 (11H, m), 7.53 (1H, s) m.d.
I	171	90	3.61 (3H, s), 3.76 (3H, s), 6.6-6.8 (2H, m), 6.8-7.5 (10H, m), 7.51 (1H, s) m.d.

LENTELES NO.	JUNGINIO NO.	DAŽNIS (MHz)	
I	175	90	3.57 (3H, s), 3.73 (3H, s), 6.50 (1H, t), 6.58 (2H, d), 6.9-7.4 (9H, m), 7.41 (1H, s) m.d,
I	177	90	2.25 (3H, s), 3.60 (3H, s), 3.76 (3H, s), 6.4-6.6 (3H, m), 6.9-7.4 (9H, m), 7.47 (1H, s) m.d,
I	179	90	3.57 (3H, s), 3.68 (3H, s), 3.72 (3H, s), 6.20 (3H, m), 6.8-7.4 (9H, m), 7.42 (1H, s) m.d,
I	180	250	3.61 (3H, s), 3.76 (3H, s), 6.4-6.6 (2H, m), 6.9-7.0 (3H, m), 7.07 (1H, t), 7.16 (1H, t), 7.2-7.4 (4H, m), 7.46 (1H, d), 7.47 (1H, s) m.d,
I	205	60	2.11 (3H, s), 3.35 (3H, s), 3.40 (3H, s), 4.71 (2H, s), 6.2-7.2 (12H, m), 7.24 (1H, s) m.d,
I	206	90	2.32 (3H, s), 3.55 (3H, s), 3.7 (3H, s), 4.9 (2H, s), 6.45-7.28 (12H, m), 7.40 (1H, s) m.d,

90

LENTELES NO.	JUNGINIO Nº.	DAŽNIS (MHz)	
I	208	90	3.54 (3H, s), 3.7 (3H, s), 3.77 (3H, s), 6.44-7.3 (12H, m), 7.39 (1H, s) m.d.
I	214	90	3.56 (3H, s), 3.73 (3H, s), 5.0 (2H, s), 6.5-7.65 (12H, m), 7.41 (1H, s) m.d.
I	216	90	3.56 (3H, s), 3.69 (3H, s), 5.04 (2H, s), 6.49-7.57 (12H, m), 7.41 (1H, s) m.d.
I	217	60	3.55 (3H, s), 3.65 (3H, s), 4.90 (2H, s), 7.45 (1H, s), 6.4-7.5 (12H, m) m.d.
I	218	90	3.54 (3H, s), 3.7 (3H, s), 4.9 (2H, s), 6.42-7.48 (12H, m), 7.4 (1H, s) ppm.d.
I	220	60	3.40 (3H, s), 3.49 (3H, s), 4.85 (2H, s), 6.2-7.5 (13H, m) m.d.
I	230	60	3.44 (3H, s), 3.52 (3H, s), 4.87 (2H, s), 6.3-7.6 (18H, m) m.d.

CH

LENTEĻS NO	JUNGINIO NO	DAŽNIS (MHz)	
I	247	90	3.5 (3H, s), 3.61 (3H, s), 5.07 (2H, s), 6.41-7.79 (15H, m), 7.42 (1H, s) m.d.
I	248	90	3.56 (3H, s), 3.7 (3H, s), 5.4 (2H, s), 6.5-8.4 (15H, m), 7.42 (1H, s) m.d.
I	283	60	3.45 (3H, s), 3.59 (3H, s), 6.5-8.0 (13H, m) m.d.
I	284	60	3.45 (3H, s), 3.57 (3H, s), 6.3-7.8 (13H, m) m.d.
I	285	250	3.57 (3H, s), 3.72 (3H, s), 6.55-7.78 (12H, m), 7.45 (1H, s) m.d.
I	288	60	3.39 (3H, s), 3.52 (3H, s), 6.4-7.4 (10H, m), 7.45 (1H, s), 7.7-8.0 (2H, m) m.d.
I	290	60	2.25 (3H, s), 3.43 (3H, s), 3.55 (3H, s), 6.4-7.7 (13H, m) m.d.
I	291	90	2.43 (3H, s), 3.54 (3H, s), 3.71 (3H, s), 6.5-7.68 (12H, m), 7.38 (1H, s) m.d.

LENTELES NO	JUNGINIO NO	DAŽNIS (MHz)	
I	295	60	3.52 (3H, s), 3.67 (3H, s), 6.6-8.0 (13H, m) m.d.
I	296	90	3.54 (3H, s), 3.72 (3H, s), 6.48-8.69 (12H, m), 7.41 (1H, s) m.d.
I	318	60	3.59 (3H, s), 3.72 (3H, s), 6.7-8.0 (12H, m) m.d.
I	332	90	3.48 (3H, s), 3.63 (3H, s), 6.48-8.3 (15H, m), 7.34 (1H, s) m.d.
I	333	90	3.44 (3H, s), 3.61 (3H, s), 6.41-8.71 (15H, m), 7.35 (1H, s) m.d.
I	360	250	3.55 (3H, s), 3.71 (3H, s), 6.15 (1H, s), 6.48-7.39 (14H, m), 7.44 (1H, s) m.d.
I	367	250	3.56 (3H, s), 3.70 (3H, s), 6.5-6.7 (2H, m), 6.95 (3H, t), 7.12 (2H, q), 7.2-7.4 (4H, m), 7.45 (1H, s), 7.48 (1H, d) m.d.

LENTELES	JUNGINIO	DAŽNIS	
NO	NO	(MHz)	
I	368	90	3.57 (3H, s), 3.73 (3H, s), 6.33 (3H, s), 6.9-7.5 (14H, m), 7.46 (1H, s) m.d.
I	369	60	3.5 (3H, s), 3.6 (3H, s), 4.1 (2H, br s), 6.6-7.3 (12H, m), 7.43 (1H, s) m.d.
I	370	90	3.6 (3H, s), 3.76 (3H, s), 5.24 (2H, s), 6.51-8.04 (13H, m), 7.47 (1H, s) m.d.
I	371	400	3.60 (3H, s), 3.75 (3H, s), 3.76 (3H, s), 4.95 (2H, s), 6.80-6.94 (6H, m), 7.03 (1H, s), 7.08-7.16 (2H, q), 7.24-7.30 (3H, m), 7.49 (1H, s) m.d.
I	373	270	3.60 (3H, s), 3.76 (3H, s), 5.02 (2H, s), 6.88-6.96 (2H, d), 6.98-7.40 (10H, m), 7.48 (1H, s) m.d.
I	374	270	3.61 (3H, s), 3.76 (3H, s), 5.05 (2H, s), 6.76-7.60 (m), 7.48 (s) m.d.

74

LENTELES NO.	JUNGINIO NO.	DAŽNIS (MHz)	
I	376	270	3.59 (3H, s), 3.73 (3H, s), 5.08 (2H, s), 6.84-6.96 (4H, m), 7.04-7.40 (8H, m), 7.46 (1H, s) m.d.
I	377	400	3.59 (3H, s), 3.75 (3H, s), 3.87 (3H, s), 5.10 (2H, s), 6.8-6.95 (6H, m), 7.05-7.15 (3H, m), 7.22-7.30 (3H, m), 7.48 (1H, s) m.d.
I	378	400	3.60 (3H, s), 3.75 (3H, s), 5.14 (2H, s), 6.90-7.04 (5H, m), 7.13-7.19 (2H, m), 7.24-7.32 (3H, m), 7.47 (1H, s), 7.48-7.60 (2H, m) m.d.
I	381	270	3.59 (3H, s), 3.75 (3H, s), 5.17 (2H, s), 6.75 (1H, d), 6.88-7.35 (11H, m), 7.48 (1H, s), 7.50 (1H, m), 7.85 (1H, d) m.d.
I	382	400	3.60 (3H, s), 3.77 (3H, s), 5.10 (2H, s) 6.94 (2H, d), 7.50 (1H, s), 7.10-7.18 (2H, m), 7.40-7.33 (4H, m), 7.42 (1H, t), 7.48 (1H, s), 7.78 (1H, s), 7.84 (1H, d) m.d.

LENTELES	JUNGINIO	DAŽNIS	
NO	NO	(MHz)	
I	383	270	3.60 (3H, s), 3.72 (3H, s), 4.97 (2H, s), 6.84-7.36 (12H, m), 7.47 (1H, s) m.d.
I	384	400	3.53 (3H, s), 3.68 (3H, s), 4.91 (2H, s), 6.73-7.26 (12H, m), 7.40 (1H, s), m.d.
I	385	270	3.58 (3H, s), 3.73 (3H, s), 4.95 (2H, m), 6.58 (2H, m), 6.66 (1H, d), 6.86-7.35 (14H, m) m.d.
I	386	270	3.59 (3H, s), 3.73 (3H, s), 4.97 (2H, s), 6.80-6.92 (4H, m), 7.0-7.32 (8H, m), 7.47 (1H, s) m.d.
I	387	270	3.60 (3H, s), 3.77 (3H, d), 3.96 (2H, s), 6.60 (1H, s), 6.70-6.90 (3H, m), 7.18 (2H, q), 7.24-7.36 (3H, m), 7.27 (1H, s), 7.40-7.48 (3H, m) m.d.
I	388	400	3.60 (3H, s), 3.78 (3H, s), 4.25 (2H, d), 6.68 (1H, s), 6.75 (1H, d), 6.82 (1H, d), 6.90 (1H, d), 7.13 (4H, m), 7.27 (1H, s), 7.42-7.48 (3H, m), 7.57 (2H, d) m.d.

26

LENTELES NO	JUNGINIO NO	DAŽNIS (MHz)	
I	389	270	3.58 (3H, s), 3.72 (3H, s), 5.08 (2H, s), 6.80-6.96 (4H, m), 7.08-7.32 (7H, m), 7.46 (1H, s), 7.54 (1H, d) m.d.
I	391	250	2.22 (6H, s), 3.65 (3H, s), 3.75 (3H, s), 6.60-7.30 (11H, m), 7.50 (1H, s), m.d.
I	392	90	2.17 (3H, s), 2.34 (3H, s), 3.55 (3H, s) 3.70 (3H s), 6.50-7.24 (11H, m), 7.51 (1H, s) m.d.
I	393	90	2.14 (3H, s), 2.27 (3H, s), 3.59 (3h, s), 3.76 (3H, s), 6.53-7.28 (11H, m), 7.50 (1H, s) m.d.
I	394	250	2.08 (6H, s), 3.52 (3H, s), 3.75 (3H, s), 6.40-7.20 (11H, m), 7.50 (1H, s) m.d.
I	395	90	2.24 (6H, s), 3.61 (3H, s), 3.77 (3H, s), 6.63-7.30 (11H, m) 7.50 (1H, s) m.d.
I	396	90	2.28 (6H, s), 3.60 (3H, s), 3.77 (3H, s), 6.63-7.24 (11H, m), 7.51 (1H s), m.d.

AT

LENTELES NO	JUNGINIO NO	DAŽNIS (MHz)	
I	397	270	3.58 (3H, s), 3.73 (3H, s), 4.96 (2H, s), 6.80 (2H, d), 6.86-6.92 (2H, m), 7.0-7.16 (3H, m), 7.20-7.38 (5H, m), 7.47 (1H, s) m.d.
I	399	270	3.60 (3H, s), 3.76 (3H, s), 4.08 (2H, s), 6.80-7.58 (12H, m), 7.47 (1H, s), md.
I	400	400	3.59 (3H, s), 3.75 (3H, s), 4.18 (2H, s), 6.85 (2H, d), 7.00 (1H, s), 7.05 (1H, d), 7.10-7.35 (5H, m), 7.48 (1H, s), 8.10 (2H, d) m.d.
I	401	400	3.72 (3H, s), 3.88 (3H, s), 4.22 (2H, q), 6.83 (1H, s), 6.88-7.0 (3H, m), 7.21-7.42 (4H, m), 7.50 (3H, d), 7.60 (1H, s), 7.66 (1H, m) m.d.
I	402	400	3.70 (3H, s), 3.87 (3H, s), 4.70 (2H, s) 6.80 (1H, d), 6.95-7.05 (3H, m), 7.22- 7.48 (5H, m), 7.59 (1H, s), 7.65 (2H, s), 7.92 (1H, d) md.

98

LENTELES NO	JUNGINIO NO	DAŽNIS (MHz)	
I	405	60	1.21 (9H, s), 3.42 (3H, s), 3.46 (3H, s), 4.80 (2H, s), 6.3-7.3 (12H, m), 7.31 (1H, s) m.d.
I	406	270	3.57 (3H, s), 3.71 (3H, s), 5.32 (2H, s), 6.92 (1H, d), 7.16 (2H, t), 7.24-7.43 (8H, m), 7.46 (1H, s), 7.66 (1H, d), 7.76 (1H, d) m.d.
I	407	270	3.51 (3H, s), 3.73 (3H, s), 4.59 (2H, d), 6.70 (1H, t), 6.96 (1H, d), 7.08 (1H, dd), 7.19 (1H, d), 7.22- 7.37 (9H, m), 7.41 (1H, s), 7.48 (1H, d) m.d.
I	408	270	3.59 (3H, s), 3.71 (3H, s), 4.29 (2H, s), 6.94 (1H, d), 7.13-7.38 (10H, m), 7.45 (1H, s), 7.51 (1H, t), 7.63 (1H, d) m.d.
I	409	270	3.61 (3H, s), 3.78 (3H, s), 6.99 (1H, d), 7.15-7.36 (4H, m), 7.44 (1H, t), 7.50 (1H, s), 7.53-7.65 (2H, m), 7.78 (1H, t), 7.89 (1H, d), 8.10-8.19 (2H, m) m.d.

LENTELES NO	JUNGINIO NO	DAŽNIS (MHz)	
I	410	400	3.60 (3H, s), 3.75 (3H, s), 5.63 (2H, s), 6.6-7.3 (12H, m), 7.47 (1H, s) m.d.
I	411	400	3.60 (3H, s), 3.75 (3H, s), 4.8 (1H, d), 4.94 (1H, d), 6.6-7.7 (13H, m), 7.47 (1H, s) m.d.
I	412	270	1.67 (3H, d), 3.55 (3H, s), 3.70 (3H, s), 5.45 (1H, q), 6.5-8.1 (13H, m), 7.45 (1H, s) m.d.
I	413	270	3.59 (3H, s), 3.73 (3H, s), 5.17 (2H, s), 6.90-6.99 (2H, m), 7.12-7.43 (1H, m), 7.49 (1H, s), 8.08 (1H, s) m.d.
I	414	270	3.55 (3H, s), 3.70 (3H, s), 5.21 (2H, s), 6.91-7.0 (2H, m), 7.10-7.19 (1H, m), 7.21-7.38 (9H, m), 7.46 (1H, s), 7.53-7.60 (2H, m) m.d.
I	415	270	2.05 (2H, m), 2.78 (2H, t), 3.60 (3H, s), 3.75 (3H, s), 3.90 (2H, t), 6.5-7.3 (13H, m), 7.48 (1H, s) m.d.

LENTELES NO	JUNGINIO NO	DAŽNIS (MHz)	
I	416	270	1.78 (4H, m), 2.65 (2H, m), 3.60 (3H, s), 3.75 (3H, s), 3.9 (2H, m), 6.5-7.3 (13H, m), 7.47 (1H, s) m.d.
I	417	270	1.44-1.85 (6H, m), 2.62 (2H, t), 3.60 (3H, s), 3.75 (3H, s), 3.87 (2H, t), 6.48-7.31 (13H, m), 7.48 (1H, s) m.d.
I	418	270	3.61 (3H, s), 3.76 (3H, s), 5.68 (1H, s), 6.8-7.6 (10H, m), 7.50 (1H, s), 7.8 (2H, m) m.d.
I	419	270	3.60 (3H, s), 3.74 (3H, s), 3.89 (3H, s), 6.9-7.6 (10H, m), 7.49 (1H, s), 7.9 (2H, m) m.d.
I	420	270	3.62 (3H, s), 3.78 (3H, s), 6.72-7.67 (13H, m), 7.49 (1H, s) m.d.
I	422	270	3.62 (3H, s), 3.80 (3H, s), 3.87 (3H, s), 6.72-7.48 (12H, m), 7.48 (1H, s), 7.78 (1H, s) m.d.

LENTELES NO	JUNGINIO NO	DAŽNIS (MHz)	
I	423	270	3.60 (3H, s), 3.70 (3H, s), 4.23 (4H, m), 6.53-7.3 (13H, m), 7.45 (1H, s) m.d.
I	424	60	3.40 (3H, s), 3.50 (3H, s), 6.40-8.4 (15H, m), 8.95 (1H, s) m.d.
I	425	270	3.60 (3H, s), 3.75 (3H, s), 5.40 (2H, s), 6.55-7.5 (13H, m), 7.47 (1H, s) ppm.d.
I	426	90	3.53 (3H, s), 3.61 (3H, s), 3.63 (3H, s), 3.66 (3H, s), 4.90 (2H, s), 6.40-7.6 (14H, m) m.d.
I	427	90	3.43 (3H, s), 3.61 (3H, s), 6.4-7.4 (10H, m), 7.32 (1H, s), 7.77 (2H, d) m.d.
I	428	90	3.55 (3H, s), 3.65 (3H, s), 3.85 (3H, s), 6.7-8.0 (13H, m) m.d.
I	443	270	3.59 (3H, s), 3.74 (3H, s), 5.17 (2H, s), 6.6-7.4 (14H, m), 7.47 (1H, s) m.d.

LENTELES NO	JUNGINIO NO	DAŽNIS (MHz)	
II	23	270	3.63 (3H, s), 3.74 (3H, s), 6.97-7.05 (3H, m), 7.10 (1H, d), 7.22-7.33 (4H, m), 7.48 (1H, d), 7.49 (1H, s), 8.54 (2H, d) m.d.
II	30	270	3.60 (3H, s), 3.74 (3H, s), 6.73-7.35 (8H, m), 7.49 (1H, s), 8.10 (1H, m), 8.25 (1H, m), 8.38 (1H, m) m.d.
II	47	270	3.60 (3H, s), 3.75 (3H, s), 5.52 (2H, s), 6.96 (2H, d), 7.07-7.40 (8H, m), 7.49 (1H, s), 7.61-7.71 (2H, q) m.d.
II	52	60	3.51 (3H, s), 3.64 (3H, s), 7.40 (1H, s), 6.5-7.8 (11H, m) m.d.
II	53	270	3.60 (3H, s), 3.75 (3H, s), 6.74-7.35 (9H, m), 7.49 (1H, s), 7.88 (1H, m), 8.43 (1H, m) m.d.
II	69	270	3.60 (3H, s), 3.75 (3H, s), 6.73-7.36 (9H, m), 7.49 (1H, s), 7.89 (1H, m), 8.45 (1H, m).

LENTELES NO	JUNGINIO NO	DAŽNIS (MHz)	
II	81	270	3.63 (3H, s), 3.78 (3H, s), 5.32 (2H, s), 6.84-6.92 (4H, m), 7.10-7.30 (4H, m), 7.48 (1H, s), 7.98 (1H, s), 8.08 (1H, s) m.d.
II	83	90	3.54 (3H, s), 3.65 (3H, s), 6.76-7.68 (12H, m), 7.38 (1H, s) m.d.
II	86	90	3.62 (3H, s), 3.79 (3H, s), 6.8-7.5 (8H, m), 7.52 (1H, s) m.d.
II	37	270	3.61 (3H, s), 3.76 (3H, s), 6.66-6.74 (2H, m), 6.79 (1H, dd), 7.00 (1H, d), 7.16 (1H, m), 7.24-7.34 (3H, m), 7.47 (1H, s), 8.47 (2H, s), 8.96 (1H, s) m.d.
II	88	90	3.62 (3H, s), 3.76 (3H, s), 4.30 (3H, s), 6.80-7.42 (8H, m), 7.50 (1H, s) m.d.
II	90	270	3.61 (3H, s), 3.76 (3H, s), 6.77 (1H, t), 6.86 (2H, m), 7.04 (1H, d), 7.15 (1H, m), 7.29 (3H, m), 7.48 (1H, s), 8.55 (2H, s) m.d.

LENTEĻĒS NO	JUNGINIO NO	DAŽNIS (MHz)	
II	91	270	3.61 (3H, s), 3.75 (3H, s), 6.77 (1H, t), 6.83-6.89 (2H, m), 7.04 (1H, d), 7.15 (1H, t), 7.25-7.35 (3H, m), 7.48 (1H, s), 8.47 (2H, s) m.d.
II	93	270	3.60 (3H, s), 3.75 (3H, s), 3.90 (3H, s), 3.94 (3H, s), 5.67 (1H, s), 6.76 (1H, t), 6.84 (2H, m), 7.00 (1H, d), 7.15 (1H, m), 7.25-7.32 (2H, m), 7.48 (1H, s) m.d.
II	96	270	3.61 (3H, s), 3.75 (3H, s), 6.75 (1H, t), 6.83 (1H, dd), 6.95 (1H, dd), 7.07 (1H, d), 7.18 (1H, m), 7.29-7.37 (3H, m), 7.49 (1H, s) ppm.d.
II	97		Anglis su nesuporuotu protonu - 13 BMR esant 67.7 MHz : delta 51.25, 61.59, 106.54, 107.41, 110.85, 114.96, 115.45, 119.58, 123.72, 125.06, 128.90, 130.05, 132.41, 152.29, 153.57, 158.81, 160.03, 160.13, 160.22, 167.49, 169.95 m.d.

LENTELĖS NO	JUNGINIO NO	DAŽNUMAS (MHz)	
II	98	270	2.72 (3H, s), 3.60 (3H, s), 3.77 (3H, s), 5.08 (2H, s), 6.5-7.4 (9H, m), 7.48 (1H, s) m.d.
II	99	270	3.60 (3H, s), 3.74 (3H, s), 5.50 (2H, s), 6.92-7.0 (2H, m), 7.09-7.36 (9H, m), 7.47 (1H, s), 7.50 (1H, d) m.d.
II	100	270	3.60 (3H, s), 3.75 (3H, s), 5.33 (2H, s), 6.90-6.96 (2H, m), 7.06-7.18 (3H, m), 7.24-7.34 (3H, m), 7.49 (1H, s), 8.07 (1H, d), 8.14 (1H, d), 8.28 (1H, s) m.d.
II	101	270	3.60 (3H, s), 3.75 (3H, s), 5.31 (2H, s), 6.90-6.99 (2H, m), 7.06 (1H, s), 7.10-7.18 (2H, m), 7.25- 7.34 (3H, m), 7.49 (1H, s), 8.17 (2H, s) m.d.
II	102	270	3.60 (3H, s), 3.75 (3H, s), 5.50 (2H, s), 6.89-6.99 (3H, m), 7.1-7.42 (7H, m), 7.49 (1H, s), 7.62 (1H, t), 7.71 (1H, d), 7.83 (1H, d), 8.0 (1H, d) m.d.

LENTELĖS NO	JUNGINIO NO	DAŽNUMAS (MHz)	
II	103	270	3.60 (3H, s), 3.77 (3H, s), 5.49 (2H, s), 6.90-6.98 (2H, m), 7.0 (1H, d), 7.08- 7.20 (3H, m), 7.24-7.33 (3H, m), 7.39 (1H, d), 7.49 (1H, s) m.d.
II	104	270	3.44 (3H, s), 3.70 (3H, s), 5.09 (2H, s), 6.82 (2H, d), 6.90 (1H, s), 7.0-7.14 (4H, m), 7.16-7.36 (3H, m), 7.49 (1H, s), 8.05 (2H, d) m.d.
II	105	270	3.60 (3H, s), 3.75 (3H, s), 5.38 (2H, s), 6.82-6.98 (3H, m), 7.05-7.20 (3H, m), 7.20-7.35 (3H, m), 7.48 (1H, s), 7.78 (1H, d), 8.43 (1H, s) m.d.
II	106	270	3.60 (3H, s), 3.76 (3H, s), 6.74-7.38 (9H, m), 7.48 (1H, s), 7.98 (1H, m), 8.30 (1H, m) m.d.
II	107	270	3.60 (3H, s), 3.76 (3H, s), 6.75-7.37 (9H, m), 7.49 (1H, s), 8.45 (1H, m), 9.03 (1H, m) m.d.

LENTELES NO	JUNGINIO NO	DAŽNUMAS (MHz)	
II	270	270	3.61 (3H, s), 3.78 (3H, s), 6.28 (1H, m), 6.70 (2H, m), 6.9-7.5 (9H, m), 7.48 (1H, s), 9.55 (1H, br, s) m.d.
II	271	270	3.60 (3H, s), 3.74 (3H, s), 6.74-7.39 (9H, m), 7.50 (1H, s), 8.32 (1H, m) m.d.
II	272	270	2.32 (3H, s), 2.54 (3H, s), 3.60 (3H, s), 3.76 (3H, s), 6.72-7.35 (8H, m), 7.49 (1H, s), 8.00 (1H, s) m.d.
II	273	270	3.60 (3H, s), 3.72 (3H, s), 6.72-7.36 (8H, m), 7.50 (1H, s), 8.26 (2H, m) m.d.
II	274	270	3.60 (3H, s), 3.75 (3H, s), 4.04 (3H, s), 6.74-7.36 (10H, m), 7.50 (1H, s) m.d.
II	310	270	3.60 (3H, s), 3.75 (3H, s), 5.30 (2H, s), 6.72 (1H, d), 6.87-7.35 (9H, m), 7.43 (1H, t), 7.49 (1H, s) m.
II	311	270	Bendri duomenys abiems regioizo- merams: 3.60 (3H, s), 3.77 (3H, s), 5.38 (2H,

LENTELĒS NO	JUNGINIO NO	DAŽNUMAS (MHz)	
			s), 6.90-7.18 (5H, m), 7.23-7.33 (3H, m), 7.49 (1H, s) m.d. Pagrindinio izomero duomenys: 6.70 (1H, d), 8.32 (1H, d) ppm. Mažes- nio izomero duomenys : 6.98 (1H, d), 8.38 (1H, d) m.d.
II	315	270	3.39 (3H, s), 3.60 (3H, s), 3.73 (3H, s), 3.84 (3H, s), 5.63 (1H, m), 5.85 (1H, m), 6.59 (1H, m), 6.7-7.3 (8H, m), 7.47 (1H, m) m.d.
II	8	270	3.60 (3H, s), 3.75 (3H, s), 6.62-7.36 (10H, m), 7.48 (1H, s), 8.38 (2H, m) m.d.
II	15	270	3.60 (3H, s), 3.74 (3H, s), 6.66-7.37 (10H, m), 7.48 (1H, s), 8.45 (2H, m) m.d.
II	35	270	3.60 (3H, s), 3.74 (3H, s), 6.70-7.50 (10H, m), 7.49 (1H, s), 8.92 (1H, m) m.d.
II	313	270	2.38 (3H, s), 2.41 (3H, s), 3.59 (3H, s), 3.75 (3H, s), 6.29 (1H, s), 6.75 (1H, t), 6.84 (2H, t of d), 6.98 (1H, d), 7.15 (1H, t),

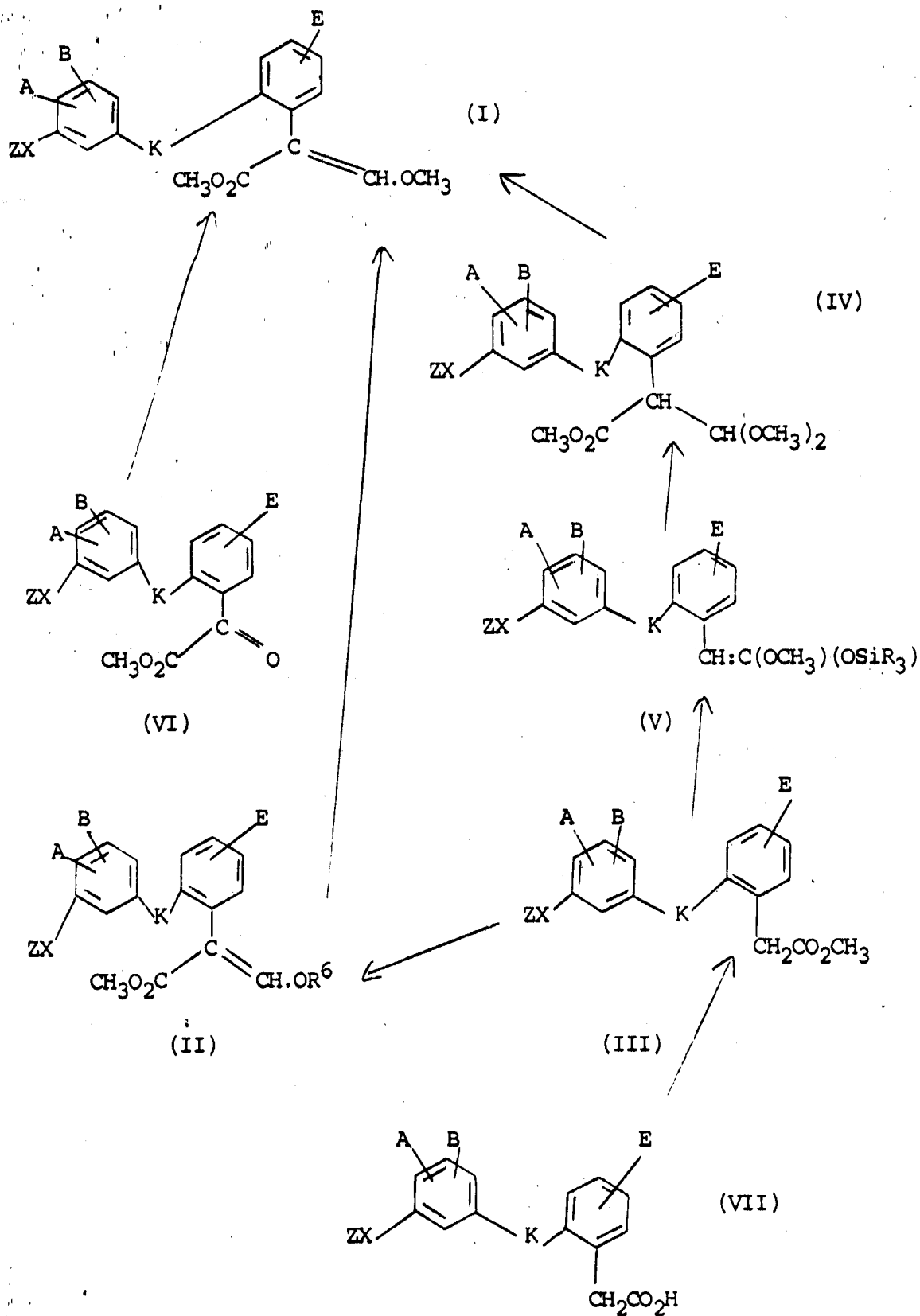
LENTELĖS NO	JUNGINIO NO	DAŽNIS (NH ₂)	
			7.25-7.34 (3H, m), 7.48 (1H, s) m.d.
II	319	270	2.90 (6H, s), 3.60 (3H, s), 3.77 (3H, s), 6.18 (1H, d), 6.75-7.37 (8H, m), 7.48 (1H, s), 8.22 (1H, d) m.d.
II	320	270	Duomenys bendri abiems regioizomerams: 3.61 (3H, s), 3.74 (3H, s), 7.50 (1H, s) ppm. Data for major isomer: 2.35 (3H, s) ppm. Mažesnio izomero duomenys: 2.38 (3H, s) m.d.
III	23	270	3.65 (3H, s), 3.75 (3H, s), 4.97 (2H, s), 6.75-6.87 (3H m), 7.14 (1H, t), 7.21-7.40 (9H, m), 7.49 (1H, s) m.d.
III	51	270	3.61 (3H, s), 3.73 (3H, s), 6.75-6.82 (2H, m), 7.02-7.17 (2H, m), 7.22-7.38 (3H, m), 7.46 (1H, s), 7.47-7.59 (4H, m), 7.62-7.72 (1H, m), 7.80 (1H, d) m.d.
III	131	270	3.63 (3H, s), 3.74 (3H, s), 6.80 (1H, d), 6.86 (1H, s),

LENTELĒS NO	JUNGINIO NO	DAŽNIS (MHz)	
III	212	270	6.99 (2H, d), 7.15-7.37 (6H, m), 7.48 (1H, s), 7.46 (1H, d), 7.93 (1H, d) m.d.
IV	87	270	3.65 (3H, s), 3.77 (3H, s), 5.08 (2H, s), 6.74-6.80 (2H, m), 6.85-6.89 (1H, d), 7.16 (1H, t), 7.20-7.38 (4H, m), 7.49 (1H, s), 7.54 (2H, d), 8.21 (2H, d) m.d.
			3.64 (3H, s), 3.75 (3H, s), 6.80 (1H, d), 6.86 (1H, s), 7.03 (1H, d), 7.21-7.38 (4H, m), 7.47 (1H, d), 7.48 (1H, s), 8.44 (2H, s), 8.95 (1H, s) m.d.

Išradimo (I) formulės junginiai gali būti gauti įvairiais būdais, ir kai kurie iš jų yra iliustruojami I - VIII schemose. Šiose schemose Z, X, A, B, E, K, R¹, R², R³, R⁴ ir R⁵ yra tokie, kaip apibrėžti aukščiau, R⁶ yra vandenilis arba metalas (toks kaip natriis arba kalis), R yra alkilo grupė, L yra paliekanti grupė, tokia kaip halogenidas (chloridas, bromidas arba jodidas), CH₃SO₄⁻ anijonas arba sulfoniloksi-anijonas. Kiekviena iš transformacijų, aprašytų I - VIII schemose, yra atliekama tinkamoje temperatūroje ir/arba tinkamame tirpiklyje, arba be jo. I schema iliustruoja būdus, kuriais metilo beta-metoksipropenoato grupė gali būti gauta galutinėse išradimo junginių gavimo iš pradinių medžiagų, turinčių 3 aromatinių žiedų struktūrą, stadijose. Alternatyviai metilo beta-metoksipropenoato grupė gali būti gauta ankstesnėje gamybos stadijose, ir tuo atveju galutinė stadija arba stadijos apima išradimo junginių kitų dalių paruošimą, kad būtų gauta 3 aromatinių žiedų struktūra. Šio tipo būdų pavyzdžiai parodyti III - VIII schemose.

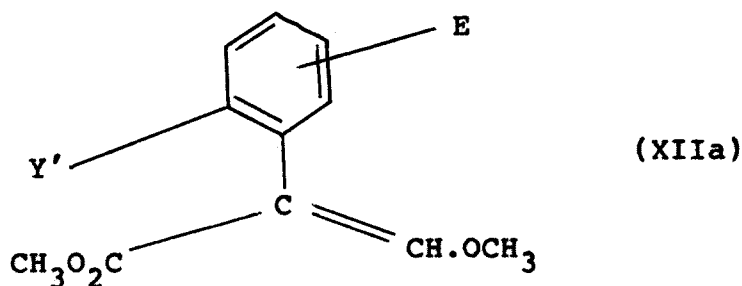
Kokia tvarka bebūtų vykdomos junginių gavimo stadijos, difenilo eterio, arba tioeterio jungtis, kuri yra bendra visiems išradimo junginiams, gali būti gauta viena iš jungimosi reakcijų, parodytų II schemoje. Ullmann eterio sintezės apžvalgą žiūrėti A. A. Moroz ir M. S. Shrartsberg, Russian Chem. Reviews, 1974, 43, 679. Žiūrėti taip pat D. Hands, H. Marley, S. J. Skittrall, S. H. B. Wright and T. R. Verhoeven, J. Heterocyclic Chem., 1986, 23, 1333. Toks junginys dažnai atliekamas dalyvaujant katalizatoriui, kuris susideda iš pereinamojo metalo arba druskos arba pereinamojo metalo junginio, tokio kaip varis arba vario druska ar junginys, arba jų mišinys II schemoje.

1. Schema

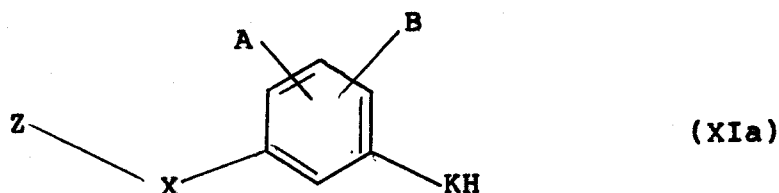


W reiškia arba grupę Z-X-, kur Z ir X yra tokie, kaip apibrėžti aukščiau, arba grupė, kuri gali būti paversta Z-X- standartiniais būdais, aprašytais cheminėje literatūroje; pavyzdžiui, W gali būti -OH, -SH arba -NHR⁴. Y yra alfa-sujungta išardimo junginių metilo beta-metoksipropenoato grupė, arba grupė, kuri gali būti paversta į šią grupę standartiniais būdais, aprašytais cheminėje literatūroje ir/arba pavaizduotais I schemeje, pateikiamoje toliau. Pavyzdžiui, Y gali būti -CH₂COOH, -CH₂COOMe arba -CHO. II schemos kontekste tinkamiausias L yra halogenas. Tuo būdu, (XI) formulės junginiai reaguoja su (XII) formulės junginiais jau aprašytose Ullmann reakcijos sąlygose, kad būtų gautas (VIII) formulės tarpinis produktas. Kaip vienas iš jungimosi reakcijų, parodytų II schemeje, pavyzdžių yra pakeistų 3-fenoksifenolių, kaip ir jų druskų, jungimasis su 2-bromo arba 2-chlorofenilacto rūgšties druskomis, kad po parūgštinimo būtų gautos pakeisto 2-(3-fenoksifenoksi)fenilacto rūgštys (palyginkite, pavyzdžiui, GB 2078-743, Ihare Chem.Ind., 27.06.80). Alternatyviai (VIII) formulės tarpiniai produktai gali būti gauti (IX) formulės junginių reakcija su (X) formulės junginiais jau aprašytose Ullmann reakcijos sąlygose.

Pagal vieną konkretų aspektą išradimas apima I formulės junginio gavimo būdą, kuris susideda iš (XIIa) formulės junginio:



kur Y' yra halogenas, reakcijos su fenoliu arba tiofenoliu, kurio formulė yra (XIa):



dalyvaujant bazei, arba su fenilo ar (XIa) formulės tiofenolio druska, geriau dalyvaujant katalizatoriui, kuriame yra tinkamo pereinamojo metalo, pereinamojo metalo druskos ar junginio, arba jų mišinio.

(I) formulės junginiai gali būti gauti iš (III) formulės fenilacetatų arba (VI) formulės ketoesterių stadijomis, parodytomis I schemoje.

Tuo būdu (I) formulės junginiai gali būti gauti, apdirbant (III) formulės fenilacetatus baze (tokia kaip natrio hidridas arba natrio metoksidas) ir metilo formatu. Jei paskui į reakcijos mišinį pridedama formulės CH_3L , kur L yra apibrėžtas aukščiau, junginio, gali būti gauti (I) formulės junginiai. Jei į reakcijos mišinį pridedama pročio rūgšties, gaunami (II) formulės, kur R^6 yra vandenilis, junginiai. Alternatyviai (II) formulės junginiai, kuriems R^6 yra metalas (toks kaip natris) patys gali būti išskirti iš reakcijos mišinio.

(II) formulės junginiai, kuriems R^6 yra metalas, gali būti paversti (I) formulės junginiais, apdirbant formulės CH_3L , kur L yra apibrėžtas aukščiau, junginiais. (II) formulės junginiai, kuriems R^6 yra vandenilis, gali būti paversti (I) formulės junginiais, iš eilės apdirbant baze (tokia kaip kalio karbonatas) ir bendros formulės CH_3L junginiais.

Alternatyviai (I) formulės junginiai gali būti gauti iš (IV) formulės acetalų, eliminuojant metanolį arba rūgštinėse, arba bazinėse sąlygose. Reagentų arba reagentų mišinių, kurie gali būti naudojami šiai transformacijai, pavyzdžiai yra ličio di-izo-

propilamidas; kalio hidrosulfatas (žiūrėti, pavyzdžiui, T.Yamada, H.Hagiwara and H.Uda, J.Chem.Soc., Chemical Communications, 1980, 838 ir ten nurodytą literatūrą); ir trietilaminas, dažnai dalyvaujant Lewis rūgščiai, tokiai kaip titano tetrachloridas (žiūrėti, pavyzdžiui, K.Nsunda ir L.Heresi, J.Chem.Soc., Chemical Communications, 1985, 1000).

(IV) formulės acetalai gali būti gauti, apdirbant (V) formulės metisililketeno acetalus, kuriems R yra alkilo grupė, tri-metilo ortoformatu, dalyvaujant Lewis rūgščiai, tokiai kaip titano tetrachloridas (žiūrėti, pavyzdžiui, K.Saigo, M.Osaki ir T.Mukaiyama, Chemistry Letters, 1976, 769).

(V) formulės metilsililketeno acetalai gali būti gauti iš (III) formulės fenilacetatų, apdirbant baze ir trialkilsililo halogenidu, kurio formulė yra R_3SiCl arba R_3SiBr , tokiu kaip trimetilsililo chloridu, arba baze (tokia kaip trietilaminu) ir trialkilsililo triflatu, kurio formulė yra $R_3Si-OSO_2CF_3$ (žiūrėti, pavyzdžiui, C.Ainsworth, F.Chen and Y.Kuo, J. Organometallic Chemistry, 1972, 46, 59).

Nevisada būtina atskirti (IV) ir (V) formulių tarpinius produktus; tinkamose sąlygose (I) formulės junginiai gali būti gauti iš (III) formulės fenilacetatų "vianame inde", iš eilės pridėdant tinkamų reagentų, nurodytų aukščiau.

Alternatyviai (I) formulės junginiai gali būti gauti, apdirbant (VI) formulės ketoesterius metoksimetileninimo reagentu, pavyzdžiui, metoksimetilentrifenilosforanu (žiūrėti, pavyzdžiui, W.Stelich, G.Schramm, T.Anke ir F.Oberwinkler, EP 0044448, 4.7. 1980).

(VI) formulės ketoesteriai gali būti gauti būdais, aprašytais literatūroje. Ypač naudingi būdai apima

(i) tinkamų fenilmagnio halogenidų arba fenil-ličio junginių reakciją su dimetilo oksalatu, panaudojant būdą, aprašytą L. M.Weinstock, R.B.Currie and A.V.Lovell, Synth.Comm., 1981, 11, 943 ir ten nurodytą literatūrą);

(ii) (III) formulės fenilacetatų oksidaciją, panaudojant seleno dioksidą, paprastai be tirpiklio ir temperatūroje, didesnėje kaip 100°C; ir

(iii) migdolų rūgšties esterių oksidaciją, panaudojant, pavyzdžiui, mangano oksidą tinkamame tirpiklyje.

(III) formulės fenilacetatai ir atitinkamos (VII) formulės fenilacetato rūgštys gali būti gautos įvairiais kitais būdais, aprašytais literatūroje. Pavyzdžiui, keli naudingi būdai yra aprašyti D.C.Atkinson, K.E.Godfrey, B.Meek, J.F.Saville and M.R.Stillings, J.Med.Chem., 1983, 26, 1353 and D.C.Atkinson, K.E.Godfrey, P.L.Meyers, N.C.Phillips, M.R.Stillings and A.P.Welbourn, J.Med.Chem., 1983, 26, 1361. Be to, daug 2-arilpropioninių esterių ir rūgščių gavimo būdų, aprašytų J.P.Rieu, A.Boucherle, H.Cousse and G.Mouzin, Tetrahedron, 1986, 42, 4095, yra pritaikomi (III) formulės fenilacetatų ir (VII) formulės fenilacto rūgščių gavimui, panaudojant tinkamas pradines medžiagas, kur orto pakeistas fenoksi pakaitas ir pakaitas E jau turimi.

III, IV, V, VI ir VII schemas iliustruojarpinių produktų, turinčių metilo beta-metoksipropenoato grupę, pavyzdžius ir rodo, kaip jie gali būti paversti tam tikrais specifiniais išradimo (I) formulės junginiais.

Taip III schemeje, dalyvaujant bazei ir kartais dalyvaujant pereinamojo metalo arba pereinamojo metalo druskos katalizatoriui, tokiam kaip vario arba vario druskos katalizatorius, (XIII) formulės junginiai reaguoja su aromatiniais arba heteroaromatiniais junginiais, kurių formulė yra ZL, kur Z ir L yra tokie, kaip api-

brėžti aukščiau, arba su formulės $Z_2I^+T^-$ jodonio druska, kur Z yra toks, kaip apibrėžta aukščiau ir T^- yra priešingas jonas, toks kaip halogenido jonas, arba arilo ar heteroarilbismuto junginiais, kad būtų gauti (XIV) formulės junginiai. Be to, dalyvaujant bazei, (XIII) formulės junginiai reaguoja su aril- arba heteroarilsulfonilo halogenidais, kurių formulė ZSO_2Q , kur Z yra toks, kaip apibrėžta aukščiau, ir Q yra halogenas, kad būtų gauti (XV) formulės junginiai. Be to, taip pat dalyvaujant bazei, (XIII) formulės junginiai reaguoja su arilalkilo arba heteroarilalkilo junginiais, kurių formulė yra $ZCHR^1L$, kur Z, R^1 ir L yra tokie, kaip apibrėžta aukščiau, kad būtų gauti (XVI) formulės junginiai.

IV schemeje (XVII) formulės tiolai, paprastai dalyvaujant bazei, reaguoja su aromatiniais arba heteroaromatiniais junginiais, kurių formulė ZL , arba formulės $Z_2I^+T^-$ jodonio druskomis, arba aril- ar heteroarilbismuto junginiais, kad būtų gauti (XVIII) formulės junginiai, būdais, kurie yra analogiški atitinkamų (XIII) formulės fenolių reakcijoms, parodytoms III schemeje. Panašiai, vėl dalyvaujant bazei, (XVII) formulės tiolai reaguoja su arilalkilo arba heteroarilalkilo junginiais, kurių formulė $ZCHR^1L$, kad būtų gauti (XIX) formulės junginiai. (XVIII) ir (XIX) formulių sulfidai gali būti oksiduoti į atitinkamus sulfoksidus ir sulfonus standartiniais būdais, aprašytais cheminėje literatūroje.

V schemeje (XX) formulės junginiai reaguoja su aromatinių arba heteroaromatinių junginių, kurių formulė yra ZOH , kur Z yra toks, kaip apibrėžta aukščiau, hidroksidariniiais, dažnai dalyvaujant bazei, kad būtų gauti (XXI) formulės junginiai. Be to, (XX) formulės junginiai reaguoja su formulės $P(OR)_3$ trialkilfosfitais arba su formulės $M^+P^-(O)(OR)_2$ junginiais, kur R yra toks, kaip apibrėžta aukščiau kiekvienu atveju, ir M yra metalas, toks

kaip natris arba litis, kad būtų gauti (XXII) formulės fosfonatai. (XXII) formulės fosfonatai, dalyvaujant bazei, reaguoja su formulės $ZR^1C:O$ aldehydais arba ketonais, kur Z ir R^1 yra tokie, kaip apibrėžta aukščiau, kad būtų gauti (XIV) formulės olefinai. Be to, iš (XXIII) formulės aldehydų arba ketonų, apdirbant fosfonato anijonais, kurių formulė $ZR^1C^-P(O)(OR)_2M^+$, kur Z, R, R^1 ir M yra tokie, kaip apibrėžta aukščiau, arba atitinkamais fosforanais, taip pat gaunami (XXIV) formulės olefinai. (XXIV) formulės olefinai gali būti redukuoti į (XXV) formulės junginius, pavyzdžiui, hidrinimu virš tinkamo katalizatoriaus.

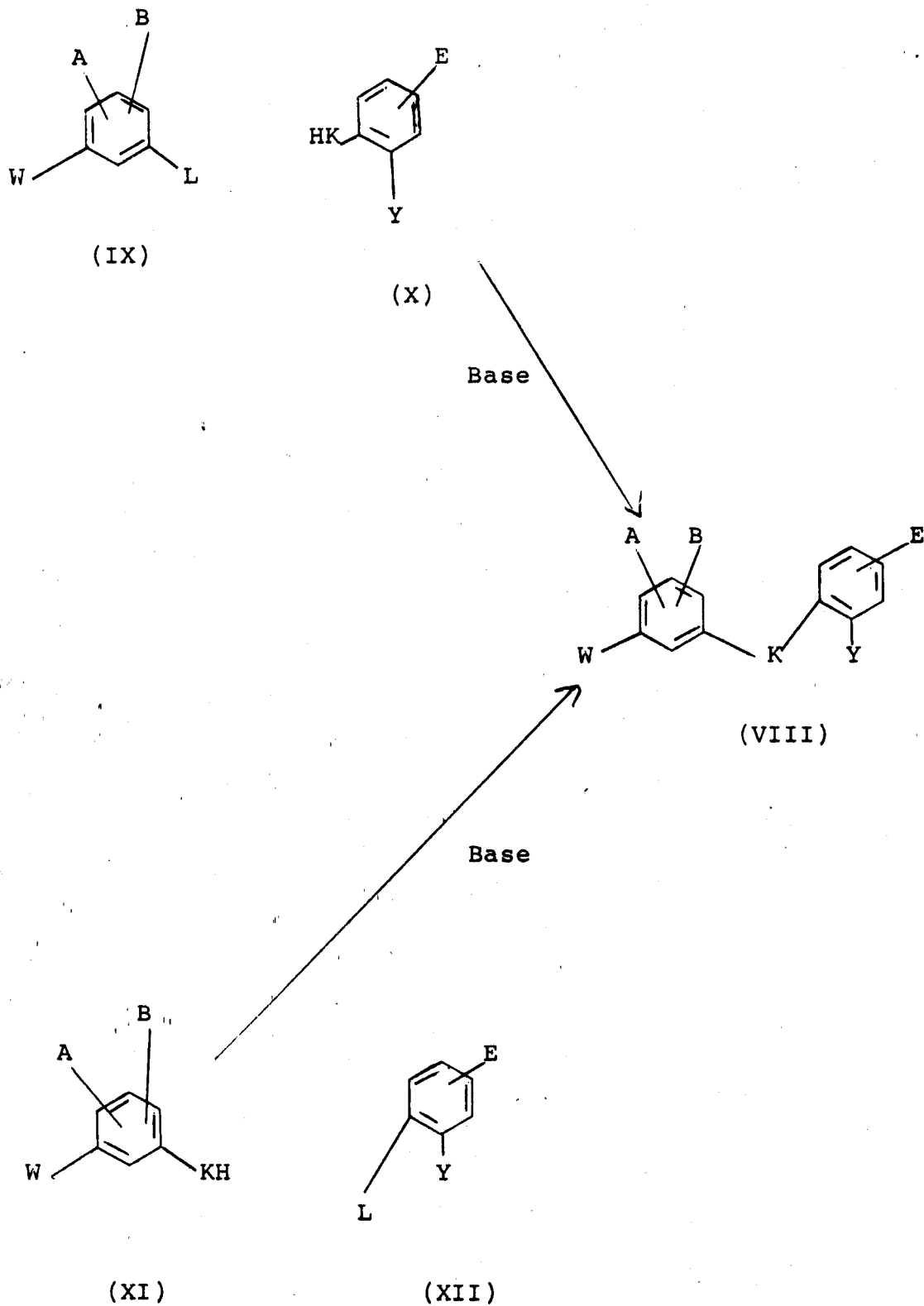
(VI) schemoje (XXVI) formulės junginiai, dalyvaujant bazei, reaguoja su rūgšties halogenais, kurių formulė $ZCOQ$, kur Z ir Q yra tokie, kaip apibrėžta aukščiau, arba dalyvaujant tinkamai dehidratacijos medžiagai, reaguoja su formulės ZCO_2H rūgštimis, kur Z yra tokie, kaip apibrėžta aukščiau, kad būtų gauti formulės (XXVII) junginiai.

(XXVI) formulės tarpiniai produktai gali būti paversti kitų tipų išradimo (I) formulės junginiais būdais, aprašytais cheminėje literatūroje. Pavyzdžiui, (XXVI) formulės junginiai, kur R^4 yra vandenilis, diazotiniu gali būti paversti atitinkamais sulfonilo chloridais (palyginkite Organic Syntheses, 1981, 60, 121), ir paskui, apdirbant alkoholiais arba fenoliais, dalyvaujant bazei, sulfoesteriais.

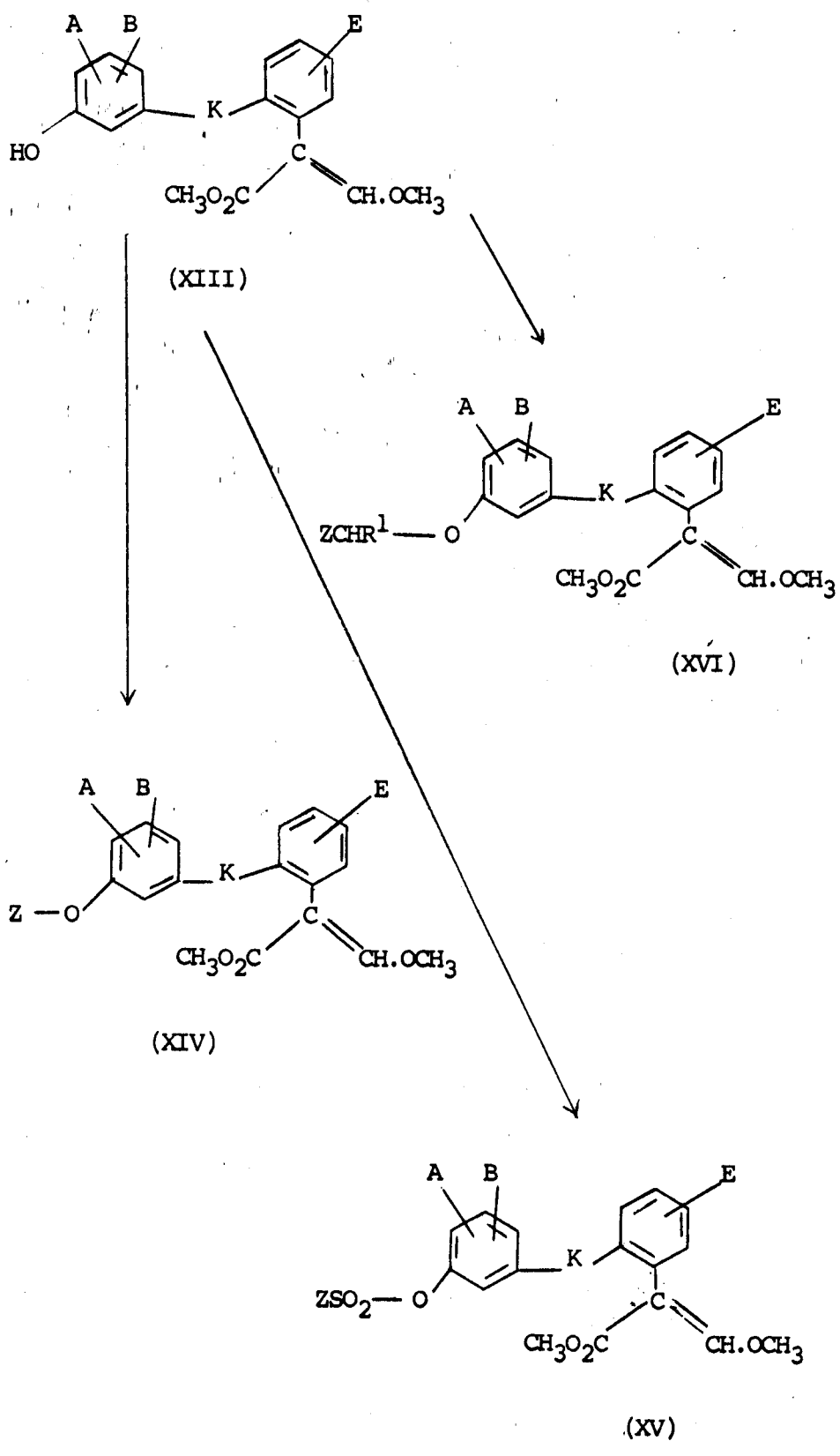
Išradimo (I) formulės junginiai, kur bent vienas iš A ir B yra vandenilis, gali būti paversti išradimo (I) formulės junginiais, kur bent vienas A ir B yra tam tikri pakaitai (tokie kaip halogenas arba nitro ar acilo grupė) elektrofiliinio pakeitimo būdais, aprašytais cheminėje literatūroje.

Formulių (XIII), (XVII), (XX), (XXIII) ir (XXIV) tarpiniai produktai gali būti gauti būdais, aprašytais cheminėje literatū-

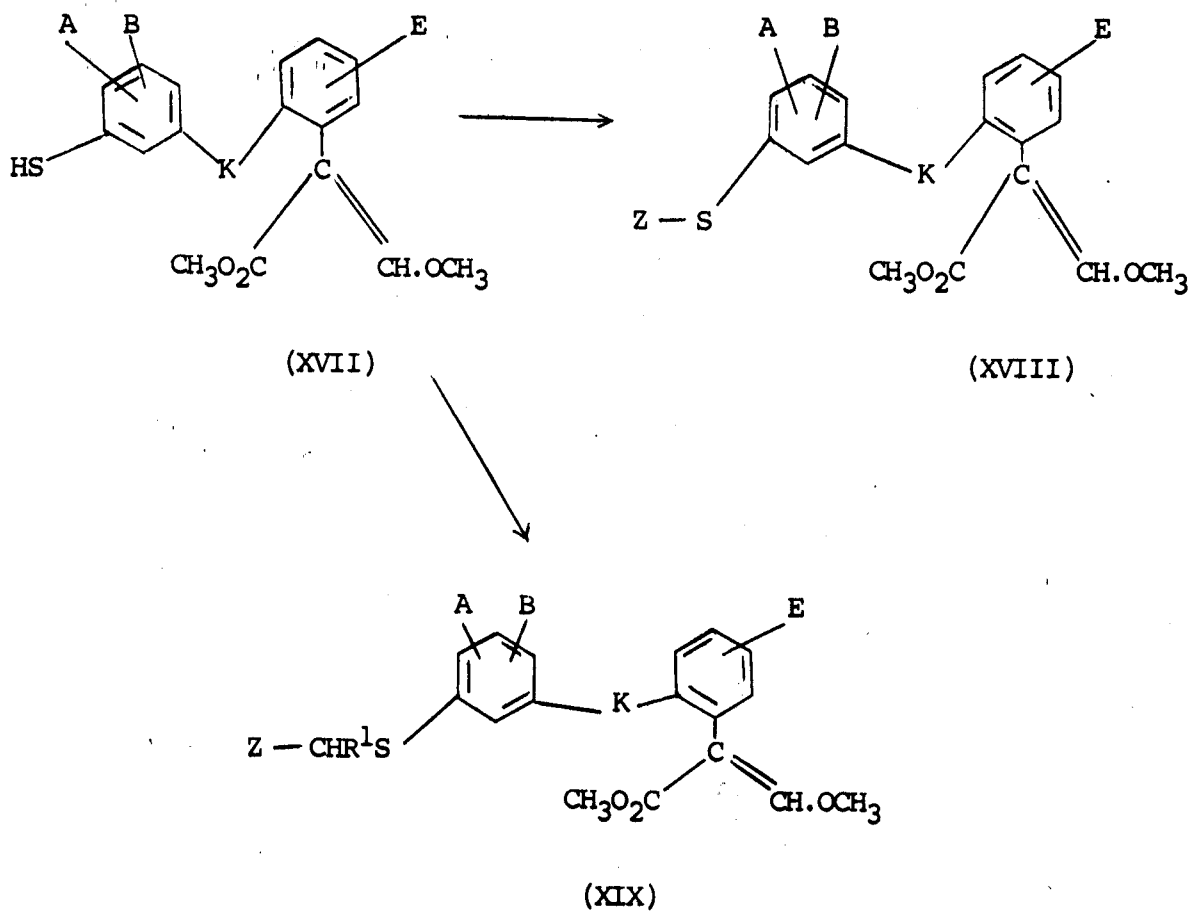
Scheme II



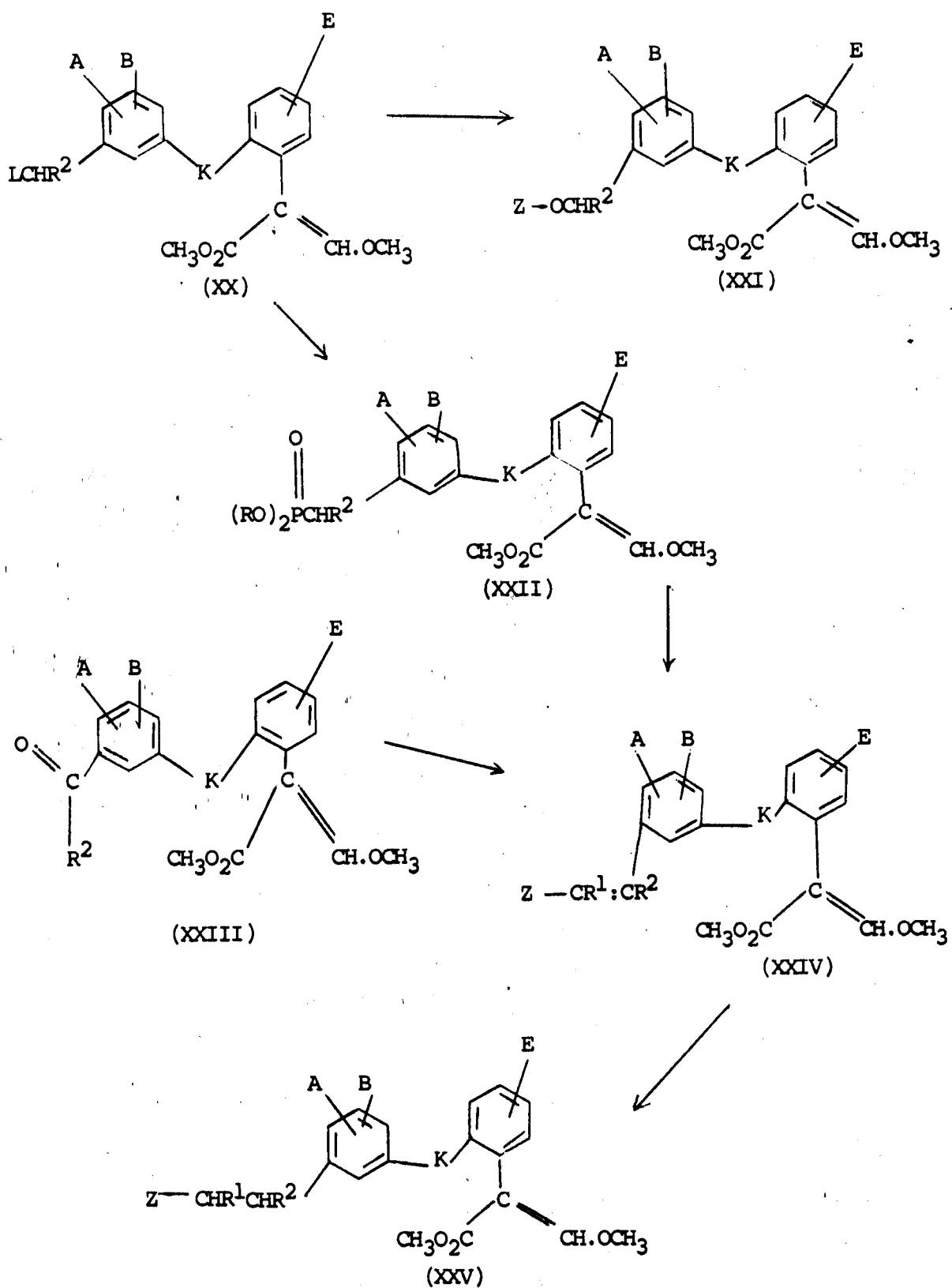
Scheme III



Scheme IV



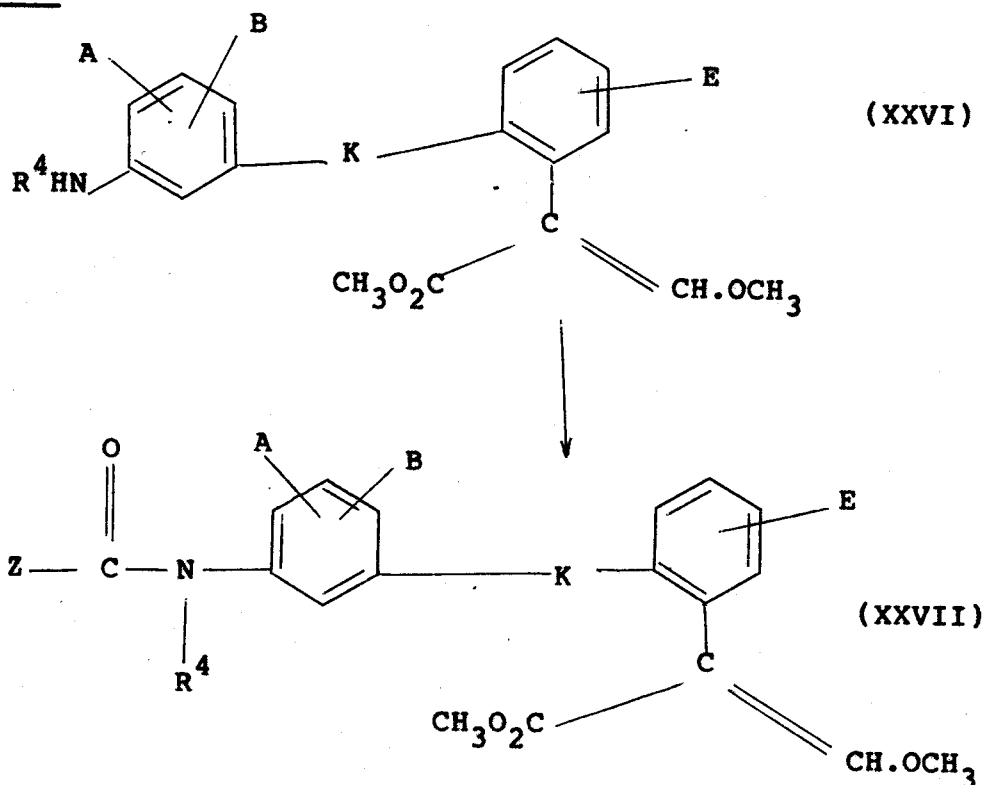
Scheme V



roje, ir būdais, pavaizduotais I ir II schemose. Pavyzdžiui, (XX) formulės junginiai, kur L yra bromas, gali būti gauti iš (XX) formulės junginių, kur L yra H, reakcija su N-bromosukcinimdu arba N,N-dibromo-dimetilhidantoinu, esant arba nesant šviesos iradiacijai.

Formulių (IX), (X), (XI), (XII), ZL , $Z_2I^+T^-$, $ZCHR^1L$, ZSO_2Q , ZOH , $ZR^1C:O$, $ZR^1C:O$, $ZR^1C^-P(O)(OR)_2M^+$, $ZCOQ$ ir ZCO_2H tarpiniai produktai gali būti gauti būdais, aprašytais cheminėje literatūroje.

VI Schema



Pagal VII schemą (XXVIII) formulės junginiai gali būti oksiduoti, pavyzdžiui, panaudojant piridino dichromatą tinkamame tirpiklyje (tokiame kaip metilo chloridas) arba oksalilo chloridą dimetilo sulfoksido, dalyvaujant bazei (Swern oksidacija), kad būtų gauti (XXIII) formulės aldehydai (kur R^2 yra H) arba ketonai (kur R^2 yra alkilas). (XXIII) formulės aldehydai arba ketonai gali reaguoti su formulės $ZONH_2$ ar $ZCHR^1ONH_2$ oksiaminai arba formulės

ZNR^1NH_2 hidrazinais, kur Z ir R^1 yra tokie, kaip apibrėžta aukščiau, kad būtų gauti išradimo (I) formulės junginiai, kur X yra atitinkamai grupė $\text{ON}=\text{CR}^2$, $\text{CHR}^1\text{ON}=\text{CR}^2$ arba $\text{NR}^1\text{N}=\text{CR}^2$. (XXIII) formulės junginiai taip apt gali reaguoti su Grinjaro reagentais, kurių formulė yra ZMgHal arba $\text{ZCR}^1\text{R}^2\text{MgHal}$, kur Hal yra chloras, bromas, jodas ir Z , R^1 bei R^2 yra tokie, kaip apibrėžta aukščiau, kad būtų gauti išradimo (I) formulės junginiai, kur X yra atitinkamai $\text{CR}^2(\text{OH})$ arba $\text{CR}^1\text{R}^2\text{CR}^2(\text{OH})$. Taip pat (XXIII) formulės junginiai gali reaguoti su formulės ZNHR^1 arba $\text{ZCR}^1\text{R}^2\text{NHR}^1$ aminais, kur Z , R^1 ir R^2 yra tokie, kaip apibrėžta aukščiau, dalyvaujant reduktoriui (tokiam kaip natrio cianoborohidridas arba vandenilio dujos, dalyvaujant tinkamam metalo katalizatoriui), kad būtų gauti išradimo (I) formulės junginiai, kur X yra NR^1CHR^2 arba $\text{CR}^1\text{R}^2\text{NR}^1\text{CHR}^2$. Kai reduktorius nedalyvauja ir kai R^1 yra H , tada priešėinančiu būdu bus gauti išradimo (I) formulės junginiai, kuriems X yra $\text{N}=\text{CR}^2$ arba $\text{CR}^1\text{R}^2\text{N}=\text{CR}^2$.

(XXVIII) formulės junginiai, kur R^2 yra H , taip pat gali būti oksiduoti į (XXIX) formulės karbonines rūgštis, panaudojant, pavyzdžiui, Jones reagentą (chromo trioksidą sieros rūgštyje). Karboninės rūgštys (XXIX) tiesiog gali būti paverstos išradimo (I) formulės junginiais, kur, pavyzdžiui, X yra O_2C , CHR^1OCO , SCO , CHR^1SCO , NR^4CO arba $\text{CHR}^1\text{NR}^4\text{CO}$, panaudojant vieną iš standartinių jungimosi reagentų, gerai žinomų literatūroje, tokį kaip dicikloheksilkarbodiimidą arba karbonildiimidazolą, tinkamame tirpiklyje.

Alternatyviai (XXIX) formulės karboninės rūgštys gali būti paverstos (XXX) formulės chloranhidridais, apdirbant, pavyzdžiui, tionilo chloridu arba oksalilo chloridu. (XXX) formulės chloranhidridai paskui gali reaguoti su formulės ZOH , ZCHR^1OH , ZSH , ZCHR^1OH , ZSH , ZCHR^1SH , ZNR^4H arba $\text{ZCHR}^1\text{NR}^4\text{H}$ junginiais tinkamame

tirpiklyje, dalyvaujant bazei, kad būtų gauti išradimo (I) formulės junginiai, kuriems X atitinkamai yra O_2C , CHR^1OCO , SCO , CHR^1SCO , NR^4CO arba CHR^1NR^4CO .

(XXVIII) formulės junginiai gali tiesiai reaguoti su formulės ZL junginiais, galimai dalyvaujant bazei, kur Z yra reaguojanti aromatinė grupė (pavyzdžiui, nitrofenilas) arba heteroaromatinė grupė (pavyzdžiui, 2-piridilas arba 2-pirimidinilas), kad būtų gauti išradimo (XXI) formulės junginiai. Gali būti būtina pirmiausiai gauti (XXVIII) formulės junginių deguonies anijoną su stipria baze, tokia kaip natrio hidridas.

Be to, (XXVIII) formulės junginiai gali būti paversti (XX) formulės junginiais, apdirbant, pavyzdžiui, halogeninančiu agentu, tokiu kaip tionilo chloridas arba fosforo tribromidas, kur L yra chloras arba bromas, arba apdirbant sulfohalogenidu (tokiu kaip p-toluolsulfonilo chloridu), dalyvaujant rūgšties akceptorui, kur L yra sulfoniloksi grupė. Paskui (XX) formulės junginiai gali būti panaudoti, kaip parodyta V schemeje. Be to, kur L yra halogenas, jie gali būti paversti (reakcija su formulės $Z(R^5)_2P$ fosfinu, kur R^5 yra tokie, kaip apibrėžta aukščiau) išradimo (I) formulės junginiai, kuriems X yra grupė $(R^5)_2P^+CHR^2Q^-$. Šie junginiai paskui gali reaguoti iš eilės su baze ir formulės $ZCOR^1$ karbonilo junginiu, kur Z ir R^1 yra tokie, kaip apibrėžta aukščiau, kad būtų gauti (XXIV) formulės olefinai.

VIII schema iliustruoja (VIII) formulės tarpinių produktų pavyzdžius, pateiktus II schemeje, kur W yra bet kokia grupė, kuri gali būti paversta $ZX-$, ir Y yra bet kokia grupė, kuri gali būti paversta metilo beta-metoksipropenoato grupe.

(XXXI) formulės junginiai gali reaguoti su (XXXII) formulės junginiais, kad būtų gauti (XXXIII) formulės junginiai, panaudo-

jant bendras Ullmann jungimosi sąlygas, smulkiai pavaizduotas (XI) ir (XII) formulės junginių reakcijai II schemeje. (XXXIII) formulės rūgštys gali būti paverstod (XXXIV) formulės metilo esteriais reakcija su metanoliu, dalyvaujant rūščiai (pavyzdžiui, druskos rūgščiai). (XXXIV) formulės junginiai gali būti paversti (XXVIII) metilo beta-metoksipropenoatais būdais, smulkiai pavaizduotais I formulėje.

Alternatyviai (XXXIV) formulės tarpiniai produktai gali būti paversti (XXXVIII), (XXXV), (XXXVI), (XXXVII) ir (III) formulių tarpiniais produktais, panaudojant būdus, pavaizduotus VII schemeje (XXVIII) formulės propenoatų pavertimui (XXIII), (XX), (XXIX), (XXX) ir (I) formulių junginiais. (III) formulės junginiai gali būti paversti (I) formulės junginiais, kaip parodyta I schemeje.

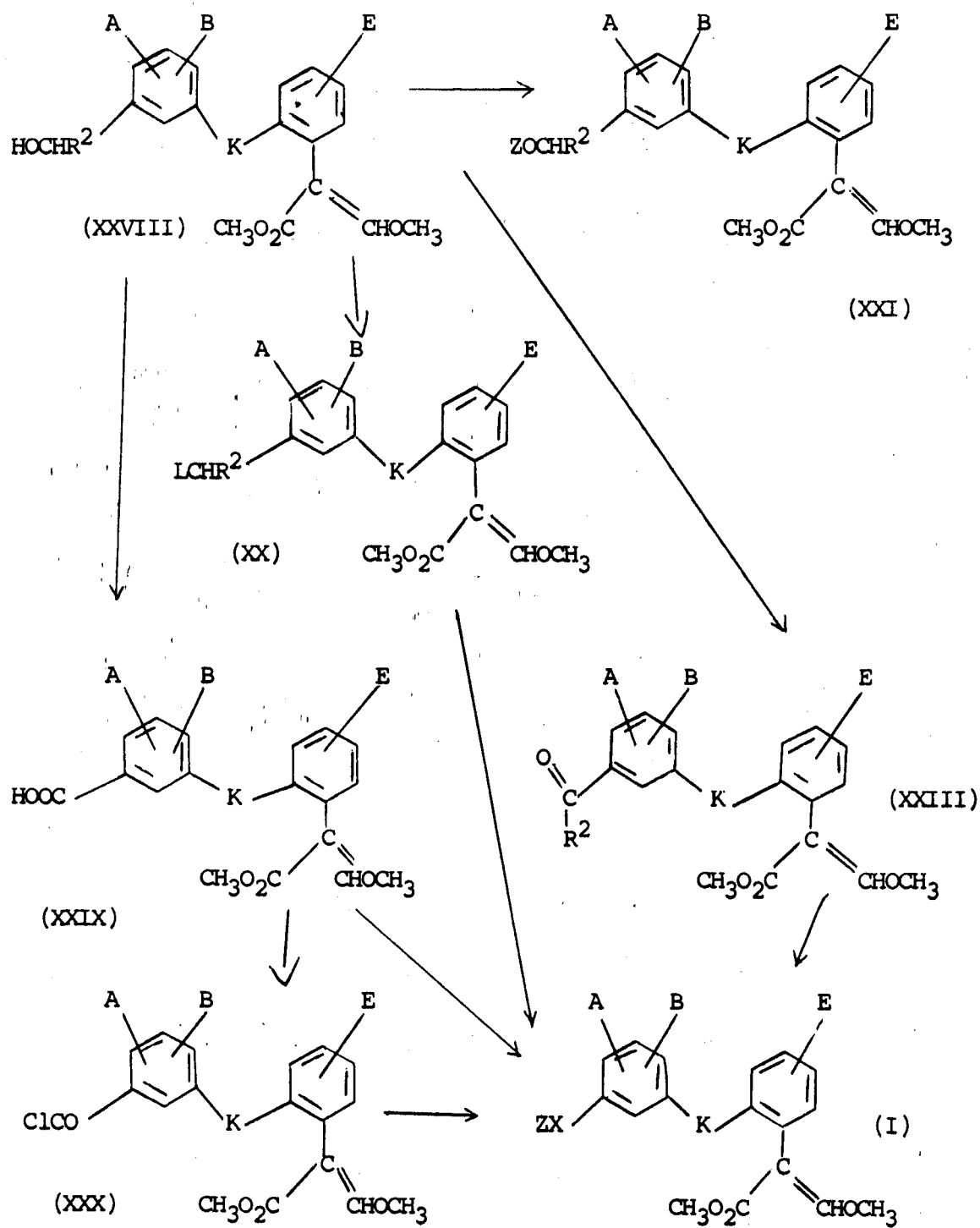
Pagal kitą aspektą išradimas pateikia čia aprašytus (I) formulės junginių gavimo būdus. Čia taip pat pateikiamos tarpinės cheminės medžiagos, kurių formulės yra (II)-(VII), (XIII)-(XXX) ir (XXXIII)-(XXXVIII).

Junginiai yra aktyvūs fungicidai ir gali būti panaudoti kovai su vienu ar daugiau iš šių patogeninių organizmų:

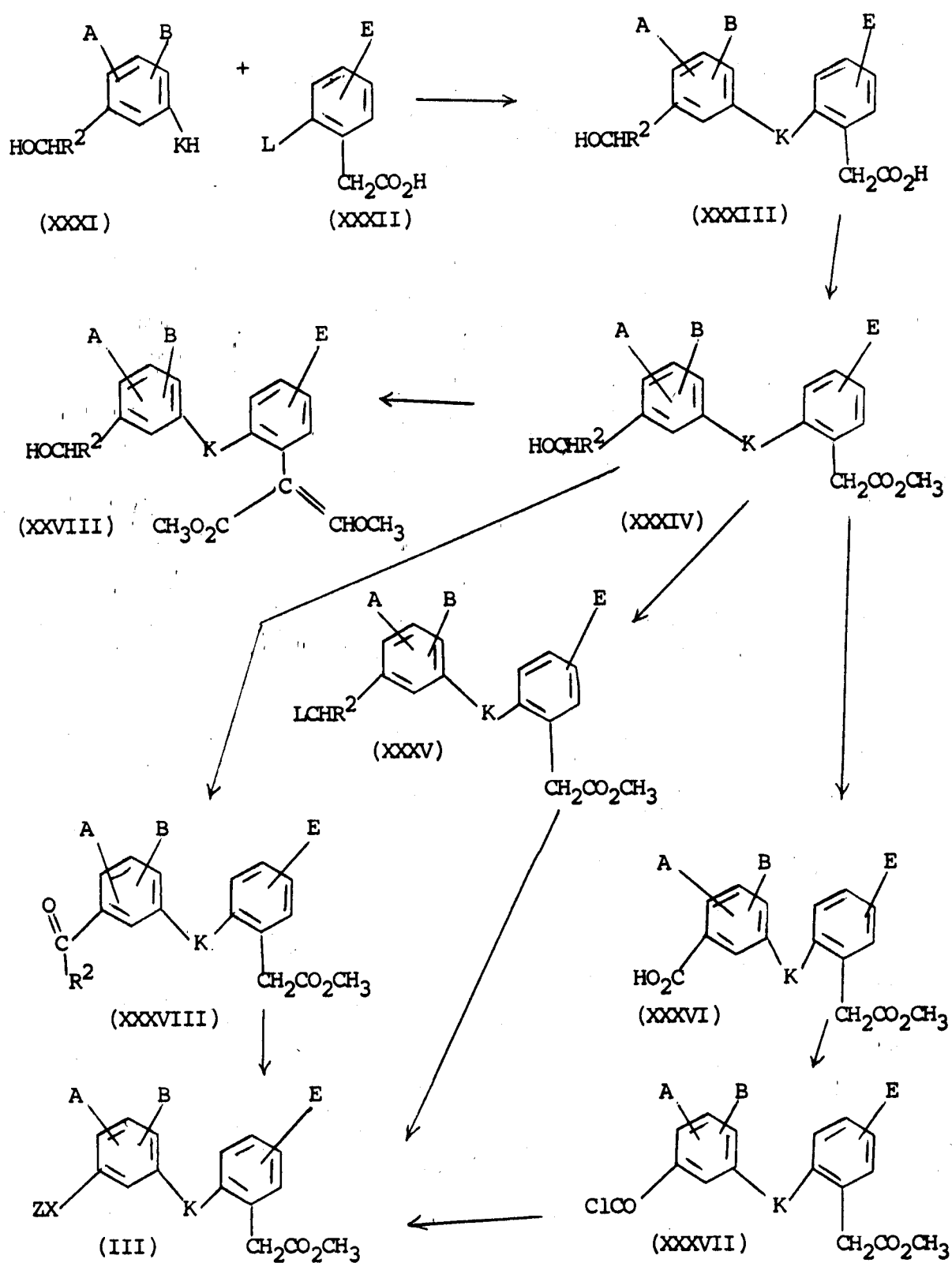
Ryžių Pyricularia oryzae, Puccinia recondita, Puccinia striiformis ir kitos kviečių rūdys, Puccinia hordei, Puccinia striiformis ir kitos miežių rūdys, rūdys kituose augaluose, pavyzdžiui, kavamedžiuose, kriaušėse, obelyse, žemės riešutuose, daržovėse ir dekoratyviniuose augaluose. Miežių ir kviečių Erysiphe graminis (tikroji miltligė) ir kitos miltligės įvairiuose augaluose, kaip apynių Sphaerotheca macularis, agurkinių augalų (pavyzdžiui, agurkų) Sphaerotheca fuliginea, obelių Podosphaera leucotricha ir vynuogienojų Uncinula necator.

Grūdinių kultūrų Helminthosporium rūšys, Rhynchosporium rūšys,

Scheme VII



Scheme VIII



Septoria rūšys, Pseudocercospora herepotrichoides ir Gaeumanomyces graminis. Žemės riešutų Cercospora arachidicola ir Cercosporidium personata, kitos Cercospora rūšys kituose augaluose, pavyzdžiui, cukriniuose runkeliuose, bananuose, sojos pupelėse bei ryžiuose. Botrytis cinerea (pilkasis pelėsis) pomidoruose, braškėse, daržovėse, vynuogienose ir kituose augaluose, Alternaria rūšys daržovėse (pavyzdžiui, agurkuose), rapse, obelyse, pomidoruose ir kituose augaluose, obelių Venturia inaequalis (rauplės), vynuogių Plasmopara viticola, kitos netikrosios miltligės, tokios kaip salotų Bremia lactucae, Peronospora rūšys sojos pupelėse, tabake, svogūnuose ir kitose augaluose, Pseudoperonospora humuli apyniuose ir Pseudoperonospora cubensis agurkiniuose augaluose, bulvių bei pomidorų Phytophthora infestans, kitos Phytophthora rūšys daržovėse, braškėse, avokado, pipiruose, dekoratyviniuose augaluose, tabake, kakavmedžiuose ir kituose augaluose. Thanatephorus cucumeris ryžiuose ir kitos Rhizoctonia rūšys įvairiuose augaluose, tokiuose kaip kviečiai ir miežiai, daržovės, medvilnė ir vilna.

Kai kurie junginiai rodo platų aktyvumo prieš grybelius spektrą in vitro. Jie taip pat gali pasižymėti aktyvumu prieš įvairias vaisių ligas po derliaus nuėmimo (pavyzdžiui, Penicillium digitatum bei italicum ir Frichoderma viride apelsinuose, Gloeosporium musarum bananuose ir Botrytis cinerea vynuogėse).

Be to, kai kurie junginiai gali būti aktyvūs sėklų beicavimui prieš Fusarium rūšis, Septoria rūšis, Tilletia rūšis (kūlę, sėklose atsirandančią kviečių ligą), Ustilago rūšys, Helminthosporium rūšis grūdinėse kultūrose, Rhizoctonia solani medvilnėje ir Pyricularia oryzae ryžiuose.

Junginiai gali pasižymėti sisteminiu judėjimu augaluose. Dar daugiau, junginiai gali būti pakankamai lakūs, kad būtų akty-

vūs garavimo fazėje prieš grybelius augaluose.

Daug (I) formulės junginių, įskaitant tuos, kuriems X yra O, naudojimas tam tikroms kultūroms (pavyzdžiui, vynuogienojams) yra saugesnis negu kitų žinomų struktūriškai giminingų junginių.

Todėl išradimas pateikia kovos su grybeliais būdą, kurį sudaro čia apibrėžta junginio ar kompozicijos, kurioje yra šio junginio, efektyvaus kiekio panaudojimas augalui ar sėklai, arba augalo ar sėklos pažeidimo židiniui.

Junginiai taip pat gali būti naudojami kaip pramoniniai (priešingai žemės ūkio) fungicidai, pavyzdžiui, apsaugoti nuo grybelių medieną, kailius, odas ir ypač dažytas plėveles.

Junginiai patys gali būti naudojami fungicidiniams tikslams, bet patogiau sudaryti jų kompozicijas, panaudojant nešėją ar skiediklį. Tuo būdu išradimas pateikia fungicidines kompozicijas, susidedančias iš čia apibrėžto bendros (I) formulės junginio ir fungicidiškai tinkamo nešėjo arba skiediklio.

Kaip fungicidai, junginiai gali būti naudojami keliais būdais. Pavyzdžiui, patys junginiai ar jų kompozicijos gali būti tiesiai panaudoti augalo lapams, sėkloms arba terpei, kurioje augalai auga arba auga, arba jie gali būti išpurškiami, išbarstomi arba naudojami kaip kremas ar pastos pavidalo priemonė, arba jie gali būti naudojami kaip garai ar lėto išskyrimo granulės. Galima naudoti bet kokioms augalo dalims, įskaitant lapus, stiebą, šaką arba šaknis, arba dirvožemiui apie šaknis, arba sėkloms prieš sodinimą; arba dirvožemiui apskritai, laistomam vandeniui arba hidroponinių kultūrų sistemoms. Išradimo junginiai taip pat gali būti išvirkščiami į augalus arba apipurškiami ant augmenijos, naudojant elektrodinaminius purkštuvus ar purškimo įrenginius ar kitus mažo tūrio būdus.

Čia naudojama sąvoka "augalas" apima daigus, krūmus ir medžius. Be to, išradimo fungicidinis būdas apima apsauginį, profilaktinį ir gydomąjį apdorojimą.

Žemės ūkio ir sodininkystės tikslams junginius geriau naudoti kompozicijos pavidalo. Naudojamos kompozicijos tipas bet kuriuo atveju priklausys nuo konkretaus apdorojimo tikslo.

Kompozicijos gali būti miltelių arba granulių pavidalo, ir jos susideda iš aktyvaus ingrediento (išradimo junginio) bei kieto skiediklio arba nešėjo, pavyzdžiui, užpildų, tokių kaip kaolinas, bentonitas, infuzorinė žemė, dolomitas, kalcio karbonatas, talkas, miltelių pavidalo magnezija, Fulerio žemė, gipsas, diatomitas ir kinietiškas molis. Tokios granulės gali būti tokio pavidalo, kad tikėtų naudoti dirvožemiui be tolimesnio apdirbimo. Šios granulės gali būti arba impregnuoti aktyviu ingredientu užpildo milteliai arba suformuoti rutulėliai iš aktyvaus ingrediento ir miltelių pavidalo užpildo mišinio.

Kompozicijos sėklų beicavimui gali turėti kompozicijos sukibimą su sėklomis padidinančios medžiagos (pavyzdžiui, mineralinio aliejaus), alternatyviai aktyvus ingredientas beicavimui gali būti paruoštas, panaudojant organinį tirpiklį (pavyzdžiui, N-metilpirolidiną, propileno klikolį arba dimetiformamidą). Kompozicijos taip pat gali būti drėkinamų miltelių, išsklaidomų granulių pavidalo, turinčios drėkinančių arba disterguojančių medžiagų, palengvinančių išsisklaidymą skysčiuose. Milteliuose ir granulėse taip pat gali būti užpildų ir suspenduojančių medžiagų.

Emulguojami koncentratai arba emulsijos gali būti gauti, ištirinant aktyvų ingredientą organiniame tirpiklyje, galimai turinčiame drėkinančios arba emulguojančios medžiagos, paskui sudedant mišinį į vandenį, kuriame taip pat gali būti drėkinančios

arba emulguojančios medžiagos. Tinkami organiniai tirpikliai yra aromatiniai tirpikliai, tokie kaip alkilbenzoliai ir alkilnaftalinai; ketonai, tokie kaip izoforonas, cikloheksanas ir metilcikloheksanonas; chloruoti angliavandeniliai, tokie kaip chlorobenzoliai ir trichloretnas; ir alkoholiai, tokie kaip benzilio alkoholis, furfurilo alkoholis, butanolis ir glikolio eteriai.

Labai netirpių kietų medžiagų suspensiniai koncentratai gali būti gauti sumalant rutuliniu malūnu su disperguojančia medžiaga ir įjungiant suspendatorių, trukdantį kietos medžiagos nusėdimą.

Kompozicijos, kurios skirtos purškimui, gali būti aerozolių pavidalo, kur priemonė yra laikoma konteineryje slėgyje, esant propelentui, pavyzdžiui, fluorotrichlorometanui arba dichlorodi - fluorometanui.

Išradimo junginiai gali būti sumaišomi sausi su pirotechniniu mišiniu, gaunant kompoziciją, turinčią dūmų, turinčių junginių, generavimui uždaroje patalpose.

Alternatyviai šie junginiai gali būti naudojami mikrokapsulių pavidalo ir gali būti įjungiami į polimerines priemones, taip gaunant lėtą kontroliuojamą aktyvios medžiagos išsiskyrimą.

Įjungiant tinkamus priedus, pavyzdžiui, priedus, gerinančius pasiskirstymą, sukibimą, apdoroto paviršiaus atsparumą lietai, įvairios kompozicijos gali būti geriau pritaikytos įvairiems tikslams.

Išradimo junginiai gali būti naudojami kaip mišiniai su trąšomis (pavyzdžiui, azoto, kalio arba fosforo turinčiomis trąšomis). Rekomenduojamos kompozicijos, kurios sudarytos iš trąšų granulių, apvilktų išradimo junginiu. Tokios granulės turėtų turėti iki 25% svorio išradimo junginio. Tuo būdu išradimas pateikia trąšų kompoziciją, susidedančią iš trąšų ir (I) formulės junginio arba jo druskos, arba jo komplekso su metalu.

Drėkinami milteliai, emulguojami koncentratai ir suspensiniai koncentratai paprastai turi paviršiaus aktyvios medžiagos, pavyzdžiui, drėkinančios, disperguojančios, emulguojančios arba suspenduojančios medžiagos. Šios medžiagos gali būti kationinės, anijoninės arba nejoninės medžiagos. Tinkamos kationinės medžiagos yra ketvirtiniai amonio junginiai, pavyzdžiui, cetiltrimetilamonio bromidas. Tinkamos anijoninės medžiagos yra muilai, sieros rūgšties alifatinių monoesterių druskos (pavyzdžiui, natrio laurilo sulfatas) ir sulfonuotų aromatinių junginių druskos (pavyzdžiui, natrio dodecilbenzolsulfonatas, natrio, kalcio arba amonio lignosulfonatas, butilnaftalino sulfonatas ir natrio diizopropilbei triizopropil-naftalino sulfonatai). Tinkamos nejoninės medžiagos yra etileno oksido kondensacijos su riebiaisiais alkoholiais, tokiais kaip oleilo arba cetilo alkoholis, produktai arba alkilofenoliai, tokie kaip oktil- arba nonil-fenolis ir oktilkrezolis. Kitos nejoninės medžiagos yra daliniai esteriai, gauti iš ilgos grandinės riebiųjų rūgščių ir heksitolio anhidridų, minėtų dalių esterių kondensacijos su etileno oksidu produktai ir lecitinai. Tinkamos suspenduojančios medžiagos yra hidrofiliniai koloidai (pavyzdžiui, polivinilpirolidonas ir natrio karboksimecilceliuliozė) ir brinkstantis molis, toks kaip bentonitas arba atapulgitas.

Kompozicijos, naudojamos kaip vandeninės dispersijos arba emulsijos, paprastai pateikiamos koncentruoto, sudaryto iš didelės dalies aktyvaus ingrediento, pavidalo, ir šis koncentratas prieš naudojimą atskiedžiamas vandeniu.

Tokie koncentratai turėtų būti atsparūs, laikant ilgą laiką, ir po to turėtų būti tirpūs vandenyje, kad galima būtų gauti vandeninius preparatus, kurie išlieka homogeniškai pakankamą laiką ir juos galima naudoti įprastuose purškimo įrenginiuose. Kon-

centratai paprastai turi iki 95, geriau 10-85, pavyzdžiui, 25-60 svorio % aktyvaus ingrediento. Atskiedus tinkami vandeniniai preparatai turės įvairius aktyvaus ingrediento kiekius, priklausančius nuo naudojimo tikslo, bet galima naudoti vandeninį preparatą, turintį nuo 0,00055 arba 0,01 iki 10 svorio % aktyvaus ingrediento.

Šio išradimo kompozicijų sudėtyje gali būti kitų junginių, pasižyminčių biologiniu aktyvumu, pavyzdžiui, junginių, pasižyminčių panašiu ar papildomu fungicidiniu aktyvumu, arba augalų augimą reguliuojančiu, herbicidiniu arba insekticidiniu aktyvumu.

Fungicidinis junginys, kuris tinka įjungti į išradimo kompozicijos sudėtį, gali būti junginys, sugebantis priešintis grūdinių kultūrų (pavyzdžiui, kviečių) varpų susirgimams, tokiems kaip Septoria, Gibberella ir Helminthosporium rūšys, sėklų arba dirvožemio ligoms, vynuogių netikrajai ir tikrajai miltligei, obelių rauplėms ir t.t. Įjungiant kitą fungicidą, kompozicijos gali pasižymėti platesniu aktyvumo spektru, negu įjungiant vien tik (I) bendros formulės junginį. Be to, kitas fungicidas gali turėti sinergetinį poveikį fungicidiniam (I) bendros formulės junginių aktyvumui. Fungicidinių junginių, kurie gali būti įjungti į šio išradimo kompozicijas, pavyzdžiai yra karbendazimas, benomilas, tiofanatas-metilas, tiabendazolas, fuberidazolas, etridazolas, dichlofluanidas, cimoksnilas, oksadiksilas, ofurasas, metalaksilas, furalaksilas, benalaksilas, fozetilaliuminis, fenarimolas, iprodionas, protiokarbas, procimidonas, vinklozolidinas, penkonazolas, miklobutanilas, propamokarbas, dinikonazolas, pirazofosas, etirimolas, ditalimfosas, tridemorfis, triforinas, nuarimolas, triazbutilas, guazatinas, 1,1'-iminodi(oktametilen)diguanidino triacetato druska, butiobatas, propikonazolas, prochlorazas, flutriafolas, heksakonazolas, (2RS,5RS)-5-(2,4-dichlorofenil)tetrahidro-5-(1H-1,2,4-triazol-1-ilmetil)-2-furil-2,2,2-tri -

fluoretilo eteris, ciprokonazolas, terbukonazolas, pirolnitrinas, 1-|(2RS,4RS;2RS,4RS)-4-bromo-2-(2,4-dichlorofenil)tetrahidrofurfuril|-1H-1,2,4-triazolas, 5-etil-5,8-dihidro-8-okso(1,3)-dioksolo (4,5-g)chinolin-7-karboninė rūgštis, (RS)-1-aminopropilfosfino rūgštis, 3-(2,4-dichlorofenil)-2-(1H-1,2,4-triazol-1-il)chinazolin-4(3H)-onas, fluzilazolas, triadimefonas, triadimenolas, diklobutrazolas, fenpropimorfos, pirifenoksas, fenpropidinas, chlorozolinatas, imazalilas, fenfuramas, karboksinas, oksikarboksinas, metfuroksamas, dodemorfos, BAS 454, blasticidin S, kasugamicinas, edifenfosos, Kitazin P, cikloheksimidas, ftalidas, probenazolas, izoprotiolanas, triciklazolas, 4-chloro-N-(ciano(etoksi)metil)benzamidai, pirochilonas, chlorbenzotiazonas, neoasozinas, polioksinas D, validamicinas A, mepronilas, flutolanilas, pencikuronas, diklomezinas, fenozino oksidas, nikelio dimetilditiokarbamatas, techloftalamas, bitertanolas, bupirimatas, etakonazolas, hidroksiizoksazolas, streptomycinai, ciprofuramas, biloksazolas, chinometionatas, dimetirimolas, 1-(2-ciano-2-metoksiiminoacetil)-3-etilo karbamidas, fenapanilas, tolklofosmetilas, piroksifuras, poliramas, manebas, mankozebas, kaptafolas, chlorotalonilas, anilazinas, tiramas, kaotanas, folpetas, zinebas, propinebas, siera, dipokapas, dichlonas, chloronebas, binapakrilas, nitrotal-izopropilas, dodidas, ditianonas, fentino hidroksidas, fentino acetatas, teknazenas, chintozenas, dikloranas, vario turintys junginiai, tokie kaip vario oksichloridas, vario sulfatas ir Bordo mišinys, ir organiniai gyvsidabrio junginiai.

(I) bendros formulės junginiai gali būti sumaišyti su dirvožemiu, durpėmis ir kita terpe šaknims, norint apsaugoti augalus nuo sėklų, dirvožemį ir lapus užkrečiančios grybelinės infekcijos.

Tinkami insekticidai, kurie gali būti įjungti į šio išradi-

mo kompozicijas, yra pirimikarbas, dimetoatas, demeton-s-metilas, formotionas, karbarilas, izoprokarbas, XMC, BPMC, karbofuranas, karbosulfanas, diazinonas, fentionas, fenitrothionas, fentoatas, chlorpirifosas, izoksationas, propafosas, monokrotofasas, buprofezinas, etoproksifenas ir cikloprotrinas.

Augalų augimą reguliuojantys junginiai yra tokie junginiai, kurie stabdo piktžolių ar ūglių formavimąsi arba selektyviai reguliuoja mažiau pageidaujamų augalų (pavyzdžiui, žolės) augimą.

Tinkamų naudoti su šio išradimo junginiais augalų augimą reguliuojančių junginių pavyzdžiai yra gibereliniai (pavyzdžiui, GA_3 , GA_4 arba GA_7), auksinai (pavyzdžiui, indolacto rūgštis, indoksviesto rūgštis, naftoksiacto rūgštis arba naftilacto rūgštis), citokininai (pavyzdžiui, kinetinas, difenilkarbamidas, benzimidazolas, benziladeninas arba benzilaminopurinas), fenoksiacto rūgštys (pavyzdžiui, 2,4-D arba MCPA), pakeista benzoinė rūgštis (pavyzdžiui, trijodobenzoinė rūgštis), morfaktinai (pavyzdžiui, chlorfurekolas), maleino hidrazidas, glifozatas, glifozinas, ilgos grandinės riebieji alkoholiai ir rūgštys, dikegulakas, paklobutrazolas, fluoridamidas, mefluididas, pakeistas ketvirtinis amonis ir fosfonio junginiai (pavyzdžiui, chloromekvato chlorfonis arba mepikvatchloridas), etefonas, karbetamidas, metil-3,6-dichloroanizatas, daminozidas, asulamas, absciso rūgštis, izopirimolas, 1-(4-chlorofenil)-4,6-dimetil-2-okso-1,2-dihidropiridin-3-karboninė rūgštis, hidroksibenzonitrilai (pavyzdžiui, bromoksinilas), difenzokvatas, benzoilprop-etilo 3,6-dichloropikolino rūgštis, fenpentezolas, inabenfidas, triapentenolas ir teknazenas.

Toliau pateikiami pavyzdžiai iliustruoja išradimą. Visuose pavyzdžiuose sąvoka "eteris" reiškia dietilo eterį, magnio sulfatas buvo naudojamas tirpalų džiovinimui ir tirpalai buvo džiovinami sumažintame slėgyje. Reakcijos, kuriose dalyvauja vandeni

jautrūs tarpiniai produktai, buvo atliekamos azoto atmosferoje ir tirpikliai buvo džiovinami prieš naudojimą, kur to reikėjo. Jei nenurodyta kitaip, chromatografija buvo atliekama silikageolio kaip stacionarios fazės kolonėlėje. Kur pateikti, IR ir BMR duomenys yra selektyvūs, nenurodant visų absorbcijos juostų visais atvejais. Jei nenurodyta kitaip, ^1H BMR spektrai buvo registruojami, panaudojant CDCl_3 tirpalus. Buvo naudojami tokie su-

trumpinimai:

DME = dimetoksietanas

THF = tetrahidrofuranas

DMF = N,N-dimetilformamidas

BMR = branduolių magnetinis rezonansas

IR = infraraudonasis spektras

s = singletas

d = dubletas

t = tripletas

m = multiplotas

lyd.t. = lydimosi temperatūra

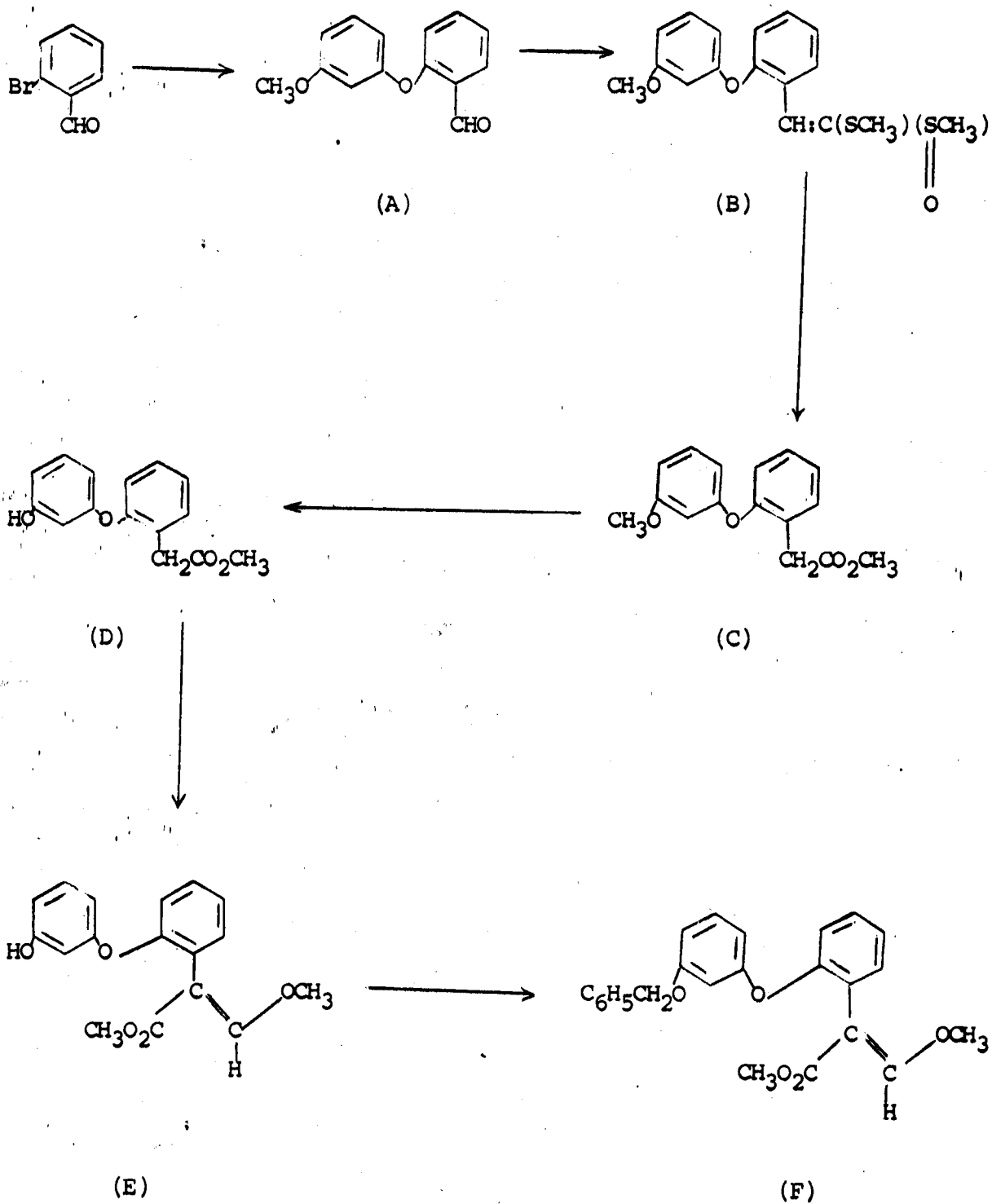
DC = dujinė chromatografija

PSC = plonasluoksnė chromatografija

DESC = didelio efektyvumo skystinė chromatografija

pl = platus

d.m. = dalelių milijonui



1 Pavyzdys

(E)-metil-2-[2-(3-benziloksifenoksi)fenil]-3-metoksipropenoato gavimas (Junginys 23, 1 lentelė).

100 g (0,54 mol) 2-brombenzaldehydo, 67,03 g (1,08 mol) etileno glikolio, 0,5 g p-toluolsulfoninės rūgšties mišinys 6 valandas virinamas su grįžtamu šaldytuvu. Tuo metu nudistiliuojama 23 ml vandens/etileno glikolio. Mišinys atšaldomas ir virinamas 1 l eterio. Eterinis tirpalas praplaunamas 200 ml sotaus natrio bikarbonato tirpalo, vandeniu (3x150 ml) ir 150 ml sūrymo. Po to tirpalas džiovinamas ir filtruojamas, o eterinis tirpalas nugarinamas. Gaunama 121,96 g (98,6 %-nė išeiga) 2-(2-bromfenil)-1,3-dioksolano riebalinio skysčio. ^1H BMR: (60 MHz) delta: 3,4 (4H, m), 6,0 (1H, s), 6,9-7,6 (4H, m), m.d.

Ši medžiaga kitoje pakopoje naudojama be valymo

35,2 g (0,63 mol) kalio hidroksido žirnelių ištirpinama 50 ml vandens ir pridedama 78 g (0,63 mol) 3-metoksifenolio ir 250 ml toluolo. Mišinys pakaitinamas ir virinamas su grįžtamu šaldytuvu, kol nudistiliuojamas vanduo (iš viso surenkama 65 ml vandens). Mišinys ataušinamas iki 80°C ir pridedama 120 g (0,524 mol) 2-(2-bromfenil)-1,3-dioksolano, 200 ml DMF ir 0,2 g vario chlorido. Mišinys lėtai pakaitinamas iki $150-155^{\circ}\text{C}$ ir nudistiliuojamas toluolas.

$150-155^{\circ}\text{C}$ temperatūroje mišinys laikomas 6 valandas, o po to atšaldomas iki 25°C ir pridedama 500 ml vandens. Mišinys nufiltruojamas, o liekana praplaunama 200 ml eterio. Filtratas 3 kartus ekstrahuojamas eteriu (3x 150 ml). Sujungti eteriniai ekstraktai praplaunami 2N natrio hidroksido tirpalu (2 x 150 ml), vandeniu (4 x 150 ml) ir 200 ml sūrymo. Po to tirpalas džiovinamas ir filtruojamas, o eterinis tirpalas nugarinamas. Gaunama 124,1 g (87,1 %-nė išeiga) 2-[2-(3-metoksifenoksi)fenil]-1,3-

dioksolano riebalinio skysčio.

^1H BMR (60 MHz) delta: 3,65 (3H, s), 3,95 (4H, d), 6,12 (1H, s),
6,6-7,6 (8H, m) m.d.

Tolimesnėje pakopoje ši medžiaga naudojama be valymo. 32,7 g (0,12 mol) 2-[2-(3-metoksifenoksi)fenil]-1,3-dioksolano maišoma 95 ml vandens ir 5 ml konc. druskos rūgšties mišinyje 19 valandų aplinkos temperatūroje. Mišinys 2 kartus ekstrahuojamas eteriu (X 60 ml), o sujungti eteriniai ekstraktai praplaunami 30 ml sotaus vandeninio natrio bikarbonato tirpalo, vandeniu (3 x 30 ml) ir 30 ml sūrymo. Gautas tirpalas džiovinamas, filtruojamas ir koncentruojamas, gaunant 26,17 g (95,4 %-nė išeiga) beveik švaraus 2-(3-metoksifenoksi)-benzaldehido (A) riebalinio skysčio. Ši medžiaga kitoje pakopoje naudojama be valymo. Tačiau analitinis pavyzdys išvalomas chromatografiškai, išplaunant eterio ir heksano mišiniu ir gaunant gintaro spalvos riebalinį skystį.

^1H BMR (90 MHz) delta: 3,79 (3H, s), 6,58-7,97 (8H, m), 10,49 (1H, d) m.d.
IR maks. (plėvelė) : 1691, 1599 cm^{-1} .

25,0 g (0,109 mol) 2-(3-metoksifenoksi)benzaldehido, 13,64 g (0,11 mol) metil-metiltiometilsulfoksido, 8,0 ml benziltrimetilamonio (30 %-nio tirpalo metanolyje) 150 ml THF mišinys maišomas su grįžtamu šaldytuvu 45 minutes. Gautas tirpalas sausai nugarinamas, o po to chromatografuojamas, išplaunant eterio ir heksano mišiniu. Gaunama 27,67 g (75,3 %-nė išeiga) sulfoksido (B), gintaro spalvos dervos.

^1H BMR (60 MHz) delta: 2,2 (3H, s), 2,55 (3H, s), 3,65 (3H, s),
6,35-8,15 (9H, m) m.d.

Į 200 ml šaldomo vandens vonioje abs. metanolio, palaukant 20 - 25°C temperatūrą, per 15 minučių sulašinama 20 ml acetilo chlorido. Į mišinį viena porcija pridedama 27,68 g (0,083 mol) sulfoksido (B) tirpalo 40 ml metanolio ir gautas mišinys

121

18 valandų maišomas aplinkos temperatūroje. Metanolio tirpalas sausai nugarinamas pažemintame slėgyje, gaunant 22,78 g rudos spalvos dervos, kuri ištirpinama 200 ml eterio. Eterinis tirpalas praplaunamas sočiu natrio bikarbonato tirpalu, nufiltruojamas nedidelis kiekis netirpios medžiagos, o eterinis tirpalas sausai nugarinamas. Liekana chromatografuojama, išplaunant eterio ir heksano mišiniu, gaunant 15,62 g (69,3 %-nė išeiga) metil-2-(3-metoksifenoksi)-fenilacetato (C), klampaus riebalinio skysčio.

^1H BMR (60 MHz) delta: 3,5 (3H, s), 3,59 (2H, s), 3,63 (3H, s), 6,35-7,32 (8H, m) m.d.

12,89 g (0,051 mol) boro tribromido ištirpinama 50 ml dichlormetano ir atšaldoma iki 0 - 5°C. Į šį tirpalą maišant, per 1 valandą sulašinamas 7,09 g (0,026 mol) metil-2-(3-metoksifenoksi)fenilacetato tirpalas 80 ml dichlormetano. Mišinys 20 min. maišomas 0 - 5°C temperatūroje, o po to, 0 - 5°C temperatūroje maišomas mišinys sulašinamas į 100 ml abs. metanolio. Gautas tirpalas išpilamas į 250 ml vandens, kuriame yra 12 g natrio bikarbonato, o gautas mišinys ekstrahuojamas 500 ml eterio. Organinė fazė praplaunama vandeniu (3 x 200 ml) ir 150 ml sūrymo. Tirpalas džiovinamas ir filtruojamas, o eterinis tirpalas nugarinamas, gaunant 6,12 g (92,3 %-nė išeiga) 2-(3-oksifenoksi)fenilacetato (D) rudos dervos. Ši medžiaga tolimesnėse pakopose naudojama be valymo. Išvalant medžiagą chromatografiškai (išplaunant eterio ir heksano mišiniu), gaunamas labai švarus auksinės spalvos klampus riebalinis skystis, kuris oro poveikyje greitai tamsėja.

Po to, metil-2-(3-oksifenoksi)fenilacetatas (D) gaunamas tokiu būdu:

30 g (0,18 mol) 2-chlorfenilacto rūgštis, 48,6 g (0,34 mol) kalio karbonato ir 43,5 g (0,35 mol) 3-metoksifenolio 3 valandas virinama 140°C temperatūroje maišant, esant katalitiniam vario (I) chlorido kiekiui. Po to dujinės ir plono sluoksnio chromatografijos būdu nustatyta, kad sureagavo visa pradinė medžiaga. Reakcijos mišinys paliekamas atšalti (pridedant 5 ml sauso DMF 5°C temperatūroje tam, kad mišinys perdaug nesutirštėtų), po to išpilamas į vandenį ir parūgštinamas konc. druskos rūgštimi. Gautas mišinys ekstrahuojamas eteriu, o sujungti ekstraktai praplaunami vandeniu iki neutralaus pH. Eteriniai ekstraktai džiovinami ir nugarinami, gaunant 3-metoksifenoksi (49 %) ir 2-(3-metoksifenoksi)fenilacto rūgštis (41 %) mišinį, rudos spalvos juodrų riebalinį skystį, kuris tolimesnėje stadijoje naudojamas be valymo.

Rudas riebalinis skystis 2,5 valandos virinamas su grįžtamu šaldytuvu 70 ml metanolio, kuriame yra 2 ml konc. sieros rūgštis. Reakcijos mišinys paliekamas atšalti kambario temperatūroje ir po to išpilamas į vandenį. Gautas mišinys 2 kartus ekstrahuojamas eteriu, o sujungti eteriniai sluoksniai praplaunami praskiestu vand. natrio hidroksido tirpalu, po to vandeniu iki neutralaus pH, o po to išdžiovinami ir nugarinami. Gaunama 34,9 g nešvaraus metil-2-(3-metoksifenoksi)fenilacetato, oranžinės-rudos spalvos riebalinio skysčio (86 % švarumo pagal GC). Nešvarus produktas sujungiamas su kita 8,2 g partija, kuri gaunama tuo pačiu metodu. Produktas pakartotinai distiliuojamas (50 - 120°C, 4×10^{-2} mbar), gaunant 37,1 g (95 % švarumo, apytiksliai 60 % išeiga nuo 2-chlorfenilacto rūgštis) metil-2-(3-metoksifenoksi)-fenilacetato riebalinio skysčio. Papildomi produkto kiekiai gaunami tokiomis operacijomis:

97 g (0,36 mol) metil-2-(3-metoksifenoksi)fenilacetato

virinama su 194 ml konc. bromo vandenilio rūgšties 150 ml acto rūgšties 8 valandas 110°C temperatūroje, o po to paliekama kambario temperatūroje per naktį. Po to papildomai pridedama 100 ml konc. bromo vandenilio rūgšties, reakcijos mišinys pakaiti - namas iki 110°C ir 7 valandas virinamas toje temperatūroje, kol sureaguoja visa pradinė medžiaga. Reakcijos mišinys atšaldomas iki kambario temperatūros, išpilamas į sūrymą ir ekstrahuojamas du kartus dichlormetane, o po to dichlormetanas nugarinamas. Gaunamas riebalinis skystis, kuris 2 valandas virinamas 70°C temperatūroje su 400 ml metanolio ir 2 ml konc. sieros rūgšties. Reakcijos mišinys paliekamas atšalti iki kambario temperatūros, išpilamas į sūrymą ir ekstrahuojamas 2 kartus dichlormetanu. Sujungti ekstraktai praplaunami vandeniu (iki neutralaus pH), po to džiovinami, filtruojami ir nugarinami, gaunant 92,8 g rudos spalvos riebalinio skysčio. Distiliuojant 72,8 g (150°C, 1×10^{-3} mbar), gaunama 41,4 g (57 %-nė išeiga nuo metil-2-(3-metoksifenoksi)fenilacetato metil-2-(3-oksifenoksi)fenilacetato (D), aukšinės spalvos sirupo pavidalo junginio.

^1H BMR (60 MHz) delta: 3,57 (3H, s), 3,63 (2H, s), 5,82 (1H, s), 6,4-7,35 (8H, m), m.d.

IR maks. (plėvelė) : 3408, 1713 cm^{-1} .

Į 0,558 g (0,023 mol) natrio hidrido suspensiją 20 ml DMF sulašinama 2,0 g (0,0077 mol) metil-2-(3-oksifenoksi)fenilacetato (D) tirpalo 10 ml DMF ir 10 g (0,167 mol) metilformiato. Mišinys maišomas 45 minutes, pridedama 100 ml vandens ir mišinys ekstrahuojamas 50 ml eterio. Vandeninis sluoksnis parūgštinamas druskos rūgštimi iki pH 3-4, o mišinys 2 kartus ekstrahuojamas eteriu (x 40 ml). Sujungti eteriniai ekstraktai 3 kartus praplaunami vandeniu (x 30 ml) ir 30 ml sūrymo, o po to išdžiovi -

nami. Eteris nugarinamas, o liekana ištirpinama 20 ml DMF ir pridedama 0,64 g (0,0046 mol) bevandenio kalio karbonato ir 0,55 g (0,0044 mol) dimetilsulfato. Mišinys 1 valandą maišomas aplinkos temperatūroje, pridedama 100 ml vandens ir mišinys du kartus ekstrahuojamas eteriu (x 40 ml). Sujungti eteriai ekstraktai praplaunami 3 kartus vandeniu (x 20 ml) ir 20 ml sūrymo, džiovinami, filtruojami, sausai nugarinami, o po to išvalomi chromatografiškai, išplaunant eterio ir heksano mišiniu. Gaunamas (E)-metil-2-[2-(3-oksifenoksi)fenil]-3-metoksipropenoatas (E), gintaro spalvos derva, kuri sutrinama su heksano ir dichlorometano mišiniu, gaunant 0,7 g |30 %-nė išeiga nuo metil-2-(3-oksifenoksi)fenilacetato (D)| baltos spalvos kietos medžiagos, lyd.temp. 115.- 116°C.

Be to, (E)-metil-2-[2-(3-oksifenoksi)-fenil]-3-metoksipropenoatą (E) galima gauti taip:

12 g (0,0465 mol) metil-2-(3-oksifenoksi)fenilacetato (D) ir 55,8 g (0,93 mol) metilformiato tirpalas 35 ml sauso DMF sulašinamas per 45 minutes į maišomą 6,696 g natrio hidrido suspensiją (50 %-nę dispersiją alyvoje, 0,1395 mol, praplautą 40 + 60 petrolio eteriu) 65 ml sauso DMF. Reakcijos mišinys 2,5 valandos maišomas kambario temperatūroje, išpilamas į 200 ml vandens, parūgštinamas konc. druskos rūgštimi iki pH 3 ir po to ekstrahuojamas 2 kartus eteriu (x 200 ml). Sujungti organiniai ekstraktai praplaunami sūrymu (2 x 200 ml), džiovinami, filtruojami ir nugarinami, gaunant 12,5 g (0,0433 mol) geltonos spalvos riebalinio skysčio.

12,5 g (0,0433 mol) riebalinio skysčio ištirpinama 100 ml sauso DMF ir pridedama 5,98 g (0,0433 mol) kalio karbonato. Reakcijos mišinys maišomas 10 minučių, o po to viena porcija prideda-

dama 5,19 g (0,042 mol) dimetilsulfato tirpalo 10 ml DMF. Gautas mišinys maišomas per naktį kambario temperatūroje, išpilamas į 200 ml vandens ir ekstrahuojama 2 kartus eteriu (x 200 ml). Sujungti eteriniai ekstraktai praplaunami 3 kartus sūrymu, džiovinami, filtruojami ir nugarinami, gaunant lipnią dervą. Derva perkristalizuojama iš dichlormetano-heksano, gaunant 9,54 g (73 %) (E)-metil-2-[2-(3-oksifenoksi)fenil]-3-metoksipropenoato (E), lyd. temp. 117 - 118°C.

¹H BMR (90 MHz) delta: 3,58 (3H, s), 3,75 (3H, s), 5,38 (1H, s),
6,39-7,33 (8H, m), 7,4 (1H, s) m.d.

IR maks. (nujolas) : 3295, 1672, 1630 cm⁻¹.

1,09 g (0,0033 mol) (E)-metil-2-[2-(3-oksifenoksi)fenil]-3-metoksipropenoato, 0,57 g (0,0033 mol) benzilo bromido, 0,8 g (0,0053 mol) kalio karbonato ir 15 ml sauso DMF mišinys 3 valandas maišomas aplinkos temperatūroje. Į mišinį pridedama 50 ml vandens ir mišinys ekstrahuojamas 2 kartus eteriu. Sujungti eteriniai ekstraktai 2 kartus praplaunami bandeniu (x 30 ml), o po to džiovinami ir filtruojami, o eteriniai tirpalas sausai nugarinamas. Produktas išvalomas chromatografiškai, išplaunant eterio ir heksano mišiniu. Gaunama 1,11 g (85 %-nė išeiga) bespalvės devos pavidalo junginio (F).

¹H BMR (90 MHz) delta : 3,55 (3H, s), 3,7 (3H, s), 4,97 (2H, s),
6,5-7,32 (13H, m), 7,44 (1H, s) m.d.

IR maks. (plėvelė) : 1710, 1638 cm⁻¹.

2 Pavyzdys

(E)-metil-3-metoksi-2-[2-(3-fenilsulfoniloksifenoksi)fenil]propenoato gavimas (junginys 51, 1 lentelė).

0,5 g (0,00166 mol) (E)-metil-2-[2-(3-oksifenoksi)-fenil]-3-metoksipropenoato (gauto pagal 1 pavyzdyje aprašytą metodiką),

0,36 g (0,002 mol) benzonilsulfonilchlorido ir 10 ml piridino mišinys 3 valandas maišomas 60 - 70°C temperatūroje. Mišinys atšaldomas iki 25°C, pridedama 60 ml vandens ir mišinys ekstrahuojamas 2 kartus eteriu (x 30 ml). Sujungti eteriniai ekstraktai praplaunami 20 ml vandens, 20 ml praskiestos druskos rūgšties, 3 kartus vandeniu (x 200 ml) ir 20 ml sūrymo. Eterinis tirpalas džiovinamas, filtruojamas, koncentruojamas ir chromatografuojamas, išplaunant chloroformo ir heksano mišiniu. Gaunama 0,21 g (28,7 %-nė išeiga) bespalvės dervos pavidalo junginio.

¹H BMR (90 MHz) delta : 3,56 (3H, s), 3,75 (3H, s), 6,52-7,96 (13H, m), 7,40 (1H, s) m.d.

3 pavyzdys

(E)-metil-3-metoksi-2-(2-[3-(4-nitrofenoksi)fenoksi|fenil]-propenoato gavimas (junginys 133, 1 lentelė).

1,2 g (0,004 mol) (E)-metil-2-[2-(3-oksifenoksi)fenil]-3-metoksipropenoato (gauto pagal 1 pavyzdyje aprašytą metodiką), 0,68 g (0,008 mol) 4-nitrofluorbenzolo, 1,1 g (0,008 mol) kalio karbonato ir 15 ml DMF mišinys 16 valandų maišomas aplinkos temperatūroje, po to mišinys išpilamas į 80 ml vandens ir du kartus ekstrahuojamas eteriu (x 30 ml). Sujungti organiniai ekstraktai 3 kartus praplaunami vandeniu (x 25 ml), 25 ml sūrymo, po to džiovinami, filtruojami, koncentruojami. Produktas išvalomas chromatografiškai, išplaunant chloroformo ir heksano mišiniu, gaunant 0,93 g (55,2 %-nė išeiga) gintaro spalvos dervos pavidalo junginio. ¹H BMR (90 MHz) delta:

3,55 (3H, s), 3,72 (3H, s), 6,67-8,41 (12H, m), 7,44 (1H, s) m.d.

4 pavyzdys

(E)-metil-2-(2-|3-(4-fluorfenoksi)fenoksi|fenil)-3-metoksipropenoato gavimas (Jung. 124, 1 lentelė).

1,0 g (0,0033 ml) (E)-metil-2-|2-(3-oksifenoksi)-fenil|-3-metoksipropenoato (gauto pagal 1 pavyzdyje aprašytą metodiką), 2,63 g (0,0069 mol) bis-(4-fluorfenil)jodonio bromido, 0,5 ml trietilamino, 0,5 g vario miltelių ir 15 ml abs. metanolio mišinys 6 valandas virinamas su grįžtamu šaldytuvu. Po to papildomai į mišinį pridedama 1 g (0,0069 mol) bis-(4-fluorfenil)jodonio bromido ir mišinys dar 3 valandas virinamas su grįžtamu šaldytuvu. Mišinys atšaldomas ir filtruojamas, į filtratą pridedama 80 ml vandens ir mišinys 2 kartus ekstrahuojamas eteriu (x 30 ml). Sujungti eteriniai ekstraktai 3 kartus praplaunami vandeniu (x 15 ml) ir 15 ml sūrymo, o po to džiovinami ir filtruojami, o eterinis tirpalas koncentruojamas. Gaunama 0,16 g (12,3 %-nė išeiga) gintaro spalvos dervos pavidalo junginio.

^1H BMR (60 MHz) delta : 3,42 (3H, s), 3,51 (3H, s), 6,35-7,30 (12H, m), 7,35 (1H, s) m.d.

IR maks. (plėvelė) 1710, 1641 cm^{-1} .

5 pavyzdys

(E)-metil-2-|2-(3-benzoiloksifenoksi)fenil|-3-metoksipropenoato gavimas (Junginys 49, 1 lentelė).

0,5 g (0,00166 mol) (E)-metil-2-|2-(3-oksifenoksi)-fenil|-3-metoksipropenoato (gauto pagal 1 pavyzdyje aprašytą metodiką), 0,26 g (0,00185 mol) benzoilo chlorido, 0,23 g (0,00166 mol) kalio karbonato ir 10 ml DMF mišinys 1,5 valandos maišomas aplin - kės temperatūroje. Po to papildomai pridedama 0,26 g (0,00166 mol) benzoilo chlorido ir 0,23 g (0,00166 mol) kalio karbonato,

ir mišinys 16 valandų maišomas aplinkos temperatūroje. Į mišinį pridedama 80 ml vandens ir 2 kartus ekstrahuojama eteriu (x 40 ml). Sujungti eteriniai ekstraktai praplaunami 3 kartus vandeniu (x 20 ml) ir 20 ml sūrymo, o po to džiovinami, filtruojami ir koncentruojami. Produktas chromatografuojamas, išplaunant eterio ir heksano mišiniu, gaunant baltos spalvos kietą medžiagą. Medžiaga perkristalizuojama iš vand. metanolio, gaunant 0,32 g (47,7 %-nė išeiga) švarios baltos spalvos medžiagos, lyd. temp. 94 - 95°C.

^1H BMR (90 MHz) delta: 3,62 (3H, s), 3,74 (3H, s), 6,76-8,38 (13H, m), 7,46 (1H, s) m.d.

IR maks. (nujolas) : 1741, 1698, 1627 cm^{-1} .

6 pavyzdys

(E,E)-metil-2-[2-(3-[4-chlorfenilazo]-4-oksifenoksi)-fenil]-3-metoksipropenoato gavimas (Junginys 282, 1 lentelė).

2,5 ml 1M druskos rūgšties supilama į 6,64 ml (0,25M vand. tirpalo) chloranilino hidrochlorido ir mišinys atšaldomas iki žemesnės, negu 10°C temperatūros. Į gautą mišinį sulašinama 3,32 ml (0,5M vand. tirpalo) natrio nitrato ir gautas mišinys 10 minučių maišomas žemesnėje temperatūroje. Gautas 3-chlorbenzoldiazonio chlorido tirpalas maišant sulašinamas į 0,5 g (0,00166 mol) (E)-metil-2-[2-(4-oksi-fenoksi)fenil]-3-metoksipropenoato (gauto pagal 1 pavyzdyje aprašytą metodiką atitinkamam 3-oksijunginiui gauti) 16,6 ml 0,1M vand. natrio hidroksido ir 30 ml acetono mišinį. Tuo pačiu metu papildomai pridedama vand. natrio hidroksido tirpalo pH palaikyti 8-10 ribose, o temperatūra palaikoma žemiau 10°C. Po to mišinys maišomas 20 minučių ir ekstrahuojamas 2 kartus eteriu (x 40 ml). Sujungti eteriniai ekstraktai 3 kartus praplaunami vandeniu (x 15 ml), o po to 15 ml sū -

rymo, džiovinami, filtruojami ir koncentruojami. Produktas iš -
valomas chromatografiškai, išplaunant eterio ir heksano mišiniu,
gaunant oranžinės spalvos kietą medžiagą. Medžiaga perkristali-
zuojama iš heksano ir dichlormetano mišinio, gaunant 99,3 mg
(13,6 % išeiga) švaraus junginio, lyd. temp. 143 - 144°C.

7 pavyzdys

(E)-metil-2-|2-(3-|3-metoksifenoksi|fenoksi)fenil|-3-meto-
ksipropenoato gavimas (Junginys 129, 1 lentelė).

Į maišomą 0,61 g natrio 10 ml metanolio tirpalą viena por-
cija pridedama 4,34 g rezacinolio. Gautas mišinys 0,5 valandos
maišomas kambario temperatūroje, o metanolio perteklius pašalina-
mas pažemintame slėgyje. Į gautą oranžinės spalvos skystį pride-
dama 6,6 ml piridino, 14,74 g 3-bromanizolo ir 192 mg vario chl)-
rido. Mišinys 66 valandas maišomas 125°C temperatūroje. Reakci-
jos mišinys paliekamas atšalti ir po to išpilamas į praskiestą
druskos rūgštį ir ekstrahuojamas eteriu. Eteriniai ekstraktai
per-ekstrahuojami praskiestu vand. natrio hidroksidu ir šie van-
deniniai ekstraktai parūgštinami praskiesta druskos rūgštimi ir
ekstrahuojami eteriu. Šie eteriniai ekstraktai praplaunami van-
deniu ir sūrymu, po to džiovinami ir koncentruojami. Gaunama
3,72 g raudonos spalvos riebalinio skysčio. Šis riebalinis skys-
tis distiliuojamas (170°C krosnies temp./0,05 mm Hg), gaunant
1,71 g 3-(3-metoksifenoksi)-fenolio tiršto gelsvos spalvos rie-
balinio skysčio.

¹H BMR delta : 3,78 (3H, s), 4,93 (1H, s) m.d.

Į maišomą 0,18 g natrio tirpalą 4 ml metanolio viena por-
cija pridedama 1,70 g 3-(3-metoksifenoksi)fenolio. Gautas miši-
nys 0,5 valandos maišomas kambario temperatūroje, o metanolio

perteklius pašalinamas pažemintame slėgyje. Į gautą oranžinės spalvos riebalinį skystį pridedama 0,85 g O-bromfenilacto rūgšties ir 40 mg vario chlorido, ir reakcijos mišinys 130°C temperatūroje maišomas 1 valandą. Po to papildomai į mišinį pridedama 0,4 g O-bromfenilacto rūgšties ir 0,13 g natrio etoksido, ir mišinys papildomai 3 valandas maišomas 130°C temperatūroje. Mišinys paliekamas atšalti, po to parūgštinamas praskiesta druskos rūgštimi ir ekstrahuojamas eteriu. Eteriniai ekstraktai praplaunami vandeniu ir sūrymu; po to džiovinami ir koncentruojami, gaunant 3,12 g raudonos spalvos skysčio, kuriame yra 2-[3-(3-metoksifenoksi)-fenoksi]fenilacto rūgšties. Į 3,12 g šios nešvarios rūgšties pridedama 40 ml metanolio ir 3 lašai konc. sieros rūgšties. Reakcijos mišinys 1 valandą maišomas 90°C temperatūroje, po to paliekamas atšalti, išpilamas į vandenį ir ekstrahuojamas eteriu. Eteriniai ekstraktai praplaunami praskiestu vand. natrio hidroksidu, vandeniu ir sūrymu, po to džiovinami ir koncentruojami, gaunant 1,33 g geltonos spalvos riebalinio skysčio. Riebalinis skystis distiliuojamas (krosnies temp. 160°C/0,07 mmHg), gaunant 1,03 g (36 %-nė išeiga nuo 3-(3-metoksifenoksi)fenolio metil-2-[3-(3-metoksifenoksi)fenoksi]fenilacetato.

¹H BMR delta : 3,62 (3H, s), 3,68 (2H, s), 3,78 (3H, s) m.d.

1,00 g metil-2-[3-(3-metoksifenoksi)fenoksi]-fenilacetato ir 3,34 ml metilformiato mišinys 1 ml DMF per 10 minučių sulašinamas į maišomą 0,13 g natrio hidrido suspensiją 10 ml DMF, atšaldytą ledu iki žemesnės, negu 10°C temperatūros (išsiskiria dujų burbuliukai). Po to reakcijos mišinys 2 valandas maišomas kambario temperatūroje, išpilamas į vandenį, parūgštinamas praskiesta druskos rūgštimi, o po to ekstrahuojamas eteriu. Ekstraktai praplaunami vandeniu, džiovinami ir koncentruojami, gaunant 1,09 g geltonos spalvos riebalinio skysčio. Po to 0,76 g

kalio karbonato ir 0,33 g dimetilsulfato pridedama į maišomą riebalinio skysčio 20 ml DMF tirpalą ir gautas mišinys 2,5 valandos maišomas kambario temperatūroje, išpilamas į vandenį, o po to ekstrahuojamas eteriu. Ekstraktai praplaunami vandeniu, džiovinami, koncentruojami ir chromatografuojami, išplaunant eterio ir petrolio mišiniu (1:1). Gaunama 0,61 g (55 %-nė išeiga nuo metil-2-[3-(3-metoksifenoksi)-fenoksi]fenilacetato) bespalvio klampaus riebalinio skysčio.

^1H BMR delta : 3,60 (3H, s), 3,75 (3H, s), 3,78 (3H, s),
6,55-6,72 (5H, m), 6,97 (1H, d), 7,10-7,30 (6H, m),
7,48 (1H, s) m.d.

IR maks. (nujolas) : 1713, 1638 cm^{-1} .

8 pavyzdys

(E)-metil-3-metoksi-2-[2-(3-[fenoksimetil]fenoksi)fenil]-propenoato gavimas (Junginys 21, 1 lentelė).

0,50 g (E)-metil-3-metoksi-2-[2-(3-metilfenoksi)fenil]-propenoato (gauto iš 3-metilfenolio ir 2-brombenzaldehido pagal 1 pavyzdyje aprašytą metodiką) ir 0,30 g N-bromsukcinimido virinama su grįžtamu šaldytuvu 25 ml anglies tetrachlorido su azobisizobutironitrilo (AIBN) pėdsakais 4,5 valandos, vis pridant AIBN pėdsakus 1,5 valandos intervalais. Reakcijos eiga kontroliuojama dujinės chromatografijos būdu. Reakcijos mišinys paliekamas stovėti per naktį, po to pridedami AIBN pėdsakai ir mišinys virinamas su grįžtamu šaldytuvu tol, kol dujinės chromatografijos būdu nustatoma, kad sureagavo beveik visa pradinė medžiaga (1 valanda). Reakcijos mišinys filtruojamas per celitą, praplaunamas vandeniu ir nugarinamas, gaunant 0,69 g geltonos spalvos dervos. Dujinės chromatografijos būdu nustatyta, kad ši derva susideda iš 80 % (E)-metil-2-[2-(3-brommetilfenoksi)fenil]-

3-metoksipropenoato, 11 % atitinkamo dibrommetilo junginio ir 8 % nesureagavusio pradinio propenoato.

^1H BMR duomenys didžiausiam komponentui : delta 3,61 (3H, s), 3,77 (3H, s), 4,42 (2H, s), 6,90-7,40 (8H, m), 7,48 (1H, s), m.d.

Ši medžiaga toliau naudojama be valymo.

0,42 g (80 % švarumo) nešvarios medžiagos maišoma su 0,105 g fenolio ir 0,077 g kalio karbonato 20 ml DMF, ir virinama 1 valandą 60°C temperatūroje. Reakcijos mišinys paliekamas stovėti per naktį, o po to vėl virinamas 1 valandą 60°C temperatūroje. Po to reakcijos mišinys atšaldomas, išpilamas į vandenį ir ekstrahuojamas etilacetatu. Organinis sluoksnis praplaunamas vandeniu, džiovinamas ir nugarinamas, gaunant 0,42 g gelsvos spalvos riebalinio skysčio. Produktas išvalomas didelio efektyvumo skystos chromatografijos būdu, išplaunant petrolio ir etilacetato mišiniu (3:1). Gaunama 0,13 g bespalvės dervos pavidalo junginio, kuriame yra 20 % (E)-metil-2-|2-(3-dibrommetilfenoksi)-fenil|-3-metoksipropenoato priemaišų.

Junginio pagal pavadinimą ^1H BMR duomenys: delta 3,58 (3H, s), 3,70 (3H, s), 4,98 (2H, s), 6,88-7,36s), (13H, m), 7,46 (1H, s) m.d.

9 pavyzdys

(E)-metil-2-|2-(2-acetil-5-fenoksifenoksi)fenil|-3-metoksipropenoato ir (E)-metil-2-|2-(4-acetil-3-fenoksifenoksi)fenil-3-metoksipropenoato gavimas (Jung 365 ir 366, 1 lentelė).

Metil-2-(3-fenoksifenoksi)fenilacetatas gaunamas iš 3-fenoksifenolio ir 2-brombenzaldehido pagal 1 pavyzdyje aprašytą metodiką metil-2-(3-metoksifenoksi)fenilacetatui gauti. Šis ju-

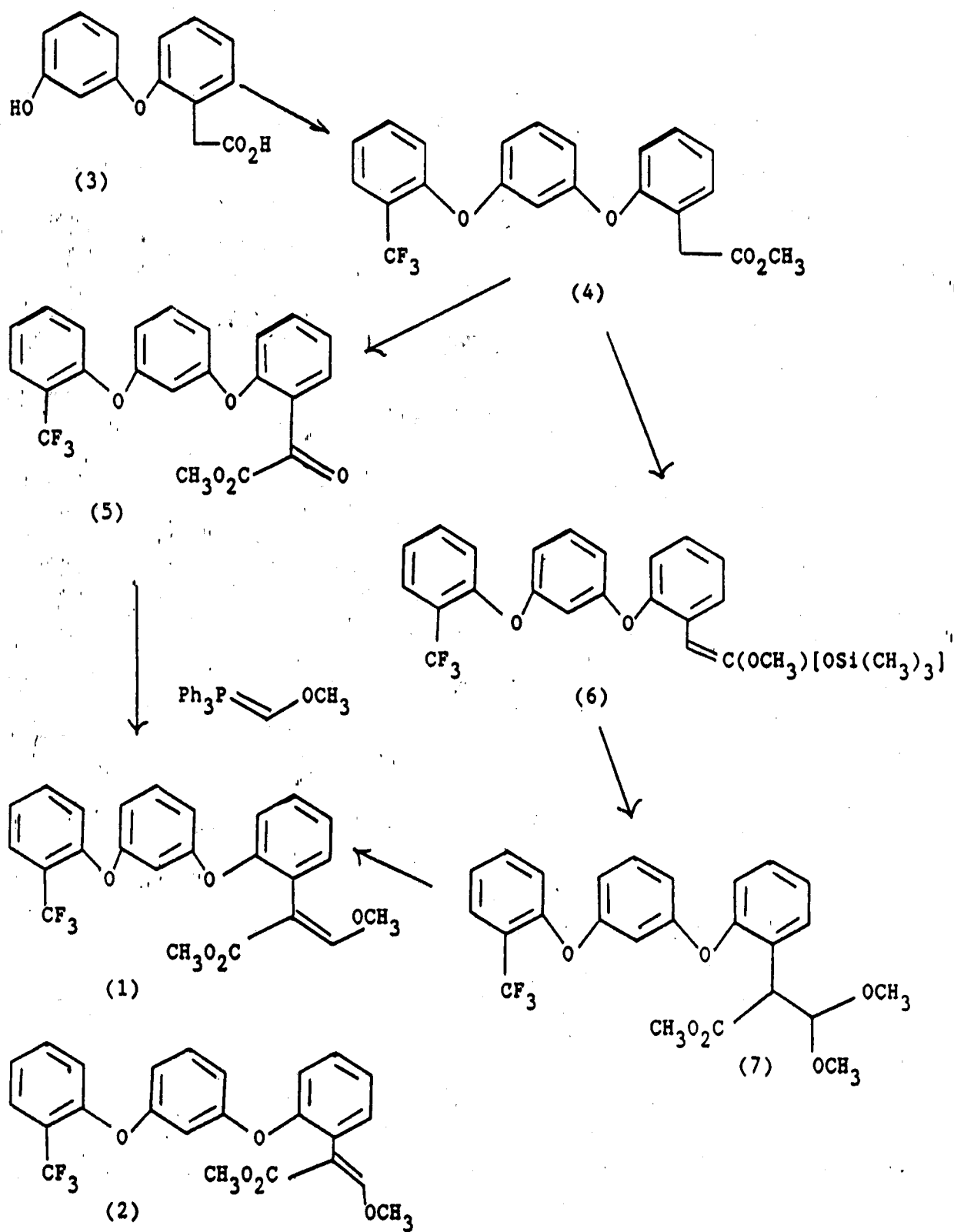
nginys paverčiamas (E)-metil-3-metoksi-2-|2-(3-fenoksi-fenok -
si)fenil|-propenoatu |¹H BMR (250 MHz) 3,61 (3H, s), 3,78 (3H,s),
6,68-7,35 (13H, m), 7,48 (1H, s), m.d. | naudojant natrio hidri-
dą ir metilformiatą, o po to kalio karbonatą ir dimetilsulfatą
pagal 1 pavyzdyje aprašytą metodiką (E)-metil-2-|2-(3-oksifeno-
ksi)fenil-3-metoksipropenoatui gauti, tik šiuo atveju imami 2
natrio hidrido ekvivalentai.

Į maišomą 0,722 g (1,92 mmol) (E)-metil-3-metoksi-2-|2-
(3-fenoksifenoksi)fenil|propenoato tirpalą 20 ml sauso dichlor-
metano 0-5°C temperatūroje sudedama 0,512 g (3,84 mmol) aliumi-
nio chlorido miltelių. Po to į mišinį per 10 minučių sulašinamas
0,151 g (1,92 mmol) acetilo chlorido tirpalas 3 ml sauso dichlor-
metano ir gautas mišinys maišomas per naktį, leidžiant jam su-
šilti iki aplinkos temperatūros. Reakcijos mišinys praskiedžia-
mas 125 ml eterio ir 2 kartus praplaunamas 2N druskos rūgšti -
mi, 10 % vand. natrio karbonato tirpalu ir vandeniu. Po to paša-
linamas tirpiklis, o liekana išvaloma chromatografiškai, išplau-
nant eterio ir petrolio mišiniu, gaunant 0,424 g dviejų junginių
pagal pavadinimą, apytiksliai santykiu (3:1) mišinio (junginiai
individualiai nėra nustatomi), bespalvės dervos. Dalis šios der-
vos (0,400 g) atskiriama didelio efektyvumo skystos chromatog -
rafijos būdu per silikagelį, išplaunant heksano-dichlormetano-
metil-tret-butilo eterio mišiniu (70:25:5). Gaunama: 1) 0,179 g
regioizomero A, didesnio komponento iš mišinio, kuris išėjo
pirmas, baltos kristalinės medžiagos, lyd. temp. 90-92°C

¹H BMR (250 MHz): delta 2,52 (3H, s), 3,56 (3H, s), 3,72 (3H,s),
6,48 (1H, d), 6,64 (1H, q), 6,9-7,4 (9H, m),
7,43 (1H, s), 7,84 (1H, d) m.d.

ir 2) 0,061 g regioizomero B (kuriame yra apytiksliai 5 % regi-

Schema



oizomero A), išėjusio antru, mažesnio mišinio komponento, bal -
tos kristalinės medžiagos, lyd.temp. 82-85°C.

¹H BMR (250 MHz): delta 2,51 (3H, s), 3,60 (3H, s), 3,75(3H,s),
6,45 (1H, d), 6,59 (1H, q), 6,9-7,4 (9H, m),
7,48 (1H, s), 7,82 (1H, d) m.d.

10 pavyzdys

(E)- metil-3-metoksi-2-|2-(3-pirimidin-2-iloksifenoksi)
fenil|propenoato gavimas (jubginys 22, 2 lentelė).

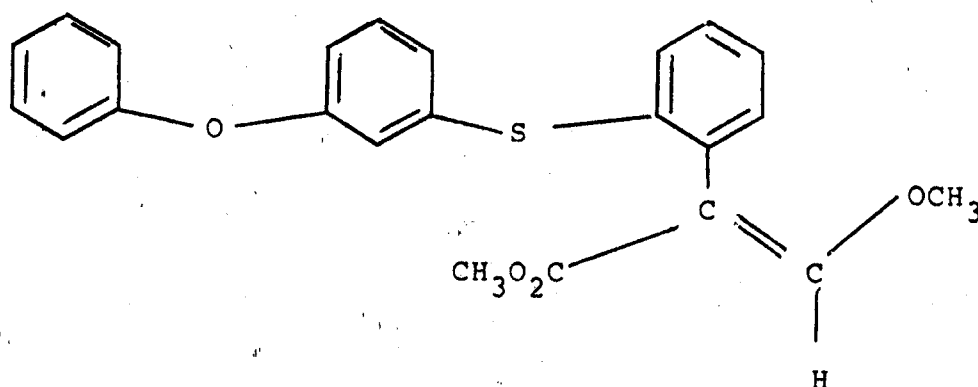
0,5 g (E)-metil-2-|2-(3-oksifenoksi)-fenil|-3-metoksi-pro-
penoato (gauto pagal 1 pavyzdyje aprašytą metodiką), 0,46 g ka -
lio karbonato, 0,23 g 2-chlorpirimidino ir 0,01 g vario chlori -
do 15 ml DMF mišinys 4 valandas virinamas su grįžtamu šaldytuvu.
Reakcijos mišinys atšaldomas, išpilamas į vandenį ir filtruoja -
mas, o filtratas ekstrahuojamas eteriu. Sujungti eteriniai eks -
traktai praplaunami vandeniu ir sūrymu, džiovinami, koncentruo -
jami ir chromatografuojami, išplaunant eterio ir heksano mišiniu.
Gaunama 0,26 g (41 %-nė išeiga) dervos pavidalo junginio.

IR (plėvelė) : 1707, 1633 cm⁻¹.

¹H BMR (90 MHz) : delta 3,54 (3H, s), 3,68 (3H, s), 6,74-7,34
(9H, m), 8,28 (2H, d) m.d.

11 pavyzdys

(E)-metil-3-metoksi-2-|2-(3-fenoksifeniltio)fenil|prope -
onato gavimas (Junginys 446, 3 lentelė).



2-Merkaptofenilacto rūgštis gaunama pagal cheminėje literatūroje aprašytus metodus (D.Papa et al., J.Org.Chem., 1949, 24, 723, R.H. Glauert ir F.G.Mann, J.Chem.Soc., 1952, 2127 ir nuorodos). Į maišomą 0,8 g natrio hidrido 10 ml metanolio tirpalą sudedama 1,68 g 2-merkaptofenilacto rūgšties (palyginti D.C. Atkinson et al., J.Med.Chem., 1983, 26, 1361). Gautas oranžinės spalvos tirpalas 90 minučių maišomas kambario temperatūroje, o po to koncentruojamas pažemintame slėgyje, pašalinant metanolio likutį azeotropinio distiliavimo būdu su toluolu, gaunant geltonos spalvos kietą medžiagą. Į maišomą kietos medžiagos tirpalą 20 ml DMF pridedama 0,2 g vario chlorido ir 2,49 g 3-fenoksibrombenzolo, (gauto iš 3-fenoksifenolio ir trifenilfosfino dibromido (J.P.Schaefer et al., Org.Synth., Coll. Vol.5, 142)) tirpalo 10 ml DMF. Gautas mišinys virinamas 95°C temperatūroje, 2 valandas 125°C temperatūroje, o po to 2 valandas grįžtamam šaldytuvui. Po reakcijos mišinys atšaldomas, išpilamas į vandeninį natrio hidroksidą ir 3 kartus plaunamas eteriu, Vandeninis tirpalas parūgštinamas konc. druskos rūgštimi ir 3 kartus ekstrahuojamas eteriu. Šie ekstraktai praplaunami vandeniu, džiovinami ir koncentruojami, gaunant 2,2 g tamsiai raudonos spalvos riebalinio skysčio, susidedančio daugiausia iš 2-(3-fenoksifeniltio)-fenilacto rūgšties. Šio riebalinio skysčio tirpalas 20 ml metanolio supilamas į parūgštintą metanolį (gautą atsargiai veikiant 30 ml metanolio 3,5 ml acetilo chlorido), o gautas mišinys 90 minučių maišomas kambario temperatūroje. Reakcijos mišinys koncentruojamas, o nuosėdos padalijamos eteriu ir vand. natrio bikarbonatu. Organinis sluoksnis atskiriamas ir praplaunamas 2 kartus vand. natrio hidroksidu ir 3 kartus vandeniu, o po to džiovinamas ir koncentruojamas, gaunant 2,06 g nešvaraus metil-2-(3-fenoksifeniltio)fenilacetato, tamsiai raudonos spalvos rie-

balinio skysčio.

IR maks. (plėvelė) : 1740 cm^{-1} , 94 %-nis švarumas, nustačius GC.

Nešvarus metil-2-(3-fenoksifeniltio)fenilacetatas paverčiamas junginiu pagal pavadinimą (53 %-nė išeiga) pakopomis pagal 7 pavyzdyje aprašytą metodiką, paverčiant metil-2-|3-(3-metoksifenoksi)fenoksi|fenilacetatą (E)-metil-2-|2(3-metoksifenoksi|fenoksi)fenil|-3-metoksipropenoatu, būtent formilijuojant su metil formiatu ir natrio hidridu, o po to o-metilinant su dimetilsulfatu ir kalio karbonatu. Gaunamas oranžinės spalvos dervos pavidalo produktas (98 % švarumas pagal GC), kuris stovėdamas išsikristalizuoja, lyd.temp. $48 - 51,5^{\circ}\text{C}$.

IR maks. (plėvelė) : 1710 ir 1632 cm^{-1} .

^1H BMR (270 MHz) : delta 3,62 (3H, s), 3,673 (3H, s), 6,78(1H,dd), 6,88-7,00 (4H, m), 7,05-7,36 (7H, m), 7,42 (1H, d), 7,48 (1H, s) m.d.

12 pavyzdys

(E)-metil-2-|2-(3-pirimidin-2-iloksifeniltio)fenil|-3-metoksipropenoato gavimas (Jung. 22, 4 lentelė).

3-metoksitiofenolio natrio druskos (gautos, veikiant 2,8 g 3-metoksitiofenolio 0,8 g natrio hidroksido 20 ml metanolio, o po to sausai nugarinant), 4,3 g 2-bromfenilacto rūgšties ir 0,4 g vario (I) chlorido 25 ml sauso DMF mišinys virinamas per naktį su grįžtamu šaldytuvu. Reakcijos mišinys atšaldomas, išpilamas į vandenį ir parūgštinamas druskos rūgštimi. Vandeni - nis mišinys 3 kartus ekstrahuojamas eteriu, o sujungti eteriniai ekstraktai du kartus praskiedžiami natrio hidroksido tirpalu. Sujungti vandeniniai hidroksido ekstraktai parūgštinami praskiesta druskos rūgštimi ir 3 kartus perekstrahuojami eteriu. Sujungti eteriniai ekstraktai 3 kartus plaunami vandeniu,

džiovinami ir nugarinami, gaunant 3,5 g oranžinės spalvos riebalinio skysčio (96,8 % švarumo pagal GC). Riebalinis skystis veikiamas parūgštintu metanolio kambario temperatūroje per naktį. Atliekami įprasti veiksmai, gaunant 2,9 g (91 % švarumo pagal GC) metil-2-(3-metoksifeniltio)fenilacetato, geltonos spalvos skysčio, kuris kitoje pakopoje naudojamas be valymo.

^1H BMR delta : 3,64 (3H, s), 3,74 (3H, s), 3,86 (2H, s) m.d.

IR maks. (plėvelė): 1739 cm^{-1} .

0,86 g metil-2-(3-metoksifeniltio)fenilacetato ir 2,08 g (perteklius) piridinio hidrochlorido 3 valandas virinama 200°C temperatūroje azoto atmosferoje. Po to reakcijos mišinys atšaldomas ir padalijamas praskiesta druskos rūgštimi ir etilo acetatu. Rūgštinis vandeninis sluoksnis papildomai ekstrahuojamas 2 kartus etilo acetatu, o sujungti organiniai sluoksniai ekstrahuojami 3 kartus prask. natrio hidroksidu. Sujungti pagrindiniai sluoksniai parūgštinami koncentruota druskos rūgštimi ir po to 3 kartus ekstrahuojama etilo acetatu. Organiniai ekstraktai sujungiami ir 3 kartus praplaunami vandeniu, džiovinami ir nugarinami, gaunant 0,64 g beveik baltos spalvos kietą medžiagą. Ši medžiaga veikiama metanoliniu vandenilio chloridu, o po to atliekami įprasti veiksmai, gaunant 0,44 g metil-2-(3-oksifeniltio)fenilacetato, raudonos spalvos riebalinio skysčio (90,5 % švarumas pagal GC), kuris kitoje pakopoje naudojamas be valymo.

IR maks.: $3384, 1738\text{ cm}^{-1}$.

0,44 g nešvaraus metil-2-(3-oksifeniltio)fenilacetato ir 1,92 ml metilformiato tirpalas 2 ml sauso DMF per 15 minučių sulašinamas į maišomą natrio hidrido suspensiją (0,21 g, 55 % - ne dispersija alyvoje, praplauta petrolinio eterio) 3 ml sauso DMF

0 - 5°C temperatūroje. Po to tirpalas paliekamas sušilti iki 138 kambario temperatūros. Po 2,5 valandos reakcijos mišinys išpilamas į vandenį, parūgštinamas koncentruota druskos rūgštimi, o po to 3 kartus ekstrahuojamas eteriu. Sujungti eteriniai sluoksniai 3 kartus praplaunami vandeniu, džiovinami ir nugarinami, gaunant 0,49 g raudonos spalvos dervos. Raudona derva ištirpinama 5 ml DMF ir atšaldoma iki 0°C. Į ją pridedama 0,132 g kalio karbonato, o po to sulašinamas 0,111 g dimetilsulfato tirpalas DMF. Reakcijos mišinys maišomas 4,5 valandos, o po to išpilamas į vandenį ir 3 kartus ekstrahuojamas eteriu. Sujungti eteriniai ekstraktai praplaunami 3 kartus vandeniu, džiovinami ir nugarinami, gaunant 0,45 g metil-2-[2-(3-oksifeniltio)fenil]-3-metoksipropenoato, raudonos spalvos dervos.

IR maks. 3240, 1709, 1665 cm^{-1} ; M^+_{316}

^1H BMR delta : 3,65 (3H, s), 3,76 (3H, s), 7,47 (1H, s) m.d.

0,4 g nešvaraus (E)-metil-2-[2-(3-oksifeniltio)fenil]-3-metoksipropenoato 4,5 valandos veikiama 0,45 g 2-chlorpirimidino ir 0,17 g kalio karbonato 10 ml sauso DMF azoto atmosferoje, esant 80 - 90°C. Po to dujinės chromatografijos būdu nustatoma, kad susidarė vienas produktas. Reakcijos mišinys atšaldomas, išpilamas į vandenį ir po to 4 kartus ekstrahuojamas eteriu. Sujungti geltoni eteriniai ekstraktai 2 kartus praplaunami vandeniu, džiovinami ir nugarinami, gaunant 0,39 g oranžinės spalvos devos. Derva chromatografuojama, išplaunant eteriu. Gaunama 0,3; g oranžinės spalvos klampios dervos.

IR maks. 1706, 1632 cm^{-1} .

^1H BMR delta : 3,64 (3H, s), 3,75 (3H, s), 6,97-7,06 (3H, m),
7,08-7,12 (1H, d), 7,25-7,35 (4H, m), 7,46-7,48
(1H, d), 7,49 (1H, s), 8,53-8,56 (2H, d) m.d.

140

13 pavyzdys

(E)-metil-2-[2-(3-feniltiofenoksi)fenil]-3-metoksipropenoato gavimas (Junginys 1, 1 lentelė).

Sumaišoma 2,02 g (0,01 mol) 3-oksodifenilsulfido, 1,35 (0,005 mol) (E)-metil-2-(2-bromfenil)-3-metoksipropenoato (gauto iš metil o-bromfenilacetato, metilformiato ir natrio hidrido, o po to kalio karbonato ir dimetilsulfato paprastai paverčiant 2 pakopomis pagal 8 pavyzdyje aprašytą metodiką, 0,69 g (0,005 mol) bevandenio kalio karbonato ir katalitinis vario chlorido kiekis ir maišant virinama 10 valandų 175°C temperatūroje. Po to mišinys atšaldomas iki aplinkos temperatūros ir ištirpinamas 50 ml DMF. Gautas tirpalas išpilamas į 100 ml vandens ir susidariusi emulsija 2 kartus ekstrahuojama eteriu. Sujungti eteriniai ekstraktai praplaunami 2 kartus vandeniu (x 100 ml), 2 kartus 2M natrio hidroksido tirpalu (x 100 ml) ir du kartus vandeniu (x 100 ml). Gautas eterinis tirpalas džiovinamas, filtruojamas ir sausai nugarinamas pažemintame slėgyje. Produktas išvalomas chromatografiškai, išplaunant heksanu ir chloroformu, gaunant 0,83 g klampaus riebalinio skysčio.

¹H BMR (60 MHz) delta : 3,52 (3H, s), 3,64 (3H, s), 6,5-7,3 (13 H, m), 7,42 (1H, s) m.d.

14 pavyzdys

(E)-metil-2-[2-(3-feniltiofenoksi)fenil]-3-metoksipropenoato - S,S-dioksido gavimo būdas (Junginys 3, 1 lentelė).

3,66 g (0,0156 mol) 3-oksodifenilsulfono, 1,5 g (0,0055 mol) (E)-metil-2-(2-bromfenil)-3-metoksipropenoato (gauto pagal 14 pavyzdyje aprašytą metodiką) ir 1,1 g (0,0079 mol) bevandenio kalio karbonato sumaišoma su katalitiniais vario chlorido ir bronzos vario pagrindu kiekiais. Mišinys 10 valandų virinamas

141

azoto atmosferoje 170°C temperatūroje. Po to lydalas atšaldomas iki aplinkos temperatūros, o likutis ištirpinamas 50 ml DMF. Gautas tirpalas praskiedžiamas 100 ml eterio, o tirpalas filtruojamas, pašalinant neorganines druskas. Tirpalas praplaunamas 100 ml vandens, 2 kartus 2M natrio hidroksido tirpalu (x 100 ml), 100 ml vandens ir 100 ml sūrymo. Eterinis tirpalas džiovinamas, filtruojamas ir sausai nugarinamas pažemintame slėgyje. Likutis išvalomas chromatografiškai, išplaunant heksanu ir chloroformu, gaunant 0,66 g junginio.

¹H BMR (60 MHz) delta : 3,46 (3H, s), 3,57 (3H, s), 6,6-8,0 (14H, m) m.d.

15 pavyzdys.

(E)-metil-2-[2-(3-anilinofenoksi)fenil]-3-metoksipropenoato gavimas (Junginys 4, 1 lentelė).

1,365 g (0,0074 mol) 3-oksidifenilamino, 1 g (0,0037 mol) (E)-metil-2-(2-bromfenil)-3-metoksipropenoato (gauto pagal 14 pavyzdyje aprašytą metodiką) ir 0,517 g (0,0037 mol) bevandeni) kalio karbonato sujungiama su katalitiniais vario chlorido ir bronzos vario pagrindu kiekiais. Mišinys 9 valandas virinamas 170°C temperatūroje, o po to atšaldomas ir ištirpinamas 20 ml DMF. Po to šis tirpalas padalijamas eteriu ir vandeniu. Eterinis sluoksnis 2 kartus praplaunamas vandeniu (x 100 ml), o po to 2 kartus 1M natrio hidroksido tirpalu (x 100 ml). Eterinis tirpalas džiovinamas, filtruojamas ir sausai nugarinamas pažemintame slėgyje. Likusi derva išvaloma chromatografiškai, išplaunant heksanu ir dichlormetanu, gaunant 0,40 g junginio.

¹H BMR (60 MHz) delta: 3,57 (3H, s), 3,67 (3H, s), 5,75 (1H, brs), 6,3-7,4 (13H, m), 7,44 (1H, s) m.d.

16 pavyzdys

(E)-metil-2-[2-(3-N-metilanilinofenoksi)fenil]-3-metoksi-

142

propenoato gavimas (Junginys 5, 1 lentelė).

300 mg natrio hidrido (80 %-nės dispersijos alyvoje, 0,01 mol) praplaunama 2 kartus heksanu (x 50 ml) alyvai pašalinti, o po to suspenduojama 10 ml sauso DMF. Į šią suspensiją pridedamas 290 mg (E)-metil-2-[2-(3-anilinofenoksi)fenil]-3-metoksipropenoato (gauto pagal 16 pavyzdyje aprašytą metodiką) tirpalas 10 ml sauso DMF tokiu greičiu, kad pastoviai išsiskirtų dujų burbuliukai. Pasibaigus dujų išsiskyrimui, mišinys maišomas papildomai 15 minučių, o po to per 5 minutes pridedama 2 ml jodometano (didelis perteklius). Suspensija atsargiai praskiedžiama 50 ml vandens ir 30 minučių papildomai maišoma. Vandeninė emulsija 2 kartus ekstrahuojama eteriu (x 50 ml), o eteriniai ekstraktai džiovinami, filtruojami, sausai nugarinami pažemintame slėgyje, gaunant 211 mg klampaus riebalinio skysčio.

¹H BMR (60 MHz) delta : 3,20 (3H, s), 3,54 (3H, s), 3,65 (3H, s), 6,3-7,4 (13H, m), 7,44 (1H, s) m.d.

17 pavyzdys

(E)-metil-3-metoksi-2-(2-[3-(alfa-oksibenzil)fenoksi]-fenil) propenoato gavimas (Junginys 380, 1 lentelė).

31,0 g 3-oksibenzilo alkoholio gerai sumalama ir maišoma su 34,6 g kalio benzoato, 26,9 g 2-bromfenilacto rūgšties ir vario chlorido (didelė pilna lopetėlė) azote. Mišinys pakaitinamas iki 140°C ir 3,5 valandos maišoma. Po to į maišomą lydalą pridedama 60 ml DMF ir tirpalas paliekamas atšalti, išpilamas į vandenį ir parūgštinamas praskiesta druskos rūgštimi. Vandeninis sluoksnis ekstrahuojamas eteriu, o eteriniai ekstraktai praplaunami vandeniu, džiovinami ir nugarinami, gaunant 42,03 g 2-(3-oksimetilfenoksi)-fenilacto rūgšties, rudos spalvos riebalinio skysčio, kuris toliau naudojamas be valymo.

41,0 g nešvarios rūgšties virinama su grįžtamu šaldytuvu 3,5 valandos 600 ml metanolio, kuriame yra 2,5 ml koncentruotos sieros rūgšties. Metanolis nugarinamas, o liekana ištirpinama etilacetate, praplaunama praskiestu vandeniniu natrio hidridu, po to vandeniu, džiovinama ir nugarinama, gaunant 26,31 g rudos spalvos riebalinio skysčio. 1,31 g produkto išvaloma didelio efektyvumo skystos chromatografijos būdu (eliuentas etilo acetatas:heksanas (1:1)), gaunant švarų metil-2-(3-oksimetilfenoksi)fenilacetatą, gelsvą riebalinį skystį.

^1H BMR (400 MHz) delta: 2,12 (1H, s), 3,60 (3H, s), 3,69 (3H, s), 4,62 (2H, s), 6,95 (1H, s), 6,85-6,90 (2H, t), 7,04-7,14 (2H, m), 7,21-7,32 (3H, m) m.d.

IR maks. (plėvelė) : 3450, 1742 cm^{-1} .

25,0 g nešvaraus metil-2-(3-oksimetilfenoksi)fenilacetato ir 56 ml metilformiato mišinys 50 ml sauso DMF per 30 minučių sulašinamas į 7,35 g natrio hidrido (60 %-nės dispersijos alyvoje, praplauto heksanu) 100 ml sauso DMF 5°C temperatūroje. Mišinys 30 minučių maišomas 5°C temperatūroje, po to kelias valandas paliekamas sušilti iki kambario temperatūros, o po to paliekamas stovėti per naktį. Po to reakcijos mišinys išpilamas į vandenį ir ekstrahuojamas eteriu. Vandeninis sluoksnis parūgštinamas praskiesta druskos rūgštimi ir ekstrahuojamas eteriu. Eteriniai ekstraktai džiovinami ir nugarinami, gaunant 32,19 g nešvaraus metil-3-oksi-2-(2-(3-oksimetilfenoksi)fenilpropenoato, oranžinės spalvos riebalinio skysčio. 32,10 g nešvaraus metilo esterio maišoma 80 ml DMF 5 - 10°C temperatūroje su 25,4 g kalio karbonato ir per 10 minučių sulašinama 11,6 g dimetilsulfato tirpalas 20 ml DMF. Kelias valandas mišinys paliekamas sušilti

iki kambario temperatūros, o po to paliekamas stovėti per naktį. Reakcijos mišinys išpilamas į vandenį, parūgštinamas praskiesta druskos rūgštimi ir ekstrahuojamas eteriu. Eteriniai ekstraktai praplaunami vandeniu, džiovinami ir nugarinami, gaunant 14,38 g rudai oranžinės spalvos riebalinio skysčio. Medžiaga išvaloma didelio efektyvumo skystos chromatografijos būdu, gaunant 7,8 g (E)-metil-3-metoksi-2-(2-(3-oksimetilfenoksi)fenil)propenoato, vos vos rožinės spalvos kristalinės medžiagos.

^1H BMR (270 MHz) delta : 2,55 (1H, s), 3,58 (3H, s), 3,74(3H,S),
4,55 (2H, s), 6,8-7,28 (8H, m),
7,44 (1H, s) m.d.

IR maks. (nujolas): 3515, 1705, 1625 cm^{-1} .

0,314 g šio alkoholio maišoma 5 ml sauso metileno chlorido, pridedama 0,564 g piridinio dichromato, ir mišinys 4 valandas maišomas kambario temperatūroje. Po to mišinys filtruojamas, o nuosėdos praplaunamos eteriu. Sujungti metileno chlorido ir eterio praplovimo tirpalai nugarinami, gaunant 0,309g (E)-metil-3-metoksi-2-(2-(3-formilfenoksi)fenil)-propenoato, rudos spalvos riebalinio skysčio.

^1H BMR (270 MHz) delta : 3,59 (3H, s), 3,65 (3H, s), 6,98(1H,d),
7,17-7,36 (4H, m), 7,40-7,47 (3H, m),
7,47 (1H, s), 7,55 (1H, d) m.d.

IR maks (plėvelė) : 1710, 1640 cm^{-1} .

0,5 g (E)-metil-3-metoksi-2-(2-(3-formilfenoksi)fenil)-propenoato maišoma 20 ml sauso THF -20°C temperatūroje azote. Į šį tirpalą lėtai sulašinama fenilmagnio bromido (0,53 ml 3M tirpalo eteriye, praskiesto tirpalo 5 ml sauso THF. Po to reakcijos mišinys maišomas 30 minučių -20°C temperatūroje, ir lėtai per 1 valandą sušildo mas iki kambario temperatūros ir palieka -

145

mas stovėti per naktį. Po to reakcijos mišinys atšaldomas iki 5°C, pridedama vandens, ir gautas mišinys ekstrahuojamas etilo acetatu. Ekstraktas praplaunamas sūrymu ir džiovinamas, o etilo tirpalas nugarinamas, gaunant geltonos spalvos riebalinį skystį. Skystis išvalomas didelio efektyvumo skystos chromatografijos būdu (eliuentas - heksanas: eteris (2:1), gaunant 0,340 g bespalvio riebalinio skysčio.

^1H BMR (400 MHz) delta : 2,30 (1H, d), 3,57 (3H, s), 3,72 (3H, s),
5,78 (1H, d), 6,82 (1H, d), 6,91 (1H, d), 7,02-7,08 (2H, m), 7,10-7,16 (1H, m), 7,20-7,38 (8H, m), 7,45 (1H, s) m.d.

IR maks. (plėvelė): 3460, 1715, 1635 cm^{-1} .

18 pavyzdys

(E)-metil-3-metoksi-2-(2-(3-(2-piridiloksimetil)fenoksi|fenil)propenoato gavimas (Junginys 6, 2 lentelė).

0,28 g sidabro karbonato sudedama į 0,75 g (70 % švarumo) (E)-metil-3-metoksi-2-(2-(3-bromometilfenoksi|fenil)propenoato (gauto pagal 9 pavyzdyje aprašytą metodiką) ir 0,19 g 2-piridono heksane. Mišinys 3 valandas virinamas su grįžtamu šaldytuvu tamsoje, apvyniojant kolbą folija, o po to paliekamas stovėti per naktį. Heksanas nugarinamas, o likutis išpilomas į metileno chloridą ir filtruojamas per celitą. Filtratas praplaunamas vandeniniu natrio bikarbonatu ir vandeniu, po to džiovinamas ir nugarinamas, gaunant 0,72 g oranžinės spalvos dervos. Derva išvaloma didelio efektyvumo skystos chromatografijos būdu (eliuentas - eteris:heksanas (1:1)), gaunant 0,188 g bespalvės dervos.

^1H BMR (270 MHz) delta: 3,60 (3H, s), 3,76 (3H, s), 5,32 (2H, s),
6,78 (1H, d), 6,84-6,96 (3H, m), 7,04-7,16 (3H, m), 7,21-7,31 (3H, m), 7,48 (1H, s), 7,52-7,60 (1H, m), 8,15 (1H, d)

m.d.

IR maks. (plėvelė) : 1715, 1670, 1645, 1600 cm^{-1} .

19 pavyzdys

(E)-metil-3-metoksi-2-(2-|3-pirimidin-2-iloksimetilfenoksi|fenil)propenoato gavimas (Junginys 85, 2 lentelė).

0,5 g (E)-metil-3-metoksi-2-(2-|3-oksimetilfenoksi|fenil)propenoato (gauto pagal 18 pavyzdyje aprašytą metodiką) keliuose ml sauso DMF supilama į maišomą kambario temperatūroje 0,072 g natrio hidrido (60 %-nės dispersijos alyvoje, praplautos heksanu) 10 ml sauso DMF. Po to reakcijos mišinys 5 minutes maišomas ir pridedama 0,92 g 2-chlorpirimidino, ir mišinys paliekamas per naktį. Po to jis išpilamas į vandenį, parūgštinamas ir ekstraguojamas eteriu. Eteriniai ekstraktai išdžiovinami ir nugarinami, gaunant 0,95 g geltonos spalvos riebalinio skysčio, kuris išvalomas didelio efektyvumo skystos chromatografijos būdu (eliuentas - etilacetatas:heksanas (1:1)). Gaunama 0,104 g riebalinio skysčio.

^1H BMR (270 MHz) delta: 3,60 (3H, s), 3,75 (3H, s), 5,39 (2H, s),
6,86-6,96 (3H, m), 7,03-7,31 (6H, m),
7,49 (1H, s), 8,50 (2H, d) m.d.

IR maks. (plėvelė): 1713, 1640 cm^{-1} .

20 pavyzdys

(E,E)- ir (E,Z)-metil-3metoksi-2-|3-(4nitrostiril)-fenoksi|fenil)propenoato gavimas (Junginys 403, 1 lentelė).

1,39 g dimetilfosfito 5 ml sauso DMF sulašinama į maišomą natrio hidrido suspensiją (0,61 g 50 %-nės dispersijos alyvoje, praplautos heksanu) 10 ml sauso DMF 20°C temperatūroje. Po to maišymas tęsiamas papildomai 20 minučių ir sulašinama 7,0 g (70 % švarumo)(E)-metil-3-metoksi-2-(2-|3-bromometilfenoksi|fe-

nil)-propenoato, gauto pagal 9 pavyzdyje aprašytą metodiką. Reakcijos mišinys paliekamas stovėti 60 valandų, po to 10 valandų virinamas 55°C temperatūroje, išpilamas į vandenį ir ekstrahuojamas etilacetatu. Ekstraktas džiovinamas ir nugarinamas, gaunant klampią geltonos spalvos dervą, kuri išvaloma chromatografiškai (eliuentas 5 %-nis metoksi etilacetatas. Gaunama 1,50 g (E)-metil-3-metoksi-2-[3-(dimetilfosfonometil)fenoksi]propenoato, beveik bespalvio riebalinio skysčio.

¹H BMR (400 MHz) delta: 3,13 (2H, d), 3,62 (3H, s), 3,66 (3H, s), 3,68 (3H, s), 3,78 (3H, s), 6,85 (1H, d), 6,92 (2H, d), 7,00 (1H, d), 7,13 (1H, t), 7,20-7,31 (4H, m), 7,48 (1H, s) m.d.

IR maks. (plėvelė): 1715, 1645 cm⁻¹.

0,61 g šio fosfonato 5 ml sauso DMF sulašinama į maišomą, 0,072 g natrio hidrido (50 %-nės dispersijos alyvoje, praplautos heksanu) 10 ml DME 5°C temperatūroje azote. Po to mišinys pašildomas iki aplinkos temperatūros ir 15 minučių maišomas. Į reakcijos mišinį lėtai sulašinama 0,227 g 4-nitrobenzaldehido 5 ml sauso DME ir maišoma per naktį kambario temperatūroje. Po to įpilama vandens ir mišinys ekstrahuojamas eteriu. Eterinis sluoksnis džiovinamas ir nugarinamas, gaunant klampų geltonos spalvos riebalinį skystį, kuris išvalomas per HPLC (eliuentas - heksanas:etilacetatas (3:1)). Gaunama 0,20 g (Z):(E)-izomerų mišinio (5:1), geltonos dervos.

¹H BMR (270 MHz) delta: |(Z)-izomero duomenys|

3,57 (3H, s), 3,74 (3H, s), 6,58 (1H, d), 6,72 (1H, d), 6,72-6,98 (3H, m), 7,05-7,36 (7H, m). 7,45 (1H, s), 8,06 (2H, d) m.d.

Šį mišinį galima izomerizuoti, virinant su grįžtamu šaldytuvu toluole, esant jodo pėdsakams. Gaunamas izomerų mišinys (85:15).

^1H BMR (400 MHz) delta ((E)-izomero duomenys): 3,62 (3H, s),
3,78 (3H, s), 6,92-7,35 (10H, m),
7,49 (1H, s), 7,61 (2H, d), 8,22 (2H, d) m.d.

21 pavyzdys

(E)-metil-3-metoksi-2-(2-(3-benzoiloksimetilfenoksi)fenil)-propeonato gavimas (Jung. 398, 1 lentelė).

0,5 g (75 % švarumo (E)-metil-3-metoksi-2-(2-(3-bromometilfenoksi)fenil)propeonato (gauto pagal 9 pavyzdyje aprašytą metodiką), 0,13 g benzoinės rūgšties ir 0,076 g kalio karbonato maišoma sausame DMF kambario temperatūroje per naktį. Po to pridama vandens ir mišinys ekstrahuojamas praskiestu vandeniniu natrio bikarbonatu, džiovinamas ir nugarinamas, gaunant 0,49 g geltonos spalvos klampaus riebalinio skysčio, kuris išvalomas per HPLC (eliuentas - heksanas:etilacetatas (5:2). Gaunama 0,120 g junginio.

^1H BMR (400 MHz) delta: 3,60 (3H, s), 3,75 (3H, s), 5,31 (2H, s),
6,93 (1H, d), 6,96 (1H, d), 7,06 (1H, s),
7,12 (1H, d), 7,16 (1H, d), 7,44 (2H, t),
7,25-7,32 (2H, m), 7,47 (1H, s), 7,55
(1H, d), 8,05 (2H, d) m.d.

22 pavyzdys

(E)-metil-3-metoksi-2-(2-(3-trifenilfosfoniometil)-fenoksi)fenil)propenoato bromido druska (Junginys 404, 1 lentelė).

4,58 g (E)-metil-3-metoksi-2-(3-bromometilfenoksi)-fenil)propenoato (70 % švarumo medžiagos, gautos pagal 9 pavyzdyje ap-

149

rašytą metodiką) ir 2,33 g trifenilfosfino maišoma 4 valandas 40 ml sauso DMF, o po to paliekama per naktį. Tirpiklis nugarinamas, gaunant lipnias nuosėdas, kurios sutrinamos su eteriu/etilacetatu, gaunant 4,38 g gelsvai-baltos spalvos kietos medžiagos, lyd.temp 176 - 177°C.

¹H BMR (270 MHz) delta: 3,56 (3H, s), 3,74 (3H, s), 5,28(2H, d), 6,48 (1H, s), 6,62 (1H, d), 6,77 (1H, d), 6,97 (1H, d), 7,04 (1H, t), 7,10-7,28 (3H, m), 7,40 (1H, s), 7,54-7,80 (15H, m), m.d.

23 pavyzdys

(E,E)-metil-3-metoksi-2-(2-(3-stirilfenoksi)fenil)propenoato gavimas (Junginys 18, 1 lentelė).

1,0 g (E)-metil-3-metoksi-2-(2-(3-trifenilfosfoniometil)fenoksi)fenil) propenoato bromido druskos (gautos pagal 23 pavyzdyje aprašytą metodiką) 5 ml sauso DMF sulašinama į 0,075 g natrio hidrido (50 %-nę dispersiją alyvoje, praplautą heksanu) 50 ml sauso DMF, gaunant oranžinės spalvos tirpalą. 2 valandas vyksta vandenilio išsiskyrimas, o po to į reakcijos mišinį pridama 0,66 g benzaldehido 5 ml sauso DMF ir mišinys 20 valandų maišomas kambario temperatūroje, o po to 2 valandas virinamas 60°C temperatūroje. Po to pridama vandens ir mišinys ekstrahuojamas etilo acetatu. Organinis ekstraktas džiovinamas ir nugarinamas, gaunant 1,3 g geltono riebalinio skysčio, kuris išvalomas per HPLC (eliuentas THF:heksanas (1:4)), gaunant 0,362g junginio pagal pavadinimą ir atitinkamo (2)-izomero mišinio (1:1).

Šis (Z):(E) mišinys izomerizuojamas, virinant su grįžtamu šaldytuvu toluole kelias valandas, esant kristaliniam jodui.

150

Gaunamas bespalvės dervos pavidalo (E)-izomeras.

^1H BMR (270 MHz) delta : 3,64 (3H, s), 3,77 (3H, s), 6,88 (1H, d),
6,96-7,40 (10H, m), 7,49 (1H, s), 7,48
(2H, m) m.d.

IR maks. (plėvelė) : 1710, 1640 cm^{-1} .

24 pavyzdys

(E)-metil-3-metoksi-2-(2-(3-fenoksikarbonilfenoksi)fenil)-
propenoato gavimas (Junginys 50, 1 lentelė).

Į 2,43 g (E)-metil-3-metoksi-2-(2-(3-oksimetilfenoksi)fenil)propenoato (gauto pagal 18 pavyzdyje aprašytą metodiką), maišomo 100 ml acetono 5 - 10°C temperatūroje pridedama chromo rūgšties (gautos ištirpinant 6,5 g chromo trioksido 18,5 ml vandens, kuriame yra 5,5 ml koncentruotos sieros rūgšties), kol nusistovi rausvai ruda tirpalo spalva, o GC parodo, kad sureagavo visas pradinis alkoholis. Po to mišinys išpilamas į vandenį ir ekstrahuojamas eteriu. Eteriniai ekstraktai praplaunami vandeniui, džiovinami ir nugarinami, gaunant 2,495 g (E)-metil-3-metoksi-2-(2-(3-karboksifenoksi)fenil)propenoato, gelsvo riebalinio skysčio.

^1H BMR (270 MHz) delta : 3,60 (3H, s), 3,76 (3H, s), 6,95 (1H, d),
7,14-7,40 (5H, m), 7,50 (1H, s), 7,66
(1H, s), 7,78 (1H, d), 9,35 (1H, br s)
m.d.

IR maks. (plėvelė): 3500-2500, 1725, 1640 cm^{-1} .

0,33 g karboninės rūgšties iš aukštesnės pakopos, maišomos 10 ml sauso THF, veikiama 0,11 ml oksalilo chlorido ir vienu lašu sauso DMF. Reakcijos mišinys maišomas 45 minutes, paliekamas per naktį ir nugarinamas, gaunant nešvarų (E)-metil-3-me -

151

toksi-2-(2-|3-chlorkarbonilfenoksi|fenil)propenoatą, oranžinės-geltonos spalvos riebalinį skystį.

IR maks. (plėvelė) : 1760, 1715, 1640 cm^{-1} .

Į rūgšties chloridą iš ankstesnės pakopos 15 ml sauso THF pridedama 0,090 g fenolio ir 0,096 g trietilamino mišinio 5 ml sauso THF. Reakcijos mišinys 1,5 valandos maišomas kambario temperatūroje, o po to išpilamas į vandenį ir ekstrahuojamas eteriu. Eteriniai ekstraktai praplaunami praskiestu natrio hidroksidu, o po to vandeniu, džiovinami ir nugarinami, gaunant 136 mg oranžinės spalvos riebalinio skysčio.

^1H BMR (270 MHz) delta: 3,60 (3H, s), 3,77 (3H, s), 6,94 (1H, d),
7,14 (2H, t), 7,23-7,38 (3H, m), 7,47
(1H, s), 7,61 (1H, t), 7,72 (1H, d) m.d.

IR maks. (plėvelė) : 1755, 1710, 1640 cm^{-1} .

25 pavyzdys

(E)-metil-2-|2-(3-|6-chlorpirimidin-4-iloksi)fenil|-3-metoksipropenoato (Junginys 89, 2 lentelė) gavimas.

0,46 g kalio karbonato, 0,027 g vario chlorido ir 0,41 g 4,6-dichlorpirimidino supilama į maišomą 1,0 g (E)-metil-2-|2-(3-oksifenoksi)fenil|-3-metoksipropenoato (gauto pagal 1 pavyzdyje aprašytą metodiką) tirpalą 10 ml DMF. Gautas mišinys 10 valandų maišomas kambario temperatūroje. Mišinys praskiedžiamas vandeniu ir ekstrahuojamas eteriu. Ekstraktai praplaunami vandeniniu natrio bikarbonatu ir vandeniu, džiovinami, koncentruojami ir chromatografuojami, išplaunant eteriu:heksanu (1:1). Gaunama 0,39 g (28 %-nė išeiga) bespalvio riebalinio skysčio.

^1H BMR (270 MHz) delta : 3,60 (3H, s), 3,76 (3H, s), 6,74 (1H, t),
6,81 (1H, dd), 6,90 (2H, m), 7,03
(1H, m), 7,17 (1H, t), 7,26-7,36 (3H,
m), 7,49 (1H, s), 8,59 (1H, s) m.d.

26 pavyzdys

(E)-metil-3-metoksi-2-[2-(3-pirimidin-4-iloksifenoksi)fenil]propeonato gavimas (Junginys 92, 2 lentelė).

0,27 g natrio hipofosfito tirpalo 5 ml vandens maišant sulašinama į 0,4 g (E)-metil-2-[2-(3-[6-chlorpirimidin-4-iloksi]fenoksi)fenil]-3-metoksipropenoato (gauto pagal 26 pavyzdyje aprašytą metodiką), 0,2 g kalio karbonato ir 0,08 g 5 %-nio padžio ant anglies 4 ml THF mišinį. Gautas mišinys 2 valandas maišomas kambario temperatūroje, o po to filtruojamas per "Hiflo", praplaunant etilo acetatu ir vandeniu. Filtratas ir plovimo skysčiai sujungiami ir atskiriamas vandeninis ir organinis sluoksniai. Organinis sluoksnis džiovinamas, koncentruojamas ir chromatografuojamas, išplaunant eterio ir heksano mišiniu (1:1). Gaunama 0,19 g (52 %-nė išeiga) bespalvio riebalinio skysčio.

¹H BMR (270 MHz) delta: 3,61 (3H, s), 3,75 (3H, s), 6,75 (1H, t), 7,48 (1H, s), 8,56 (1H, d), 8,76 (1H, s)
m.d.

27 pavyzdys

(E)-metil-3-metoksi-2-[2-(3-[3-nitrofenoksi]fenoksi)fenil]propeonato gavimas (Junginys 132, 1 lentelė).

1,7 g 3-(3-nitrofenoksi)fenolio, 2,0 g (E)-metil-2-(2-bromfenil)-3-metoksipropenoato (gauto pagal 14 pavyzdyje aprašytą metodiką), 1,0 g kalio karbonato ir 1,0 g vario chlorido mišinys 5 valandas virinamas 170 - 180°C temperatūroje, o po to atšaldomas. Mišinys praskiedžiamas vandeniu ir ekstrahuojamas eteriu. Ekstraktas praplaunamas vandeniniu natrio hidroksidu ir rūrymu, po to džiovinamas ir koncentruojamas, gaunant 3,12 g rudos spalvos riebalinio skysčio. Produktas išvalomas chromatogra-

153

fiškai, išplaunant įvairiomis eterio proporcijomis (iki 20 %) heksane. Gaunama 1,06 g (34 %-tų išeiga) geltono riebalinio skysčio.

^1H BMR (270 MHz) delta: 3,60 (3H, s), 3,76 (3H, s), 6,66-6,83 (3H, m), 7,02 (1H, d), 7,18 (1H, d), 7,22-7,38 (3H, m), 7,45-7,52 (1H, m), 7,49 (1H, s), 7,78 (1H, m), 7,92-7,97 (1H, m) m.d.

2B pavyzdys

(E)-metil-3-metoksi-2-(2-|3-(3-metoksifenoksimetil)fenoksi|fenil)propenoato gavimas (Junginys 372, 1 lentelė).

0,50 g (E)-metil-3-metoksi-2-|3-metilfenoksi|fenil)propenoato (gauto pagal 9 pavyzdyje aprašytą metodiką), 0,32 g 1,3-dibromo-5,5-dimetilhidantaoino ir 0,033 g azoizobutironitrilo 1 valandą virinama su grįžtamu šaldytuvu 40 ml anglies tetrachlorido, apšvitinant 400 vatų volframo lempa. Po to mišinys atšaldomas ir išpilamas į vandenį. Organinis sluoksnis praplaunamas vandeniu, džiovinamas ir nugarinamas, gaunant 0,825 g klampaus geltonos spalvos riebalinio skysčio, turinčio apie 65 % (E)-metil-3-metoksi-2-(2-|3-bromometilfenoksi|fenil)-propenoato, kuris toliau naudojamas be valymo (^1H BMR duomenų žiūrėti 9 pavyzdyje).

0,41 g mėšvaraus bromido tirpalo 4 ml sauso DMF supilama į natrio 3-metoksifenoksido tirpalą (gautą iš 3-metoksifenolio ir natrio hidrido) 6 ml sauso DMF ir mišinys 4 valandas maišomas, o po to paliekamas stovėti per naktį. Reakcijos mišinys išpilamas į praskiestą vandeninį druskos rūgšties hidrokloridą ir ekstrahuojama etilo acetatu. Organinės frakcijos džiovinamos ir nugarinamos, gaunant rudos spalvos riebalinį skystį. Produktas

154

išvalomas per HPLC (eliuentas 40/60 petrolio eteris:etilo acetatas (7:3), gaunant 0,20 g bespalvės dervos.

IR maks. (plėvelė) : 1715, 1640 cm^{-1} .

^1H BMR (400 MHz) delta: 3,60 (3H, s), 3,73 (3H, s), 3,77 (3H, s),
4,99 (2H, s), 6,50-6,55 (3H, m), 6,88-
6,95 (2H, m), 7,05 (1H, s), 7,09-7,20
(3H, m), 7,24-7,31 (3H, m), 7,47 (1H, s)
m.d.

29 pavyzdys

(E)-metil-3-metoksi-2-(2-[3-benzoilfenoksi]fenil)propeo -
nato gavimas (Junginys 12, 1 lentelė).

Sumaišoma 10,0 g metil-2-(3-oksimetilfenoksi)fenilacetato
(gauto pagal 18 pavyzdyje aprašytą metodiką) ir 10 g celito 100
ml metileno chlorido ir viena porcija pridedama 15,85 g piridi-
nio chlorchromato. Reakcijos mišinys 2,5 valandos maišomas kam-
bario temperatūroje po to filtruojamas ir nugarinamas. Gaunama
8,48 g metil-2-(3-formilfenoksi)fenilacetato, oranžinės spalvos
riebalinio skysčio, kuris pakankamai švarus, todėl toliau naudo-
jamas be valymo.

IR maks. (plėvelė) : 1740, 1700 cm^{-1} .

^1H BMR (270 MHz) delta: 3,59 (3H, s), 3,69 (2H, s), 6,92 (1H, d),
7,14-7,20 (1H, t), 7,23-7,37 (3H, m),
7,43 (1H, m), 7,50 (1H, t), 7,60 (1H,
dd), 9,95 (1H, s) m.d.

2,84 ml fenilmagnio bromido (3M tirpalo eteryje per 35 mi-
nutes sulašinama į atšaldytą ir maišomą 2,30 g aldehido iš prieš
tai einančios pakopos tirpalą THF taip, kad temperatūra neviršy-
tų -30°C . Po to reakcijos mišinys lėtai pašildomas iki kambario

temperatūros, maišomas per naktį, o po to atšaldomas ledo vonioje, atsargiai pridedant vandens. Į mišinį pridedama praskiestos druskos rūgštis ir mišinys ekstrahuojamas etilacetatu. Ekstraktai džiovinami ir nugarinami, gaunant geltonos spalvos riebalinį skystį, kuris išvalomas chromatografiškai (eliuentas heksanas: etilacetatas (2:1)). Gaunama 1,69 g metil-2-[(3-(alfa-oksi)benzil)fenoksi]fenilacetato, gelsvos spalvos riebalinio skysčio.

^1H BMR (270 MHz) delta : 3,57 (3H, s), 3,68 (2H, s), 5,79 (1H, s),
6,79-6,90 (2H, m), 7,05-7,13 (3H, m),
7,18-7,40 (9H, m) m.d.

0,91 g oksi-esterio iš ankstesnės pakopos maišoma 25 ml metileno chlorido kambario temperatūroje su dviem porcijomis (lopetėlėmis) cetilo. Po to pridedama 0,65 g piridinio chlorochromato ir reakcijos mišinys 3 valandas maišomas. Mišinys filtruojamas, o filtratas nugarinamas ir išvalomas per HPLC (eliuentas heksanas:etilacetatas (3:1)). Gaunama 0,56 g metil-2-(3-benzoilfenoksi)fenilacetato, gelsvos spalvos dervos.

^1H BMR (270 MHz) delta: 3,60 (3H, s), 3,70 (2H, s), 6,93 (1H, d),
7,10-7,63 (10H, m), 7,81 (2H, d) m.d.
IR maks. (plėvelė) : 1740, 1660 cm^{-1} .

Ši medžiaga paverčiama junginiu pagal pavadinimą, veikiant natrio hidridu ir metilformiatu, o po to kalio karbonatu ir dimetilsulfatu dviem pakopomis, pagal 8 pavyzdyje aprašytą metodiką.

IR maks. (plėvelė): 1710, 1660, 1635 cm^{-1} .

^1H BMR (270 MHz) delta: 3,60 (3H, s), 3,75 (3H, s), 6,98 (1H, d),
7,12-7,20 (2H, m), 7,26-7,52 (8H, m),
7,47 (1H, s), 7,55-7,63 (1H, m), 7,80
(2H, dd) m.d.

156

30 pavyzdys

(E)-metil-3-metoksi-2-(2-(3-benzilfenoksi)fenil)propenoato gavimas (Junginys 9, 1 lentelė).

3,27 g trifluoracto rūgšties maišant sulašinama į 1,68 g metil-2-(3-(alfa-oksi)benzil)fenoksi-fenilacetato (gauto pagal 30 pavyzdyje aprašytą metodiką) 5°C temperatūroje. Po to į mišinį lėtai sulašinama 2,24 g trietilsilano. Susidaręs skaidrus tirpalas maišomas per naktį, praskiedžiamas vandeniu ir ekstrahuojamas eteriu. Eterinė frakcija praplaunama vandeniniu natrio bikarbonatu, džiovinama, koncentruojama ir išvaloma per HPLC (eliuentas heksanas:eteris (4:1). Gaunama 1,03 g metil-2-(3-benzilfenoksi)fenilacetato, bespalvio riebalinio skysčio.

IR maks. (plėvelė) : 1742 cm^{-1} .

Ši medžiaga paverčiama junginiu pagal pavadinimą, veikiant natrio hidridu ir metil-formiatu, o po to kalio karbonatu ir dimetilsulfatu dviem pakopomis, pagal 8 pavyzdyje aprašytą metodiką.

IR maks. (plėvelė): 1708, 1635 cm^{-1} .

^1H BMR (270 MHz) delta: 3,56 (3H, s), 3,72 (3H, s), 3,93 (2H, s),
6,76-6,93 (4H, m), 7,08-7,31 (10H, m),
7,47 (1H, s) m.d.

31 pavyzdys

(E)-metil-3-metoksi-2-(2-(3-N-fenilsulfonamido)fenoksi)-fenilpropenoato gavimas (Jung 78, 1 lentelė).

21,5 g 2-bromfenilacto rūgšties, 29,2 g 3-nitrofenolio, 27,6 g kalio karbonato ir 0,5 g vario chlorido mišinys 6 valandas virinamas 130°C temperatūroje maišant. Mišinys atšaldomas, išpilamas į 500 ml vandens, parūgštinamas koncentruota druskos

157

rūgštimi ir 3 kartus ekstrahuojamas (x 200 ml) etilacetatu. Ekstraktai džiovinami, filtruojami ir koncentruojami, gaunant tamsų riebalinį skystį. Šis skystis ištirpinamas 400 ml metanolio, turinčio 4 ml koncentruotos sieros rūgšties, o gautas tirpalas 3 valandas virinamas su grįžtamu šaldytuvu. Reakcijos mišinys koncentruojamas, o liekana ištirpinama 300 ml etilacetato. Šis tirpalas praplaunamas 2 kartus 1M vandeninio natrio hidroksido tirpalu (x 100 ml) ir sūrymu, po to džiovinamas, filtruojamas ir koncentruojamas, gaunant tamsų riebalinį skystį. Šis skystis distiliuojamas (krosnies temp. 220°C, 0,2 mmHg), gaunant 16,74 g (58 %-nė išeiga nuo 2-bromfenilacto rūgšties) metil-2-(3-nitrofenoksi)fenilacetato, skaidraus balzgano riebalinio skysčio.

^1H BMR (270 MHz) delta: 3,60 (3H, s), 3,70 (2H, s), 6,9-8,0 (8H, m) m.d.

IR maks. (plėvelė) : 1739 cm^{-1} .

15 g metil-2-(3-nitrofenoksi)fenilacetato, 100 ml metanolio, 100 ml ledinės acto rūgšties ir 15,0 g geležies miltelių mišinys 30 minučių atsargiai virinamas su grįžtamu šaldytuvu maišant. Po to mišinys atšaldomas, o geležies miltelių perteklius nufiltruojamas. Filtratas išpilamas į 700 ml vandens ir 2 kartus ekstrahuojamas eteriu (x 200 ml). Eteriniai ekstraktai neutralizuojami maišant su vandeniniu natrio bikarbonatu, po to džiovinami, filtruojami ir koncentruojami. Gaunama 13,0 g (97%-nė išeiga) metil-2-(3-aminofenoksi)fenilacetato, gelsvo riebalinio skysčio.

^1H BMR (270 MHz) delta: 3,63 (3H, s), 3,68 (2H, s), 3,9(1H, br s), 6,2-7,3 (8H, m) m.d.

IR maks. (plėvelė) : 3400, 3373, 1733 cm^{-1} .

158

11,54 g metil-2-(3-aminofenoksi)fenilacetato ir 27,7 ml metilformiato 25 ml DMF mišinys sulašinamas į maišomą 3,25 g natrio hidrido suspensiją 50 ml DMF, atšaldytą ledu žemiau 10°C (išsiskiria dujų burbuliukai). Po to reakcijos mišinys 3 valandas maišomas kambario temperatūroje, išpilamas į vandenį, parūgštinamas konc. druskos rūgštimi ir ekstrahuojamas etilo acetatu. Šie ekstraktai praplaunami sūrymu, džiovinami ir koncentruojami, gaunant klampų geltonos spalvos riebalinį skystį. Į maišomą šio skysčio tirpalą 50 ml DMF pridedama 12,4 g kalio karbonato ir 4,25 ml dimetilsulfato, o gautas mišinys 3 valandas maišomas kambario temperatūroje, išpilamas į vandenį ir ekstrahuojamas etilacetatu. Ekstraktai praplaunami vandeniu, džiovinami ir koncentruojami, gaunant 13,67 g (93 %-nė išeiga) (E)-metil-2-(3-formamidofenoksi)fenil-3-metoksipropenoato, skaidrios žalios spalvos dervos.

^1H BMR (270 MHz) delta: 3,60 (3H, s), 3,78 (3H, s), 7,47 (1H, s)
m.d.

IR maks. (plėvelė) : 3309, 1702, 1606 cm^{-1} .

Į maišomą 13,67 g (E)-metil-2-|2-(3-formamidofenoksi)fenil|-3-metoksipropenoato tirpalą 100 ml metanolio, palaikant temperatūrą žemiau 50°C šaldančios vonios pagalba, sulašinama 7,8 ml fosforilo chlorido. Reakcijos mišinys 20 minučių maišomas, po to išpilamas į 500 ml vandens, neutralizuojamas natrio bikarbonatu ir ekstrahuojamas eteriu. Ekstraktai džiovinami ir koncentruojami, gaunant geltonos spalvos riebalinį skystį, kuris išvalomas išplaunant eteriu. Gaunama 8,57 g (68 %-tą išeiga) (E)-metil-2-|2-(3-aminofenoksi)fenil|-3-metoksipropenoato, geltonos spalvos kietos medžiagos, lyd.temp. 83-85°C.

^1H BMR (270 MHz) delta: 3,6 (2H, br s), 3,62 (3H, s), 3,77

(3H, s), 6,2-6,4 (3H, m), 6,9-7,3 (5H, m),
7,48 (1H, s) m.d.

IR maks. (plėvelė): 3450, 3370, 1703, 1632 cm^{-1} .

0,4 g (E)-metil-2-[2-(3-aminofenoksi)-fenil]-3-metoksi -
propenoato tirpalo 2 ml ledinės acto rūgšties veikiama 1 ml 5,8
M druskos rūgšties -10°C temperatūroje. Po to maišomas tirpalas
30 minučių veikiamas 0,1 g natrio nitrito 2 ml vandens taip pat
 -10°C temperatūroje. Gautas tirpalas (kuriame yra diazonio dru-
skos) sudedamas į 0,5 ml ledinės acto rūgšties, prisotintos
sieros dioksidu, kuriame yra 0,1 g vario chlorido (išsiskiria
dujų burbuliukai). Po 30 minučių reakcijos mišinys išpilamas į
vandenį ir ekstrahuojamas eteriu. Eteriniai ekstraktai neutra-
lizuojami sočiu vandeniniu natrio bikarbonato tirpalu, džiovi-
nami ir koncentruojami, gaunant 0,14 g (E)-metil-2-[2-(3-chlor-
sulfonilfenoksi)fenil]-3-metoksipropenoato, geltonos spalvos
riebalinio skysčio.

IR maks. (plėvelė) : 1710, 1636 cm^{-1} .

Į 0,14 g metil-2-[2-(3-chlorsulfonilfenoksi)fenil]-3-metok-
sipropenoato tirpalo (0,5 ml) piridino kambario temperatūroje
maišant sulašinama 0,05 ml anilino. Po 3 valandų reakcijos mi-
šinys išpilamas į vandenį. Gautas mišinys lengvai parūgštinamas
2M druskos rūgštimi ir ekstrahuojamas eteriu. Eteriniai ekstra-
ktai praplaunami sūrymu, džiovinami, koncentruojami ir chromato-
grafuojami, išplaunant eteriu. Gaunama 0,145 g skaidraus rieba-
linio skysčio.

IR maks. (plėvelė): 3240, 1693, 1635, 1600 cm^{-1} .

^1H BMR (270 MHz) delta: 3,55 (3H, s), 3,69 (3H, s), 6,53 (1H,
br s), 6,8 (1H, m), 7,0-7,4 (12H, m),
7,43 (1H, s) m.d.

32 pavyzdys

(E)-metil-2-[2-(3-brombenzoilamino|fenoksi)fenil]-3-metoksipropenoato gavimas (Junginys 421, 1 lentelė).

0,37 g 3-brombenzoilo chlorido sudedama į maišomą 0,5 g (E)-metil-2-[2-(3-aminofenoksi)fenil]-3-metoksipropenoato, gauto pagal 32 pavyzdyje aprašytą metodiką, tirpalą 20 ml dichlorometano, kuriame yra 0,17 g trietilamino. Po 3 valandų reakcijos mišinys išpilamas į vandenį ir 2 kartus ekstrahuojamas dichlorometanu (x 50 ml). Ekstraktai džiovinami, koncentruojami ir chromatografuojami, išplaunant eteriu. Gaunama 0,61 g gelsvos spalvos putų.

IR maks. (nujolas): 1710, 1680, 1640, 1605 cm^{-1} .

^1H BMR (270 MHz) delta: 3,62 (3H, s), 3,78 (3H, s), 6,73-8,0 (13H, m), 7,47 (1H, s) m.d.

33 pavyzdys

(E)-metil-2-[2-(3-piridin-2-iloksifenoksi)fenil]-3-metoksipropenoato gavimas (Junginys 1, 2 lentelė).

0,92 g kalio karbonato, vario chlorido (katalitinio), bronzos vario pagrindu (katalitin.) ir 1,94 g 2-fluorpiridino sudedama į maišomą 2,0 g (E)-metil-2-[2-(3-oksifenoksi)fenil]-3-metoksipropenoato (gauto pagal 1 pavyzdyje aprašytą metodiką) tirpala 15 ml DMF. Gautas mišinys 3 valandas maišomas 130°C temperatūroje. Po to mišinys atšaldomas, praskiedžiamas vandeniu ir 2 kartus ekstrahuojamas eteriu. Sujungti ekstraktai praplaunami vandeniniu natrio hidroksidu, vandeniu ir sūrymu, po to džiovinami ir koncentruojami. Produktas išvalomas chromatografiškai, išplaunant eterio-heksano mišiniu, gaunant 1,68 g (67 % išeiga) geltonai oranžinės spalvos lipnaus riebalinio

skysčio.

^1H BMR (270 MHz) delta: 3,60 (3H, s), 3,73 (3H, s), 6,72-7,32
6,72-7,32 (10H, m), 7,48 (1H, s), 7,67
(1H, m), 8,19 (1H, m) m.d.

34 pavyzdys

(E)-metil-2-[2-(3-[6-chlorpiridazin-3-iloksi]fenoksi)fenil]-3-metoksipropenoato gavimas (Junginys 130, 2 lentelė).

0,93 g kalio karbonato, vario chlorido (katalitinio) ir 1,0 g 3,6-dichlorpiridazino sudedama į maišomą 2,01 g (E)-metil-2-[2-(3-oksifenoksi)fenil]-3-metoksipropenoato (gauto pagal 1 pavyzdyje aprašytą metodiką) tirpalą 30 ml DMF. Gautas mišinys 2 valandas maišomas 95°C temperatūroje, po to atšaldomas, praskiedžiamas vandeniu ir 2 kartus ekstrahuojamas eteriu. Sujungti ekstraktai praplaunami vandeniniu natrio hidroksidu, vandeniu ir sūrymu, po to džiovinami ir koncentruojami. Produktas išvalomas chromatografiškai, išplaunant eterio-heksano mišiniu. Gaunama 1,71 g (62 % išeiga) geltonos dervos.

^1H BMR (270 MHz) delta: 3,60 (3H, s), 3,73 (3H, s), 6,73-7,36
(9H, m), 7,46 (1H, m), 7,50 (1H, s) m.d.

Toliau pateikiami kompozicijų pavyzdžiai išradimo junginių pagrindu žemės ūkio ir sodų kultūroms apdirbti. Tokios kompozicijos apima vieną iš išradimo tikslų. Pateikiami procentai yra svorio procentai.

35 pavyzdys

Emulsinis koncentratas gaunamas, maišant komponentus tik, kol jie ištirpsta.

Junginys 212, 1 lentelė	10 %
Benzilo alkoholis	30 %

Kalcio dodecilbenzolsulfonatas	5 %
Nonilfenoletoksilatas (13 molių etileno oksido)	10 %
Alkil benzolai	45 %

36 pavyzdys

Aktyvus komponentas ištirpinamas metileno dichloride, o gautu tirpalu apipurškiamos atapulgitinio molio granulės. Po to tirpiklis paliekamas išgaruoti, gaunant granulių kompoziciją.

Junginys 212, 1 lentelė	5 %
Atapulgito granulės	95 %

37 pavyzdys

Kompozicija sėklų beicavimui gaunama, susmulkinant ir sumaišant tris komponentus.

Junginys 212, 1 lentelė	50 %
Mineralinis aliejus	2 %
Kaolinas	48 %

38 pavyzdys

Dustas gaunamas sumalant ir sumaišant aktyvų komponentą su talku.

Junginys 212, 1 lentelė	5 %
Talkas	95 %

39 pavyzdys

Suspensinis koncentratas gaunamas sumalant komponentus rutuliniame malūne ir gaunant vandeningą sumalto mišinio suspensiją.

Junginys 212, 1 lentelė	40 %
Natrio lignosulfonatas	10 %
Bentonito molis	1 %
Vanduo	49 %

Šį sąstatą praskiedus vandeniu galima naudoti purškimui arba juo tiesiai apdirbti sėklas.

40 pavyzdys

Suvilgytų miltelių sąstatas gaunamas maišant ir malant kartu visus komponentus, kol susidaro vienalytė masė.

Junginys 212, 1 lentelė	25 %
Natrio laurilsulfatas	2 %
Natrio lignosulfonatas	5 %
Silicio dioksidas	25 %
Kaolinas	43 %

41 pavyzdys

Išradimo junginiai buvo tiriami prieš įvairias augalų gyvybines ligas. Bandymas vykdomas toliau aprašytu būdu.

Augalai auginami John Innes Potting Compost (Nr.1 arba 2) 4 cm skersmens puodeliuose. Tiriamų junginių preparatai gaminami, sumalant rutuliniame malūne su vandeniniu Dispersol T arba ištirpinant acetone arba acetono/etanolio mišinyje ir praskiedžiant iki nirimos koncentracijos prieš naudojimą. Grybelinių ligų atveju preparatais (100 m.d. aktyvaus komponento, jei kitaip nenurodyta) apipurškiami augalų lapai arba augalų šaknys dirvoje. Lapai apipurškiami taip, kad kompozicija išsilaikytų ant jų, o apdirbant šaknis dirvoje galutinė koncentracija sudaro apytiksliai 40 m.d. aktyvaus komponento/sausai dirvai. Apipurškiant varpinius augalus, pridedama toks Tween 20 kiekis, kad galutinė jo koncentracija sudarytų 0,05 %.

Daugeliu atvejų augalų šaknys žemėje ir lapai (apipurškiant) tiriamais junginiais apdirbami vieną ar dvi dienas iki užkrėtimo ligos sukėlėju. Kitaip vykdomas bandymas su Erysiphe

graminis, kada augalai užkrečiami 24 valandas prieš gydymą. Lapų ligų sukėlėjais, sporų suspensijomis, buvo apipurškiami tiriamų augalų lapai. Užkrėsti augalai laikomi atitinkamoje aplinkoje, leidžiant infekcijai plisti ir po to inkubuojami tol, kol ligą galima įvertinti. Laiko tarpas tarp užkrėtimo ir įvertinimo sudaro 4-14 dienos, ir priklauso nuo ligos ir aplinkos sąlygų.

Ligos išplitimo laipsnis įvertinamas balais pagal toliau pateiktą sistemą:

4 = nėra ligos

3 = pėdsakai - 5 % ligos nuo neapdirbtų augalų

2 = 6-25 % ligos nuo neapdirbtų augalų

1 = 26-59 % ligos nuo neapdirbtų augalų

0 = 60-100 % ligos nuo neapdirbtų augalų

Rezultatai pateikiami 6 lentelėje.

165

6 lentelė

Junginio Nr.	Lentelės Nr.	PUCCINIA RECONDITA (WHEAT) (kviečiai)	ERYSIPHE GRAMINIS (BARLEY) (Miežiai)	VENTURIA INAEQUALIS (APPLE) (Obelys)	PYRICULARIA ORYZAE (RICE) (Ryžiai)	CERCOSPORA ARACHIDICOLA (PEANUT) (Žemės riešutai) (Vynmedžiai)	PLASMOPARA VITICOLA (VINE)	PHYTOPHTHORA INFESTANS (TOMATO)
1	I	4	4	4	4	4	4	3
2	I	4	2	4	4	4	4	0
3	I	3	0	4	2	4	4	0
4	I	4	4	4	3	4	4	3
5	I	4	4	4	3	4	4	2
6	II	4	4	4	4	4	4	4
7	I	3	4	4	3	4	4	0
12	I	4	3	4	4	4	4	4
18	I	4	3	4	4	4	4	0
21	I	4	4	4	4	4	4	4
22	I	4	4	0	0	-	4	0
22	II	4	4	4	3	4	4	4
22	IV	4	0	4	4	4	4	3
23	I	4	3	4	4	4	4	4
24	I	4	4	4	4	4	4	2
25	I	4	3	4	3	4	4	3
27	I	4	0	4	4	4	4	3
29	I	4	3	4	0	4	4	4
38	I	4	3	3	4	4	4	3
38	II	4	4	4	4	2	4	4
47	II	0	4	4	3	4	4	3
49	I	4	2	4	3	4	4	3
50	I	3	0	3	2	0	4	2
51	I	4	4	3	4	4	4	4
52	II	4	4	4	4	4a	-	0
53	II	4	3	4	4	4	4	4
62	I	4	3	4	4	4	3	4
67	I	3	4	4	3	3	4	3
81	II	4	4	0	3	1	4	3

6 lentelė (tęsinys)

Junginio N°	Lentelės N°.	PUCCINIA RECONDITA (WHEAT) (kviečiai)	ERYSIPHE GRAMINIS (BARLEY) (miežiai)	VENTURIA INAEQUALIS (APPLE) (obelys)	PYRICULARIA ORYZAE (RICE) (ryžiai)	CERCOSPORA ARACHIDICOLA (PEANUT) (žemės riešutai)	PLASMOPARA VITICOLA (VINE) (vynmedžiai)	PHYTOPHTHORA INFESTANS (TOMATO) (pomidorai)
83	II	3	4	4	4	2	4	3
84	I	3	0	4	0	0	4	0
84	II	4	4	4	3	4	4	1
85	II	4	4	4	4	4	4	4
86	I	1	0	4	1	4	4	0
86	II	0	0	0	0	0	2	0
87	II	3	4	4	4	2	4	3
87	IV	3a	0a	4a	3a	4a	4a	0a
89	II	4	4	4	3	4	4	3
90	II	4	4	4	4	4	4	3
93	II	4	3	4	3	2	4	0
94	II	4	3	4	4	4	4	4
95	II	1	0	4	0	1	4	0
96	I	4	4	4	2	4	4	2
96	II	4	0	3	1	0	4	3
98	II	4	4	4	4	4	4	4
99	II	3	4	4	3	1	4	0
100	II	4	4	4	4	4	4	3
105	II	3	4	4	4	4	4	3
111	I	3	0	4	3	2	4	0
115	I	4	3	4	4	4	4	3
119	I	4	4	4	4	4	4	4
120	I	4	3	4	3	4	4	4
122	I	4	4	4	3	4	4	4
124	I	4	4	4	4	4	4	4
125	I	4	4	4	4	4	4a	4
126	I	4	4	4	3	4	4	4
127	I	4	3	4	3	4	4	3
			3	4	4	4	4	2

6 lentelė (tesinys)

Junginio Nr.	Lentelės Nr.	PUCCINIA RECONDITA (WHEAT) (Kviečiai)	ERYSIPHE GRAMINIS (BARLEY) (Miežiai)	VENTURIA INAEQUALIS (APPLE) (Obels)	PYRICULARIA ORYZAE (RICE) (Ryžiai)	CERCOSPORA ARACHIDICOLA (PEANUT) (Žemės riešutai)	PLASMOPARA VITICOLA (VINE) (Vynmedžiai)	PHYTOPHTHORA INFESTANS (TOMATO) (Pomidorai)
128	I	4	4	4	3	4	4	4
129	I	4	2	4	4	4	4	4
130	I	4	3	4	-	4	4	4
131	I	4a	4a	4a	4a	-	4a	4a
131	III	0a	0a	4c	4a	4a	0c	-0c
132	I	4	4	4	4	4	4	3
133	I	4	2	4	4	4	4	2
134	I	4	4	4	4	4	4	4
135	I	4	4	4	4	4	4	3
138	I	4	4	4	3	4	4	4
141	I	4	4	4	3	4	4	0
143	I	4	4	4	3	4	3	3
144	I	4	4	4	3	4	4	0
145	I	4	3	4	3	4	4	1
150	I	3	3	4	4	4	4	0
157	I	3	3	4	4	3a	-	0
171	I	4	4	4	4	4	0	0
175	I	4	4	4	4	3a	-	0
177	I	4	4	4	4	3	4	0
179	I	1	1	0	3	-	4	0
204	I	4	4	4	0	2	4	0
205	I	4	4	4	4	4a	-	0
206	I	4	4	4	4	3a	-	1
208	I	4	4	4	4	4	4	3
212	I	4	4	4	-	3	4	3
214	I	4	4	4	4	4	4	0
216	I	4	4	4	-	4	4	4
217	I	4	3	4	-	4	4	4
		4	4	4	3	3a	-	0

168

6 lentelė (tęsinys)

Junginio Nr.	Lentelės Nr.	PUCCINIA RECONDITA (WHEAT) (Kviečiai)	ERYSIPIE GRAMINIS (BARLEY) (Miežiai)	VENTURIA INAEQUALIS (APPLE) (Obels)	PYRICULARIA ORYZAE (RICE) (Ryžiai)	CERCOSPORA ARACHIDICOLA (PEANUT) (Žemės riešutai)	PLASMOPIA VITICOLA (VINE) (Vynmedžiai)	PHYTOPHTHORA INFESTANS (TOMATO) (Pomidorai)
218	I	4	3	3	-	4	4	4
220	I	4	3	4	2	4	4	0
230	I	4	2	4	4	4	4	0
247	I	4	4	4	0	3	4	3
248	I	4	3	4	-	4	4	2
282	I	4	2	4	0	4	4	2
283	I	4	3	4	4	3	4	0
284	I	4	4	4	4	3	4	0
285	I	4	4	4	4	3	4	2
288	I	4	3	4	4	4	4	0
290	I	4	1	4	3	4	4	0
291	I	4	0	0	3	-	4	1
294	I	3	4	4	4	4	4	1
295	I	4	0	4	1	4	4	0
296	I	4	0	4	4	-	4	0
332	I	0a	0a	-	2a	-	4a	2a
333	I	4	1	2	3	-	4	0
360	I	4	4	4	4	4	4	1
365	I	4	3	4	3	-	4	3
366	I	0a	4a	3a	0a	-	4a	0a
367	I	3a	1a	0a	1a	4a	3a	3a
368	I	1	0	0	0	-	0	0
369	I	4	0	3	2	-	4	0
370	I	4	2	4	4	-	4	4
371	I	4	4	4	3	4	4	3
372	I	4	4	4	3	4	4	2
373	I	3	4	4	3	4	4	3
374	I	3	4	4	4	3	4	3
375	I	4	4	4	3	1	4	2

6 lentelė (tęsinys)

Junginio Nr.	Lentelės Nr.	PUCCINIA RECONDITA (WHEAT) (Kviečiai)	ERYSIPHE GRAMINIS (BARLEY) (Miežiai)	VENTURIA INAEQUALIS (APPLE) (Obelys)	PYRICULARIA ORYZAE (RICE) (Ryžiai)	CERCOSPORA ARACHIDICOLA (PEANUT) (Žemės riešutai)	PLASMOPIRA VITICOLA (VINE) (Vynmedžiai)	PHYTOPHTHORA INFESTANS (TOMATO) (Pomidorai)
376	I	4	3	0	4	1	4	3
377	I	4	4	0	4	3	4	3
378	I	3	4	0	4	4	4	4
380	I	3	4	0	4	4	4	3
381	I	3	4	0	4	4	4	4
382	I	4	4	4	3	4	4	2
383	I	4	3	4	4	4	4	0
384	I	4	4	4	4	4	0	0
385	I	4	4	4	4	4	4	0
386	I	4	4	4	3	4	4	2
387	I	4	1	0	4	4	4	3
388	I	3a	4a	4a	4a	4a	3a	0a
389	I	4	3	4	3	4	4	4
390	I	4	4	4	2	4	4	2
391	I	4	3	4	4	4	4	2
392	I	4	2	4	4	4	4	0
393	I	4	4	4	4	4	4	0
394	I	4	3	4	4	4	4	0
395	I	3a	1a	4b	4a	4a	4b	3b
396	I	4	3	4	3	4	4	3
397	I	4	4	4	4	4	4	0
398	I	3	0	3	2	2	4	2
399	I	4a	3a	4a	4a	4a	4a	2a
400	I	2	0	4	4	2	4	0
401	I	4a	3a	4a	4a	4a	-	0a
402	I	4	2	2	3	4	4	3
403	I	4	4	4	3	3	3	0
404	I	4	3	3	0	4	3	0

170

6 lentelė (tesinys)

Junginio Nr.	Lentelės Nr.	PUCCINIA RECONDITA (WHEAT) (Kviečiai)	ERYSIPE GRAMINIS (BARLEY) (Miežiai)	VENTURIA INAEQUALIS (APPLE) (Obelys)	PYRICULARIA ORYZAE (RICE) (Ryžiai)	CERCOSPORA ARACHIDICOLA (PEANUT) (Žemės riešutai)	PLASMOPARA VITICOLA (VINE) (Vynmedžiai)	PHYTOPHTHORA INFESTANS (TOMATO) (Pomidorai)
405	I	4	4	4	4	4a	-	0
406	I	3	0	4	0	0	4	0
407	I	4	4	4	0	-	4	0
408	I	3	0	4	1	4	4	0
409	I	4	0	3	0	4	4	0
410	I	4	2	4	3	4	4	1
410	III	4	2	3	3	-	4	1
411	I	4	3	4	4	4	4	3
411	III	4	2	3	0	0	3	0
412	I	4	3	4	4	4	4	2
413	I	4	2	4	4	4	4	0
414	I	4	1	4	3	4	4	0
423	I	4	4	4	4	4	4	3
424	I	4	3	4	4	4	3	4

171

6 lentels (tesinys)

<i>Junginio</i> No.	<i>Lentelės</i> No.	PUCCINIA RECONDITA (WHEAT)	ERYSIPHE GRAMINIS (BARLEY)	VENTURIA INAEQUALIS (APPLES)	PYRICULARIA ORYZAE (RICE)	CERCOSPORA ARACHIDICOLA (PEANUT)	PLASMOPIRA VITICOLA (VINES)	PHYTOPHTHORA INFESTANS (TOMATOES)
211	II	3	0	4	0	3	4	0
212	II	-	4d	4	3d	4d	4	1
216	II	4	4	4	-	4	4	4
219	II	0c	0c	3c	0c	0c	-	0c
277	II	4	4	4	4	4	4	0
278	II	4	3	4	2	4	4	3
279	II	4	4	4	4	4	4	0
281	II	3	3	4	2	4	4	0
282	II	-	0	3	4	3	4	1
284	II	4	4	4	2	-	4	3
286	II	3	4	4	2	3	4	2
300	II	3c	2c	-	2c	2c	0c	0c
303	II	3	4	4	0	3	4	2

6 lentelė (tęsinys)

Junginio Nr.	Lentelės Nr.	PUCCINIA RECONDITA (WHEAT) (Kviečiai)	ERYSIPHE GRAMINIS (BARLEY) (miežiai)	VENTURIA INAEQUALIS (APPLES) (Obels)	PYRICULARIA ORYZAE (RICE) (Ryžiai)	CERCOSPORA ARACHIDICOLA (PEANUT) (Žemės riešutai)	PLASMOPIRA VITICOLA (VINES) (Vynmedžiai)	PHYTOPHTHORA INFESTANS (TOMATOES) (Pomidorai)
7	II	4	4	4	-	4	4	4
14	II	4	3	3	-	4	4	4
21	II	4	3	3	-	4	4	4
57	II	-	4	4	4	4	4	4
59	II	4	4	4	-	4	4	3
65	II	4	2	3	-	3	4	4
68	I	3	4	2	-	3	4	4
110	II	4	4	4	-	4	4	3
111	II	4c	4c	4c	3c	4c	4c	1c
135	II	3	2	4	0	2	4	0
204	II	-	4	4	4	4	4	4
207	II	-	4	4	4	4	4	2
208	II	4c	3c	4c	0c	0c	4c	1c

173

6 lentelė (tęsinys)

Junginio Nr.	Lentelės Nr.	PUCCINIA RECONDITA (WHEAT) (Kviečiai)	ERYSIPHE GRAMINIS (BARLEY) (Miežiai)	VENTURIA INAEQUALIS (APPLES) (Obels)	PYRICULARIA ORYZAE (RICE) (Ryžiai)	CERCOSPORA ARACHIDICOLA (PEANUT) (Žemės riešutai)	PLASMOPARA VITICOLA (VINES) (Vynmedžiai)	PHYTOPHTHORA INFESTANS (TOMATOES) (Pomidorai)
306	II	-	4	4	3	2	4	2
309	II	-	4	4	4	4	4	4
311	II	4	4	4	4	4	4	3
316	II	4	4	4	0	-	4	0
318	II	4	3	4	2	-	4	4
321	II	3	0	4	-	3	4	4
322	II	4	1	2	-	3	4	0
323	II	3	0	4	-	2	4	4
324	II	4	4	4	-	4	4	4
325	II	3	0	4	-	1	4	3
327	II	4	4	4	-	4	4	3
328	II	4	3	4	-	3	4	3
329	II	0	0	0	-	3	4	0
330	II	3	3	1	-	3	4	0
331	II	0a	0a	0a	0a	1a	0a	0a

6 lentelė (tęsinys)

Junginio Nr.	Lentelės Nr.	PUCCINIA RECONDITA (WHEAT) (Kviečiai)	ERYSIPHE GRAMINIS (BARLEY) (Miežiai)	VENTURIA INAEQUALIS (APPLES) (Obels)	PYRICULARIA ORYZAE (RICE) (Ryžiai)	CERCOSPORA ARACHIDICOLA (PEANUT) (Žemės riešutai) (Vynmedžiai)	PLASMOPIRIS VITICOLA (VINES)	PHYTOPTHORA INFESTANS (TOMATOES) (Pomidorai)
332	II	4	4	4	-	3	4	0
333	II	4	4	4	-	4	4	4
334	II	4	0	3	-	4	4	4
335	II	4	3	4	-	4	4	4
336	II	4	4	4	-	4	4	4
337	II	3	0	3	-	2	4	0
338	II	4	4	4	-	4	4	3
339	II	4c	4c	-	3c	4c	4c	4c
340	II	3	0	4	-	2	4	4
341	II	4	3	2	-	3	4	0
342	II	4	3	4	-	4	4	2
343	II	0	4	4	0	2	4	0
344	II	4	2	4	-	2	4	4
345	II	4	3	4	-	3	4	4

6 lentelė (tesinys)

Junginio Nr.	Lentelės Nr.	PUCCINIA RECONDITA (WHEAT) (Kviečiai)	ERYSIPHE GRAMINIS (BARLEY) (Miežiai)	VENTURIA INAEQUALIS (APPLES) (Obels)	PYRICULARIA ORYZAE (RICE) (Ryžiai)	CERCOSPORA ARACHIDICOLA (PEANUT) (Žemės riešutai)	PLASNOPARA VITICOLA (VINES) (Vynmedžiai)	PHYTOPHTHORA INFESTANS (TOMATOES) (Pomidorai)
346	II	4	3	4	-	4	4	3
347	II	3	0	4	-	3	4	1
348	II	4	2	4	-	4	4	2
349	II	4	4	4	-	4	4	2
350	II	4	2	3	-	4	4	2
351	II	0e	0e	4e	0e	0e	-	0
352	II	-	0	0	4	2	4	2
353	II	-	0	0	1	4	4	2
354	II	-	2	0	4	3	4	4
355	II	-	2	4	3	2	4	0
357	II	4	4	4	3	-	4	1
358	II	4	4	4	4	4	4	4
359	II	4	4	4	4	4	4	3
360	II	4	4	4	4	3	4	4

175

6 lentelė (tęsinys)

Junginio Nr.	Lentelės Nr.	PUCCINIA RECONDITA (WHEAT) (Kviečiai)	ERYSIPHE GRAMINIS (BARLEY) (Miežiai)	VENTURIA INAEQUALIS (APPLES) (Obels)	PYRICULARIA ORYZAE (RICE) (Ryžiai)	CERCOSPORA ARACHIDICOLA (PEANUT) (Žemės riešutai)	PLASMOPARA VITICOLA (VINES) (Vynmedžiai)	PHYTOPHTHORA INFESTANS (TOMATOES) (Pomidorai)
361	II	4	3	4	0	-	4	4
362	II	4	4	4	3	-	4	0
363	II	4	4	4	0	4	4	0
364	II	4	4	4	0	4	4	0
365	II	-	4c	4c	2c	4c	4c	0c
366	II	-	4	4	3	4	4	1
367	II	-	4	4	3	4	4	3
368	II	4	3	3	0	4	2	0
369	II	-	4	4	4	4	4	4
370	II	-	4c	4c	2c	4c	4c	0c
372	II	-	0c	-	0c	2c	-	-
373	II	3	0	4	0	4	4	3
374	II	4	1	3	3	4	4	3

6 lentelė (tesinys)

Junginio, Nr.	lentele Nr.	PUCCINIA RECONDITA (WHEAT) (Kviečiai)	ERYSIPHE GRAMINIS (BARLEY) (Miežiai)	VENTURIA INAEQUALIS (APPLES) (Obelys)	PYRICULARIA ORYZAE (RICE) (Ryžiai)	CERCOSPORA ARACHIDICOLA (PEANUT) (Žemės riešutai)	PLASMOPIRA VITICOLA (VINES) (Vynmedžiai)	PHYTOPHTHORA INFESTANS (TOMATOES) (Pomidorai)
375	II	3c	1c	4c	3c	2c	4c	0c
376	II	4	4	4	4	4	4	4
377	II	4	4	4	3	2	4	2
378	II	0	1	0	0	1	-	0
379	II	4	2	0	0	2	4	3
380	II	3	1	0	2	0	4	0
382	II	0	2	4	4	0	4	4
383	II	3	0	4	0	-	4	4
384	II	3	0	4	0	-	4	4
385	II	4	4	4	1	-	4	3
386	II	4	2	4	0	3	4	0
387	II	4	4	4	4	4	-	4
388	II	4	4	4	4	4	4	4

178

6 lentelė (tęsinys)

Junginio Nr.	Lentelės Nr.	PUCCINIA RECONDITA (WHEAT) (Kviečiai)	ERYSIPHE GRAMINIS (BARLEY) (Miežiai)	VENTURIA INAEQUALIS (APPLES) (Obels)	PYRICULARIA ORYZAE (RICE) (Ryžiai)	CERCOSPORA ARACHIDICOLA (PEANUT) (Žemės riešutai)	PLASMOPARA VITICOLA (VINES) (Vynmedžiai)	PHYTOPHTHORA INFESTANS (TOMATOES) (Pomidorai)
389	II	4c	0c	4c	3c	2c	3c	0c
390	II	0	0	3	0	-	4	0
391	II	4	4	4	3	4	4	4
446	I	1	0	0	0	0	3	0
447	I	4	4	4	-	4	4	3
448	I	3	2	4	-	3	4	3
449	I	3	0	4	2	4	4	0
450	I	4	4	4	-	3	4	4
451	I	2	4	3	-	2	4	3
452	I	0	3	1	-	0	2	0
453	I	3	4	4	-	3	4	4
454	I	3	4	4	-	4	4	4

6 lentelė (tęsinys)

Junginio Nr.	Lentelės Nr.	PUCCINIA RECONDITA (WHEAT) (Kviečiai)	ERYSIPHE GRAMINIS (BARLEY) (Miežiai)	VENTURIA INAEQUALIS (APPLES) (Obelys)	PYRICULARIA ORYZAE (RICE) (Ryžiai)	CERCOSPORA ARACHIDICOLA (PEANUT) (Žemės riešutai)	PLASMOPARA VITICOLA (VINES) (Vynmedžiai)	PHYTOPHTHORA INFESTANS- (TOMATOES) Pomidorai)
455	I	4	3	4	-	4	4	3
456	I	4	1	4	-	4	4	2
457	I	4	2	4	-	4	4	3
458	I	-	0	0	0	4	4	3
459	I	4	1	4	-	4	4	2
460	I	4	4	4	0	4	4	0
461	I	2	0	3	-	3	4	1

a= 25 m.d. skystis lapų apipurškimui

b= 15 m.d. skystis lapų apipurškimui

c= 10 m.d. skystis lapų apipurškimui

d= 15 m.d. apdirbimas kartu apipurškiant lapus ir drėkinant šaknis

e= 40 m.d. skystis lapų apipurškimui

-- bandymas nepavyko arba nebuvo duomenų.

179

180

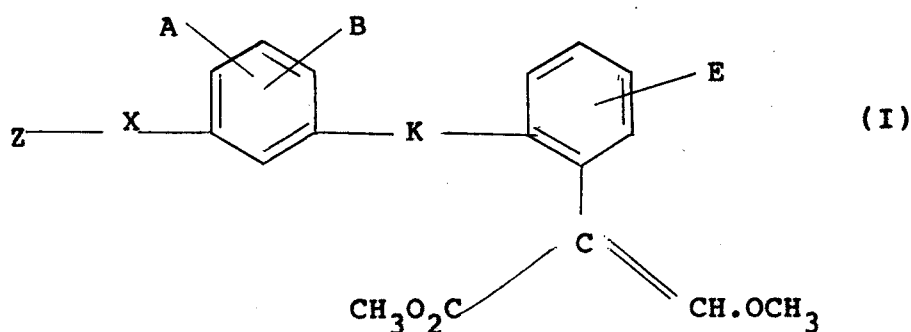
6 lentelė (tęsinys)

Junginio COMPOUND	Lentelės TABLE	PUCCINIA RECONDITA WHEAT (Kviečiai)	ERYSIPHE GRAMINIS HORDEI BARLEY (Miežiai)	VENTURIA INAEQUALIS APPLE 9obelys)	PYRICULARIA ORYZAE RICE (Ryžiai)	CERCOSPORA ARCHIDICOLA PEANUT (Žemės riešutai) (Vynmedžiai) (Pmīdorai)	PLASMOPOARA VITICOLA VINE	PHYTOPHTHORA INFESTANS TOMATO
104	II	4	2	4	2	4	4	4
23	I	4f	-	4f	2f	3f	4f	4f

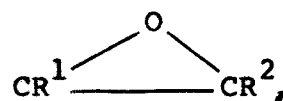
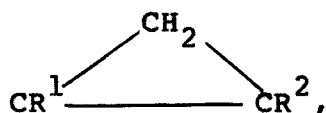
f = 5 m.d. lapų apipurškimas

IŠRADIMO APIBRĖŽTIS

1. Fungicidiniai junginiai, kurių formulė yra (I)



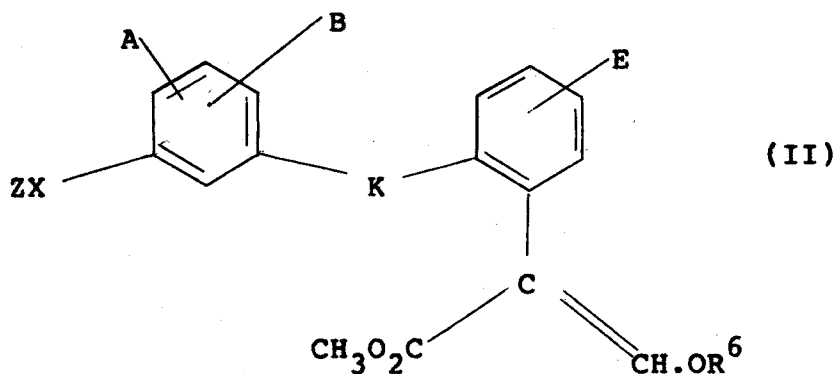
ir jų stereoizomerai, kur K yra deguonis arba sierra; Z yra galimai pakeistas arilas arba galimai pakeistas heteroarilas; X yra O, S(O)_n, NR⁴, CR¹R², CHR⁵, CO, CR¹(OR²), C=CR¹R², CHR¹CHR², CR¹=CR², CHR¹CR²=CH, C≡C, OCHR¹, CHR¹O, OCHR¹O, S(O)_nCHR¹, S(O)_nCHR¹O, CHR¹S(O)_n, CHR¹OSO₂, NR⁴CHR¹, CHR¹NR⁴, CO₂, O₂C, SO₂O, OSO₂, CO.CO, COCHR¹, COCHR¹O, CHR¹CO, CHOH.CHR¹, CHR¹.CHOH,



CONR⁴, OCONR⁴, NR⁴CO, CSNR⁴, OCS.NR⁴, SCO.NR⁴, NR⁴CO₂, NR⁴CS, NR⁴CSO, NR⁴COS, NR⁴CONR⁴, S(O)_nNR⁴, NR⁴S(O)_n, CS₂, S₂C, CO.S, SCO, N=N, N=CR¹, CR¹=N, CHR¹CHR²CH(OH), CHR¹OCO, CHR¹SCO, CHR¹NR⁴CO, CHR¹NR⁴COR⁴, CHR¹CHR²CO, O.N=CR¹, CHR¹O.N=CR², COOCR¹R², CHR¹CHR²CHR³, OCHR¹CHR², (CH₂)_mO, CHR¹OCHR², CHR¹CHR²O, OCHR¹CHR²O, S(O)_nCHR¹CHR², CHR¹S(O)_nCHR², CHR¹CHR²S(O)_n, CR¹=NNR⁴, NR⁴N=CR¹, CHR¹CONR², CHR¹OCO.NR², CH=CHCH₂O, COCHR¹CHR²O, arba (R⁵)₂P⁺CHR²Q⁻; A, B ir E, kurie gali būti vienodi arba skirtingi, yra H, halo, hidroksi, C₁₋₄ alkilas, C₁₋₄ alkoksi, C₁₋₄ haloalkoksilas, C₁₋₄ haloalkoksi,

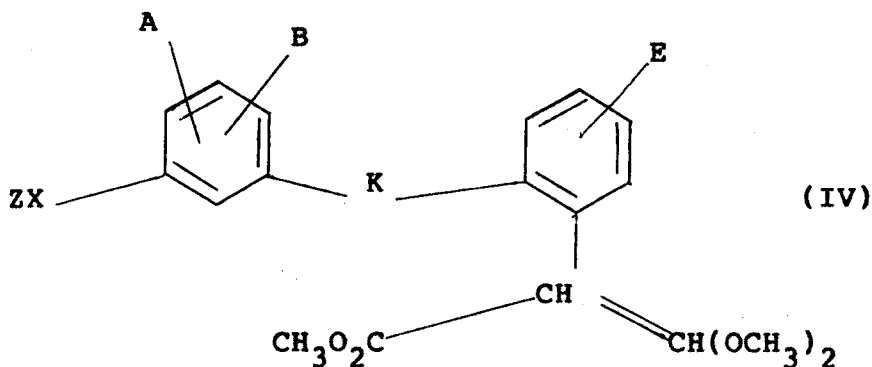
C_{1-4} alkilkarbonilas, C_{1-4} alkoksikarbonilas, fenoksi, nitro arba ciano; R^1 , R^2 ir R^3 , kurie gali būti vienodi arba skirtingi, yra H, C_{1-4} alkilas arba fenilas; R^4 yra H, C_{1-4} alkilas arba COR^1 ; R^5 yra galimai pakeistas fenilas; Q^- yra halogenido anijonas; n yra 0, 1 arba 2 ir m yra 3, 4 arba 5; išskyrus tai, kad kai Z yra nepakeistas fenilas ir X bei K yra deguonis, A, B ir E visi kartu nėra vandenilis.

2. Junginiai pagal 1 punktą, b e s i s k i r i a n t y s tuo, kad Z yra galimai pakeistas heteroarilas ir X yra O.
3. Junginiai pagal 1 punktą, b e s i s k i r i a n t y s tuo, kad X yra ne O.
4. Junginio pagal 1 punktą gavimo būdas, kuris susideda iš
(a) (II) formulės junginio



apdirbimo formulės CH_3L junginiu; arba

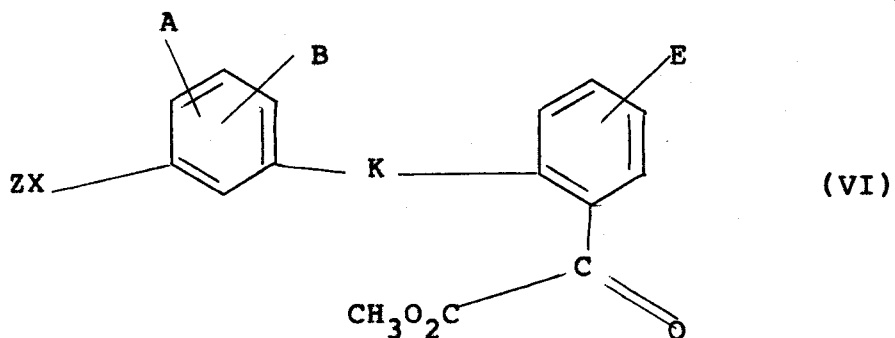
- (b) metanolio elementų iš (IV) formulės junginio:



pašalinimo rūgštinėse arba bazinėse sąlygose;

arba

(c) ketoesterio, kurio formulė yra (VI):



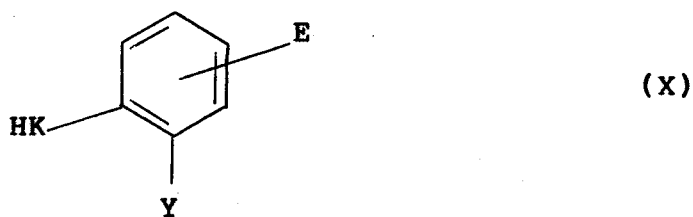
apdirbimo metoksimetileninimo reagentu;

arba

(d) (IX) formulės junginio:



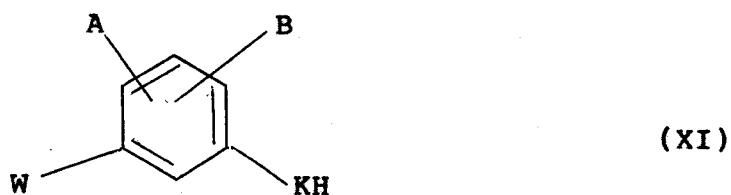
reakcijos su (X) formulės junginiu:



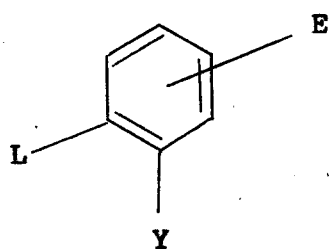
dalyvaujant bazei;

arba

(e) (XI) formulės junginio:



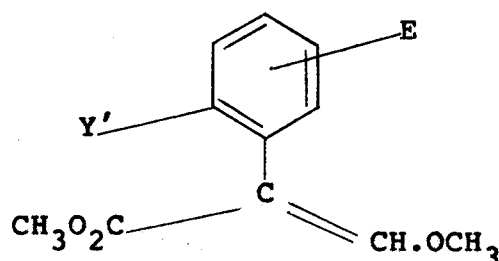
reakcijos su (XII) formulės junginiu:



(XII)

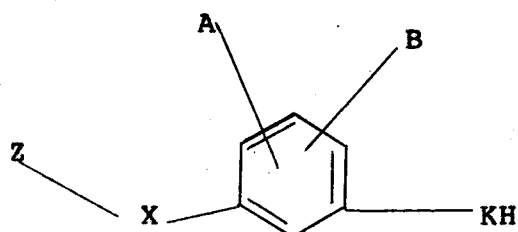
dalyvaujant bazei; kur A,B,E,K,Z ir X reikšmės nusakytos 1 punkte, R^6 yra metalo atomas, L yra paliekanti grupė, W yra ZX arba grupė, kuri yra paskui standartiniais būdais paverčiama ZX, ir Y yra grupė $CH_3O \cdot CH=C-(CO_2CH_3)$ arba grupė, kuri paskui paverčiama tokia grupe standartiniais būdais.

5. Junginio pagal 1 punktą gavimo būdas, kuris susideda iš (XIIa) bendros formulės junginio:



(XIIa)

kur Y' yra halogenas ir E yra kaip nusakytas 1 punkte, reakcijos su fenoliu arba tiofenoliu, kurio bendra formulė yra (XIa):

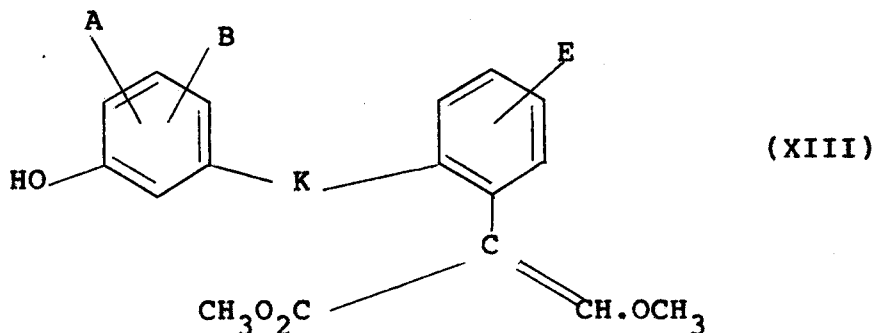


(XIa)

kur A,B,K,X ir Z yra nusakyti 1 punkte, dalyvaujant bazei, arba su fenolio ar (XIa) formulės tiofenolio druska; geriau dalyvaujant katalizatoriui, kuris apima tinkamą pereinamąjį metalą, pereinamojo metalo druską ar junginį, arba jų mišinį.

6. Junginio pagal 1 punktą gavimo būdas, kuris susideda iš:

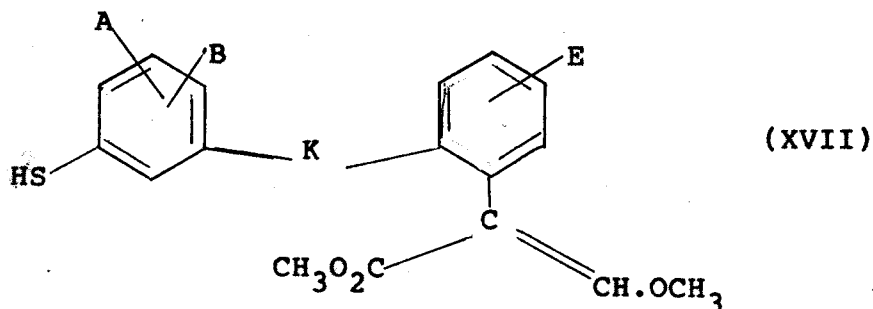
(a) (XIII) formulės junginio:



reakcijos, dalyvaujant bazei,

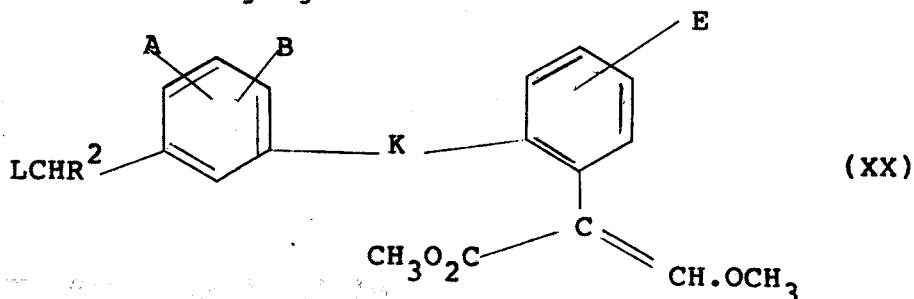
- (i) kai X yra O, su junginiu ZL; arba
- (ii) kai X yra SO₂O, su junginiu ZSO₂Q; arba
- (iii) kai X yra CHR¹O, su junginiu ZCHR¹L; arba

(b) (XVII) formulės junginio:



- (i) kai X yra S, su junginiu ZL; arba
- (ii) kai X yra CHR¹O, su junginiu ZCHR¹Z; arba

(c) (XX) formulės junginio:

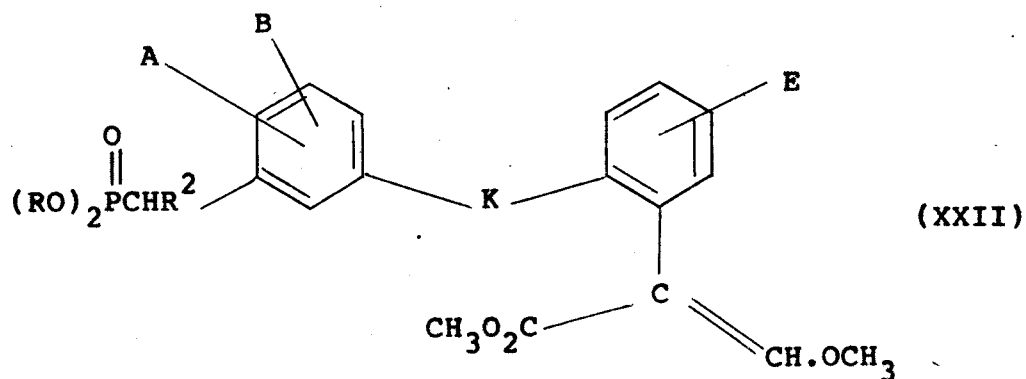


reakcijos, dalyvaujant bazei,

- (i) kai X yra OCHR², su junginiu ZOH; arba
- (ii) kai X yra (R⁵)₂P⁺CHR²Q⁻ ir L yra halogenas, su formulės Z(R⁵)₂P fosfinu; arba

186

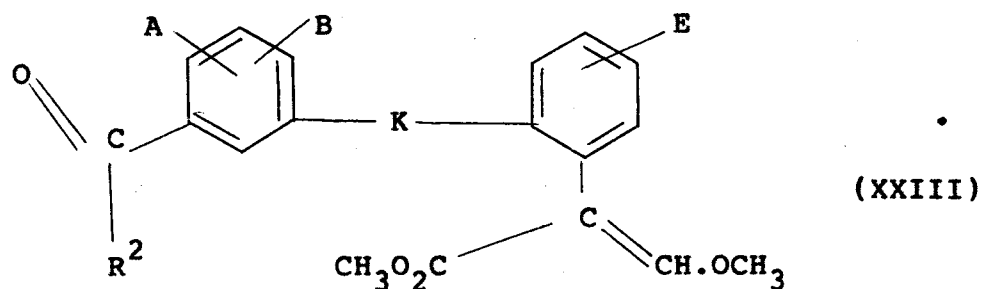
(d) kai X yra $CR^1=CR^2$, (XXII) formulės junginio:



reakcijos, dalyvaujant bazei, su aldehidu arba ketonu, kurio formulė yra $ZR^1C=O$; arba

(e) kai X yra $CR^1=CR^2$,

(i) (XXIII) formulės junginio



apdirbimo su fosfonato anijonu, kurio formulė $ZR^1C^+P(=O)(OR)_2M^+$ arba atitinkamu fosforanu; arba

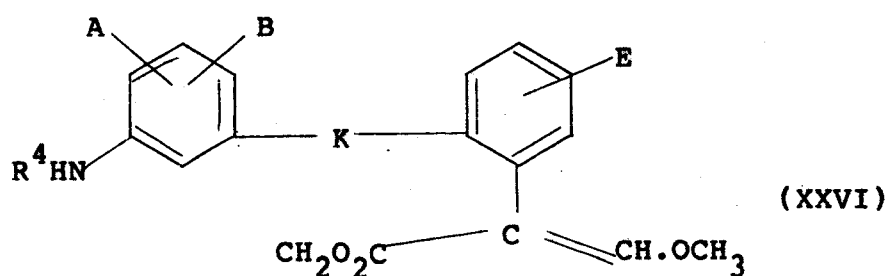
$ZR^1C^-P(=O)(OR)_2M^+$ arba atitinkamu fosforanu; arba

(ii) (I) formulės junginio, kuriam X yra $(R^5)_2P^+CHR^2Q^-$,

reakcijos iš eilės su baze ir formulės $ZCOR^1$ karbo -
nilo junginiu; arba

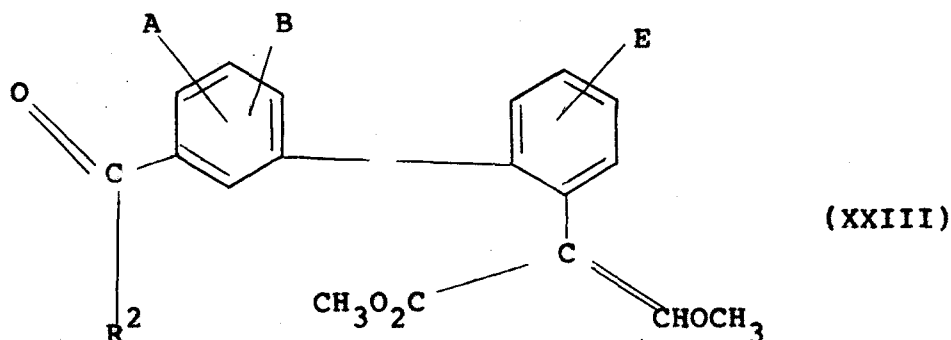
(f) kai X yra CHR^1CHR^2 , (e) stadijos produkto redukavimo; arba

(g) kai X yra $CONR^4$, (XXVI) formulės junginio



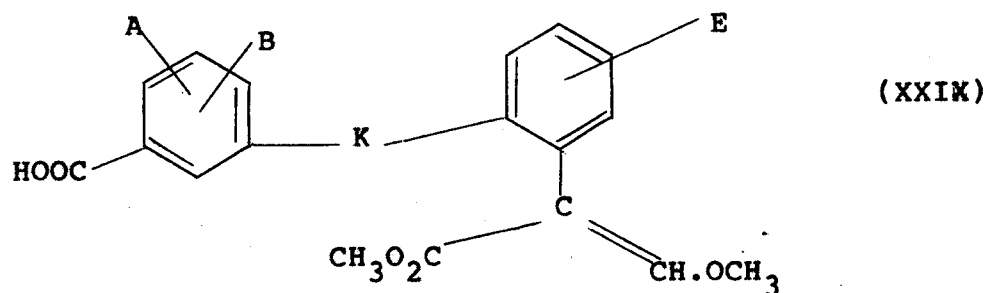
reakcijos

- (i) dalyvaujant bazei, su halogenanhidridu, kurio formulė $ZCOQ$; arba
- (ii) dalyvaujant dehidratacijos agentui, su formulės ZCO_2H rūgštimi; arba
- (h) aldehido arba ketono, kurio formulė yra (XXIII):



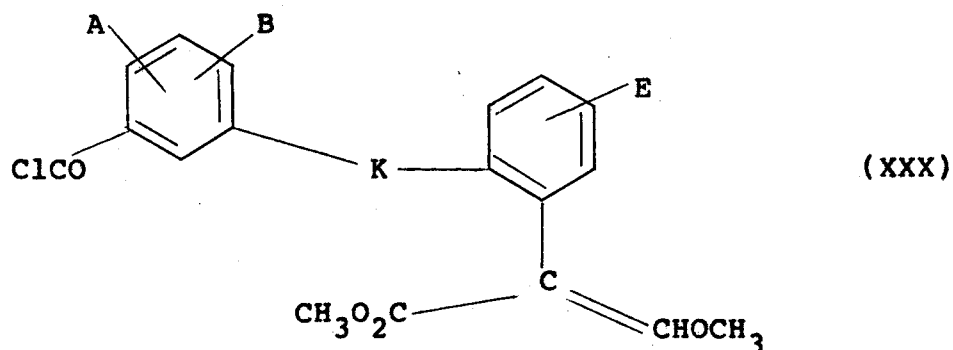
reakcijos,

- (i) kur X yra $ON=CR^2$, $CHR^1ON=CR^2$ arba $NR^1N=CR^2$, atitinkamai su formulės $ZONH_2$ arba $ZCHR^1ONH_2$ oksiaminu arba su formulės ZNR^1NH_2 hidrazinu; arba
- (ii) kur X yra $CR^2(OH)$ arba $CR^1R^2CR^2(OH)$, atitinkamia su Grinjaro reagentu, kurio formulė yra $ZMgHal$ arba ZCR^1R^2MgHal ; arba
- (iii) kur X yra NR^1CHR^2 arba $CR^1R^2NR^1CHR^2$, atitinkamai su formulės $ZNHR^1$ arba $ZCR^1R^2NHR^1$ aminu, dalyvaujant reduktoriui; arba
- (iv) kur X yra $N=CR^2$ arba $CR^1R^2N=CR^2$, atitinkamai su formulės ZNH_2 ar $ZCR^1R^2NH_2$ aminu, dalyvaujant reduktoriui; arba
- (k) kur X yra O_2C , CHR^1OCO , SCO , CHR^1SCO , NR^4CO arba CHR^1NR^4CO ,
 - (i) (XXIX) formulės karboninės rūgšties



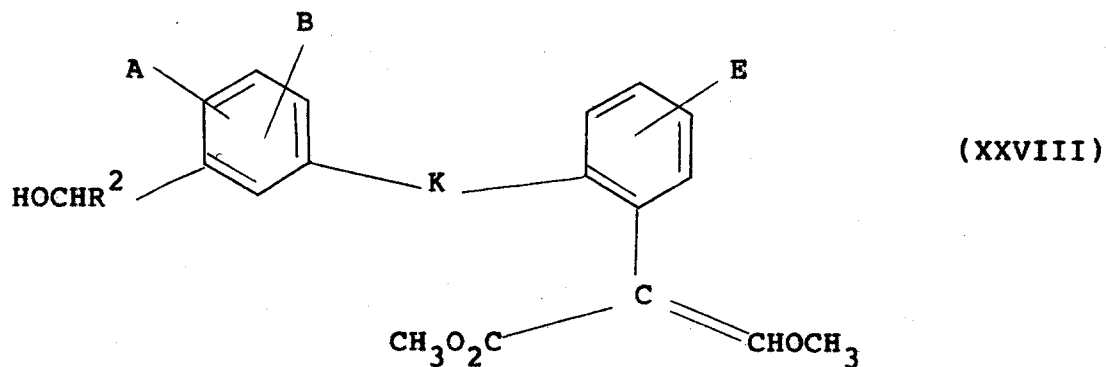
apdirbimo su tinkamu alkoholiu, tiolu arba amidu, dalyvaujant standartiniam junginio reagentui, tokiam kaip cikloheksilkarbodiimidazolas arba karbonildiimidazolas tinkamame tirpiklyje; arba

(ii) (XXX) formulės chloranhidrido



reakcijoje atitinkamai su junginiu, kurio formulė yra ZOH, ZCHR¹OH, ZSH, ZCHR¹SH, ZNR⁴H arba ZCHR¹NR⁴H tinkamame tirpiklyje, dalyvaujant bazei; arba

(1) kur X yra OCHR², (XXVIII) formulės junginio



reakcijos su formulės ZL junginiu; kur A, B, E, K, R¹, R², R⁴,

189

R^5 ir Z yra tokie, kaip apibrėžta 1 punkte, L yra paliekanti grupė, Q ir Hal yra halogenas, R yra alkilo grupė ir M^+ yra metalo jonas.

7. Tarpiniai junginiai, kurių formulės yra (II)-(VII), (XIII)-(XXX) ir (XXXIII)-(XXXVIII), kaip čia apibrėžti.
8. Fungicidinė kompozicija, susidedanti iš aktyvaus ingrediento ir fungicidiškai tinkamo nešėjo ar skiediklio, b e s i s k i r i a n t i tuo, kad aktyvus ingredientas yra junginys pagal 1 punktą.
9. Kovos su grybeliais būdas, kuris susideda iš junginio pagal 1 punktą arba kompozicijos pagal 8 punktą panaudojimo augalams, augalų sėkloms arba augalų ar sėklų buvimo vietoms.