

(19)



(10) **LT IP867 A**

(12) **PARAIŠKOS APRAŠYMAS**

- (21) Paraiškos numeris: **IP867** (51) Int. Cl. (2006): **A01N 31/00**
A01N 33/00
(22) Paraiškos padavimo data: **1993 08 17** **A01N 37/10**
A01N 43/34
(41) Paraiškos paskelbimo data: **1995 03 27** **A01N 43/48**
A01N 43/64
(62) Paraiškos, iš kurios dokumentas išskirtas, numeris: — **C07C 67/00**
C07C 69/00
(86) Tarptautinės paraiškos numeris: — **C07D 213/00**
C07D 215/00
(86) Tarptautinės paraiškos padavimo data: — **C07D 239/00**
C07D 241/00
(85) Nacionalinio PCT lygio procedūros pradžios data: — **C07D 249/00**
(30) Prioritetas: **8721706, 1987 09 15, GB**
8801485, 1988 01 22, GB
8806317, 1988 03 17, GB
8814734, 1988 06 21, GB
4743256, 1990 03 07, 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 BEAUTEMENT, 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:
Propeno rūgšties darinių gavimo būdas

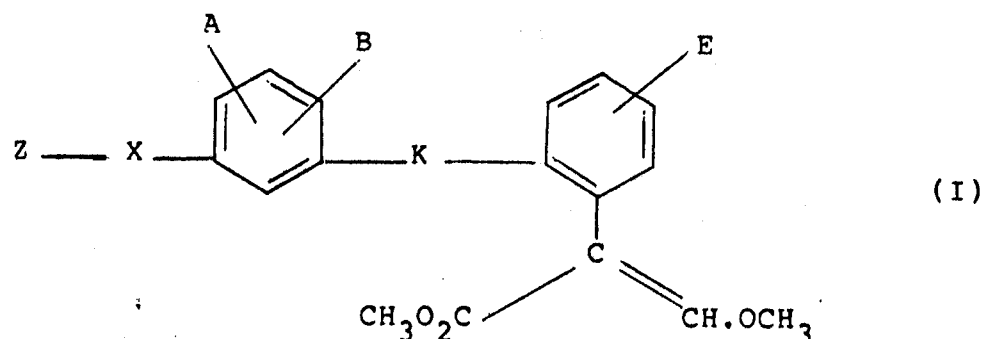
- (57) Referatas:
—

PROPENO RŪGŠTIES DARINIŲ GAVIMO BŪDAS

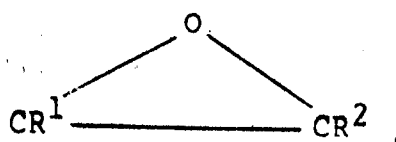
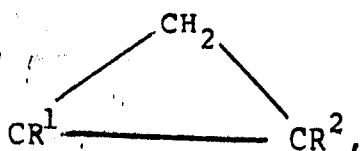
Šis išradimas skirtas propeno rūgšties darinių, kaip fungicidų prieš grybelius, ypač prieš grybelines augalų ligas, gavimo būdui.

Europos patento paraiškoje Nr. 0178826 aprašomi fungicidiniai propeno rūgšties dariniai ir pateikiamas (E)-metil-2-[2-(fenoksifenoksi)fenil]-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, 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, 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, CO.OCR¹R², 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 gali būti vienodi arba skirtingi, yra H, hidroksilas, halogenas, C₁₋₄ alkilas, C₁₋₄alkoksi, C₁₋₄ halogenalkilas, C₁₋₄ halogenalkoksi, C₁₋₄alkilkarbonilas, C₁₋₄ alkoksikarbonilas, fenoksi, nitro arba ciano; R¹, R² ir R³, kurie gali būti tokie patys arba skirtingi, yra H, C₁₋₄alkilas arba fenilas; R⁴ yra H, C₁₋₄alkilas arba COR¹; R⁵ 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 nepakeistas 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, SO₂, NH, NCH₃, NCOCH₃, CH(C₆H₅), CH(OH), CH=CH, OCH₂, CH₂O, CH(CH₃)O, S(O)CH₂, S(O)₂CH₂, S(O)₂CH₂, SO₂O, CO.CH₂O arba CO₂CH₂ ir ypatingai, O, CH₂O, OCH₂, SO₂O arba CH(OH).

Išradimo junginiuose yra bent viena dviguba anglis-anglis jungtis, ir kartais jie gaunami, kaip geometrinių izomerų mišiniai. Tačiau šiuos mišinius galima atskirti į atskirus izomerus, ir šis išradimas apima tokius izomerus, 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 $-\text{CO}_2\text{CH}_3$ ir $-\text{OCH}_3$ 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 valentin-gumas, galimai pakeistas arilo arba heteroarilo grupės gali tu-rėti iki 5 pakaitų. Terminas "arilas" apima fenilą ir ypač naf-tilą. Terminas "heteroarilas" apima 5- ir 6-nares heterocikli - nes grupes, turinčias vieną arba keletą iš tokių heteroatomų : O, S ir N (geriau S arba N), kondensuotas su benzoinėmis ir he-teroaromatinėmis ciklinėmis sistemomis, o taip pat kiekvienu atveju atitinkamus N-oksidas. Z atitinkančių heteroarilo grupių pavyzdžiai apima piridinilą, pirimidinilą, pirazinilą, piridazi-nilą, 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, tiazoli-lą, oksadiazolilą, chinolinilą, izochinolinilą, chinoksalinilą, benzotienilą, benzoksazolilą ir benztiazolilą ir kur galima, ati-tinkamus N-oksidas. Pakaitai, kurie gali būti galimai pakeistose arilo ir heteroarilo dalyse apima vieną ar daugiau iš tokių gru-pių: 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.

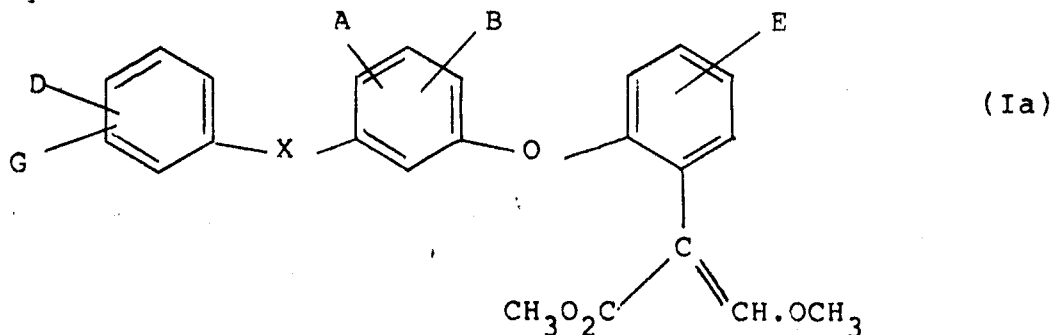
Pakaitai, kurie gali būti bet kurių iš aukščiau užrašytų arilo arba heteroarilo žieduose arba R^5 fenilo žiede apima vieną arba kelias grupes iš tokių: halogeno, oks, merkapt, C_{1-4} alki-

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, 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, 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 grupes 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.

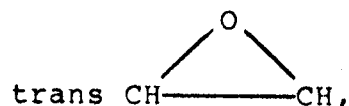
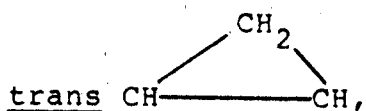
Geriau kai A ir B pakaitai yra 4- ir 5-oje fenilo žiedo pozicijose, o pakaitas E yra maža grupė arba vienintelis atomas, toks kaip vandenilis arba halogenas. Paprastai, E ir vienas arba abu iš A ir B yra vandenilis.

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)- $CH=CH$,

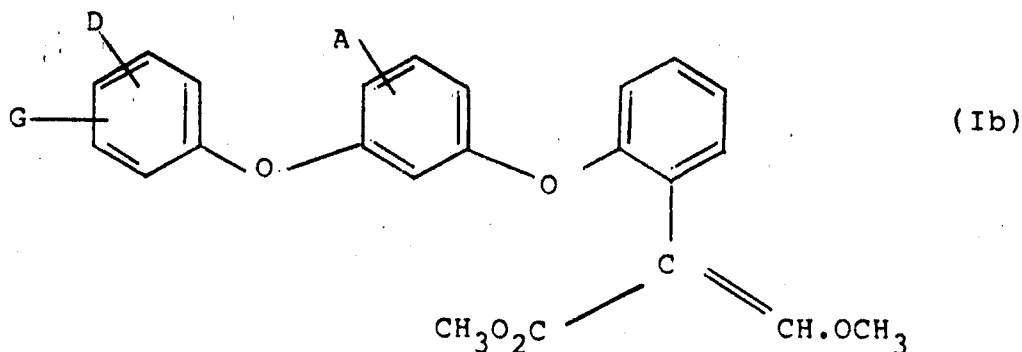
(E)-C(CH₃)=C(CH₃), C≡C, OCH₂, OCH(CH₃), (CH₂)_pO, kur p yra nuo 1 iki 5, CH(CH₃)O, SCH₂, SCH(CH₃), S(O)CH₂, S(O)CH(CH₃), S(O)₂CH₂, S(O)₂CH(CH₃), CH₂S, CH(CH₃)S, CH₂S(O), CH(CH₃)S(O), CH₂S(O)₂, CH(CH₃)S(O)₂, NHCH₂, N(CH₃)CH₂, N(COCH₃)CH₂, NHCH(CH₃), N(COCH₃)CH(CH₃), CH₂NH, CH₂N(CH₃), CH₂N(COCH₃), CH(CH₃)NH, 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, $CH(CH_3)O$, SCH_2 , SCH_2O , $S(O)CH_2$, $S(O)CH_2O$, $S(O)_2CH_2$, CONH, NH, NCH_3 , CH_2NH , $N(CH_3)CH_2$, NHCO, $CH_2OCO \cdot NH$, $NCOCH_3$, $NHSO_2$, (E)-N=N, (Z)-N=N, (E)-N=CH, (E)-N(CH₃)N=CH, (E)-CH₂ON=N, (Z)-CH₂ON=CH, $CH(C_6H_5)$, $COCH_2O$, $COCH(CH_3)O$, CH_2OCO , CH_2NHCO , CH_2SCO arba $(C_6H_5)_2P^+CH_2Br^-$; A yra H,oksi, halogenas, C_{1-4} alkilas, C_{1-4} alkoksi, acetilas arba fenoksi; B ir E abu yra H; D yra H,oksi, 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):

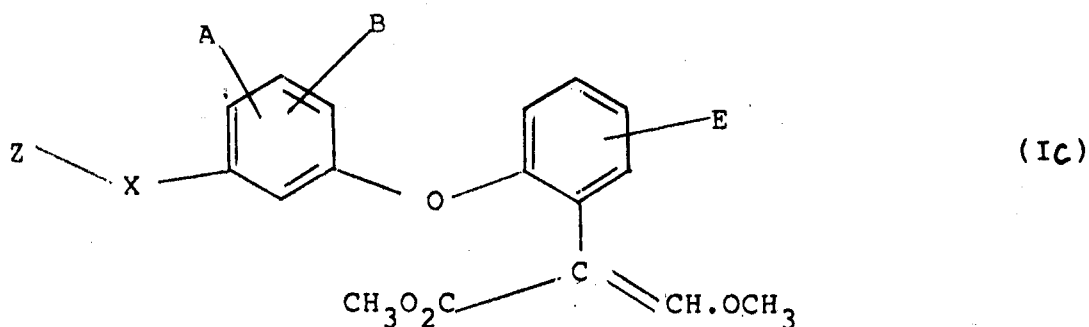


kur D ir G yra nepriklausomai halogenas, C_{1-4} alkilas, C_{1-4} alkoksi, trifluormetilas, nitro, ciano, fenilas, fenoksi, $NHCOR^6$,

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.

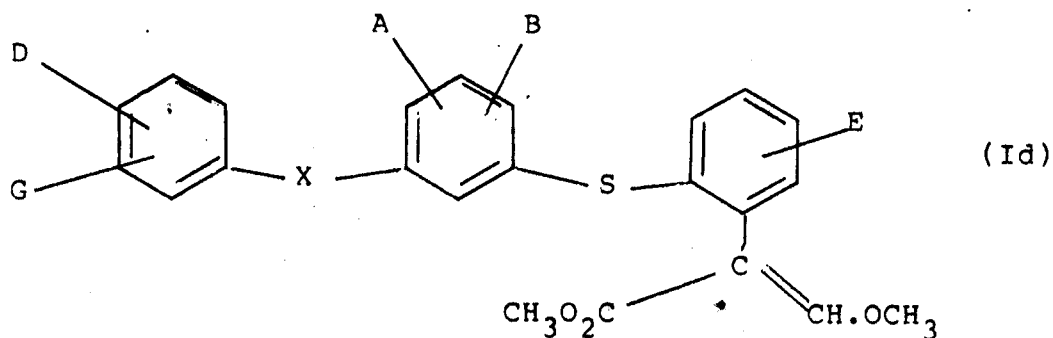
Pagal dar vieną iš išradimo aspektų, pateikiami (Ic) formulės junginiai:



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.

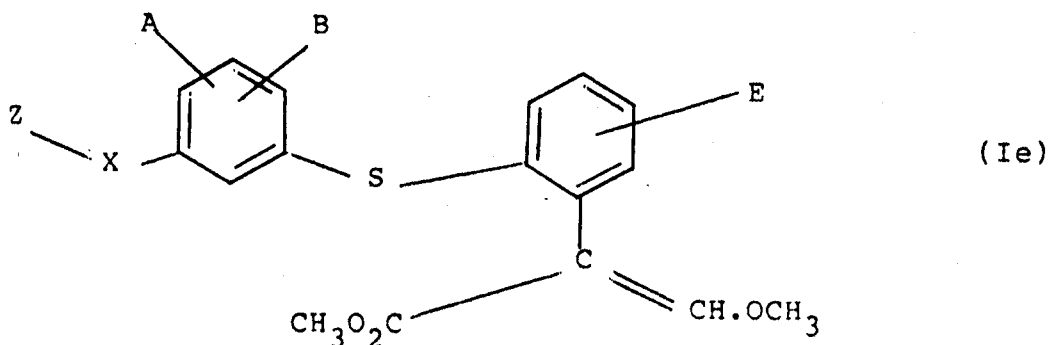
Pagal dar vieną iš aspektų pateikiami junginiai, kurių formulė (Id):



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):

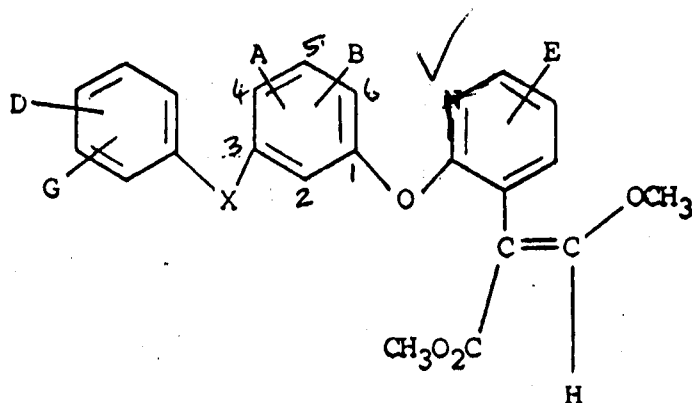


15

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	NOOCH 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 (tęsinys)

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		

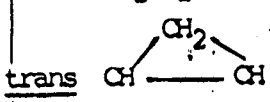
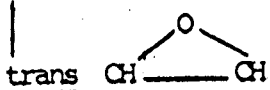
1 lentelė (tęsinys)

Junginio No.	X	D	G	A	B	E	Olefininis +	Lyd. temp.(°C)
48	$\text{CH}(\text{CH}_3)\text{N}(\text{OOCH}_3)$	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	$\text{CO}\cdot\text{CO}$	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	$\text{CSN}(\text{CH}_3)$	H	H	H	H	H		
73	CSNH	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.	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)-N=NN:CH	H	H	H	H	H		
110	(E)-N=NN: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	trans 	H	H	H	H	H		
118	trans 	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 (tesinys)

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	7,51	Derva
167	O	3-CH ₃ O	4-Cl	H	H	H		
168	O	⊕	⊕	H	H	H		
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 + temp. (°C)	Lyd.
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 Cl 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	+ Olefinnis	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 (tesinys)

Junginio No.	X	D	G	A	B	E	Olefini nis ⁺	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
333	SO ₂ O	⊕	⊕	H	H	H	7,35	98-100
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	SOCH ₂	2-Cl	H	H	H	H	7,47	74-78
400	SOCH 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	OO.NH	2-Br	H	H	H	H	7,49	Putas
421	OO.NH	3-Br	H	H	H	H	7,47	Putas
422	OO.NH	3- CH_3O	H	H	H	H	7,48	Putas
423	$\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{O}$	H	H	H	H	H	7,45	Putas
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-($\text{CH}_3\text{O}_2\text{C}-$ O=CH.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		

33

1 lentelė (tęsinys)

Junginio No.	X	D	G	A	B	E	Olefininis temp. (°C)	Lyd.
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)

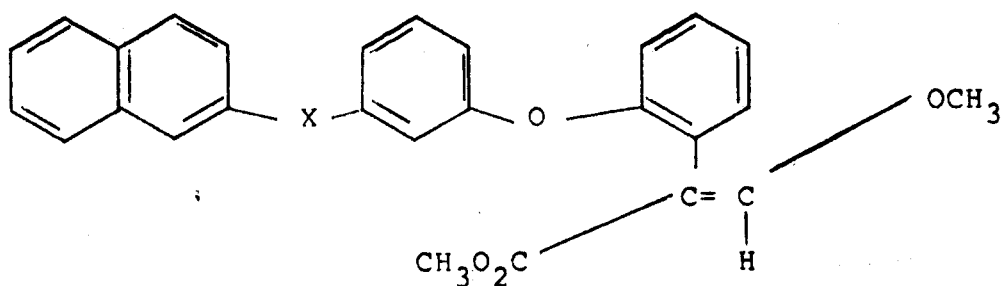
Junginio Nr.	X	D	G	A	B	E	Olefininis	Lyd. temp. (°C)
433	CH(OH)	4-Cl	H	H	H	H	7.40	Derva 64-65
446	SO ₂ NH	3-NO ₂	H	H	H	H	7.46	55-57
447	NH	2-Cl	4-Cl	H	H	H	7.47	Derva
448	NH	4-CH ₃ O	H	H	H	H	7.45	Derva
449	SO ₂ NH	4-CH ₃	H	H	H	H	7.45	Derva
450	NHCO	2-CH ₃ O	H	H	H	H	7.48	110-114
451	NHCO	3-Cl	H	H	H	H	7.40	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(OH)	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:

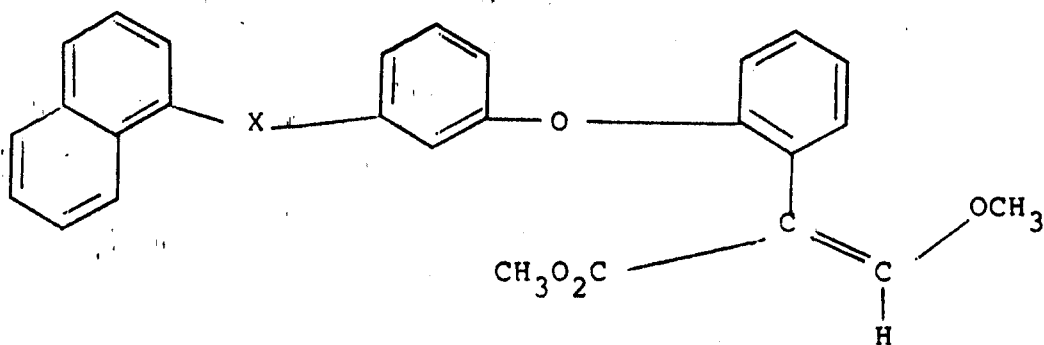
+ cheminis singleto poslinkis nuo beta-metoksiipropenoato grupės olefininio protono (m. d. nuo tetrametilsilano).

Tirpiklis : CDCl_3 , jei nėra kitaip nurodyta.

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

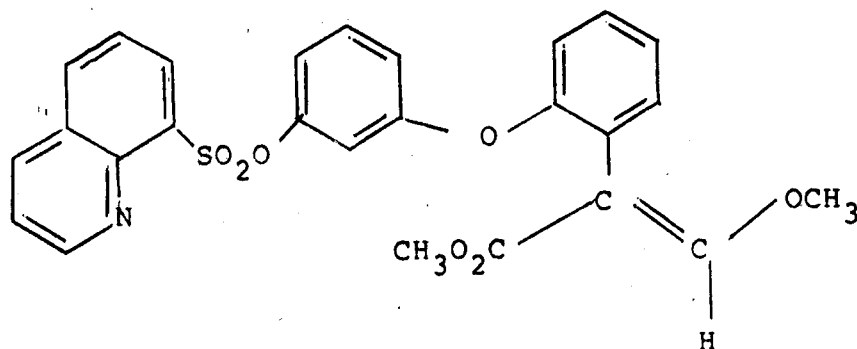


<u>X</u>	<u>Junginio Nr.</u>
O	168
CH_2	247
CO_2O	332



<u>X</u>	<u>Junginio Nr.</u>
O	169
CH_2O	248
SO_2O	333

Junginio 424 formulė:

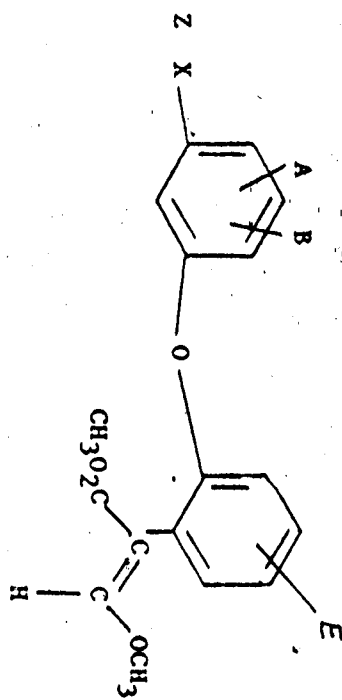


*, ⊕ kiekvienu atveju rodo, kad junginio struktūra gali būti priešinga. Pavyzdžiui, junginį 180 charakterizuojantys duomenys iš esmės gali apibūdinti junginį 367 ir atvirkščiai. Tas pats tinka junginiams 365 ir 366.

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

Ph yra fenilas.

2 lentele



-32-

Junginio No.	Z	X	A	B	E	Olefininis ⁺	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 lentele (tęsinys)

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

2 pentete (Hsingyi)

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

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		
52	Thien-2-ilas	SO ₂ O	H	H	H	7,40 7,49	Derva 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		
57	3-Cl-Piridin-2-ilas	O	H	H	H	7,48	84-87
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	SO	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	SO	H	H	H		

2 lentele (tęsinys)

Junginio No.	Z	X	A	B	E	Olefinai nis ⁺	Lydimosi temp ^o 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	Pirimidin-2-ilas	0	H	H	5-Cl		
78	Pirimidin-2-ilas	0	H	H	6-F		

2 lentelė (tęsinys)

Junginio No.	Z	X	A	B	E	Olefininis [†]	Lydimosi temp. (°C)
79	Benzotriazol-2-ilas	0	4-CF ₃ O	H	5-F		
80	Benzotriazol-2-ilas	0	5-NO ₂	H	H		
81	1,2,4-Triazol-1-ilas	CH ₂	H	H	H	7,48	Derva
82	1,2,3-Triazol-1-ilas	CH ₂	H	H	H		
83	Benzthiazol-2-ilas	0	H	H	H	7,38	Derva
84	3-Chloro-4-nitro-1,2,4-triazol-5-ilas	0	H	H	H	7,50	117-119
85	Pyrimidin-2-ilas	OCH ₂	H	H	H	7,49	Alyva
86	3,5-di-Cl-1,3,5-triazin-2-ilas	0	H	H	H	7,52	Derva
87	Pyrimidin-5-ilas	0	H	H	H	7,47	Alyva
88	3-Cl,5-(CH ₃ O)-1,3,5-triazin-2-ilas	0	H	H	H	7,50	Derva
89	6-Cl-Pyrimidin-4-ilas	0	H	H	H	7,49	Alyva
90	5-Br-Pyrimidin-2-ilas	0	H	H	H	7,48	Derva
91	5-Cl-Pyrimidin-2-ilas	0	H	H	H	7,48	Alyva
92	Pyrimidin-4-ilas	0	H	H	H	7,48	Alyva
93	2,6-Di-CH ₃ O-ilas Pyrimidin-4-ilas	0	H	H	H	7,48	Alyva

2 lentelė (tęsinys)

Junginio No.	Z	X	A	B	E	Olefininis +	Lydinio 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	Primidin-2-ilas	CH ₂ O	H	H	H		

2 lentele (tęsinys)

Junginio No.	Z	X	A	B	E	Olefininis ⁺	Lydimosi temp. (°C)
109	Pirimidin-2-ilas	SO ₂ O	H	H	H	7,50	Derva
110	Pirimidin-2-ilas	NH	H	H	H	7,50	Derva
111	Pirimidin-2-ilas	N(CH ₃)	H	H	H	7,47	Derva
112	Pirimidin-2-ilas	CH ₂	H	H	H		
113	Pirimidin-2-ilas	CH(OH)	H	H	H		
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 lentele (tēsinys)

Junginio No.	Z	X	A	B	E	Olefinis + temperatūra (°C)
127	Pirimidīn-5-īlas	S	H	H	H	Derva
128	Pirimidīn-5-īlas	CH ₂	H	H	H	
129	Frimidīn-5-īlas	CH(OH)	H	H	H	
130	6-Chloropiridazīn-3-īlas	O	H	H	H	
131	6-Chloropiridazīn-3-īlas	CH ₂ O	H	H	H	
132	6-Chloropiridazīn-3-īlas	NH	H	H	H	Derva
133	6-Chloropiridazīn-3-īlas	N(CH ₃)	H	H	H	
134	6-Chloropiridazīn-3-īlas	CH(OH)	H	H	H	
135	Piridazīn-4-īlas	O	H	H	H	
136	Piridazīn-4-īlas	OCH ₂	H	H	H	
137	Piridazīn-4-īlas	NH	H	H	H	Derva
138	Piridazīn-4-īlas	SO ₂ O	H	H	H	
139	1,3,5-Triazīn-2-īlas	NH	H	H	H	

2 lentelė (tesinys)

Jungrinio 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	Pyrimidin-2-ilas	O	H	H	H		
149	Pyrimidin-4-ilas 1-N-oksidas	O	H	H	H		
150	Pyrimidin-4-ilas 3-N-oksidas	O	H	H	H		
151	Pyridin-2-ilas N-oksidas	O	H	H	H		
152	Pyridin-3-ilas N-oksidas	O	H	H	H		
153	Pyrazin-2-ilas 1-N-oksidas	O	H	H	H		
154	Pyrazin-2-ilas 4-N-oksidas	O	H	H	H		

2 lentele (tesinys)

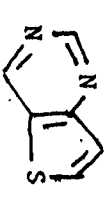
Junginio No.	Z	X	A	B	E	Olefininis ⁺	Lydimosi temp. (°C)
155	Piridazin-3-ilas 1-N- oksidas	O	H	H	H		
156	Piridazin-3-ilas 2-N- oksidas	O	H	H	H		
157	Isochinolin-1-ilas	O	H	H	H		
158	Isochinolin-1-ilas	NH	H	H	H		
159	Isochinolin-1-ilas	CH ₂ O	H	H	H		
160	Isochinolin-1-ilas	OCH ₂	H	H	H		
161	Isochinolin-1-ilas	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		

68

2 lentele (tęsinys)

Junginio No.	Z	X	A	B	E	Olefinai nis ⁺	Lydimosi temp. (°C)
171	Chinazolin-4-ilas	O	H	H	H		
172	Chinazolin-4-ilas	NH	H	H	H		
173	Chinazolin-4-ilas	CH ₂ O	H	H	H		
174	Chinazolin-4-ilas	OCH ₂	H	H	H		
175	Chinazolin-4-ilas	CH(OH)	H	H	H		
176	Chinazolin-4-ilas	S	H	H	H		
177	Chinazolin-4-ilas	SO ₂ O	H	H	H		
178	7-Chlorochinolin-4-ilas	O	H	H	H		
179	7-Chlorochinolin-4-ilas	S	H	H	H		
180	7-Chlorochinolin-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		
201		O	H	H	H	7,49	115-116

20

2 lentelė (tęsinys)

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

2 lentelė (tęsinys)

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	7,49	
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-Clano-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)

Auginio No.	Z	X	A	B	E	Olefininis	Lydinio temp. (°C)
228	2-F-pirimidin-4-ilas	0	H	H	H		
229	2-Br-pirimidin-4-ilas	0	H	H	H		
230	2-CH ₃ -Pirimidin-4-ilas	0	H	H	H		
231	2-CH ₃ O-pirimidin-4-ilas	0	H	H	H		
232	2-CH ₃ CH ₂ O-pirimidin-4-ilas	0	H	H	H		
233	2-NO ₂ -Pirimidin-4-ilas	0	H	H	H		
234	2-CH ₃ S-pirimidin-4-ilas	0	H	H	H		
235	2-C ₆ H ₅ O-pirimidin-4-ilas	0	H	H	H		
236	2-CF ₃ -Pirimidin-4-ilas	0	H	H	H		
237	2-C ₆ H ₅ O-pirimidin-4-ilas	0	H	H	H		
238	2-C ₆ H ₅ -Pirimidin-4-ilas	0	H	H	H		
239	6-F-pirimidin-4-ilas	0	H	H	H		
240	6-Br-pirimidin-4-ilas	0	H	H	H		
241	6-CH ₃ -Pirimidin-4-ilas	0	H	H	H		
242	6-CH ₃ O-pirimidin-4-ilas	0	H	H	H		
243	6-CH ₃ CH ₂ O-pirimidin-4-ilas	0	H	H	H		

2 lentelė (tęsinys)

Junginio No.	Z	X	A	B	E	Olefininis +	Lydimosi temp. (°C)
244	6-NO ₂ -Pirimidin-4-ilas	0	H	H	H		
245	6-Ciano-Pirimidin-4-ilas	0	H	H	H		
246	6-CF ₃ -Pirimidin-4-ilas	0	H	H	H		
247	6-C ₆ H ₅ O-Pirimidin-4-ilas	0	H	H	H		
248	5-C ₆ H ₅ -Pirimidin-4-ilas	0	H	H	H		
249	5-F-Pirimidin-4-ilas	0	H	H	H		
250	5-Cl-Pirimidin-4-ilas	0	H	H	H		
251	5-Br-Pirimidin-4-ilas	0	H	H	H		
252	5-CH ₃ -Pirimidin-4-ilas	0	H	H	H		
253	5-CH ₃ O-Pirimidin-4-ilas	0	H	H	H		
254	5-CH ₃ CH ₂ O-Pirimidin-4-ilas	0	H	H	H		
255	5-NO ₂ -Pirimidin-4-ilas	0	H	H	H		
256	5-Ciano-Pirimidin-4-ilas	0	H	H	H		
257	5-CF ₃ -Pirimidin-4-ilas	0	H	H	H		
258	5-C ₆ H ₅ O-Pirimidin-4-ilas	0	H	H	H		
259	5-C ₆ H ₅ -Pirimidin-4-ilas	0	H	H	H		

54

2 lentele (tęsinys)

Junginio No.	Z	X	A	B	E	Olefinais ⁺	Lydinosi temper. (°C)
260	2-Cl-Pirimidin-5-ilas	0	H	H	H		
261	2-CH ₃ -Pirimidin-5-ilas	0	H	H	H		
262	2-F-Pirimidin-5-ilas	0	H	H	H		
263	2-CH ₃ O-Pirimidin-5-ilas	0	H	H	H		
264	2-Cyano-Pirimidin-5-ilas	0	H	H	H		
265	4-CH ₃ -Pirimidin-5-ilas	0	H	H	H		
266	4-CH ₃ O-Pirimidin-5-ilas	0	H	H	H		
267	4-CF ₃ -Pirimidin-5-ilas	0	H	H	H		
268	2,4-di-CH ₃ -Pirimidin-5-ilas	0	H	H	H		
269	2-CH ₃ S-4-CH ₃ O-Pirimidin-5-ilas	0	H	H	H		
270	Perol-2-ilas	CONH	H	H	H	7,48	Putā
271	6-Cl-3-NO ₂ -Pirimidin-2-ilas	0	H	H	H	7,50	Derva
272	6-Cl-5-NO ₂ -Pirimidin-2-ilas, 1:1 mišinys 3,6-Di-CH ₃ -Pirazin-2-ilas	0	H	H	H	7,49	Derva

57

2 lentelė (tesinys)

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

18

-51-

2 lentele (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-oksadiazol-5-ilas	O	H	H	H		
298	3-Cl-1,2,4-oksadiazol-5-ilas	S	H	H	H		
299	5-CH ₃ S-1,2,4-oksadiazol-3-ilas	O	H	H	H		
300	Piridin-2-ilas	CH(OH)	H	H	H	7,47	Deriva

2 lentelė (tęsinys)

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

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

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 - Izokazol-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- Pirimidin-4-ilas	O	H	H	H	7.48	Derva
341	5-(Piridin-2-ilas Thien-2-ilas	SO ₂ O	H	H	H	7.55	Derva
342	2,4-di-CH ₃ - Thiazol-5- ilas	SO ₂ O	H	H	H	7.47	Derva
343	4,5-di-Br- Thien-2-ilas	SO ₂ O	H	H	H	7.45	Derva
344	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

65

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)

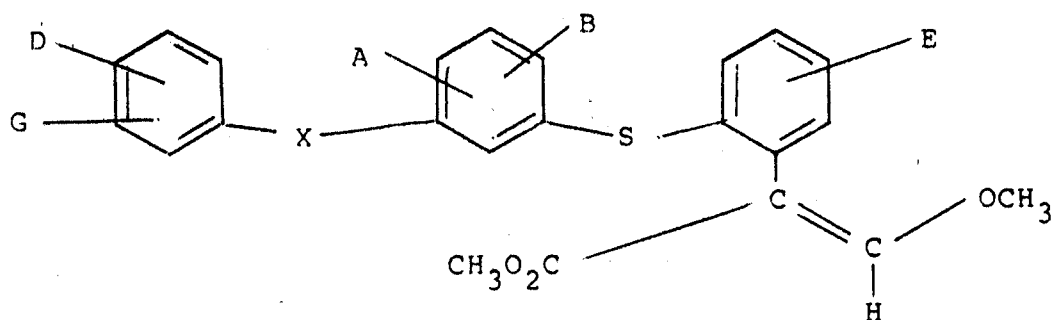
Junginio Nr.	Z	X	A	B	E	Olefininis ⁺	Lydimosi temp. (°C)
384	3-Ciano-5-NH ₂ Piridin-2-ilas	O	H	H	H	7.48	Derva
385	4,6-di-Ciano- piridin-2-ilas	O	H	H	H	7.50	Derva
386	4-Cianopiridin- 3-ilas	O	H	H	H	7.48	97-99
387	3-NO ₂ -Piridin- 2-ilas	N(CH ₃)	H	H	H	7.51	Putra
388	2-Cianopiridin- 3-ilas	O	H	H	H	7.46	93-95
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 singletas poslinkis nuo beta -metoksipropenoato

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

"*" - BMR¹³C duomenys pateikti 5 lentelėje

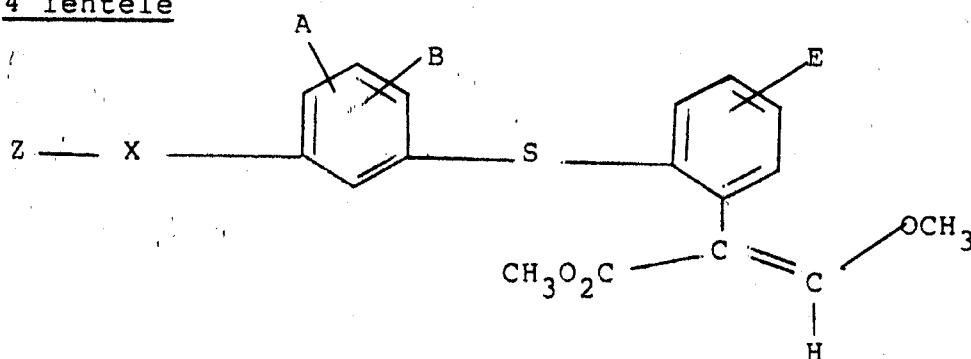
3 lentelė



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

68

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 = kvartetąs

m = multipletas

LENTELES NO.	JUNIORIO 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),

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.

LENTELĖS 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	JUNGINIO	DAŽNIS	
NO.	NQ.	(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.

74

LENTEĻS NO.	JUNĢINIO 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,

75

LENTEĻĒS NO.	JUNGINIO NŅ.	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.

LENTELĒS 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.

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.

81

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.

LENTEĻĒS 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.

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.

LENTELĒS 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	87	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.

89

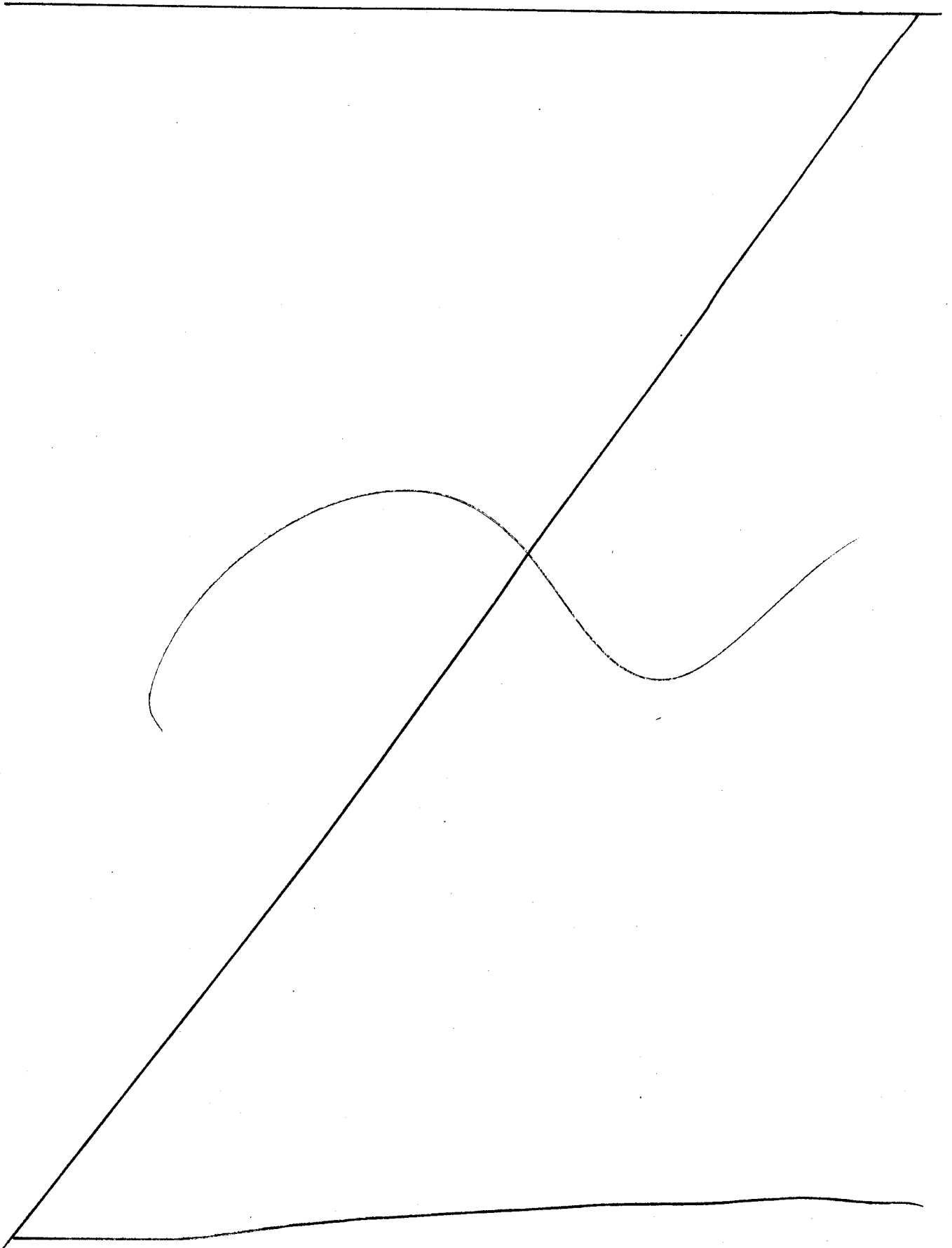
LENTELES NO	JUNGINIO NO	DAŽNIS (MHz)	
II	91	270	3.61 (3H, s), 3.75 (3H, s), 6.77 (1H, t), 6.83-6.89 (2H, m), 7.04 (1H, d), 7.15 (1H, t), 7.25-7.35 (3H, m), 7.48 (1H, s), 8.47 (2H, s). m.d.
II	93	270	3.60 (3H, s), 3.75 (3H, s), 3.90 (3H, s), 3.94 (3H, s), 5.67 (1H, s), 6.76 (1H, t), 6.84 (2H, m), 7.00 (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.

30

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.

LENTELĖS 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,



LENTELĖS 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 (MHz)	
II	319	270	7.25-7.34 (3H, m), 7.48 (1H, s) m.d. 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),

LENTELĖS 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.

23

(I) formulės junginius galima gauti, veikiant ketoesterius (VI) metoksimetilinančia medžiaga, pavyzdžiui, metoksimetilentrifenilfosforanu (žiūrėti, pavyzdžiui, W. Steglich, G. Schramm, T. Anke ir F. Oberwinkler, EP 0044448, 1980.07.04).

(VI) formulės ketoesterius galima gauti pagal literatūroje aprašytus metodus. Ypač geruose metoduose: 1) atitinkami fenilmagnio halogenidai arba fenil-ličio dariniai reaguoja su dimetiloksalatu pagal L.M. Weinstock, R.B. Currie ir A.V. Lovell, Synth. Commun., 1981, 11, 943 ir nuorodos); 2) (III) formulės fenilacetatai oksiduojami seleno dioksidu dažniausiai be tirpiklio, ir dažniausiai aukštesnėje nei 100°C temperatūroje; ir 3) migdolų rūgšties esteriai oksiduojami, pavyzdžiui, magnio oksidu tinkamame tirpiklyje.

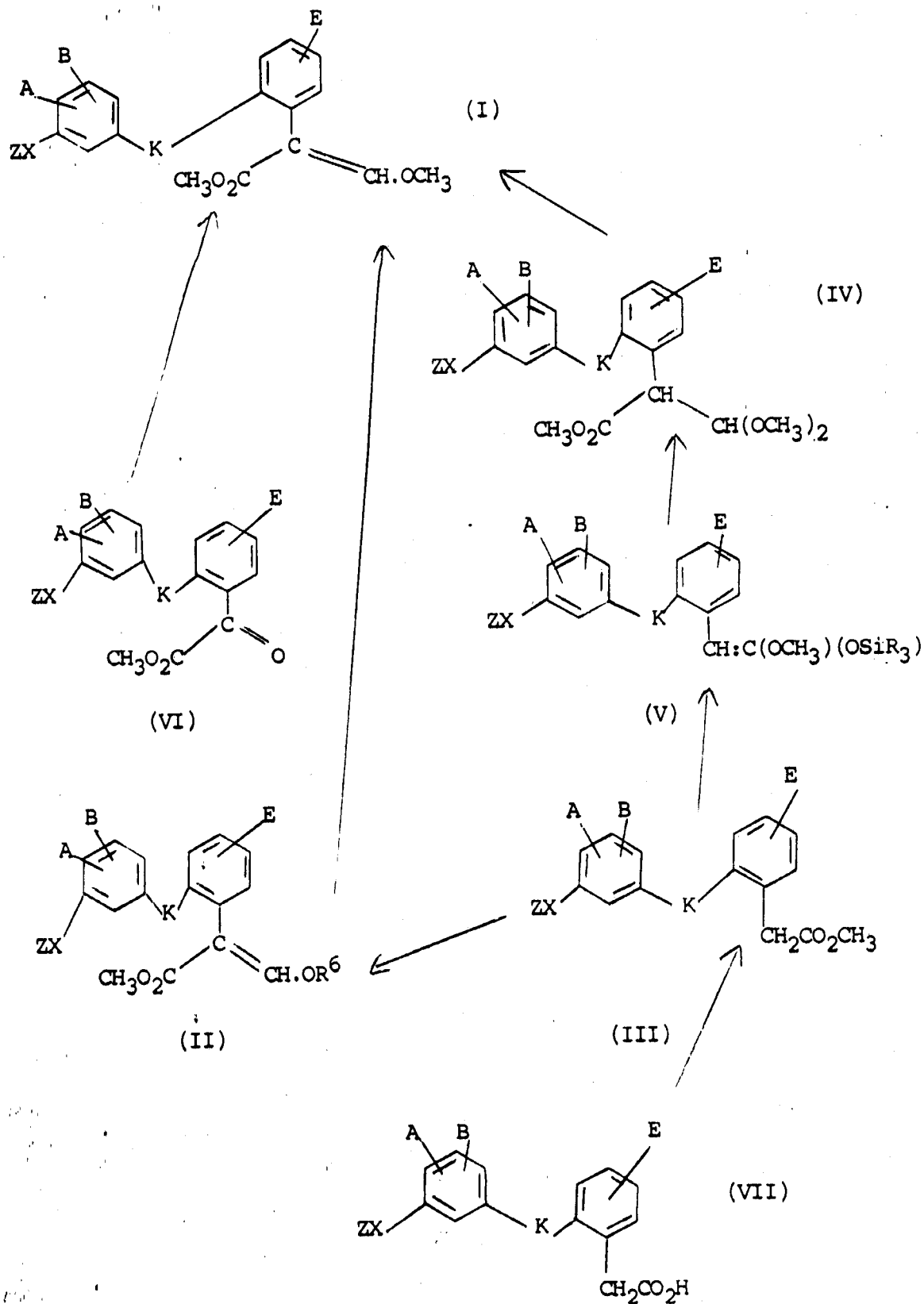
(III) formulės fenilacetatus ir atitinkamas (VII) formulės fenilacetato rūgštis taip pat galima gauti daugeliu kitų metodų, aprašytų cheminėje literatūroje. Pavyzdžiui, D.C. Atkinson, K.E. Godfrey, B. Meek, J.F. Saville ir M.R. Stillings, J. Med. Chem., 1983, 26, 1353 ir D.C. Atkinson, K.E. Godfrey, P.L. Meyers, N.C. Phillips, M.R. Stillings ir A.P. Welbourn, J. Med. Chem., 1983, 26, 1361. Be to, daug metodų, aprašytų 2-arilpropioninės rūgšties esteriams ir rūgštims gauti (J.-P. Rieu, A. Boucherle, H. Cousse ir G. Mouzin, Tetrahedron, 1986, 42, 4095), taip pat tinka (III) formulės fenilacetatams ir (VII) formulės fenilacto rūgštims gauti iš atitinkamų pradinių medžiagų, kuriose jau yra orto pakeistas fenoksi pakaitas ir E pakaitas.

(I) formulės junginiai yra efektyvūs fungicidai ir gali būti naudojami prieš tokius patogenus:

Ryžių Pyricularia oryzae.

Puccinia recondita, Puccinia striiformis ir kitos kviečių rūdys,

1. Schema



Puccinia hordei, Puccinia striiformis ir kitos miežių rūdys ir kitų kultūrinių augalų rūdys, pavyzdžiui, kavos, kriaušių, obuolių, žemės riešutų, daržovių ir dekoratyvinių augalų. Miežių ir kviečių Erysiphe graminis (tikroji miltligė) ir kitos įvairių kultūrinių augalų miltligės rūšys, kaip apynių Sphaerotheca macularis, moliūginių (pavyzdžiui, agurkų) Sphaerotheca fuliginea, obuolių Podosphaera leucotricha ir vynmedžių Uncinula necator vynmedžių. Grūdinių Helminthosporium, Rhynchosporium, Septoria, Pseudocercospora herpotrichoides ir Gaeumannomyces graminis. Žemės riešutų Cercospora arachidicola ir Cercosporidium personata ir kitos kultūrinių augalų, pavyzdžiui, cukrinių runkelių, bananų, sojos pupelių ir ryžių Cercospora rūšys. Pomidorų, braškių, daržovių, vynmedžių ir kitų kultūrinių augalų pilkoji miltligė. Daržovių (pavyzdžiui, agurkų), rapsų, obuolių, pomidorų ir kitų kultūrinių augalų Alternaria rūšys. Obuolių Venturia inaequalis (susna).

Vynuogių Plasmopara viticola.

Kitos netikros miltligės rūšys, kaip salotų Bremia lactucae, sojos pupelių, tabako, svogūnų ir kitų kultūrinių augalų Peronospora ir apynių Pseudoperonospora humuli ir moliūginių Pseudoperonospora humuli ir moliūginių Pseudoperonospora cubensis.

Bulvių ir pomidorų Phytophthora infestans ir kitos daržovių, žemuogių, avokado, pipirų, dekoratyvinių augalų, tabako, kakavos ir kitų kultūrinių augalų Phytophthora infestans rūšys. Ryžių Thanatephorus cucumeris ir kitos įvairių kultūrinių augalų, tokių kaip kviečiai ir miežiai, daržovės, medvilnė ir velėnos Rhizoctonia rūšys.

Kai kurie iš junginių pasižymi plačiu poveikio spektru prieš grybelius in vitro. Jie taip pat gali būti efektyvūs prieš

(10)

įvairias po derliaus nuėmimo atsiradusias vaisių ligas (pavyzdžiui, apelsinų Penicillium digitatum ir italicum ir Trichoderma viride, bananų Gloeosporium musarum ir vynuogių Botrytis cinerea).

Be to, kai kurie iš junginių gali būti efektyvūs, beicuojant sėklas prieš Fusarium, Septoria, Tilletia grybelių rūšis (kviečių sėklų kietąją kūlą); grūdinių Ustilago, Helminthosporium, medvilnės Rhizoctonia solani ir ryžių Pyricularia oryzae.

Junginiai gali sistemiškai judėti augaluose. Be to, junginiai gali būti pakankamai lakūs, todėl gali garų fazėje veikti augalų grybelius.

Daugelis (I) formulės junginių, įskaitant tuos, kur X yra deguonis yra mažai pavojingi kultūriniams augalams (pavyzdžiui, vynuogėms), negu žinomi artimos struktūros junginiai.

Tokiu būdu išradime pateikiamas kovos prieš grybelius būdas, kuriame augalai, augalų sėklos, arba augalų augimo ar sėklų buvimo vieta apdirbama efektyviu aukščiau apibūdinto junginio arba kompozicijos to junginio pagrindu kiekiu.

Junginiai taipogi gali būti taikomi, kaip pramoniniai (priešingai žemės ūkio) fungicidai, pavyzdžiui, prieš medžio, išdirbtos odos, odos dirbinių ir ypač dažų plėvelių grybelius. Junginius fungicidiniais tikslai galima taikyti tiesiai, bet žymiai patogiau juos sukomponuoti į kompozicijas su nešėju arba praskiedėju. Todėl išradime pateikiama fungicidinė kompozicija, susidedanti iš (I) formulės junginio ir fungicidiškai tinkamo nešėjo arba praskiedėjo.

Kaip fungicidus, junginius galima naudoti įvairiu būdu. Pavyzdžiui, galima naudoti jų kompoziciją arba vienus tiesiai augalų lapams, sėkloms arba terpei, kurioje augalai auga arba bus auginami, arba juos galima purkšti, pabarstyti arba naudoti

kaip kremą arba pastą, arba juos galima naudoti garų pavidalu arba kaip prailginto veikimo granules. Apdirbti galima bet kurią augalų adlį, įskaitant alpus, stiebus, šakas ir šaknis, arba dirvą apie šaknis arba sėklas prieš sėją; arba dirvą bendrai, vandenį laistymui arba hidroponines augalų auginimo sistemas. Junginius galima įvesti injekcijomis į augalus arba apipurkšti jais, naudojant elektrodinaminę purškimo įrangą arba kitais mažo imlumo metodais.

Terminas "augalas" apima sodinukus, krūmus ir medžius. Be to, fungicidinis išradimo metodas apima prevencinį, apsauginį, profilaktinį ir naikinantį poveikį.

Daugiausia išradimo junginiai, kaip kompozicijos, yra skirti žemės ūkiui ir sodininkystei. Kompozicijos tipas bet kuriuo atveju priklauso nuo konkretaus tikslo.

Kompozicijos gali būti dusto miltelių arba granulių formos, kuriuose aktyvus komponentas (išradimo junginys) yra su kietu praskiedėju arba nešėju, pavyzdžiui, užpildu, kaip kaolinas, bentonitas, kizelguras, dolomitas, kalcio karbonatas, talakas, magnio milteliai, fullerio žemė, gipsas, diatominė žemė ir kinietiškas molis. Tokios granulės gali būti paruošiamos iš anksto ir taikomos dirvai be papildomo apdirbimo. Šias granules galima gauti, sudrėkinant užpildo tabletes aktyviu komponentu arba gaunant aktyvaus komponento ir miltelių pavidalo užpildo mišinio tabletes. Kompozicijose sėklų beicavimui gali būti medžiaga (pavyzdžiui, mineralinis aliejus), padedanti kompozicijai išsilaikyti ant sėklų; arba aktyvų komponentą galima įvesti į sąstatą sėklų beicavimui, naudojant organinį tirpiklį (pavyzdžiui, N-metilpirolidoną, propilenoglikolį arba dimetilformamidą). Kompozicijos taip pat gali būti suvilgytų miltelių iš vandenyje di-

sperguojamų granulių formos su drėkinančia arba disperguojančia medžiaga tirpumui skysčiuose palengvinti. Milteliuose ir granulėse taip pat gali būti užpildų ir suspenduojančių medžiagų.

Emulsiniai koncentratai arba emulsijos gali būti gaunami, ištirpinant aktyvų komponentą organiniame tirpiklyje, kuriame gali būti drėkinančių arba emulguojančių medžiagų, o po to supilant mišinį į vandenį, kuriame taip pat gali būti drėkinančių arba emulguojančių medžiagų. Tinkami organiniai tirpikliai yra aromatiniai tirpikliai, kaip alkilbenzoliai ir alkilnaftalinai, ketonai, kaip izoforonas, cikloheksanonas, ir metilcikloheksanonas, chlorinti angliavandeniai, kaip chlorbenzolas ir trichlorešanas, ir alkoholiai, kaip benzilo alkoholis, furfurilo alkoholis, butanolis ir glikolio eteriai.

Daugeliu netirpiu kietu medžiagu suspensinius koncentratu galima gauti, malant rutuliniame malūne su disperguojančia medžiaga ir įvedant suspenduojančią medžiagą kietos medžiagos nusėdimui sustabdyti.

Kompozicijos purškimui gali būti aerozoliu formos; sąstatas laikomas konteineryje po spaudimu, esant propelentui, pavyzdžiui, fluortrichlormetanui arba dichlordifluormetanui.

Išradimo junginius sausame būvyje galima sumaišyti su pirotechniniu mišiniu, gaunant kompoziciją, kuri uždaroje aplinkoje skleidžia dūmus, su išradimo junginiais.

Alternatyviai, junginius galima naudoti mikrokapsulėse arba juos galima įvesti į sąstatus su biodegraduojančiais polimeriais, kai aktyvi medžiaga išsiskiria lėtai ir išskyrimas kontroliuojamas.

Skirtingas kompozicijas galima geriau pritaikyti įvairiems

tikslams, įvedus tinkamus priedus, pavyzdžiui, priedus, pagerinančius pasiskirstymą, adheziją ir apdirbtų paviršių atsparumą lietai.

Išradimo junginius galima naudoti, kaip mišinius su trąšomis (pavyzdžiui, azoto, kalio, ar fosforo trąšomis). Geros yra kompozicijos, kuriose trąšų granulės yra padengtos išradimo junginiais. Tokiose granulėse yra iki 25 svorio % aktyvaus junginio.. Tokiu būdu, išradime pateikiama trąšų kompozicija, kurios sudėtyje yra trąša ir (I) formulės junginys arba jo druska arba jo kompleksas su metalu.

Suvilgytuose milteliuose, emulsiniuose koncentratuose ir suspensiniuose koncentratuose paprastai yra paviršiaus aktyvių medžiagų, pavyzdžiui, drėkinanti medžiaga, disperguojanti medžiaga, emulguojanti medžiaga arba suspenduojanti medžiaga. Šios medžiagos gali būti katijoninės, anijoninės arba nejoninės.

Tinkamos katijoninės medžiagos yra ketvirtiniai amino junginiai, pavyzdžiui, cetiltrimetilamino bromidas. Tinkamos anijoninės medžiagos yra muilai, sieros rūgšties alifatinių monoesterių druskos (pavyzdžiui, natrio laurilsulfatas) ir sulfonintų aromatinių junginių druskos (pavyzdžiui, natrio dodecilbenzolsulfonatas, natrio, kalcio ar amonio lignosulfonatas, butilnaftalino sulfonatas ir natrio diizopropil- ir triizopropil-naftalino sulfonatų mišinys).

Tinkamos nejoninės medžiagos yra etileno oksido kondensacijos produktai su riebiaisiais alkoholiais, tokiais kaip oleilo arba cetilo alkoholis, arba su alkil-fenoliais, tokiais kaip oktil- arba nonil-fenolis ir oktilkrezolis. Kitos nejoninės medžiagos yra daliniai esteriai, gauti iš ilgos grandinės riebiųjų rūgščių ir heksitolo anhidridų, pastarųjų dalinių esterių konde-

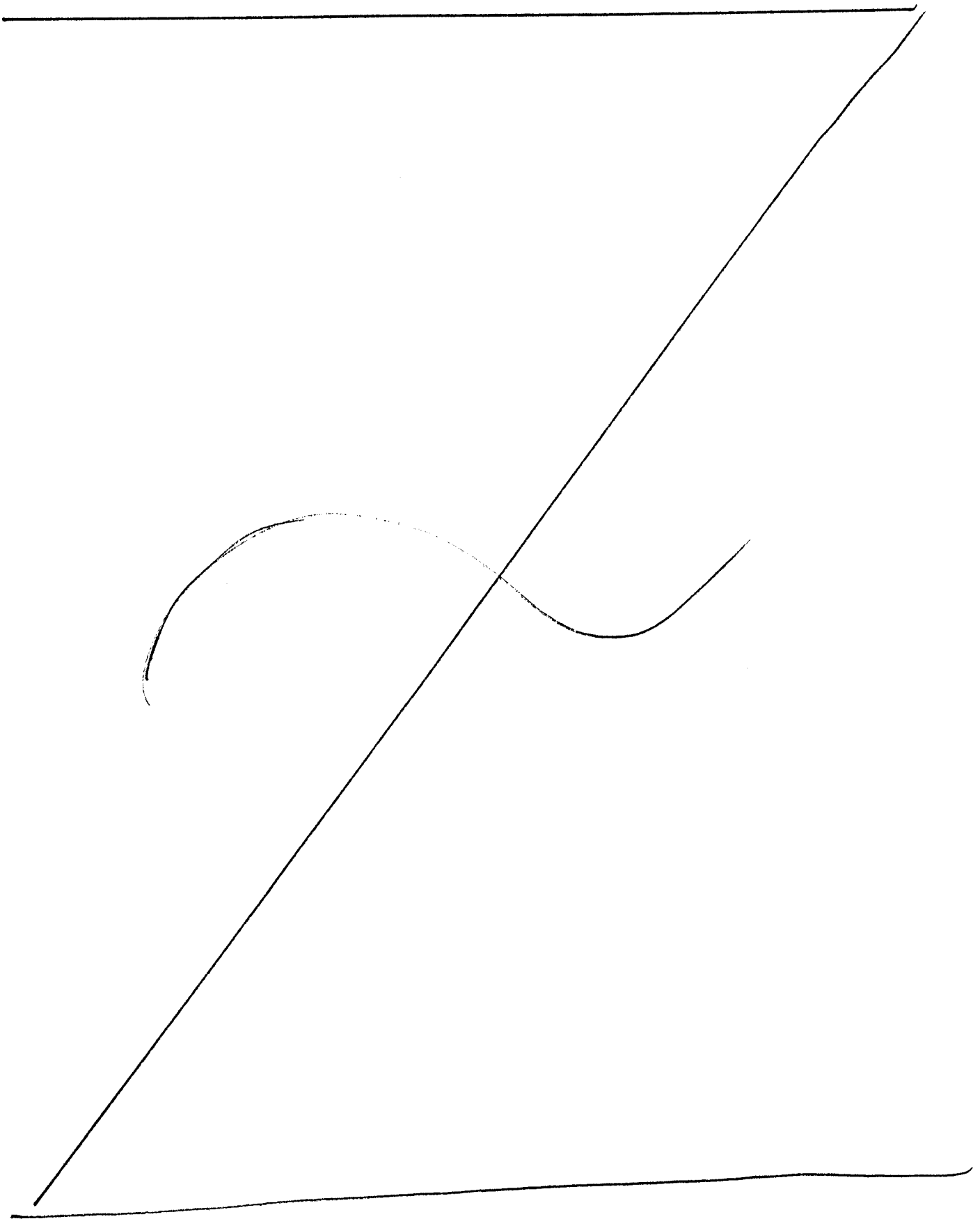
nsacijos produktai su etileno oksidu ir lecitinais.

Tinkamos suspenduojančios medžiagos yra hidrofiliniai koloidai (pavyzdžiui, polivinilpirolidonas ir natrio karboksimetilceliuliozė), ir brinkstantys moliai, tokie kaip bentonitas arba atapulgitas. Vandeninės dispersijų arba emulsijų kompozicijos paprastai yra koncentratai, kuriuose didelis aktyvaus komponento kiekis ir šis koncentratas prieš naudojimą praskiedžiamas. Šie koncentratai turi būti atsparūs ilgam laikymui, kad po laikymo juos galima būtų praskiesti vandeniu vandeniniams preparatams gauti, kurie išlieka homogeniškai pakankamai ilgą laiko tarpą ir juos galima purkšti įprasta purškimo technika. Koncentratuose paprastai būna iki 95 %, atitinkamia 10 - 85 %, pavyzdžiui, 25 - 60 svorio % aktyvaus junginio. Norint gauti vandeninius preparatus, koncentratai praskiedžiami; priklausomai nuo tikslo atitinkamuose preparatuose gali būti įvairūs aktyvaus komponento kiekiai, bet gali būti naudojami vandeniniai preparatai, kuriuose aktyvus komponentas sudaro 0,00055 arba 0,01 - 10 svorio %.

Šio išradimo kompozicijose gali būti kitų biologiškai aktyvių medžiagų, pavyzdžiui, junginių su panašiu ar papildomu fungicidiniu poveikiu arba augalų augimą reguliuojančiu, herbicidiniu arba insekticidiniu poveikiu.

Fungicidinis junginys, galintis dalyvauti kompozicijose, gali būti toks, kuris veikia prieš grūdinių kultūrų varpų ligas (pavyzdžiui, kviečių), tokias kaip Septoria, Gibberella ir Helminthosporium, sėklų ir dirvos ligas, prieš tikrąją ir netikrąją vynuogių miltligę ir obuolių miltligę ir susną ir t.t.. Įvedus kitą fungicidą, kompozicijos efektyvumo spektras praplatėja, palyginus su vieno (I) formulės junginio poveikiu. Be to, kito fungicido poveikis (I) formulės junginiui gali būti sinergetinis.

Fungicidinių junginių, kurie gali būti įvesti į kompoziciją, pavyzdžiai apima: karbendazimą, benomilą, tiofanat-metilą, tiabendazolą, fuberidazolą, etridazolą, dichlofluonidą, cimoksanilą, oksadiksilą, ofuracą, metalaksilą, furalaksilą, benalaksilą, fozetilaliuminį, fenorimolą, iprodioną, protiokarbą, procimidoną, vinklozoliną, penkonazolą, miklobutanilą, propamokarbą, dinikonazolą, pirazofosą, etirimolą, ditalimfosą, tridemorfą, triforiną, nuarimolą, triazbutilą, kvazatiną, 1,1'-iminodi(oktilmetileno)diguanidino triacetato druską, butiobatą, propikonazolą, prochlorazą, flutriafolą, (2RS, 5RS)-5-(2,4-dichlorfenil)tetrahidro-5-(1H-1,2,4-triazol-1-ilmetil)-2-furil-2,2,2-trifluoretilo eterį, ciprokonazolą, terbukonazolą, pirolnitriną, 1-[(2RS, 4RS; 2RS, 4RS)-4-brom-2-(2,4-dichlorfenil)tetrahidrofurfuril]-1H-1,2,4-triazolą, 5-etil-5,8-dihidro-8-okso(1,3)-dioksolo(4,5-g)chinolin-7-karboninę rūgštį, (RS)-1-aminopropilfosfonio rūgštį, 3-(2,4-dichlorfenil)-2-(1H-1,2,4-triazol-1-il)chinazolin-4(3H)-oną, fluzilazolą, triadimefoną, triadimenolą, diclobutrazolą, fenpropimorfą, pirifenoksa, fenpropidiną, chlorzolinatą, imazalilą, fenfuramą, karboksina, oksikarboksina, metfuroksamą, dodemorfą, BAS 454, blasticidiną S, kazugamiciną, edifenfosą, Kitaziną P, cikloheksimidą, ftalidą, probenazolą, izoprotiolaną, triciklazolą, 4-Chlor-N-(ciano(etoksi)metil)benzamidą, pirochiloną, chlorbenztiazoną, neoazoziną, polioksiną D, validamiciną A, meproniolą, fentolanilą, pencikuroną, diklomeziną, fenazinoksidą, nikelio dimetilditiokarbamatą, techloftalamą, bitertanolą, bupirimatą, etakonazolą, hidroksioksazolą, streptomyciną, ciprofuramą, biloksazolą, chinometionatą, dimetirimolą, 1-(2-ciano-2-metoksiiminoacetil)-3-etil-karbamidą, fenapanilą, tolklofosmetilą, piroksifurą, poliramą, manebą, mankozebą, kaptafolą, chlortalonilą, anilaziną, tiramą, kaptaną, folpetą, zinebą, propinebą, sierą,



107

dinokapą, dichloną, chloronebą, binapakrilą, nitrotal-izopropilą, dodiną, ditianoną, fentin-hidroksidą, fentin-acetata, teknazeną, chintozeną, dichloraną, vario turinčius junginius, tokius kaip vario oksichloridas, vario sulfatas ir Bordo mišinys, o taip pat gyvsidabrio organinius junginius.

(I) formulės junginius galima sumaišyti su dirva, durpėmis arba kita terpe šaknims, apsaugant augalus prieš grybelinę sėklų, dirvos ar lapų infekciją.

Tinkami įvedimui į kompoziciją insekticidai apima pirimi-karbą, dimetoatą, demeton-s-metilą, formotioną, karbarilą, diazinoną, fentioną, fenitrotationą, fentoatą, chlorpirifosą, izoksationą, propafosą, monokrotofosą, buprofeziną, etoproksifeną ir cikloprotriną.

Augalų augimą reguliuojantys junginiai reguliuoja piktžolių arba daigų formavimąsi arba selektyviai kontroliuoja mažiau reikalingų augalų augimą (pavyzdžiui, žolės).

Tinkami įvedimui į kompoziciją augalų augimą reguliuojantys junginiai yra gibereliniai (pavyzdžiui, GA_3 , GA_4 , arba GA_7), auksinai (pavyzdžiui, indolacto rūgštis, indolbutirinė rūgštis, naftoksiacto rūgštis arba naftilacto rūgštis), citokininai (pavyzdžiui, kinetinas, difenilkarbamidas, benzimidazolas arba benzilaminopurinas), fenoksiacto rūgštys (pavyzdžiui, 2,4-D arba MCPA), pakeista benzoinė rūgštis (pavyzdžiui, trijodobenzoinė rūgštis), morfaktiniai (pavyzdžiui, chlorfluorekolas), maleino hidrazidas, glifozatas, glifozinas, ilgos grandinės riebieji alkoholiai ir rūgštys, dikegulakas, paklobutrazolas, fluoridai, mefluidas, pakeisti ketvirtiniai amonio ir fosfonio junginiai (pavyzdžiui, chlorfonio chlormekvatas arba mepikvatchloridas), etefonas, karbetamidas, metil-3,6-dichloranizatas, dami-

108

nozidas, azulanas, abscizo rūgštis, izopirimolas, 1-(4-chlorfe -
nil)-4,6-dimetil-2-okso-1,2-dihidropiridin-3-karboninė rūgštis,
hidrobenzonitrilai (pavyzdžiui, bromoksinilas), difenzokvatas,
benzoilprop-etil-3,6-dichlorpikolino rūgštis, fempentezolas, in-
abenfidas, triapentenolas ir teknazenas.

Toliau pateikti pavyzdžiai paaiškina išradimą.

Visuose pavyzdžiuose terminas "eteris" priskiriamas etilo
eteriui, magnio sulfatas naudojamas tirpalams džiovinti, o tir -
palai koncentruojami pažemintame slėgyje. Reakcijos su vandeniu
jautriais tarpiniais junginiais vykdomos azoto atmosferoje, o
tirpikliai, kur reikia, išdžiovinami prieš naudojimą. Jei nėra
kitaip pažymėta, chromatografuojama per silikagelio kolonėlę. Kur
parodyta IR ir BMR spektroskopijos duomenys yra selektyvūs; ne -
nurodant visais atvejais visų absorbuotų juostų. ¹H BMR spektras
užrašomas, naudojant CDCl₃ tirpiklį, jei nėra kitaip pažymėta.
Visur naudojami tokie sutrumpinimai:

DMF = dimetoksietanas

THF = tetrahidrofuranas

DMF = N,N-dimetilformamidas

BMR = branduolinis magnetinis rezonansas

IR = infraraudonas

s = singletas, d = dubletas, t = tripletas, m = multipletas,

Lyd.temp. = lydimosi temperatūra

GC = dujinė chromatografija

TLC = plono sluoksnio chromatografija

HPLC = didelį efektyvumą skysta chromatografija

Br = platus

PPM = milijoninės dalys (m.d.)

1 Pavyzdys

Metil-3-metoksi-2-[2-(3-[2-trifluormetilfenoksi]fenoksi)-fenil]propenoato, (E)- ir (Z)-izomerų gavimas (Junginys 1* ir 2 atitinkamai).

3,06 g 2-(3-oksifenoksi)fenilacto rūgšties (3) (gautos hidrolizuoiant atitinkamą metilo esterį), 2,82 g 2-trifluormetilbrombenzolo, 3,46 g kalio karbonato ir vario (I) chlorido (katalit) 5 ml DMF mišinys 1 valandą virinamas 110°C temperatūroje ir 4 valandas 150°C temperatūroje, o po to atšaldomas ir išpilamas į vandenį. Gautas mišinys parūgštinamas ir ekstrahuojamas eteriu, o ekstraktas praplaunamas vandeniu, džiovinamas ir koncentruojamas, gaunant tamsiai rudą riebalinį skystį. Šis skystis ištirpinamas 40 ml metanolio, kuriame yra keli lašai konc. sieros rūgšties, o gautas mišinys virinamas 2 valandas su grįžtamu šaldytuvu. Mišinys atšaldomas, išpilamas į vandenį ir ekstrahuojamas eteriu. Ekstraktai praplaunami vandeniniu natrio hidroksido tirpalu, vandeniu ir sūrymu, po to džiovinami, koncentruojami ir chromatografuojami, išplaunant santykinai didesniu eterio kiekiu (0 - 20%) heksane, gaunant 3,04 g (60% išeiga nuo fenilacto rūgšties (3)) metil-2-[3-(trifluormetilfenoksi)-fenoksi]fenilacetato, geltonos spalvos riebalinio skysčio; IR(plėvelė): 1741 cm⁻¹; ¹H BMR: δ 3,53 (3H, s), 3,60 (2H, s), 6,6-7,6 (12H, m) m.d.

3,04 g fenilacetato (4), 3,16 g seleno dioksido ir apytiksliai 1 ml DMF mišinys 3 valandas maišant virinamas 200°C temperatūroje. Po to mišinys atšaldomas ir pridedamas papildomas kiekis (apie 1,7 g) seleno dioksido ir 1 lašas konc. druskos rūgšties. Reakcijos mišinys 7 valandas virinamas 200°C temperatūroje, o po to atšaldomas. Mišinys chromatografuojamas, išplaunant santykinai didėjančiu (10 - 30%) dichlormetano kiekiu heksane.

Po to atitinkamos reakcijos sujungiamos, koncentruojamos ir sutrinamos su eterio ir etano mišiniu, gaunant 6,639 g (21% išeiga) 2-[3-(2-trifluormetilfenoksi)fenoksi]benzoilformato (5), kietos šviesiai kreminės spalvos medžiagos. Lyd.temp. 68,5 - 70,5°C, ^1H BMR: δ 3,70 (3H, s), 7,75-7,86 (12H, m) m.d.

0,22 g kalio t-butoksido viena porcija supilama į maišomą 0,74 (metoksilmetil)trifenilfosfonio chlorido suspensiją 50 ml eterio. Po 30 minučių į maišomą raudonai-oranžinės spalvos reakcijos mišinį viena porcija sudedama 0,300 g benzoilformiato (3) tirpalo 20 ml eterio ir mišinys iš karto prašviesėja. Gautas mišinys 6 valandas maišomas, o po to išpilamas į vandenį. Atskiriami eterinis ir vandeninis sluoksniai, o pastarasis eksrtahuojamas eteriu. Sujungti eteriniai sluoksniai praplaunami vandeniu ir sūrymu, po to džiovinami ir koncentruojami, gaunant gelsvą riebalinį skystį, kuris sutrinamas su pentano ir eterio mišiniu. Gaunamas trifenilfosfino oksidas, kuris chromatografuojamas, išplaunant vis didėjančiu santykiu eterio (10 - 30%) kiekiu hekसानe, gaunant aukščiau užrašytus stereoizomerinius junginius, kurie yra atskirti vienas nuo kito ir nuo nedidelio kiekio nesureagavusio benzoilformiato (5):

- (1) benzoilformiatas (5) (130 mg, 43%), išplaunamas pirmiausia;
- (2) (E)-izomeras (1), išplaunamas antras, bespalvis riebalinis skystis (80 mg, 28% išeiga).

^1H BMR: δ 3,60 (3H, s), 3,75 (3H, s), 6,63-7,67 (13 H, m, olefininis singletas, esant 7,48) m.d.;

- (3) (Z)-izomeras, išplaunamas trečias, bespalvis riebalinis skystis (66 mg, 20% išeiga), ^1H BMR: δ 1,53 (3H, s), 3,83 (1H, s), 6,60 (1H, s), 6,63-7,68 (12H, m), m.d.

* junginių numeriai skliausteliuose atitinka pridedamos schemas numerius (psl. 97).

2 Pavyzdys

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

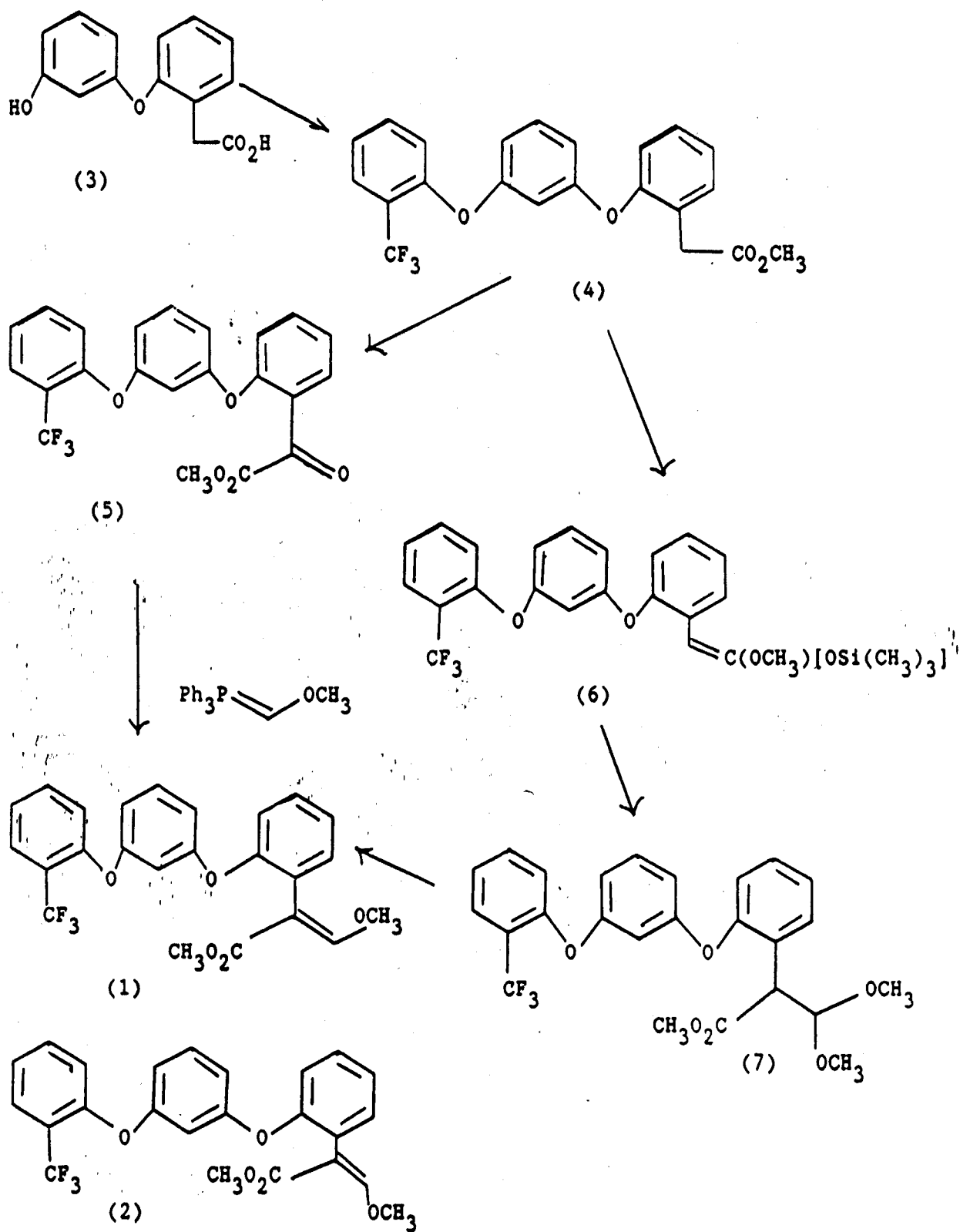
100 g (0,54 mol) 2-brombenzaldehydo, 67,03 g (1,08 mol)
etileno glikolio, 0,5 g p-toluolsulfoninės rūgšties mišinys 6 va-
landas virinamas su grįžtamu šaldytuvu. Tuo metu nudistiliuojama
23 ml vandens/etileno glikolio. Mišinys atšaldomas ir virinamas 1
l eterio. Eterinis tirpalas praplaunamas 200 ml sotaus natrio bi-
karbonato tirpalo, vandeniu (3x150 ml) ir 150 ml sūrymo. Po to
tirpalas džiovinamas ir filtruojamas, o eterinis tirpalas nugari-
namas. 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 šaldy-
tuvu, kol nudistiliuojamas vanduo (iš viso surenkama 65 ml van-
dens). 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 chlo-
rido. Mišinys lėtai pakaitinamas iki $150-155^{\circ}\text{C}$ ir nudistiliuoja-
mas toluolas.

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

Schema



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.

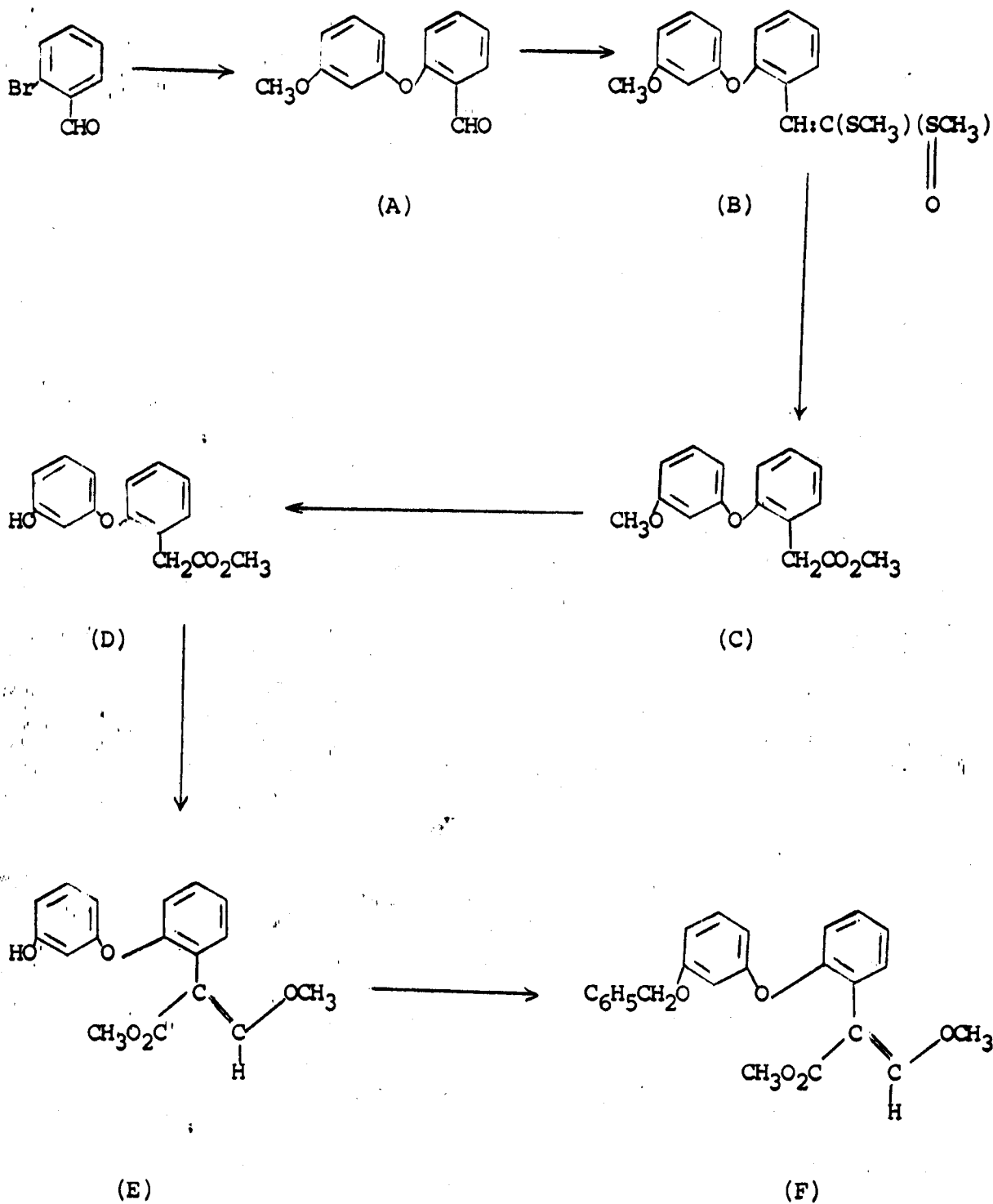
Tolimesnėje pakopoje ši medžiaga naudojama be valymo. 32,7 g (0,12 mol) 2-[2-(3-metoksifenoksi)fenil]-1,3-dioksolano maišoma 95 ml vandens ir 5 ml konc. druskos rūgšties mišinyje 19 valandų aplinkos temperatūroje. Mišinys 2 kartus ekstrahuojamas eteriu (x 60 ml), o sujungti eteriniai ekstraktai praplaunami 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, s) 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, palaikant 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.



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 rūgšties (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 rūgšties. 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 rūgšties) 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 %-inė 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 -

113

namis. 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-

128

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). Su - jungti 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 eterinie tirpalas sausai nugarinamas. Produktas išvalomas chromatografiškai, išplaunant eterio ir heksano mišiniu. Gaunama 1,11 g (85 %-nė išeiga) bespalvės dėvos 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.

3 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.

4 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.

5 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} .

6 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 aplinkos 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.

7 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 išvalomas chromatografiškai, išplaunant eterio ir heksano mišiniu, gaunant oranžinės spalvos kietą medžiagą. Medžiaga perkristalizuojama iš heksano ir dichlormetano mišinio, gaunant 99,3 mg (13,6 % išeiga) švaraus junginio, lyd. temp. 143 - 144°C.

8 pavyzdys

(E)-metil-2-[2-(3-[3-metoksifenoksi]fenil)-3-metoksiipropenoato gavimas (Junginys 129, 1 lentelė).

Į maišomą 0,61 g natrio 10 ml metanolio tirpalą viena porcija pridedama 4,34 g rezacinolio. Gautas mišinys 0,5 valandos maišomas kambario temperatūroje, o metanolio perteklius pašalinamas pažemintame slėgyje. Į gautą oranžinės spalvos skystį pridedama 6,6 ml piridino, 14,74 g 3-bromanizolo ir 192 mg vario chl)rido. Mišinys 66 valandas maišomas 125°C temperatūroje. Reakcijos mišinys paliekamas atšalti ir po to išpilamas į praskiestą druskos rūgštį ir ekstrahuojamas eteriu. Eteriniai ekstraktai per-ekstrahuojami praskiestu vand. natrio hidroksidu ir šie vandeniniai ekstraktai parūgštinami praskiesta druskos rūgštimi ir ekstrahuojami eteriu. Šie eteriniai ekstraktai praplaunami vandeniu ir sūrymu, po to džiovinami ir koncentruojami. Gaunama 3,72 g raudonos spalvos riebalinio skysčio. Šis riebalinis skystis distiliuojamas (170°C krosnies temp./0,05 mm Hg), gaunant 1,71 g 3-(3-metoksifenoksi)-fenolio tiršto gelsvos spalvos riebalinio 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 porcija pridedama 1,70 g 3-(3-metoksifenoksi)fenolio. Gautas mišinys 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.

9 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.

10 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 hidridą ir metilformiatą, o po to kalio karbonatą ir dimetilsulfatą pagal 1 pavyzdįje 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 paš- 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, išplauinant 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-

128

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.

11 pavyzdys

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

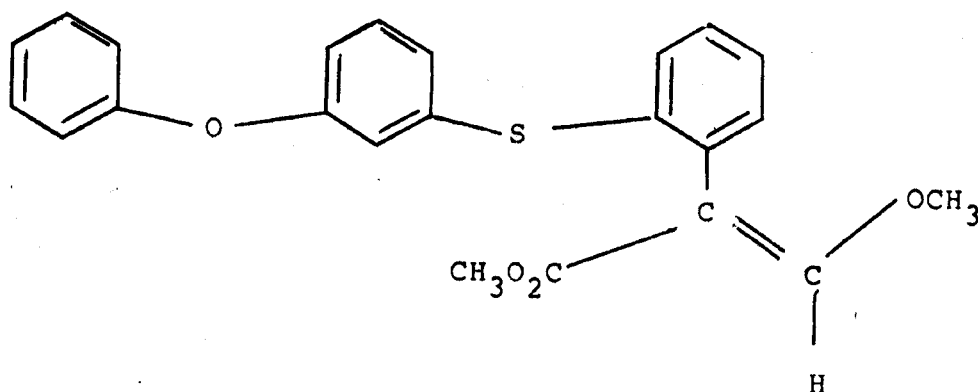
0,5 g (E)-metil-2-|2-(3-oksifenoksi)-fenil|-3-metoksi-pro-
penoato (gautø pagal 1 pavyzdyje aprašytà metodikà), 0,46 g ka -
lio karbonato, 0,23 g 2-chlorpirimidino ir 0,01 g vario chlori -
do 15 ml DMF mišinys 4 valandas virinamas su grįžtamu šaldytuvu.
Reakcijos mišinys atšaldomas, išpilamas į vandenį 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.

12 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, nustatius 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.

13 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. Vandenis 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 hidroklorido 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-oksifenil-tio)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 %-nė dispersija alyvoje, praplauta petrolio eteriu) 3 ml sauso DMF

0 - 5°C temperatūroje. Po to tirpalas paliekamas sušilti iki 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} ; $\text{M}^+ 316$

^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.

14 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.

15 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

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.

16 pavyzdys

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

1,365 g (0,0074 mol) 3-oksifipenilamino, 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.

17 pavyzdys

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

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-anilino fenoksi)fenil)-3-metoksi propenoato (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.

18 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 parūgštintas 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, pridama 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 -

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.

19 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} .

20 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 ekstrahuojamas 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} .

21 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.

Ši 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.

22 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.

23 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-

147

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.

24 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 pridedama 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 pridedama 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 junginių pagal pavadinimą ir atitinkamo (2)-izomero mišinio (1:1).

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

143

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} .

25 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 -

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 pridėdama 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} .

26 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 %-inė 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.

27 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-[-(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.

28 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 sūrymu, po to džiovinamas ir koncentruojamas, gaunant 3,12 g rudos spalvos riebalinio skysčio. Produktas išvalomas chromatogra-

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.

29 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 nešvaraus 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 hidrochloridą ir ekstrahuojama etilo acetatu. Organinės frakcijos džiovinamos ir nugarinamos, gaunant rudos spalvos riebalinį skystį. Produktas

642

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.

30 pavyzdys

(E)-metil-3-metoksi-2-(2-(3-benzoilfenoksi)fenil)propeno -
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 piridinio chlorchromato. Reakcijos mišinys 2,5 valandos maišomas kambario temperatūroje po to filtruojamas ir nugarinamas. Gaunama 8,48 g metil-2-(3-formilfenoksi)fenilacetato, oranžinės spalvos riebalinio skysčio, kuris pakankamai švarus, todėl toliau naudojamas 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 minutes sulašinama į atšaldytą ir maišomą 2,30 g aldehido iš prieš tai einančios pakopos tirpalą THF taip, kad temperatūra neviršytų -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 chlor - chromato 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.

31 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.

32 pavyzdys

(E)-metil-3-metoksi-2-(2-(3-(N-fenilsulfonamido)fenoksi)-fenil)propenoato 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

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 %-né 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%-né 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} .

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 %-tų 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 druskos) 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 neutralizuojami sočiu vandeniniu natrio bikarbonato tirpalu, džiovinami 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-metoksipropenoato tirpalo (0,5 ml) piridino kambario temperatūroje maišant sulašinama 0,05 ml anilino. Po 3 valandų reakcijos mišinys išpilamas į vandenį. Gautas mišinys lengvai parūgštinamas 2M druskos rūgštimi ir ekstrahuojamas eteriu. Eteriniai ekstraktai praplaunami sūrymu, džiovinami, koncentruojami ir chromatografuojami, išplaunant eteriu. Gaunama 0,145 g skaidraus riebalinio 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.

33 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.

34 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.

35 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.

36 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 %

37 pavyzdys

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

Junginys 212, 1 lentelė	5 %
Atapulgito granulės	95 %

38 pavyzdys

Kompozicija sėklų beicavimui gaunama, susmulkinant ir sumaišant tris komponentus.

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

39 pavyzdys

Dustas gaunamas sumalant ir sumaišant aktyvų komponentą su talku.

Junginys 212, 1 lentelė	5 %
Talkas	95 %

40 pavyzdys

Suspensinis koncentratas gaunamas sumalant komponentus rutuliniame malūne ir gaunant vandeninę 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.

41 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 %

42 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 varpinus 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.

6 lentele

Junginio Nr.	Lentelės Nr.	PUCCINIA RECONDITA (WHFAT) (kvičiai)	ERYSIPIE GRAMINIS (BARLEY) (miežiai)	VENTURIA INAFUALIS (APPLE) (obels)	PRICULARIA ORYZAE (RICE) (ryžiai)	CERCOSPOA ARACHIDICOLA (PEANUT) (žemės riešutai)	PLASMOPARA VITICOLA (VINE) (vynmedžiai)	PHYTOPHTHORA INFESTANS (TOMATO) (pomidorai)
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	0
21	I	4	4	0	0	4	4	4
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	3	4	4	2
25	I	4	3	4	3	4	4	3
27	I	4	0	4	4	3	4	3
29	I	4	3	4	0	4	4	3
38	I	4	3	3	4	4	4	4
38	II	4	4	4	4	2	4	3
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	4 _a	-	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 lentele (tėsinsys)

Junginio Nr.	Leitės Nr.	PUCCINIA - RECONDITA (WHEAT) (kviečiai)	ERYSIPHE GRAMINIS (BARLEY) (Miežiai)	VENTURIA INAEQUALIS (APPLE) (Obelsys)	PRICULARIA ORYZAE (RICE) (Ryžiai)	CERCOSPORA ARACHIDICOLA (PEANUT) (žemės riešutai)	PLASMOPIARA 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	4a	4
125	I	4	4	4	3	4	4	4
126	I	4	3	4	3	4	4	3
127	I	4	3	4	4	4	4	2

6 lentele (tėsinsys)

Junginio Nr.	Lentelės Nr.	PUCINIA RECONDITA (WHEAT) (Kviečiai)	ERYTHRE GRAMINIS (BARLEY) (Miežiai)	VENTURIA INAEQUALIS (APPLE) (Obels)	PERICULARIA ORYZAE (RICE) (Ryziai)	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	3a	-	0
157	I	3	3	4	3	4	0	0
171	I	4	4	4	4	3a	-	0
175	I	4	4	4	4	3	4	0
177	I	4	4	4	3	-	4	0
179	I	1	1	0	0	2	4	0
204	I	4	4	4	4	4a	-	0
205	I	4	4	4	4	3a	-	1
206	I	4	4	4	4	4	4	3
208	I	4	4	4	-	3	4	3
212	I	4	4	4	4	4	4	0
214	I	4	4	4	-	4	4	4
216	I	4	3	4	-	4	4	4
217	I	4	4	4	3	3a	-	0

6 lentele (tēsinys)

Junginio Nr.	Lentelēs Nr.	PUCCINIA RECONDITA (WHEAT) (Kviečiai)	ERYSIPHE GRAMINIS (BARLEY) (mieži)	VENTURIA INAEQUALIS (APPLE) (Obels)	PERICULARIA ORYZAE (RICE) (Ryži)	CERCOSPORA ARACHIDICOLA (PEANUT) (Zēnēs riešutai)	PLASMODIUM VITICOLA (VINE) (Vīnmedži)	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	4	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 lentele (tėsins)

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)
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	3
380	I	3	4	0	4	4	4	4
381	I	3	4	0	4	4	4	3
382	I	4	4	4	3	4	4	4
383	I	4	3	4	4	4	4	2
384	I	4	4	4	4	4	4	0
385	I	4	1	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	4	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

6 lentele (tėsinys)

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)	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	4	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

		Puccinia Recondita (Wheat)	Erysiphe Graminis (Barley)	Venturia Inaequalis (Apples)	Pyricularia Oryzae (Rice)	Cercospora Arachidicola (Peanut)	Plasmopara 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)	ERYSIPIE GRAMINIS (BARLEY) (miežiai)	VENTURIA INAEQUALIS (APPLES) (Obelys)	PYRICULARIA ORYZAE (RICE) (Ryžiai)	CERCOSPORA ARACHIDICOLA (PEANUT) (žemės riešutai)	PLASMO PARA VITICOLA (VINES) (Vynmedžiai)	PHYTOPTHORA 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

6 lentele (tęsinys)

Junginio Nr.	Lentelės Nr.	PUCCINIA RECONDITA (WHEAT) (Kviečiai)	ERYSIPHE GRAMINIS (BARLEY) (Miežiai)	VENTURIA INAEQUALIS (APPLES) (Obelys)	PHYRICULARIA ORYZAE (RICE) (Ryžiai)	CERCOSPORA ARACIDICOLA (PEANUT) (Žemės riešutai)	PLASMOPIRA 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

167

6 lentelė (tęsinys)

Junginio Nr.	Lentelės Nr.	PUCCINIA RECONDITA (WHEAT) (Kviečiai)	ERYSIPIE GRAMINIS (BARLEY) (Miežiai)	VENTURIA INAEQUALIS (APPLES) (Obels)	PHYCULARIA ORYZAE (RICE) (Ryžiai)	CERCOSPORA ARACHIDICOLA (PEANUT) (žemės riešutai)	PLASMOPIARA VITICOLA (VINES) (Vynmedžiai)	PHYTOPIHTHORA 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 (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)
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	Oe	Oe	4e	Oe	Oe	-	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

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)
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 Lentele (tėsinsys)

Junginio, Nr.	Lentelės Nr.	PUCCINIA RECONDITA (WHEAT) (Kviečiai)	ERYSPHE GRAMINIS (BARLEY) (Miežiai)	VENTURIA INAEQUALIS (APPLES) (Obelys)	PRICULARIA ORYZAE (RICE) (Ryžiai)	CERCOSPORA ARACHIDICOLA (PEANUT) (Žemės riešutai)	PLASMOPIARA VITICOLA (VINES) (Vynmedžiai)	PHYTOPIHTHORA 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

6 lentes (tēsins)

Junginio Nr.	Lentes 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)
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)

Dujinio	Lentelės	PUCCINIA RECONDITA (WHEAT) (Kviečiai)	ERYTHRE GRAMINIS (BARLEY) (Miežiai)	VENTURIA INAEQUALIS (APPLES) (Obelys)	PYRICULARIA ORYZAE (RICE) (Ryžiai)	CERCOSPORA ARACHIDICOLA (PEANUT) (Žemės riešutai)	PLASMOPARA VITICOLA (VINES) (Vynmedžiai)	PHYTOPHTHORA INFESTANS (TOMATOES) (Pomidorai)
Nr.	Nr.							
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.

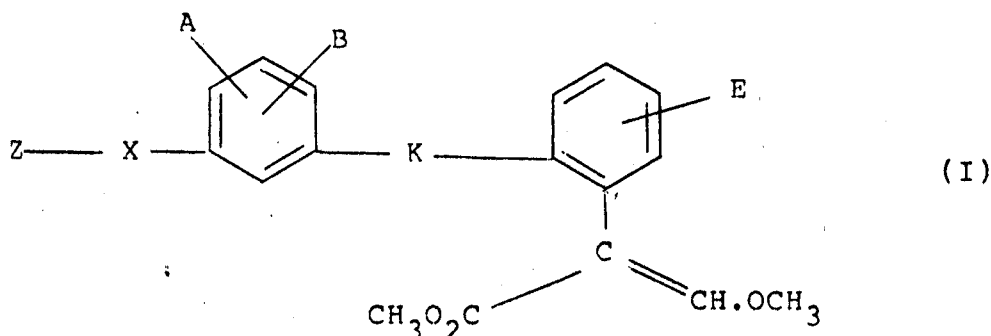
6 lentelė (tęsinys)

Junginio COMPOUND	Lentelės TABLE NO	PICCINIA RECONDITA WHEAT (kviečiai)	ERYSIPIE GRAHINIS HORDEI BARLEY (miežiai)	VENTURIA INAEQUALIS APPLE (obels)	PYRICULARIA ORYZAE RICE (ryžiai)	CERCOSPORA ARCHIDICOLA PEANUT (žemės riešutai)	PLASHPARA VITICOLA VINE (Vynmedžiai)	PHYTOPHTHORA INFESTANS TOMATO (Pūdorai)
104	II	4	2	4	2	4	4	4
23	I	4f	-	4f	2f	3f	4f	4f

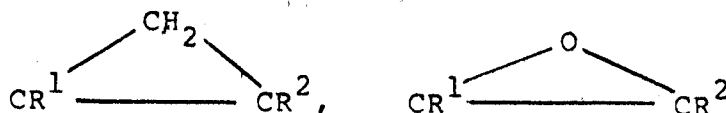
f = 5 m.d. lapų apipurskimas

IŠRADIMO APIBRĖŽTIS

1. Propeno rūgšties darinių, kurių formulė (I):



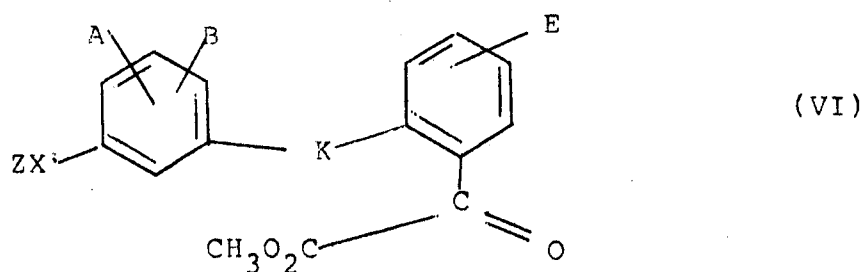
gavimo būdas, kur K yra deguonis arba sieros atomas, Z - nepakeistas arba pakeistas arilas arba nepakeistas arba pakeistas heteroarilas; X yra O, S(O)_n, NR⁴, CR¹R², CHR⁵, CO, CR¹(OR²), C=CR¹R², CHR¹CHR², CR¹=CR², CHR¹CR²=CH, C≡C, OCHR¹, CHR¹O, OCHR¹O, S(O)_nCHR¹, S(O)_nCHR¹O, CHR¹S(O)_n, CHR¹OSO₂, NR⁴CHR¹,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



CONR⁴, OCONR⁴, NR⁴CO, CSNR⁴, OCS.NR⁴, SCO7NR⁴, 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 tokie patys arba skirtingi, yra vandenilis, halogenas, oksis, C₁₋₄ alkilas, C₁₋₄alkoksi, C₁₋₄

halogenalkilas, C_{1-4} halogenalkoksi, C_{1-4} alkilkarbonilas, C_{1-4} alkoksikarbonilas, fenoksi, nitro arba ciano; R^1 , R^2 ir R^3 , kurie gali būti tokis patys arba skirtingi, yra vandenilis, C_{1-4} alkilas arba fenilas; R^4 yra vandenilis, 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 nepakeistas fenilas, o X ir K yra deguonis, A, B ir E visi nėra vandenilis, b e s i s k i r i a n t i s tuo, kad ketoesteris, kurio formulė (VI):



kur A, B, Z, X, K ir E yra pažymėti aukščiau, yra veikiamas metoksinančia medžiaga.