



(12) BẢN MÔ TẢ SÁNG CHẾ THUỘC BẰNG ĐỘC QUYỀN SÁNG CHẾ

(19) Cộng hòa xã hội chủ nghĩa Việt Nam (VN)
CỤC SỞ HỮU TRÍ TUỆ

(11)



1-0049011

(51)^{2020.01} C07D 239/49; A01N 43/48; A01N
47/08; C07D 213/16; C07D 213/56;
A01N 43/40; C07C 323/33

(13) B

(21) 1-2021-06098

(22) 31/08/2020

(86) PCT/CN2020/000198 31/08/2020

(87) WO 2021/056922 01/04/2021

(30) 201910900234.4 23/09/2019 CN; 202010796915.3 10/08/2020 CN

(45) 25/07/2025 448

(43) 25/08/2022 413A

(73) SHANDONG KANGQIAO BIO-TECHNOLOGY CO., LTD (CN)

Luyi Town Industrial Park, Boxing County, Binzhou, Shandong, 256500 China

(72) LI, Ning (CN); LIU, Yingshuai (CN); LI, Xianjiang (CN); XIAO, Jian (CN); LIU, Xiangwei (CN); LIU, Ruibin (CN); SHENG, Guozhu (CN); FENG, Ruijie (CN); XIANG, Xiaozhong (CN); CUI, Yingrui (CN); CHEN, Yu (CN); WANG, Shiling (CN).

(74) Văn phòng Luật sư Ân Nam (ANNAM IP & LAW)

(54) ARYL SULFUA CHỨA CẤU TRÚC BENZYLAMIN, PHƯƠNG PHÁP ĐIỀU CHẾ VÀ CHẾ PHẨM NÔNG NGHIỆP CHỨA HỢP CHẤT NÀY

(21) 1-2021-06098

(57) Sáng chế thuộc lĩnh vực kỹ thuật về thuốc diệt sinh vật gây hại và cụ thể là đề cập đến aryl sulfua chứa cấu trúc benzylamin, phương pháp tổng hợp và việc sử dụng nó. Aryl sulfua được chỉ rõ là hợp chất I. Cũng được đề xuất là muối có thể chấp nhận trong nông nghiệp của aryl sulfua. Hợp chất có công thức I có hiệu quả tuyệt vời đối với nhiều sinh vật gây hại khác nhau, đặc biệt là ve nhện đại diện là *Tetranychus cinnabarinus*, *Tetranychus urticae*, *Tetranychus Kanzawai* Kishida, *Panonychus citri*, v.v. và có thể sử dụng để kiểm soát tất cả các loài ve gây hại.

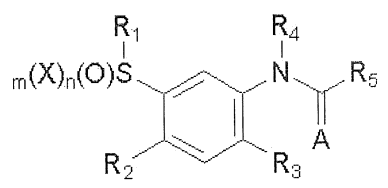
Lĩnh vực kỹ thuật được đề cập

Sáng chế đề cập đến lĩnh vực thuốc trừ sâu, và cụ thể hơn là đề cập đến aryl sulfua chứa benzylamin, phương pháp tổng hợp và ứng dụng của nó.

Tình trạng kỹ thuật của sáng chế

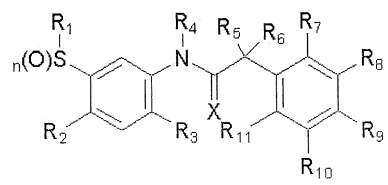
Các tài liệu sáng chế WO9955668A, CN104995193A, CN105517995A, JP2015036377A, CN103664811B, US2017226107A, WO2018051252A, TW201127291A, CN108290886A, JP2011042611A, JP2011219419A, JP2015036377A và v.v. ghi chép các dẫn xuất của aryl sulfoxit có hiệu quả kiểm soát sinh vật gây hại.

Hợp chất có công thức chung sau đây được công bố trong bằng sáng chế Nhật Bản JP2011-42611A bởi công ty Japan Soda Co., Ltd. có hoạt tính diệt ve:



trong đó A là oxy hoặc lưu huỳnh, R₅ là C₁₋₂₀ alkyl được thế hoặc không được thế, amino được thế hoặc không được thế, chất dị vòng nitơ, v.v..

Hợp chất có công thức chung sau đây được công bố trong công bố sáng chế WO2018015852 (CN109803956A) bởi Insecticide (India) Co., Ltd. có hoạt tính diệt ve:



trong đó R₄ đại diện cho hydro, formyl, C₁₋₆ alkyl, hoặc tương tự; R₅ và R₆ giống nhau hoặc khác nhau và tại mỗi lần xuất hiện đại diện cho hydro, halogen, C₁₋₆ alkyl, hoặc tương tự; R₇, R₈, R₉, R₁₀, R₁₁ giống nhau hoặc khác nhau và tại mỗi lần xuất hiện đại diện cho hydro, halogen, hoặc tương tự; X là oxy hoặc lưu huỳnh.

Trong kỹ thuật liên quan, hợp chất có công thức chung I theo sáng chế và hoạt

tính diệt ve của nó chưa được báo cáo.

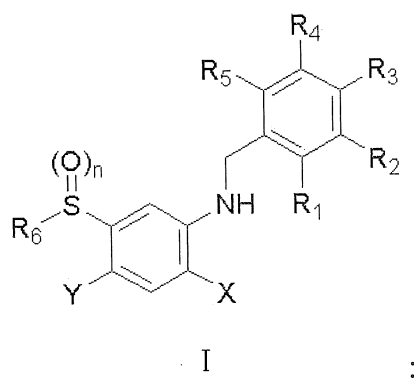
Hợp chất hoạt hóa được đề cập trong các tài liệu ở trên có hoạt tính thấp trong việc kiểm soát các sinh vật gây hại, đặc biệt là ve. Cụ thể là, tại liều lượng sử dụng thấp, hoạt tính diệt ve của nó không đạt yêu cầu, và hiệu quả kiểm soát *Tetranychus* kháng thuốc là rất kém. Do đó, cần phải có các loại thuốc mới có hiệu quả cao, độc tính thấp và có hiệu quả tốt trong tiêu diệt ve kháng thuốc trong sản xuất nông nghiệp.

Bản chất kỹ thuật của sáng chế

Bởi vì hoạt tính diệt ve kém trong việc kiểm soát ve trong kỹ thuật trước đây, sáng chế đề xuất aryl sulfua chứa benzylamin và phương pháp tổng hợp và việc sử dụng của nó. Để nghiên cứu phát triển tác nhân kiểm soát sinh vật gây hại có đặc tính lý tưởng, tác giả sáng chế đã tổng hợp nhiều dẫn xuất aryl sulfua khác nhau và tiến hành nghiên cứu chuyên sâu về hoạt tính sinh học của nó. Kết quả cho thấy rằng các dẫn xuất aryl sulfua có công thức chung dưới đây có hiệu quả tuyệt vời trên nhiều loại sinh vật gây hại khác nhau, đặc biệt là trên *Tetranychus cinnabarinus*, *Tetranychus urticae*, *Tetranychus kanzawai*, *Panonychus citri*, và tương tự.

Mô tả chi tiết sáng chế

Sáng chế đề xuất là aryl sulfua chứa benzylamin có công thức I, hoặc muối chấp nhận được trong nông nghiệp của nó:



trong đó:

n là 0, 1 hoặc 2;

X và Y tại mỗi lần xuất hiện đại diện cho hydro, flo, clo, brom, iot, nhóm xyano, C₁₋₄ alkyl, C₁₋₄ haloalkyl, C₁₋₄ alkoxy hoặc C₁₋₄ haloalkoxy;

R₁, R₂, R₃, R₄, và R₅ tại mỗi lần xuất hiện đại diện cho hydro, flo, clo, brom, iot,

nhóm xyano, nitro, amino, hydroxymetyl, cacboxyl, hydroxyl, sulfydryl, C₁₋₁₀ alkyl, C₁₋₁₀ haloalkyl, C₁₋₁₀ alkoxy, C₁₋₁₀ haloalkoxy, C₁₋₁₀ alkoxycacbonyl, C₁₋₁₀ haloalkoxycacbonyl, C₁₋₁₀ alkylsulfonyloxy, C₁₋₁₀ alkylsulfonyl, C₁₋₁₀ alkylthiol, C₁₋₁₀ haloalkylthiol, C₂₋₁₀ etoxycacbonyl, C₁₋₁₀ alkyl cacbonyl, amino cacbonyl, C₁₋₁₀ N-alkyl cacbonyl, N, N-dimethylcacbonyl, N, N-dimethylthiocacbonyl, C₁₋₁₀ N-alkyl thiocacbonyl, 2-oxoprooxycacbonyl, metoxymetoxycacbonyl; và

R₆ đại diện cho C₁₋₆ haloalkyl, C₂₋₆ alkynyl, C₂₋₆ alkenyl, C₁₋₆ alkyl, C₃₋₆ xycloalkyl, C₃₋₆ epoxy alkyl.

Trong một loại của phương án này, trong công thức I,

n là 0 hoặc 1;

X là flo, clo, hoặc metyl;

Y là clo hoặc metyl;

R₁ là hydro, flo, clo, brom, hydroxyl, nitro, hydroxymetyl, nhóm xyano, triflometyl, C₁₋₃ alkyl, C₁₋₄ alkoxycacbonyl, axetyl, propionyl, C₁₋₃ alkoxy, etylthio, 2-floetanthioxy, 2-cloetanthioxy, 2,2-difloetylthio, 2,2,2-trifloetylthio, propylthio, 2,2,2-trifloetylsulfinyl, vinyloxycacbonyl, 2,2, 2-trifloetoxycacbonyl, hoặc N-metylcacbonyl;

R₂ là hydro, flo, hoặc clo;

R₃ là hydro, flo, clo, brom, hoặc nhóm xyano;

R₄ và R₅ tại mỗi lần xuất hiện đại diện cho hydro; và

R₆ là N-propyl hoặc 2,2,2-trifloetyl.

Trong một loại của phương án này, trong công thức I,

n là 0 hoặc 1;

X là flo;

Y là clo hoặc metyl;

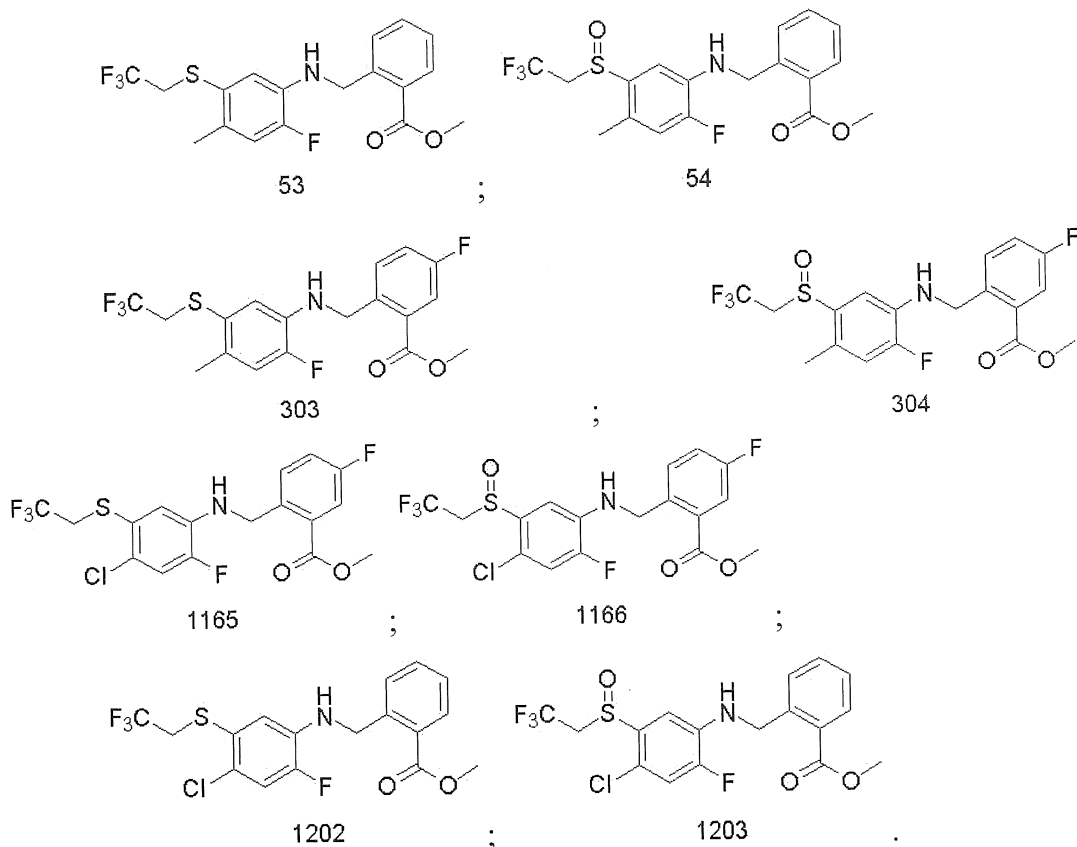
R₁ là metoxycacbonyl, etoxycacbonyl, etylthio, hoặc 2,2,2-trifloetylthio;

R₂, R₄, và R₅ tại mỗi lần xuất hiện đại diện cho hydro;

R₃ là hydro, flo, clo, hoặc nhóm xyano; và

R₆ là 2,2,2-trifloetyl.

Trong một loại của phương án này, công thức I bao gồm:



Các hợp chất tiêu biểu của công thức chung I của sáng chế được trình bày trong bảng 1. Tuy nhiên, các hợp chất trong sáng chế không chỉ giới hạn ở các hợp chất được liệt kê ở đây. Ngoài ra, hàng loạt các hợp chất tương đương cũng được liệt kê trong bảng 1.

Theo loại của phân tử thể, hợp chất của dẫn xuất aryl sulfua và dẫn xuất aryl lưu huỳnh oxit theo sáng chế ở dạng đồng phân hình học loại E và loại Z, và hợp chất theo sáng chế chứa loại E, loại Z hoặc hỗn hợp của chúng theo tỷ lệ bất kỳ.

Các chữ viết tắt sau đây trong bảng 1 lần lượt dùng để chỉ các nhóm sau đây:

Me: metyl;

Et: etyl;

tBU: tert butyl;

CF₃: triflometyl;

AC: nhóm axetyl;

nPropyl: n-propyl;

isopropyl: Isopropyl;

nButyl: n-butyl;

nPentyl: n-amyl;

nHexyl: n-hexyl;

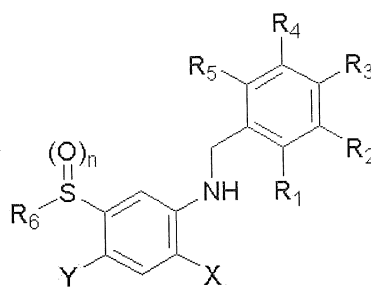
nHeptyl: n-heptyl;

nOctyl: n-octyl;

nNonyl: nonyl;

nDecyl: n-decyl.

Bảng 1: Danh sách các hợp chất



I

;

STT	X	Y	n	R ₁	R ₂	R ₃	R ₄	R ₅	R ₆
1	F	Me	0	Me	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
2	F	Me	1	Me	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
3	F	Me	0	CF ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
4	F	Me	1	CF ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
5	F	Me	0	Et	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
6	F	Me	1	Et	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
7	F	Me	0	nPropyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
8	F	Me	1	nPropyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
9	F	Me	0	isopropyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
10	F	Me	1	isopropyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
11	F	Me	0	nButyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
12	F	Me	1	nButyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
13	F	Me	0	nPentyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
14	F	Me	1	nPentyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
15	F	Me	0	nHexyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃

16	F	Me	1	nHexyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
17	F	Me	0	nHeptyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
18	F	Me	1	nHeptyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
19	F	Me	0	nOctyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
20	F	Me	1	nOctyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
21	F	Me	0	nNonyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
22	F	Me	1	nNonyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
23	F	Me	0	nDecyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
24	F	Me	1	nDecyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
25	F	Me	0	F	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
26	F	Me	1	F	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
27	F	Me	0	Cl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
28	F	Me	1	Cl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
29	F	Me	0	Br	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
30	F	Me	1	Br	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
31	F	Me	0	I	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
32	F	Me	1	I	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
33	F	Me	0	CN	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
34	F	Me	1	CN	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
35	F	Me	0	NO ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
36	F	Me	1	NO ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
37	F	Me	0	NH ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
38	F	Me	1	NH ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
39	F	Me	0	CH ₂ OH	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
40	F	Me	1	CH ₂ OH	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
41	F	Me	0	COCH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
42	F	Me	1	COCH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
43	F	Me	0	COCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
44	F	Me	1	COCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
45	F	Me	0	COCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
46	F	Me	1	COCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
47	F	Me	0	COCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
48	F	Me	1	COCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
49	F	Me	0	COCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
50	F	Me	1	COCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
51	F	Me	0	COOH	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
52	F	Me	1	COOH	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
53	F	Me	0	CO ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
54	F	Me	1	CO ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃

55	F	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
56	F	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
57	F	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
58	F	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
59	F	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
60	F	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
61	F	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
62	F	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
63	F	Me	0	CO ₂ CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
64	F	Me	1	CO ₂ CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
65	F	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
66	F	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
67	F	Me	0	CO ₂ CH=CH ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
68	F	Me	1	CO ₂ CH=CH ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
69	F	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH=CH ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
70	F	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH=CH ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
71	F	Me	0	CO ₂ CH ₂ CF ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
72	F	Me	1	CO ₂ CH ₂ CF ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
73	F	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ Cl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
74	F	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ Cl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
75	F	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ Br	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
76	F	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ Br	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
77	F	Me	0	CO ₂ CH ₂ OCH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
78	F	Me	1	CO ₂ CH ₂ COCH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
79	F	Me	0	CONH ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
80	F	Me	1	CONH ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
81	F	Me	0	CONHCH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
82	F	Me	1	CONHCH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
83	F	Me	0	CON(CH ₃) ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
84	F	Me	1	CON(CH ₃) ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
85	F	Me	0	CONHCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
86	F	Me	1	CONHCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
87	F	Me	0	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
88	F	Me	1	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
89	F	Me	0	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
90	F	Me	1	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃

91	F	Me	0	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
92	F	Me	1	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
93	F	Me	0	OH	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
94	F	Me	1	OH	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
95	F	Me	0	OCH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
96	F	Me	1	OCH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
97	F	Me	0	OCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
98	F	Me	1	OCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
99	F	Me	0	OCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
100	F	Me	1	OCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
101	F	Me	0	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
102	F	Me	1	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
103	F	Me	0	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ C H ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
104	F	Me	1	SH	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
105	F	Me	0	SH	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
106	F	Me	1	SCH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
107	F	Me	0	SCH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
108	F	Me	1	SCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
109	F	Me	0	SCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
110	F	Me	1	SCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
111	F	Me	0	SCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
112	F	Me	1	SCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
113	F	Me	0	SCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
114	F	Me	1	SCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ C H ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
115	Me	Me	0	Me	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
116	Me	Me	1	Me	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
117	Me	Me	0	CF ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
118	Me	Me	1	CF ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
119	Me	Me	0	Et	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
120	Me	Me	1	Et	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
121	Me	Me	0	nPropyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
122	Me	Me	1	nPropyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
123	Me	Me	0	isopropyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
124	Me	Me	1	isopropyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
125	Me	Me	0	nButyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
126	Me	Me	1	nButyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
127	Me	Me	0	nPentyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
128	Me	Me	1	nPentyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃

129	Me	Me	0	nHexyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
130	Me	Me	1	nHexyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
131	Me	Me	0	nHeptyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
132	Me	Me	1	nHeptyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
133	Me	Me	0	nOctyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
134	Me	Me	1	nOctyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
135	Me	Me	0	nNonyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
136	Me	Me	1	nNonyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
137	Me	Me	0	nDecyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
138	Me	Me	1	nDecyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
139	Me	Me	0	F	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
140	Me	Me	1	F	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
141	Me	Me	0	Cl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
142	Me	Me	1	Cl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
143	Me	Me	0	Br	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
144	Me	Me	1	Br	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
145	Me	Me	0	I	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
146	Me	Me	1	I	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
147	Me	Me	0	CN	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
148	Me	Me	1	CN	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
149	Me	Me	0	NO ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
150	Me	Me	1	NO ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
151	Me	Me	0	NH ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
152	Me	Me	1	NH ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
153	Me	Me	0	CH ₂ OH	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
154	Me	Me	1	CH ₂ OH	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
155	Me	Me	0	COCH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
156	Me	Me	1	COCH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
157	Me	Me	0	COCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
158	Me	Me	1	COCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
159	Me	Me	0	COCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
160	Me	Me	1	COCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
161	Me	Me	0	COCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
162	Me	Me	1	COCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
163	Me	Me	0	COCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
164	Me	Me	1	COCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
165	Me	Me	0	COOH	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
166	Me	Me	1	COOH	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
167	Me	Me	0	CO ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃

168	Me	Me	1	CO ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
169	Me	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
170	Me	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
171	Me	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
172	Me	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
173	Me	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
174	Me	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
175	Me	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
176	Me	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
177	Me	Me	0	CO ₂ CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
178	Me	Me	1	CO ₂ CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
179	Me	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
180	Me	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
181	Me	Me	0	CO ₂ CH=CH ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
182	Me	Me	1	CO ₂ CH=CH ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
183	Me	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH=CH ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
184	Me	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH=CH ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
185	Me	Me	0	CO ₂ CH ₂ CF ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
186	Me	Me	1	CO ₂ CH ₂ CF ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
187	Me	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ Cl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
188	Me	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ Cl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
189	Me	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ Br	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
190	Me	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ Br	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
191	Me	Me	0	CO ₂ CH ₂ OCH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
192	Me	Me	1	CO ₂ CH ₂ COCH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
193	Me	Me	0	CONH ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
194	Me	Me	1	CONH ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
195	Me	Me	0	CONHCH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
196	Me	Me	1	CONHCH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
197	Me	Me	0	CON(CH ₃) ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
198	Me	Me	1	CON(CH ₃) ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
199	Me	Me	0	CONHCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
200	Me	Me	1	CONHCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
201	Me	Me	0	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
202	Me	Me	1	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
203	Me	Me	0	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
204	Me	Me	1	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃

				CH ₃					
205	Me	Me	0	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
206	Me	Me	1	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
207	Me	Me	0	OH	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
208	Me	Me	1	OH	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
209	Me	Me	0	OCH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
210	Me	Me	1	OCH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
211	Me	Me	0	OCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
212	Me	Me	1	OCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
213	Me	Me	0	OCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
214	Me	Me	1	OCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
215	Me	Me	0	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
216	Me	Me	1	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
217	Me	Me	0	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ C H ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
218	Me	Me	1	SH	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
219	Me	Me	0	SH	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
220	Me	Me	1	SCH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
221	Me	Me	0	SCH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
222	Me	Me	1	SCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
223	Me	Me	0	SCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
224	Me	Me	1	SCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
225	Me	Me	0	SCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
226	Me	Me	1	SCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
227	Me	Me	0	SCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
228	Me	Me	1	SCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
229	F	Me	0	H	F	H	H	H	CH ₂ CF ₃
230	F	Me	1	H	F	H	H	H	CH ₂ CF ₃
231	F	Me	0	H	Cl	H	H	H	CH ₂ CF ₃
232	F	Me	1	H	Cl	H	H	H	CH ₂ CF ₃
233	F	Me	0	H	Br	H	H	H	CH ₂ CF ₃
234	F	Me	1	H	Br	H	H	H	CH ₂ CF ₃
235	F	Me	0	H	I	H	H	H	CH ₂ CF ₃
236	F	Me	1	H	I	H	H	H	CH ₂ CF ₃
237	F	Me	0	H	Me	H	H	H	CH ₂ CF ₃
238	F	Me	1	H	Me	H	H	H	CH ₂ CF ₃
239	F	Me	0	H	OCH ₃	H	H	H	CH ₂ CF ₃
240	F	Me	1	H	OCH ₃	H	H	H	CH ₂ CF ₃
241	F	Me	0	H	NO ₂	H	H	H	CH ₂ CF ₃
242	F	Me	1	H	NO ₂	H	H	H	CH ₂ CF ₃

243	F	Me	0	H	CN	H	H	H	CH ₂ CF ₃
244	F	Me	1	H	CN	H	H	H	CH ₂ CF ₃
245	F	Me	0	H	CO ₂ C H ₃	H	H	H	CH ₂ CF ₃
246	F	Me	1	H	CO ₂ C H ₃	H	H	H	CH ₂ CF ₃
247	F	Me	0	H	Cl	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
248	F	Me	1	H	Cl	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
249	F	Me	0	H	F	CL	H	H	CH ₂ CF ₃
250	F	Me	1	H	F	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
251	F	Me	0	H	Br	H	F	H	CH ₂ CF ₃
252	F	Me	1	H	Br	H	F	H	CH ₂ CF ₃
253	F	Me	0	Me	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
254	F	Me	1	Me	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
255	F	Me	0	Et	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
256	F	Me	1	Et	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
257	F	Me	0	nPropyl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
258	F	Me	1	nPropyl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
259	F	Me	0	isopropyl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
260	F	Me	1	isopropyl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
261	F	Me	0	nButyl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
262	F	Me	1	nButyl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
263	F	Me	0	nPentyl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
264	F	Me	1	nPentyl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
265	F	Me	0	nHexyl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
266	F	Me	1	nHexyl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
267	F	Me	0	nHeptyl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
268	F	Me	1	nHeptyl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
269	F	Me	0	nOctyl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
270	F	Me	1	nOctyl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
271	F	Me	0	nNonyl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
272	F	Me	1	nNonyl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
273	F	Me	0	nDecyl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
274	F	Me	1	nDecyl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
275	F	Me	0	F	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
276	F	Me	1	F	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
277	F	Me	0	Cl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
278	F	Me	1	Cl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
279	F	Me	0	Br	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
280	F	Me	1	Br	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
281	F	Me	0	I	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃

282	F	Me	1	I	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
283	F	Me	0	CN	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
284	F	Me	1	CN	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
285	F	Me	0	NO ₂	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
286	F	Me	1	NO ₂	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
287	F	Me	0	NH ₂	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
288	F	Me	1	NH ₂	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
289	F	Me	0	CH ₂ OH	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
290	F	Me	1	CH ₂ OH	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
291	F	Me	0	COCH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
292	F	Me	1	COCH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
293	F	Me	0	COCH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
294	F	Me	1	COCH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
295	F	Me	0	COCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
296	F	Me	1	COCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
297	F	Me	0	COCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
298	F	Me	1	COCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
299	F	Me	0	COCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
300	F	Me	1	COCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
301	F	Me	0	COOH	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
302	F	Me	1	COOH	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
303	F	Me	0	CO ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
304	F	Me	1	CO ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
305	F	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
306	F	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
307	F	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
308	F	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
309	F	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH 3	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
310	F	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH 3	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
311	F	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH 2CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
312	F	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH 2CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
313	F	Me	0	CO ₂ CH(CH ₃) ₂	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
314	F	Me	1	CO ₂ CH(CH ₃) ₂	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
315	F	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH(CH ₃) ₂	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
316	F	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH(CH ₃) ₂	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
317	F	Me	0	CO ₂ CH=CH ₂	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃

318	F	Me	1	CO ₂ CH=CH ₂	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
319	F	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH=CH ₂	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
320	F	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH=CH ₂	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
321	F	Me	0	CO ₂ CH ₂ CF ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
322	F	Me	1	CO ₂ CH ₂ CF ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
323	F	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ Cl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
324	F	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ Cl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
325	F	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ Br	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
326	F	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ Br	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
327	F	Me	0	CO ₂ CH ₂ OCH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
328	F	Me	1	CO ₂ CH ₂ COCH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
329	F	Me	0	CONH ₂	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
330	F	Me	1	CONH ₂	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
331	F	Me	0	CONHCH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
332	F	Me	1	CONHCH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
333	F	Me	0	CON(CH ₃) ₂	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
334	F	Me	1	CON(CH ₃) ₂	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
335	F	Me	0	CONHCH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
336	F	Me	1	CONHCH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
337	F	Me	0	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
338	F	Me	1	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
339	F	Me	0	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
340	F	Me	1	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
341	F	Me	0	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
342	F	Me	1	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
343	F	Me	0	CSNHCH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
344	F	Me	1	CSNHCH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
345	F	Me	0	CSN(CH ₃) ₂	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
346	F	Me	1	CSN(CH ₃) ₂	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
347	F	Me	0	CSNHCH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
348	F	Me	1	CSNHCH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
349	F	Me	0	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
350	F	Me	1	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
351	F	Me	0	OH	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
352	F	Me	1	OH	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
353	F	Me	0	OCH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
354	F	Me	1	OCH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
355	F	Me	0	OCH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃

356	F	Me	1	OCH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
357	F	Me	0	OCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
358	F	Me	1	OCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
359	F	Me	0	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
360	F	Me	1	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
361	F	Me	0	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ C H ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
362	F	Me	1	SH	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
363	F	Me	0	SH	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
364	F	Me	1	SCH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
365	F	Me	0	SCH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
366	F	Me	1	SCH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
367	F	Me	0	SCH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
368	F	Me	1	SCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
369	F	Me	0	SCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
370	F	Me	1	SCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
371	F	Me	0	SCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
372	F	Me	1	SCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ C H ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
373	Me	Me	0	Me	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
374	Me	Me	1	Me	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
375	Me	Me	0	Et	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
376	Me	Me	1	Et	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
377	Me	Me	0	nPropyl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
378	Me	Me	1	nPropyl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
379	Me	Me	0	isopropyl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
380	Me	Me	1	isopropyl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
381	Me	Me	0	nButyl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
382	Me	Me	1	nButyl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
383	Me	Me	0	nPentyl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
384	Me	Me	1	nPentyl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
385	Me	Me	0	nHexyl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
386	Me	Me	1	nHexyl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
387	Me	Me	0	nHeptyl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
388	Me	Me	1	nHeptyl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
389	Me	Me	0	nOctyl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
390	Me	Me	1	nOctyl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
391	Me	Me	0	nNonyl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
392	Me	Me	1	nNonyl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
393	Me	Me	0	nDecyl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
394	Me	Me	1	nDecyl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃

395	Me	Me	0	F	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
396	Me	Me	1	F	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
397	Me	Me	0	Cl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
398	Me	Me	1	Cl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
399	Me	Me	0	Br	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
400	Me	Me	1	Br	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
401	Me	Me	0	I	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
402	Me	Me	1	I	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
403	Me	Me	0	CN	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
404	Me	Me	1	CN	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
405	Me	Me	0	NO ₂	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
406	Me	Me	1	NO ₂	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
407	Me	Me	0	NH ₂	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
408	Me	Me	1	NH ₂	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
409	Me	Me	0	CH ₂ OH	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
410	Me	Me	1	CH ₂ OH	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
411	Me	Me	0	COCH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
412	Me	Me	1	COCH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
413	Me	Me	0	COCH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
414	Me	Me	1	COCH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
415	Me	Me	0	COCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
416	Me	Me	1	COCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
417	Me	Me	0	COCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
418	Me	Me	1	COCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
419	Me	Me	0	COCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
420	Me	Me	1	COCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
421	Me	Me	0	COOH	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
422	Me	Me	1	COOH	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
423	Me	Me	0	CO ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
424	Me	Me	1	CO ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
425	Me	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
426	Me	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
427	Me	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
428	Me	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
429	Me	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH 3	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
430	Me	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH 3	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
431	Me	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH 2CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃

432	Me	Me	1	$\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	F	H	H	CH_2CF_3
433	Me	Me	0	$\text{CO}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	F	H	H	CH_2CF_3
434	Me	Me	1	$\text{CO}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	F	H	H	CH_2CF_3
435	Me	Me	0	$\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	F	H	H	CH_2CF_3
436	Me	Me	1	$\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	F	H	H	CH_2CF_3
437	Me	Me	0	$\text{CO}_2\text{CH}=\text{CH}_2$	H	F	H	H	CH_2CF_3
438	Me	Me	1	$\text{CO}_2\text{CH}=\text{CH}_2$	H	F	H	H	CH_2CF_3
439	Me	Me	0	$\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}=\text{CH}_2$	H	F	H	H	CH_2CF_3
440	Me	Me	1	$\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}=\text{CH}_2$	H	F	H	H	CH_2CF_3
441	Me	Me	0	$\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CF}_3$	H	F	H	H	CH_2CF_3
442	Me	Me	1	$\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CF}_3$	H	F	H	H	CH_2CF_3
443	Me	Me	0	$\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{Cl}$	H	F	H	H	CH_2CF_3
444	Me	Me	1	$\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{Cl}$	H	F	H	H	CH_2CF_3
445	Me	Me	0	$\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{Br}$	H	F	H	H	CH_2CF_3
446	Me	Me	1	$\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{Br}$	H	F	H	H	CH_2CF_3
447	Me	Me	0	$\text{CO}_2\text{CH}_2\text{OCH}_3$	H	F	H	H	CH_2CF_3
448	Me	Me	1	$\text{CO}_2\text{CH}_2\text{COCH}_3$	H	F	H	H	CH_2CF_3
449	Me	Me	0	CONH_2	H	F	H	H	CH_2CF_3
450	Me	Me	1	CONH_2	H	F	H	H	CH_2CF_3
451	Me	Me	0	CONHCH_3	H	F	H	H	CH_2CF_3
452	Me	Me	1	CONHCH_3	H	F	H	H	CH_2CF_3
453	Me	Me	0	$\text{CON}(\text{CH}_3)_2$	H	F	H	H	CH_2CF_3
454	Me	Me	1	$\text{CON}(\text{CH}_3)_2$	H	F	H	H	CH_2CF_3
455	Me	Me	0	$\text{CONHCH}_2\text{CH}_3$	H	F	H	H	CH_2CF_3
456	Me	Me	1	$\text{CONHCH}_2\text{CH}_3$	H	F	H	H	CH_2CF_3
457	Me	Me	0	$\text{CONHCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	F	H	H	CH_2CF_3
458	Me	Me	1	$\text{CONHCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	F	H	H	CH_2CF_3
459	Me	Me	0	$\text{CONHCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	F	H	H	CH_2CF_3
460	Me	Me	1	$\text{CONHCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	F	H	H	CH_2CF_3
461	Me	Me	0	$\text{CONHCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	F	H	H	CH_2CF_3
462	Me	Me	1	$\text{CONHCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	F	H	H	CH_2CF_3
463	Me	Me	0	OH	H	F	H	H	CH_2CF_3
464	Me	Me	1	OH	H	F	H	H	CH_2CF_3
465	Me	Me	0	OCH_3	H	F	H	H	CH_2CF_3
466	Me	Me	1	OCH_3	H	F	H	H	CH_2CF_3
467	Me	Me	0	OCH_2CH_3	H	F	H	H	CH_2CF_3
468	Me	Me	1	OCH_2CH_3	H	F	H	H	CH_2CF_3

469	Me	Me	0	OCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
470	Me	Me	1	OCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
471	Me	Me	0	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
472	Me	Me	1	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
473	Me	Me	0	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ C H ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
474	Me	Me	1	SH	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
475	Me	Me	0	SH	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
476	Me	Me	1	SCH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
477	Me	Me	0	SCH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
478	Me	Me	1	SCH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
479	Me	Me	0	SCH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
480	Me	Me	1	SCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
481	Me	Me	0	SCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
482	Me	Me	1	SCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
483	Me	Me	0	SCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
484	Me	Me	1	SCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ C H ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
485	F	Me	0	Me	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
486	F	Me	1	Me	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
487	F	Me	0	Et	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
488	F	Me	1	Et	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
489	F	Me	0	nPropyl	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
490	F	Me	1	nPropyl	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
491	F	Me	0	isopropyl	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
492	F	Me	1	isopropyl	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
493	F	Me	0	nButyl	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
494	F	Me	1	nButyl	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
495	F	Me	0	nPentyl	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
496	F	Me	1	nPentyl	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
497	F	Me	0	nHexyl	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
498	F	Me	1	nHexyl	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
499	F	Me	0	nHeptyl	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
500	F	Me	1	nHeptyl	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
501	F	Me	0	nOctyl	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
502	F	Me	1	nOctyl	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
503	F	Me	0	nNonyl	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
504	F	Me	1	nNonyl	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
505	F	Me	0	nDecyl	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
506	F	Me	1	nDecyl	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
507	F	Me	0	F	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃

508	F	Me	1	F	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
509	F	Me	0	Cl	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
510	F	Me	1	Cl	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
511	F	Me	0	Br	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
512	F	Me	1	Br	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
513	F	Me	0	I	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
514	F	Me	1	I	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
515	F	Me	0	CN	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
516	F	Me	1	CN	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
517	F	Me	0	NO ₂	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
518	F	Me	1	NO ₂	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
519	F	Me	0	NH ₂	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
520	F	Me	1	NH ₂	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
521	F	Me	0	CH ₂ OH	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
522	F	Me	1	CH ₂ OH	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
523	F	Me	0	COCH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
524	F	Me	1	COCH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
525	F	Me	0	COCH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
526	F	Me	1	COCH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
527	F	Me	0	COCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
528	F	Me	1	COCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
529	F	Me	0	COCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
530	F	Me	1	COCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
531	F	Me	0	COCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
532	F	Me	1	COCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
533	F	Me	0	COOH	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
534	F	Me	1	COOH	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
535	F	Me	0	CO ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
536	F	Me	1	CO ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
537	F	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
538	F	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
539	F	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
540	F	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
541	F	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH 3	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
542	F	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH 3	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
543	F	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH 2CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
544	F	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃

				${}^2\text{CH}_3$					
545	F	Me	0	$\text{CO}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	Cl	H	H	CH_2CF_3
546	F	Me	1	$\text{CO}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	Cl	H	H	CH_2CF_3
547	F	Me	0	$\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	Cl	H	H	CH_2CF_3
548	F	Me	1	$\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	Cl	H	H	CH_2CF_3
549	F	Me	0	$\text{CO}_2\text{CH}=\text{CH}_2$	H	Cl	H	H	CH_2CF_3
550	F	Me	1	$\text{CO}_2\text{CH}=\text{CH}_2$	H	Cl	H	H	CH_2CF_3
551	F	Me	0	$\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}=\text{CH}_2$	H	Cl	H	H	CH_2CF_3
552	F	Me	1	$\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}=\text{CH}_2$	H	Cl	H	H	CH_2CF_3
553	F	Me	0	$\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CF}_3$	H	Cl	H	H	CH_2CF_3
554	F	Me	1	$\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CF}_3$	H	Cl	H	H	CH_2CF_3
555	F	Me	0	$\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{Cl}$	H	Cl	H	H	CH_2CF_3
556	F	Me	1	$\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{Cl}$	H	Cl	H	H	CH_2CF_3
557	F	Me	0	$\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{Br}$	H	Cl	H	H	CH_2CF_3
558	F	Me	1	$\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{Br}$	H	Cl	H	H	CH_2CF_3
559	F	Me	0	$\text{CO}_2\text{CH}_2\text{OCH}_3$	H	Cl	H	H	CH_2CF_3
560	F	Me	1	$\text{CO}_2\text{CH}_2\text{COCH}_3$	H	Cl	H	H	CH_2CF_3
561	F	Me	0	CONH_2	H	Cl	H	H	CH_2CF_3
562	F	Me	1	CONH_2	H	Cl	H	H	CH_2CF_3
563	F	Me	0	CONHCH_3	H	Cl	H	H	CH_2CF_3
564	F	Me	1	CONHCH_3	H	Cl	H	H	CH_2CF_3
565	F	Me	0	$\text{CON}(\text{CH}_3)_2$	H	Cl	H	H	CH_2CF_3
566	F	Me	1	$\text{CON}(\text{CH}_3)_2$	H	Cl	H	H	CH_2CF_3
567	F	Me	0	$\text{CONHCH}_2\text{CH}_3$	H	Cl	H	H	CH_2CF_3
568	F	Me	1	$\text{CONHCH}_2\text{CH}_3$	H	Cl	H	H	CH_2CF_3
569	F	Me	0	$\text{CONHCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	Cl	H	H	CH_2CF_3
570	F	Me	1	$\text{CONHCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	Cl	H	H	CH_2CF_3
571	F	Me	0	$\text{CONHCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	Cl	H	H	CH_2CF_3
572	F	Me	1	$\text{CONHCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	Cl	H	H	CH_2CF_3
573	F	Me	0	$\text{CONHCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	Cl	H	H	CH_2CF_3
574	F	Me	1	$\text{CONHCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	Cl	H	H	CH_2CF_3
575	F	Me	0	OH	H	Cl	H	H	CH_2CF_3
576	F	Me	1	OH	H	Cl	H	H	CH_2CF_3
577	F	Me	0	OCH_3	H	Cl	H	H	CH_2CF_3
578	F	Me	1	OCH_3	H	Cl	H	H	CH_2CF_3
579	F	Me	0	OCH_2CH_3	H	Cl	H	H	CH_2CF_3
580	F	Me	1	OCH_2CH_3	H	Cl	H	H	CH_2CF_3
581	F	Me	0	$\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	Cl	H	H	CH_2CF_3

582	F	Me	1	OCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
583	F	Me	0	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
584	F	Me	1	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
585	F	Me	0	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ C H ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
586	F	Me	1	SH	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
587	F	Me	0	SH	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
588	F	Me	1	SCH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
589	F	Me	0	SCH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
590	F	Me	1	SCH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
591	F	Me	0	SCH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
592	F	Me	1	SCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
593	F	Me	0	SCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
594	F	Me	1	SCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
595	F	Me	0	SCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
596	F	Me	1	SCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ C H ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
597	Me	Me	0	Me	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
598	Me	Me	1	Me	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
599	Me	Me	0	Et	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
600	Me	Me	1	Et	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
601	Me	Me	0	nPropyl	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
602	Me	Me	1	nPropyl	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
603	Me	Me	0	isopropyl	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
604	Me	Me	1	isopropyl	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
605	Me	Me	0	nButyl	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
606	Me	Me	1	nButyl	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
607	Me	Me	0	nPentyl	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
608	Me	Me	1	nPentyl	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
609	Me	Me	0	nHexyl	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
610	Me	Me	1	nHexyl	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
611	Me	Me	0	nHeptyl	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
612	Me	Me	1	nHeptyl	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
613	Me	Me	0	nOctyl	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
614	Me	Me	1	nOctyl	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
615	Me	Me	0	nNonyl	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
616	Me	Me	1	nNonyl	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
617	Me	Me	0	nDecyl	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
618	Me	Me	1	nDecyl	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
619	Me	Me	0	F	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
620	Me	Me	1	F	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃

621	Me	Me	0	Cl	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
622	Me	Me	1	Cl	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
623	Me	Me	0	Br	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
624	Me	Me	1	Br	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
625	Me	Me	0	I	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
626	Me	Me	1	I	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
627	Me	Me	0	CN	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
628	Me	Me	1	CN	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
629	Me	Me	0	NO ₂	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
630	Me	Me	1	NO ₂	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
631	Me	Me	0	NH ₂	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
632	Me	Me	1	NH ₂	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
633	Me	Me	0	CH ₂ OH	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
634	Me	Me	1	CH ₂ OH	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
635	Me	Me	0	COCH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
636	Me	Me	1	COCH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
637	Me	Me	0	COCH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
638	Me	Me	1	COCH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
639	Me	Me	0	COCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
640	Me	Me	1	COCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
641	Me	Me	0	COCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
642	Me	Me	1	COCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
643	Me	Me	0	COCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
644	Me	Me	1	COCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
645	Me	Me	0	COOH	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
646	Me	Me	1	COOH	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
647	Me	Me	0	CO ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
648	Me	Me	1	CO ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
649	Me	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
650	Me	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
651	Me	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
652	Me	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
653	Me	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
654	Me	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
655	Me	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
656	Me	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃

657	Me	Me	0	CO ₂ CH(CH ₃) ₂	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
658	Me	Me	1	CO ₂ CH(CH ₃) ₂	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
659	Me	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH(CH ₃) ₂	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
660	Me	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH(CH ₃) ₂	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
661	Me	Me	0	CO ₂ CH=CH ₂	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
662	Me	Me	1	CO ₂ CH=CH ₂	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
663	Me	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH=CH ₂	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
664	Me	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH=CH ₂	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
665	Me	Me	0	CO ₂ CH ₂ CF ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
666	Me	Me	1	CO ₂ CH ₂ CF ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
667	Me	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ Cl	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
668	Me	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ Cl	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
669	Me	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ Br	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
670	Me	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ Br	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
671	Me	Me	0	CO ₂ CH ₂ OCH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
672	Me	Me	1	CO ₂ CH ₂ COCH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
673	Me	Me	0	CONH ₂	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
674	Me	Me	1	CONH ₂	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
675	Me	Me	0	CONHCH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
676	Me	Me	1	CONHCH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
677	Me	Me	0	CON(CH ₃) ₂	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
678	Me	Me	1	CON(CH ₃) ₂	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
679	Me	Me	0	CONHCH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
680	Me	Me	1	CONHCH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
681	Me	Me	0	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
682	Me	Me	1	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
683	Me	Me	0	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
684	Me	Me	1	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
685	Me	Me	0	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
686	Me	Me	1	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
687	Me	Me	0	OH	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
688	Me	Me	1	OH	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
689	Me	Me	0	OCH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
690	Me	Me	1	OCH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
691	Me	Me	0	OCH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
692	Me	Me	1	OCH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
693	Me	Me	0	OCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
694	Me	Me	1	OCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃

695	Me	Me	0	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
696	Me	Me	1	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
697	Me	Me	0	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ C H ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
698	Me	Me	1	SH	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
699	Me	Me	0	SH	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
700	Me	Me	1	SCH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
701	Me	Me	0	SCH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
702	Me	Me	1	SCH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
703	Me	Me	0	SCH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
704	Me	Me	1	SCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
705	Me	Me	0	SCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
706	Me	Me	1	SCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
707	Me	Me	0	SCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
708	Me	Me	1	SCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ C H ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
709	F	Me	0	H	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
710	F	Me	1	H	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
711	F	Me	0	H	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
712	F	Me	1	H	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
713	F	Me	0	H	H	Br	H	H	CH ₂ CF ₃
714	F	Me	1	H	H	Br	H	H	CH ₂ CF ₃
715	F	Me	0	H	H	I	H	H	CH ₂ CF ₃
716	F	Me	1	H	H	I	H	H	CH ₂ CF ₃
717	F	Me	0	H	H	OH	H	H	CH ₂ CF ₃
718	F	Me	1	H	H	OH	H	H	CH ₂ CF ₃
719	F	Me	0	H	H	NH ₂	H	H	CH ₂ CF ₃
720	F	Me	1	H	H	NH ₂	H	H	CH ₂ CF ₃
721	F	Me	0	H	H	CN	H	H	CH ₂ CF ₃
722	F	Me	1	H	H	CN	H	H	CH ₂ CF ₃
723	F	Me	0	H	H	NO ₂	H	H	CH ₂ CF ₃
724	F	Me	1	H	H	NO ₂	H	H	CH ₂ CF ₃
725	F	Me	0	H	H	CF ₃	H	H	CH ₂ CF ₃
726	F	Me	1	H	H	CF ₃	H	H	CH ₂ CF ₃
727	F	Me	0	H	H	COCH ₃	H	H	CH ₂ CF ₃
728	F	Me	1	H	H	COCH ₃	H	H	CH ₂ CF ₃
729	F	Me	0	H	H	COCH ₂ CH ₃	H	H	CH ₂ CF ₃
730	F	Me	1	H	H	COCH ₂ CH ₃	H	H	CH ₂ CF ₃
731	F	Me	0	H	H	COCH ₂ CH ₂ CH 3	H	H	CH ₂ CF ₃
732	F	Me	1	H	H	COCH ₂ CH ₂ CH 3	H	H	CH ₂ CF ₃

733	F	Me	0	H	H	$\text{COCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	H	CH_2CF_3
734	F	Me	1	H	H	$\text{COCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	H	CH_2CF_3
735	F	Me	0	H	H	$\text{COCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	H	CH_2CF_3
736	F	Me	1	H	H	$\text{COCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	H	CH_2CF_3
737	F	Me	0	H	H	COOH	H	H	CH_2CF_3
738	F	Me	1	H	H	COOH	H	H	CH_2CF_3
739	F	Me	0	H	H	CO_2CH_3	H	H	CH_2CF_3
740	F	Me	1	H	H	CO_2CH_3	H	H	CH_2CF_3
741	F	Me	0	H	H	F	H	H	CH_2CF_3
742	F	Me	1	H	H	F	H	H	CH_2CF_3
743	F	Me	0	H	H	Cl	H	H	CH_2CF_3
744	F	Me	1	H	H	Cl	H	H	CH_2CF_3
745	F	Me	0	H	H	Br	H	H	CH_2CF_3
746	F	Me	1	H	H	Br	H	H	CH_2CF_3
747	F	Me	0	H	H	I	H	H	CH_2CF_3
748	F	Me	1	H	H	I	H	H	CH_2CF_3
749	F	Me	0	H	H	OH	H	H	CH_2CF_3
750	F	Me	1	H	H	OH	H	H	CH_2CF_3
751	F	Me	0	H	H	NH_2	H	H	CH_2CF_3
752	F	Me	1	H	H	NH_2	H	H	CH_2CF_3
753	F	Me	0	H	H	CN	H	H	CH_2CF_3
754	F	Me	1	H	H	CN	H	H	CH_2CF_3
755	F	Me	0	H	H	NO_2	H	H	CH_2CF_3
756	F	Me	1	H	H	NO_2	H	H	CH_2CF_3
757	F	Me	0	H	H	COCH_3	H	H	CH_2CF_3
758	F	Me	1	H	H	COCH_3	H	H	CH_2CF_3
759	F	Me	0	H	H	COCH_2CH_3	H	H	CH_2CF_3
760	F	Me	1	H	H	COCH_2CH_3	H	H	CH_2CF_3
761	F	Me	0	H	H	$\text{COCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	H	CH_2CF_3
762	F	Me	1	H	H	$\text{COCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	H	CH_2CF_3
763	F	Me	0	H	H	$\text{COCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	H	CH_2CF_3
764	F	Me	1	H	H	$\text{COCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	H	CH_2CF_3
765	F	Me	0	H	H	$\text{COCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	H	CH_2CF_3
766	F	Me	1	H	H	$\text{COCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	H	CH_2CF_3

						${}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$			
767	F	Me	0	Me	H	H	H	H	nPropyl
768	F	Me	1	Me	H	H	H	H	nPropyl
769	F	Me	0	Et	H	H	H	H	nPropyl
770	F	Me	1	Et	H	H	H	H	nPropyl
771	F	Me	0	nPropyl	H	H	H	H	nPropyl
772	F	Me	1	nPropyl	H	H	H	H	nPropyl
773	F	Me	0	isopropyl	H	H	H	H	nPropyl
774	F	Me	1	isopropyl	H	H	H	H	nPropyl
775	F	Me	0	nButyl	H	H	H	H	nPropyl
776	F	Me	1	nButyl	H	H	H	H	nPropyl
777	F	Me	0	nPentyl	H	H	H	H	nPropyl
778	F	Me	1	nPentyl	H	H	H	H	nPropyl
779	F	Me	0	nHexyl	H	H	H	H	nPropyl
780	F	Me	1	nHexyl	H	H	H	H	nPropyl
781	F	Me	0	nHeptyl	H	H	H	H	nPropyl
782	F	Me	1	nHeptyl	H	H	H	H	nPropyl
783	F	Me	0	nOctyl	H	H	H	H	nPropyl
784	F	Me	1	nOctyl	H	H	H	H	nPropyl
785	F	Me	0	nNonyl	H	H	H	H	nPropyl
786	F	Me	1	nNonyl	H	H	H	H	nPropyl
787	F	Me	0	nDecyl	H	H	H	H	nPropyl
788	F	Me	1	nDecyl	H	H	H	H	nPropyl
789	F	Me	0	F	H	H	H	H	nPropyl
790	F	Me	1	F	H	H	H	H	nPropyl
791	F	Me	0	Cl	H	H	H	H	nPropyl
792	F	Me	1	Cl	H	H	H	H	nPropyl
793	F	Me	0	Br	H	H	H	H	nPropyl
794	F	Me	1	Br	H	H	H	H	nPropyl
795	F	Me	0	I	H	H	H	H	nPropyl
796	F	Me	1	I	H	H	H	H	nPropyl
797	F	Me	0	CN	H	H	H	H	nPropyl
798	F	Me	1	CN	H	H	H	H	nPropyl
799	F	Me	0	NO ₂	H	H	H	H	nPropyl
800	F	Me	1	NO ₂	H	H	H	H	nPropyl
801	F	Me	0	NH ₂	H	H	H	H	nPropyl
802	F	Me	1	NH ₂	H	H	H	H	nPropyl
803	F	Me	0	CH ₂ OH	H	H	H	H	nPropyl
804	F	Me	1	CH ₂ OH	H	H	H	H	nPropyl
805	F	Me	0	COCH ₃	H	H	H	H	nPropyl
806	F	Me	1	COCH ₃	H	H	H	H	nPropyl

807	F	Me	0	COCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
808	F	Me	1	COCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
809	F	Me	0	COCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
810	F	Me	1	COCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
811	F	Me	0	COCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
812	F	Me	1	COCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
813	F	Me	0	COCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
814	F	Me	1	COCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
815	F	Me	0	COOH	H	H	H	H	nPropyl
816	F	Me	1	COOH	H	H	H	H	nPropyl
817	F	Me	0	CO ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
818	F	Me	1	CO ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
819	F	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
820	F	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
821	F	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
822	F	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
823	F	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH 3	H	H	H	H	nPropyl
824	F	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH 3	H	H	H	H	nPropyl
825	F	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH 2CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
826	F	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH 2CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
827	F	Me	0	CO ₂ CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	nPropyl
828	F	Me	1	CO ₂ CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	nPropyl
829	F	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	nPropyl
830	F	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	nPropyl
831	F	Me	0	CO ₂ CH=CH ₂	H	H	H	H	nPropyl
832	F	Me	1	CO ₂ CH=CH ₂	H	H	H	H	nPropyl
833	F	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH=CH ₂	H	H	H	H	nPropyl
834	F	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH=CH ₂	H	H	H	H	nPropyl
835	F	Me	0	CO ₂ CH ₂ CF ₃	H	H	H	H	nPropyl
836	F	Me	1	CO ₂ CH ₂ CF ₃	H	H	H	H	nPropyl
837	F	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ Cl	H	H	H	H	nPropyl
838	F	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ Cl	H	H	H	H	nPropyl
839	F	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ Br	H	H	H	H	nPropyl
840	F	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ Br	H	H	H	H	nPropyl
841	F	Me	0	CO ₂ CH ₂ OCH ₃	H	H	H	H	nPropyl
842	F	Me	1	CO ₂ CH ₂ COCH ₃	H	H	H	H	nPropyl

843	F	Me	0	CONH ₂	H	H	H	H	nPropyl
844	F	Me	1	CONH ₂	H	H	H	H	nPropyl
845	F	Me	0	CONHCH ₃	H	H	H	H	nPropyl
846	F	Me	1	CONHCH ₃	H	H	H	H	nPropyl
847	F	Me	0	CON(CH ₃) ₂	H	H	H	H	nPropyl
848	F	Me	1	CON(CH ₃) ₂	H	H	H	H	nPropyl
849	F	Me	0	CONHCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
850	F	Me	1	CONHCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
851	F	Me	0	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
852	F	Me	1	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
853	F	Me	0	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
854	F	Me	1	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
855	F	Me	0	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
856	F	Me	1	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
857	F	Me	0	OH	H	H	H	H	nPropyl
858	F	Me	1	OH	H	H	H	H	nPropyl
859	F	Me	0	OCH ₃	H	H	H	H	nPropyl
860	F	Me	1	OCH ₃	H	H	H	H	nPropyl
861	F	Me	0	OCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
862	F	Me	1	OCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
863	F	Me	0	OCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
864	F	Me	1	OCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
865	F	Me	0	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
866	F	Me	1	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
867	F	Me	0	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ C H ₃	H	H	H	H	nPropyl
868	F	Me	1	SH	H	H	H	H	nPropyl
869	F	Me	0	SH	H	H	H	H	nPropyl
870	F	Me	1	SCH ₃	H	H	H	H	nPropyl
871	F	Me	0	SCH ₃	H	H	H	H	nPropyl
872	F	Me	1	SCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
873	F	Me	0	SCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
874	F	Me	1	SCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
875	F	Me	0	SCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
876	F	Me	1	SCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
877	F	Me	0	SCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
878	F	Me	1	SCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ C H ₃	H	H	H	H	nPropyl

879	Me	Me	0	Me	H	H	H	H	nPropyl
880	Me	Me	1	Me	H	H	H	H	nPropyl
881	Me	Me	0	Et	H	H	H	H	nPropyl
882	Me	Me	1	Et	H	H	H	H	nPropyl
883	Me	Me	0	nPropyl	H	H	H	H	nPropyl
884	Me	Me	1	nPropyl	H	H	H	H	nPropyl
885	Me	Me	0	isopropyl	H	H	H	H	nPropyl
886	Me	Me	1	isopropyl	H	H	H	H	nPropyl
887	Me	Me	0	nButyl	H	H	H	H	nPropyl
888	Me	Me	1	nButyl	H	H	H	H	nPropyl
889	Me	Me	0	nPentyl	H	H	H	H	nPropyl
890	Me	Me	1	nPentyl	H	H	H	H	nPropyl
891	Me	Me	0	nHexyl	H	H	H	H	nPropyl
892	Me	Me	1	nHexyl	H	H	H	H	nPropyl
893	Me	Me	0	nHeptyl	H	H	H	H	nPropyl
894	Me	Me	1	nHeptyl	H	H	H	H	nPropyl
895	Me	Me	0	nOctyl	H	H	H	H	nPropyl
896	Me	Me	1	nOctyl	H	H	H	H	nPropyl
897	Me	Me	0	nNonyl	H	H	H	H	nPropyl
898	Me	Me	1	nNonyl	H	H	H	H	nPropyl
899	Me	Me	0	nDecyl	H	H	H	H	nPropyl
900	Me	Me	1	nDecyl	H	H	H	H	nPropyl
901	Me	Me	0	F	H	H	H	H	nPropyl
902	Me	Me	1	F	H	H	H	H	nPropyl
903	Me	Me	0	Cl	H	H	H	H	nPropyl
904	Me	Me	1	Cl	H	H	H	H	nPropyl
905	Me	Me	0	Br	H	H	H	H	nPropyl
906	Me	Me	1	Br	H	H	H	H	nPropyl
907	Me	Me	0	I	H	H	H	H	nPropyl
908	Me	Me	1	I	H	H	H	H	nPropyl
909	Me	Me	0	CN	H	H	H	H	nPropyl
910	Me	Me	1	CN	H	H	H	H	nPropyl
911	Me	Me	0	NO ₂	H	H	H	H	nPropyl
912	Me	Me	1	NO ₂	H	H	H	H	nPropyl
913	Me	Me	0	NH ₂	H	H	H	H	nPropyl
914	Me	Me	1	NH ₂	H	H	H	H	nPropyl
915	Me	Me	0	CH ₂ OH	H	H	H	H	nPropyl
916	Me	Me	1	CH ₂ OH	H	H	H	H	nPropyl
917	Me	Me	0	COCH ₃	H	H	H	H	nPropyl
918	Me	Me	1	COCH ₃	H	H	H	H	nPropyl
919	Me	Me	0	COCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl

920	Me	Me	1	COCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
921	Me	Me	0	COCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
922	Me	Me	1	COCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
923	Me	Me	0	COCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
924	Me	Me	1	COCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
925	Me	Me	0	COCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
926	Me	Me	1	COCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
927	Me	Me	0	COOH	H	H	H	H	nPropyl
928	Me	Me	1	COOH	H	H	H	H	nPropyl
929	Me	Me	0	CO ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
930	Me	Me	1	CO ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
931	Me	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
932	Me	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
933	Me	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
934	Me	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
935	Me	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH 3	H	H	H	H	nPropyl
936	Me	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH 3	H	H	H	H	nPropyl
937	Me	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH 2CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
938	Me	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH 2CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
939	Me	Me	0	CO ₂ CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	nPropyl
940	Me	Me	1	CO ₂ CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	nPropyl
941	Me	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	nPropyl
942	Me	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	nPropyl
943	Me	Me	0	CO ₂ CH=CH ₂	H	H	H	H	nPropyl
944	Me	Me	1	CO ₂ CH=CH ₂	H	H	H	H	nPropyl
945	Me	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH=CH ₂	H	H	H	H	nPropyl
946	Me	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH=CH ₂	H	H	H	H	nPropyl
947	Me	Me	0	CO ₂ CH ₂ CF ₃	H	H	H	H	nPropyl
948	Me	Me	1	CO ₂ CH ₂ CF ₃	H	H	H	H	nPropyl
949	Me	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ Cl	H	H	H	H	nPropyl
950	Me	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ Cl	H	H	H	H	nPropyl
951	Me	Me	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ Br	H	H	H	H	nPropyl
952	Me	Me	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ Br	H	H	H	H	nPropyl
953	Me	Me	0	CO ₂ CH ₂ OCH ₃	H	H	H	H	nPropyl
954	Me	Me	1	CO ₂ CH ₂ COCH ₃	H	H	H	H	nPropyl
955	Me	Me	0	CONH ₂	H	H	H	H	nPropyl

956	Me	Me	1	CONH ₂	H	H	H	H	nPropyl
957	Me	Me	0	CONHCH ₃	H	H	H	H	nPropyl
958	Me	Me	1	CONHCH ₃	H	H	H	H	nPropyl
959	Me	Me	0	CON(CH ₃) ₂	H	H	H	H	nPropyl
960	Me	Me	1	CON(CH ₃) ₂	H	H	H	H	nPropyl
961	Me	Me	0	CONHCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
962	Me	Me	1	CONHCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
963	Me	Me	0	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
964	Me	Me	1	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
965	Me	Me	0	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
966	Me	Me	1	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
967	Me	Me	0	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
968	Me	Me	1	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
969	Me	Me	0	OH	H	H	H	H	nPropyl
970	Me	Me	1	OH	H	H	H	H	nPropyl
971	Me	Me	0	OCH ₃	H	H	H	H	nPropyl
972	Me	Me	1	OCH ₃	H	H	H	H	nPropyl
973	Me	Me	0	OCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
974	Me	Me	1	OCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
975	Me	Me	0	OCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
976	Me	Me	1	OCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
977	Me	Me	0	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
978	Me	Me	1	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
979	Me	Me	0	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ C H ₃	H	H	H	H	nPropyl
980	Me	Me	1	SH	H	H	H	H	nPropyl
981	Me	Me	0	SH	H	H	H	H	nPropyl
982	Me	Me	1	SCH ₃	H	H	H	H	nPropyl
983	Me	Me	0	SCH ₃	H	H	H	H	nPropyl
984	Me	Me	1	SCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
985	Me	Me	0	SCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
986	Me	Me	1	SCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
987	Me	Me	0	SCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
988	Me	Me	1	SCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
989	Me	Me	0	SCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	nPropyl
990	Me	Me	1	SCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ C H ₃	H	H	H	H	nPropyl
991	F	Me	0	Me	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃

992	F	Me	1	Me	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
993	F	Me	0	CF ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
994	F	Me	1	CF ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
995	F	Me	0	Et	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
996	F	Me	1	Et	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
997	F	Me	0	nPropyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
998	F	Me	1	nPropyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
999	F	Me	0	isopropyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1000	F	Me	1	isopropyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1001	F	Me	0	nButyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1002	F	Me	1	nButyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1003	F	Me	0	nPentyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1004	F	Me	1	nPentyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1005	F	Me	0	nHexyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1006	F	Me	1	nHexyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1007	F	Me	0	nHeptyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1008	F	Me	1	nHeptyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1009	F	Me	0	nOctyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1010	F	Me	1	nOctyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1011	F	Me	0	nNonyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1012	F	Me	1	nNonyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1013	F	Me	0	nDecyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1014	F	Me	1	nDecyl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1015	F	Me	0	F	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1016	F	Me	1	F	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1017	F	Me	0	Cl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1018	F	Me	1	Cl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1019	F	Me	0	Br	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1020	F	Me	1	Br	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1021	F	Me	0	I	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1022	F	Me	1	I	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1023	F	Me	0	CN	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1024	F	Me	1	CN	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1025	F	Me	0	NO ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1026	F	Me	1	NO ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1027	F	Me	0	NH ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1028	F	Me	1	NH ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1029	F	Me	0	CH ₂ OH	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1030	Cl	Cl	1	CH ₂ OH	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1031	Cl	Cl	0	COCH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1032	Cl	Cl	1	COCH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃

1033	Cl	Cl	0	COCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1034	Cl	Cl	1	COCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1035	Cl	Cl	0	COCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1036	Cl	Cl	1	COCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1037	Cl	Cl	0	COCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1038	Cl	Cl	1	COCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1039	Cl	Cl	0	COCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1040	Cl	Cl	1	COCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1041	Cl	Cl	0	COOH	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1042	Cl	Cl	1	COOH	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1043	Cl	Cl	0	CO ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1044	Cl	Cl	1	CO ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1045	Cl	Cl	0	CO ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1046	Cl	Cl	1	CO ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1047	Cl	Cl	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1048	Cl	Cl	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1049	Cl	Cl	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH 3	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1050	Cl	Cl	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH 3	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1051	Cl	Cl	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH 2CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1052	Cl	Cl	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH 2CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1053	Cl	Cl	0	CO ₂ CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1054	Cl	Cl	1	CO ₂ CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1055	Cl	Cl	0	CO ₂ CH ₂ CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1056	Cl	Cl	1	CO ₂ CH ₂ CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1057	Cl	Cl	0	CO ₂ CH=CH ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1058	Cl	Cl	1	CO ₂ CH=CH ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1059	Cl	Cl	0	CO ₂ CH ₂ CH=CH ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1060	Cl	Cl	1	CO ₂ CH ₂ CH=CH ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1061	Cl	Cl	0	CO ₂ CH ₂ CF ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1062	Cl	Cl	1	CO ₂ CH ₂ CF ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1063	Cl	Cl	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ Cl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1064	Cl	Cl	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ Cl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1065	Cl	Cl	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ Br	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1066	Cl	Cl	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ Br	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1067	Cl	Cl	0	CO ₂ CH ₂ OCH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1068	Cl	Cl	1	CO ₂ CH ₂ COCH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃

1069	Cl	Cl	0	CONH ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1070	Cl	Cl	1	CONH ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1071	Cl	Cl	0	CONHCH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1072	Cl	Cl	1	CONHCH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1073	Cl	Cl	0	CON(CH ₃) ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1074	Cl	Cl	1	CON(CH ₃) ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1075	Cl	Cl	0	CONHCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1076	Cl	Cl	1	CONHCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1077	Cl	Cl	0	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1078	Cl	Cl	1	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1079	Cl	Cl	0	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1080	Cl	Cl	1	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1081	Cl	Cl	0	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1082	Cl	Cl	1	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1083	Cl	Cl	0	OH	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1084	Cl	Cl	1	OH	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1085	Cl	Cl	0	OCH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1086	Cl	Cl	1	OCH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1087	Cl	Cl	0	OCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1088	Cl	Cl	1	OCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1089	Cl	Cl	0	OCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1090	Cl	Cl	1	OCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1091	Cl	Cl	0	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1092	Cl	Cl	1	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1093	Cl	Cl	0	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ C H ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1094	Cl	Cl	1	SH	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1095	Cl	Cl	0	SH	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1096	Cl	Cl	1	SCH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1097	Cl	Cl	0	SCH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1098	Cl	Cl	1	SCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1099	Cl	Cl	0	SCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1100	Cl	Cl	1	SCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1101	Cl	Cl	0	SCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1102	Cl	Cl	1	SCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1103	Cl	Cl	0	SCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1104	Cl	Cl	1	SCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ C H ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃

1105	F	Me	0	H	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1106	F	Me	1	H	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1107	F	Me	0	OCF ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1108	F	Me	1	OCF ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1109	F	Me	0	H	H	OCH ₃	H	H	CH ₂ CF ₃
1110	F	Me	1	H	H	OCH ₃	H	H	CH ₂ CF ₃
1111	F	Me	0	CO ₂ CH ₃	H	CO ₂ CH ₃	H	H	CH ₂ CF ₃
1112	F	Me	1	CO ₂ CH ₃	H	CO ₂ CH ₃	H	H	CH ₂ CF ₃
1113	F	Me	0	CO ₂ CH ₃	H	F	H	H	nPropyl
1114	F	Me	1	CO ₂ CH ₃	H	F	H	H	nPropyl
1115	F	Me	0	CO ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	nPropyl
1116	F	Me	1	CO ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	nPropyl
1117	F	Me	0	CO ₂ CH ₃	H	Br	H	H	CH ₂ CF ₃
1118	F	Me	1	CO ₂ CH ₃	H	Br	H	H	CH ₂ CF ₃
1119	F	Me	0	CO ₂ CH ₃	H	I	H	H	CH ₂ CF ₃
1120	F	Me	1	CO ₂ CH ₃	H	I	H	H	CH ₂ CF ₃
1121	F	Me	0	CO ₂ CH ₃	H	OH	H	H	CH ₂ CF ₃
1122	F	Me	1	CO ₂ CH ₃	H	OH	H	H	CH ₂ CF ₃
1123	F	Me	0	CO ₂ CH ₃	H	NH ₂	H	H	CH ₂ CF ₃
1124	F	Me	1	CO ₂ CH ₃	H	NH ₂	H	H	CH ₂ CF ₃
1125	F	Me	0	CO ₂ CH ₃	H	CN	H	H	CH ₂ CF ₃
1126	F	Me	1	CO ₂ CH ₃	H	CN	H	H	CH ₂ CF ₃
1127	F	Me	0	CO ₂ CH ₃	H	NO ₂	H	H	CH ₂ CF ₃
1128	F	Me	1	CO ₂ CH ₃	H	NO ₂	H	H	CH ₂ CF ₃
1129	F	Me	0	CO ₂ CH ₃	H	COCH ₃	H	H	CH ₂ CF ₃
1130	F	Me	1	CO ₂ CH ₃	H	COCH ₃	H	H	CH ₂ CF ₃
1131	F	Me	0	CO ₂ CH ₃	H	OCH ₃	H	H	CH ₂ CF ₃
1132	F	Me	1	CO ₂ CH ₃	H	OCH ₃	H	H	CH ₂ CF ₃
1133	F	Me	0	CO ₂ CH ₃	H	OCH ₂ CH ₃	H	H	CH ₂ CF ₃
1134	F	Me	1	CO ₂ CH ₃	H	OCH ₂ CH ₃	H	H	CH ₂ CF ₃
1135	F	Me	0	CO ₂ CH ₃	H	OPh	H	H	CH ₂ CF ₃
1136	F	Me	1	CO ₂ CH ₃	H	OPh	H	H	CH ₂ CF ₃
1137	Me	Me	0	CO ₂ CH ₃	H	CO ₂ CH ₃	H	H	CH ₂ CF ₃
1138	Me	Me	1	CO ₂ CH ₃	H	CO ₂ CH ₃	H	H	CH ₂ CF ₃
1139	Me	Me	0	CO ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
1140	Me	Me	1	CO ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
1141	Me	Me	0	CO ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
1142	Me	Me	1	CO ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
1143	Me	Me	0	CO ₂ CH ₃	H	Br	H	H	CH ₂ CF ₃
1144	Me	Me	1	CO ₂ CH ₃	H	Br	H	H	CH ₂ CF ₃
1145	Me	Me	0	CO ₂ CH ₃	H	I	H	H	CH ₂ CF ₃

1146	Me	Me	1	CO ₂ CH ₃	H	I	H	H	CH ₂ CF ₃
1147	Me	Me	0	CO ₂ CH ₃	H	OH	H	H	CH ₂ CF ₃
1148	Me	Me	1	CO ₂ CH ₃	H	OH	H	H	CH ₂ CF ₃
1149	Me	Me	0	CO ₂ CH ₃	H	NH ₂	H	H	CH ₂ CF ₃
1150	Me	Me	1	CO ₂ CH ₃	H	NH ₂	H	H	CH ₂ CF ₃
1151	Me	Me	0	CO ₂ CH ₃	H	CN	H	H	CH ₂ CF ₃
1152	Me	Me	1	CO ₂ CH ₃	H	CN	H	H	CH ₂ CF ₃
1153	Me	Me	0	CO ₂ CH ₃	H	NO ₂	H	H	CH ₂ CF ₃
1154	Me	Me	1	CO ₂ CH ₃	H	NO ₂	H	H	CH ₂ CF ₃
1155	Me	Me	0	CO ₂ CH ₃	H	COCH ₃	H	H	CH ₂ CF ₃
1156	Me	Me	1	CO ₂ CH ₃	H	COCH ₃	H	H	CH ₂ CF ₃
1157	Me	Me	0	CO ₂ CH ₃	H	OCH ₃	H	H	CH ₂ CF ₃
1158	Me	Me	1	CO ₂ CH ₃	H	OCH ₃	H	H	CH ₂ CF ₃
1159	Me	Me	0	CO ₂ CH ₃	H	OCH ₂ CH ₃	H	H	CH ₂ CF ₃
1160	Me	Me	1	CO ₂ CH ₃	H	OCH ₂ CH ₃	H	H	CH ₂ CF ₃
1161	Me	Me	0	CO ₂ CH ₃	H	OPh	H	H	CH ₂ CF ₃
1162	Me	Me	1	CO ₂ CH ₃	H	OPh	H	H	CH ₂ CF ₃
1163	F	Cl	0	CO ₂ CH ₃	H	CO ₂ CH ₃	H	H	CH ₂ CF ₃
1164	F	Cl	1	CO ₂ CH ₃	H	CO ₂ CH ₃	H	H	CH ₂ CF ₃
1165	F	Cl	0	CO ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
1166	F	Cl	1	CO ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
1167	F	Cl	0	CO ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
1168	F	Cl	1	CO ₂ CH ₃	H	Cl	H	H	CH ₂ CF ₃
1169	F	Cl	0	CO ₂ CH ₃	H	Br	H	H	CH ₂ CF ₃
1170	F	Cl	1	CO ₂ CH ₃	H	Br	H	H	CH ₂ CF ₃
1171	F	Cl	0	CO ₂ CH ₃	H	I	H	H	CH ₂ CF ₃
1172	F	Cl	1	CO ₂ CH ₃	H	I	H	H	CH ₂ CF ₃
1173	F	Cl	0	CO ₂ CH ₃	H	OH	H	H	CH ₂ CF ₃
1174	F	Cl	1	CO ₂ CH ₃	H	OH	H	H	CH ₂ CF ₃
1175	F	Cl	0	CO ₂ CH ₃	H	NH ₂	H	H	CH ₂ CF ₃
1176	F	Cl	1	CO ₂ CH ₃	H	NH ₂	H	H	CH ₂ CF ₃
1177	F	Cl	0	CO ₂ CH ₃	H	CN	H	H	CH ₂ CF ₃
1178	F	Cl	1	CO ₂ CH ₃	H	CN	H	H	CH ₂ CF ₃
1179	F	Cl	0	CO ₂ CH ₃	H	NO ₂	H	H	CH ₂ CF ₃
1180	F	Cl	1	CO ₂ CH ₃	H	NO ₂	H	H	CH ₂ CF ₃
1181	F	Cl	0	CO ₂ CH ₃	H	COCH ₃	H	H	CH ₂ CF ₃
1182	F	Cl	1	CO ₂ CH ₃	H	COCH ₃	H	H	CH ₂ CF ₃
1183	F	Cl	0	CO ₂ CH ₃	H	OCH ₃	H	H	CH ₂ CF ₃
1184	F	Cl	1	CO ₂ CH ₃	H	OCH ₃	H	H	CH ₂ CF ₃
1185	F	Cl	0	CO ₂ CH ₃	H	OCH ₂ CH ₃	H	H	CH ₂ CF ₃
1186	F	Cl	1	CO ₂ CH ₃	H	OCH ₂ CH ₃	H	H	CH ₂ CF ₃

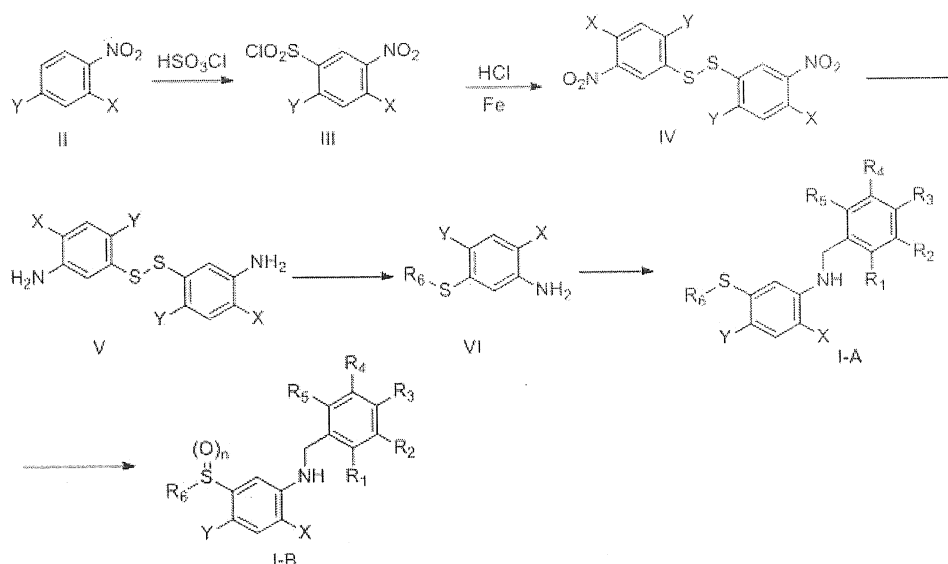
1187	F	Cl	0	CO ₂ CH ₃	H	OPh	H	H	CH ₂ CF ₃
1188	F	Cl	1	CO ₂ CH ₃	H	OPh	H	H	CH ₂ CF ₃
1189	F	Cl	1	CH ₂ OH	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1190	F	Cl	0	COCH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1191	F	Cl	1	COCH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1192	F	Cl	0	COCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1193	F	Cl	1	COCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1194	F	Cl	0	COCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1195	F	Cl	1	COCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1196	F	Cl	0	COCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1197	F	Cl	1	COCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1198	F	Cl	0	COCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1199	F	Cl	1	COCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1200	F	Cl	0	COOH	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1201	F	Cl	1	COOH	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1202	F	Cl	0	CO ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1203	F	Cl	1	CO ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1204	F	Cl	0	CO ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1205	F	Cl	1	CO ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1206	F	Cl	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1207	F	Cl	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1208	F	Cl	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH 3	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1209	F	Cl	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH 3	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1210	F	Cl	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH 2CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1211	F	Cl	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH 2CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1212	F	Cl	0	CO ₂ CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1213	F	Cl	1	CO ₂ CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1214	F	Cl	0	CO ₂ CH ₂ CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1215	F	Cl	1	CO ₂ CH ₂ CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1216	F	Cl	0	CO ₂ CH=CH ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1217	F	Cl	1	CO ₂ CH=CH ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1218	F	Cl	0	CO ₂ CH ₂ CH=CH ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1219	F	Cl	1	CO ₂ CH ₂ CH=CH ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1220	F	Cl	0	CO ₂ CH ₂ CF ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1221	F	Cl	1	CO ₂ CH ₂ CF ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃

1222	F	Cl	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ Cl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1223	F	Cl	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ Cl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1224	F	Cl	0	CO ₂ CH ₂ CH ₂ Br	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1225	F	Cl	1	CO ₂ CH ₂ CH ₂ Br	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1226	F	Cl	0	CO ₂ CH ₂ OCH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1227	F	Cl	1	CO ₂ CH ₂ COCH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1228	F	Cl	0	CONH ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1229	F	Cl	1	CONH ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1230	F	Cl	0	CONHCH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1231	F	Cl	1	CONHCH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1232	F	Cl	0	CON(CH ₃) ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1233	F	Cl	1	CON(CH ₃) ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1234	F	Cl	0	CONHCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1235	F	Cl	1	CONHCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1236	F	Cl	0	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1237	F	Cl	1	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1238	F	Cl	0	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1239	F	Cl	1	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1240	F	Cl	0	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1241	F	Cl	1	CONHCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1242	F	Cl	0	OH	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1243	F	Cl	1	OH	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1244	F	Cl	0	OCH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1245	F	Cl	1	OCH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1246	F	Cl	0	OCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1247	F	Cl	1	OCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1248	F	Cl	0	OCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1249	F	Cl	1	OCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1250	F	Cl	0	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1251	F	Cl	1	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1252	F	Cl	0	SH	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1253	F	Cl	1	SH	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1254	F	Cl	0	SCH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1255	F	Cl	1	SCH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1256	F	Cl	0	SCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1257	F	Cl	1	SCH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1258	F	Cl	0	SCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1259	F	Cl	1	SCH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃

1260	F	Cl	0	SCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1261	F	Cl	1	SCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1262	F	Cl	0	SCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ C H ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1263	F	Cl	1	SCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ C H ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1264	F	Cl	0	SCH ₂ CF ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1265	F	Cl	1	SCH ₂ CF ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1266	F	Cl	0	SCH ₂ CH ₂ Cl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1267	F	Cl	1	SCH ₂ CH ₂ Cl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1268	F	Cl	0	SCH ₂ CH ₂ F	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1269	F	Cl	1	SCH ₂ CH ₂ F	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1270	F	Cl	0	SCH ₂ CHF ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1271	F	Cl	1	SCH ₂ CHF ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1272	F	Cl	0	S(O)CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1273	F	Cl	1	S(O)CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1274	F	Cl	0	S(O)CH ₂ CF ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1275	F	Cl	1	S(O)CH ₂ CF ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1276	F	Cl	0	S(O)CH ₂ CH ₂ Cl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1277	F	Cl	1	S(O)CH ₂ CH ₂ Cl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1278	F	Cl	0	S(O)CH ₂ CH ₂ F	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1279	F	Cl	1	S(O)CH ₂ CH ₂ F	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1280	F	Cl	0	S(O)CH ₂ CHF ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1281	F	Cl	1	S(O)CH ₂ CHF ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1282	F	Cl	0	SCH ₂ CF ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
1283	F	Cl	1	SCH ₂ CF ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
1284	F	Cl	0	SCH ₂ CH ₂ Cl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
1285	F	Cl	1	SCH ₂ CH ₂ Cl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
1286	F	Cl	0	SCH ₂ CH ₂ F	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
1287	F	Cl	1	SCH ₂ CH ₂ F	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
1288	F	Cl	0	SCH ₂ CHF ₂	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
1289	F	Cl	1	SCH ₂ CHF ₂	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
1290	F	Cl	0	S(O)CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
1291	F	Cl	1	S(O)CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
1292	F	Cl	0	S(O)CH ₂ CF ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
1293	F	Cl	1	S(O)CH ₂ CF ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
1294	F	Cl	0	S(O)CH ₂ CH ₂ Cl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
1295	F	Cl	1	S(O)CH ₂ CH ₂ Cl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
1296	F	Cl	0	S(O)CH ₂ CH ₂ F	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
1297	F	Cl	1	S(O)CH ₂ CH ₂ F	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
1298	F	Cl	0	S(O)CH ₂ CHF ₂	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃

1299	F	Cl	1	S(O)CH ₂ CHF ₂	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
1300	F	Me	0	SCH ₂ CF ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1301	F	Me	1	SCH ₂ CF ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1302	F	Me	0	SCH ₂ CH ₂ Cl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1303	F	Me	1	SCH ₂ CH ₂ Cl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1304	F	Me	0	SCH ₂ CH ₂ F	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1305	F	Me	1	SCH ₂ CH ₂ F	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1306	F	Me	0	SCH ₂ CHF ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1307	F	Me	1	SCH ₂ CHF ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1308	F	Me	0	S(O)CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1309	F	Me	1	S(O)CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1310	F	Me	0	S(O)CH ₂ CF ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1311	F	Me	1	S(O)CH ₂ CF ₃	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1312	F	Me	0	S(O)CH ₂ CH ₂ Cl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1313	F	Me	1	S(O)CH ₂ CH ₂ Cl	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1314	F	Me	0	S(O)CH ₂ CH ₂ F	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1315	F	Me	1	S(O)CH ₂ CH ₂ F	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1316	F	Me	0	S(O)CH ₂ CHF ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1317	F	Me	1	S(O)CH ₂ CHF ₂	H	H	H	H	CH ₂ CF ₃
1318	F	Me	0	SCH ₂ CF ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
1319	F	Me	1	SCH ₂ CF ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
1320	F	Me	0	SCH ₂ CH ₂ Cl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
1321	F	Me	1	SCH ₂ CH ₂ Cl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
1322	F	Me	0	SCH ₂ CH ₂ F	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
1323	F	Me	1	SCH ₂ CH ₂ F	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
1324	F	Me	0	SCH ₂ CHF ₂	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
1325	F	Me	1	SCH ₂ CHF ₂	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
1326	F	Me	0	S(O)CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
1327	F	Me	1	S(O)CH ₂ CH ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
1328	F	Me	0	S(O)CH ₂ CF ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
1329	F	Me	1	S(O)CH ₂ CF ₃	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
1330	F	Me	0	S(O)CH ₂ CH ₂ Cl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
1331	F	Me	1	S(O)CH ₂ CH ₂ Cl	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
1332	F	Me	0	S(O)CH ₂ CH ₂ F	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
1333	F	Me	1	S(O)CH ₂ CH ₂ F	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
1334	F	Me	0	S(O)CH ₂ CHF ₂	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃
1335	F	Me	1	S(O)CH ₂ CHF ₂	H	F	H	H	CH ₂ CF ₃

Sáng chế cũng đề xuất phương pháp điều chế aryl sulfua, phương pháp bao gồm các bước tổng hợp sau đây:

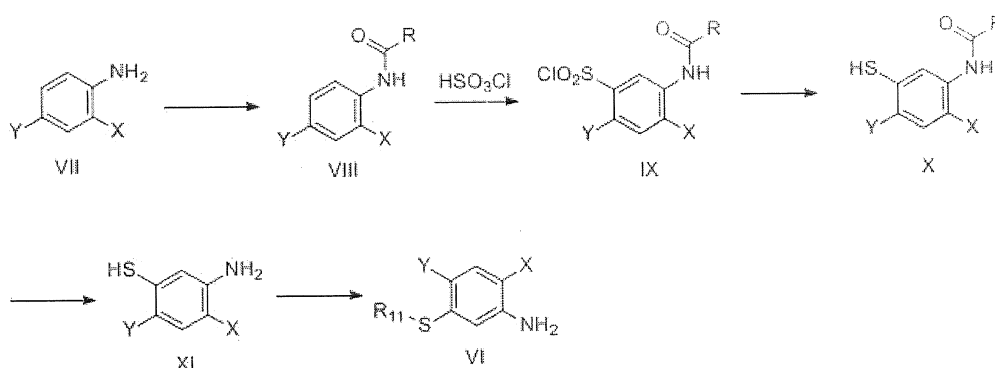


$R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, X, Y, n$ có cùng định nghĩa như được đề cập ở trên.

Cụ thể, phương pháp bao gồm các bước:

đun nóng hỗn hợp gồm hợp chất II nitro và axit closulfonic để thu được hợp chất III sulfonyl clorua; khử hợp chất III sulfonyl clorua để thu được hợp chất IV disunfua; khử hợp chất IV disunfua bằng hydro hoặc kim loại để thu được hợp chất V amino; cho hợp chất V tiếp amino xúc với chất ái điện tử dưới điều kiện kiềm để thu được chất trung gian VI; cho chất trung gian VI tiếp xúc với benzyl bromua được thể để thu được hợp chất I-A thứ nhất; và cho hợp chất I-A thứ nhất tiếp xúc với axit m-cloperoxybenzoic hoặc hydro peroxit để xảy ra phản ứng oxi hóa nhằm thu được hợp chất I-B thứ hai.

Trong một nhóm của phương án này, chất trung gian VI được tổng hợp như sau:



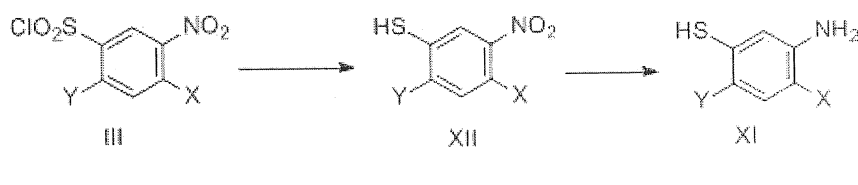
$R_6, X,$ và Y có cùng định nghĩa như được đề cập ở trên.

Cụ thể là, việc tổng hợp chất trung gian VI bao gồm:

cho hợp chất VII amino tiếp xúc với axyl clorua hoặc anhydrit để thu được hợp

chất VIII amit được bảo vệ amino; cho hợp chất VIII amit được bảo vệ amino phản ứng với axit closulfonic và đun nóng để thu được hợp chất IX; khử hợp chất IX để thu được hợp chất X thiophenol, được thủy phân dưới điều kiện kiềm và cho tiếp xúc với chất ái điện tử để xảy ra phản ứng thế để thu được chất trung gian VI.

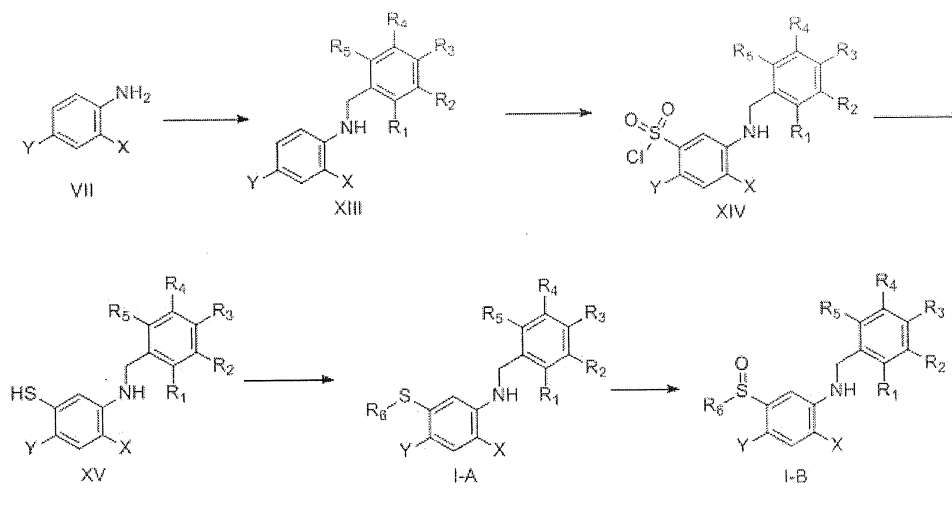
Theo một nhóm của phương án này, hợp chất XI được tổng hợp như sau:



X, và Y có cùng định nghĩa như được đề cập ở trên.

Cụ thể là, việc tổng hợp hợp chất XI bao gồm: khử hợp chất III để thu được hợp chất XII thiophenol và khử hợp chất XII thiophenol để thu được hợp chất XI.

Sáng chế đề xuất thêm phương pháp điều chế aryl sulfua, phương pháp bao gồm các bước tổng hợp sau đây:



$R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, X, Y$, và n có cùng định nghĩa như được đề cập ở trên.

Cụ thể là, phương pháp bao gồm các bước:

điều chế chất trung gian XIII benzylamin từ chất trung gian VII; cho chất trung gian XIII tiếp xúc với sulfonyl clorua, sau đó là phản ứng khử và phản ứng thế để thu được hợp chất I-A thứ nhất; và cho hợp chất I-A thứ nhất tiếp xúc với axit m-cloperoxybenzoic hoặc hydro peroxit để xảy ra phản ứng oxi hóa nhằm thu được hợp

chất I-B thứ hai.

Muối có thể chấp nhận trong nông nghiệp là dẫn xuất của hợp chất có công thức I theo sáng chế. Cụ thể là, khi hydroxyl, cacboxyl, hoặc amino tồn tại trong cấu trúc của công thức I, hydroxyl, cacboxyl, hoặc amino phản ứng với kim loại hoặc bazơ hữu cơ để tạo thành muối, hoặc phản ứng với axit vô cơ hoặc axit hữu cơ để tạo thành muối, chẳng hạn như muối kali, muối natri, muối magiê, hoặc muối canxi. Các bazơ hữu cơ có thể là triethylamin hoặc diisopropylamin; axit vô cơ có thể là axit clohydric, axit sunfuric, axit hydrobromic, v.v.; axit hữu cơ có thể là axit fomic, axit axetic, axit metansulfonic, axit fumaric, axit maleic, v.v..

Hợp chất có công thức chung I (bao gồm I-A và I-B) theo sáng chế có hoạt tính diệt ve cao không ngờ. Do đó, sơ đồ kỹ thuật của sáng chế còn bao gồm việc sử dụng hợp chất có công thức I trong bào chế thuốc diệt ve trong lĩnh vực nông nghiệp hoặc lĩnh vực khác. Cụ thể là, hợp chất có công thức I có hoạt tính mạnh với các loài sau đây (đối tượng được liệt kê bên dưới chỉ dùng để minh họa chứ không làm giới hạn sáng chế): Tetranychidae (*Tetranychus cinnabarinus*, *Panonychus citri*, *Tetranychus urticae*, *Panonychus ulmi*, *Tetranychus kanzawai*, *Tetranychus viennensis*), Acaridae, zodiaceae, Tetranychidae, *Myzus persicae*, nematodes, v.v..

Các hợp chất nêu trên có đặc tính tốt và do đó có thể được sử dụng để bảo vệ cây trồng và vật nuôi trong nông nghiệp và nghề làm vườn không bị ve phá hoại.

Để có được hiệu quả lý tưởng, liều lượng của hợp chất thay đổi cùng với nhiều yếu tố khác nhau, chẳng hạn như hợp chất được sử dụng, cây trồng được bảo vệ, loại sinh vật gây hại, mức độ lây nhiễm, phương pháp sử dụng, môi trường sử dụng, và dạng liều, v.v..

8 g đến 3 kg hợp chất trên mỗi hecta có thể được cung cấp để kiểm soát ve hoàn toàn.

Chế phẩm theo sáng chế có thể được dùng ở dạng bào chế. Hợp chất có công thức chung I được hòa tan hoặc phân tán trong chất mang dưới dạng thành phần hoạt hóa, hoặc được định hình dưới dạng bào chế, sao cho nó dễ dàng phân tán khi sử dụng làm thuốc diệt ve. Ví dụ, hoạt chất có thể được bào chế thành dạng bột thấm nước, hạt phân tán trong nước, chất tạo hỗn dịch, nhũ tương nước, tác nhân nước hoặc nhũ tương đậm đặc. Ít nhất một chất mang rắn hoặc lỏng được thêm vào chế phẩm, và chất

hoạt động bề mặt thích hợp có thể được thêm vào nếu cần.

Sáng chế đề xuất phương pháp ngăn ngừa ve bao gồm: dùng chế phẩm theo sáng chế lên ve hoặc môi trường sinh trưởng của nó. Nhìn chung, liều lượng có hiệu quả thích hợp là từ 8 g đến 1000 g/ha, và liều lượng có hiệu quả tối ưu là 15 g đến 300 g/ha.

Đối với một vài sử dụng, ví dụ, trong nông nghiệp, một hoặc nhiều thuốc trừ sâu, thuốc diệt ve, thuốc diệt nấm, thuốc diệt cỏ, thuốc điều hòa sinh trưởng thực vật hoặc phân bón khác có thể thêm vào chế phẩm diệt ve theo sáng chế, nhờ đó tạo ra hiệu quả và ưu thế cộng gộp.

Có thể hiểu là, có thể làm nhiều biến đổi và sửa đổi khác nhau trong phạm vi bảo hộ của sáng chế.

Các ưu điểm sau đây liên quan đến aryl sulfua chứa benzylamin theo sáng chế:

1. Aryl sunfua chứa benxylamin có hiệu quả tuyệt vời trong việc tiêu diệt nhiều sinh vật gây hại khác nhau, đặc biệt là *Tetranychus urticae*, *Tetranychus kanzawai* và *Tetranychus Panonychus*

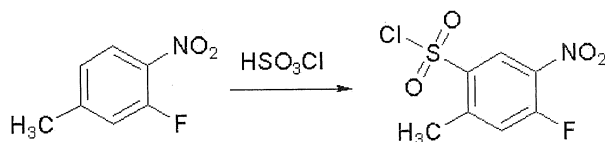
2. Hợp chất có đặc tính tốt trong bảo vệ cây trồng nông nghiệp và làm vườn và vật nuôi.

Ví dụ thực hiện sáng chế

Để minh học thêm, các phương án mô tả chi tiết về aryl sulfua chứa benzylamin và phương pháp điều chế của nó được mô tả bên dưới. Cần phải lưu ý rằng các phương án sau đây được dự tính để mô tả và không làm giới hạn sáng chế.

Ví dụ 1: Điều chế N-(4-clo-3-flobenzyl)-2-flo-4-metyl-5-((2,2,2-trifloetyl) thio) anilin (hợp chất 249)

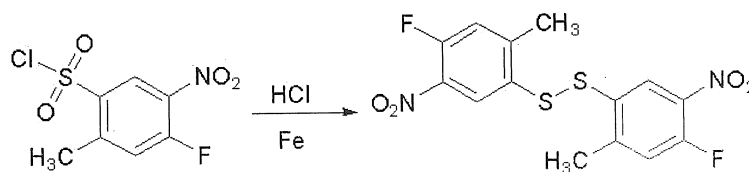
S1. Điều chế 4-flo-2-metyl-5-nitrobenzensulfonyl clorua



Tại nhiệt độ phòng, axit closulfonic (34,95 g, 30 mmol) được thêm vào trong bình thốt cổ đáy tròn 250 mL và 2-flo-4-metylnitrobenzen (15,5 g, 10 mmol) được thêm từ từ làm 4 mẻ vào bình thốt cổ. Dung dịch phản ứng tỏa nhiệt mãnh liệt. Sau đó, bình

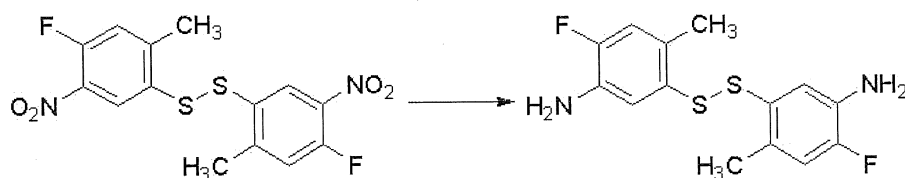
phản ứng được đun nóng tại 60°C, và 2 giờ sau, nhận thấy phản ứng cơ bản đã hoàn thành. Dung dịch phản ứng được thêm vào 500 mL hỗn hợp nước-đá và 400 mL diclometan được thêm vào để chiết và tách chất lỏng. 300 mL nước được thêm vào pha hữu cơ. Sau khi tách và chiết, pha hữu cơ được cho bay hơi trong thiết bị bay hơi quay và được chiết bằng sắc ký cột gel silic dioxit, để thu được 16,5 g chất rắn màu vàng nhạt (hiệu suất 64,45%).

S2. Điều chế 1,2-bis (4-flo-2-metyl-5-nitrophenyl) disunfua



Dưới sự bảo vệ của nitơ, 4-flo-2-metyl-5-nitrobenzensulfonyl clorua (12,7 g, 5 mmol) được hòa tan trong 200 mL axit axetic. 40 mL axit hydrocloric đặc được thêm vào, và dung dịch phản ứng được đun nóng để hồi lưu. Bột sắt (11,2 g, 20 mmol) được thêm từ từ vào dung dịch phản ứng thành 4 mẻ trong 1 giờ. 1,5 giờ sau, 20 mL muối axit đặc được thêm vào và khuấy trong một giờ. Sau đó, phần lớn axit axetic trong dung dịch phản ứng được cho bay hơi, và 300 mL etyl axetat và 300 mL nước được thêm vào dung dịch phản ứng để chiết và tách chất lỏng. 150 mL etyl axetat được thêm vào lớp nước để chiết và tách chất lỏng một lần nữa. Các lớp hữu cơ được kết hợp và rửa với 50 mL dung dịch natri clorua bão hòa, được làm khô trên 10 g natri sulfat khan trong 10 phút, cho bay hơi trong thiết bị bay hơi quay, và được tinh sạch bằng sắc ký cột gel silic dioxit, để thu được 7,4g chất rắn màu nâu nhạt (hiệu suất 79,56%).

S3. Điều chế 5,5'-disunfua (2-flo-4-metylanilin)



Phương pháp 1:

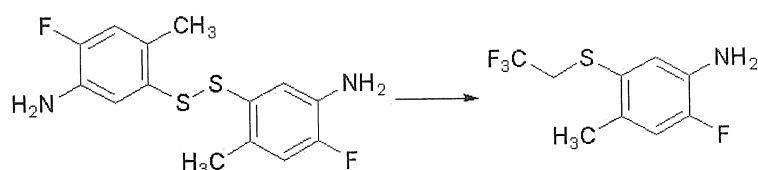
1,2-bis (4-flo-2-metyl-5-nitrophenyl) disunfua (3,72 g, 1 mmol) được thêm vào 30 mL axit hydrocloric 20%. Dung dịch phản ứng được đun nóng tại 60°C, và bột kẽm (1,30 g, 2 mmol) được thêm vào từ từ thành nhiều mẻ và được khuấy trong 1 giờ dưới đun nóng. Phần lớn axit axetic được loại bỏ bằng thiết bị bay hơi quay chân không, và

100 mL dung dịch natri cacbonat bão hòa và 100 mL etyl axetat được thêm vào cặn để chiết và tách. Lớp hữu cơ được làm khô trên 5 g natri sulfat khan, cho bay hơi trong thiết bị bay hơi quay, và được tinh sạch bằng sắc ký cột gel silic dioxit, để thu được 2,45 g chất rắn màu trắng nhờ (hiệu suất 78,52%).

Phương pháp 2:

1,2-bis (4-flu-2-metyl-5-nitrophenyl) disulfua (1,86 g, 0,5 mmol) được hòa tan trong 30 mL etanol khan. Không khí trong bình thốt cổ phản ứng được thay thế bằng nitơ, và 0,3 g paladi cacbon (chứa 50% nước) có 10% paladi được thêm vào. Khí trong bình thốt cổ phản ứng được thay thế bằng khí hydro, và dung dịch phản ứng được khuấy tại 20 atm trong áp suất khí hydro tại 65°C trong 10 giờ. Sau phản ứng, loại bỏ paladi cacbon bằng cách lọc chân không, và dung dịch phản ứng được cho bay hơi trong thiết bị bay hơi quay để thu được 1,50 g chất rắn màu nâu nhạt (hiệu suất 96,2%).

S4. Điều chế 2-flu-4-metyl-5-((2,2,2-trifloetyl) thio) anilin



Phương pháp 1:

5,5'-disulfua (2-flu-4-metylanilin) (1,56 g, 5 mmol) được hòa tan trong 30 mL N, N-dimetylformamit (DMF). 50 mL dung dịch chứa nước natri dihydro photphat (5,0 g, 41,7 mmol) được thêm vào dung dịch phản ứng. Không khí trong bình thốt cổ phản ứng được thay thế bằng nitơ, và natri hydrosunfit (2,5 g, 14,4 mmol) được thêm vào. Bình thốt cổ phản ứng được đun nóng tại 60°C trong 2 giờ, và sau đó 2,2-trifloetyltriflometan sulfonat (3,48 g, 14,4 mmol) được thêm vào và được khuấy trong 1 giờ. Sau đó, dung dịch phản ứng được thêm vào 300 mL nước, và 200 mL etyl axetat được thêm vào để chiết và tách chất lỏng. Lớp hữu cơ được rửa với nước bốn lần, 300 mL nước mỗi lần. Sau khi rửa, pha hữu cơ được cho bay hơi trong thiết bị bay hơi quay, và được tinh sạch bằng sắc ký cột gel silic dioxit, để thu được 1,68 g chất lỏng màu nâu nhạt (hiệu suất là 70,29%).

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, *d6*-DMSO): δ = 7,01 (m, 2H, Ar-H), 5,12 (s, 2H, N-H), 3,76 (dd, J = 21,2, 10,4 Hz, 2H, CH_2), 2,30 (s, 3H, CH_3).

Phương pháp 2:

5,5'-disunfua (2-flo-4-metylanilin) (1,56 g, 5 mmol) được hòa tan trong 30 mL N, N-dimetylformamit (DMF). Natri cacbonat (0,53 g, 5 mmol) và natri hydroxymetylsulfinat (0,67 g, 5 mmol) được thêm vào, và sau đó 2,2,2-trifloioetan (3,15 g, 15 mmol) được thêm vào và được khuấy trong 1 giờ. Sau đó, dung dịch phản ứng được thêm vào 300 mL nước, và 200 mL etyl axetat được thêm vào để chiết và tách chất lỏng. Lớp hữu cơ được rửa với nước bốn lần, 300 mL nước mỗi lần. Sau khi rửa, pha hữu cơ được cho bay hơi trong thiết bị bay hơi quay, và được chiết bằng sắc ký cột gel silic dioxit, để thu được 1,77 g chất lỏng màu nâu nhạt (hiệu suất là 74,06%).

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, d_6 -DMSO): δ = 7,01 (m, 2H, Ar-H), 5,12 (s, 2H, N-H), 3,76 (dd, J =21,2, 10,4 Hz, 2H, CH_2), 2,30 (s, 3H, CH_3).

S5. Điều chế N-(4-clo-3-flobenzyl)-2-flo-4-metyl-5-((2,2,2-trifloetyl) thio) anilin (hợp chất 249)

2-flo-4-metyl-5-((2,2,2-trifloetyl) thio) anilin (239 mg, 1 mmol) được thêm vào DMF (5 mL), và sau đó kali cacbonat (138 mg, 1 mmol) và 4-bromometyl-1-clo-2-flobenzen (223 mg, 1 mmol) lần lượt được thêm vào. Dung dịch phản ứng được khuấy tại nhiệt độ phòng trong 5 giờ, được thêm vào 100 mL nước, và được chiết hai lần với 100 mL etyl axetat. Pha hữu cơ được rửa với nước, được làm khô trên natri sulfat khan, được cô đặc chân không, và được tinh sạch bằng sắc ký cột để thu được 252 mg chất lỏng nhớt không màu. Hiệu suất là 66,0%.

$^1\text{H-NMR}$ (500 MHz, CDCl_3): δ = 7,21-7,34 (m, 2H), 7,00-7,04 (m, 1H), 6,79-6,88 (m, 2H), 4,44 (d, J = 8,0 Hz, 2H), 3,17 (q, J = 7,5 Hz, 2H), 2,36 (d, J = 21,5 Hz, 3H).

MS (m/z , ESI): 382,04 ($m+H$).

Ví dụ 2: Điều chế 2-flo-N-(3-flobenzyl)-4-metyl-5-((2,2,2-trifloetyl) thio) anilin (hợp chất 229)

S1. Điều chế 4-flo-2-metyl-5-nitrophenylthiophenol

4-flo-2-metyl-5-nitrobenzensulfonyl clorua (0,15 mol, 38,0 g) được đổ vào trong bình thót cổ chỉ có một miệng 250 mL, và 80 mL hydroiodat được thêm vào. Dung dịch phản ứng quay lại màu đen, và được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 1 giờ. Sau đó, 80 mL dung dịch natri sulfit bão hòa được thêm vào từ từ, và bột rắn màu vàng xuất hiện

trong dung dịch phản ứng. Bột rắn màu vàng được lọc chân không và được rửa với nước, để thu được 28,0 g bột màu vàng nhạt với hiệu suất là 100%.

S2. Điều chế 4-flo-2-metyl-5-aminothiophenol

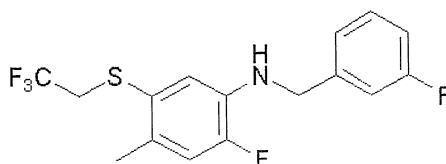
4-flo-2-metyl-5-nitrobenzen thiophenol (0,15 mol, 28,0 g) được hòa tan trong etanol khan (280 mL), và 10% paladi cacbon (1,0 g, 50% lượng nước) được thêm vào. Khí trong bình thốt cổ phản ứng được thay thế bằng hydro ba lần, và dung dịch phản ứng được khuấy qua đêm tại nhiệt độ phòng dưới áp suất bình thường trong áp suất khí hydro. Dung dịch phản ứng được lọc dưới áp suất rút gọn để loại bỏ paladi cacbon, và được cô đặc đến khô dưới áp suất rút gọn để loại bỏ etanol. Thu được 23,2 g chất rắn màu trắng xám với hiệu suất là 98,7%. $^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, d_6 -DMSO): δ = 6,93 (m, 2H, Ar-H), 5,12 (s, 2H, N-H), 3,35 (br, 0,5 H, S-H), 2,15 (s, 3H, CH₃).

S3. Điều chế 2-flo-4-metyl-5-((2,2,2-trifloetyl) thio) anilin

4-flo-2-metyl-5-aminothiophenol (25 mmol, 3,9 g) được hòa tan trong DMF khan (50 mL), và sau đó natri cacbonat (50 mmol, 5,3 g, 2 đương lượng) và natri hydroxymetyl sunfit (25 mmol, 3,4 g, 1 đương lượng) lần lượt được thêm vào. Sau đó, trifloetan (27,5 mmol, 5,8 G, 1,1 đương lượng) được thêm vào dưới bề đá. Dung dịch phản ứng được khuấy tại nhiệt độ phòng trong 2 giờ cho đến khi phản ứng xảy ra hoàn toàn. Dung dịch phản ứng được đổ vào trong nước, và được chiết và tách bằng etyl axetat. Lóp hữu cơ được rửa với nước ba lần, và sau đó được rửa với nước muối bão hòa một lần. Sau khi tách, lóp hữu cơ được làm khô trên natri sulfat khan, và được làm khô dưới áp suất rút gọn để thu được chất lỏng dạng dầu màu nâu. Chất lỏng dạng dầu màu nâu được tinh sạch bằng sắc ký cột với pha động là ete dầu mỏ: etyl axetat = 10: 1, để thu được 4,2 g sản phẩm dạng dầu màu vàng với hiệu suất là 71,2%.

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, d_6 -DMSO): δ = 7,01 (m, 2H, Ar-H), 5,12 (s, 2H, N-H), 3,76 (dd, $J=21,2, 10,4$ Hz, 2H, CH₂), 2,30 (s, 3H, CH₃).

S4. Điều chế 2-flo-N-(3-flobenzyl)-4-metyl-5-((2,2,2-trifloetyl) thio) anilin (hợp chất 229)



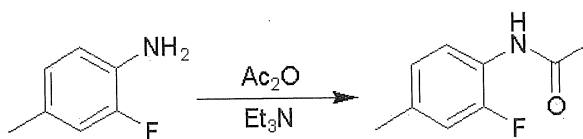
Thao tác giống như thao tác trong S5 của Ví dụ 1.

$^1\text{H-NMR}$ (500 MHz, CDCl_3): $\delta = 7,28\text{-}7,33$ (m, 1H), $7,05\text{-}7,14$ (m, 2H), $6,94\text{-}6,99$ (m, 1H), $6,85$ (d, $J = 15,0\text{Hz}$, 1H), $6,75$ (d, $J = 10,5\text{Hz}$, 1H), $4,36$ (d, $J = 7,0\text{Hz}$, 2H), $3,17$ (q, $J = 12,0\text{Hz}$, 2H), $2,35$ (d, $J = 6,0\text{Hz}$, 3H).

MS (m/z, ESI): $388,07(\text{m}+\text{H})$.

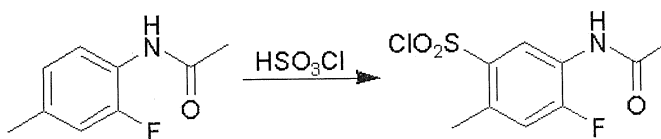
Ví dụ 3: Điều chế 2-flo-N-(3-methoxybenzyl)-4-metyl-5-((2,2,2-trifloetyl) thio) anilin (hợp chất 239)

S1: Điều chế N-(2-flo-4-metylphenyl) axetamit



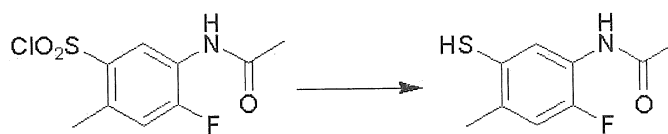
2-flo-4-metylanilin (125 g, 1 mol) được hòa tan trong diclometan (1 L), và trietylamin (111 g, 1,1 mol) được thêm vào. Dung dịch hỗn hợp được làm lạnh trong bể muối đá cho đến khi nhiệt độ nội tại của nó là 0°C . Anhydrit axetic (102 g, 1 mol) được thêm vào từ từ. Sau đó, dung dịch phản ứng được khuấy để phản ứng tại nhiệt độ phòng trong 3 giờ. 2 L nước được thêm vào dung dịch phản ứng để tách và chiết. Pha hữu cơ được làm khô trên natri sulfat khan, và được cho bay hơi trong thiết bị bay hơi quay, để thu được 162 g chất rắn màu trắng, với hiệu suất là 97,0%.

S2: Điều chế 5-axetamino-4-flo-2-metylbenzensulfonyl clorua



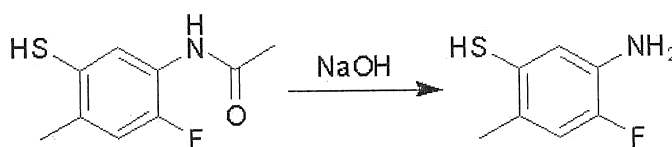
N-(2-flo-4-metylphenyl) axetamit (145 g, 868 mmol) được thêm vào bình thót cổ đáy tròn 1 L, và thiết bị hấp thụ khí được đặt trên bình thót cổ đáy tròn. Axit closulfonic (302 g, 2,60 mol) được thêm vào từ từ và được khuấy bằng điện. Sau đó, dung dịch đã trộn được đun nóng cho đến khi nhiệt độ nội tại của nó là 60°C . 3 giờ sau, nhiệt độ được giảm xuống nhiệt độ phòng. Chất lỏng phản ứng được khuấy và được thêm từ từ vào 2 kg đá, và được chiết hai lần với 500 mL etyl axetat. Các pha hữu cơ được kết hợp, làm khô trên natri sulfat khan, và được cho bay hơi trong thiết bị bay hơi quay, để thu được 175,2 g chất rắn màu trắng nhò, với hiệu suất là 76,2%.

S3: Điều chế N-(2-flo-5-mercapto-4-metylphenyl) axetamit



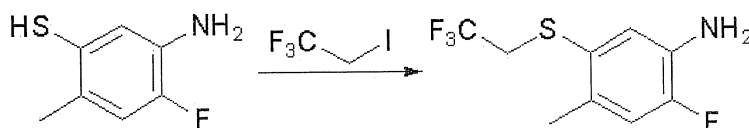
5-axetamino-4-flo-2-metylbenzensulfonyl clorua (174,6 g, 660 mmol) được thêm vào axit axetic (700 mL), và photpho đỏ (50 g, 1,61 mol) và iot (2g) lần lượt được thêm vào. Chất lỏng phản ứng được đun nóng đến trạng thái hồi lưu và được khuấy trong 3 giờ. Chất lỏng phản ứng được cô đặc dưới áp suất rút gọn để loại bỏ axit axetic. 1,5 L nước và 1 L etyl axetat được thêm vào để chiết và tách chất lỏng. 500 mL etyl axetat được thêm vào pha chứa nước để tách chất lỏng. Các pha hữu cơ được kết hợp, được rửa với dung dịch natri cacbonat, được tách và được cho bay hơi trong thiết bị bay hơi quay để thu được 103,4 g chất rắn màu nâu nhạt với hiệu suất là 78,4%.

S4: Điều chế 5-amino-4-flo-2-metylthiophenol



N-(2-flo-5-mercapto-4-metylphenyl) axetamit (101 g, 507 mmol) được thêm vào dung dịch chứa nước natri hydroxit 10% (1 L), được đun nóng và hồi lưu trong 5 giờ. pH của dung dịch phản ứng được điều chỉnh thành 7 bằng axit clohydr loãng, và sau đó dung dịch phản ứng được chiết bằng etyl axetat. Pha hữu cơ được làm khô bằng natri sulfat khan và được cô đặc dưới áp suất rút gọn. Thu được 62,7g chất rắn màu trắng nhò với hiệu suất là 78,8%.

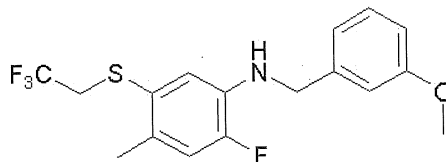
S5: Điều chế 2-flo-4-metyl-5-((2,2,2-trifloetyl) thio) anilin



5-amino-4-flo-2-metylthiophen (15,72 g, 0,1 mol) được hòa tan trong DMF (100 mL), và sau đó kali hydroxit (5,6 g, 0,1 mol), natri formaldehyt bisunfit (15,4g, 0,1mol) và triflo iodoetan (20,9g, 0,1mol) lần lượt được thêm vào. Dung dịch phản ứng được khuấy tại nhiệt độ phòng trong 5 giờ, và sau đó được thêm vào trong 500 mL nước. 500 mL dịch chiết etyl axetat được thêm vào để tách và chiết chất lỏng. 200 mL etyl axetat

được thêm vào pha chứa nước để tách và chiết chất lỏng. Các lớp hữu cơ được kết hợp, được rửa với 500 mL nước hai lần. Pha hữu cơ được tách, làm khô trên natri sulfat khan, được cô đặc dưới áp suất rút gọn, và sau đó được tinh sạch bằng sắc ký cột. Thu được 16,6 g chất rắn màu nâu với hiệu suất là 69,45%.

S6: Điều chế 2-flo-N-(3-methoxybenzyl)-4-metyl-5-((2,2,2-trifloetyl) thio) anilin (hợp chất 239)

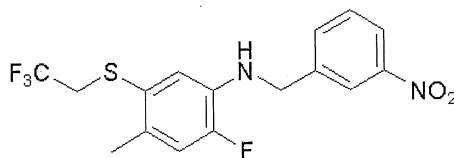


Thao tác giống như thao tác trong S5 của Ví dụ 1.

$^1\text{H-NMR}$ (500 MHz, CDCl_3): $\delta = 7,24\text{--}7,28$ (m, 1H), 6,76–6,98 (m, 5H), 4,30 (d, $J=16,5\text{Hz}$, 2H), 3,75(s, 3H), 3,15 (q, $J = 12,0\text{Hz}$, 2H), 2,35 (s, 3H).

MS (m/z, ESI): 360,09(m+H).

Ví dụ 4: Điều chế 2-flo-4-metyl-n-(3-nitrobenzyl)-5-((2,2,2-trifloetyl) thio) anilin (hợp chất 241)

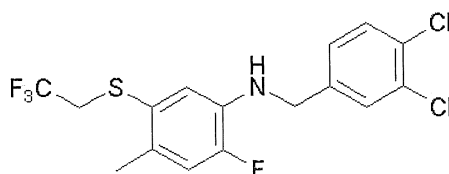


Thao tác giống như thao tác trong S5 của Ví dụ 1.

$^1\text{H-NMR}$ (500 MHz, CDCl_3): $\delta = 8,10$ (d, $J = 10,0\text{Hz}$, 1H), 7,58–7,60 (m, 2H), 7,44–7,47 (m, 1H), 6,87 (d, $J = 14,5\text{Hz}$, 1H), 6,68 (d, $J = 11,0\text{Hz}$, 1H), 4,75 (d, $J = 8,0\text{Hz}$, 2H), 3,15 (q, $J = 12,0\text{Hz}$, 2H), 2,35 (s, 3H).

MS (m/z, ESI): 375,06(m+H).

Ví dụ 5: Điều chế N-(3,4-diclobenzyl)-2-flo-4-metyl-5-((2,2,2-trifloetyl) thio) anilin (hợp chất 247)

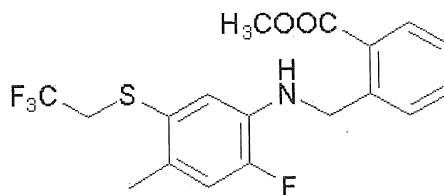


Thao tác giống như thao tác trong S5 của Ví dụ 1.

$^1\text{H-NMR}$ (500 MHz, CDCl_3): $\delta = 7,34\text{-}7,45$ (m, 2H), 7,19 (dd, $J_1 = 3,0\text{Hz}$, $J_2 = 10,5\text{Hz}$, 1H), 6,73 (d, $J = 10,5\text{Hz}$, 1H), 6,55 (d, $J = 10,5\text{Hz}$, 1H), 4,31 (d, $J = 6,5\text{Hz}$, 2H), 3,17 (q, $J = 12,5\text{Hz}$, 2H), 2,36 (d, $J = 14,0\text{Hz}$, 3H).

MS (m/z, ESI): 398,01(m+H).

Ví dụ 6: Điều chế 2-(((2-flo-4-metyl-5-((2,2,2-trifloetyl) thio) phenyl) amino) metyl) benzoat (hợp chất 53)

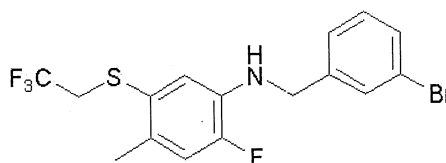


Thao tác giống như thao tác trong S5 của Ví dụ 1.

$^1\text{H-NMR}$ (500 MHz, CDCl_3): $\delta = 7,98$ (d, $J = 9,5\text{Hz}$, 1H), 7,46-7,48 (m, 2H), 7,31-7,34 (m, 1H), 6,80-6,84 (m, 2H), 4,68 (s, 2H), 3,92 (s, 3H), 3,18 (q, $J = 12,0\text{Hz}$, 3H), 2,32(s, 3H).

MS (m/z, ESI): 388,06(m+H).

Ví dụ 7: Điều chế N-(3-bromobenzyl)-2-flo-4-metyl-5-((2,2,2-trifloetyl) thio) anilin (hợp chất 233)

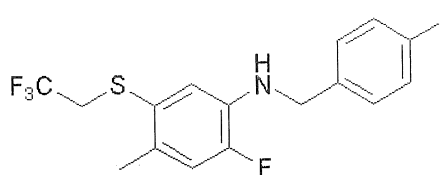


Thao tác giống như thao tác trong S5 của Ví dụ 1.

$^1\text{H-NMR}$ (500 MHz, CDCl_3): $\delta = 7,51$ (s, 1H), 7,38-7,42 (m, 1H), 7,23-7,40 (m, 2H), 6,85-6,88 (m, 1H), 6,76 (d, $J = 11,0\text{Hz}$, 1H), 4,34 (s, 2H), 3,17 (q, $J = 12,0\text{Hz}$, 2H), 2,36 (d, $J = 10,0\text{Hz}$, 3H).

MS (m/z, ESI): 408,00 (m+H).

Ví dụ 8: Điều chế 2-flo-N-(4-iodobenzyl)-4-metyl-5-((2,2,2-trifloetyl) thio) anilin (hợp chất 707)

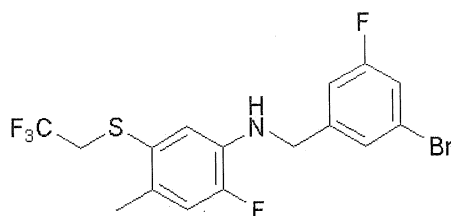


Thao tác giống như thao tác trong S5 của Ví dụ 1.

$^1\text{H-NMR}$ (500 MHz, CDCl_3): $\delta = 7,72(\text{s}, 1\text{H})$, $7,62(\text{d}, J = 9,5\text{Hz}, 1\text{H})$, $7,29\text{-}7,32(\text{m}, 1\text{H})$, $7,08\text{-}7,12(\text{m}, 1\text{H})$, $6,87(\text{d}, J = 15,5\text{Hz}, 1\text{H})$, $6,76(\text{d}, J = 11,0\text{Hz}, 1\text{H})$, $4,32(\text{s}, 2\text{H})$, $3,17(\text{q}, J = 12,0\text{Hz}, 2\text{H})$, $2,33(\text{d}, J = 21,5\text{Hz}, 3\text{H})$.

MS (m/z , ESI): 455,87($m+H$).

Ví dụ 9: Điều chế N-(3-bromo-5-flobenzyl)-2-flo-4-metyl-5-((2,2,2-trifloetyl) thio) anilin (hợp chất 251)



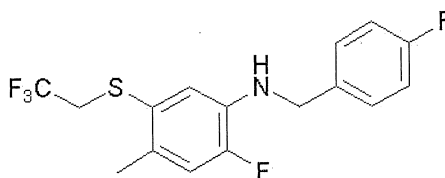
Thao tác giống như thao tác trong S5 của Ví dụ 1.

$^1\text{H-NMR}$ (500 MHz, CDCl_3): $\delta = 7,19\text{-}7,27(\text{m}, 3\text{H})$, $6,78\text{-}6,87(\text{m}, 2\text{H})$, $4,37(\text{d}, J = 7,0\text{Hz}, 2\text{H})$, $3,21(\text{q}, J = 12,0\text{Hz}, 2\text{H})$, $2,34\text{-}2,36(\text{m}, 3\text{H})$.

MS (m/z , ESI): 325,98($m+H$).

Ví dụ 10

Điều chế 2-flo-n-(4-flobenzyl)-4-metyl-5-((2,2,2-trifloetyl) thio) anilin (hợp chất 709)



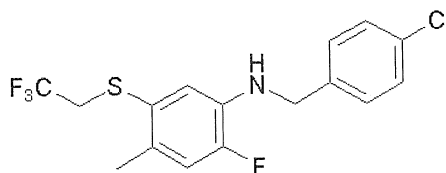
Thao tác giống như thao tác trong S5 của Ví dụ 1.

$^1\text{H-NMR}$ (500 MHz, CDCl_3): $\delta = 7,30\text{-}7,34(\text{m}, 2\text{H})$, $6,96\text{-}7,06(\text{m}, 2\text{H})$, $6,82(\text{d}, J = 11,5\text{Hz}, 1\text{H})$, $6,76(\text{d}, J = 11,0\text{Hz}, 1\text{H})$, $4,31(\text{d}, J = 7,0\text{Hz}, 2\text{H})$, $3,22(\text{q}, J = 12,5\text{Hz}, 2\text{H})$, $2,34\text{-}2,36(\text{m}, 3\text{H})$.

MS (m/z, ESI): 348,07(m+H).

Ví dụ 11

Điều chế N-(4-clobenzyl)-2-flo-4-metyl-5-((2,2,2-trifloetyl) thio) anilin (hợp chất 711)



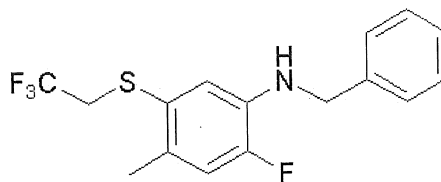
Thao tác giống như thao tác trong S5 của Ví dụ 1.

$^1\text{H-NMR}$ (500 MHz, CDCl_3): $\delta = 7,35(\text{s}, 1\text{H})$, $7,22-7,28(\text{m}, 3\text{H})$, $6,87(\text{d}, J = 15,0\text{Hz}, 1\text{H})$, $6,76(\text{d}, J = 11,0\text{Hz}, 1\text{H})$, $4,31(\text{d}, J = 7,0\text{Hz}, 2\text{H})$, $3,21(\text{q}, J = 12,0\text{Hz}, 2\text{H})$, $2,34-2,37(\text{m}, 3\text{H})$.

MS (m/z, ESI): 364,05(m+H).

Ví dụ 12

Điều chế N-benzyl-2-flo-4-metyl-5-((2,2,2-trifloetyl) thio) anilin (hợp chất 1105)



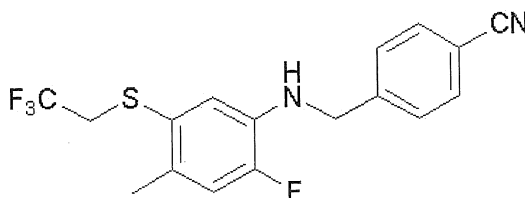
Thao tác giống như thao tác trong S5 của Ví dụ 1.

$^1\text{H-NMR}$ (500 MHz, CDCl_3): $\delta = 7,18-7,28(\text{m}, 6\text{H})$, $6,73-6,82(\text{m}, 2\text{H})$, $4,26(\text{s}, 2\text{H})$, $3,06-3,16(\text{m}, 2\text{H})$, $2,27(\text{s}, 3\text{H})$.

MS (m/z, ESI): 330,09(m+H).

Ví dụ 13

Điều chế 4-((2-flo-4-metyl-5-((2,2,2-trifloetyl) thio) phenyl) amino) metyl) benzylnitril (hợp chất 721)



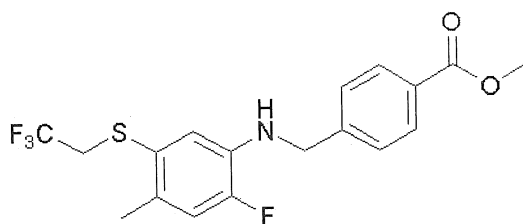
Thao tác giống như thao tác trong S5 của Ví dụ 1.

$^1\text{H-NMR}$ (500 MHz, CDCl_3): δ = 7,64(d, J = 10,0Hz, 2H), 7,46(d, J = 10,5Hz, 2H), 6,88(d, J = 18,5Hz, 1H), 6,66(d, J = 11,0Hz, 1H), 4,44(s, 2H), 3,14(q, J = 7,0Hz, 2H), 2,36(s, 3H).

MS (m/z , ESI): 355,08($m+H$).

Ví dụ 14

Điều chế methyl 4-((2-flu-4-metyl-5-((2,2,2-trifloetyl) thio) phenyl) amino) methyl benzoat (hợp chất 739)



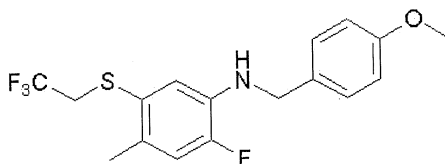
Thao tác giống như thao tác trong S5 của Ví dụ 1.

$^1\text{H-NMR}$ (500 MHz, CDCl_3): δ = 7,94(d, J = 10,5Hz, 2H), 7,34(d, J = 10,0Hz, 2H), 6,77(d, J = 15,5Hz, 1H), 6,68(d, J = 10,5Hz, 1H), 4,34(s, 2H), 3,83(s, 3H), 3,07(q, J = 12,0Hz, 2H), 2,27(s, 3H).

MS (m/z , ESI): 388,06($m+H$).

Ví dụ 15

Điều chế 2-flu-N-(4-methoxybenzyl)-4-metyl-5-((2,2,2-trifloetyl) thio) anilin (hợp chất 1131)



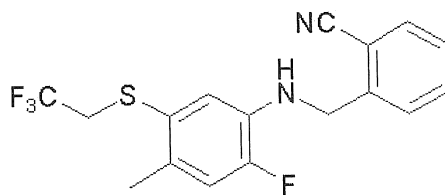
Thao tác giống như thao tác trong S5 của Ví dụ 1.

$^1\text{H-NMR}$ (500 MHz, CDCl_3): δ = 7.20-7.26(m, 2H), 7.67-7.84(m, 4H), 5.07(s, 1H), 4.20(s, 2H), 3.69(s, 3H), 3.13(q, J = 12.0Hz, 2H), 2.28(s, 3H).

MS (m/z , ESI): 360,09($m+H$).

Ví dụ 16

Điều chế 2-((2-flo-4-metyl-5-((2,2,2-trifloetyl) thio) phenyl) amino) metyl) benzylnitril (hợp chất 33)



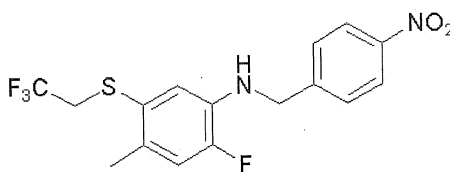
Thao tác giống như thao tác trong S5 của Ví dụ 1.

$^1\text{H-NMR}$ (500 MHz, CDCl_3): δ = 7,68(d, J = 9,5Hz, 1H), 7,50-7,55(m, 2H), 7,35-7,37(m, 1H), 6,85(d, J = 8,5Hz, 1H), 6,74(d, J = 10,5Hz, 1H), 3,18(q, J = 12,0Hz, 2H), 2,35(s, 3H).

MS (m/z, ESI): 355,08(m+H).

Ví dụ 17

Điều chế 2-flo-4-metyl-N-(4-nitrobenzyl)-5-((2,2,2-trifloetyl) thio) anilin (hợp chất 755)



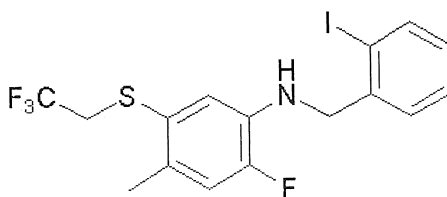
Thao tác giống như thao tác trong S5 của Ví dụ 1.

$^1\text{H-NMR}$ (500 MHz, CDCl_3): δ = 7,68(d, J = 9,5Hz, 1H), 7,50-7,55(m, 2H), 7,35-7,37(m, 1H), 6,85(d, J = 8,5Hz, 1H), 6,74(d, J = 10,5Hz, 1H), 4,49(s, 2H), 3,18(q, J = 12,0Hz, 2H), 2,35(s, 3H).

MS (m/z, ESI): 375,06(m+H).

Ví dụ 18

Điều chế 2-flo-N-(2-iodobenzyl)-4-metyl-5-((2,2,2-trifloetyl) thio) anilin (hợp chất 31)



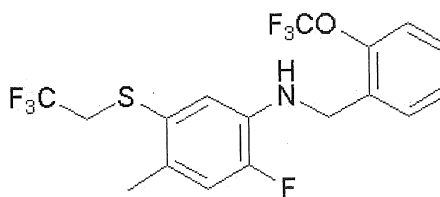
Thao tác giống như thao tác trong S5 của Ví dụ 1.

$^1\text{H-NMR}$ (500 MHz, CDCl_3): δ = 7,86(d, J = 10,0Hz, 1H), 7,30-7,33(m, 2H), 6,95-7,00(m, 1H), 6,85(d, J = 8,5Hz, 1H), 6,73(d, J = 11,0Hz, 1H), 4,34(s, 2H), 3,20(q, J = 12,0Hz, 2H), 2,35(s, 3H).

MS (m/z , ESI): 455,87($m+H$).

Ví dụ 19

Điều chế 2-flo-4-metyl-5-((2,2,2-trifloetyl) thio)-N-(2-(triflomoxy) benzyl) anilin (hợp chất 1107)



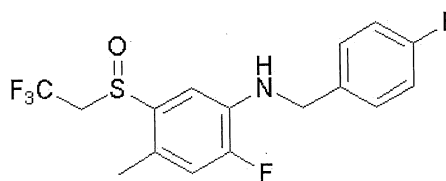
Thao tác giống như thao tác trong S5 của Ví dụ 1.

$^1\text{H-NMR}$ (500 MHz, CDCl_3): δ = 7,30-7,53(m, 4H), 6,85(d, J = 16,5Hz, 1H), 6,73(d, J = 10,5Hz, 1H), 4,44(s, 2H), 3,17(q, J = 12,0Hz, 2H), 2,36(s, 3H).

MS (m/z , ESI): 413,95($m+H$).

Ví dụ 20

Điều chế 2-flo-N-(4-flobenzyl)-4-metyl-5-((2,2,2-trifloetyl) sulfinyl) anilin (hợp chất 710)



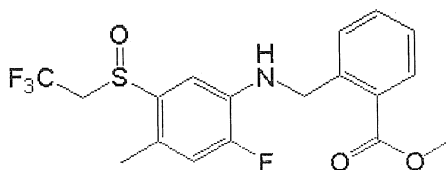
2-flo-N-(4-flobenzyl)-4-metyl-5-((2,2,2-trifloetyl) thio) anilin (347 mg, 1 mmol) được hòa tan trong cloroform (5 mL). Axit m-cloperoxybenzoic (172 mg, 1 mmol) được thêm vào dưới bề đá. Dung dịch phản ứng được khuấy trong 1 giờ, và 50 mL etyl axetat và 50 mL nước được thêm vào để tách và chiết chất lỏng. 50 mL etyl axetat được thêm vào pha chứa nước. Các pha hữu cơ được kết hợp, được rửa với 50 mL nước muối bão hòa, được cho bay hơi trong thiết bị bay hơi quay và được tinh sạch bằng sắc ký cột, để thu được 288 mg chất rắn màu trắng, với hiệu suất là 79,3%.

$^1\text{H-NMR}$ (500 MHz, CDCl_3): $\delta = 7,30\text{-}7,34(\text{m}, 2\text{H}), 6,96\text{-}7,06(\text{m}, 2\text{H}), 6,85(\text{d}, J = 11,5\text{Hz}, 1\text{H}), 6,56(\text{d}, J = 11,0\text{Hz}, 1\text{H}), 4,31(\text{d}, J = 7,0\text{Hz}, 2\text{H}), 3,22(\text{q}, J = 12,5\text{Hz}, 2\text{H}), 2,26(\text{s}, 3\text{H})$.

MS (m/z, ESI): 364,07(m+H).

Ví dụ 21

Điều chế 2-((((2-flu-4-metyl -5-((2,2, 2-trifloetyl) sulfonyl) phenyl) amino) metyl) benzoat (hợp chất 54)



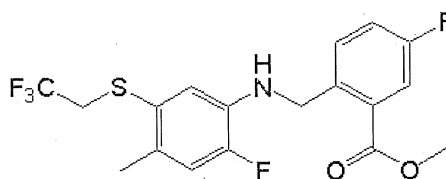
Thao tác giống như thao tác trong S5 của Ví dụ 1 và Ví dụ 20.

$^1\text{H-NMR}$ (500 MHz, CDCl_3): $\delta = 7,94\text{-}8,04(\text{m}, 1\text{H}), 7,45\text{-}7,48(\text{m}, 2\text{H}), 7,25\text{-}7,28(\text{m}, 2\text{H}), 6,82(\text{d}, J = 14,5\text{Hz}, 1\text{H}), 4,73(\text{s}, 2\text{H}), 3,94(\text{s}, 3\text{H}), 3,29(\text{q}, J = 18,0\text{Hz}, 2\text{H}), 2,23(\text{s}, 3\text{H})$.

MS (m/z, ESI): 404,1(m+H), 424,1(m+Na).

Ví dụ 22

Điều chế 5-flu-2-((((2-flu-4-metyl -5-((2,2, 2-trifloetyl) thio) phenyl) amino) metyl) benzoat (hợp chất 303)



Thao tác giống như thao tác trong S5 của Ví dụ 1.

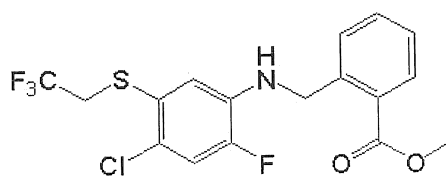
$^1\text{H-NMR}$ (500 MHz, CDCl_3): $\delta = 7,68(\text{dd}, J_1 = 3,5\text{Hz}, J_2 = 11,5\text{Hz}, 1\text{H}), 7,45(\text{dd}, J_1 = 7,0\text{Hz}, J_2 = 10,5\text{Hz}, 1\text{H}), 7,16(\text{t}, J = 10\text{Hz}, 1\text{H}), 6,81(\text{dd}, J_1 = 10,5\text{Hz}, J_2 = 17,5\text{Hz}, 2\text{H}), 4,65(\text{s}, 2\text{H}), 3,92(\text{s}, 3\text{H}), 3,19(\text{q}, J = 7,5\text{Hz}, 2\text{H}), 2,33(\text{s}, 3\text{H})$.

MS (m/z, ESI): 406,5(m+H).

Ví dụ 23

Điều chế 2-((((4-clo-2-flu-5-((2,2, 2-trifloetyl) thio) phenyl) amino) metyl) benzoat (hợp chất 304)

benzoat (hợp chất 1202)



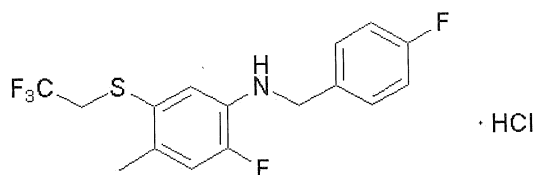
Thao tác giống như thao tác trong S5 của Ví dụ 1.

$^1\text{H-NMR}$ (500 MHz, CDCl_3): $\delta = 8,00(\text{dd}, J_1 = 1,5\text{Hz}, J_2 = 9,5\text{Hz}, 1\text{H}), 7,43-7,50(\text{m}, 2\text{H}), 7,33-7,38(\text{m}, 1\text{H}), 7,05(\text{d}, J = 14\text{Hz}, 1\text{H}), 6,91(\text{d}, J = 6,0\text{Hz}, 1\text{H}), 4,69(\text{s}, 2\text{H}), 3,92(\text{s}, 3\text{H}), 3,32(\text{q}, J = 14,0\text{Hz}, 2\text{H})$.

MS (m/z , ESI): 408,5($m+H$), 430,5($m+Na$).

Ví dụ 24

Điều chế 2-flo-N-(4-flo-Benzyl) -4-metyl-5-((2,2, 2-trifloetyl) sunfua) anilin (hydroclorua của hợp chất 709)



2-flo-N-(4-flo-benzyl) -4-metyl-5-((2,2, 2-trifloetyl) sunfua) anilin (347 mg, 1 mmol) được hòa tan trong metanol (5 mL), và 30% dung dịch hydro clorua metanol (5 mL) được thêm vào. Dung dịch đã trộn được khuấy tại nhiệt độ phòng trong 1 giờ, và được cất dưới áp suất rút gọn để loại bỏ dung môi và hydro clorua. Thu được 384 mg chất rắn màu trắng với hiệu suất là 100%.

$^1\text{H-NMR}$ (500 MHz, DMSO): $\delta = 7,11-7,28(\text{m}, 6\text{H}), 6,75-6,85(\text{m}, 2\text{H}), 4,58(\text{d}, J = 7,0\text{Hz}, 2\text{H}), 3,22(\text{q}, J = 12,5\text{Hz}, 2\text{H}), 2,34-2,36(\text{m}, 3\text{H})$.

MS (m/z , ESI): 348,07($m+H$).

Ví dụ về dạng bào chế 1

Nhũ tương đậm đặc chứa 8% là hợp chất 709

8 phần của hợp chất 709 được hòa tan trong hỗn hợp gồm 10 phần là metylnaphthalen, 2 phần là metylpyrrolidon và 20 phần là metyl oleat 1169. Hỗn hợp được khuấy, và 8 phần là canxi dodecyl benzen sulfonat và 4 phần là tristyren phenol

polyoxyetylen polyoxypropylen ete được thêm vào. Số còn lại là dầu dung môi thơm cho đến khi tổng trọng lượng là 100 phần. Dung dịch đã trộn được khuấy để thu được nhũ tương đậm đặc chứa 8% là hợp chất 709.

Ví dụ về dạng bào chế 2

Chất tạo hỗn dịch chứa 20% là hợp chất 710

20 phần là hợp chất 71, 1 phần là magie nhôm silicat và 0,3 phần là axit benzoic được trộn để sử dụng. 3 phần là amoni tristyrylphenol polyoxyetylen ete sulfat, 3 phần là polyete khối, 5 phần là etylen glycol và nước được cắt và trộn trong máy cắt tốc độ cao. Sau đó, các chất phụ gia đã cắt được thêm vào hỗn hợp rắn, được khuấy và cắt và sau đó nghiền trong máy nghiền trong 3 giờ. Sau đó, hạt thủy tinh được lọc ra để thu được chất tạo hỗn dịch chứa 20% là hợp chất 710.

Ví dụ về dạng bào chế 3

Bột thấm nước chứa 20% là hợp chất 53

20 phần là hợp chất 53 được thêm vào hỗn hợp gồm 2 phần là natri lauryl sulfat, 4 phần là natri lignosulfonat, 20 phần là silica hydrat và 54 phần là đất sét. Hỗn hợp được khuấy hoàn toàn để thu được bột thấm nước chứa 20% là hợp chất 53.

Ví dụ về dạng bào chế 4

Dạng hạt chứa 5% là hợp chất 53

2 phần là natri dodecylbenzen sulfonat, 10 phần là bentonit và 83 phần là đất sét được thêm vào 5 phần là hợp chất 53. Hỗn hợp được khuấy hoàn toàn, và lượng nước thích hợp được thêm vào. Hỗn hợp được khuấy liên tục, được tạo hạt bằng máy tạo hạt, và được sấy khô bằng không khí để thu được hạt chứa 5% là hợp chất 53.

Ví dụ về dạng bào chế 5

Dạng bột hòa nước chứa 30% là hợp chất 53

30 phần là hợp chất 53, 20 phần là natri lignosulfonat, 2 phần là chất thấm ướt, và 2 phần là đen cacbon trắng được trộn, và cao lạnh được thêm vào cho đến khi tổng trọng lượng là 100 phần. Hỗn hợp được trộn với nước, đập nhỏ và đồng nhất hóa bằng máy chặt, nghiền trong máy xay cát, và sấy phun sương để thu được bột hòa nước chứa 30% là hợp chất 53.

Ví dụ về việc sử dụng

Thử nghiệm hoạt tính trên *Tetranychus cinnabarinus*

Hợp chất thử nghiệm được hòa tan trong axeton và được pha loãng đến nồng độ mong muốn với dung dịch Tween 80 0,1% với hàm lượng axeton không vượt quá 5%.

Bỏ bớt một lá thật khỏi cây đậu con có hai lá thật. *Tetranychus cinnabarinus* được nhiễm cho cây và số lượng của nó nghiên cứu. Toàn bộ cây trồng được phun bằng máy phun cầm tay, và mỗi xử lý được lặp lại 3 lần. Sau mỗi xử lý, cây đậu con được trồng trong phòng nhiệt độ không đổi. Sau 72 giờ, nghiên cứu số lượng ve sống và tính toán số lượng ve chết. Số lượng *Tetranychus cinnabarinus* là 100-200 trên mỗi lần nhiễm.

Số lượng chết = (số lượng ve nhiễm - số lượng ve còn sống sau xử lý) $\times$ số lượng ve nhiễm $\times$ 100%.

Trong thử nghiệm này, các hợp chất sau đây cho thấy tỷ lệ chết trên 90% đối với ve tại 100 ppm (100 mg/L): Hợp chất số 1, 2, 3, 4, 5, 6, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 33, 34, 39, 40, 41, 42, 43, 44, 53, 54, 55, 56, 57, 58, 67, 68, 71, 72, 95, 96, 97, 98, 99, 100, 108, 109, 110, 111, 139, 140, 141, 142, 153, 154, 155, 156, 167, 168, 169, 170, 229, 230, 231, 232, 247, 248, 249, 250, 253, 254, 255, 256, 257, 258, 275, 276, 277, 278, 283, 284, 285, 286, 289, 290, 291, 292, 293, 294, 303, 304, 305, 306, 307, 308, 317, 318, 321, 322, 331, 332, 355, 356, 357, 358, 366, 367, 368, 369, 423, 424, 425, 426, 507, 508, 509, 510, 523, 524, 535, 536, 537, 538, 577, 578, 619, 620, 635, 636, 647, 648, 649, 650, 805, 806, 807, 808, 817, 818, 819, 820, 929, 930, 931, 932, 957, 958, 1029, 1030, 1031, 1032, 1043, 1044, 1045, 1046, 1071, 1072, 1113, 1114, 1115, 1116, 1117, 1118, 1125, 1126, 1165, 1166, 1167, 1168, 1177, 1178, 1202, 1203, 1204, 1205, 1216, 1217, 1256, 1257, 1264, 1265, 1266, 1267, 1268, 1269, 1270, 1271, 1274, 1275, 1282, 1283, 1284, 1285, 1286, 1287, 1288, 1289, 1292, 1293, 1300, 1301, 1302, 1303, 1304, 1305, 1306, 1307, 1310, 1311, 1318, 1319, 1320, 1321, 1322, 1323, 1324, 1325, 1328, 1329.

Trong thử nghiệm này, các hợp chất sau đây có tỷ lệ gây chết là trên 90% đối với ve tại 25 ppm (25 mg/L): Hợp chất số 53, 54, 55, 56, 108, 109, 303, 304, 305, 306, 366, 367, 535, 536, 1165, 1166, 1167, 1168, 1177, 1178, 1202, 1203, 1264, 1265, 1282, 1283, 1300, 1301, 1318, 1319.

Trong thử nghiệm này, các hợp chất sau đây có tỷ lệ gây chết là trên 90% đối với

ve tại 6,25 ppm (6,25 mg/L): Hợp chất số 53, 54, 303, 304, 1165, 1166, 1202, 1203.

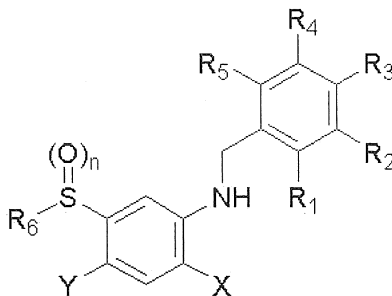
Theo phương pháp ở trên, hợp chất số 53, 54, 303, 304, 1165, 1166, 1202 và 1203 theo sáng chế được lựa chọn để tiến hành thử nghiệm diệt ve song song với bifenazat và cyflumetofen. Các kết quả thử nghiệm được trình bày trong Bảng 2 dưới đây:

Bảng 2: Dữ liệu thử nghiệm

Hợp chất số:	Nồng độ (ppm)	% chết
53	3,12	99
54	3,12	100
303	3,12	99
304	3,12	98
1165	3,12	99
1166	3,12	98
1202	3,12	97
1203	3,12	98
Bifenazat	3,12	85
Cyflumetofen	3,12	72

YÊU CẦU BẢO HỘ

1. Aryl sulfua chứa benzylamin có công thức I, hoặc muối có thể chấp nhận trong nông nghiệp của nó;



I

;

trong đó:

n là 0, 1 hoặc 2;

X và Y tại mỗi lần xuất hiện đại diện cho hydro, flo, clo, brom, iot, nhóm xyano, C_{1-4} alkyl, C_{1-4} haloalkyl, C_{1-4} alkoxy hoặc C_{1-4} haloalkoxy;

R_1 , R_2 , R_3 , R_4 , và R_5 tại mỗi lần xuất hiện đại diện cho hydro, flo, clo, brom, iot, nhóm xyano, nitro, amino, hydroxymetyl, cacboxyl, hydroxyl, sulfydryl, C_{1-10} alkyl, C_{1-10} haloalkyl, C_{1-10} alkoxy, C_{1-10} haloalkoxy, C_{1-10} alkoxyacetyl, C_{1-10} haloalkoxyacetyl, C_{1-10} alkylsulfonyloxy, C_{1-10} alkylsulfonyl, C_{1-10} alkylthiol, C_{1-10} haloalkylthiol, C_{2-10} etoxyacetyl, C_{1-10} alkyl acetyl, amino acetyl, C_{1-10} N-alkyl acetyl, N, N-dimethylacetyl, N, N-dimethylthioacetyl, C_{1-10} N-alkyl thioacetyl, 2-oxoproxyacetyl, metoxymetoxycacbonyl; và

R_6 đại diện cho C_{1-6} haloalkyl hoặc n-propyl.

2. Aryl sulfua theo điểm 1, trong đó trong công thức I,

n là 0 hoặc 1;

X là flo, clo, hoặc metyl;

Y là clo hoặc metyl;

R_1 là hydro, flo, clo, brom, hydroxyl, nitro, hydroxymetyl, nhóm xyano, triflometyl, C_{1-3} alkyl, C_{1-4} alkoxyacetyl, axetyl, propionyl, C_{1-3} alkoxy, etylthio, 2-floetanolthioxy, 2-cloetanolthioxy, 2,2-difloetylthio, 2,2,2-trifloetylthio, propylthio,

2,2,2-trifloethylsulfinyl, vinyloxycarbonyl, 2,2, 2-trifloetoxycarbonyl, hoặc N-methylcarbonyl;

R₂ là hydro, flo, hoặc clo;

R₃ là hydro, flo, clo, brom, hoặc nhóm xyano;

R₄ và R₅ tại mỗi lần xuất hiện đại diện cho hydro; và

R₆ là N-propyl hoặc 2,2,2-trifloethyl.

3. Aryl sulfua theo điểm 1, trong đó

n là 0 hoặc 1;

X là flo;

Y là clo hoặc metyl;

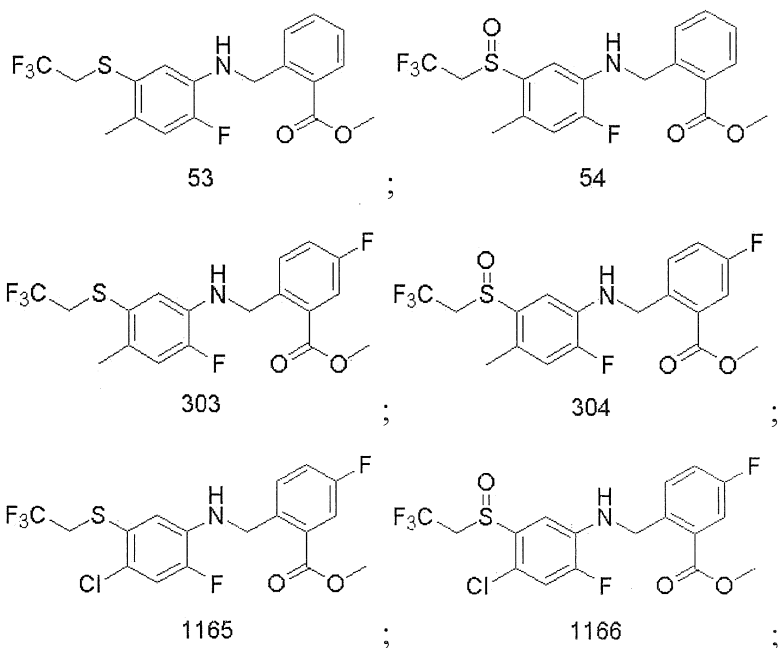
R₁ là metoxycarbonyl, etoxycarbonyl, etylthio, hoặc 2,2,2-trifloethylthio;

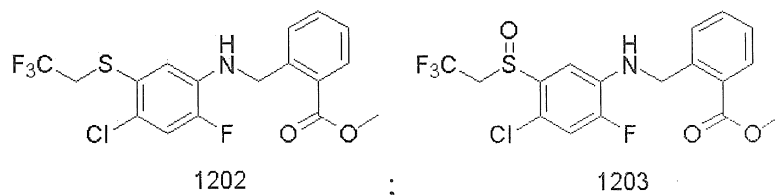
R₂, R₄, và R₅ tại mỗi lần xuất hiện đại diện cho hydro;

R₃ là hydro, flo, clo, hoặc nhóm xyano; và

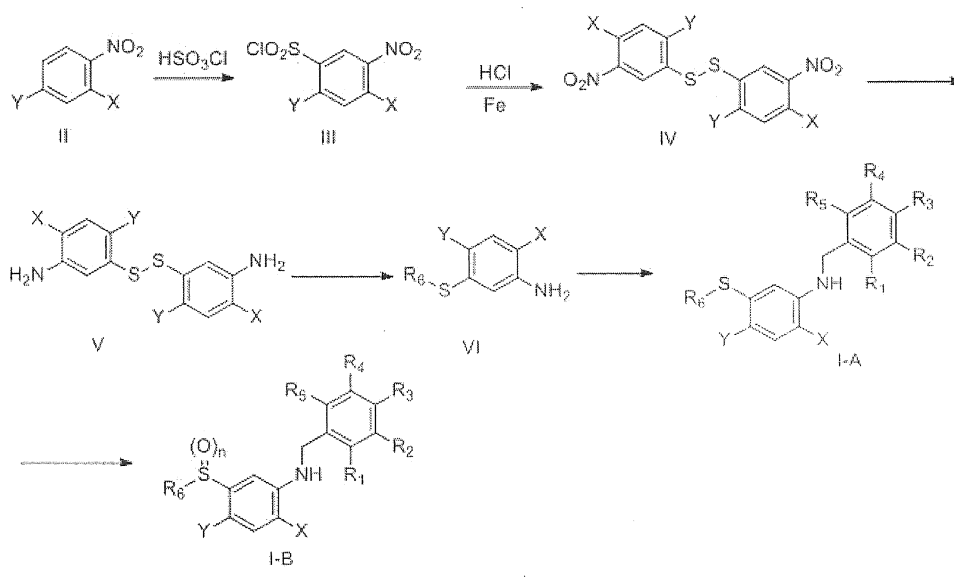
R₆ là 2,2,2-trifloethyl.

4. Aryl sulfua theo điểm 1, trong đó công thức I bao gồm:





5. Phương pháp điều chế aryl sulfua theo điểm 1, phương pháp này có con đường tổng hợp sau đây:

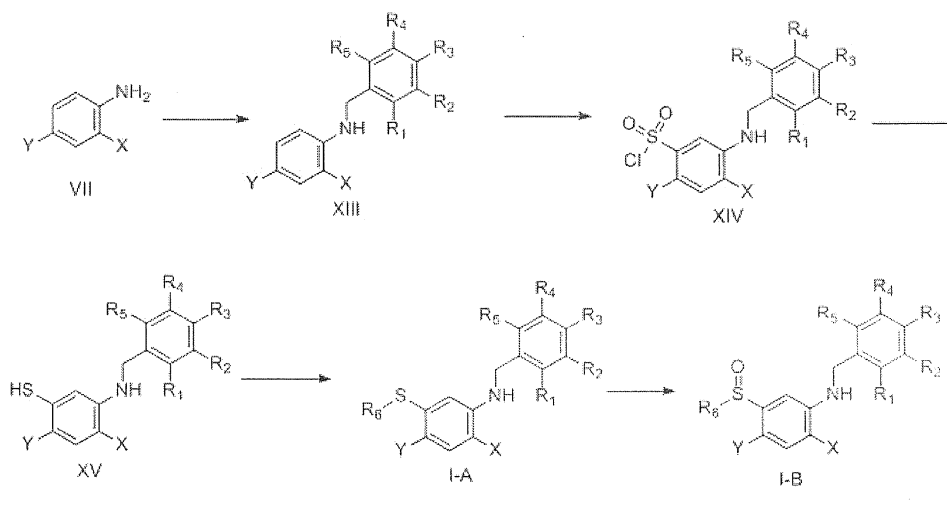


trong đó, R_1 , R_2 , R_3 , R_4 , R_5 , R_6 , X , và Y như đã xác định trong điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 4, và n là 1 hoặc 2;

phương pháp bao gồm:

đun nóng hỗn hợp gồm hợp chất II nitro và axit closulfonic để thu được hợp chất III sulfonyl clorua; khử hợp chất III sulfonyl clorua để thu được hợp chất IV disulfua; khử hợp chất IV disulfua bằng hydro hoặc kim loại để thu được hợp chất V amino; cho hợp chất V amino tiếp xúc với chất ái điện tử dưới điều kiện kiềm để thu được chất trung gian VI; cho chất trung gian VI tiếp xúc với benzyl bromua được thế để thu được hợp chất I-A thứ nhất; và cho hợp chất I-A thứ nhất tiếp xúc với axit m-cloperoxybenzoic hoặc hydro peroxit để xảy ra phản ứng oxi hóa nhằm thu được hợp chất I-B thứ hai.

6. Phương pháp điều chế aryl sulfua theo điểm 1, phương pháp này có con đường tổng hợp sau đây:



trong đó, R_1 , R_2 , R_3 , R_4 , R_5 , R_6 , X , và Y như đã xác định trong điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 4;

phương pháp bao gồm:

điều chế chất trung gian XIII benzylamin từ chất trung gian VII; cho chất trung gian XIII benzylamin tiếp xúc với sulfonyl clorua, sau đó là phản ứng khử và phản ứng thế, để thu được hợp chất I-A thứ nhất; và cho hợp chất I-A thứ nhất tiếp xúc với axit m-cloperoxybenzoic hoặc hydro peroxit để xảy ra phản ứng oxi hóa nhằm thu được hợp chất I-B thứ hai.

7. Chế phẩm nông nghiệp, chứa hợp chất có công thức I theo điểm 1, muối nông nghiệp và ít nhất một chất mang lỏng hoặc rắn.

8. Phương pháp kiểm soát sinh vật gây hại không xương sống, phương pháp này bao gồm xử lý sinh vật gây hại không xương sống, chuỗi thức ăn của nó, môi trường sống hoặc nơi sinh sản, hoặc cây trồng và đất nơi sinh vật gây hại không xương sống sinh trưởng bằng hợp chất có công thức I theo điểm 1 và muối nông nghiệp của nó.

9. Phương pháp theo điểm 8, phương pháp này bao gồm xử lý cây trồng với liều lượng có hiệu quả trừ sâu của hợp chất có công thức I và muối nông nghiệp của nó.