(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) **1-0028696**

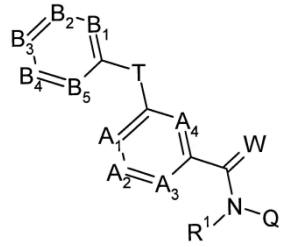
(51)[7] **C07D 231/12**; A01N 43/72; A01N 43/80; C07D 401/04; C07D 207/337; C07D 261/08; A01N 43/56; A01P 7/00

(13) **B**

(21) 1-2016-01938 (22) 05/11/2014
(86) PCT/EP2014/073794 05/11/2014 (87) WO2015/067646 14/05/2015
(30) 13191610.8 05/11/2013 EP; 14181149.7 15/08/2014 EP
(45) 25/06/2021 399 (43) 25/08/2016 341A
(73) Bayer Cropscience Aktiengesellschaft (DE)
Alfred-Nobel-Str. 50, 40789 Monheim am Rhein, Germany
(72) HALLENBACH, Werner (DE); SCHWARZ, Hans-Georg (DE); ILG, Kerstin (DE); GÖRGENS, Ulrich (DE); KÖBBERLING, Johannes (DE); TURBERG, Andreas (DE); BÖHNKE, Niels (DE); MAUE, Michael (DE); VELTEN, Robert (DE); HARSCHNECK, Tobias (DE); HAHN, Julia Johanna (DE); HORSTMANN, Sebastian (DE).
(74) Công ty Luật TNHH T&G (TGVN)

(54) HỢP CHẤT TRIFLO VÀ CHẾ PHẨM DIỆT CÔN TRÙNG CHỨA HỢP CHẤT NÀY

(57) Sáng chế đề cập đến, không kể những đối tượng khác, hợp chất có công thức chung (I)



(I)

trong đó các nhóm A_1-A_4, T, n, w, Q, R^1 và B_1-B_4 mỗi nhóm là như được xác định trong phần mô tả. Sáng chế cũng đề cập đến quy trình điều chế các hợp chất có công thức (I). Các hợp chất theo sáng chế đặc biệt thích hợp để phòng trừ côn trùng, nhện và giun tròn trong nông nghiệp, và ngoại ký sinh trùng trong thú y.

Lĩnh vực kỹ thuật được đề cập

Sáng chế đề cập đến các hợp chất triflo mới, quy trình điều chế chúng và việc sử dụng chúng để kiểm soát động vật gây hại, cụ thể là động vật chân khớp và đặc biệt là côn trùng, nhện và giun tròn.

Tình trạng kỹ thuật của sáng chế

Đã biết rằng các hợp chất được thế halogen cụ thể có hoạt tính diệt côn trùng (EP 1 911 751, WO2012/069366, WO2012/080376, WO2012/107434 và WO2012/175474).

WO 2011/113756 bộc lộ các dẫn xuất triazol có hoạt tính diệt côn trùng.

Cũng đã biết rằng các hợp chất được thế halogen cụ thể có hoạt tính ức chế xytokin (WO 2000/07980).

Các chế phẩm bảo vệ mùa màng hiện đại cần đáp ứng nhiều nhu cầu, chẳng hạn liên quan đến hiệu lực, mức độ tồn dư và phổ hoạt động, và ứng dụng có thể có. Những câu hỏi về độc tính và khả năng tương thích với các thành phần hoạt tính khác hoặc chất phụ gia điều chế đóng vai trò nhất định, cũng như câu hỏi về chi phí để tổng hợp thành phần hoạt tính. Ngoài ra, tính kháng có thể tồn tại. Vì tất cả những lý do đó, việc tìm kiếm tác nhân bảo vệ mùa màng mới có thể không bao giờ được xem là hoàn thành, và có nhu cầu thường xuyên về các hợp chất mới có các đặc tính được cải thiện so với các hợp chất đã biết ít nhất liên quan đến các khía cạnh riêng.

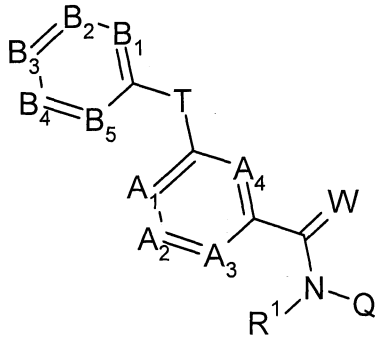
Mục đích của sáng chế là cung cấp các hợp chất mà mở rộng phổ của các thuốc trừ sâu theo nhiều khía cạnh khác nhau và/hoặc cải thiện hoạt tính của chúng.

Hiện đã bất ngờ phát hiện rằng, các hợp chất được thế halogen cụ thể và muối của chúng có các đặc tính sinh học và đặc biệt thích hợp để phòng trừ động vật gây hại, và do đó có khả năng ứng dụng đặc biệt tốt trong lĩnh vực hóa nông và trong lĩnh vực sức khỏe động vật.

Các hợp chất tương tự là đã biết qua WO 2010/051926.

Bản chất kỹ thuật của sáng chế

Các hợp chất được thế halogen mới mà có hoạt tính diệt côn trùng, trừ nhện và/hoặc diệt động vật ký sinh và có công thức chung (I) đã được phát hiện:



(I)

trong đó

R^1 là H, trong từng trường hợp là C_2-C_6-alkenyl, C_2-C_6-alkynyl, C_3-C_7-xycloalkyl, C_1-C_6-alkylcacbonyl, C_1-C_6-alkoxycacbonyl, aryl(C_1-C_3)-alkyl, heteroaryl(C_1-C_3)-alkyl tùy ý được thế, hoặc là C_1-C_6-alkyl tùy ý được thế, tốt hơn là H hoặc tốt hơn là C_1-C_2-alkyl, tốt nhất là H hoặc metyl, đặc biệt là metyl,

các nhóm sau đây là như sau:

A_1 là CR^2 hoặc N,

A_2 là CR^3 hoặc N,

A_3 là CR^4 hoặc N,

A_4 là CR^5 hoặc N,

B_1 là CR^6 hoặc N,

B_2 là CR^7 hoặc N,

B_3 là CR^8 hoặc N,

B_4 là CR^9 hoặc N, và

B_5 là CR^{10} hoặc N,

nhưng không quá ba trong số các nhóm A_1 đến A_4 là N và không quá ba trong số các nhóm B_1 đến B_5 là N;

R^2, R^3, R^4, R^5, R^6, R^7, R^9 và R^{10} mỗi nhóm độc lập là H, halogen, xyano, nitro, trong từng trường hợp là C_1-C_6-alkyl, C_3-C_6-xycloalkyl, C_1-C_6-alkoxy, *N*-C_1-C_6-alkoxyimino-C_1-C_3-alkyl, C_1-C_6-alkylsulphanyl, C_1-C_6-alkylsulphinyl, C_1-C_6-alkylsulphonyl, *N*-C_1-C_6-alkylamino, *N,N*-di-C_1-C_6-alkylamino hoặc *N*-C_1-C_3-alkoxy-C_1-C_4-alkylamino tùy ý được thế hoặc 1-pyrolidinyl;

nếu không có nhóm nào trong số các nhóm A_2 và A_3 là N, R^3 và R^4 cùng với nguyên tử cacbon mà chúng liên kết có thể tạo thành vòng 5 hoặc 6 cạnh chứa 0, 1 hoặc 2 nguyên tử nitơ và/hoặc 0 hoặc 1 nguyên tử oxy và/hoặc 0 hoặc 1 nguyên tử lưu huỳnh; hoặc

nếu không có nhóm nào trong số các nhóm A_1 và A_2 là N, R^2 và R^3 cùng với nguyên tử cacbon mà chúng liên kết có thể tạo thành vòng 6 cạnh chứa 0, 1 hoặc 2 nguyên tử nitơ;

R^8 là halogen, xyano, nitro, trong từng trường hợp là C_1-C_6-alkyl, C_3-C_6-xycloalkyl, C_1-C_6-alkoxy, *N*-C_1-C_6-alkoxyimino-C_1-C_3-alkyl, C_1-C_6-alkylsulphanyl, C_1-C_6-alkylsulphinyl, C_1-C_6-alkylsulphonyl, *N*-C_1-C_6-alkylamino hoặc *N,N*-di-C_1-C_6-alkylamino tùy ý được thế;

W là O hoặc S;

Q là H, formyl, hydroxyl, amino hoặc trong từng trường hợp là C_1-C_6-alkyl, C_2-C_6-alkenyl, C_2-C_6-alkynyl, C_3-C_6-xycloalkyl, C_1-C_5-heteroxycloalkyl, C_1-C_4-alkoxy, C_1-C_6-alkyl-C_3-C_6-xycloalkyl, C_3-C_6-xycloalkyl-C_1-C_6-alkyl, C_6-,C_{10}-C_{14}-aryl, C_1-C_5-heteroaryl, C_6-,C_{10}-,C_{14}-aryl-(C_1-C_3)-alkyl, C_1-C_5-heteroaryl-(C_1-C_3)-alkyl, *N*-C_1-C_4-alkylamino, *N*-C_1-C_4-alkylcacbonylamino, hoặc *N,N*-di-C_1-C_4-alkylamino tùy ý được thế; hoặc

là vòng cacbon 6 cạnh không no tùy ý được thế poly-V; hoặc

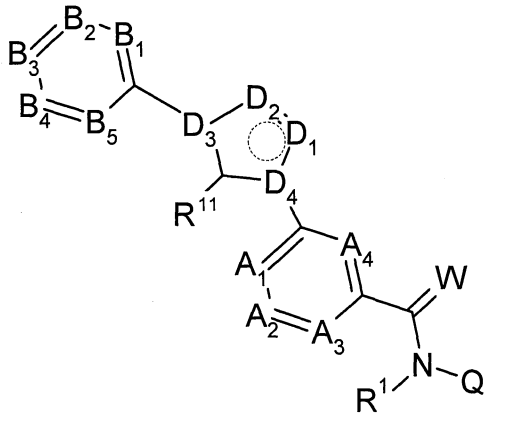
là dị vòng 4, 5 hoặc 6 cạnh không no tùy ý được thế poly-V, trong đó

V độc lập là halogen, xyano, nitro, trong từng trường hợp là C_1-C_6-alkyl, C_1-C_4-alkenyl, C_1-C_4-alkynyl, C_3-C_6-xycloalkyl, C_1-C_6-alkoxy, *N*-C_1-C_6-alkoxyimino-C_1-C_3-alkyl, C_1-C_6-alkylsulphanyl, C_1-C_6-alkylsulphinyl, C_1-C_6-alkylsulphonyl, hoặc *N,N*-di-(C_1-C_6-alkyl)amino tùy ý được thế;

T là hệ dị vòng thơm 5 cạnh tùy ý được thế chứa không quá 2 nguyên tử khác loại (1 hoặc 2 nguyên tử khác loại), như bốn nguyên tử cacbon và một (1) nguyên tử khác loại, tốt hơn là một (1) nguyên tử nitơ, một (1) nguyên tử oxy hoặc một (1) nguyên tử lưu huỳnh hoặc ba nguyên tử cacbon và hai nguyên tử khác loại, tốt hơn là hai nguyên tử nitơ, một (1) nguyên tử nitơ và một (1) nguyên tử oxy, hoặc một (1) nguyên tử nitơ và một (1) nguyên tử lưu huỳnh,

và muối, N-oxit và các dạng đồng phân hỗ biến của hợp chất có công thức (I).

Theo một khía cạnh, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (Ia)



(Ia)

trong đó

các nhóm D_1, D_2 mỗi nhóm độc lập là C-R^{11} hoặc nguyên tử khác loại được chọn từ N và O;

các nhóm D_3 và D_4 mỗi nhóm độc lập là C hoặc nguyên tử khác loại được chọn từ N (tức là các nhóm D_3 và D_4 mỗi nhóm độc lập là C hoặc N);

trong đó không quá một (1) hoặc hai nhóm được chọn từ D_1, D_2, D_3 và D_4 là nguyên tử khác loại, trong đó một (1) hoặc hai nhóm được chọn từ D_1, D_2, D_3 và D_4 là nguyên tử khác loại được chọn từ N và O trong trường hợp D_1 và D_2, hoặc N trong trường hợp D_3 và D_4;

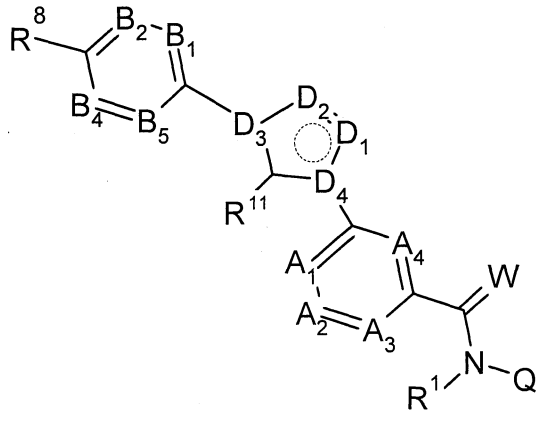
◌ là hệ vòng thơm; và

R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, B_1, B_2, B_3, B_4, B_5, R^2, R^3, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8, R^9, R^{10}, R^{11}, W, Q, V, và T từng nhóm được xác định như mô tả trong bản mô tả, trong đó không quá một nhóm được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 là N và không quá một nhóm được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N; hoặc trong đó một hoặc hai nhóm được

chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 có thể là N và không quá một nhóm được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N,

và muối, N-oxit và các dạng đồng phân hỗ biến của các hợp chất có công thức (I).

Theo một phương án, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (Ia')



(Ia')

trong đó

R^1, R^{11}, Q, W, A_1, A_2, A_3, A_4, B_1, B_2, B_4 và B_5 từng nhóm được xác định như mô tả trong bản mô tả, trong đó không quá một nhóm được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 là N và không quá một nhóm được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N; hoặc trong đó một hoặc hai nhóm được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 có thể là N và không quá một nhóm được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N;

D_1 và D_2 mỗi nhóm độc lập là C-R^{11} hoặc nguyên tử khác loại, tốt hơn là C-R^{11} hoặc nguyên tử khác loại được chọn từ N, O và S, tốt hơn nữa là C-R^{11} hoặc nguyên tử khác loại được chọn từ N và O;

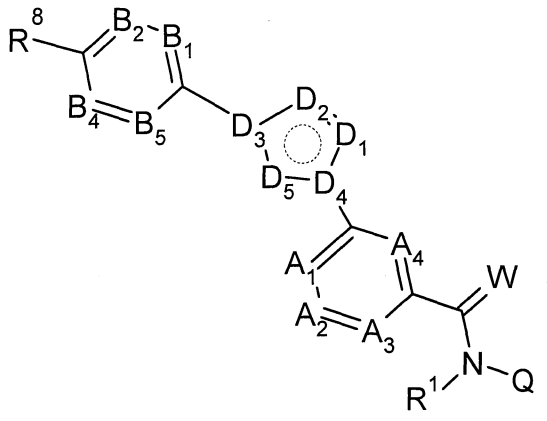
các nhóm D_3 và D_4 mỗi nhóm độc lập là C hoặc nguyên tử khác loại được chọn từ N;

trong đó không quá một (1) hoặc hai nhóm được chọn từ D_1, D_2, D_3 và D_4 là nguyên tử khác loại, trong đó một (1) hoặc hai nhóm được chọn từ D_1, D_2, D_3 và D_4 là nguyên tử khác loại được chọn từ N và O trong trường hợp D_1 và D_2, hoặc N trong trường hợp D_3 và D_4;

là hệ vòng thơm

và R^8 là như được xác định trong bản mô tả, tốt hơn là C_1-C_4-alkyl được perflo hóa.

Theo một phương án tiếp theo, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (Ia")



(Ia")

trong đó

D_1 là C-R^{11} hoặc nguyên tử khác loại được chọn từ N và O;

D_2 là C-R^{11} hoặc nguyên tử khác loại được chọn từ N và O;

D_3 là C hoặc N;

D_4 là C hoặc N;

D_5 là C-R^{11} hoặc N;

trong đó không quá một (1) hoặc hai nhóm được chọn từ D_1, D_2, D_3, D_4 và D_5 và nguyên tử khác loại;

◌ là hệ vòng thơm; và

R^1 là H, trong từng trường hợp là C_2-C_6-alkenyl, C_2-C_6-alkynyl, C_3-C_7-xycloalkyl, C_1-C_6-alkylcacbonyl, C_1-C_6-alkoxycacbonyl, aryl(C_1-C_3)-alkyl, heteroaryl(C_1-C_3)-alkyl tùy ý được thế, hoặc C_1-C_6-alkyl tùy ý được thế, tốt hơn nữa là C_1-C_6-alkyl như C_1-C_2-alkyl, như metyl;

các nhóm sau đây là như sau:

A_1 là CR^2 hoặc N,

A_2 là CR^3 hoặc N,

A_3 là CR^4 hoặc N,

A_4 là CR^5 hoặc N,

B_1 là CR^6 hoặc N,

B_2 là CR^7 hoặc N,

B_3 là CR^8 hoặc N,

B_4 là CR^9 hoặc N, và

B_5 là CR^{10} hoặc N,

nhưng không quá ba trong số các nhóm A_1 đến A_4 là N và không quá ba trong số các nhóm B_1 đến B_5 đồng thời là N;

R^2, R^3, R^4, R^5, R^6, R^7, R^9 và R^{10} mỗi nhóm độc lập là H, halogen, xyano, nitro, trong từng trường hợp là C_1-C_6-alkyl, C_3-C_6-xycloalkyl, C_1-C_6-alkoxy, *N*-C_1-C_6-alkoxyimino-C_1-C_3-alkyl, C_1-C_6-alkylsulphanyl, C_1-C_6-alkylsulphinyl, C_1-C_6-alkylsulphonyl, *N*-C_1-C_6-alkylamino hoặc *N,N*-di-C_1-C_6-alkylamino tùy ý được thế;

nếu không có nhóm nào trong số các nhóm A_2 và A_3 là N, R^3 và R^4 cùng với nguyên tử cacbon mà chúng liên kết có thể tạo thành vòng 5 hoặc 6 cạnh chứa 0, 1 hoặc 2 nguyên tử nitơ và/hoặc 0 hoặc 1 nguyên tử oxy và/hoặc 0 hoặc 1 nguyên tử lưu huỳnh, hoặc

nếu không có nhóm nào trong số các nhóm A_1 và A_2 là N, R^2 và R^3 cùng với nguyên tử cacbon mà chúng liên kết có thể tạo thành vòng 6 cạnh chứa 0, 1 hoặc 2 nguyên tử nitơ;

R^8 là halogen, xyano, nitro, trong từng trường hợp là C_1-C_6-alkyl, C_3-C_6-xycloalkyl, C_1-C_6-alkoxy, *N*-C_1-C_6-alkoxyimino-C_1-C_3-alkyl, C_1-C_6-alkylsulphanyl, C_1-C_6-alkylsulphinyl, C_1-C_6-alkylsulphonyl, *N*-C_1-C_6-alkylamino hoặc *N,N*-di-C_1-C_6-alkylamino tùy ý được thế;

R^{11} độc lập là H, halogen, xyano, nitro, amino hoặc C_1-C_6-alkyl, C_1-C_6-alkyloxy, C_1-C_6-alkylcacbonyl, C_1-C_6-alkylsulphanyl, C_1-C_6-alkylsulphinyl, C_1-C_6-alkylsulphonyl tùy ý được thế, tốt hơn là H;

W là O hoặc S;

Q là H, formyl, hydroxyl, amino hoặc trong từng trường hợp là C_1-C_6-alkyl, C_2-C_6-alkenyl, C_2-C_6-alkynyl, C_3-C_6-xycloalkyl, C_1-C_5-heteroxycloalkyl,

C_1-C_4-alkoxy, C_1-C_6-alkyl-C_3-C_6-xycloalkyl, C_3-C_6-xycloalkyl-C_1-C_6-alkyl, C_6-,C_{10}-C_{14}-aryl, C_1-C_5-heteroaryl, C_6-,C_{10}-,C_{14}-aryl-(C_1-C_3)-alkyl, C_1-C_5-heteroaryl-(C_1-C_3)-alkyl, *N*-C_1-C_4-alkylamino, *N*-C_1-C_4-alkylcacbonylamino, hoặc *N,N*-di-C_1-C_4-alkylamino tùy ý được thế; hoặc

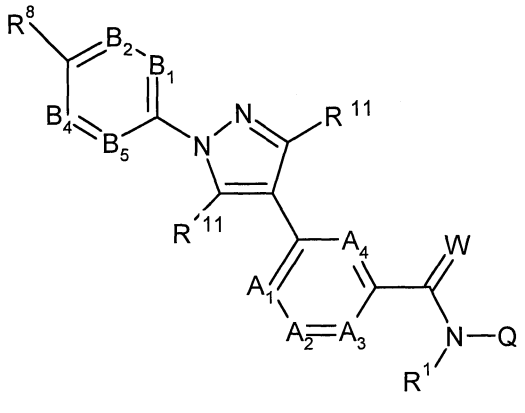
là vòng cacbon 6 cạnh không no tùy ý được thế poly-V; hoặc

là dị vòng 4, 5 hoặc 6 cạnh không no tùy ý được thế poly-V, trong đó

V độc lập là halogen, xyano, nitro, trong từng trường hợp là C_1-C_6-alkyl, C_1-C_4-alkenyl, C_1-C_4-alkynyl, C_3-C_6-xycloalkyl, C_1-C_6-alkoxy, *N*-C_1-C_6-alkoxyimino-C_1-C_3-alkyl, C_1-C_6-alkylsulphanyl, C_1-C_6-alkylsulphinyl, C_1-C_6-alkylsulphonyl, hoặc *N,N*-di-(C_1-C_6-alkyl)amino tùy ý được thế;

và muối, N-oxit và các dạng đồng phân hỗ biến của các hợp chất có công thức (Ia").

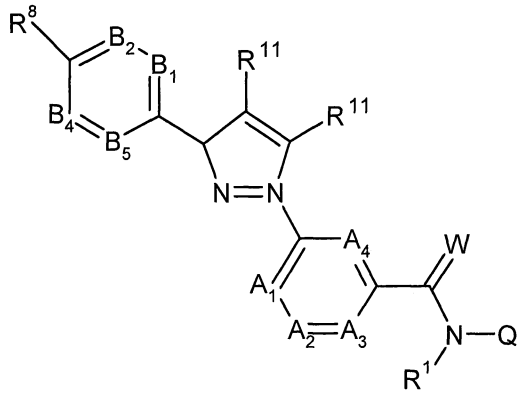
Theo một phương án tiếp theo, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (Ia"), trong đó các hợp chất có công thức (Ia") là các hợp chất có công thức (I-T3)



(I-T3)

trong đó R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, R^{11}, Q và W từng nhóm được xác định như mô tả trong bản mô tả, trong đó không quá một nhóm được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 là N và không quá một nhóm được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N; hoặc trong đó một hoặc hai nhóm được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 có thể là N và không quá một nhóm được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N.

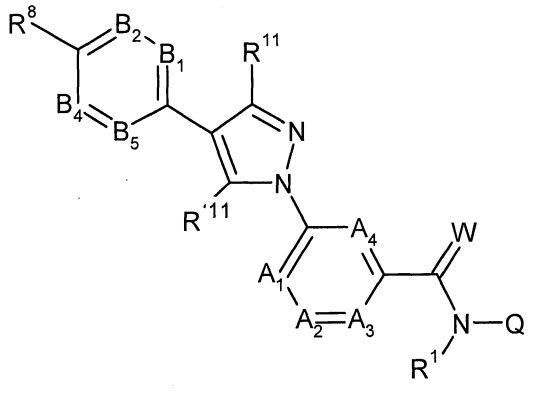
Theo một phương án tiếp theo, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (Ia"), trong đó các hợp chất có công thức (Ia") là các hợp chất có công thức (I-T2)



(I-T2)

trong đó R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, R^{11}, Q và W từng nhóm được xác định như mô tả trong bản mô tả, trong đó không quá một nhóm được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 là N và không quá một nhóm được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N; hoặc trong đó một hoặc hai nhóm được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 có thể là N và không quá một nhóm được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N.

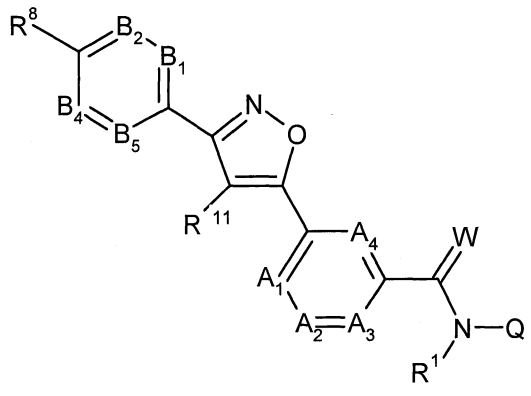
Theo một phương án tiếp theo, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (Ia"), trong đó các hợp chất có công thức (Ia") là các hợp chất có công thức (I-T4)



(I-T4)

trong đó R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, R^{11}, Q và W từng nhóm được xác định như mô tả trong bản mô tả, trong đó không quá một nhóm được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 là N và không quá một nhóm được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N; hoặc trong đó một hoặc hai nhóm được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 có thể là N và không quá một nhóm được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N.

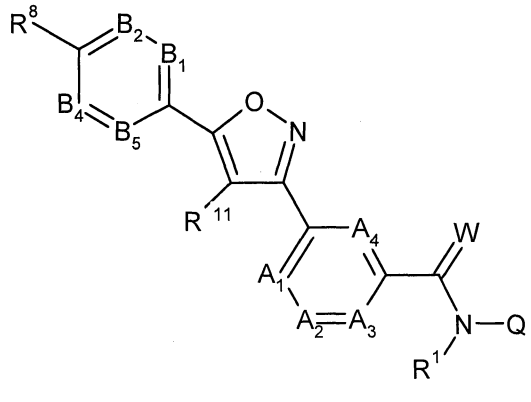
Theo một phương án tiếp theo, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (Ia"), trong đó các hợp chất có công thức (Ia") là các hợp chất có công thức (I-T22)



(I-T-22)

trong đó R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, R^{11}, Q và W từng nhóm được xác định như mô tả trong bản mô tả, trong đó không quá một nhóm được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 là N và không quá một nhóm được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N; hoặc trong đó một hoặc hai nhóm được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 có thể là N và không quá một nhóm được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N.

Theo một phương án tiếp theo, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (Ia"), trong đó các hợp chất có công thức (Ia") là các hợp chất có công thức (I-T23)



(I-T23)

trong đó R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, R^{11} Q và W từng nhóm được xác định như mô tả trong bản mô tả, trong đó không quá một nhóm được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 là N và không quá một nhóm được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N; hoặc trong đó một hoặc hai nhóm được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 có thể là N và không quá một nhóm được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N.

Theo một phương án tiếp theo, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức và các phương án được mô tả trong bản mô tả, trong đó R^{11} độc lập là H và W là O.

Theo một phương án tiếp theo, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức và các phương án được mô tả trong bản mô tả, trong đó R^{11} độc lập là H và W là O và

B_3 là C-R^8, R^8 là C_1-C_3-alkyl được thế halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được perhalogen hóa, tốt hơn nữa là C_1-C_3-alkyl được perflo hóa) hoặc C_1-C_3-alkoxy được thế halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkoxy được perhalogen hóa, tốt hơn nữa là C_1-C_3-alkoxy được perflo hóa).

Theo một phương án tiếp theo, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức và các phương án được mô tả trong bản mô tả, trong đó các nhóm A_1 đến A_4 và B_1 đến B_5 là như sau:

A_1 là C-H,

A_2 là CR^3 hoặc N,

A_3 là CR^4,

A_4 là C-H,

B_1 là CR^6 hoặc N,

B_2 là C-H,

B_3 là CR^8,

B_4 là C-H và

B_5 là CR^{10} hoặc N.

Theo một phương án tiếp theo, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức và các phương án được mô tả trong bản mô tả, trong đó R^1 là H.

Theo một phương án tiếp theo, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức và các phương án được mô tả trong bản mô tả, trong đó Q là C_1-C_4-alkyl, C_3-C_4-xycloalkyl được thế flo, C_3-C_4-xycloalkyl, C_4-C_6-heteroxycloalkyl, 1-oxidothietan-3-yl, 1,1-dioxidothietan-3-yl, benzyl, pyridin-2-ylmetyl, metylsulphonyl hoặc 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetylamino)etyl tùy ý được thế xyano- hoặc flo.

Theo một phương án tiếp theo, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức và các phương án được mô tả trong bản mô tả, trong đó R^8 là halogen hoặc C_1-C_4-alkyl được thế halogen.

Theo một phương án khác nữa, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức được mô tả trong bản mô tả, trong đó R^{11} độc lập là H.

Theo một phương án khác nữa, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức được mô tả trong bản mô tả, trong đó R^6, R^7, R^9 và R^{10} mỗi nhóm độc lập là H, halogen, xyano, nitro, trong từng trường hợp là C_1-C_4-alkyl, C_3-C_4-xycloalkyl, C_1-C_4-alkoxy, *N*-alkoxyiminoalkyl, C_1-C_4-alkylsulphanyl, C_1-C_4-alkylsulphinyl, C_1-C_4-alkylsulphonyl, *N*-C_1-C_4-alkylamino, *N,N*-di-C_1-C_4-alkylamino tùy ý được thế.

Theo một phương án khác nữa, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức được mô tả trong bản mô tả, trong đó R^2, R^3, R^4 và R^5 mỗi nhóm độc lập là H, halogen, xyano, nitro, trong từng trường hợp là C_1-C_4-alkyl, C_3-C_4-xycloalkyl, C_1-C_4-alkoxy, *N*-C_1-C_4-alkoxyimino-C_1-C_4-alkyl, C_1-C_4-alkylsulphanyl, C_1-C_4-alkylsulphinyl, C_1-C_4-alkylsulphonyl, *N*-C_1-C_4-alkylamino hoặc *N,N*-di-C_1-C_4-alkylamino tùy ý được thế.

Theo một phương án khác nữa, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức được mô tả trong bản mô tả, trong đó các nhóm A_1 đến A_4 và B_1 đến B_5 là như sau:

A_1 là C-H,

A_2 là CR^3 hoặc N,

A_3 là CR^4,

A_4 là C-H,

B_1 là CR^6 hoặc N,

B_2 là C-H,

B_3 là CR^8,

B_4 là C-H và

B_5 là CR^{10} hoặc N.

Theo một phương án khác nữa, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức được mô tả trong bản mô tả, trong đó R^1 là H.

Theo một phương án khác nữa, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức được mô tả trong bản mô tả, trong đó Q là C_1-C_4-alkyl được thế bằng flo hoặc bằng cacbonamit (–C(=O)N(R)$_2$ trong đó R độc lập là H, C_1-C_3-alkyl hoặc C_1-C_3-alkyl được thế halogen), C_3-C_4-xycloalkyl, C_4-C_6-heteroxycloalkyl, 1-oxidothietan-3-yl, 1,1-

dioxidothietan-3-yl, benzyl, pyridin-2-ylmetyl, metylsulphonyl hoặc 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetylamino)etyl tùy ý được thế xyano hoặc flo.

Theo một phương án khác nữa, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức được mô tả trong bản mô tả, trong đó Q là 2,2,2-trifloetyl, 2,2-difloetyl, 3,3,3-triflopropyl, xyclopropyl, xyclobutyl, xyclopropyl, xyclobutyl, 1-xyanoxyclopropyl, trans-2-floxyclopropyl, hoặc xis-2-floxyclopropyl, oxetan-3-yl, thietan-3-yl, 1-oxidothietan-3-yl, 1,1-dioxidothietan-3-yl, benzyl, pyridin-2-ylmetyl, metylsulphonyl hoặc 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetylamino)etyl.

Theo một phương án khác nữa, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức được mô tả trong bản mô tả, trong đó R^8 là halogen hoặc C_1-C_4-alkyl được thế halogen.

Theo một khía cạnh khác, sáng chế đề cập đến các chế phẩm diệt côn trùng, đặc trưng bởi hàm lượng của ít nhất một hợp chất có công thức (I) như được mô tả trong bản mô tả và chất độn và/hoặc chất hoạt động bề mặt.

Theo một khía cạnh khác, sáng chế đề cập đến phương pháp bảo vệ hạt chuyển gen hoặc hạt thông thường và thức vật được phát triển từ đó khỏi sự phá hoại của sinh vật gây hại, khác biệt ở chỗ hạt này được xử lý bằng ít nhất một hợp chất có công thức (I) như được mô tả trong bản mô tả.

Theo một khía cạnh khác nữa, sáng chế đề cập đến việc sử dụng các hợp chất có công thức (I) như được mô tả trong bản mô tả hoặc sử dụng chế phẩm diệt côn trùng như được mô tả trong bản mô tả để phòng trừ sinh vật gây hại.

Theo một khía cạnh khác, sáng chế đề cập đến việc sử dụng các hợp chất có công thức (I) như được mô tả trong bản mô tả trong kiểm soát vật trung gian truyền bệnh.

Theo một khía cạnh khác nữa, sáng chế đề cập đến hạt trong đó hợp chất có công thức (I) như được mô tả trong bản mô tả đã được đưa lên hạt dưới dạng thành phần bao hoặc dưới dạng lớp tiếp theo hoặc các lớp tiếp theo ngoài lớp bao.

Theo đó, theo một khía cạnh khác, sáng chế đề cập đến phương pháp áp dụng lớp bao chứa ít nhất một hợp chất có công thức (I) như được mô tả trong bản mô tả hoặc áp dụng hợp chất có công thức (I) như được mô tả trong bản mô tả, mà được đưa lên hạt dưới dạng lớp hoặc các lớp tiếp theo ngoài lớp bao, bao gồm bước a) trộn hạt với

nguyên liệu bao gồm hoặc chứa hợp chất có công thức (I) như được mô tả trong bản mô tả, b) bổ sung thành phần cho chế phẩm hạt được bao thu được, c) làm khô chế phẩm hạt được bổ sung thành phần thu được, d) chống hoặc loại bỏ kết tụ chế phẩm hạt được làm khô thu được.

Tùy thuộc vào bản chất của các phần tử thế, các hợp chất có công thức (I) được mô tả ở đây có thể tùy ý ở dạng các chất đồng phân hình học và/hoặc hoạt động quang học hoặc các hỗn hợp chất đồng phân tương ứng với các thành phần khác nhau. Sáng chế đề cập đến cả các chất đồng phân tinh khiết và hỗn hợp chất đồng phân.

Các hợp chất theo sáng chế cũng có thể ở dạng phức kim loại.

Mô tả chi tiết sáng chế

Các định nghĩa

Người có hiểu biết trung bình về lĩnh vực này biết rằng, nếu không được tuyên bố rõ ràng, cách thể hiện "một" được sử dụng trong đơn sáng chế này có thể, tùy thuộc vào tình huống, là nghĩa là "một (1)", "một (1) hoặc nhiều" hoặc "ít nhất một (1)".

Đối với tất cả các cấu trúc được mô tả trong bản mô tả, như hệ vòng và nhóm, các nguyên tử liền kề không phải là -O-O- hoặc -O-S-.

Các cấu trúc có số nguyên tử cacbon (C) có thể có thay đổi có thể được đề cập đến trong đơn sáng chế này dưới dạng các cấu trúc $C_{\text{số nguyên tử cacbon giới hạn dưới}}$-$C_{\text{số nguyên tử cacbon giới hạn trên}}$ (cấu trúc C_{LL}-C_{UL}), để nhờ đó được quy định cụ thể hơn. Chẳng hạn: nhóm alkyl có thể gồm 3 đến 10 nguyên tử cacbon và trong trường hợp này tương ứng với C_3-C_{10}-alkyl. Các cấu trúc vòng bao gồm các nguyên tử cacbon và nguyên tử khác loại có thể gọi là các cấu trúc "LL- đến UL- cạnh". Một ví dụ về cấu trúc vòng 6 cạnh là toluen (cấu trúc vòng 6 cạnh được thế bằng nhóm metyl).

Nếu thuật ngữ gộp chung dùng cho phần tử thế, chẳng hạn (C_{LL}-C_{UL})-alkyl, ở cuối phần tử thế hỗn hợp, ví dụ (C_{LL}-C_{UL})-xycloalkyl-(C_{LL}-C_{UL})-alkyl, thành phần ở vị trí bắt đầu của phần tử thế hỗn hợp, ví dụ (C_{LL}-C_{UL})-xycloalkyl, có thể được thế một lần hoặc nhiều lần bằng phần tử thế giống hoặc khác nhau và độc lập với phần tử thế sau, ví dụ (C_{LL}-C_{UL})-alkyl. Tất cả các thuật ngữ gộp chung được sử dụng trong đơn dùng cho nhóm hóa học, hệ vòng và các nhóm vòng có thể được quy định cụ thể hơn bằng cách bổ sung "C_{LL}-C_{UL}" hoặc "LL- đến UL-cạnh".

Trừ khi được xác định khác, định nghĩa về thuật ngữ gộp chung cũng áp dụng cho các thuật ngữ gộp chung này trong các phần từ thế hỗn hợp. Chẳng hạn: định nghĩa về C_{LL}-C_{UL}-alkyl cũng áp dụng cho C_{LL}-C_{UL}-alkyl như một phần của phần tử thế hỗn hợp, ví dụ C_{LL}-C_{UL}-xycloalkyl-C_{LL}-C_{UL}-alkyl.

Người có hiểu biết trung bình về lĩnh vực này sẽ thấy rõ rằng các ví dụ được trích dẫn trong đơn này không được xem là cách hạn chế, mà chỉ nhằm mô tả chi tiết một số phương án.

Trong định nghĩa về các ký hiệu được đưa ra trong các công thức trên đây, các thuật ngữ gộp chung thường đại diện cho các phần tử thế sau đây được sử dụng:

Halogen đề cập đến các nguyên tố thuộc nhóm chính 7, tốt hơn là flo, clo, brom và iod, tốt hơn nữa là flo, clo và brom, và thậm chí tốt hơn nữa là flo và clo.

Ví dụ về nguyên tử khác loại là N, O, S, P, B, Si. Tốt hơn, nếu thuật ngữ "nguyên tử khác loại" đề cập đến N, S và O.

Theo sáng chế, "alkyl" – đứng một mình hoặc là một phần của nhóm hóa học – là các hydrocacbon mạch thẳng hoặc phân nhánh tốt hơn là có 1 đến 6 nguyên tử cacbon, ví dụ metyl, etyl, n-propyl, isopropyl, n-butyl, isobutyl, s-butyl, t-butyl, pentyl, 1-metylbutyl, 2-metylbutyl, 3-metylbutyl, 1,2-dimetylpropyl, 1,1-dimetylpropyl, 2,2-dimetylpropyl, 1-etylpropyl, hexyl, 1-metylpentyl, 2-metylpentyl, 3-metylpentyl, 4-metylpentyl, 1,2-dimetylpropyl, 1,3-dimetylbutyl, 1,4-dimetylbutyl, 2,3-dimetylbutyl, 1,1-dimetylbutyl, 2,2-dimetylbutyl, 3,3-dimetylbutyl, 1,1,2-trimetylpropyl, 1,2,2-trimetylpropyl, 1-etylbutyl và 2-etylbutyl. Ưu tiên các alkyl có 1 đến 4 nguyên tử cacbon như metyl, etyl, n-propyl, isopropyl, n-butyl, isobutyl, s-butyl hoặc t-butyl, không kể các alkyl khác. Các alkyl theo sáng chế có thể được thế bằng một hoặc nhiều gốc giống hoặc khác nhau.

Theo sáng chế, "alkenyl" – đứng một mình hoặc là một phần của nhóm hóa học – là các hydrocacbon mạch thẳng hoặc phân nhánh tốt hơn là có 2 đến 6 nguyên tử cacbon và ít nhất một liên kết đôi, ví dụ vinyl, 2-propenyl, 2-butenyl, 3-butenyl, 1-metyl-2-propenyl, 2-metyl-2-propenyl, 2-pentenyl, 3-pentenyl, 4-pentenyl, 1-metyl-2-butenyl, 2-metyl-2-butenyl, 3-metyl-2-butenyl, 1-metyl-3-butenyl, 2-metyl-3-butenyl, 3-metyl-3-butenyl, 1,1-dimetyl-2-propenyl, 1,2-dimetyl-2-propenyl, 1-etyl-2-propenyl,

2-hexenyl, 3-hexenyl, 4-hexenyl, 5-hexenyl, 1-metyl-2-pentenyl, 2-metyl-2-pentenyl, 3-metyl-2-pentenyl, 4-metyl-2-pentenyl, 3-metyl-3-pentenyl, 4-metyl-3-pentenyl, 1-metyl-4-pentenyl, 2-metyl-4-pentenyl, 3-metyl-4-pentenyl, 4-metyl-4-pentenyl, 1,1-dimetyl-2-butenyl, 1,1-dimetyl-3-butenyl, 1,2-dimetyl-2-butenyl, 1,2-dimetyl-3-butenyl, 1,3-dimetyl-2-butenyl, 2,2-dimetyl-3-butenyl, 2,3-dimetyl-2-butenyl, 2,3-dimetyl-3-butenyl, 1-etyl-2-butenyl, 1-etyl-3-butenyl, 2-etyl-2-butenyl, 2-etyl-3-butenyl, 1,1,2-trimetyl-2-propenyl, 1-etyl-1-metyl-2-propenyl và 1-etyl-2-metyl-2-propenyl. Ưu tiên các alkenyl có 2 đến 4 nguyên tử cacbon như, 2-propenyl, 2-butenyl hoặc 1-metyl-2-propenyl, trong số các alkenyl khác. Các alkenyl theo sáng chế có thể được thế bằng một hoặc nhiều gốc giống hoặc khác nhau.

Theo sáng chế, "alkynyl" – đứng một mình hoặc là một phần của nhóm hóa học – là các hydrocacbon mạch thẳng hoặc phân nhánh tốt hơn là có 2 đến 6 nguyên tử cacbon và ít nhất một liên kết ba, ví dụ 2-propynyl, 2-butynyl, 3-butynyl, 1-metyl-2-propynyl, 2-pentynyl, 3-pentynyl, 4-pentynyl, 1-metyl-3-butynyl, 2-metyl-3-butynyl, 1-metyl-2-butynyl, 1,1-dimetyl-2-propynyl, 1-etyl-2-propynyl, 2-hexynyl, 3-hexynyl, 4-hexynyl, 5-hexynyl, 1-metyl-2-pentynyl, 1-metyl-3-pentynyl, 1-metyl-4-pentynyl, 2-metyl-3-pentynyl, 2-metyl-4-pentynyl, 3-metyl-4-pentynyl, 4-metyl-2-pentynyl, 1,1-dimetyl-3-butynyl, 1,2-dimetyl-3-butynyl, 2,2-dimetyl-3-butynyl, 1-etyl-3-butynyl, 2-etyl-3-butynyl, 1-etyl-1-metyl-2-propynyl và 2,5-hexadiynyl. Ưu tiên các alkynyl có 2 đến 4 nguyên tử cacbon như etynyl, 2-propynyl hoặc 2-butynyl-2-propenyl, trong số các alkylnyl khác. Các alkynyl theo sáng chế có thể được thế bằng một hoặc nhiều gốc giống hoặc khác nhau.

Theo sáng chế, "xycloalkyl" – đứng một mình hoặc là một phần của nhóm hóa học – là các hydrocacbon một, hai hoặc ba vòng tốt hơn là có 3 đến 10 cacbon, ví dụ xyclopropyl, xyclobutyl, xyclopentyl, xyclohexyl, xycloheptyl, xyclooctyl, bixyclo[2.2.1]heptyl, bixyclo[2.2.2]octyl hoặc adamantyl. Ưu tiên các xycloalkyl có 3, 4, 5, 6 hoặc 7 nguyên tử cacbon như xyclopropyl hoặc xyclobutyl, trong số các xycloalkyl khác. Các xycloalkyl theo sáng chế có thể được thế bằng một hoặc nhiều gốc giống hoặc khác nhau.

Theo sáng chế, "alkylxycloalkyl" là alkylxycloalkyl một hai hoặc ba vòng tốt hơn là có 4 đến 10 hoặc 4 đến 7 nguyên tử cacbon, ví dụ metylxyclopropyl,

etylxyclopropyl, isopropylxyclobutyl, 3-metylxyclopentyl và 4-metylxyclohexyl. Ưu tiên các alkylxycloalkyl có 4, 5 hoặc 7 nguyên tử cacbon như etylxyclopropyl hoặc 4-metylxyclohexyl, trong số các alkylxycloalkyl khác. Các alkylxycloalkyl theo sáng chế có thể được thế bằng một hoặc nhiều gốc giống hoặc khác nhau.

Theo sáng chế, "xycloalkylalkyl" là xycloalkylalkyl một, hai hoặc ba vòng tốt hơn là có 4 đến 10 hoặc 4 đến 7 nguyên tử cacbon, ví dụ xyclopropylmetyl, xyclobutylmetyl, xyclopentylmetyl, xyclohexylmetyl và xyclopentyletyl. Ưu tiên các xycloalkylalkyl có 4, 5 hoặc 7 nguyên tử cacbon như xyclopropylmetyl hoặc xyclobutylmetyl, trong số các xycloalkylalkyl khác. Các xycloalkylalkyl theo sáng chế có thể được thế bằng một hoặc nhiều gốc giống hoặc khác nhau.

Theo sáng chế, "hydroxyalkyl" là rượu mạch thẳng hoặc phân nhánh tốt hơn là có 1 đến 6 nguyên tử cacbon, ví dụ metanol, etanol, n-propanol, isopropanol, n-butanol, isobutanol, s-butanol và t-butanol. Ưu tiên các nhóm hydroxyalkyl có 1 đến 4 nguyên tử cacbon. Các nhóm hydroxyalkyl theo sáng chế có thể được thế bằng một hoặc nhiều gốc giống hoặc khác nhau.

Theo sáng chế, "alkoxy" là O-alkyl mạch thẳng hoặc phân nhánh tốt hơn là có 1 đến 6 nguyên tử cacbon, ví dụ metoxy, etoxy, n-propoxy, isopropoxy, n-butoxy, isobutoxy, s-butoxy và t-butoxy. Ưu tiên các nhóm alkoxy có 1 đến 4 nguyên tử cacbon. Các nhóm alkoxy theo sáng chế có thể được thế bằng một hoặc nhiều gốc giống hoặc khác nhau.

Theo sáng chế, "alkylsulphanyl" là S-alkyl mạch thẳng hoặc phân nhánh tốt hơn là có 1 đến 6 nguyên tử cacbon, ví dụ metylthio, etylthio, n-propylthio, isopropylthio, n-butylthio, isobutylthio, s-butylthio và t-butylthio. Ưu tiên các nhóm alkylsulphanyl có 1 đến 4 nguyên tử cacbon. Các nhóm alkylsulphanyl theo sáng chế có thể được thế bằng một hoặc nhiều gốc giống hoặc khác nhau.

Theo sáng chế, "alkylsulphinyl" là alkylsulphinyl mạch thẳng hoặc phân nhánh tốt hơn là có 1 đến 6 nguyên tử cacbon, ví dụ metylsulphinyl, etylsulphinyl, n-propylsulphinyl, isopropylsulphinyl, n-butylsulphinyl, isobutylsulphinyl, s-butylsulphinyl và t-butylsulphinyl. Ưu tiên các nhóm alkylsulphinyl có 1 đến 4 nguyên tử cacbon. Các nhóm alkylsulphinyl theo sáng chế có thể được thế bằng một hoặc nhiều gốc giống hoặc khác nhau.

Theo sáng chế, "alkylsulphonyl" là alkylsulphonyl mạch thẳng hoặc phân nhánh tốt hơn là có 1 đến 6 nguyên tử cacbon, ví dụ metylsulphonyl, etylsulphonyl, n-propylsulphonyl, isopropylsulphonyl, n-butylsulphonyl, isobutylsulphonyl, s-butylsulphonyl và t-butylsulphonyl. Ưu tiên các nhóm alkylsulphonyl có 1 đến 4 nguyên tử cacbon. Các nhóm alkylsulphonyl theo sáng chế có thể được thế bằng một hoặc nhiều gốc giống hoặc khác nhau.

Theo sáng chế, "alkylcacbonyl" là alkyl-C(=O) mạch thẳng hoặc phân nhánh tốt hơn là có 2 đến 7 nguyên tử cacbon như metylcacbonyl, etylcacbonyl, n-propylcacbonyl, isopropylcacbonyl, s-butylcacbonyl và t-butylcacbonyl. Ưu tiên các alkylcacbonyl có 1 đến 4 nguyên tử cacbon. Các alkylcacbonyl theo sáng chế có thể được thế bằng một hoặc nhiều gốc giống hoặc khác nhau.

Theo sáng chế, "xycloalkylcacbonyl" là mạch thẳng hoặc phân nhánh xycloalkylcacbonyl tốt hơn là có 3 đến 10 nguyên tử cacbon trong nhóm xycloalkyl, ví dụ xyclopropylcacbonyl, xyclobutylcacbonyl, xyclopentylcacbonyl, xyclohexylcacbonyl, xycloheptylcacbonyl, xyclooctylcacbonyl, bixyclo[2.2.1]heptyl, bixyclo[2.2.2]octylcacbonyl và adamantylcacbonyl. Ưu tiên xycloalkylcacbonyl có 3, 5 hoặc 7 nguyên tử cacbon trong nhóm xycloalkyl. Các nhóm xycloalkylcacbonyl theo sáng chế có thể được thế bằng một hoặc nhiều gốc giống hoặc khác nhau.

Theo sáng chế, "alkoxycacbonyl" – đứng một mình hoặc là thành phần của nhóm hóa học – là alkoxycacbonyl mạch thẳng hoặc phân nhánh, tốt hơn là có 1 đến 6 nguyên tử cacbon hoặc có 1 đến 4 nguyên tử cacbon trong nhóm alkoxy, ví dụ metoxycacbonyl, etoxycacbonyl, n-propoxycacbonyl, isopropoxycacbonyl, s-butoxycacbonyl và t-butoxycacbonyl. Các nhóm alkoxycacbonyl theo sáng chế có thể được thế bằng một hoặc nhiều gốc giống hoặc khác nhau.

Theo sáng chế, "alkylaminocacbonyl" là mạch thẳng hoặc phân nhánh alkylaminocacbonyl tốt hơn là có 1 đến 6 nguyên tử cacbon hoặc 1 đến 4 nguyên tử cacbon trong nhóm alkyl, ví dụ metylaminocacbonyl, etylaminocacbonyl, n-propylaminocacbonyl, isopropylaminocacbonyl, s-butylaminocacbonyl và t-butylaminocacbonyl. Các nhóm alkylaminocacbonyl theo sáng chế có thể được thế bằng một hoặc nhiều gốc giống hoặc khác nhau.

Theo sáng chế, "*N,N*-dialkylaminocacbonyl" là *N,N*-dialkylaminocacbonyl mạch thẳng hoặc phân nhánh tốt hơn là có 1 đến 6 nguyên tử cacbon hoặc 1 đến 4 nguyên tử cacbon trong nhóm alkyl, ví dụ *N,N*-dimetylaminocacbonyl, *N,N*-dietylaminocacbonyl, *N,N*-di(n-propylamino)cacbonyl, *N,N*-di(isopropylamino)cacbonyl và *N,N*-di-(s-butylamino)cacbonyl. Các nhóm *N,N*-dialkylaminocacbonyl theo sáng chế có thể được thế bằng một hoặc nhiều gốc giống hoặc khác nhau.

Theo sáng chế, "aryl" là hệ một, hai hoặc nhiều vòng thơm tốt hơn là có 6 đến 14, đặc biệt là 6 đến 10, nguyên tử cacbon trong vòng, ví dụ phenyl, naphtyl, anthryl, phenanthrenyl, tốt hơn là phenyl. Ngoài ra, aryl còn là hệ nhiều vòng như tetrahydronaphtyl, indenyl, indanyl, fluorenyl, biphenyl, trong đó vị trí liên kết là ở trên hệ vòng thơm. Các nhóm aryl theo sáng chế có thể được thế bằng một hoặc nhiều gốc giống hoặc khác nhau.

Ví dụ về các aryl được thế là arylalkyl, mà cũng có thể được thế bằng một hoặc nhiều gốc giống hoặc khác nhau trong nhóm C_1-C_4-alkyl và/hoặc C_6-C_{14}-aryl. Ví dụ về các arylalkyl như vậy bao gồm benzyl và 1-phenyletyl.

Theo sáng chế, "dị vòng", "vòng dị vòng" hoặc "hệ dị vòng" là hệ vòng cacbon có ít nhất một vòng trong đó ít nhất một nguyên tử cacbon được thay thế bằng nguyên tử khác loại, tốt hơn là bằng nguyên tử khác loại từ nhóm gồm N, O, S, P, B, Si, Se, và là no, không no hoặc dị vòng thơm và có thể không được thế hoặc được thế, trong đó vị trí liên kết là ở trên nguyên tử của vòng. Trừ khi được xác đinh khác, dị vòng tốt hơn là chứa 3 đến 9 nguyên tử trong vòng, đặc biệt là 3 đến 6 nguyên tử trong vòng, và một hoặc nhiều, tốt hơn là 1 đến 4, đặc biệt là 1, 2 hoặc 3, nguyên tử khác loại trong dị vòng, tốt hơn là từ nhóm gồm N, O, và S, mặc dù không nên có hai nguyên tử oxy trực tiếp liền kề. Các dị vòng thường chứa không quá 4 nguyên tử nitơ và/hoặc không quá 2 nguyên tử oxy và/hoặc không quá 2 nguyên tử lưu huỳnh. Khi gốc dị vòng hoặc dị vòng tùy ý được thế, nó có thể được ngưng tụ với các vòng cacbon hoặc dị vòng khác. Trong trường hợp heteroxyclyl tùy ý được thế, sáng chế cũng bao gồm các hệ đa vòng, ví dụ 8-azabixyclo[3.2.1]octanyl hoặc 1-azabixyclo[2.2.1]heptyl. Trong trường hợp heteroxyclyl tùy ý được thế, sáng chế cũng bao gồm các hệ vòng xoắn, ví dụ 1-oxa-5-azaspiro[2.3]hexyl.

Các nhóm heteroxyclyl theo sáng chế là, ví dụ, piperidinyl, piperazinyl, morpholinyl, thiomorpholinyl, dihydropyranyl, tetrahydropyranyl, dioxanyl, pyrolinyl, pyrolidinyl, imidazolinyl, imidazolidinyl, thiazolidinyl, oxazolidinyl, dioxolanyl, dioxolyl, pyrazolidinyl, tetrahydrofuranyl, dihydrofuranyl, oxetanyl, oxiranyl, azetidinyl, aziridinyl, oxazetidinyl, oxaziridinyl, oxazepanyl, oxazinanyl, azepanyl, oxopyrolidinyl, dioxopyrolidinyl, oxomorpholinyl, oxopiperazinyl và oxepanyl.

Có ý nghĩa đáng kể là các heteroaryl, tức là các hệ dị vòng thơm. Theo sáng chế, thuật ngữ heteroaryl chỉ các hợp chất dị vòng thơm, tức là các hợp chất dị vòng thơm hoàn toàn không no nằm trong định nghĩa về dị vòng trên đây. Ưu tiên các vòng 5 đến 7 cạnh có 1 đến 3, tốt hơn là 1 hoặc 2, nguyên tử khác loại giống hoặc khác nhau từ nhóm trên đây. Các heteroaryl theo sáng chế là, ví dụ, furyl, thienyl, pyrazolyl, imidazolyl, 1,2,3- và 1,2,4-triazolyl, isoxazolyl, thiazolyl, isothiazolyl, 1,2,3-, 1,3,4-, 1,2,4- và 1,2,5-oxadiazolyl, azepinyl, pyrolyl, pyridyl, pyridazinyl, pyrimidinyl, pyrazinyl, 1,3,5-, 1,2,4- và 1,2,3-triazinyl, 1,2,4-, 1,3,2-, 1,3,6- và 1,2,6-oxazinyl, oxepinyl, thiepinyl, 1,2,4-triazolonyl và 1,2,4-diazepinyl. Các nhóm heteroaryl theo sáng chế cũng có thể được thế bằng một hoặc nhiều gốc giống hoặc khác nhau.

Thuật ngữ nhóm/phần tử thế "(tùy ý) được thế", như alkyl, alkenyl, alkynyl, alkoxy, alkylsulphanyl, alkylsulphinyl, alkylsulphonyl, xycloalkyl, aryl, phenyl, benzyl, heteroxyclyl và gốc heteroaryl được thế, nghĩa là ví dụ, gốc được thế thu được từ cấu trúc cơ sở không được thế, khi các phần tử thế, ví dụ, một (1) phần tử thế hoặc nhiều phần tử thế, tốt hơn là 1, 2, 3, 4, 5, 6 hoặc 7 phần tử thế, được chọn từ nhóm gồm amino, hydroxyl, halogen, nitro, xyano, isoxyano, mercapto, isothioxyanato, C_1-C_4-carboxyl, cacbonamit, SF_5, aminosulphonyl, C_1-C_4-alkyl, C_3-C_4-xycloalkyl, C_2-C_4-alkenyl, C_3-C_4-xycloalkenyl, C_2-C_4-alkynyl, *N*-mono-C_1-C_4-alkylamino, *N,N*-di-C_1-C_4-alkylamino, *N*-C_1-C_4-alkanoylamino, C_1-C_4-alkoxy, C_2-C_4-alkenyloxy, C_2-C_4-alkynyloxy, C_3-C_4-xycloalkoxy, C_3-C_4-xycloalkenyloxy, C_1-C_4-alkoxycacbonyl, C_2-C_4- C_2-C_4-alkenyloxycacbonyl, C_2-C_4-alkynyloxycacbonyl, C_6-,C_{10}-,C_{14}-aryloxycacbonyl, C_1-C_4-alkanoyl, C_2-C_4-alkenylcacbonyl, C_2-C_4-alkynylcacbonyl, C_6-,C_{10}-,C_{14}-arylcacbonyl, C_1-C_4-alkylsulphanyl, C_3-C_4-xycloalkylsulphanyl, C_1-C_4-alkylthio, C_2-C_4-alkenylthio, C_3-C_4-xycloalkenylthio, C_2-C_4-alkynylthio, C_1-C_4-alkylsulphenyl và C_1-C_4-alkylsulphinyl, bao gồm cả hai chất đồng phân đối ảnh của

nhóm C_1-C_4-alkylsulphinyl, C_1-C_4-alkylsulphonyl, *N*-mono-C_1-C_4-alkylaminosulphonyl, *N,N*-di-C_1-C_4-alkylaminosulphonyl, C_1-C_4-alkylphosphinyl, C_1-C_4-alkylphosphonyl, bao gồm cả hai chất đồng phân đối ảnh của C_1-C_4-alkylphosphinyl và C_1-C_4-alkylphosphonyl, *N*-C_1-C_4-alkylaminocacbonyl, *N,N*-di-C_1-C_4-alkylaminocacbonyl, N-C_1-C_4-alkanoylaminocacbonyl, N-C_1-C_4-alkanoyl-N-C_1-C_4-alkylaminocacbonyl, C_6-,C_{10}-,C_{14}-aryl, C_6-,C_{10}-,C_{14}-aryloxy, benzyl, benzyloxy, benzylthio, C_6-,C_{10}-,C_{14}-arylthio, C_6-,C_{10}-,C_{14}-arylamino, benzylamino, heteroxyclyl và trialkylsilyl, các phần tử thế được liên kết qua liên kết đôi, như C_1-C_4-alkyliden (ví dụ, metyliden hoặc etyliden), nhóm oxo, nhóm thioxo, nhóm imino và nhóm imino được thế. Khi hai hoặc nhiều gốc là từ một hoặc nhiều vòng, các gốc này có thể là vòng cacbon, dị vòng, no, no từng phần, không no, ví dụ bao gồm các vòng thơm và được thế tiếp.

Các phần tử thế được đề cập làm ví dụ ("mức phần tử thế thứ nhất") có thể, nếu chúng chứa các thành hydrocacbon, tùy ý có phéo thế trong đó ("mức phần tử thế thứ hai"), ví dụ bằng một hoặc nhiều phần tử thế mỗi phần tử thế này độc lập được chọn từ halogen, hydroxyl, amino, nitro, xyano, isoxyano, azido, axylamino, nhóm oxo và nhóm imino. Thuật ngữ nhóm "(tùy ý) được thế" tốt hơn là bao gồm chỉ một hoặc hai mức phần tử thế.

Các nhóm hóa học được thế halogen hoặc các nhóm được halogen hóa theo sáng chế (ví dụ alkyl hoặc alkoxy) được thế một lần hoặc nhiều lần bằng halogen đến không quá số phần tử thế tối đa có thể có. Các nhóm như vậy cũng gọi là các nhóm halo (ví dụ haloalkyl). Trong trường hợp thế nhiều lần bằng halogen, các nguyên tử halogen có thể là giống hoặc khác nhau, và tất cả có thể được liên kết với một nguyên tử cacbon hoặc có thể được liên kết với nhiều nguyên tử cacbon. Halogen đặc biệt là flo, clo, brom hoặc iot, tốt hơn là flo, clo hoặc brom và tốt hơn nữa là flo. Cụ thể hơn, các nhóm được thế halogen là monohaloxycloalkyl như 1-floxyclopropyl, 2-floxyclopropyl hoặc 1-floxyclobutyl, monohaloalkyl như 2-cloetyl, 2-floetyl, 1-cloetyl, 1-floetyl, clometyl, hoặc flometyl; perhaloalkyl như triclometyl hoặc triflometyl hoặc CF_2CF_3, polyhaloalkyl như diflometyl, 2-flo-2-cloetyl, diclometyl, 1,1,2,2-tetrafloetyl hoặc 2,2,2-trifloetyl. Ví dụ tiếp theo về các haloalkyl là triclometyl, clodiflometyl, dicloflometyl, clometyl, bromometyl, 1-floetyl, 2-floetyl, 2,2-difloetyl,

2,2,2-trifloetyl, 2,2,2-tricloetyl, 2-clo-2,2-difloetyl, pentafloetyl, 3,3,3-tripropyl và pentaflo-t-butyl. Ưu tiên các haloalkyl có 1 đến 4 nguyên tử cacbon và 1 đến 9, tốt hơn là 1 đến 5, nguyên tử halogen giống hoặc khác nhau được chọn từ flo, clo và brom. Đặc biệt ưu tiên các haloalkyl có 1 hoặc 2 nguyên tử cacbon và 1 đến 5 nguyên tử halogen giống hoặc khác nhau được chọn từ flo và clo, như diflometyl, triflometyl hoặc 2,2-difloetyl, trong số các haloalkyl khác. Ví dụ tiếp theo về các hợp chất được thế halogen là haloalkoxy như OCF_3, $OCHF_2$, OCH_2F, OCF_2CF_3, OCH_2CF_3, OCH_2CHF_2 và OCH_2CH_2Cl, các haloalkylsulphanyl như diflometylthio, triflometylthio, triclometylthio, clodiflometylthio, 1-floetylthio, 2-floetylthio, 2,2-difloetylthio, 1,1,2,2-tetrafloetylthio, 2,2,2-trifloetylthio hoặc 2-clo-1,1,2-trifloetylthio, các haloalkylsulphinyl như diflometylsulphinyl, triflometylsulphinyl, triclometylsulphinyl, clodiflometylsulphinyl, 1-floetylsulphinyl, 2-floetylsulphinyl, 2,2-difloetylsulphinyl, 1,1,2,2-tetrafloetylsulphinyl, 2,2,2-trifloetylsulphinyl và 2-clo-1,1,2-trifloetylsulphinyl, các haloalkylsulphinyl như diflometylsulphinyl, triflometylsulphinyl, triclometylsulphinyl, clodiflometylsulphinyl, 1-floetylsulphinyl, 2-floetylsulphinyl, 2,2-difloetylsulphinyl, 1,1,2,2-tetrafloetylsulphinyl, 2,2,2-trifloetylsulphinyl và 2-clo-1,1,2-trifloetylsulphinyl, các nhóm haloalkylsulphonyl như diflometylsulphonyl, triflometylsulphonyl, triclometylsulphonyl, clodiflometylsulphonyl, 1-floetylsulphonyl, 2-floetylsulphonyl, 2,2-difloetylsulphonyl, 1,1,2,2-tetrafloetylsulphonyl, 2,2,2-trifloetylsulphonyl và 2-clo-1,1,2-trifloetylsulphonyl.

Trong trường hợp các gốc có nguyên tử cacbon, ưu tiên các gốc có 1 đến 4 nguyên tử cacbon, đặc biệt là 1 hoặc 2 nguyên tử cacbon. Thường ưu tiên các phần tử thế từ nhóm halogen, ví dụ, flo và clo, (C_1-C_4)-alkyl, tốt hơn là metyl hoặc etyl, (C_1-C_4)-haloalkyl, tốt hơn là triflometyl, (C_1-C_4)-alkoxy, tốt hơn là metoxy hoặc etoxy, (C_1-C_4)-haloalkoxy, nitro và xyano. Ở đây đặc biệt ưu tiên các phần tử thế metyl, metoxy, flo và clo.

Các amino được thế như amino được thế một lần hoặc hai lần chỉ gốc gốc từ nhóm các nhóm Amino được thế là được thế *N*, ví dụ, bằng một hoặc hai gốc giống hoặc khác nhau từ nhóm alkyl, hydroxy, amino, alkoxy, axyl và aryl; tốt hơn là *N*-mono- và *N,N*-dialkylamino, (ví dụ metylamino, etylamino, *N,N*-dimetylamino, *N,N*-dietylamino, *N,N*-di-n-propylamino, *N,N*-diisopropylamino hoặc *N,N*-dibutylamino),

các nhóm *N*-mono- hoặc *N,N*-dialkoxyalkylamino (ví dụ *N*-metoxymetylamino, *N*-metoxyetylamino, *N,N*-di(metoxymetyl)amino hoặc *N,N*-di(metoxyetyl)amino), *N*-mono- và *N,N*-diarylamino, như các anilin, axylamino, *N,N*-diaxylamino, *N*-alkyl-*N*-arylamino, *N*-alkyl-*N*-acylamino tùy ý được thế và cả các *N*-dị vòng no; ở đây ưu tiên các nhóm Alkyl có 1 đến 4 nguyên tử cacbon; ở đây, aryl tốt hơn là phenyl hoặc phenyl được thế; đối với axyl, định nghĩa dưới đây được áp dụng, tốt hơn là (C_1-C_4)-alkanoyl. Điều này cũng áp dụng đối với hydroxylamino hoặc hydrazino được thế.

Theo sáng chế, thuật ngữ "nhóm amino vòng" bao gồm các hệ dị vòng thơm hoặc vòng béo có một hoặc nhiều nguyên tử nitơ. Các dị vòng no hoặc không no, gồm một hoặc nhiều hệ vòng được ngưng tụ tùy ý và tùy ý chứa các nguyên tử khác loại, ví dụ một hoặc hai nguyên tử nitơ, nguyên tử oxy và/hoặc nguyên tử lưu huỳnh. Ngoài ra, thuật ngữ này cũng bao gồm các nhóm có hệ vòng xoắn hoặc vòng được bắc cầu. Số nguyên tử mà tạo ra nhóm amino vòng không bị hạn chế và có thể bao gồm, ví dụ, trong trường hợp hệ một vòng 3 đến 8 nguyên tử trong vòng, và trong trường hợp hệ hai vòng 7 đến 11 nguyên tử.

ví dụ về các nhóm amino vòng có các nhóm một vòng no và không no có nguyên tử nitơ làm nguyên tử khác loại bao gồm 1-azetidinyl, pyrolidino, 2-pyrolidin-1-yl, 1-pyrolyl, piperidino, 1,4-dihydropyrazin-1-yl, 1,2,5,6-tetrahydropyrazin-1-yl, 1,4-dihydropyridin-1-yl, 1,2,5,6-tetrahydropyridin-1-yl, homopiperidinyl; ví dụ về các nhóm amino vòng có các nhóm một vòng no và không no có hai hoặc nhiều nguyên tử nitơ làm nguyên tử khác loại bao gồm 1-imidazolidinyl, 1-imidazolyl, 1-pyrazolyl, 1-triazolyl, 1-tetrazolyl, 1-piperazinyl, 1-homopiperazinyl, 1,2-dihydropiperazin-1-yl, 1,2-dihydropyrimidin-1-yl, perhydropyrimidin-1-yl, 1,4-diazaxycloheptan-1-yl; ví dụ về các nhóm amino vòng có các nhóm một vòng no và không no có một hoặc hai nguyên tử oxy và một đến ba nguyên tử nitơ làm nguyên tử khác loại, ví dụ, oxazolidin-3-yl, 2,3-dihydroisoxazol-2-yl, isoxazol-2-yl, 1,2,3-oxadiazin-2-yl, morpholino, ví dụ về các nhóm amino vòng có các nhóm một vòng no và không no có một đến ba nguyên tử nitơ và một đến hai nguyên tử lưu huỳnh làm nguyên tử khác loại bao gồm thiazolidin-3-yl, isothiazolin-2-yl, thiomorpholino, hoặc dioxothiomorpholino; ví dụ về các nhóm amino vòng có các nhóm vòng ngưng tụ no và không no bao gồm indol-1-yl, 1,2-dihydrobenzimidazol-1-yl, perhydropyrolo[1,2-

a]pyrazin-2-yl; ví dụ về các nhóm amino vòng có các nhóm vòng xoắn bao gồm 2-azaspiro[4,5]decan-2-yl; ví dụ về các nhóm amino vòng có các nhóm dị vòng bắc cầu bao gồm 2-azabixyclo[2.2.1]heptan-7-yl.

Amino được thế cũng bao gồm các hợp chất amoni bậc bốn (muối) có bốn phần tử thế hữu cơ trên nguyên tử nitơ.

Phenyl tùy ý được thế tốt hơn là phenyl which is không được thế hoặc được thế một hoặc nhiều lần, tốt hơn là được thế không quá ba lần, bằng gốc giống hoặc khác nhau từ nhóm halogen, (C_1-C_4)-alkyl, (C_1-C_4)-alkoxy, (C_1-C_4)-alkoxy-(C_1-C_4)-alkoxy, (C_1-C_4)-alkoxy-(C_1-C_4)-alkyl, (C_1-C_4)-haloalkyl, (C_1-C_4)-haloalkoxy, (C_1-C_4)-alkylsulphanyl, (C_1-C_4)-haloalkylsulphanyl, xyano, isoxyano và nitro, ví dụ o-, m- và p-tolyl, dimetylphenyl, 2-, 3- và 4-clophenyl, 2-, 3- và 4-flophenyl, 2-, 3- và 4-triflometyl- và -triclometylphenyl, 2,4-, 3,5-, 2,5- và 2,3-diclophenyl, o-, m- và p-metoxyphenyl, 4-heptaflophenyl.

Xycloalkyl tùy ý được thế tốt hơn là xycloalkyl không được thế hoặc được thế một hoặc nhiều lần, tốt hơn là được thế không quá ba lần, bằng gốc giống hoặc khác nhau từ nhóm halogen, xyano, (C_1-C_4)-alkyl, (C_1-C_4)-alkoxy, (C_1-C_4)-alkoxy-(C_1-C_4)-alkoxy, (C_1-C_4)-alkoxy-(C_1-C_4)-alkyl, (C_1-C_4)-haloalkyl và (C_1-C_4)-haloalkoxy, bằng biệt là bằng một hoặc hai gốc (C_1-C_4)-alkyl.

Heteroxyclyl tùy ý được thế tốt hơn là heteroxyclyl không được thế hoặc được thế một hoặc nhiều lần, tốt hơn là được thế không quá ba lần, bằng gốc giống hoặc khác nhau từ nhóm halogen, xyano, (C_1-C_4)-alkyl, (C_1-C_4)-alkoxy, (C_1-C_4)-alkoxy-(C_1-C_4)-alkoxy, (C_1-C_4)-alkoxy-(C_1-C_4)-alkyl, (C_1-C_4)-haloalkyl, (C_1-C_4)-haloalkoxy, nitro và oxo, đặc biệt là các gốc được thế một hoặc nhiều lần từ nhóm halogen, (C_1-C_4)-alkyl, (C_1-C_4)-alkoxy, (C_1-C_4)-haloalkyl và oxo, tốt nhất là được thế bằng một hoặc hai gốc (C_1-C_4)-alkyl.

Ví dụ về các heteroaryl được thế alkyl là furylmetyl, thienylmetyl, pyrazolylmetyl, imidazolylmetyl, 1,2,3- và 1,2,4-triazolylmetyl, isoxazolylmetyl, thiazolylmetyl, isothiazolylmetyl, 1,2,3-, 1,3,4-, 1,2,4- và 1,2,5-oxadiazolylmetyl, azepinylmetyl, pyrolylmetyl, pyridylmetyl, pyridazinylmetyl, pyrimidinylmetyl, pyrazinylmetyl, 1,3,5-, 1,2,4- và 1,2,3-triazinylmetyl, 1,2,4-, 1,3,2-, 1,3,6- và 1,2,6-oxazinylmetyl, oxepinylmetyl, thiepinylmetyl và 1,2,4-diazepinylmetyl.

Các hợp chất theo sáng chế có thể nằm trong các phương án được ưu tiên. Các phương án riêng rẽ được mô tả trong bản mô tả có thể được kết hợp với nhau. Sáng chế không bao gồm các tổ hợp trái quy luật tự nhiên mà người có hiểu biết trung bình về lĩnh vực này do đó có thể bác bỏ dựa trên kiến thức chuyên môn của mình. Các cấu trúc vòng có ba nguyên tử oxy liền kề hoặc nhiều hơn, ví dụ, bị loại trừ.

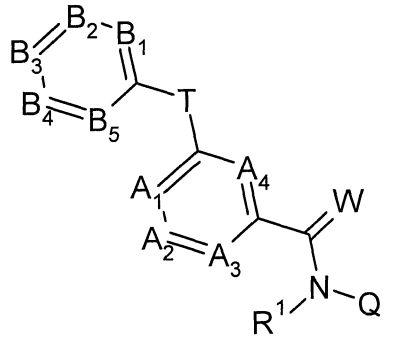
Các phương án về hợp chất theo sáng chế

Sẽ rõ ràng đối với người có hiểu biết trung bình về lĩnh vực này rằng tất cả các phương án có thể đứng một mình hoặc kết hợp.

Các hợp chất có công thức (I), đặc biệt là các hợp chất có công thức (Ia), (Ib), (I-T2), (I-T3), (I-T4), (I-T22) và (I-T23), nếu thích hợp, tùy thuộc vào bản chất của các phần tử thế, có thể ở dạng muối, chất đồng phân hỗ biến, chất đồng phân hình học và/hoặc hoạt động quang học hoặc hỗn hợp chất đồng phân tương ứng với các thành phần khác nhau.

Nếu thích hợp, các hợp chất theo sáng chế có thể ở nhiều dạng đa hình khác nhau hoặc ở dạng hỗn hợp các dạng đa hình khác nhau. Cả dạng đa hình tinh khiết và hỗn hợp dạng đa hình là một phần đối tượng của sáng chế và có thể được sử dụng theo sáng chế.

Các phương án về các hợp chất có công thức (I) được mô tả chi tiết dưới đây:



(I)

trong đó

R^1 là H, trong từng trường hợp là C_2-C_6-alkenyl, C_2-C_6-alkynyl, C_3-C_7-xycloalkyl, C_1-C_6-alkylcacbonyl, C_1-C_6-alkoxycacbonyl, aryl(C_1-C_3)-alkyl, heteroaryl(C_1-C_3)-alkyl tùy ý được thế, hoặc là C_1-C_6-alkyl tùy ý được thế, tốt hơn là C_1-C_2-alkyl, tốt nhất là metyl,

các nhóm sau đây là như sau:

A_1 là CR^2 hoặc N,

A_2 là CR^3 hoặc N,

A_3 là CR^4 hoặc N,

A_4 là CR^5 hoặc N,

B_1 là CR^6 hoặc N,

B_2 là CR^7 hoặc N,

B_3 là CR^8 hoặc N,

B_4 là CR^9 hoặc N, và

B_5 là CR^{10} hoặc N,

hhưng không quá ba trong số các nhóm A_1 đến A_4 là N và không quá ba trong số các nhóm B_1 đến B_5 đồng thời là N;

R^2, R^3, R^4, R^5, R^6, R^7, R^9 và R^{10} mỗi nhóm độc lập là H, halogen, xyano, nitro, trong từng trường hợp là C_1-C_6-alkyl, C_3-C_6-xycloalkyl, C_1-C_6-alkoxy, *N*-C_1-C_6-alkoxyimino-C_1-C_3-alkyl, C_1-C_6-alkylsulphanyl, C_1-C_6-alkylsulphinyl, C_1-C_6-alkylsulphonyl, *N*-C_1-C_6-alkylamino, *N,N*-di-C_1-C_6-alkylamino hoặc *N*-C_1-C_3-alkoxy-C_1-C_4-alkylamino hoặc 1-pyrolidinyl tùy ý được thế;

nếu không có nhóm nào trong số các nhóm A_2 và A_3 là N, R^3 và R^4 cùng với nguyên tử cacbon mà chúng liên kết có thể tạo thành vòng 5 hoặc 6 cạnh chứa 0, 1 hoặc 2 nguyên tử nitơ và/hoặc 0 hoặc 1 nguyên tử oxy và/hoặc 0 hoặc 1 nguyên tử lưu huỳnh, hoặc

nếu không có nhóm nào trong số các nhóm A_1 và A_2 là N, R^2 và R^3 cùng với nguyên tử cacbon mà chúng liên kết có thể tạo thành vòng 6 cạnh chứa 0, 1 hoặc 2 nguyên tử nitơ;

R^8 là halogen, xyano, nitro, trong từng trường hợp là C_1-C_6-alkyl, C_3-C_6-xycloalkyl, C_1-C_6-alkoxy, *N*-C_1-C_6-alkoxyimino-C_1-C_3-alkyl, C_1-C_6-alkylsulphanyl, C_1-C_6-alkylsulphinyl, C_1-C_6-alkylsulphonyl, *N*-C_1-C_6-alkylamino hoặc *N,N*-di-C_1-C_6-alkylamino tùy ý được thế;

W là O hoặc S;

Q là H, formyl, hydroxyl, amino hoặc trong từng trường hợp là C_1-C_6-alkyl, C_2-C_6-alkenyl, C_2-C_6-alkynyl, C_3-C_6-xycloalkyl, C_1-C_5-heteroxycloalkyl, C_1-C_4-alkoxy, C_1-C_6-alkyl-C_3-C_6-xycloalkyl, C_3-C_6-xycloalkyl-C_1-C_6-alkyl, C_6-,C_{10}-C_{14}-aryl, C_1-C_5-heteroaryl, C_6-,C_{10}-,C_{14}-aryl-C_1-C_3-alkyl, C_1-C_5-heteroaryl-C_1-C_3-alkyl, *N*-C_1-C_4-alkylamino, *N*-C_1-C_4-alkylcacbonylamino, hoặc *N,N*-di-C_1-C_4-alkylamino tùy ý được thế; hoặc

là vòng cacbon 6 cạnh không no tùy ý được thế poly-V; hoặc

là dị vòng 4, 5 hoặc 6 cạnh không no tùy ý được thế poly-V, trong đó

V độc lập là halogen, xyano, nitro, trong từng trường hợp là C_1-C_6-alkyl, C_1-C_4-alkenyl, C_1-C_4-alkynyl, C_3-C_6-xycloalkyl, C_1-C_6-alkoxy, *N*-C_1-C_6-alkoxyimino-C_1-C_3-alkyl, C_1-C_6-alkylsulphanyl, C_1-C_6-alkylsulphinyl, C_1-C_6-alkylsulphonyl, hoặc *N,N*-di-(C_1-C_6-alkyl)amino tùy ý được thế;

T là hệ dị vòng thơm 5 cạnh tùy ý được thế chứa không quá 2 nguyên tử khác loại, như bốn nguyên tử cacbon và một (1) nguyên tử khác loại, tốt hơn là một (1) nguyên tử nitơ, một (1) nguyên tử oxy hoặc một (1) nguyên tử lưu huỳnh hoặc ba nguyên tử cacbon và hai nguyên tử khác loại, tốt hơn là hai nguyên tử nitơ, một (1) nguyên tử nitơ và một (1) nguyên tử oxy, hoặc một (1) nguyên tử nitơ và một (1) nguyên tử lưu huỳnh,

và muối, N-oxit và các dạng đồng phân hỗ biến của các hợp chất có công thức (I).

R^1

Theo một phương án được ưu tiên, R^1 trong hợp chất có công thức (I) là H, trong từng trường hợp là metyl, etyl, n-propyl, isopropyl, n-butyl, isobutyl, s-butyl, t-butyl, metoxymetyl, etoxymetyl, propoxymetyl, metylcacbonyl, etylcacbonyl, n-propylcacbonyl, isopropylcacbonyl, s-butylcacbonyl, t-butylcacbonyl, metoxycacbonyl, etoxycacbonyl, n-propoxycacbonyl, isopropoxycacbonyl, s-butoxycacbonyl, t-butoxycacbonyl, xyanometyl, 2-xyanoetyl, benzyl, 4-metoxybenzyl, pyrid-2-ylmetyl, pyrid-3-ylmetyl, pyrid-4-ylmetyl, 4-clopyrid-3-ylmetyl tùy ý được thế, tốt nhất là metyl, etyl, n-propyl, isopropyl, n-butyl, isobutyl, s-butyl, t-butyl.

Theo một phương án được ưu tiên hơn nữa, R^1 là metyl.

W

Theo một phương án được ưu tiên khác, W là O.

Q

Theo một phương án được ưu tiên khác, Q là H, trong từng trường hợp là metyl, etyl, n-propyl, 1-metyletyl, 1,1-dimetyletyl, 1-metylpropyl, n-butyl, 2-metylpropyl, 2-metylbutyl, hydroxymetyl, 2-hydroxypropyl, xyanometyl, 2-xyanoetyl, 2-floetyl, 2,2-difloetyl, 2,2,2-trifloetyl, 1-triflometyletyl, 2,2-diflopropyl, 3,3,3-triflopropyl, 2,2-dimetyl-3-flopropyl, xyclopropyl, 1-xyanoxyclopropyl, 1-metoxycacbonylxyclopropyl, 1-(*N*-metylcarbamoyl)xyclopropyl, 1-(*N*-xyclopropylcarbamoyl)xyclopropyl, 1-(thiocarbamoyl)xyclopropyl, xyclopropylmetyl, xyclobutyl, xyclopentyl, xyclohexyl, 1-xyclopropyletyl, bis(xyclopropyl)metyl, 2,2-dimetylxyclopropylmetyl, 2-phenylxyclopropyl, 2,2-dicloxyclopropyl, trans-2-cloxyclopropyl, xis-2-cloxyclopropyl, 2,2-difloxyclopropyl, trans-2-floxyclopropyl, xis-2-floxyclopropyl, trans-4-hydroxyxyclohexyl, 4-triflometylxyclohexyl, prop-2-enyl, 2-metylprop-2-enyl, prop-2-ynyl, 1,1-dimetylbut-2-ynyl, 3-cloprop-2-enyl, 3,3-dicloprop-2-enyl, 3,3-diclo-1,1-dimetylprop-2-enyl, phenyl, 2-clophenyl, 3-clophenyl, 4-clophenyl, oxetan-3-yl, thietan-3-yl, 1-oxidothietan-3-yl, 1,1-dioxidothietan-3-yl, isoxazol-3-ylmetyl, 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetylamino)etyl, 1,2,4-triazol-3-ylmetyl, 3-metyloxetan-3-ylmetyl, benzyl, 2,6-diflophenylmetyl, 3-flophenylmetyl, 2-flophenylmetyl, 2,5-diflophenylmetyl, 1-phenyletyl, 4-clophenyletyl, 2-triflometylphenyletyl, 1-pyridin-2-yletyl, pyridin-2-ylmetyl, 5-flopyridin-2-ylmetyl, (6-clopyridin-3-yl)metyl, pyrimidin-2-ylmetyl, metoxy, 2-etoxyetyl, 2-(metylsulphanyl)etyl, 1-metyl-2-(etylsulphanyl)etyl, 2-metyl-1-(metylsulphanyl)propan-2-yl, metoxycacbonyl, metoxycacbonylmetyl, NH_2, *N*-etylamino, *N*-allylamino, *N*,*N*-dimetylamino, *N*,*N*-dietylamino tùy ý được thế; hoặc

Q là một trong các nhóm sau, mỗi nhóm được thế bằng 0-4 phần tử thế V: phenyl, naphtyl, pyridazin, pyrazin, pyrimidin, triazin, pyridin, pyrazol, thiazol, isothiazol, oxazol, isoxazol, triazol, imidazol, furan, thiophen, pyrol, oxadiazol, thiadiazol, trong đó

V độc lập là F, Cl, Br, I, xyano, nitro, metyl, etyl, diflometyl, triclometyl, clodiflometyl, dicloflometyl, triflometyl, clometyl, bromometyl, 1-floetyl, 2-floetyl, 2,2-difloetyl, 2,2,2-trifloetyl, 1,2,2,2-tetrafloetyl, 1-clo-1,2,2,2-tetrafloetyl, 2,2,2-tricloetyl, 2-clo-2,2-difloetyl, 1,1-difloetyl, pentafloetyl, heptaflo-n-propyl, heptafloisopropyl, nonaflo-n-butyl, xyclopropyl, xyclobutyl, metoxy, etoxy, n-propoxy, 1-metyletoxy, flometoxy, diflometoxy, clodiflometoxy, dicloflometoxy, triflometoxy, 2,2,2-trifloetoxy, 2-clo-2,2-difloetoxy, pentafloetoxy, *N*-metoxyiminometyl, 1-(*N*-metoxyimino)etyl, metylsulphanyl, metylsulphonyl, metylsulphinyl, triflometylsulphonyl, triflometylsulphinyl, triflometylsulphanyl, *N*,*N*-dimetylamino.

Theo một phương án được ưu tiên khác, Q là C_1-C_4-alkyl tùy ý được thế hoặc C_3-C_6-xycloalkyl tùy ý được thế hoặc dị vòng 4, 5 hoặc 6 cạnh không no tùy ý được thế bằng một, hai hoặc ba phần tử thế V, trong đó V độc lập là halogen, xyano, nitro, oxo (=O), C_1-C_6-alkyl, C_1-C_4-alkenyl, C_1-C_6-alkoxy, C_1-C_6-alkylsulphanyl, C_1-C_6-alkylsulphinyl, C_1-C_6-alkylsulphonyl tùy ý được thế bằng halogen. Tốt hơn, nếu Q là C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen; bằng xyano, hydroxyl hoặc cacbonamit (–C(=O)N(R)$_2$ trong đó R độc lập là H hoặc C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkyl được thế; C_3-xycloalkyl; C_3-xycloalkyl được thế C_1-C_2-alkyl được thế xyano, được thế bằng halogen, được thế nitro hoặc được halogen hóa; dị vòng 4, 5 hoặc 6 cạnh không no tùy ý được thế bằng một, hai hoặc ba V và chứa một hoặc hai nguyên tử khác loại được chọn từ nhóm gồm N, O và S, trong đó V độc lập là halogen, xyano, nitro, oxo (=O), C_1-C_6-alkyl tùy ý được thế bằng halogen. Tốt hơn nữa, nếu Q là C_1-C_3-alkyl được flo hóa như CF_3, CH_2CF_3 hoặc $CH_2CH_2CF_3$; C_1-C_3-alkyl được thế bằng cacbonamit (–C(=O)N(R)$_2$ trong đó R độc lập là H, C_1-C_3-alkyl hoặc C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen, như 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetylamino)etyl; xyclopropyl; xyclopropyl được thế C_1-C_2-alkyl được thế xyano hoặc được flo hóa như 1-(xyano)xyclopropyl hoặc 1-(triflometyl)xyclopropyl); hệ dị vòng 4 cạnh chứa một nguyên tử khác loại được chọn từ nhóm gồm N, O và S, như thietan-3-yl.

Theo một phương án được ưu tiên hơn, Q là C_1-C_4-alkyl được thế bằng flo như 2,2,2-trifloetyl, 2,2-difloetyl, 3,3,3-triflopropyl; C_3-C_4-xycloalkyl như xyclopropyl hoặc xyclobutyl; C_3-C_4-xycloalkyl tùy ý được thế như 1-triflometylxyclopropyl, 1-tert-

butylxyclopropyl, 1-thiocarbamoylxyclopropyl, 1-xyanoxyclopropyl, trans-2-floxyclopropyl, xis-2-floxyclopropyl; C_4-C_6-heteroxycloalkyl như oxetan-3-yl, thietan-3-yl, 1-oxidothietan-3-yl hoặc 1,1-dioxidothietan-3-yl; benzyl; pyridin-2-ylmetyl; metylsulphonyl; hoặc 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetylamino)etyl.

Theo một phương án đặc biệt được ưu tiên, Q là C_1-C_3-alkyl được thế bằng flo như 2,2,2-trifloetyl hoặc 3,3,3-triflopropyl; xyclopropyl; xyclopropyl tùy ý được thế như 1-xyanoxyclopropyl hoặc 1-triflometylxyclopropyl, thietan-3-yl; hoặc 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetyl)aminoetyl.

A1 đến A4

Theo một phương án được ưu tiên, không quá một (1) trong số các nhóm A_1 đến A_4 là N (nói cách khác: một (1) trong số các nhóm A_1 đến A_4 (tốt hơn là A_2) là N); hoặc không (0) nhóm nào trong số các nhóm A_1 đến A_4 là N (nói cách khác: A_1 đến A_4 mỗi nhóm độc lập là CR^2, CR^3, CR^4, và CR^5); hoặc một hoặc hai nhóm được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 có thể là N và không quá một nhóm được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N.

Theo một phương án được ưu tiên khác, R^2, R^3, R^4 và R^5 (nếu nhóm A tương ứng là CR) trong hợp chất có công thức (I) mỗi nhóm độc lập là H, halogen, xyano, nitro, trong từng trường hợp là C_1-C_4-alkyl, C_3-C_4-xycloalkyl, C_1-C_4-alkoxy, *N*-C_1-C_4-alkoxyimino-C_1-C_4-alkyl, C_1-C_4-alkylsulphanyl, C_1-C_4-alkylsulphinyl, C_1-C_4-alkylsulphonyl, *N*-C_1-C_4-alkylamino, *N,N*-di-C_1-C_4-alkylamino hoặc *N*-C_1-C_3-alkoxy-C_1-C_4-alkylamino hoặc 1-pyrolidinyl tùy ý được thế.

Theo một phương án được ưu tiên khác, R^2 và R^5 mỗi nhóm độc lập là H, metyl, F và Cl.

Theo một phương án được ưu tiên khác, R^3 và R^4 mỗi nhóm độc lập là H, F, Cl, Br, I, xyano, nitro, metyl, etyl, flometyl, diflometyl, clodiflometyl, triflometyl, 2,2,2-trifloetyl, metoxy, etoxy, n-propoxy, 1-metyletoxy, flometoxy, diflometoxy, clodiflometoxy, dicloflometoxy, triflometoxy, 2,2,2-trifloetoxy, 2-clo-2,2-difloetoxy, pentafloetoxy, N-metoxyiminometyl, 1-(N-metoxyimino)etyl, metylsulphanyl, triflometylsulphanyl, metylsulphonyl, metylsulphinyl, triflometylsulphonyl, triflometylsulphinyl.

B1 đến B5

Theo một phương án được ưu tiên, không quá một (1) trong số các nhóm B_1 đến B_5 là N (nói cách khác: một (1) trong số các nhóm B_1 đến B_5 là N); hoặc không (0) trong số các nhóm B_1 đến B_5 là N (B_1 đến B_5 mỗi nhóm là CR^6, CR^7, CR^8, CR^9 và CR^{10}).

Theo một phương án được ưu tiên khác, R^6, R^7, R^9 và R^{10} (khi nhóm B tương ứng là CR) mỗi nhóm độc lập là H, halogen, xyano, nitro, trong từng trường hợp là C_1-C_4-alkyl, C_3-C_4-xycloalkyl, C_1-C_4-alkoxy, *N*-alkoxyiminoalkyl, C_1-C_4-alkylsulphanyl, C_1-C_4-alkylsulphinyl, C_1-C_4-alkylsulphonyl, *N*-C_1-C_4-alkylamino, *N,N*-di-C_1-C_4-alkylamino tùy ý được thế.

Theo một phương án được ưu tiên khác, R^6, R^7, R^9 và R^{10} mỗi nhóm độc lập là H, halogen, xyano, nitro, metyl, etyl, flometyl, diflometyl, clodiflometyl, triflometyl, 2,2,2-trifloetyl, metoxy, etoxy, n-propoxy, 1-metyletoxy, flometoxy, diflometoxy, clodiflometoxy, dicloflometoxy, triflometoxy, 2,2,2-trifloetoxy, 2-clo-2,2-difloetoxy, pentafloetoxy, N-metoxyiminometyl, 1-(N-metoxyimino)etyl, metylsulphanyl, triflometylsulphanyl, metylsulphonyl, metylsulphinyl, triflometylsulphonyl, triflometylsulphinyl.

Theo một phương án được ưu tiên khác, R^6 và R^{10} mỗi nhóm độc lập là H, halogen (đặc biệt là clo, brom, flo), xyano, nitro, metyl, etyl, diflometyl, clodiflometyl, triflometyl, metoxy, etoxy, 1-metyletoxy, diflometoxy, clodiflometoxy, dicloflometoxy, triflometoxy, 2,2,2-trifloetoxy, 2-clo-2,2-difloetoxy, metylsulphanyl, triflometylsulphanyl, metylsulphonyl, metylsulphinyl, triflometylsulphonyl, triflometylsulphinyl.

Theo một phương án được ưu tiên khác, R^6 và R^{10} là các phần tử thế được mô tả trong bản mô tả, nhưng R^6 và R^{10} trong một hợp chất không đồng thời là H. Nói cách khác, khi R^6 trong hợp chất là H, thì R^{10} là một trong số các phần tử thế khác được mô tả trong bản mô tả, và ngược lại.

Theo một phương án được ưu tiên khác, R^6 và R^{10} mỗi nhóm là một phần tử thế được chọn từ halogen (tốt hơn là Cl, Br hoặc F), C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen, C_1-C_3-alkoxy và C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen.

Theo một phương án được ưu tiên khác, R^6 và R^{10} mỗi nhóm là halogen (như Cl, Br hoặc F), mỗi nhóm là C_1-C_3-alkyl, hoặc mỗi nhóm là C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen, ví dụ C_1-C_3-alkyl được perflo hóa (perflometyl, perfloetyl hoặc perflopropyl).

Theo một phương án được ưu tiên khác, R^6 là C_1-C_3-alkyl được perflo hóa (ví dụ perflometyl) và R^{10} là Cl, Br hoặc F, tốt hơn nữa là Cl hoặc Br.

R^8

Theo một phương án đặc biệt được ưu tiên, B_3 là C-R^8 trong đó R^8 là halogen, xyano, nitro, C_1-C_4-alkyl được thế halogen, C_3-C_4-xycloalkyl, C_1-C_4-alkoxy, *N*-C_1-C_4-alkoxyimino-C_1-C_4-alkyl, C_1-C_4-alkylsulphanyl, C_1-C_4-alkylsulphinyl, C_1-C_4-alkylsulphonyl, *N*-C_1-C_4-alkylamino hoặc *N,N*-di-C_1-C_4-alkylamino.

Theo một phương án được ưu tiên khác, R^8 là halogen như flo, clo, brom, iot, hoặc C_1-C_4-alkyl được thế halogen, xyano, nitro, metyl, etyl, diflometyl, triclometyl, clodiflometyl, dicloflometyl, triflometyl, clometyl, bromometyl, 1-floetyl, 2-floetyl, 2,2-difloetyl, 2,2,2-trifloetyl, 1,2,2,2-tetrafloetyl, 1-clo-1,2,2,2-tetrafloetyl, 2,2,2-tricloetyl, 2-clo-2,2-difloetyl, 1,1-difloetyl, pentafloetyl, pentaflo-tert-butyl, heptaflo-n-propyl, heptafloisopropyl, nonaflo-n-butyl, nonaflo-sec-butyl, xyclopropyl, xyclobutyl, metoxy, etoxy, n-propoxy, 1-metyletoxy, flometoxy, diflometoxy, clodiflometoxy, dicloflometoxy, triflometoxy, 2,2,2-trifloetoxy, 2-clo-2,2-difloetoxy, pentafloetoxy, *N*-metoxyiminometyl, 1-(*N*-metoxyimino)etyl, metylsulphanyl, metylsulphonyl, metylsulphinyl, triflometylsulphonyl, triflometylsulphinyl, triflometylsulphanyl, *N,N*-dimetylamino.

Theo một phương án được ưu tiên hơn, R^8 là diflometyl, triclometyl, clodiflometyl, dicloflometyl, triflometyl, 1-floetyl, 2-floetyl, 2,2-difloetyl, 2,2,2-trifloetyl, 1,2,2,2-tetrafloetyl, 1-clo-1,2,2,2-tetrafloetyl, 2,2,2-tricloetyl, 2-clo-2,2-difloetyl, 1,1-difloetyl, pentafloetyl, pentaflo-tert-butyl, heptaflo-n-propyl, heptafloisopropyl, nonaflo-n-butyl, nonaflo-sec-butyl, flometoxy, diflometoxy, clodiflometoxy, dicloflometoxy, triflometoxy, 2,2,2-trifloetoxy, 2-clo-2,2-difloetoxy, pentafloetoxy, triflometylsulphonyl, triflometylsulphinyl, triflometylsulphanyl.

Theo một phương án được ưu tiên hơn nữa, R^8 là được thế bằng halogen C_1-C_3-alkyl (tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được perflo hóa (CF_3, C_2F_5 hoặc C_3F_7)) hoặc alkoxy được

thế bằng halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkoxy được perflo hóa (OCF_3, OC_2F_5 hoặc OC_3F_7)).

Theo một phương án đặc biệt được ưu tiên, R^8 là C_1-C_3-alkyl được perflo hóa như n- hoặc i-propyl được perflo hóa ($-C_3F_7$), etyl được perflo hóa (C_2F_5) hoặc metyl được perflo hóa (CF_3), tốt hơn nữa là n- hoặc i-propyl được perflo hóa ($-C_3F_7$) hoặc metyl được perflo hóa.

A và B

Theo một phương án được ưu tiên khác, các nhóm A_1 đến A_4 và B_1 đến B_5 trong các hợp chất có công thức (I) là như sau:

A_1 là C-H,

A_2 là CR^3 hoặc N,

A_3 là CR^4,

A_4 là CR^5 hoặc N,

B_1 là CR^6 hoặc N,

B_2 là CR^7,

B_3 là CR^8,

B_4 là CR^9 và

B_5 là CR^{10} hoặc N.

Theo một phương án được ưu tiên hơn nữa, các nhóm A_1 đến A_4 và B_1 đến B_5 trong các hợp chất có công thức (I) là như sau:

A_1 là C-H,

A_2 là CR^3 hoặc N,

A_3 là CR^4,

A_4 là C-H,

B_1 là CR^6 hoặc N,

B_2 là C-H,

B_3 là CR^8,

B_4 là C-H và

B_5 là CR^{10} hoặc N.

Theo một phương án được ưu tiên hơn nữa, các nhóm A_1 đến A_4 và B_1 đến B_5 trong các hợp chất có công thức (I) là như sau:

A_1 là C-H,

A_2 là CR^3 hoặc N,

A_3 là CR^4,

A_4 là C-H oder N,

B_1 là CR^6,

B_2 là C-H,

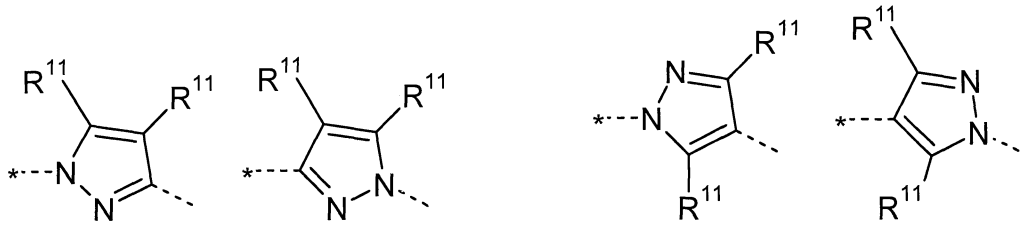
B_3 là CR^8,

B_4 là C-H và

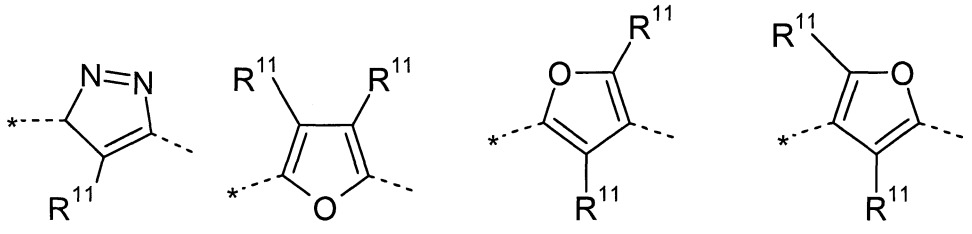
B_5 là CR^{10} hoặc N.

T

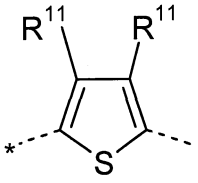
Theo một phương án được ưu tiên khác, T là một trong số các hệ dị vòng thơm 5 cạnh được thể hiện dưới đây, trong đó liên kết với nguyên tử cacbon của hệ vòng (C-B_1-B_5) được xác định bằng liên kết nét đứt đánh dấu bằng dấu hoa thị, và liên kết với nguyên tử cacbon của hệ vòng (C-A_1-A_2-A_3-C-A_4) được xác định bằng liên kết nét đứt.



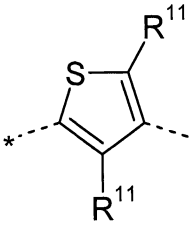
T1 T2 T3 T4



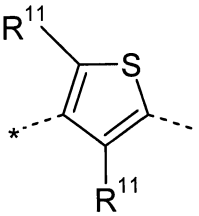
T5



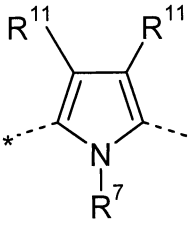
T8



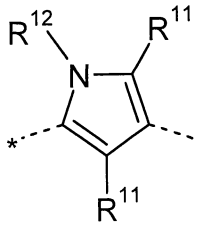
T9



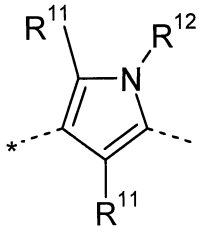
T10



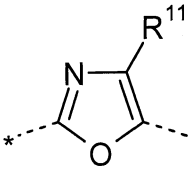
T11



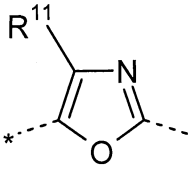
T12



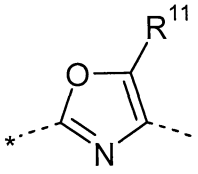
T13



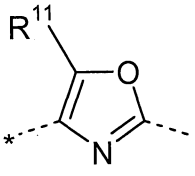
T14



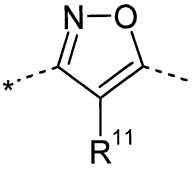
T15



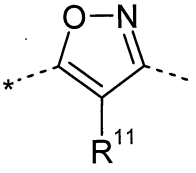
T16



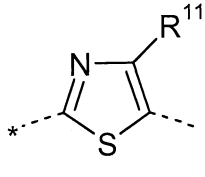
T18



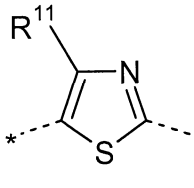
T19



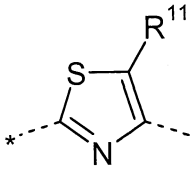
T20



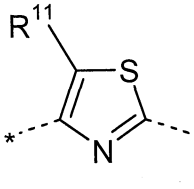
T21



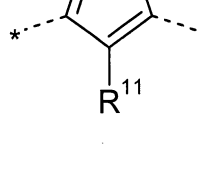
T22



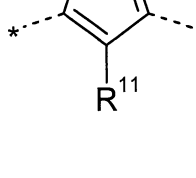
T23



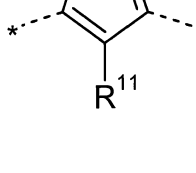
T24



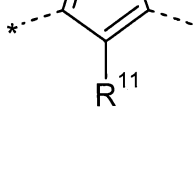
T25



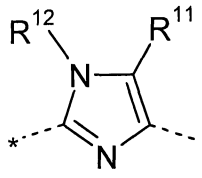
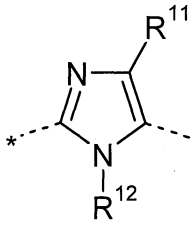
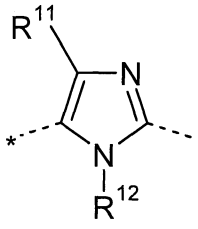
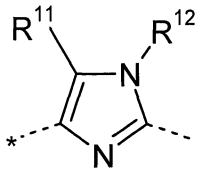
T26



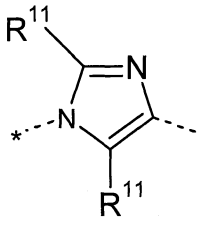
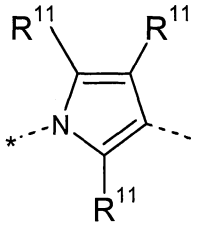
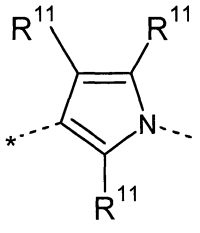
T27



T28 T29 T30 T31

T32 T33 T34 T35

T45 T46 T47

trong đó

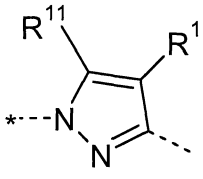
R^{11} độc lập là H, halogen, xyano, nitro, amino hoặc C_1-C_6-alkyl, C_1-C_6-alkyloxy, C_1-C_6-alkylcacbonyl, C_1-C_6-alkylsulphanyl, C_1-C_6-alkylsulphinyl, C_1-C_6-alkylsulphonyl tùy ý được thế, tốt hơn là H; và

R^{12} là H, halogen, xyano, nitro, amino hoặc C_1-C_6-alkyl, C_1-C_6-alkyloxy, C_1-C_6-alkylcacbonyl, C_1-C_6-alkylsulphanyl, C_1-C_6-alkylsulphinyl, C_1-C_6-alkylsulphonyl tùy ý được thế, tốt hơn là H hoặc metyl.

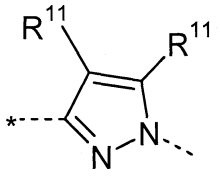
Theo một phương án được ưu tiên khác, R^{11} độc lập là halogen, xyano, nitro, amino, metyl, etyl, 1-metyletyl, tert-butyl, triflometyl, diflometyl, metoxy, etoxy, triflometoxy, 2,2-difloetoxy, 2,2,2-trifloetoxy, metylcacbonyl, etylcacbonyl, triflometylcacbonyl, metylsulphanyl, metylsulphinyl, metylsulphonyl, triflometylsulphonyl, triflometylsulphanyl hoặc triflometylsulphinyl.

Theo một phương án được ưu tiên hơn, R^{11} độc lập là H, metyl, etyl, 2-metyletyl, 2,2-dimetyletyl, flo, clo, brom, iot, nitro, triflometyl hoặc amino.

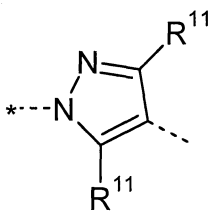
Theo một phương án được ưu tiên khác, T là một trong số các hệ dị vòng thơm 5 cạnh được thể hiện dưới đây, trong đó liên kết với nguyên tử cacbon của hệ vòng (C-B_1-B_5) được xác định bằng liên kết nét đứt có đánh dấu hoa thị, và liên kết với nguyên tử cacbon của hệ vòng (C-A_1-A_2-A_3-C-A_4) được xác định bằng liên kết nét đứt.



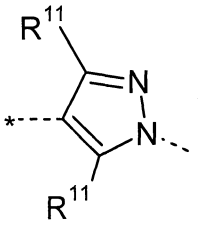
T1



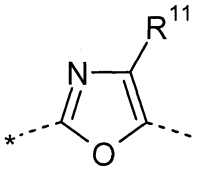
T2



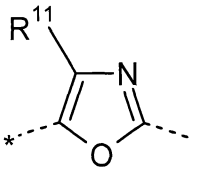
T3



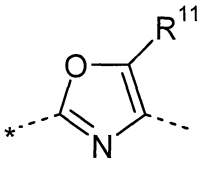
T4



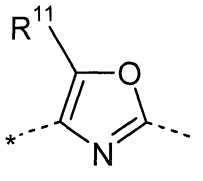
T18



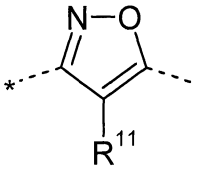
T19



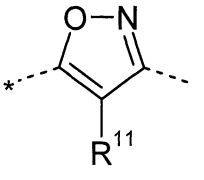
T20



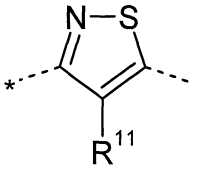
T21



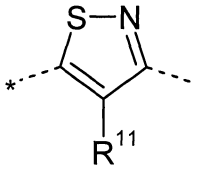
T22



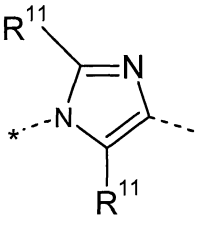
T23



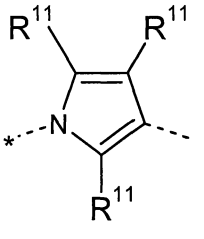
T28



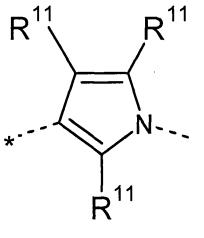
T29



T45



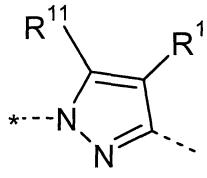
T46



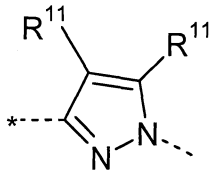
T47

trong đó R^{11} độc lập được xác định như được mô tả trong bản mô tả.

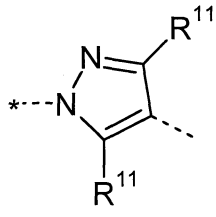
Theo một phương án được ưu tiên hơn, T là một trong số các hệ dị vòng thơm 5 cạnh được thể hiện dưới đây, trong đó liên kết với nguyên tử cacbon của hệ vòng (C-B_1-B_5) được xác định bằng liên kết nét đứt có đánh dấu hoa thị, và liên kết với nguyên tử cacbon của hệ vòng (C-A_1-A_2-A_3-C-A_4) được xác định bằng liên kết nét đứt.



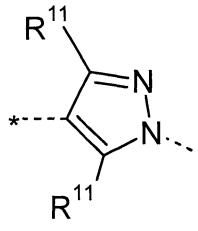
T1



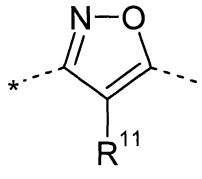
T2



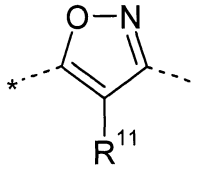
T3



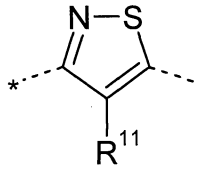
T4



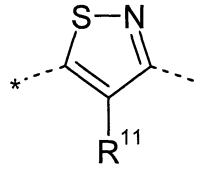
T22



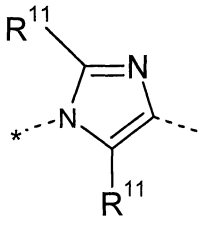
T23



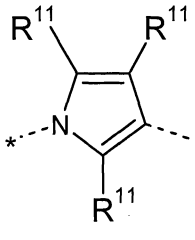
T28



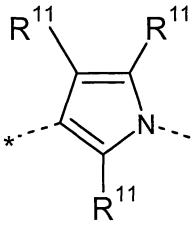
T29



T45



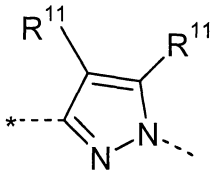
T46



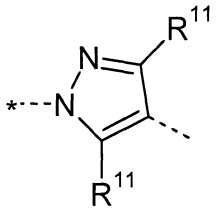
T47

trong đó R^{11} được xác định như được mô tả trong bản mô tả và n có giá trị 1 hoặc 2.

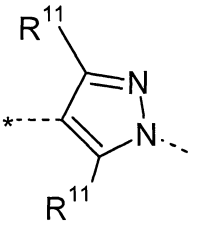
Theo một phương án đặc biệt được ưu tiên, T là một trong số các hệ dị vòng thơm 5 cạnh được thể hiện dưới đây, trong đó liên kết với nguyên tử cacbon của hệ vòng (C-B_1-B_5) được xác định bằng liên kết nét đứt có đánh dấu hoa thị, và liên kết với nguyên tử cacbon của hệ vòng (C-A_1-A_2-A_3-C-A_4)- được xác định bằng liên kết nét đứt.



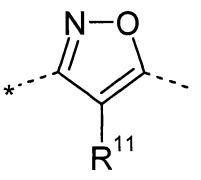
T2



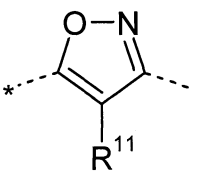
T3



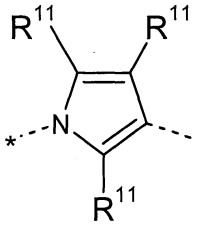
T4



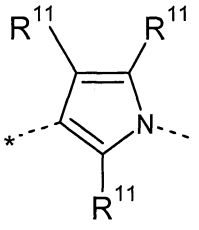
T22



T23



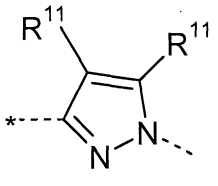
T46



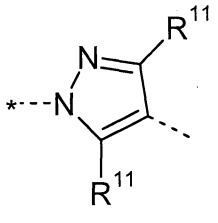
T47

trong đó R^{11} độc lập được xác định như được mô tả trong bản mô tả.

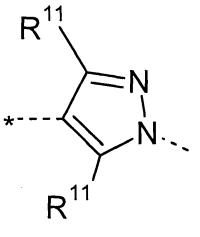
Theo một phương án đặc biệt được ưu tiên khác, T là một trong số các hệ dị vòng thơm 5 cạnh được thể hiện dưới đây, trong đó liên kết với nguyên tử cacbon của hệ vòng (C-B_1-B_5) được xác định bằng liên kết nét đứt có đánh dấu hóa thị, và liên kết với nguyên tử cacbon của hệ vòng (C-A_1-A_2-A_3-C-A_4) được xác định bằng liên kết nét đứt.



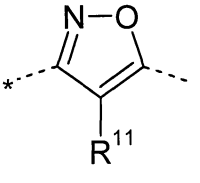
T2



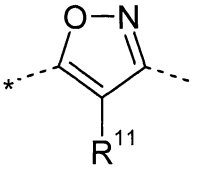
T3



T4



T22



T23

trong đó R^{11} độc lập được xác định như được mô tả trong bản mô tả.

Theo một phương án được ưu tiên hơn nữa, trong công thức (I) và các công thức chung khác được mô tả chi tiết trong bản mô tả,

A_1 là C-R^2 hoặc N, tốt hơn là C-R^2,

A_2 là CR^3 hoặc N,

A_3 là CR^4,

A_4 là C-R^5 hoặc N,

B_1 là CR^6,

B_2 là C-H,

B_3 là CR^8,

B_4 là C-H,

B_5 là CR^{10} hoặc N,

R^1 là hydro,

R^2 là hydro, C_1-C_3-alkyl, flo hoặc clo, tốt hơn là H,

R^3 là hydro hoặc C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được perflo hóa (CF_3, C_2F_5 hoặc C_3F_7)),

R^4 là hydro, clo, flo, C_1-C_3-alkyl (như -CH_3), xyclopropyl, C_1-C_3-alkoxy (như -O-CH_3), *N*-C_1-C_4-alkylamino (-NH-C_1-C_3-alkyl như -NH-CH_3), C_3-xycloalkylamino (như –NH-C_3H_5), *N*-C_1-C_3-alkoxy-C_1-C_3-alkylamino (như -NH-C_2H_4-O-CH_3) hoặc 1-pyrolidinyl, tốt hơn nữa là clo,

R^5 là hydro hoặc flo, tốt hơn là H,

R^6 và R^{10} mỗi nhóm độc lập là hydro, C_1-C_3-alkyl (tốt hơn, nếu R^6 và R^{10} mỗi nhóm là C_1-C_3-alkyl), C_1-C_3-alkoxy, C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được perflo hóa (CF_3, C_2F_5 hoặc C_3F_7)), C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkoxy được perflo hóa (OCF_3, OC_2F_5 hoặc OC_3F_7)), C_1-C_3-alkylsulphanyl, C_1-C_3-alkylsulphinyl, C_1-C_3-alkylsulphonyl, flo, brom hoặc clo (tốt hơn nếu R^6 và R^{10} mỗi nhóm là clo),

R^8 là C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được perflo hóa (CF_3, C_2F_5 hoặc C_3F_7)) hoặc C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkoxy được perflo hóa (OCF_3, OC_2F_5 hoặc OC_3F_7)),

R^{11} là hydro, xyano (CN) hoặc amino (NH_2),

W là oxy hoặc lưu huỳnh, tốt hơn là oxy,

Q là C_1-C_3-alkyl, xyclopropyl, 1-(xyano)xyclopropyl, 1-(C_1-C_3-alkyl được perflo hóa)xyclopropyl (như (1-(triflometyl)xyclopropyl), 1-(C_1-C_4-alkyl)xyclopropyl (như 1-(tert-butyl)xyclopropyl), 1-(thiocarbamoyl)xyclopropyl, C_1-C_3-alkyl được

thế bằng halogen (ví dụ CH_2CF_3, $CH_2CH_2CF_3$), thietan-3-yl, N-metylpyrazol-3-yl, 2-oxo-2(2,2,2-trifloetylamino)etyl, và

T là T được chọn từ nhóm gồm T1 đến T47, tốt hơn là T2, T3, T4, T22 hoặc T23 (tốt hơn nữa là T22 hoặc T23).

Theo một phương án thậm chí được ưu tiên hơn nữa, trong công thức (I) và các công thức chung khác được mô tả chi tiết trong bản mô tả,

A_1 là C-R^2 hoặc N, tốt hơn là C-R^2,

A_2 là CR^3 hoặc N,

A_3 là CR^4,

A_4 là C-R^5 hoặc N,

B_1 là CR^6,

B_2 là C-H,

B_3 là CR^8,

B_4 là C-H,

B_5 là CR^{10} hoặc N,

R^1 là C_1-C_2-alkyl (metyl hoặc etyl, tốt hơn nữa là metyl),

R^2 là hydro, C_1-C_3-alkyl, flo hoặc clo, tốt hơn là H,

R^3 là hydro hoặc C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được perflo hóa (CF_3, C_2F_5 hoặc C_3F_7)),

R^4 là hydro, clo, flo, C_1-C_3-alkyl (như -CH_3), xyclopropyl, C_1-C_3-alkoxy (như -O-CH_3), *N*-C_1-C_4-alkylamino (-NH-C_1-C_3-alkyl như -NH-CH_3), C_3-xycloalkylamino (như –NH-C_3H_5), *N*-C_1-C_3-alkoxy-C_1-C_3-alkylamino (như -NH-C_2H_4-O-CH_3) hoặc 1-pyrolidinyl, tốt hơn nữa là clo,

R^5 là hydro hoặc flo, tốt hơn là H,

R^6 và R^{10} mỗi nhóm độc lập là hydro, C_1-C_3-alkyl (tốt hơn, nếu R^6 và R^{10} mỗi nhóm là C_1-C_3-alkyl), C_1-C_3-alkoxy, C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được perflo hóa (CF_3, C_2F_5 hoặc C_3F_7)), C_1-C_3-alkoxy được thế bằng

halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkoxy được perflo hóa (OCF_3, OC_2F_5 hoặc OC_3F_7)), C_1-C_3-alkylsulphanyl, C_1-C_3-alkylsulphinyl, C_1-C_3-alkylsulphonyl, flo, brom hoặc clo (tốt hơn, nếu R^6 và R^{10} mỗi nhóm là clo),

R^8 là C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được perflo hóa (CF_3, C_2F_5 hoặc C_3F_7)) hoặc C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkoxy được perflo hóa (OCF_3, OC_2F_5 hoặc OC_3F_7)),

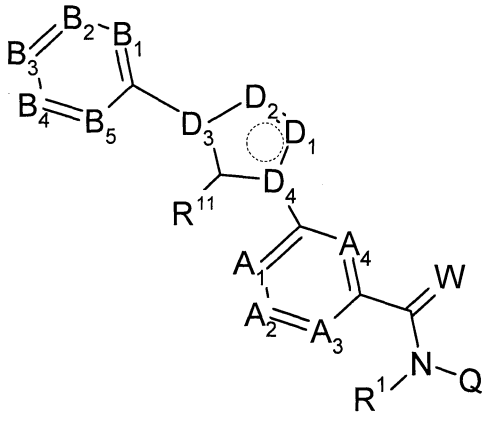
R^{11} là hydro, xyano (CN) hoặc amino (NH_2),

W là oxy hoặc lưu huỳnh, tốt hơn là oxy,

Q là C_1-C_3-alkyl, xyclopropyl, 1-(xyano)xyclopropyl, 1-(được perflo hóa C_1-C_3-alkyl)xyclopropyl (như (1-(triflometyl)xyclopropyl), 1-(C_1-C_4-alkyl)xyclopropyl (như 1-(tert-butyl)xyclopropyl), 1-(thiocarbamoyl)xyclopropyl, được thế bằng halogen C_1-C_3-alkyl (ví dụ CH_2CF_3, $CH_2CH_2CF_3$), thietan-3-yl, N-metylpyrazol-3-yl, 2-oxo-2(2,2,2-trifloetylamino)etyl, và

T là T được chọn từ nhóm gồm T1 đến T47, tốt hơn là T2, T3, T4, T22 hoặc T23 (tốt hơn nữa là T22 hoặc T23).

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập thêm đến các hợp chất có công thức (Ia)



(Ia)

trong đó

R^1, R^{11}, Q, W, A_1, A_2, A_3, A_4, B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 từng nhóm được xác định như mô tả trong bản mô tả, trong đó không quá một nhóm được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 là N và không quá một nhóm được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N; hoặc trong đó một hoặc

hai nhóm được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 có thể là N và không quá một nhóm được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N; và

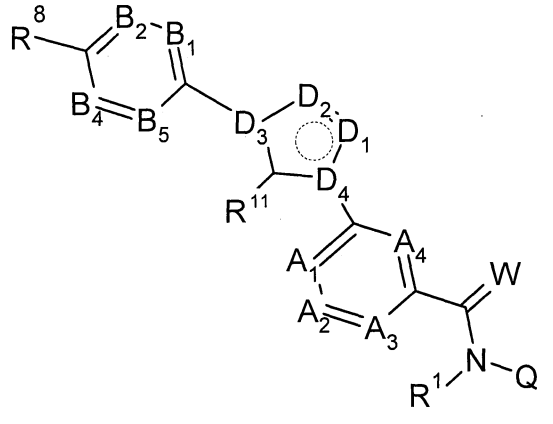
D_1 và D_2 mỗi nhóm độc lập là C-R^{11} hoặc nguyên tử khác loại, tốt hơn là C-R^{11} hoặc nguyên tử khác loại được chọn từ N, O và S, tốt hơn nữa là C-R^{11} hoặc nguyên tử khác loại được chọn từ N và O;

Các nhóm D_3 và D_4 mỗi nhóm độc lập là C hoặc nguyên tử khác loại được chọn từ N;

trong đó một (1) hoặc hai nhóm được chọn từ D_1, D_2, D_3 và D_4 là nguyên tử khác loại;

là hệ vòng thơm.

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập thêm đến các hợp chất có công thức (Ia')



(Ia')

trong đó

R^1, R^{11}, Q, W, A_1, A_2, A_3, A_4, B_1, B_2, B_4 và B_5 từng nhóm được xác định như mô tả trong bản mô tả, trong đó không quá một nhóm được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 là N và không quá một nhóm được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N; hoặc trong đó một hoặc hai nhóm được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 có thể là N và không quá một nhóm được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N;

D_1 và D_2 mỗi nhóm độc lập là C-R^{11} hoặc nguyên tử khác loại, tốt hơn là C-R^{11} hoặc nguyên tử khác loại được chọn từ N, O và S, tốt hơn nữa là C-R^{11} hoặc nguyên tử khác loại được chọn từ N và O;

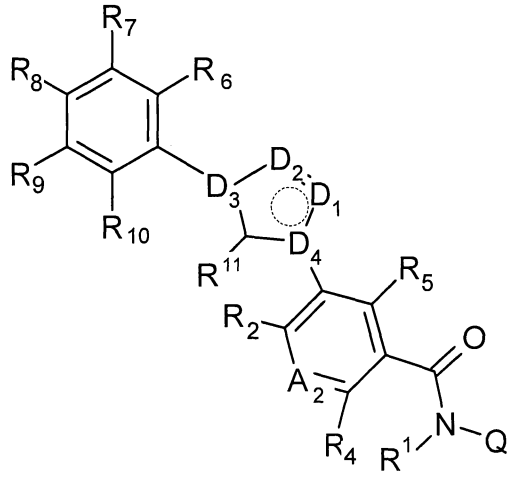
Các nhóm D_3 và D_4 mỗi nhóm độc lập là C hoặc nguyên tử khác loại được chọn từ N;

trong đó một (1) hoặc hai nhóm được chọn từ D_1, D_2, D_3 và D_4 là nguyên tử khác loại; nói cách khác, trong đó không quá một (1) hoặc hai nhóm được chọn từ D_1, D_2, D_3 và D_4 là nguyên tử khác loại, trong đó một (1) hoặc hai nhóm được chọn từ D_1, D_2, D_3 và D_4 là nguyên tử khác loại được chọn từ N và O trong trường hợp D_1 và D_2, hoặc N trong trường hợpD_3 và D_4;

◌ là hệ vòng thơm

và R^8 là như được xác định trong bản mô tả, tốt hơn là C_1-C_4-alkyl được perflo hóa.

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (Ib)



(Ib)

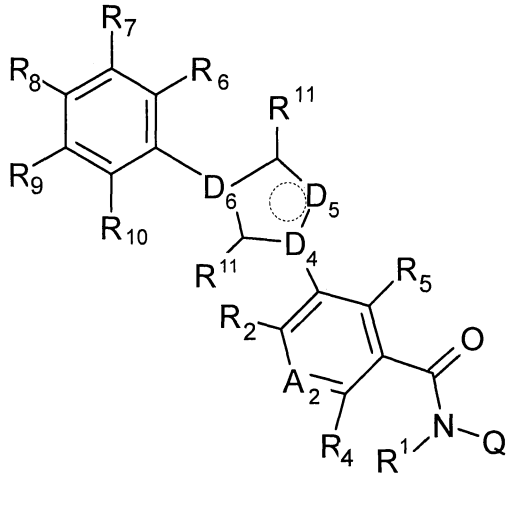
trong đó R_1, R_2, R_4, R_5, R_6, R_7, R^8, R_9, R_{10}, R^{11}, A_2, Q, D_1, D_2, D_3 D_4 và ◌ từng nhóm được xác định như mô tả trong bản mô tả, và trong đó một (1) hoặc hai nhóm được chọn từ D_1, D_2, D_3 và D_4 là nguyên tử khác loại.

Theo hai phương án được đặc biệt ưu tiên, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (Ib) và (Id) trong đó D_1 là N, D_2 là O và D_3 và D_4 là C; hoặc D_1 là C-R^{13}, D_2 là N và D_3 là N và D_4 là C, trong đó R_{13} là H, halogen, xyano, nitro, amino hoặc C_1-C_6-alkyl, C_1-C_6-alkyloxy, C_1-C_6-alkylcacbonyl, C_1-C_6-alkylsulphanyl, C_1-C_6-alkylsulphinyl, C_1-C_6-alkylsulphonyl tùy ý được thế, tốt hơn là H hoặc halogen như F, Cl, Br hoặc I, và tốt hơn nữa là H; và R_1 tốt hơn là H hoặc R_1 tốt hơn là metyl.

Theo một phương án được đặc biệt ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (Ib) và (Id) tong đó D_1 là O, D_2 là N và D_3 và D_4 là C; trong đó R_{13}

là H, halogen, xyano, nitro, amino hoặc C_1-C_6-alkyl, C_1-C_6-alkyloxy, C_1-C_6-alkylcacbonyl, C_1-C_6-alkylsulphanyl, C_1-C_6-alkylsulphinyl, C_1-C_6-alkylsulphonyl tùy ý được thế, tốt hơn là H hoặc halogen như F, Cl, Br hoặc I, và tốt hơn nữa là H; và R_1 tốt hơn là H hoặc R_1 tốt hơn là metyl.

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (Ic)



(Ic)

trong đó R_1, R_2, R_4, R_5, R_6, R_7, R^8, R_9, R_{10}, R^{11}, A_2 và Q từng nhóm được xác định như mô tả trong bản mô tả và ◌ là hệ vòng thơm; và

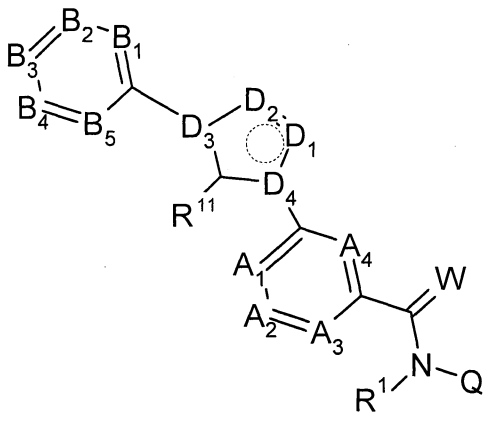
một nhóm được chọn từ D_4 và D_6 là N, trong đó nhóm khác lần lượt được chọn từ D_4 và D_6 là N hoặc C; và

D_5 là N hoặc C-R^{11};

trong điều kiện rằng không quá hai nhóm được chọn từ D_4, D_5 và D_6 là N.

Theo các phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (Ic) trong đó D_4 là N và D_5 và D_6 mỗi nhóm là C-R^{11}; trong đó D_6 là N và D_5 và D_4 mỗi nhóm là C-R^{11}; hoặc trong đó D_4 và D_5 mỗi nhóm là N và D_6 là C-R^{11}.

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (Id)



(Id)

trong đó R^1, R^{11}, Q, W, A_1, A_2, A_3, A_4, B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5, D_1, D_2, D_3 và D_4 và từng nhóm được xác định như mô tả trong bản mô tả, trong đó không quá một (1) hoặc hai nhóm được chọn từ D_1, D_2, D_3 và D_4 là nguyên tử khác loại và trong đó không quá một nhóm được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 là N và không quá một nhóm được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N.

Theo một phương án được đặc biệt ưu tiên, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (Ia), (Ib), (Ic) hoặc (Id) trong đó R^8 là C_1-C_6-alkyl, C_1-C_6-alkyl được thế bằng halogen, C_3-C_6-xycloalkyl, C_3-C_6-xycloalkyl được thế bằng halogen, C_1-C_6-alkoxy, C_1-C_6-alkoxy được thế bằng halogen, *N*-alkoxyiminoalkyl, C_1-C_6-alkylsulphanyl được thế bằng halogen, C_1-C_6-alkylsulphinyl được thế bằng halogen, C_1-C_6-alkylsulphonyl được thế bằng halogen, *N*-C_1-C_6-alkylamino, *N,N*-di-C_1-C_4-alkylamino, và là halogen, xyano hoặc nitro. Ví dụ, flo, clo, brom, iot, xyano, nitro, metyl, etyl, diflometyl, triclometyl, clodiflometyl, dicloflometyl, triflometyl, clometyl, bromometyl, 1-floetyl, 2-floetyl, 2,2-difloetyl, 2,2,2-trifloetyl, 1,2,2,2-tetrafloetyl, 1-clo-1,2,2,2-tetrafloetyl, 2,2,2-tricloetyl, 2-clo-2,2-difloetyl, 1,1-difloetyl, pentafloetyl, pentaflo-tert-butyl, heptaflo-n-propyl, heptafloisopropyl, nonaflo-n-butyl, nonaflo-sec-butyl, xyclopropyl, xyclobutyl, metoxy, etoxy, n-propoxy, 1-metyletoxy, flometoxy, diflometoxy, clodiflometoxy, dicloflometoxy, triflometoxy, 2,2,2-trifloetoxy, 2-clo-2,2-difloetoxy, pentafloetoxy, *N*-metoxyiminometyl, 1-(*N*-metoxyimino)etyl, metylsulphanyl, metylsulphonyl, metylsulphinyl, triflometylsulphonyl, triflometylsulphinyl, triflometylsulphanyl, *N,N*-dimetylamino. Tốt hơn nữa, nếu R^8 là C_1-C_4-alkyl được thế halogen như diflometyl, triclometyl, clodiflometyl, dicloflometyl, triflometyl, 1-floetyl, 2-floetyl, 2,2-difloetyl, 2,2,2-trifloetyl, 1,2,2,2-tetrafloetyl, 1-clo-1,2,2,2-tetrafloetyl, 2,2,2-tricloetyl, 2-clo-2,2-difloetyl, 1,1-difloetyl,

pentafloetyl, pentaflo-tert-butyl, heptaflo-n-propyl, heptafloisopropyl, nonaflo-n-butyl, nonaflo-sec-butyl; được thế bằng halogen C_1-C_4-alkoxy như flometoxy, diflometoxy, clodiflometoxy, dicloflometoxy, triflometoxy, 2,2,2-trifloetoxy, 2-clo-2,2-difloetoxy, pentafloetoxy; triflometylsulphonyl; triflometylsulphinyl; hoặc triflometylsulphanyl. Thậm chí tốt hơn nữa, nếu R^8 là diflometyl, triclometyl, clodiflometyl, dicloflometyl, triflometyl, 1-floetyl, 2-floetyl, 2,2-difloetyl, 2,2,2-trifloetyl, 1,2,2,2-tetrafloetyl, 1-clo-1,2,2,2-tetrafloetyl, 2,2,2-tricloetyl, 2-clo-2,2-difloetyl, 1,1-difloetyl, pentafloetyl, pentaflo-tert-butyl, heptaflo-n-propyl, heptafloisopropyl, nonaflo-n-butyl, nonaflo-sec-butyl, flometoxy, diflometoxy, clodiflometoxy, dicloflometoxy, triflometoxy, 2,2,2-trifloetoxy, 2-clo-2,2-difloetoxy, pentafloetoxy, triflometylsulphonyl, triflometylsulphinyl hoặc triflometylsulphanyl. Tốt hơn nữa, nếu R^8 trong các hợp chất có công thức (Ib) là C_1-C_3-alkyl được perflo hóa như propyl được perflo hóa ($-C_3F_7$), etyl được perflo hóa (C_2F_5) hoặc metyl được perflo hóa (CF_3), tốt nhất là propyl được perflo hóa ($-C_3F_7$) hoặc metyl được perflo hóa.

Các hợp chất được đặc biệt ưu tiên tương ứng với các hợp chất có công thức (Ia) là các hợp chất có công thức (I-T2), (I-T3), (I-T4), (I-T22) và (I-T23).

Theo một phương án, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I-T2) và (I-T4).

Theo phương án tiếp theo, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I-T3).

Theo phương án tiếp theo, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I-T22) và (I-T23).

Do đó, theo một phương án được rất đặc biệt ưu tiên, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I-T2). Theo một phương án được ưu tiên, sáng chế lần lượt đề cập đến các hợp chất có công thức (I-T2) trong đó R^1 là H. Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế lần lượt đề cập đến các hợp chất có công thức (I-T2) trong đó R^1 là metyl.

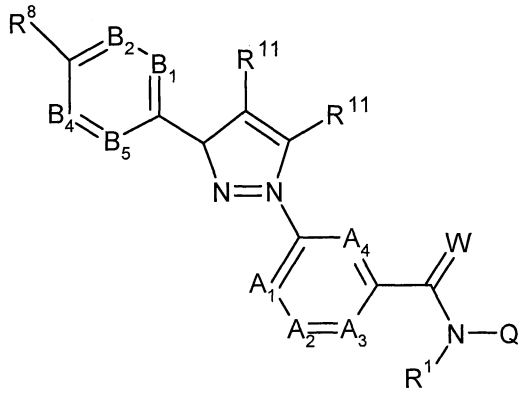
Theo một phương án được rất đặc biệt ưu tiên khác, sáng chế lần lượt đề cập đến các hợp chất có công thức (I-T3). Theo một phương án được ưu tiên, sáng chế lần lượt đề cập đến các hợp chất có công thức (I-T3) trong đó R^1 là H. Theo một phương án

được ưu tiên khác, sáng chế lần lượt đề cập đến các hợp chất có công thức (I-T3) trong đó R^1 là metyl.

Theo một phương án được rất đặc biệt ưu tiên khác, sáng chế lần lượt đề cập đến các hợp chất có công thức (I-T4). Theo một phương án được ưu tiên, sáng chế lần lượt đề cập đến các hợp chất có công thức (I-T4) trong đó R^1 là H. Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế lần lượt đề cập đến các hợp chất có công thức (I-T4) trong đó R^1 là metyl.

Theo một phương án được rất đặc biệt ưu tiên khác, sáng chế lần lượt đề cập đến các hợp chất có công thức (I-T22). Theo một phương án được ưu tiên, sáng chế lần lượt đề cập đến các hợp chất có công thức (I-T22) trong đó R^1 là H. Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế lần lượt đề cập đến các hợp chất có công thức (I-T22) trong đó R^1 là metyl.

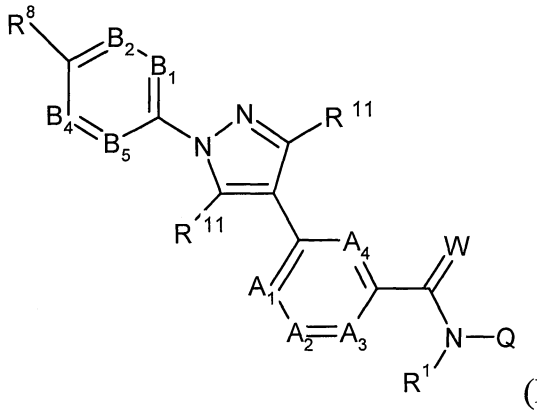
Theo một phương án được rất đặc biệt ưu tiên khác, sáng chế lần lượt đề cập đến các hợp chất có công thức (I-T23). Theo một phương án được ưu tiên, sáng chế lần lượt đề cập đến các hợp chất có công thức (I-T23) trong đó R^1 là H. Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế lần lượt đề cập đến các hợp chất có công thức (I-T23) trong đó R^1 là metyl.



(I-T2)

trong đó

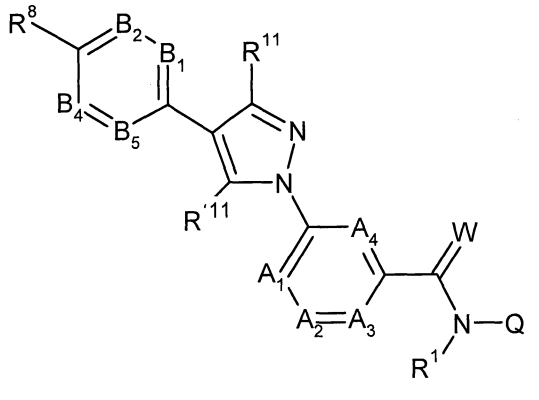
R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, R^{11}, Q và W từng nhóm được xác định như mô tả trong bản mô tả, trong đó không quá một nhóm được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 là N và không quá một nhóm được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N; hoặc trong đó một hoặc hai nhóm được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 có thể là N và không quá một nhóm được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N; hoặc



(I-T3)

trong đó

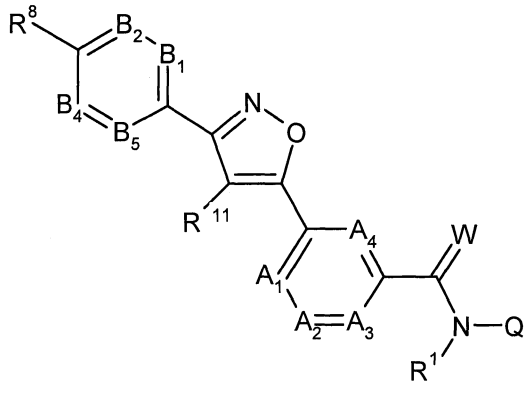
R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, R^{11}, Q và W từng nhóm được xác định như mô tả trong bản mô tả, trong đó không quá một nhóm được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 là N và không quá một nhóm được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N; hoặc trong đó một hoặc hai nhóm được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 có thể là N và không quá một nhóm được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N; hoặc



(I-T4)

trong đó

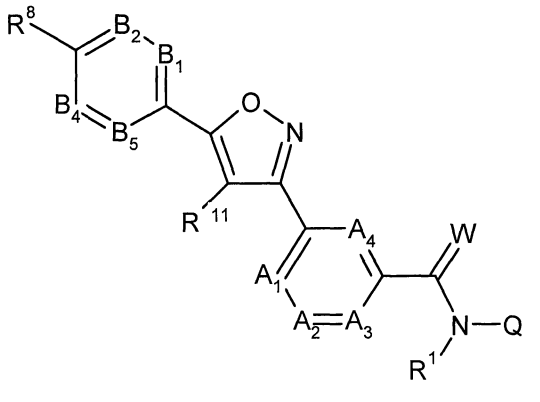
R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, R^{11}, Q và W từng nhóm được xác định như mô tả trong bản mô tả, trong đó không quá một nhóm được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 là N và không quá một nhóm được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N; hoặc trong đó một hoặc hai nhóm được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 có thể là N và không quá một nhóm được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N; hoặc



(T-22)

trong đó

R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, R^{11}, Q và W từng nhóm được xác định như mô tả trong bản mô tả, trong đó không quá một nhóm được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 là N và không quá một nhóm được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N; hoặc trong đó một hoặc hai nhóm được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 có thể là N và không quá một nhóm được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N; hoặc

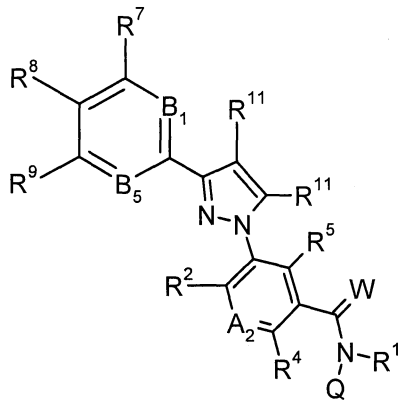


(I-T23)

trong đó

R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, R^{11}, Q và W từng nhóm được xác định như mô tả trong bản mô tả, trong đó không quá một nhóm được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 là N và không quá một nhóm được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N; hoặc trong đó một hoặc hai nhóm được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 có thể là N và không quá một nhóm được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N.

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (In) (T = T2)



(In)

trong đó R^1, Q, W, A_2, B_1, B_5, R^2, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8, R^9 và R^{11} từng nhóm được xác định như mô tả trong bản mô tả, trong đó R^1 là H hoặc trong đó R^1 là metyl.

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (In) trong đó

W là O;

Q là C_1-C_4-alkyl tùy ý được thế hoặc C_3-C_6-xycloalkyl tùy ý được thế hoặc dị vòng 4, 5 hoặc 6 cạnh không no tùy ý được thế bằng một, hai hoặc ba phần tử thế V, trong đó V độc lập là halogen, xyano, nitro, oxo (=O), C_1-C_6-alkyl tùy ý được thế bằng halogen, C_1-C_4-alkenyl, C_1-C_6-alkoxy, C_1-C_6-alkylsulphanyl, C_1-C_6-alkylsulphinyl, C_1-C_6-alkylsulphonyl;

tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen; bằng xyano, hydroxyl hoặc cacbonamit (-C(=O)N(R)$_2$ trong đó R độc lập là H hoặc C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkyl được thế; C_3-xycloalkyl; C_3-xycloalkyl được thế C_1-C_2-alkyl được thế xyano, được thế bằng halogen, được thế nitro hoặc được halogen hóa; dị vòng 4, 5 hoặc 6 cạnh không no tùy ý được thế bằng một, hai hoặc ba V và chứa một hoặc hai nguyên tử khác loại được chọn từ nhóm gồm N, O và S, trong đó V độc lập là halogen, xyano, nitro, oxo (=O), C_1-C_6-alkyl tùy ý được thế bằng halogen;

tốt hơn nữa là C_1-C_3-alkyl được flo hóa như CF_3, CH_2CF_3 hoặc $CH_2CH_2CF_3$; C_1-C_3-alkyl được thế bằng cacbonamit (–C(=O)N(R)$_2$ trong đó R độc lập là H, C_1-C_3-alkyl hoặc C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen), như 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetylamino)etyl; xyclopropyl; xyclopropyl được thế C_1-C_2-alkyl được thế xyano hoặc được flo hóa như 1-

(xyano)xyclopropyl hoặc 1-(triflometyl)xyclopropyl); dị vòng 4 cạnh chứa một nguyên tử khác loại được chọn từ nhóm gồm N, O và S, như thietan-3-yl;

R^7 và R^9 mỗi nhóm là H;

R^{11} trong từng trường hợp là H;

R^1 là H;

R^2 là H, halogen hoặc C_1-C_4-alkyl, tốt hơn là H, flo, clo hoặc metyl;

R^4 là H hoặc halogen, tốt hơn là H, flo hoặc clo;

R^5 là H hoặc halogen, tốt hơn là H, flo hoặc clo;

B_5 là N hoặc C-R^{10}, tốt hơn là C-R^{10} trong đó

R^{10} là hydro, C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkoxy, được thế bằng halogen C_1-C_3-alkyl (tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được perflo hóa (CF_3, C_2F_5 hoặc C_3F_7)), C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkoxy được perflo hóa (OCF_3, OC_2F_5 hoặc OC_3F_7)), C_1-C_3-alkylsulphanyl, C_1-C_3-alkylsulphinyl, C_1-C_3-alkylsulphonyl, flo, brom hoặc clo;

A_2 là N hoặc C-R^3, tốt hơn là C-R^3 trong đó

R^3 là H, halogen, hoặc C_1-C_4-alkyl tùy ý được thế, tốt hơn là H, flo, clo hoặc C_1-C_2-alkyl tùy ý được thế bằng halogen, tốt hơn nữa là H hoặc metyl được thế flo, ví dụ perflometyl;

R^6 là hydro, C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkoxy, C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được perflo hóa (CF_3, C_2F_5 hoặc C_3F_7)), C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkoxy được perflo hóa (OCF_3, OC_2F_5 hoặc OC_3F_7)), C_1-C_3-alkylsulphanyl, C_1-C_3-alkylsulphinyl, C_1-C_3-alkylsulphonyl, flo, clo hoặc brom, tốt hơn là flo, clo, brom, C_1-C_2-alkyl, C_1-C_2-alkyl được thế bằng halogen (ví dụ perflometyl) hoặc C_1-C_2-alkoxy tùy ý được thế bằng halogen, tốt hơn nữa là flo, brom, clo, metyl, etyl, metyl được flo hóa hoặc etyl được flo hóa (tốt hơn nữa là perflometyl hoặc perfloetyl), metoxy được flo hóa hoặc etoxy được flo hóa (tốt hơn nữa là perflometoxy);

R^8 là halogen hoặc C_1-C_4-alkyl tùy ý được thế halogen hoặc C_1-C_4-alkoxy tùy ý được thế bằng halogen, tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen hoặc C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen, tốt hơn nữa là C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen như C_1-C_3-alkyl được flo hóa (ví dụ, C_3-alkyl được flo hóa như perflopropyl).

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (In) trong đó

W là O;

Q là C_1-C_4-alkyl tùy ý được thế hoặc C_3-C_6-xycloalkyl tùy ý được thế hoặc dị vòng 4, 5 hoặc 6 cạnh không no tùy ý được thế bằng một, hai hoặc ba phần tử thế V, trong đó V độc lập là halogen, xyano, nitro, oxo (=O), C_1-C_6-alkyl, C_1-C_4-alkenyl, C_1-C_6-alkoxy, C_1-C_6-alkylsulphanyl, C_1-C_6-alkylsulphinyl, C_1-C_6-alkylsulphonyl tùy ý được thế bằng halogen;

tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen; với xyano, hydroxyl hoặc cacbonamit (-C(=O)N(R)$_2$ trong đó R độc lập là H hoặc C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkyl được thế; C_3-xycloalkyl; C_3-xycloalkyl được thế C_1-C_2-alkyl được thế bằng xyano, được thế bằng halogen, được thế bằng nitro hoặc được halogen hóa; dị vòng 4, 5 hoặc 6 cạnh không no tùy ý được thế bằng một, hai hoặc ba V và chứa một hoặc hai nguyên tử khác loại được chọn từ nhóm gồm N, O và S, trong đó V độc lập là halogen, xyano, nitro, oxo (=O), C_1-C_6-alkyl tùy ý được thế bằng halogen;

tốt hơn nữa là C_1-C_3-alkyl được flo hóa như CF_3, CH_2CF_3 hoặc $CH_2CH_2CF_3$; C_1-C_3-alkyl được thế bằng cacbonamit (–C(=O)N(R)$_2$ trong đó R độc lập là H, C_1-C_3-alkyl hoặc C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen), như 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetylamino)etyl; xyclopropyl; xyano-substituted hoặc xyclopropyl được thế C_1-C_2-alkyl được flo hóa như 1-(xyano)xyclopropyl hoặc 1-(triflometyl)xyclopropyl); dị vòng 4 cạnh chứa một nguyên tử khác loại được chọn từ nhóm gồm N, O và S, như thietan-3-yl;

R^7 và R^9 mỗi nhóm là H;

R^{11} trong từng trường hợp là H;

R^1 là metyl;

R^2 là H, halogen hoặc C_1-C_4-alkyl, tốt hơn là H, flo, clo hoặc metyl;

R^4 là H hoặc halogen, tốt hơn là H, flo hoặc clo;

R^5 là H hoặc halogen, tốt hơn là H, flo hoặc clo;

B_5 là N hoặc C-R^{10}, tốt hơn là C-R^{10} trong đó

R^{10} là hydro, C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkoxy, C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được perflo hóa (CF_3, C_2F_5 hoặc C_3F_7)), C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkoxy được perflo hóa (OCF_3, OC_2F_5 hoặc OC_3F_7)), C_1-C_3-alkylsulphanyl, C_1-C_3-alkylsulphinyl, C_1-C_3-alkylsulphonyl, flo, brom hoặc clo;

A_2 là N hoặc C-R^3, tốt hơn là C-R^3 trong đó

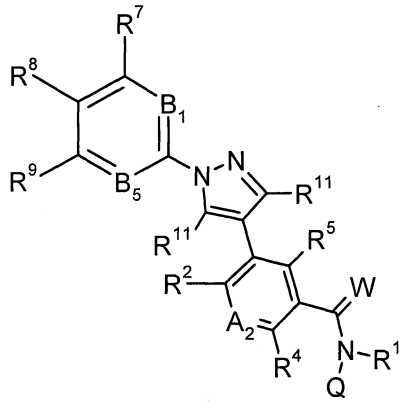
R^3 là H, halogen, hoặc C_1-C_4-alkyl tùy ý được thế, tốt hơn là H, flo, clo hoặc C_1-C_2-alkyl tùy ý được thế bằng halogen, tốt hơn nữa là H hoặc metyl được thế flo, ví dụ perflometyl;

R^6 là hydro, C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkoxy, C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được perflo hóa (CF_3, C_2F_5 hoặc C_3F_7)), C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkoxy được perflo hóa (OCF_3, OC_2F_5 hoặc OC_3F_7)), C_1-C_3-alkylsulphanyl, C_1-C_3-alkylsulphinyl, C_1-C_3-alkylsulphonyl, flo, clo hoặc brom, tốt hơn là flo, clo, brom, C_1-C_2-alkyl, C_1-C_2-alkyl được thế bằng halogen (ví dụ perflometyl) hoặc C_1-C_2-alkoxy tùy ý được thế bằng halogen, tốt hơn nữa là flo, brom, clo, metyl, etyl, metyl được flo hóa hoặc etyl được flo hóa (tốt hơn nữa là perflometyl hoặc perfloetyl), metoxy được flo hóa hoặc etoxy được flo hóa (tốt hơn nữa là perflometoxy);

R^8 là halogen hoặc C_1-C_4-alkyl tùy ý được thế halogen hoặc C_1-C_4-alkoxy tùy ý được thế bằng halogen, tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen hoặc C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen, tốt hơn nữa là C_1-C_3-

alkyl được thế bằng halogen như C_1-C_3-alkyl được flo hóa (ví dụ C_3-alkyl được flo hóa như perflopropyl).

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (Ie) (T = T3)



(Ie)

trong đó R^1, Q, W, A_2, B_1, B_5, R^2, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8, R^9 và R^{11} từng nhóm được xác định như mô tả trong bản mô tả, trong đó R^1 là H hoặc trong đó R^1 là metyl.

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (Ie) trong đó

W là O;

Q là C_1-C_4-alkyl tùy ý được thế hoặc C_3-C_6-xycloalkyl tùy ý được thế hoặc dị vòng 4, 5 hoặc 6 cạnh không no tùy ý được thế bằng một, hai hoặc ba phần tử thế V, trong đó V độc lập là halogen, xyano, nitro, oxo (=O), C_1-C_6-alkyl, C_1-C_4-alkenyl, C_1-C_6-alkoxy, C_1-C_6-alkylsulphanyl, C_1-C_6-alkylsulphinyl, C_1-C_6-alkylsulphonyl tùy ý được thế bằng halogen;

tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen; với xyano, hydroxyl hoặc cacbonamit (-C(=O)N(R)$_2$ trong đó R độc lập là H hoặc C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkyl được thế; C_3-xycloalkyl; C_3-xycloalkyl được thế C_1-C_2-alkyl được thế xyano, được thế bằng halogen, được thế nitro hoặc được halogen hóa; dị vòng 4, 5 hoặc 6 cạnh không no tùy ý được thế bằng một, hai hoặc ba V và chứa một hoặc hai nguyên tử khác loại được chọn từ nhóm gồm N, O và S, trong đó V độc lập là halogen, xyano, nitro, oxo (=O), C_1-C_6-alkyl tùy ý được thế bằng halogen;

tốt hơn nữa là C_1-C_3-alkyl được flo hóa như CF_3, CH_2CF_3 hoặc $CH_2CH_2CF_3$; C_1-C_3-alkyl được thế bằng cacbonamit (–C(=O)N(R)$_2$ trong đó R độc lập là H, C_1-C_3-alkyl hoặc C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen), như 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetylamino)etyl; xyclopropyl; xyclopropyl C_1-C_2-alkyl được thế xyano hoặc được flo hóa như 1-(xyano)xyclopropyl hoặc 1-(triflometyl)xyclopropyl); dị vòng 4 cạnh chứa một nguyên tử khác loại được chọn từ nhóm gồm N, O và S, như thietan-3-yl;

R^7 và R^9 mỗi nhóm là H;

R^{11} trong từng trường hợp là H;

R^1 là H;

R^2 là H, halogen hoặc C_1-C_4-alkyl, tốt hơn là H, flo, clo hoặc metyl;

R^4 là H hoặc halogen, tốt hơn là H, flo hoặc clo;

R^5 là H hoặc halogen, tốt hơn là H, flo hoặc clo;

B_5 là N hoặc C-R^{10}, tốt hơn là C-R^{10} trong đó

R^{10} là hydro, C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkoxy, C_1-C_3-alkyl (được thế bằng halogen tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được perflo hóa (CF_3, C_2F_5 hoặc C_3F_7)), C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkoxy được perflo hóa (OCF_3, OC_2F_5 hoặc OC_3F_7)), C_1-C_3-alkylsulphanyl, C_1-C_3-alkylsulphinyl, C_1-C_3-alkylsulphonyl, flo, brom hoặc clo;

A_2 là N hoặc C-R^3, tốt hơn là C-R^3 trong đó

R^3 là H, halogen, hoặc C_1-C_4-alkyl tùy ý được thế, tốt hơn là H, flo, clo hoặc C_1-C_2-alkyl tùy ý được thế bằng halogen, tốt hơn nữa là H hoặc metyl được thế flo, ví dụ perflometyl;

R^6 là hydro, C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkoxy, C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được perflo hóa (CF_3, C_2F_5 hoặc C_3F_7)), C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkoxy được perflo hóa (OCF_3, OC_2F_5 hoặc OC_3F_7)), C_1-C_3-alkylsulphanyl, C_1-C_3-alkylsulphinyl, C_1-C_3-alkylsulphonyl, flo, clo hoặc brom, tốt hơn là flo, clo, brom, C_1-C_2-alkyl, C_1-C_2-alkyl được thế bằng halogen (ví dụ

perflometyl) hoặc C_1-C_2-alkoxy tùy ý được thế bằng halogen, tốt hơn nữa là flo, brom, clo, metyl, etyl, metyl được flo hóa hoặc etyl được flo hóa (tốt hơn nữa là perflometyl hoặc perfloetyl), metoxy được flo hóa hoặc etoxy được flo hóa (tốt hơn nữa là perflometoxy);

R^8 là halogen hoặc C_1-C_4-alkyl tùy ý được thế halogen hoặc C_1-C_4-alkoxy tùy ý được thế bằng halogen, tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen hoặc C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen, tốt hơn nữa là C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen như C_1-C_3-alkyl (được flo hóa ví dụ được flo hóa C_3-alkyl như perflopropyl).

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (Ie) trong đó

W là O;

Q là C_1-C_4-alkyl tùy ý được thế hoặc C_3-C_6-xycloalkyl tùy ý được thế hoặc dị vòng 4, 5 hoặc 6 cạnh không no tùy ý được thế bằng một, hai hoặc ba phần tử thế V, trong đó V độc lập là halogen, xyano, nitro, oxo (=O), C_1-C_6-alkyl, C_1-C_4-alkenyl, C_1-C_6-alkoxy, C_1-C_6-alkylsulphanyl, C_1-C_6-alkylsulphinyl, C_1-C_6-alkylsulphonyl tùy ý được thế bằng halogen;

tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen; bằng xyano, hydroxyl hoặc cacbonamit (-C(=O)N(R)$_2$ trong đó R độc lập là H hoặc C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkyl được thế; C_3-xycloalkyl; C_3-xycloalkyl được thế C_1-C_2-alkyl được thế xyano, được thế bằng halogen, được thế nitro hoặc được halogen hóa; dị vòng 4, 5 hoặc 6 cạnh không no tùy ý được thế bằng một, hai hoặc ba V và chứa một hoặc hai nguyên tử khác loại được chọn từ nhóm gồm N, O và S, trong đó V độc lập là halogen, xyano, nitro, oxo (=O), C_1-C_6-alkyl tùy ý được thế bằng halogen;

tốt hơn nữa là C_1-C_3-alkyl được flo hóa như CF_3, CH_2CF_3 hoặc $CH_2CH_2CF_3$; C_1-C_3-alkyl được thế bằng cacbonamit (–C(=O)N(R)$_2$ trong đó R độc lập là H, C_1-C_3-alkyl hoặc C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen), như 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetylamino)etyl; xyclopropyl; xyclopropyl được thế C_1-C_2-alkyl được thế xyano hoặc được flo hóa như 1-

(xyano)xyclopropyl hoặc 1-(triflometyl)xyclopropyl); dị vòng 4 cạnh chứa một nguyên tử khác loại được chọn từ nhóm gồm N, O và S, như thietan-3-yl;

R^7 và R^9 mỗi nhóm là H;

R^{11} trong từng trường hợp là H;

R^1 là metyl;

R^2 là H, halogen hoặc C_1-C_4-alkyl, tốt hơn là H, flo, clo hoặc metyl;

R^4 là H hoặc halogen, tốt hơn là H, flo hoặc clo;

R^5 là H hoặc halogen, tốt hơn là H, flo hoặc clo;

B_5 là N hoặc C-R^{10}, tốt hơn là C-R^{10} trong đó

R^{10} là hydro, C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkoxy, C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkyl (được perflo hóa CF_3, C_2F_5 hoặc C_3F_7)), C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkoxy được perflo hóa (OCF_3, OC_2F_5 hoặc OC_3F_7)), C_1-C_3-alkylsulphanyl, C_1-C_3-alkylsulphinyl, C_1-C_3-alkylsulphonyl, flo, brom hoặc clo;

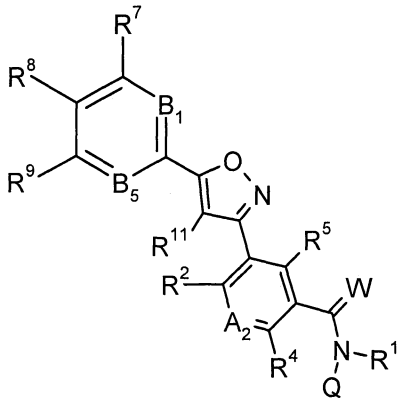
A_2 là N hoặc C-R^3, tốt hơn là C-R^3 trong đó

R^3 là H, halogen, hoặc C_1-C_4-alkyl tùy ý được thế, tốt hơn là H, flo, clo hoặc C_1-C_2-alkyl tùy ý được thế bằng halogen, tốt hơn nữa là H hoặc metyl được thế flo, ví dụ perflometyl;

R^6 là hydro, C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkoxy, C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được perflo hóa (CF_3, C_2F_5 hoặc C_3F_7)), C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkoxy được perflo hóa (OCF_3, OC_2F_5 hoặc OC_3F_7)), C_1-C_3-alkylsulphanyl, C_1-C_3-alkylsulphinyl, C_1-C_3-alkylsulphonyl, flo, clo hoặc brom, tốt hơn là flo, clo, brom, C_1-C_2-alkyl, C_1-C_2-alkyl được thế bằng halogen (ví dụ perflometyl) hoặc C_1-C_2-alkoxy tùy ý được thế bằng halogen, tốt hơn nữa là flo, brom, clo, metyl, etyl, metyl được flo hóa hoặc etyl được flo hóa (tốt hơn nữa là perflometyl hoặc perfloetyl), metoxy được flo hóa hoặc etoxy được flo hóa (tốt hơn nữa là perflometoxy);

R^8 là halogen hoặc C_1-C_4-alkyl tùy ý được thế halogen hoặc C_1-C_4-alkoxy tùy ý được thế bằng halogen, tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen hoặc C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen, tốt hơn nữa là C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen như C_1-C_3-alkyl được flo hóa (ví dụ được flo hóa C_3-alkyl như perflopropyl).

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (If) (T = T23)



(If)

trong đó R^1, Q, W, A_2, B_1, B_5, R^2, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8, R^9 và R^{11} từng nhóm được xác định như mô tả trong bản mô tả, trong đó R^1 là H hoặc trong đó R^1 là metyl.

Theo một phương án được ưu tiên, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (If) trong đó

W là O;

Q là C_1-C_4-alkyl tùy ý được thế, C_3-C_6-xycloalkyl hoặc tùy ý được thế hoặc dị vòng 4, 5 hoặc 6 cạnh không no tùy ý được thế bằng một, hai hoặc ba phần tử thế V, trong đó V độc lập là halogen, xyano, nitro, oxo (=O), C_1-C_6-alkyl, C_1-C_4-alkenyl, C_1-C_6-alkoxy, C_1-C_6-alkylsulphanyl, C_1-C_6-alkylsulphinyl, C_1-C_6-alkylsulphonyl tùy ý được thế bằng halogen;

tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen; bằng xyano, hydroxyl hoặc cacbonamit (-C(=O)N(R)$_2$ trong đó R độc lập là H hoặc C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkyl được thế; C_3-xycloalkyl; C_3-xycloalkyl được thế C_1-

C_2-alkyl được thế xyano, được thế bằng halogen, được thế nitro hoặc được halogen hóa; dị vòng 4, 5 hoặc 6 cạnh không no tùy ý được thế bằng một, hai hoặc ba V và chứa một hoặc hai nguyên tử khác loại được chọn từ nhóm gồm N, O và S, trong đó V độc lập là halogen, xyano, nitro, oxo (=O), C_1-C_6-alkyl tùy ý được thế bằng halogen;

tốt hơn nữa là được flo hóa C_1-C_3-alkyl như CF_3, CH_2CF_3 hoặc $CH_2CH_2CF_3$; C_1-C_3-alkyl được thế bằng cacbonamit (–C(=O)N(R)$_2$ trong đó R độc lập là H, C_1-C_3-alkyl hoặc C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen), như 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetylamino)etyl; xyclopropyl; xyclopropyl được thế C_1-C_2-alkyl được thế xyano hoặc được flo hóa như 1-(xyano)xyclopropyl hoặc 1-(triflometyl)xyclopropyl); dị vòng 4 cạnh chứa một nguyên tử khác loại được chọn từ nhóm gồm N, O và S, như thietan-3-yl;

R^7 và R^9 mỗi nhóm là H;

R^{11} trong từng trường hợp là H;

R^1 là H;

R^2 là H, halogen hoặc C_1-C_4-alkyl, tốt hơn là H, flo, clo hoặc metyl;

R^4 là H hoặc halogen, tốt hơn là H, flo hoặc clo;

R^5 là H hoặc halogen, tốt hơn là H, flo hoặc clo;

B_5 là N hoặc C-R^{10}, tốt hơn là C-R^{10} trong đó

R^{10} là H, halogen, C_1-C_4-alkyl hoặc C_1-C_4-alkoxy, tốt hơn là H, flo, brom, clo, C_1-C_2-alkyl hoặc C_1-C_2-alkoxy, tốt hơn nữa là H, clo, brom, flo, metyl hoặc metoxy;

A_2 là N hoặc C-R^3, tốt hơn là C-R^3 trong đó

R^3 là H, halogen, hoặc C_1-C_4-alkyl tùy ý được thế, tốt hơn là H, flo, clo hoặc C_1-C_2-alkyl tùy ý được thế bằng halogen, tốt hơn nữa là H hoặc metyl được thế flo, ví dụ perflometyl;

R^6 là H, halogen, C_1-C_4-alkyl tùy ý được thế hoặc C_1-C_4-alkoxy tùy ý được thế, tốt hơn là flo, clo, C_1-C_2-alkyl, C_1-C_2-alkyl được thế bằng halogen

(ví dụ perflometyl) hoặc C_1-C_2-alkoxy tùy ý được thế bằng halogen, tốt hơn nữa là flo, brom, clo, metyl, etyl, metyl được flo hóa hoặc etyl được flo hóa (tốt hơn nữa là perflometyl hoặc perfloetyl), metoxy được flo hóa hoặc etoxy được flo hóa (tốt hơn nữa là perflometoxy);

R^8 là halogen hoặc C_1-C_4-alkyl tùy ý được thế halogen hoặc C_1-C_4-alkoxy tùy ý được thế bằng halogen, tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen hoặc C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen, tốt hơn nữa là C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen như C_1-C_3-alkyl được flo hóa (ví dụ C_3-alkyl được flo hóa như perflopropyl).

Theo một phương án được ưu tiên, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (If) trong đó

W là O;

Q là C_1-C_4-alkyl tùy ý được thế hoặc C_3-C_6-xycloalkyl tùy ý được thế hoặc dị vòng 4, 5 hoặc 6 cạnh không no tùy ý được thế bằng một, hai hoặc ba phần tử thế V, trong đó V độc lập là halogen, xyano, nitro, oxo (=O), C_1-C_6-alkyl, C_1-C_4-alkenyl, C_1-C_6-alkoxy, C_1-C_6-alkylsulphanyl, C_1-C_6-alkylsulphinyl, C_1-C_6-alkylsulphonyl tùy ý được thế bằng halogen;

tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen; bằng xyano, hydroxyl hoặc cacbonamit (-C(=O)N(R)$_2$ trong đó R độc lập là H hoặc C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkyl được thế; C_3-xycloalkyl; C_3-xycloalkyl được thế C_1-C_2-alkyl được thế xyano, được thế bằng halogen, được thế nitro hoặc được halogen hóa; dị vòng 4, 5 hoặc 6 cạnh không no tùy ý được thế bằng một, hai hoặc ba V và chứa một hoặc hai nguyên tử khác loại được chọn từ nhóm gồm N, O và S, trong đó V độc lập là halogen, xyano, nitro, oxo (=O C_1-C_6-alkyl), tùy ý được thế bằng halogen;

tốt hơn nữa là C_1-C_3-alkyl được flo hóa như CF_3, CH_2CF_3 hoặc $CH_2CH_2CF_3$; C_1-C_3-alkyl được thế bằng cacbonamit (–C(=O)N(R)$_2$ trong đó R độc lập là H, C_1-C_3-alkyl hoặc C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen), như 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetylamino)etyl; xyclopropyl; xyclopropyl được thế C_1-C_2-alkyl được thế xyano hoặc được flo hóa như 1-

(xyano)xyclopropyl hoặc 1-(triflometyl)xyclopropyl); dị vòng 4 cạnh chứa một nguyên tử khác loại được chọn từ nhóm gồm N, O và S, như thietan-3-yl;

R^7 và R^9 mỗi nhóm là H;

R^{11} trong từng trường hợp là H;

R^1 là metyl;

R^2 là H, halogen hoặc C_1-C_4-alkyl, tốt hơn là H, flo, clo hoặc metyl;

R^4 là H hoặc halogen, tốt hơn là H, flo hoặc clo;

R^5 là H hoặc halogen, tốt hơn là H, flo hoặc clo;

B_5 là N hoặc C-R^{10}, tốt hơn là C-R^{10} trong đó

R^{10} là hydro, C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkoxy, C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được perflo hóa (CF_3, C_2F_5 hoặc C_3F_7)), C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkoxy được perflo hóa (OCF_3, OC_2F_5 hoặc OC_3F_7)), C_1-C_3-alkylsulphanyl, C_1-C_3-alkylsulphinyl, C_1-C_3-alkylsulphonyl, flo, brom hoặc clo;

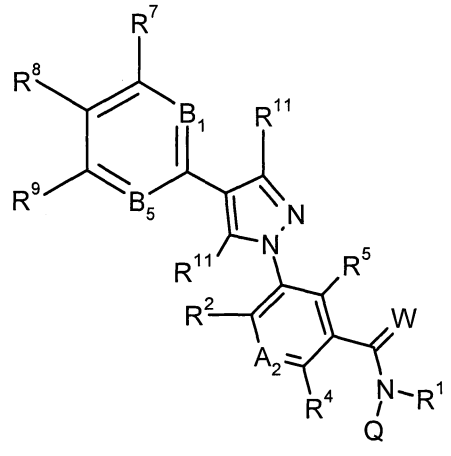
A_2 là N hoặc C-R^3, tốt hơn là C-R^3 trong đó

R^3 là H, halogen, hoặc C_1-C_4-alkyl tùy ý được thế, tốt hơn là H, flo, clo hoặc C_1-C_2-alkyl tùy ý được thế bằng halogen, tốt hơn nữa là H hoặc metyl được thế flo, ví dụ perflometyl;

R^6 là hydro, C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkoxy, C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được perflo hóa (CF_3, C_2F_5 hoặc C_3F_7)), C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkoxy được perflo hóa (OCF_3, OC_2F_5 hoặc OC_3F_7)), C_1-C_3-alkylsulphanyl, C_1-C_3-alkylsulphinyl, C_1-C_3-alkylsulphonyl, flo, clo hoặc brom, tốt hơn là flo, clo, brom, C_1-C_2-alkyl, C_1-C_2-alkyl được thế bằng halogen (ví dụ perflometyl) hoặc C_1-C_2-alkoxy tùy ý được thế bằng halogen, tốt hơn nữa là flo, brom, clo, metyl, etyl, metyl được flo hóa hoặc etyl được flo hóa (tốt hơn nữa là perflometyl hoặc perfloetyl), metoxy được flo hóa hoặc etoxy được flo hóa (tốt hơn nữa là perflometoxy);

R^8 là halogen hoặc C_1-C_4-alkyl tùy ý được thế bằng halogen hoặc C_1-C_4-alkoxy tùy ý được thế bằng halogen, tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen hoặc C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen, tốt hơn nữa là C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen như C_1-C_3-alkyl được flo hóa (ví dụ C_3-alkyl được flo hóa như perflopropyl).

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (Ig) (T = T4)



(Ig)

trong đó R^1, Q, W, A_2, B_1, B_5, R^2, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8, R^9 và R^{11} từng nhóm được xác định như mô tả trong bản mô tả, trong đó R^1 là H hoặc trong đó R^1 là metyl.

Theo một phương án được ưu tiên, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (Ig) trong đó

W là O;

Q là C_1-C_4-alkyl tùy ý được thế hoặc C_3-C_6-xycloalkyl tùy ý được thế hoặc dị vòng 4, 5 hoặc 6 cạnh không no tùy ý được thế bằng một, hai hoặc ba phần tử thế V, trong đó V độc lập là halogen, xyano, nitro, oxo (=O), C_1-C_6-alkyl, C_1-C_4-alkenyl, C_1-C_6-alkoxy, C_1-C_6-alkylsulphanyl, C_1-C_6-alkylsulphinyl, C_1-C_6-alkylsulphonyl tùy ý được thế bằng halogen;

tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen; bằng xyano, hydroxyl hoặc cacbonamit (-C(=O)N(R)$_2$ trong đó R độc lập là H hoặc C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkyl được thế; C_3-xycloalkyl; C_3-xycloalkyl được thế C_1-C_2-alkyl được thế xyano, được thế bằng halogen, được thế nitro hoặc được halogen hóa; dị vòng 4, 5 hoặc 6 cạnh không no tùy ý được thế

bằng một, hai hoặc ba V và chứa một hoặc hai nguyên tử khác loại được chọn từ nhóm gồm N, O và S, trong đó V độc lập là halogen, xyano, nitro, oxo (=O), C_1-C_6-alkyl tùy ý được thế bằng halogen;

tốt hơn nữa là được flo hóa C_1-C_3-alkyl như CF_3, CH_2CF_3 hoặc $CH_2CH_2CF_3$; C_1-C_3-alkyl được thế bằng cacbonamit (–C(=O)N(R)$_2$ trong đó R độc lập là H, C_1-C_3-alkyl hoặc C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen), như 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetylamino)etyl; xyclopropyl; xyclopropyl được thế C_1-C_2-alkyl được thế xyano hoặc được flo hóa như 1-(xyano)xyclopropyl hoặc 1-(triflometyl)xyclopropyl); dị vòng 4 cạnh chứa một nguyên tử khác loại được chọn từ nhóm gồm N, O và S, như thietan-3-yl;

R^7 và R^9 mỗi nhóm là H;

R^{11} trong từng trường hợp là H;

R^1 là H;

R^2 là H, halogen hoặc C_1-C_4-alkyl, tốt hơn là H, flo, clo hoặc metyl;

R^4 là H hoặc halogen, tốt hơn là H, flo hoặc clo;

R^5 là H hoặc halogen, tốt hơn là H, flo hoặc clo;

B_5 là N hoặc C-R^{10}, tốt hơn là C-R^{10} trong đó

R^{10} là hydro, C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkoxy, C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được perflo hóa (CF_3, C_2F_5 hoặc C_3F_7)), C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkoxy được perflo hóa (OCF_3, OC_2F_5 hoặc OC_3F_7)), C_1-C_3-alkylsulphanyl, C_1-C_3-alkylsulphinyl, C_1-C_3-alkylsulphonyl, flo, brom hoặc clo;

A_2 là N hoặc C-R^3, tốt hơn là C-R^3 trong đó

R^3 là H, halogen, hoặc C_1-C_4-alkyl tùy ý được thế, tốt hơn là H, flo, clo hoặc C_1-C_2-alkyl tùy ý được thế bằng halogen, tốt hơn nữa là H hoặc metyl được thế flo, ví dụ perflometyl;

R^6 là hydro, C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkoxy, C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được perflo hóa (CF_3, C_2F_5 hoặc C_3F_7)), C_1-C_3-

alkoxy được thế bằng halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkoxy được perflo hóa (OCF_3, OC_2F_5 hoặc OC_3F_7)), C_1-C_3-alkylsulphanyl, C_1-C_3-alkylsulphinyl, C_1-C_3-alkylsulphonyl, flo, clo hoặc brom, tốt hơn là flo, clo, brom, C_1-C_2-alkyl, C_1-C_2-alkyl được thế bằng halogen (ví dụ perflometyl) hoặc C_1-C_2-alkoxy tùy ý được thế bằng halogen, tốt hơn nữa là flo, brom, clo, metyl, etyl, metyl được flo hóa hoặc etyl được flo hóa (tốt hơn nữa là perflometyl hoặc perfloetyl), metoxy được flo hóa hoặc etoxy được flo hóa (tốt hơn nữa là perflometoxy);

R^8 là halogen hoặc C_1-C_4-alkyl tùy ý được thế halogen hoặc C_1-C_4-alkoxy tùy ý được thế bằng halogen, tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen hoặc C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen, tốt hơn nữa là C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen như C_1-C_3-alkyl được flo hóa (ví dụ C_3-alkyl được flo hóa như perflopropyl).

Theo một phương án được ưu tiên, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (Ig) trong đó

W là O;

Q là C_1-C_4-alkyl tùy ý được thế hoặc C_3-C_6-xycloalkyl tùy ý được thế hoặc dị vòng 4, 5 hoặc 6 cạnh không no tùy ý được thế bằng một, hai hoặc ba phần tử thế V, trong đó V độc lập là halogen, xyano, nitro, oxo (=O), C_1-C_6-alkyl tùy ý được thế bằng halogen, C_1-C_4-alkenyl, C_1-C_6-alkoxy, C_1-C_6-alkylsulphanyl, C_1-C_6-alkylsulphinyl, C_1-C_6-alkylsulphonyl;

tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen; bằng xyano, hydroxyl hoặc cacbonamit (-C(=O)N(R)$_2$ trong đó R độc lập là H hoặc C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkyl được thế; C_3-xycloalkyl; C_3-xycloalkyl được thế C_1-C_2-alkyl được thế xyano, được thế bằng halogen, được thế nitro hoặc được halogen hóa; dị vòng 4, 5 hoặc 6 cạnh không no tùy ý được thế bằng một, hai hoặc ba V và chứa một hoặc hai nguyên tử khác loại được chọn từ nhóm gồm N, O và S, trong đó V độc lập là halogen, xyano, nitro, oxo (=O), C_1-C_6-alkyl tùy ý được thế bằng halogen;

tốt hơn nữa là C_1-C_3-alkyl được flo hóa như CF_3, CH_2CF_3 hoặc $CH_2CH_2CF_3$; C_1-C_3-alkyl được thế bằng cacbonamit (–C(=O)N(R)$_2$ trong đó R độc lập là H, C_1-C_3-alkyl hoặc C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen), như 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetylamino)etyl; xyclopropyl; xyclopropyl được thế C_1-C_2-alkyl được thế xyano hoặc được flo hóa như 1-(xyano)xyclopropyl hoặc 1-(triflometyl)xyclopropyl); dị vòng 4 cạnh chứa một nguyên tử khác loại được chọn từ nhóm gồm N, O và S, như thietan-3-yl;

R^7 và R^9 mỗi nhóm là H;

R^{11} trong từng trường hợp là H;

R^1 là metyl;

R^2 là H, halogen hoặc C_1-C_4-alkyl, tốt hơn là H, flo, clo hoặc metyl;

R^4 là H hoặc halogen, tốt hơn là H, flo hoặc clo;

R^5 là H hoặc halogen, tốt hơn là H, flo hoặc clo;

B_5 là N hoặc C-R^{10}, tốt hơn là C-R^{10} trong đó

R^{10} là hydro, C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkoxy, C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được perflo hóa (CF_3, C_2F_5 hoặc C_3F_7)), C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkoxy được perflo hóa (OCF_3, OC_2F_5 hoặc OC_3F_7)), C_1-C_3-alkylsulphanyl, C_1-C_3-alkylsulphinyl, C_1-C_3-alkylsulphonyl, flo, brom hoặc clo;

A_2 là N hoặc C-R^3, tốt hơn là C-R^3 trong đó

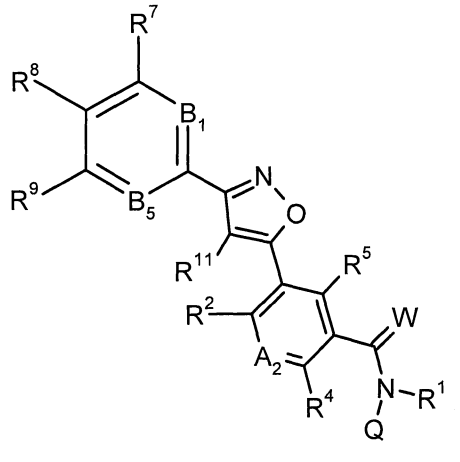
R^3 là H, halogen, hoặc C_1-C_4-alkyl tùy ý được thế, tốt hơn là H, flo, clo hoặc C_1-C_2-alkyl tùy ý được thế bằng halogen, tốt hơn nữa là H hoặc metyl được thế flo, ví dụ perflometyl;

R^6 là hydro, C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkoxy, C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được perflo hóa (CF_3, C_2F_5 hoặc C_3F_7)), C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkoxy được perflo hóa (OCF_3, OC_2F_5 hoặc OC_3F_7)), C_1-C_3-alkylsulphanyl, C_1-C_3-alkylsulphinyl, C_1-C_3-alkylsulphonyl, flo, clo hoặc brom, tốt hơn là flo,

clo, brom, C_1-C_2-alkyl, C_1-C_2-alkyl được thế bằng halogen (ví dụ perflometyl) hoặc C_1-C_2-alkoxy tùy ý được thế bằng halogen, tốt hơn nữa là flo, brom, clo, metyl, etyl, metyl được flo hóa hoặc etyl được flo hóa (tốt hơn nữa là perflometyl hoặc perfloetyl), metoxy được flo hóa hoặc etoxy được flo hóa (tốt hơn nữa là perflometoxy);

R^8 là halogen hoặc C_1-C_4-alkyl tùy ý được thế halogen hoặc C_1-C_4-alkoxy tùy ý được thế bằng halogen, tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen hoặc C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen, tốt hơn nữa là C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen như C_1-C_3-alkyl được flo hóa (ví dụ C_3-alkyl được flo hóa như perflopropyl).

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (Io) (T = T22)



(Io)

trong đó R^1, Q, W, A_2, B_1, B_5, R^2, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8, R^9 và R^{11} từng nhóm được xác định như mô tả trong bản mô tả, trong đó R^1 là H hoặc trong đó R^1 là metyl.

Theo một phương án được ưu tiên, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (Io) trong đó

W là O;

Q là C_1-C_4-alkyl tùy ý được thế hoặc C_3-C_6-xycloalkyl tùy ý được thế hoặc dị vòng 4, 5 hoặc 6 cạnh không no tùy ý được thế bằng một, hai hoặc ba phần tử thế V, trong đó V độc lập là halogen, xyano, nitro, oxo (=O), C_1-

C_6-alkyl, C_1-C_4-alkenyl, C_1-C_6-alkoxy, C_1-C_6-alkylsulphanyl, C_1-C_6-alkylsulphinyl, C_1-C_6-alkylsulphonyl tùy ý được thế bằng halogen;

tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen; bằng xyano, hydroxyl hoặc cacbonamit (-C(=O)N(R)$_2$ trong đó R độc lập là H hoặc C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkyl được thế; C_3-xycloalkyl; được thế xyano, C_3-xycloalkyl được thế C_1-C_2-alkyl được thế bằng halogen, được thế nitro hoặc được halogen hóa; dị vòng 4, 5 hoặc 6 cạnh không no tùy ý được thế bằng một, hai hoặc ba V và chứa một hoặc hai nguyên tử khác loại được chọn từ nhóm gồm N, O và S, trong đó V độc lập là halogen, xyano, nitro, oxo (=O), C_1-C_6-alkyl tùy ý được thế bằng halogen;

tốt hơn nữa là C_1-C_3-alkyl được flo hóa như CF_3, CH_2CF_3 hoặc $CH_2CH_2CF_3$; C_1-C_3-alkyl được thế bằng cacbonamit (–C(=O)N(R)$_2$ trong đó R độc lập là H, C_1-C_3-alkyl hoặc C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen), như 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetylamino)etyl; xyclopropyl; xyclopropyl được thế C_1-C_2-alkyl được thế xyano hoặc được flo hóa như 1-(xyano)xyclopropyl hoặc 1-(triflometyl)xyclopropyl); dị vòng 4 cạnh chứa một nguyên tử khác loại được chọn từ nhóm gồm N, O và S, như thietan-3-yl;

R^7 và R^9 mỗi nhóm là H;

R^{11} trong từng trường hợp là H;

R^1 là H;

R^2 là H, halogen hoặc C_1-C_4-alkyl, tốt hơn là H, flo, clo hoặc metyl;

R^4 là H hoặc halogen, tốt hơn là H, flo hoặc clo;

R^5 là H hoặc halogen, tốt hơn là H, flo hoặc clo;

B_5 là N hoặc C-R^{10}, tốt hơn là C-R^{10} trong đó

R^{10} là hydro, C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkoxy, C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được perflo hóa (CF_3, C_2F_5 hoặc C_3F_7)), C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkoxy được perflo hóa

(OCF_3, OC_2F_5 hoặc OC_3F_7)), C_1-C_3-alkylsulphanyl, C_1-C_3-alkylsulphinyl, C_1-C_3-alkylsulphonyl, flo, brom hoặc clo;

A_2 là N hoặc C-R^3, tốt hơn là C-R^3 trong đó

R^3 là H, halogen, hoặc C_1-C_4-alkyl tùy ý được thế, tốt hơn là H, flo, clo hoặc C_1-C_2-alkyl tùy ý được thế bằng halogen, tốt hơn nữa là H hoặc metyl được thế flo, ví dụ perflometyl;

R^6 là hydro, C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkoxy, C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được perflo hóa (CF_3, C_2F_5 hoặc C_3F_7)), C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkoxy được perflo hóa (OCF_3, OC_2F_5 hoặc OC_3F_7)), C_1-C_3-alkylsulphanyl, C_1-C_3-alkylsulphinyl, C_1-C_3-alkylsulphonyl, flo, clo hoặc brom, tốt hơn là flo, clo, brom, C_1-C_2-alkyl, C_1-C_2-alkyl được thế bằng halogen (ví dụ perflometyl) hoặc C_1-C_2-alkoxy tùy ý được thế bằng halogen, tốt hơn nữa là flo, brom, clo, metyl, etyl, metyl được flo hóa hoặc etyl được flo hóa (tốt hơn nữa là perflometyl hoặc perfloetyl), metoxy được flo hóa hoặc etoxy được flo hóa (tốt hơn nữa là perflometoxy);

R^8 là halogen hoặc C_1-C_4-alkyl tùy ý được thế halogen hoặc C_1-C_4-alkoxy tùy ý được thế bằng halogen, tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen hoặc C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen, tốt hơn nữa là C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen như C_1-C_3-alkyl được flo hóa (ví dụ C_3-alkyl được flo hóa như perflopropyl).

Theo một phương án được ưu tiên, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (Io) trong đó

W là O;

Q là C_1-C_4-alkyl tùy ý được thế hoặc C_3-C_6-xycloalkyl tùy ý được thế hoặc dị vòng 4, 5 hoặc 6 cạnh không no tùy ý được thế bằng một, hai hoặc ba phần tử thế V, trong đó V độc lập là halogen, xyano, nitro, oxo (=O), C_1-C_6-alkyl, C_1-C_4-alkenyl, C_1-C_6-alkoxy, C_1-C_6-alkylsulphanyl, C_1-C_6-alkylsulphinyl, C_1-C_6-alkylsulphonyl tùy ý được thế bằng halogen;

tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen; bằng xyano, hydroxyl hoặc cacbonamit (-C(=O)N(R)$_2$ trong đó R độc lập là H hoặc C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkyl được thế; C_3-xycloalkyl; C_3-xycloalkyl được thế C_1-C_2-alkyl được thế xyano, được thế bằng halogen, được thế nitro hoặc được halogen hóa; dị vòng 4, 5 hoặc 6 cạnh không no tùy ý được thế bằng một, hai hoặc ba V và chứa một hoặc hai nguyên tử khác loại được chọn từ nhóm gồm N, O và S, trong đó V độc lập là halogen, xyano, nitro, oxo (=O), C_1-C_6-alkyl tùy ý được thế bằng halogen;

tốt hơn nữa là được flo hóa C_1-C_3-alkyl như CF_3, CH_2CF_3 hoặc $CH_2CH_2CF_3$; C_1-C_3-alkyl được thế bằng cacbonamit (–C(=O)N(R)$_2$ trong đó R độc lập là H, C_1-C_3-alkyl hoặc C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen), như 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetylamino)etyl; xyclopropyl; xyclopropyl được thế C_1-C_2-alkyl được thế xyano hoặc được flo hóa như 1-(xyano)xyclopropyl hoặc 1-(triflometyl)xyclopropyl); dị vòng 4 cạnh chứa một nguyên tử khác loại được chọn từ nhóm gồm N, O và S, như thietan-3-yl;

R^7 và R^9 mỗi nhóm là H;

R^{11} trong từng trường hợp là H;

R^1 là metyl;

R^2 là H, halogen hoặc C_1-C_4-alkyl, tốt hơn là H, flo, clo hoặc metyl;

R^4 là H hoặc halogen, tốt hơn là H, flo hoặc clo;

R^5 là H hoặc halogen, tốt hơn là H, flo hoặc clo;

B_5 là N hoặc C-R^{10}, tốt hơn là C-R^{10} trong đó

R^{10} là hydro, C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkoxy, C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được perflo hóa (CF_3, C_2F_5 hoặc C_3F_7)), C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkoxy được perflo hóa (OCF_3, OC_2F_5 hoặc OC_3F_7)), C_1-C_3-alkylsulphanyl, C_1-C_3-alkylsulphinyl, C_1-C_3-alkylsulphonyl, flo, brom hoặc clo;

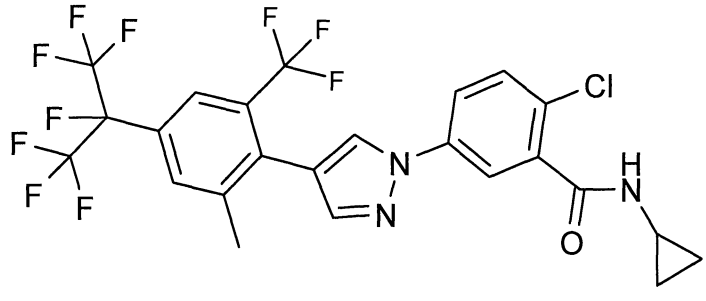
A_2 là N hoặc C-R^3, tốt hơn là C-R^3 trong đó

R^3 là H, halogen, hoặc C_1-C_4-alkyl tùy ý được thế, tốt hơn là H, flo, clo hoặc C_1-C_2-alkyl tùy ý được thế bằng halogen, tốt hơn nữa là H hoặc metyl được thế flo, ví dụ perflometyl;

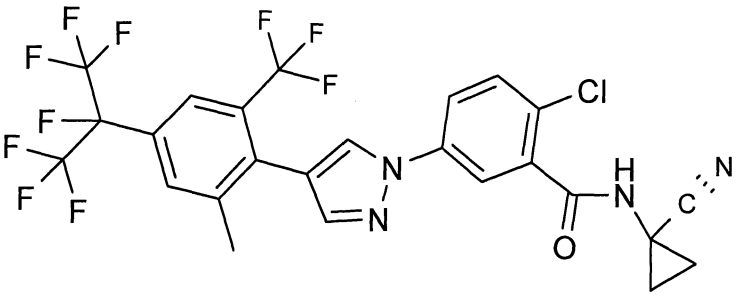
R^6 là hydro, C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkoxy, C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được perflo hóa (CF_3, C_2F_5 hoặc C_3F_7)), C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkoxy được perflo hóa (OCF_3, OC_2F_5 hoặc OC_3F_7)), C_1-C_3-alkylsulphanyl, C_1-C_3-alkylsulphinyl, C_1-C_3-alkylsulphonyl, flo, clo hoặc brom, tốt hơn là flo, clo, brom, C_1-C_2-alkyl, C_1-C_2-alkyl được thế bằng halogen (ví dụ perflometyl) hoặc C_1-C_2-alkoxy tùy ý được thế bằng halogen, tốt hơn nữa là flo, brom, clo, metyl, etyl, metyl được flo hóa hoặc etyl được flo hóa (tốt hơn nữa là perflometyl hoặc perfloetyl), metoxy được flo hóa hoặc etoxy được flo hóa (tốt hơn nữa là perflometoxy);

R^8 là halogen hoặc C_1-C_4-alkyl tùy ý được thế halogen hoặc C_1-C_4-alkoxy tùy ý được thế bằng halogen, tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen hoặc C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen, tốt hơn nữa là C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen như C_1-C_3-alkyl được flo hóa (ví dụ C_3-alkyl được flo hóa như perflopropyl).

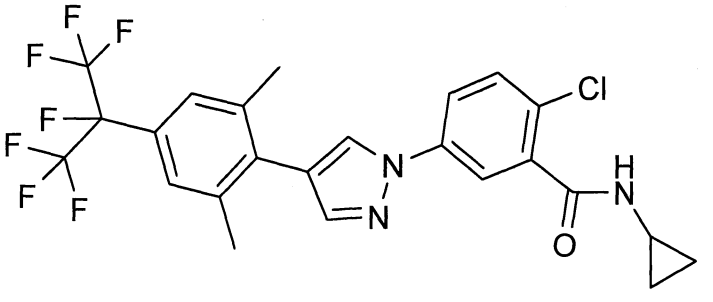
Ví dụ về các hợp chất có công thức (I) bao gồm các cấu trúc sau:



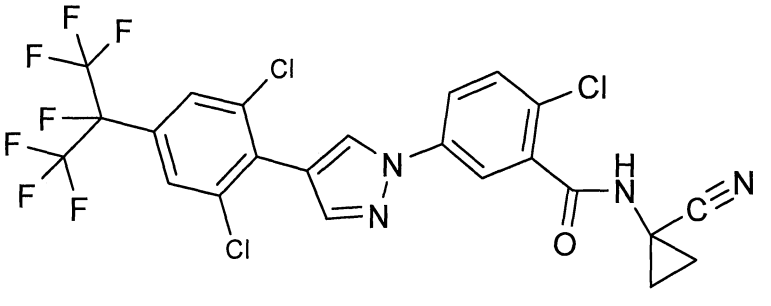
2-clo-N-xyclopropyl-5-[1-[4-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)-2-metyl-6-(triflometyl)phenyl]-1H-pyrazol-4-yl]benzamit,



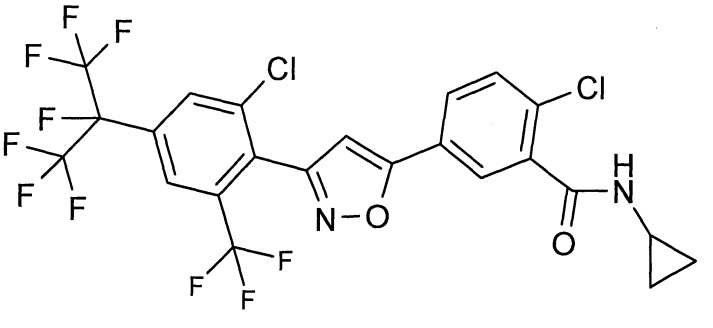
2-clo-N-(1-xyanoxyclopropyl-5-[1-[4-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)-2-metyl-6-(triflometyl)phenyl]-1H-pyrazol-4-yl]benzamit,



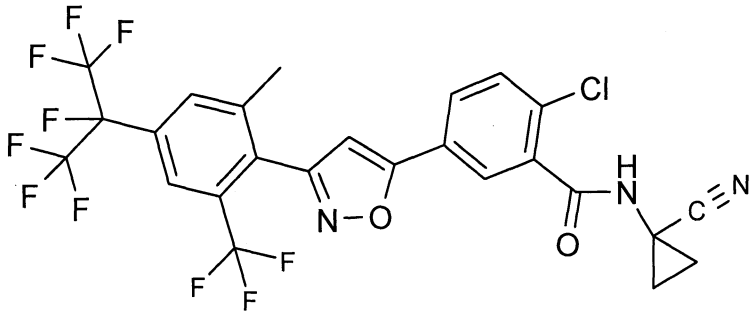
2-clo-N-xyclopropyl-5-[4-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-1-yl]benzamit,



2-clo-N-(1-xyanoxyclopropyl)-5-[4-[2,6-diclo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-1-yl]benzamit,

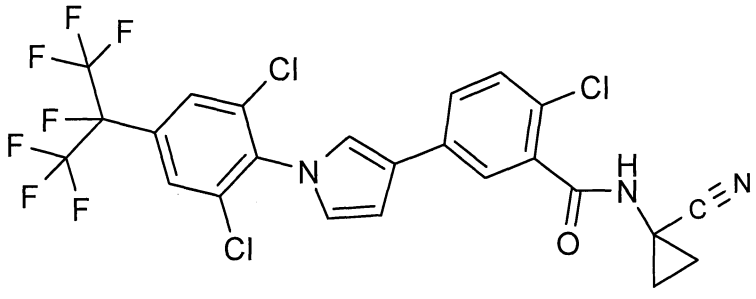


2-clo-5-[3-[2-clo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometyl)phenyl]isoxazol-5-yl]-N-xyclopropylbenzamit,

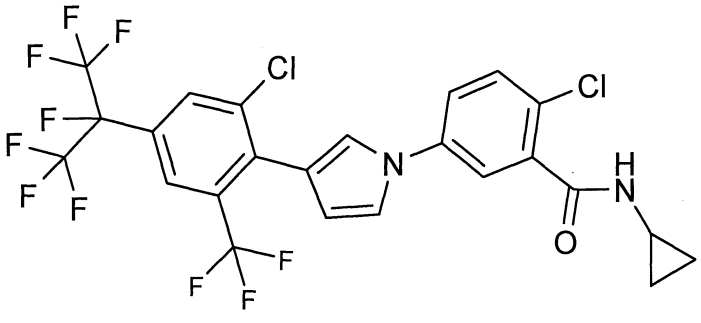


2-clo-N-(1-xyanoxyclopropyl)-5-[3-[2-metyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometyl)phenyl]isoxazol-5-yl]benzamit,

Các hợp chất tiếp theo theo sáng chế là



2-clo-N-(1-xyanoxyclopropyl)-5-[1-[2,6-diclo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrol-3-yl]benzamit,



2-clo-5-[3-[2-clo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometyl)phenyl]pyrol-1-yl]-N-xyclopropylbenzamit.

R1 Metyl

Theo một phương án được ưu tiên, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là metyl và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85].

T3 - Metyl

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là metyl, T là T3, R^{11} trong T3 là H, W là O và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [112].

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là metyl, T là T3, R^{11} trong T3 là H, W là O, A_1 là CR^2, A_2 là CR^3 hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CR^5, B_1 là CR^6, B_2 là CR^7, B_3 là CR^8, B_4 là CR^9, B_5 là CR^{10} và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [112].

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là metyl, T là T3, R^{11} trong T3 là H, W là O, A_1 là CH, A_2 là CH hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CH, B_1 là CR^6, B_2 là CH, B_3 là CR^8, B_4 là CH, B_5 là CR^{10}, trong đó R^6 và R^{10} mỗi nhóm là một phần tử thế được chọn từ halogen (tốt hơn là clo, brom hoặc flo), C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen, C_1-C_3-alkoxy hoặc C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen, và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [112].

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là metyl, T là T3, R^{11} trong T3 là H, W là O, A_1 là CH, A_2 là CH hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CH, B_1 là CR^6, B_2 là CH, B_3 là CR^8, B_4 là CH, B_5 là CR^{10}, trong đó R^6 và R^{10} mỗi nhóm là một phần tử thế được chọn từ halogen (tốt hơn là clo, brom hoặc flo), C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen, C_1-C_3-alkoxy hoặc C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen, và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [112].

T2 - Metyl

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là metyl, T là T2, R^{11} trong T2 là H, W là O và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [112].

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là metyl, T là T2, R^{11} trong T2 là H, W là O, A_1 là CR^2, A_2 là CR^3 hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CR^5, B_1 là CR^6, B_2 là CR^7, B_3 là CR^8, B_4 là CR^9, B_5 là CR^{10} và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [112].

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là metyl, T là T2, R^{11} trong T2 là H, W là O, A_1 là CH, A_2 là CH hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CH, B_1 là CR^6, B_2 là CH, B_3 là CR^8, B_4 là CH, B_5 là CR^{10}, trong đó R^6 và R^{10} mỗi nhóm là một phần tử thế được chọn từ halogen (tốt hơn là clo, brom hoặc flo), C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen, C_1-C_3-alkoxy hoặc C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen, và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [112].

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là metyl, T là T2, R^{11} trong T2 là H, W là O, A_1 là CH, A_2 là CH hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CH, B_1 là CR^6, B_2 là CH, B_3 là CR^8, B_4 là CH, B_5 là CR^{10}, trong đó R^6 và R^{10} mỗi nhóm là một phần tử thế được chọn từ halogen (tốt hơn là clo, brom hoặc flo), C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen, C_1-C_3-alkoxy hoặc C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen, và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [112].

T4 - Metyl

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là metyl, T là T4, R^{11} trong T4 là H, W là O và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [112].

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là metyl, T là T4, R^{11} trong T4 là H, W là O, A_1 là CR^2, A_2 là CR^3 hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CR^5, B_1 là CR^6, B_2 là CR^7, B_3 là CR^8, B_4 là CR^9, B_5 là CR^{10} và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [112].

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là metyl, T là T4, R^{11} trong T4 là H, W là O, A_1 là CH, A_2 là CH hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CH, B_1 là CR^6, B_2 là Ch, B_3 là CR^8, B_4 là CH, B_5 là CR^{10}, trong đó R^6 và R^{10} mỗi nhóm là một phần tử thế được chọn từ halogen (tốt hơn là clo, brom hoặc flo), C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen, C_1-C_3-alkoxy hoặc C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen, và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [112].

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là metyl, T là T4, R^{11} trong T4 là H, W là O, A_1 là CH, A_2 là CH hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CH, B_1 là CR^6, B_2 là CH, B_3 là CR^8, B_4 là CH, B_5 là CR^{10}, trong đó R^6 và R^{10} mỗi nhóm là một phần tử thế được chọn từ halogen (tốt hơn là clo, brom hoặc flo), C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen, C_1-C_3-alkoxy hoặc C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen, và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [112].

T22 - Metyl

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là metyl, T là T22, R^{11} trong T22 là H, W là O và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [112].

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là metyl, T là T22, R^{11} trong T22 là H, W là O, A_1 là CR^2, A_2 là CR^3 hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CR^5, B_1 là CR^6, B_2 là CR^7, B_3 là CR^8, B_4 là CR^9, B_5 là CR^{10} và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [112].

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là metyl, T là T22, R^{11} trong T22 là H, W là O, A_1 là CH, A_2 là CH hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CH, B_1 là CR^6, B_2 là CH, B_3 là CR^8, B_4 là CH, B_5 là CR^{10}, trong đó R^6 và R^{10} mỗi nhóm là một phần tử thế được chọn từ halogen (tốt hơn là clo, brom hoặc flo), C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen, C_1-C_3-alkoxy hoặc C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen, và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [112].

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là metyl, T là T22, R^{11} trong T22 là H, W là O, A_1 là CH, A_2 là CH hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CH, B_1 là CR^6, B_2 là CH, B_3 là CR^8, B_4 là CH, B_5 là CR^{10}, trong đó R^6 và R^{10} mỗi nhóm là một phần tử thế được chọn từ halogen (tốt hơn là clo, brom hoặc flo), C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen, C_1-C_3-alkoxy hoặc C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen, và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [112].

T23 - Metyl

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là metyl, T là T23, R^{11} trong T23 là H, W là O và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [0113] và các đoạn tiếp theo.

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là metyl, T là T23, R^{11} trong T23 là H, W là O, A_1 là CR^2, A_2 là CR^3 hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CR^5, B_1 là CR^6, B_2 là CR^7, B_3 là CR^8, B_4 là CR^9, B_5 là CR^{10} và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [0113] và các đoạn tiếp theo.

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là metyl, T là T23, R^{11} trong T23 là H, W là O, A_1 là CH, A_2 là CH hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CH, B_1 là CR^6, B_2 là CH, B_3 là CR^8, B_4 là CH, B_5 là CR^{10}, trong đó R^6 và R^{10} mỗi nhóm là một phần tử thế được chọn từ halogen (tốt hơn là clo, brom hoặc flo), C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen, C_1-C_3-alkoxy hoặc C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen, và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [0113] và các đoạn tiếp theo.

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là metyl, T là T23, R^{11} trong T23 là H, W là O, A_1 là CH, A_2 là CH hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CH, B_1 là CR^6, B_2 là CH, B_3 là CR^8, B_4 là CH, B_5 là CR^{10}, trong đó R^6 và R^{10} mỗi nhóm là một phần tử thế được chọn từ halogen (tốt hơn là clo, brom hoặc flo), C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen, C_1-C_3-alkoxy hoặc C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen, và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [0113] và các đoạn tiếp theo.

T3 - H

Theo một phương án được ưu tiên, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là hydro (H) và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [0113] và các đoạn tiếp theo.

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là H, T là T3, R^{11} trong T3 là H, W là O và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [0113] và các đoạn tiếp theo.

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là H, T là T3, R^{11} trong T3 là H, W là O, A_1 là CR^2, A_2 là CR^3 hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CR^5, B_1 là CR^6, B_2 là CR^7, B_3 là CR^8, B_4 là CR^9, B_5 là CR^{10} và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [0113] và các đoạn tiếp theo.

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là H, T là T3, R^{11} trong T3 là H, W là O, A_1 là CH, A_2 là CH hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CH, B_1 là CR^6, B_2 là CH, B_3 là CR^8, B_4 là CH, B_5 là CR^{10}, trong đó R^6 và R^{10} mỗi nhóm là một phần tử thế được chọn từ halogen (tốt hơn là clo, brom hoặc flo), C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen, C_1-C_3-alkoxy hoặc C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen, và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [0113] và các đoạn tiếp theo.

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là H, T là T3, R^{11} trong T3 là H, W là O, A_1 là CH, A_2 là CH hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CH, B_1 là CR^6, B_2 là CH, B_3 là CR^8, B_4 là CH, B_5 là CR^{10}, trong đó R^6 và R^{10} mỗi nhóm là một phần tử thế được chọn từ halogen (tốt hơn là clo, brom hoặc flo), C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen, C_1-C_3-alkoxy hoặc C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen, và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [0113] và các đoạn tiếp theo.

T2 - H

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là H, T là T2, R^{11} trong T2 là H, W là O và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [0113] và các đoạn tiếp theo.

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là H, T là T2, R^{11} trong T2 là H, W là O, A_1 là CR^2, A_2 là CR^3 hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CR^5, B_1 là CR^6, B_2 là CR^7, B_3 là CR^8, B_4 là CR^9, B_5 là

CR^{10} và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [0113] và các đoạn tiếp theo.

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là H, T là T2, R^{11} trong T2 là H, W là O, A_1 là CH, A_2 là CH hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CH, B_1 là CR^6, B_2 là CH, B_3 là CR^8, B_4 là CH, B_5 là CR^{10}, trong đó R^6 và R^{10} mỗi nhóm là một phần tử thế được chọn từ halogen (tốt hơn là clo, brom hoặc flo), C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen, C_1-C_3-alkoxy hoặc C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen, và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [0113] và các đoạn tiếp theo.

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là H, T là T2, R^{11} trong T2 là H, W là O, A_1 là CH, A_2 là CH hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CH, B_1 là CR^6, B_2 là CH, B_3 là CR^8, B_4 là CH, B_5 là CR^{10}, trong đó R^6 và R^{10} mỗi nhóm là một phần tử thế được chọn từ halogen (tốt hơn là clo, brom hoặc flo), C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen, C_1-C_3-alkoxy hoặc C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen, và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [0113] và các đoạn tiếp theo.

T4 - H

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là H, T là T4, R^{11} trong T4 là H, W là O và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [0113] và các đoạn tiếp theo.

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là H, T là T4, R^{11} trong T4 là H, W là O, A_1 là CR^2, A_2 là CR^3 hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CR^5, B_1 là CR^6, B_2 là CR^7, B_3 là CR^8, B_4 là CR^9, B_5 là CR^{10} và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [0113] và các đoạn tiếp theo.

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là H, T là T4, R^{11} trong T4 là H, W là O, A_1 là CH, A_2 là CH hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CH, B_1 là CR^6, B_2 là CH, B_3 là CR^8, B_4 là CH, B_5 là CR^{10}, trong đó R^6 và R^{10} mỗi nhóm là một phần tử thế được chọn từ halogen (tốt hơn là clo, brom hoặc flo), C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen, C_1-C_3-alkoxy hoặc

C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen, và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [0113] và các đoạn tiếp theo.

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là H, T là T4, R^{11} trong T4 là H, W là O, A_1 là CH, A_2 là CH hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CH, B_1 là CR^6, B_2 là CH, B_3 là CR^8, B_4 là CH, B_5 là CR^{10}, trong đó R^6 và R^{10} mỗi nhóm là một phần tử thế được chọn từ halogen (tốt hơn là clo, brom hoặc flo), C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen, C_1-C_3-alkoxy hoặc C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen, và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [0113] và các đoạn tiếp theo.

T22 - H

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là H, T là T22, R^{11} trong T22 là H, W là O và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [0113] và các đoạn tiếp theo.

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là H, T là T22, R^{11} trong T22 là H, W là O, A_1 là CR^2, A_2 là CR^3 hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CR^5, B_1 là CR^6, B_2 là CR^7, B_3 là CR^8, B_4 là CR^9, B_5 là CR^{10} và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [0113] và các đoạn tiếp theo.

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là H, T là T22, R^{11} trong T22 là H, W là O, A_1 là CH, A_2 là CH hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CH, B_1 là CR^6, B_2 là CH, B_3 là CR^8, B_4 là CH, B_5 là CR^{10}, trong đó R^6 và R^{10} mỗi nhóm là một phần tử thế được chọn từ halogen (tốt hơn là clo, brom hoặc flo), C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen, C_1-C_3-alkoxy hoặc C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen, và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [0113] và các đoạn tiếp theo.

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là H, T là T22, R^{11} trong T22 là H, W là O, A_1 là CH, A_2 là CH hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CH, B_1 là CR^6, B_2 là CH, B_3 là CR^8, B_4 là CH, B_5 là CR^{10}, trong đó R^6 và R^{10} mỗi nhóm là một phần tử thế được chọn từ halogen (tốt hơn

là clo, brom hoặc flo), C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen, C_1-C_3-alkoxy hoặc C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen, và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [0113] và các đoạn tiếp theo.

T23 - H

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là H, T là T23, R^{11} trong T23 là H, W là O và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [0113] và các đoạn tiếp theo.

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là H, T là T23, R^{11} trong T23 là H, W là O, A_1 là CR^2, A_2 là CR^3 hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CR^5, B_1 là CR^6, B_2 là CR^7, B_3 là CR^8, B_4 là CR^9, B_5 là CR^{10} và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [0113] và các đoạn tiếp theo.

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là H, T là T23, R^{11} trong T23 là H, W là O, A_1 là CH, A_2 là CH hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CH, B_1 là CR^6, B_2 là CH, B_3 là CR^8, B_4 là CH, B_5 là CR^{10}, trong đó R^6 và R^{10} mỗi nhóm là một phần tử thế được chọn từ halogen (tốt hơn là clo, brom hoặc flo), C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen, C_1-C_3-alkoxy hoặc C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen, và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [0113] và các đoạn tiếp theo.

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là H, T là T23, R^{11} trong T23 là H, W là O, A_1 là CH, A_2 là CH hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CH, B_1 là CR^6, B_2 là CH, B_3 là CR^8, B_4 là CH, B_5 là CR^{10}, trong đó R^6 và R^{10} mỗi nhóm là một phần tử thế được chọn từ halogen (tốt hơn là clo, brom hoặc flo), C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen, C_1-C_3-alkoxy hoặc C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen, và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [0113] và các đoạn tiếp theo.

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó B_1 là C-R^6 và R^6 là halogen (tốt hơn là clo hoặc flo), C_1-C_4-alkyl, C_1-C_4-alkoxy, C_1-C_4-haloalkyl (tốt hơn là được perflo hóa C_1-C_4-alkyl), C_1-C_4-

haloalkoxy (tốt hơn là được perflo hóa C_1-C_4-alkoxy), C_1-C_4-alkylsulphanyl hoặc C_1-C_4-alkylsulphonyl.

Muối của các hợp chất theo sáng chế mà thích hợp theo sáng chế, ví dụ muối với các muối cộng bazơ hoặc axit, đều là các muối thường không độc, tốt hơn là các muối chấp nhận được về mặt nông học và/hoặc sinh lý. Ưu tiên các muối với bazơ vô cơ, ví dụ muối kim loại kềm (ví dụ muối natri, muối kali hoặc muối xesi), muối kim loại kiềm thổ (ví dụ muối canxi hoặc muối magie), muối amoni hoặc muối với bazơ hữu cơ, cụ thể là các amin hữu cơ, ví dụ các muối trietylamoni, dixyclohexylamoni, *N,N'*-dibenzyletylenediamoni, pyridini, picolini hoặc etanolamoni, các muối với axit vô cơ (ví dụ hydroclorua, hydrobromua, dihydrosulphat, trihydrosulphat hoặc phosphat), muối với axit carboxylic hữu cơ hoặc axit sulpho hữu cơ (ví dụ format, axetat, trifloaxetat, maleat, tartrat, metansulphonat, benzensulphonat hoặc 4-toluensulphonat). Đã biết rõ rằng t-amin, ví dụ một số hợp chất theo sáng chế, có khả năng tạo *N*-oxit, mà cũng là muối theo sáng chế.

Tùy thuộc vào bản chất của các phần tử thế, các hợp chất có công thức (I) có thể ở dạng chất đồng phân hình học và/hoặc hoạt động quang học hoặc hỗn hợp chất đồng phân tương ứng với thành phần khác nhau. Các chất đồng phân lập thể là, ví dụ, chất đồng phân đối ảnh, chất đồng phân không đối quang, chất đồng phân atrop hoặc chất đồng phân hình học. Theo đó, sáng chế bao gồm cả các chất đồng phân lập thể tinh khiết và hỗn hợp bất kỳ của các chất đồng phân này.

Sáng chế cũng đề cập đến phương pháp phòng trừ động vật gây hại, trong đó các hợp chất có công thức (I) được cho hoạt động trên động vật gây hại và/hoặc môi trường sống của chúng. Việc phòng trừ động vật gây hại tốt hơn là được tiến hành trong nông nghiệp và lâm nghiệp, và trong bảo vệ vật liệu. Tốt hơn nếu loại trừ các phương pháp phẫu thuật hoặc điều trị cho cơ thể người hoặc động vật và các phương pháp chẩn đoán được tiến hành trên cơ thể người hoặc động vật.

Sáng chế cũng đề cập đến việc sử dụng các hợp chất có công thức (I) làm thuốc trừ sâu, đặc biệt là tác nhân bảo vệ mùa màng.

Trong ngữ cảnh của sáng chế, thuật ngữ "thuốc trừ sâu" cũng luôn bao gồm thuật ngữ "tác nhân bảo vệ mùa màng".

Các hợp chất có công thức (I), với khả năng dung nạp thực vật tốt, độc tính đẳng nhiệt có lợi và độ tương hợp môi trường tốt, là thích hợp để bảo vệ thực vật và các cơ quan của thực vật chống lại các yếu tố bất lợi sinh học và phi sinh học, để tăng năng suất thu hoạch, để cải thiện chất lượng của nguyên liệu được thu hoạch và để phòng trừ động vật gây hại, đặc biệt là côn trùng, nhện, giun sán, giun tròn và động vật thân mềm, thường gặp trong nông nghiệp, làm vườn, chăn nuôi động vật, nuôi trồng thủy sản, lâm nghiệp, vườn cây và các tiện ích giải trí, trong bảo vệ các sản phẩm được bảo quản và nguyên liệu, và trong lĩnh vực vệ sinh. Tốt hơn nếu chúng có thể được sử dụng làm thuốc trừ sâu. Chúng hữu ích chống lại các loài nhạy cảm thông thường và các loài kháng thuốc và chống lại tất cả hoặc một số giai đoạn phát triển. Các sinh vật gây hại nêu trên bao gồm:

sinh vật gây hại từ ngành Arthropoda, đặc biệt là từ lớp Arachnida, ví dụ Acarus spp., ví dụ Acarus siro, Aceria kuko, Aceria sheldoni, Aculops spp., Aculus spp., ví dụ Aculus fockeui, Aculus schlechtendali, Amblyomma spp., Amphitetranychus viennensis, Argas spp., Boophilus spp., Brevipalpus spp., ví dụ Brevipalpus phoenicis, Bryobia graminum, Bryobia praetiosa, Centruroides spp., Chorioptes spp., Dermanyssus gallinae, Dermatophagoides pteronyssinus, Dermatophagoides farinae, Dermacentor spp., Eotetranychus spp., ví dụ Eotetranychus hicoriae, Epitrimerus pyri, Eutetranychus spp., ví dụ Eutetranychus banksi, Eriophyes spp., ví dụ Eriophyes pyri, Glycyphagus domesticus, Halotydeus destructor, Hemitarsonemus spp., ví dụ Hemitarsonemus latus (=Polyphagotarsonemus latus), Hyalomma spp., Ixodes spp., Latrodectus spp., Loxosceles spp., Neutrombicula autumnalis, Nuphersa spp., Oligonychus spp., ví dụ Oligonychus coniferarum, Oligonychus ilicis, Oligonychus indicus, Oligonychus mangiferus, Oligonychus pratensis, Oligonychus punicae, Oligonychus yothersi, Ornithodorus spp., Ornithonyssus spp., Panonychus spp., ví dụ Panonychus citri (=Metatetranychus citri), Panonychus ulmi (=Metatetranychus ulmi), Phyllocoptruta oleivora, Platytetranychus multidigituli, Polyphagotarsonemus latus, Psoroptes spp., Rhipicephalus spp., Rhizoglyphus spp., Sarcoptes spp., Scorpio maurus, Steneotarsonemus spp., Steneotarsonemus spinki, Tarsonemus spp., ví dụ Tarsonemus confusus, Tarsonemus pallidus, Tetranychus spp., ví dụ Tetranychus canadensis, Tetranychus cinnabarinus,

Tetranychus turkestani, Tetranychus urticae, Trombicula alfreddugesi, Vaejovis spp., Vasates lycopersici;

từ lớp Chilopoda, ví dụ Geophilus spp., Scutigera spp.;

từ bộ hoặc lớp Collembola, ví dụ Onychiurus armatus; Sminthurus viridis;

từ lớp Diplopoda, ví dụ Blaniulus guttulatus;

từ lớp Insecta, ví dụ từ bộ Blattodea, ví dụ Blatta orientalis, Blattella asahinai, Blattella germanica, Leucophaea maderae, Panchlora spp., Parcoblatta spp., Periplaneta spp., ví dụ Periplaneta americana, Periplaneta australasiae, Supella longipalpa;

từ bộ Coleoptera, ví dụ Acalymma vittatum, Acanthoscelides obtectus, Adoretus spp., Agelastica alni, Agriotes spp., ví dụ Agriotes linneatus, Agriotes mancus, Alphitobius diaperinus, Amphimallon solstitialis, Anobium punctatum, Anoplophora spp., Anthonomus spp., ví dụ Anthonomus grandis, Anthrenus spp., Apion spp., Apogonia spp., Atomaria spp., ví dụ Atomaria linearis, Attagenus spp., Baris caerulescens, Bruchidius obtectus, Bruchus spp., ví dụ Bruchus pisorum, Bruchus rufimanus, Cassida spp., Cerotoma trifurcata, Ceutorrhynchus spp., ví dụ Ceutorrhynchus assimilis, Ceutorrhynchus quadridens, Ceutorrhynchus rapae, Chaetocnema spp., ví dụ Chaetocnema confinis, Chaetocnema denticulata, Chaetocnema ectypa, Cleonus mendicus, Conoderus spp., Cosmopolites spp., ví dụ Cosmopolites sordidus, Costelytra zealandica, Ctenicera spp., Curculio spp., ví dụ Curculio caryae, Curculio caryatrypes, Curculio obtusus, Curculio sayi, Cryptolestes ferrugineus, Cryptolestes pusillus, Cryptorhynchus lapathi, Cryptorhynchus mangiferae, Cylindrocopturus spp., Cylindrocopturus adspersus, Cylindrocopturus furnissi, Dermestes spp., Diabrotica spp., ví dụ Diabrotica balteata, Diabrotica barberi, Diabrotica undecimpunctata howardi, Diabrotica undecimpunctata undecimpunctata, Diabrotica virgifera virgifera, Diabrotica virgifera zeae, Dichocrocis spp., Dicladispa armigera, Diloboderus spp., Epilachna spp., ví dụ Epilachna borealis, Epilachna varivestis, Epitrix spp., ví dụ Epitrix cucumeris, Epitrix fuscula, Epitrix hirtipennis, Epitrix subcrinita, Epitrix tuberis, Faustinus spp., Gibbium psylloides, Gnathocerus cornutus, Hellula undalis, Heteronychus arator, Heteronyx spp., Hylamorpha elegans, Hylotrupes bajulus, Hypera postica, Hypomeces squamosus, Hypothenemus spp., ví dụ Hypothenemus hampei, Hypothenemus obscurus, Hypothenemus pubescens, Lachnosterna

consanguinea, Lasioderma serricorne, Latheticus oryzae, Lathridius spp., Lema spp., Leptinotarsa decemlineata, Leucoptera spp., ví dụ Leucoptera coffeella, Lissorhoptrus oryzophilus, Lixus spp., Luperomorpha xanthodera, Luperodes spp., Lyctus spp., Megascelis spp., Melanotus spp., ví dụ Melanotus longulus oregonensis, Meligethes aeneus, Melolontha spp., ví dụ Melolontha melolontha, Migdolus spp., Monochamus spp., Naupactus xanthographus, Necrobia spp., Niptus hololeucus, Oryctes rhinoceros, Oryzaephilus surinamensis, Oryzaphagus oryzae, Otiorhynchus spp., ví dụ Otiorhynchus cribricollis, Otiorhynchus ligustici, Otiorhynchus ovatus, Otiorhynchus rugosostriarus, Otiorhynchus sulcatus, Oxycetonia jucunda, Phaedon cochleariae, Phyllophaga spp., Phyllophaga helleri, Phyllotreta spp., ví dụ Phyllotreta armoraciae, Phyllotreta pusilla, Phyllotreta ramosa, Phyllotreta striolata, Popillia japonica, Premnotrypes spp., Prostephanus truncatus, Psylliodes spp., ví dụ Psylliodes affinis, Psylliodes chrysocephala, Psylliodes punctulata, Ptinus spp., Rhizobius ventralis, Rhizopertha dominica, Sitophilus spp., ví dụ Sitophilus granarius, Sitophilus linearis, Sitophilus oryzae, Sitophilus zeamais, Sphenophorus spp., Stegobium paniceum, Sternechus spp., ví dụ Sternechus paludatus, Symphyletes spp., Tanymecus spp., ví dụ Tanymecus dilaticollis, Tanymecus indicus, Tanymecus palliatus, Tenebrio molitor, Tenebrioides mauretanicus, Tribolium spp., ví dụ Tribolium audax, Tribolium castaneum, Tribolium confusum, Trogoderma spp., Tychius spp., Xylotrechus spp., Zabrus spp., ví dụ Zabrus tenebrioides;

từ bộ Diptera, ví dụ Aedes spp., ví dụ Aedes aegypti, Aedes albopictus, Aedes sticticus, Aedes vexans, Agromyza spp., ví dụ Agromyza frontella, Agromyza parvicornis, Anastrepha spp., Anopheles spp., ví dụ Anopheles quadrimaculatus, Anopheles gambiae, Asphondylia spp., Bactrocera spp., ví dụ Bactrocera cucurbitae, Bactrocera dorsalis, Bactrocera oleae, Bibio hortulanus, Calliphora erythrocephala, Calliphora vicina, Ceratitis capitata, Chironomus spp., Chrysomya spp., Chrysops spp., Chrysozona pluvialis, Cochliomya spp., Contarinia spp., ví dụ Contarinia johnsoni, Contarinia nasturtii, Contarinia pyrivora, Contarinia schulzi, Contarinia sorghicola, Contarinia tritici, Cordylobia anthropophaga, Cricotopus sylvestris, Culex spp., ví dụ Culex pipiens, Culex quinquefasciatus, Culicoides spp., Culiseta spp., Cuterebra spp., Dacus oleae, Dasineura spp., ví dụ Dasineura brassicae, Delia spp., ví dụ Delia antiqua, Delia coarctata, Delia florilega, Delia platura, Delia radicum,

Dermatobia hominis, Drosophila spp., ví dụ Drosphila melanogaster, Drosophila suzukii, Echinocnemus spp., Fannia spp., Gasterophilus spp., Glossina spp., Haematopota spp., Hydrellia spp., Hydrellia griseola, Hylemya spp., Hippobosca spp., Hypoderma spp., Liriomyza spp., ví dụ Liriomyza brassicae, Liriomyza huidobrensis, Liriomyza sativae, Lucilia spp., ví dụ Lucilia cuprina, Lutzomyia spp., Mansonia spp., Musca spp., ví dụ Musca domestica, Musca domestica vicina, Oestrus spp., Oscinella frit, Paratanytarsus spp., Paralauterborniella subcincta, Pegomya spp., ví dụ Pegomya betae, Pegomya hyoscyami, Pegomya rubivora, Phlebotomus spp., Phorbia spp., Phormia spp., Piophila casei, Prodiplosis spp., Psila rosae, Rhagoletis spp., ví dụ Rhagoletis cingulata, Rhagoletis completa, Rhagoletis fausta, Rhagoletis indifferens, Rhagoletis mendax, Rhagoletis pomonella, Sarcophaga spp., Simulium spp., ví dụ Simulium meridionale, Stomoxys spp., Tabanus spp., Tetanops spp., Tipula spp., ví dụ Tipula paludosa, Tipula simplex;

từ bộ Heteroptera, ví dụ Anasa tristis, Antestiopsis spp., Boisea spp., Blissus spp., Calocoris spp., Campylomma livida, Cavelerius spp., Cimex spp., ví dụ Cimex adjunctus, Cimex hemipterus, Cimex lectularius, Cimex pilosellus, Collaria spp., Creontiades dilutus, Dasynus piperis, Dichelops furcatus, Diconocoris hewetti, Dysdercus spp., Euschistus spp., ví dụ Euschistus heros, Euschistus servus, Euschistus tristigmus, Euschistus variolarius, Eurygaster spp., Halyomorpha halys, Heliopeltis spp., Horcias nobilellus, Leptocorisa spp., Leptocorisa varicornis, Leptoglossus occidentalis, Leptoglossus phyllopus, Lygocoris spp., ví dụ Lygocoris pabulinus, Lygus spp., ví dụ Lygus elisus, Lygus hesperus, Lygus lineolaris, Macropes excavatus, Monalonion atratum, Nezara spp., ví dụ Nezara viridula, Oebalus spp., Piesma quadrata, Piezodorus spp., ví dụ Piezodorus guildinii, Psallus spp., Pseudacysta persea, Rhodnius spp., Sahlbergella singularis, Scaptocoris castanea, Scotinophora spp., Stephanitis nashi, Tibraca spp., Triatoma spp.;

từ bộ Homoptera, ví dụ Acizzia acaciaebaileyanae, Acizzia dodonaeae, Acizzia uncatoides, Acrida turrita, Acyrthosipon spp., ví dụ Acyrthosiphon pisum, Acrogonia spp., Aeneolamia spp., Agonoscena spp., Aleyrodes proletella, Aleurolobus barodensis, Aleurothrixus floccosus, Allocaridara malayensis, Amrasca spp., ví dụ Amrasca bigutulla, Amrasca devastans, Anuraphis cardui, Aonidiella spp., ví dụ

Aonidiella aurantii, Aonidiella citrina, Aonidiella inornata, Aphanostigma piri, Aphis spp., ví dụ Aphis craccivora, Aphis fabae, Aphis forbesi, Aphis glycines, Aphis gossypii, Aphis hederae, Aphis illinoisensis, Aphis middletoni, Aphis nasturtii, Aphis nerii, Aphis pomi, Aphis spiraecola, Aphis viburniphila, Arboridia apicalis, Arytainilla spp., Aspidiella spp., Aspidiotus spp., ví dụ Aspidiotus nerii, Atanus spp., Aulacorthum solani, Bemisia tabaci, Blastopsylla occidentalis, Boreioglycaspis melaleucae, Brachycaudus helichrysi, Brachycolus spp., Brevicoryne brassicae, Cacopsylla spp., ví dụ Cacopsylla pyricola, Calligypona marginata, Carneocephala fulgida, Ceratovacuna lanigera, Cercopidae, Ceroplastes spp., Chaetosiphon fragaefolii, Chionaspis tegalensis, Chlorita onukii, Chondracris rosea, Chromaphis juglandicola, Chrysomphalus ficus, Cicadulina mbila, Coccomytilus halli, Coccus spp., ví dụ Coccus hesperidum, Coccus longulus, Coccus pseudomagnoliarum, Coccus viridis, Cryptomyzus ribis, Cryptoneossa spp., Ctenarytaina spp., Dalbulus spp., Dialeurodes citri, Diaphorina citri, Diaspis spp., Drosicha spp., Dysaphis spp., ví dụ Dysaphis apiifolia, Dysaphis plantaginea, Dysaphis tulipae, Dysmicoccus spp., Empoasca spp., ví dụ Empoasca abrupta, Empoasca fabae, Empoasca maligna, Empoasca solana, Empoasca stevensi, Eriosoma spp., ví dụ Eriosoma americanum, Eriosoma lanigerum, Eriosoma pyricola, Erythroneura spp., Eucalyptolyma spp., Euphyllura spp., Euscelis bilobatus, Ferrisia spp., Geococcus coffeae, Glycaspis spp., Heteropsylla cubana, Heteropsylla spinulosa, Homalodisca coagulata, Hyalopterus arundinis, Hyalopterus pruni, Icerya spp., ví dụ Icerya purchasi, Idiocerus spp., Idioscopus spp., Laodelphax striatellus, Lecanium spp., ví dụ Lecanium corni (=Parthenolecanium corni), Lepidosaphes spp., ví dụ Lepidosaphes ulmi, Lipaphis erysimi, Macrosiphum spp., ví dụ Macrosiphum euphorbiae, Macrosiphum lilii, Macrosiphum rosae, Macrosteles facifrons, Mahanarva spp., Melanaphis sacchari, Metcalfiella spp., Metopolophium dirhodum, Monellia costalis, Monelliopsis pecanis, Myzus spp., ví dụ Myzus ascalonicus, Myzus cerasi, Myzus ligustri, Myzus ornatus, Myzus persicae, Myzus nicotianae, Nasonovia ribisnigri, Nephotettix spp., ví dụ Nephotettix cincticeps, Nephotettix nigropictus, Nilaparvata lugens, Oncometopia spp., Orthezia praelonga, Oxya chinensis, Pachypsylla spp., Parabemisia myricae, Paratrioza spp., ví dụ Paratrioza cockerelli, Parlatoria spp., Pemphigus spp., ví dụ Pemphigus bursarius, Pemphigus populivenae, Peregrinus maidis, Phenacoccus spp.,

ví dụ Phenacoccus madeirensis, Phloeomyzus passerinii, Phorodon humuli, Phylloxera spp., ví dụ Phylloxera devastatrix, Phylloxera notabilis, Pinnaspis aspidistrae, Planococcus spp., ví dụ Planococcus citri, Prosopidopsylla flava, Protopulvinaria pyriformis, Pseudaulacaspis pentagona, Pseudococcus spp., ví dụ Pseudococcus calceolariae, Pseudococcus comstocki, Pseudococcus longispinus, Pseudococcus maritimus, Pseudococcus viburni, Psyllopsis spp., Psylla spp., ví dụ Psylla buxi, Psylla mali, Psylla pyri, Pteromalus spp., Pyrilla spp., Quadraspidiotus spp., ví dụ Quadraspidiotus juglansregiae, Quadraspidiotus ostreaeformis, Quadraspidiotus perniciosus, Quesada gigas, Rastrococcus spp., Rhopalosiphum spp., ví dụ Rhopalosiphum maidis, Rhopalosiphum oxyacanthae, Rhopalosiphum padi, Rhopalosiphum rufiabdominale, Saissetia spp., ví dụ Saissetia coffeae, Saissetia miranda, Saissetia neglecta, Saissetia oleae, Scaphoideus titanus, Schizaphis graminum, Selenaspidus articulatus, Sitobion avenae, Sogata spp., Sogatella furcifera, Sogatodes spp., Stictocephala festina, Siphoninus phillyreae, Tenalaphara malayensis, Tetragonocephela spp., Tinocallis caryaefoliae, Tomaspis spp., Toxoptera spp., ví dụ Toxoptera aurantii, Toxoptera citricidus, Trialeurodes vaporariorum, Trioza spp., ví dụ Trioza diospyri, Typhlocyba spp., Unaspis spp., Viteus vitifolii, Zygina spp.;

từ bộ Hymenoptera, ví dụ Acromyrmex spp., Athalia spp., ví dụ Athalia rosae, Atta spp., Diprion spp., ví dụ Diprion similis, Hoplocampa spp., ví dụ Hoplocampa cookei, Hoplocampa testudinea, Lasius spp., Monomorium pharaonis, Sirex spp., Solenopsis invicta, Tapinoma spp., Urocerus spp., Vespa spp., ví dụ Vespa crabro, Xeris spp.;

từ bộ Isopoda, ví dụ Armadillidium vulgare, Oniscus asellus, Porcellio scaber;

từ bộ Isoptera, ví dụ Coptotermes spp., ví dụ Coptotermes formosanus, Cornitermes cumulans, Cryptotermes spp., Incisitermes spp., Microtermes obesi, Odontotermes spp., Reticulitermes spp., ví dụ Reticulitermes flavipes, Reticulitermes hesperus;

từ bộ Lepidoptera, ví dụ Achroia grisella, Acronicta major, Adoxophyes spp., ví dụ Adoxophyes orana, Aedia leucomelas, Agrotis spp., ví dụ Agrotis segetum, Agrotis ipsilon, Alabama spp., ví dụ Alabama argillacea, Amyelois transitella, Anarsia spp., Anticarsia spp., ví dụ Anticarsia gemmatalis, Argyroploce spp., Barathra brassicae, Borbo cinnara, Bucculatrix thurberiella, Bupalus piniarius, Busseola spp., Cacoecia spp., Caloptilia theivora, Capua reticulana, Carpocapsa pomonella, Carposina

niponensis, Cheimatobia brumata, Chilo spp., ví dụ Chilo plejadellus, Chilo suppressalis, Choristoneura spp., Clysia ambiguella, Cnaphalocerus spp., Cnaphalocrocis medinalis, Cnephasia spp., Conopomorpha spp., Conotrachelus spp., Copitarsia spp., Cydia spp., ví dụ Cydia nigricana, Cydia pomonella, Dalaca noctuides, Diaphania spp., Diatraea saccharalis, Earias spp., Ecdytolopha aurantium, Elasmopalpus lignosellus, Eldana saccharina, Ephestia spp., ví dụ Ephestia elutella, Ephestia kuehniella, Epinotia spp., Epiphyas postvittana, Etiella spp., Eulia spp., Eupoecilia ambiguella, Euproctis spp., ví dụ Euproctis chrysorrhoea, Euxoa spp., Feltia spp., Galleria mellonella, Gracillaria spp., Grapholitha spp., ví dụ Grapholita molesta, Grapholita prunivora, Hedylepta spp., Helicoverpa spp., ví dụ Helicoverpa armigera, Helicoverpa zea, Heliothis spp., ví dụ Heliothis virescens, Hofmannophila pseudospretella, Homoeosoma spp., Homona spp., Hyponomeuta padella, Kakivoria flavofasciata, Laphygma spp., Leucinodes orbonalis, Leucoptera spp., ví dụ Leucoptera coffeella, Lithocolletis spp., ví dụ Lithocolletis blancardella, Lithophane antennata, Lobesia spp., ví dụ Lobesia botrana, Loxagrotis albicosta, Lymantria spp., ví dụ Lymantria dispar, Lyonetia spp., ví dụ Lyonetia clerkella, Malacosoma neustria, Maruca testulalis, Mamestra brassicae, Melanitis leda, Mocis spp., Monopis obviella, Mythimna separata, Nemapogon cloacellus, Nymphula spp., Oiketicus spp., Oria spp., Orthaga spp., Ostrinia spp., ví dụ Ostrinia nubilalis, Oulema melanopus, Oulema oryzae, Panolis flammea, Parnara spp., Pectinophora spp., ví dụ Pectinophora gossypiella, Perileucoptera spp., Phthorimaea spp., ví dụ Phthorimaea operculella, Phyllocnistis citrella, Phyllonorycter spp., ví dụ Phyllonorycter blancardella, Phyllonorycter crataegella, Pieris spp., ví dụ Pieris rapae, Platynota stultana, Plodia interpunctella, Plusia spp., Plutella xylostella (=Plutella maculipennis), Prays spp., Prodenia spp., Protoparce spp., Pseudaletia spp., ví dụ Pseudaletia unipuncta, Pseudoplusia includens, Pyrausta nubilalis, Rachiplusia nu, Schoenobius spp., ví dụ Schoenobius bipunctifer, Scirpophaga spp., ví dụ Scirpophaga innotata, Scotia segetum, Sesamia spp., ví dụ Sesamia inferens, Sparganothis spp., Spodoptera spp., ví dụ Spodoptera eradiana, Spodoptera exigua, Spodoptera frugiperda, Spodoptera praefica, Stathmopoda spp., Stomopteryx subsecivella, Synanthedon spp., Tecia solanivora, Thermesia gemmatalis, Tinea cloacella, Tinea pellionella, Tineola

bisselliella, Tortrix spp., Trichophaga tapetzella, Trichoplusia spp., ví dụ Trichoplusia ni, Tryporyza incertulas, Tuta absoluta, Virachola spp.;

từ bộ Orthoptera hoặc Saltatoria, ví dụ Acheta domesticus, Dichroplus spp., Gryllotalpa spp., ví dụ Gryllotalpa gryllotalpa, Hieroglyphus spp., Locusta spp., ví dụ Locusta migratoria, Melanoplus spp., ví dụ Melanoplus devastator, Schistocerca gregaria;

từ bộ Phthiraptera, ví dụ Damalinia spp., Haematopinus spp., Linognathus spp., Pediculus spp., Phylloxera vastatrix, Phthirus pubis, Trichodectes spp.;

từ bộ Psocoptera, ví dụ Lepinotus spp., Liposcelis spp.;

từ bộ Siphonaptera, ví dụ, Ceratophyllus spp., Ctenocephalides spp., ví dụ Ctenocephalides canis, Ctenocephalides felis, Pulex irritans, Tunga penetrans, Xenopsylla cheopis;

từ bộ Thysanoptera, ví dụ Anaphothrips obscurus, Baliothrips biformis, Drepanothrips reuteri, Enneothrips flavens, Frankliniella spp., ví dụ Frankliniella fusca, Frankliniella occidentalis, Frankliniella schultzei, Frankliniella tritici, Frankliniella vaccinii, Frankliniella williamsi, Heliothrips spp., Hercinothrips femoralis, Rhipiphorothrips cruentatus, Scirtothrips spp., Taeniothrips cardamomi, Thrips spp., ví dụ Thrips palmi, Thrips tabaci;

từ bộ Zygentoma (= Thysanura), ví dụ Ctenolepisma spp., Lepisma saccharina, Lepismodes inquilinus, Thermobia domestica;

từ lớp Symphyla, ví dụ Scutigerella spp., ví dụ Scutigerella immaculata;

sinh vật gây hại từ ngành động vật thân mềm, ví dụ từ lớp Bivalvia, ví dụ Dreissena spp.,

và cả từ lớp Gastropoda, ví dụ Arion spp., ví dụ Arion ater rufus, Biomphalaria spp., Bulinus spp., Deroceras spp., ví dụ Deroceras laeve, Galba spp., Lymnaea spp., Oncomelania spp., Pomacea spp., Succinea spp.;

các động vật ký sinh từ các ngành Plathelminthes và Nematoda, ví dụ Ancylostoma spp., ví dụ Ancylostoma duodenale, Ancylostoma ceylanicum, Ancylostoma braziliensis, Ascaris spp., Brugia malayi, Brugia timori, Bunostomum

spp., Chabertia spp., Clonorchis spp., Cooperia spp., Dicrocoelium spp., Dictyocaulus filaria, Diphyllobothrium latum, Dracunculus medinensis, Echinococcus granulosus, Echinococcus multilocularis, Enterobius vermicularis, Faciola spp., Haemonchus spp., Heterakis spp., Hymenolepis nana, Hyostrongulus spp., Loa Loa, Nematodirus spp., Oesophagostomum spp., Opisthorchis spp., Onchocerca volvulus, Ostertagia spp., Paragonimus spp., Schistosomen spp., Strongyloides fuelleborni, Strongyloides stercoralis, Stronyloides spp., Taenia saginata, Taenia solium, Trichinella spiralis, Trichinella nativa, Trichinella britovi, Trichinella nelsoni, Trichinella pseudopsiralis, Trichostrongulus spp., Trichuris trichuria, Wuchereria bancrofti;

các sinh vật gây hại thực vật từ ngành Nematoda, i.e. phytoparasitic nematodes, especially Aglenchus spp., ví dụ Aglenchus agricola, Anguina spp., ví dụ Anguina tritici, Aphelenchoides spp., ví dụ Aphelenchoides arachidis, Aphelenchoides fragariae, Belonolaimus spp., ví dụ Belonolaimus gracilis, Belonolaimus longicaudatus, Belonolaimus nortoni, Bursaphelenchus spp., ví dụ Bursaphelenchus cocophilus, Bursaphelenchus eremus, Bursaphelenchus xylophilus, Cacopaurus spp., ví dụ Cacopaurus pestis, Criconemella spp., ví dụ Criconemella curvata, Criconemella onoensis, Criconemella ornata, Criconemella rusium, Criconemella xenoplax (= Mesocriconema xenoplax), Criconemoides spp., ví dụ Criconemoides ferniae, Criconemoides onoense, Criconemoides ornatum, Ditylenchus spp., ví dụ Ditylenchus dipsaci, Dolichodorus spp., Globodera spp., ví dụ Globodera pallida, Globodera rostochiensis, Helicotylenchus spp., ví dụ Helicotylenchus dihystera, Hemicriconemoides spp., Hemicycliophora spp., Heterodera spp., ví dụ Heterodera avenae, Heterodera glycines, Heterodera schachtii, Hoplolaimus spp., Longidorus spp., ví dụ Longidorus africanus, Meloidogyne spp., ví dụ Meloidogyne chitwoodi, Meloidogyne fallax, Meloidogyne hapla, Meloidogyne incognita, Meloinema spp., Nacobbus spp., Neotylenchus spp., Paraphelenchus spp., Paratrichodorus spp., ví dụ Paratrichodorus minor, Pratylenchus spp., ví dụ Pratylenchus penetrans, Pseudohalenchus spp., Psilenchus spp., Punctodera spp., Quinisulcius spp., Radopholus spp., ví dụ Radopholus citrophilus, Radopholus similis, Rotylenchulus spp., Rotylenchus spp., Scutellonema spp., Subanguina spp., Trichodorus spp., ví dụ Trichodorus obtusus, Trichodorus primitivus, Tylenchorhynchus spp., ví dụ

Tylenchorhynchus annulatus, Tylenchulus spp., ví dụ Tylenchulus semipenetrans, Xiphinema spp., ví dụ Xiphinema index.

Ngoài ra, cũng có thể phòng trừ, từ phân giới động vật nguyên sinh, bộ Coccidia, ví dụ, Eimeria spp.

Các hợp chất có công thức (I) có thể tùy ý, ở nồng độ hoặc tỷ lệ áp dụng nhất định, cũng được dùng làm thuốc diệt cỏ, chất an toàn, chất điều hòa sinh trưởng hoặc tác nhân cải thiện đặc tính thực vật, dưới dạng thuốc diệt vi sinh vật hoặc thuốc diệt tế bào sinh dục, ví dụ thuốc diệt nấm, chất chống nấm, thuốc diệt vi khuẩn, thuốc diệt virut (bao gồm các tác nhân chống lại viroid) hoặc dưới dạng tác nhân chống lại các sinh vật giống mycoplasma (mycoplasma-like organisms - MLO) và các sinh vật giống rickettsia (rickettsia-like organisms - RLO). Nếu thích hợp, chúng cũng có thể được sử dụng làm chất trung gian hoặc tiền chất để tổng hợp các thành phần hoạt tính khác.

Sáng chế cũng đề cập đến chế phẩm và các dạng sử dụng được điều chế từ đó dưới dạng thuốc trừ sâu, ví dụ chất lỏng để tẩm ướt, nhỏ giọt và phun, chứa ít nhất một hợp chất có công thức (I). Trong một số trường hợp, các dạng sử dụng chứa thêm thuốc trừ sâu và/hoặc chất phụ trợ mà cải thiện hoạt tính, như chất làm trơn, ví dụ, dầu thực vật, ví dụ dầu hạt cải, dầu hướng dương, dầu khoáng, ví dụ dầu parafin, các alkyl este của axit béo thực vật, ví dụ metyl este dầu hạt cải hoặc metyl este dầu đậu tương, hoặc các alkanol alkoxylat và/hoặc chất phát tán, ví dụ các alkylsiloxan và/hoặc muối, ví dụ muối amoni hoặc phosphoni vô cơ hoặc hữu cơ, ví dụ amoni sulphat hoặc diamoni hydrophosphat và/hoặc chất thúc đẩy duy trì, ví dụ dioctyl sulphosucxinat hoặc các polyme hydroxypropyl guar và/hoặc các chất làm ẩm, ví dụ glyxerol và/hoặc phân bón, ví dụ phân bón chứa amoni, kali hoặc phospho.

Các chế phẩm thông thường là, ví dụ, các chất lỏng tan trong nước (water-soluble liquid - SL), các thể đặc dạng nhũ tương (emulsion concentrate - EC), các nhũ tương trong nước (emulsion in water - EW), các thể đặc dạng huyền phù (suspension concentrate - SC, SE, FS, OD), các hạt phân tán được trong nước (water-dispersible granules - WG), hạt (GR) và các thể đặc trong nang (capsule concentrate - CS); các dạng này và các loại dạng bào chế có thể có khác được mô tả, ví dụ, bởi Crop Life International và trong tài liệu Pesticide Specifications, Manual on development and use trong FAO and WHO specifications for pesticides, FAO Plant Production and

Protection Papers – 173, được chuẩn bị bởi FAO/WHO Joint Meeting on Pesticide Specifications, 2004, ISBN: 9251048576. Các chế phẩm này, ngoài một hoặc nhiều các hợp chất có công thức (I), tùy ý chứa thêm các thành phần có hoạt tính hóa nông.

Chúng tốt hơn là các chế phẩm hoặc dạng sử dụng chứa chất phụ trợ, ví dụ chất độn, dung môi, chất thúc đẩy tự sinh, chất mang, chất nhũ hóa, chất phân tán, chất bảo vệ khi đông lạnh, chất diệt sinh vật, chất làm đặc và/hoặc các chất phụ trợ khác, ví dụ chất phụ gia. Chất phụ gia trong ngữ cảnh của sáng chế là thành phần mà tăng cường tác dụng sinh học của chế phẩm, mà thành phần này bản thân nó không có tác dụng sinh học bất kỳ. Ví dụ về các chất phụ gia là các tác nhân mà thúc đẩy sự duy trì, lan truyền, gắn kết với bề mặt lá hoặc sự thâm nhập.

Các chế phẩm này được sản xuất theo cách đã biết, ví dụ bằng cách trộn các hợp chất có công thức (I) với các chất phụ trợ, ví dụ chất độn, dung môi và/hoặc chất mang rắn và/hoặc các chất phụ trợ khác, ví dụ chất hoạt động bề mặt. Các chế phẩm này được sản xuất trong các tiện ích thích hợp hoặc trước hoặc trong khi ứng dụng.

Các chất phụ trợ được sử dụng có thể là các chất thích hợp để đem lại các đặc tính đặc biệt, như các đặc tính vật lý, kỹ thuật và/hoặc sinh học đặc biệt, cho chế phẩm chứa các hợp chất có công thức (I), hoặc cho dạng sử dụng được điều chế từ các chế phẩm này (ví dụ các thuốc trừ sâu dùng được luôn như dịch lỏng để phun hoặc các sản phẩm xử lý hạt).

Các chất độn thích hợp là, ví dụ, nước, chất lỏng hóa hữu cơ có cực và không cực, ví dụ từ các nhóm hydrocacbon thơm và không thơm (như parafin, alkylbenzen, alkylnaphtalen, clobenzen), các rượu và rượu đa chức (mà cũng có thể tùy ý được thế, ete hóa và/hoặc este hóa), các keton (như axeton, xyclohexanon), các este (bao gồm các chất béo và dầu) và các (poly)ete, các amin, amit, lactam (như N-alkylpyrolidon) và lacton không được thế hoặc được thế, các sulphon và sulphoxit (như dimetyl sulphoxit).

Nếu chất độn được sử dụng là nước, cũng có thể sử dụng, ví dụ, dung môi hữu cơ làm dung môi phụ trợ. Các dung môi lỏng hữu dụng chủ yếu là: các dung môi thơm như như xylen, toluen hoặc alkylnaphtalen, các hydrocacbon thơm được clo hóa hoặc béo được clo hóa như clobenzen, cloetylen hoặc metylen clorua, các hydrocacbon béo như xyclohexan hoặc parafin, ví dụ các phân đoạn dầu khoáng, các dầu khoáng và dầu

thực vật, các rượu như butanol hoặc glycol và ete và este của chúng, các keton như axeton, metyl etyl keton, metyl isobutyl keton hoặc xyclohexanon, các dung môi phân cực mạnh như dimetylformamit và dimetyl sulphoxit, và cả nước.

Về nguyên tắc, có thể sử dụng tất cả các dung môi thích hợp. Ví dụ về các dung môi thích hợp là các hydrocacbon thơm như xylen, toluen hoặc alkylnaphtalen, các hydrocacbon thơm hoặc béo được clo hóa như clobenzen, cloetylen hoặc metylen clorua, các hydrocacbon béo như xyclohexan, parafin, các phân đoạn dầu khoáng, các dầu khoáng và dầu thực vật, các rượu như metanol, etanol, isopropanol, butanol hoặc glycol và ete và este của chúng, các keton như axeton, metyl etyl keton, metyl isobutyl keton hoặc xyclohexanon, các dung môi phân cực mạnh như dimetyl sulphoxit, và nước.

Về nguyên tắc, có thể sử dụng tất cả các chất mang thích hợp. Các chất mang hữu dụng đặc biệt bao gồm: ví dụ các muối amoni và các khoáng chất tự nhiên nghiền như cao lanh, đất sét, talc, đá phấn, thạch anh, atapulgit, monmorilonit hoặc đất diatomit, và các khoáng chất tổng hợp nghiền như silic oxit nghiền mịn, nhôm oxit và các silicat tjw nhiên hoặc tổng hợp, các phân bón nhựa, sáp và/hoặc rắn. Hỗn hợp của các chất mang này cũng có thể được sử dụng. Các chất mang hữu dụng dạng hạt mịn bao gồm: ví dụ đá tự nhiên nghiền và phân đoạn như canxit, đá hoa cương, đá bọt, sepiolit, dolomit, và các hạt bột vô cơ và hữu cơ tổng hợp, và cả các hạt vật liệu hữu cơ như mùn cưa, giấy, vỏ dừa, lõi ngô và cuống thuốc lá.

các chất độn hoặc dung môi dạng khí hóa lỏng cũng có thể được sử dụng. Các chất độn hoặc chất mang đặc biệt thích hợp là các chất có dang khí ở nhiệt độ môi trường và dưới áp suất khí quyển, ví dụ các khí đẩy sol khí, như các halohydrocacbon, và cả butan, propan, nitơ và cacbon dioxit.

Ví dụ về chất nhũ hóa và/hoặc chất tạo bọt, chất phân tán hoặc chất làm ẩm có các đặc tính ion hoặc không ion, hoặc hỗn hợp của các chất hoạt động bề mặt này, là muối của axit polyacrylic, muối của axit lignosulphonic, muối của axit phenolsulphonic hoặc muối của axit naphtalensulphonic, sản phẩm trùng ngưng của etylen oxit với các rượu béo hoặc với axit béo hoặc với amin béo, với các phenol được thế (tốt hơn là alkylphenol hoặc arylphenol), các muối của este sulphosucxinic, các dẫn xuất taurin (tốt hơn là alkyl taurat), các este phosphoric của rượu hoặc phenol

được polyetoxy hóa, các este axit béo của rượu đa chức, và dẫn xuất của các hợp chất chứa sulphat, sulphonat và phosphat, ví dụ, alkylaryl polyglycol ete, alkylsulphonat, alkyl sulphat, arylsulphonat, các sản phẩm thủy phân protein, nước thải chứa lignosulphit, và metyl xenluloza. Sự có mặt của chất hoạt động bề mặt là có lợi nếu một trong số các hợp chất có công thức (I) và/hoặc một trong số các chất mang trơ là tan trong nước và ứng dụng diễn ra trong nước.

Các chất phụ trợ khác mà có thể có trong các chế phẩm và các dạng sử dụng thu được từ đó bao gồm chất tạo màu như các chất màu vô cơ, ví dụ sắt oxit, titan oxit và xanh Prussian, và các chất tạo màu hữn cơ như chất tạo màu alizarin, chất tạo màu azo và chất tạo màu metal phtaloxyanin, và các chất dinh dưỡng và chất dinh dưỡng vi lượng như muối sắt, mangan, bo, đồng, cô ban, molybden và kẽm.

Các thành phần khác có thể là chất ổn định, như chất ổn định trong điều kiện lạnh, chất bảo quản, chất chống oxy hóa, chất ổn định trong điều kiện có ánh sáng, hoặc các chất khác mà cải thiện độ ổn định hóa học và/hoặc vật lý. Chất tạo bọt hoặc chất chống tạo bọt cũng có thể có mặt.

Ngoài ra, các chế phẩm và các dạng sử dụng thu được từ đó cũng có thể chứa, dưới dạng các chất phụ trợ khác, chất kết dính như carboxymetyl xenluloza và các polyme tự nhiên và tổng hợp ở dạng bột, hạt mịn hoặc latex, như gôm arabic, rượu polyvinylic và polyvinyl axetat, hoặc các phospholipit tự nhiên như xephalin và lexithin và các phospholipit tổng hợp. Các chất phụ trợ khac có thể có là dầu khoáng và dầu thực vật.

Tùy ý, các chất phụ trợ khác có thể có trong các chế phẩm và các dạng sử dụng thu được từ đó. Ví dụ về các chất phụ gia như vậy bao gồm chất thơm, các chất keo bảo vệ, chất liên kết, chất kết dính, chất làm đặc, chất xúc biến, chất thấm, chất thúc đẩy sự duy trì, chất ổn định, chất cô lập, chất tạo phức, chất làm ẩm, chất lan truyền. Nói chung, các hợp chất có công thức (I) có thể được kết hợp với chất phụ gia rắn hoặc lỏng bất kỳ thường dùng cho các mục đích tạo chế phẩm.

Các chất thúc đẩy sự duy trì bao gồm các chất mà giảm sức căng bề mặt động lực học, ví dụ dioctyl sulphosucxinat, hoặc tăng độ nhớt đàn hồi, ví dụ các polyme hydroxypropylguar.

Các chất thấm hữu dụng trong ngữ cảnh này là tất cả các chất thường dùng để cải thiện khả năng thấm của các thành phần hóa nông vào thực vật. Các chất thấm được định nghĩa trong ngữ cảnh này bằng khả năng đâm xuyên từ chất lỏng áp dụng (thường chứa nước) và/hoặc từ lớp phủ phun vào biểu bì thực vật của chúng và nhờ đó tăng tính lưu động của các thành phần hoạt tính trong biểu bì. Phương pháp được mô tả trong tài liệu (Baur et al., 1997, Pesticide Science 51, 131-152) có thể được sử dụng để xác định đặc tính này. Ví dụ bao gồm các rượu alkoxylat như etoxylat của chất béo dừa (10) hoặc isotridexyl etoxylat (12), các este của axit béo, ví dụ este metyl dầu hạt cải hoặc este metyl dầu đậu tương, alkoxylat của amin béo, ví dụ tallowamin etoxylat (15), hoặc các muối amoni và/hoặc phosphoni, ví dụ amoni sulphat hoặc diamoni hydrophosphat.

Tốt hơn nếu các chế phẩm chứa từ 0,00000001% đến 98% trọng lượng hợp chất có công thức (I), tốt hơn nữa là từ 0,01% đến 95% trọng lượng hợp chất có công thức (I), tốt nhất là từ 0,5% đến 90% trọng lượng hợp chất có công thức (I), dựa trên trọng lượng của chế phẩm.

Hàm lượng hợp chất có công thức (I) trong các dạng sử dụng được điều chế từ các chế phẩm này (đặc biệt là thuốc trừ sâu) có thể thay đổi trong phạm vi rộng. Nồng độ của hợp chất có công thức (I) trong các dạng sử dụng thường có thể nằm trong khoảng từ 0,00000001% đến 95% trọng lượng hợp chất có công thức (I), tốt hơn là từ 0,00001% đến 1% trọng lượng, dựa trên trọng lượng của dạng sử dụng. Việc áp dụng được thực hiện theo cách thích hợp đối với các dạng sử dụng.

Các hợp chất có công thức (I) cũng có thể được sử dụng trong hỗn hợp với một hoặc nhiều thuốc diệt nấm, thuốc diệt vi khuẩn, thuốc trừ nhện, thuốc diệt động vật thân mềm, thuốc diệt giun tròn, thuốc diệt côn trùng, vi sinh vật, các sinh vật có ích, thuốc diệt cỏ, phân bón, thuốc đuổi chim, các thảo dược, chất tiệt trùng, chất an toàn, chất truyền tín hiệu và/hoặc chất điều hòa sinh trưởng thực vật, để do đó, ví dụ, mở rộng phổ hoạt động, kéo dài thời gian hoạt động, tăng tốc độ hoạt động, ngăn tác dụng chống thấm hoặc ngăn ngừa sự mở rộng khả năng kháng. Ngoài ra, hỗn hợp các thành phần hoạt tính loại này có thể cải thiện sức sinh trưởng thực vật và/hoặc khả năng chịu được các yếu tố phi sinh học, ví dụ chịu nhiệt độ cao hoặc thấp, chịu hạn hoặc chịu hàm lượng nước tăng hoặc độ mặn của đất tăng. Cũng có thể cải thiện năng lực ra hoa

và ra quả, tối ưu hóa khả năng nảy mầm và phát triển rễ, tạo thuận lợi cho việc thu hoạch và cải thiện năng suất, ảnh hưởng đến sự chín, cải thiện chất lượng và/hoặc giá trị dinh dưỡng của sản phẩm sau thu hoạch, kéo dài thời gian bảo quản và/hoặc cải thiện khả năng chế biến của sản phẩm sau thu hoạch.

Ngoài ra, các hợp chất có công thức (I) có thể có trong hỗn hợp với các thành phần hoạt tính khác hoặc chất truyền tín hiệu như chất dẫn dụ và/hoặc chất đuổi chim và/hoặc chất hoạt hóa thực vật và/hoặc chất điều hòa sinh trưởng và/hoặc phân bón. Tương tự, các hợp chất có công thức (I) có thể được sử dụng trong hỗn hợp với các chất để cải thiện các đặc tính của thực vật, ví dụ sức sinh trưởng, năng suất và chất lượng nguyên liệu sau thu hoạch.

Theo một phương án cụ thể của sáng chế, các hợp chất có công thức (I) ở dạng chế phẩm hoặc các dạng sử dụng được điều chế từ các chế phẩm này trong hỗn hợp với các hợp chất khác, tốt hơn là các hợp chất được mô tả dưới đây.

Nếu một hợp chất được đề cập dưới đây có thể tồn tại ở nhiều dạng chất đồng phân hỗ biến khác nhau, các dạng này cũng được bao gồm ngay cả nếu không được đề rõ ràng cập trong từng trường hợp.

Thuốc diệt côn trùng/thuốc trừ nhện/thuốc diệt giun tròn

Các thành phần hoạt tính được đưa ra ở đây bằng "tên thông thường" của chúng là đã biết và được mô tả ví dụ trong The Pesticide Manual, 16th ed., British Crop Protection Council 2012, hoặc có thể được tra cứu trên Internet (ví dụ http://www.alanwood.net/pesticides).

(1) Các chất ức chế axetylcholinesteraza (AChE), ví dụ carbamat, ví dụ, alanycarb, aldicarb, bendiocarb, benfuracarb, butocarboxim, butoxycarboxim, carbaryl, carbofuran, carbosulfan, ethiofencarb, fenobucarb, formetanat, furathiocarb, isoprocarb, methiocarb, methomyl, metolcarb, oxamyl, pirimicarb, propoxur, thiodicarb, thiofanox, triazamat, trimethacarb, XMC và xylylcarb; hoặc các phosphat hữu cơ, ví dụ, axephat, azamethiphos, azinphos-etyl, azinphos-metyl, cadusafos, cloetoxyfos, clofenvinphos, clomephos, clopyrifos, clopyrifos-metyl, coumaphos, xyanophos, demeton-S-metyl, diazinon, dichlorvos/DDVP, dicrotophos, dimethoat, dimetylvinphos, disulfoton, EPN, ethion, ethoprophos,

famphur, fenamiphos, fenitrothion, fenthion, fosthiazat, heptenophos, imixyafos, isofenphos, isopropyl O-(metoxyaminothiophosphoryl) salixylat, isoxathion, malathion, mecarbam, methamidophos, methidathion, mevinphos, monocrotophos, naled, omethoat, oxydemeton-metyl, parathion, parathion-metyl, phenthoat, phorat, phosalon, phosmet, phosphamidon, phoxim, pirimiphos-metyl, profenofos, propetamphos, prothiofos, pyraclofos, pyridaphenthion, quinalphos, sulfotep, tebupirimfos, temephos, terbufos, tetrachlorvinphos, thiometon, triazophos, triclorfon và vamidothion.

(2) Các chất đối kháng kênh clorua cổng GABA, ví dụ xyclodien-clo hữu cơ, ví dụ, clodan và endosulfan hoặc phenylpyrazol (fiprol), ví dụ, ethiprol và fipronil.

(3) Các chất điều biến kênh natri/các chất phong bế kênh natri cổng điện thế, ví dụ pyrethroid, ví dụ, acrinathrin, allethrin, d-xis-trans allethrin, d-trans allethrin, bifenthrin, bioallethrin, chất đồng phân bioallethrin s-xyclopentenyl, bioresmethrin, xycloprothrin, xyfluthrin, beta-xyfluthrin, xyhalothrin, lambda-xyhalothrin, gamma-xyhalothrin, xypermethrin, alpha-xypermethrin, beta-xypermethrin, theta-xypermethrin, zeta-xypermethrin, xyphenothrin [chất đồng phân (1R)-trans], deltamethrin, empenthrin [chất đồng phân (EZ)-(1R)], esfenvalerat, etofenprox, fenpropathrin, fenvalerat, fluxythrinat, flumethrin, tau-fluvalinat, halfenprox, imiprothrin, kadethrin, permethrin, phenothrin [chất đồng phân (1R)-trans], prallethrin, pyrethrins (pyrethrum), resmethrin, silafluofen, tefluthrin, tetramethrin, tetramethrin [chất đồng phân (1R)], tralomethrin và transfluthrin hoặc DDT hoặc metoxyclo.

(4) Các chất chủ vận thụ thể nicotinergic axetylcholin (Nicotinergic axetylcholine receptor - nAChR), ví dụ neonicotinoid, ví dụ, axetamiprid, clothianidin, dinotefuran, imidacloprid, nitenpyram, thiacloprid và thiamethoxam hoặc nicotin hoặc sulfoxaflor.

(5) Các chất hoạt hóa dị lập thể của thụ thể nicotinergic axetylcholin (nAChR), ví dụ spinosyn, ví dụ, spinetoram và spinosad.

(6) Các chất hoạt hóa kênh clorua, ví dụ, avermectin/milbemyxin, ví dụ, abamectin, emamectin benzoat, lepimectin và milbemectin.

(7) Các chất giả hormon Juvenile, ví dụ, các chất tương tự hormon Juvenile ví dụ, hydropren, kinopren và methopren hoặc fenoxycarb hoặc pyriproxyfen.

(8) Các thành phần hoặc tính với cơ chế hoạt động chưa biết hoặc không đặc hiệu, ví dụ

alkyl halogenua, ví dụ, metyl bromua và các alkyl halogenua khác; hoặc cloropicrin hoặc sulphuryl florua hoặc borax hoặc tartar emetic.

(9) Các chất chống ăn chọn lọc, ví dụ, pymetrozin hoặc flonicamid.

(10) Các chất ức chế sự sinh trưởng của ve bét, ví dụ, clofentezin, hexythiazox và diflovidazin hoặc etoxazol.

(11) Chất phá vỡ màng ruột côn trùng có nguồn gốc vi sinh vật, ví dụ, Bacillus thuringiensis phân loài israelensis, Bacillus sphaericus, Bacillus thuringiensis phân loài aizawai, Bacillus thuringiensis phân loài kurstaki, Bacillus thuringiensis phân loài tenebrionis, và các protein thực vật BT: Cry1Ab, Cry1Ac, Cry1Fa, Cry2Ab, mCry3A, Cry3Ab, Cry3Bb, Cry34/35Ab1.

(12) Các chất ức chế sự phosphoryl hóa oxy hóa, chất phá vỡ ATP, ví dụ các hợp chất diafenthiuron hoặc thiếc hữu cơ, ví dụ, azoxyclotin, xyhexatin và fenbutatin oxit hoặc propargit hoặc tetradifon.

(13) Các chất tách cặp phosphoryl hóa oxy hóa mà phá vỡ gradien proton H, ví dụ clofenapyr, DNOC và sulfluramid.

(14) Nicotinergic axetylcholine receptor antagonists, ví dụ bensultap, cartap hydroclorua, thiocyclam, và thiosultap-natri.

(15) Các chất ức chế sinh tổng hợp chitin, loại 0, ví dụ bistrifluron, clofluazuron, diflubenzuron, fluxycloxuron, flufenoxuron, hexaflumuron, lufenuron, novaluron, noviflumuron, teflubenzuron và triflumuron.

(16) Các chất ức chế sinh tổng hợp chitin, loại 1, ví dụ buprofezin.

(17) Chất ức chế lột xác (đặc biệt đối với Diptera, tức là ruồi), ví dụ xyromazin.

(18) Các chất chủ vận thụ thể Ecdyson, ví dụ cromafenozid, halofenozid, metoxyfenozid và tebufenozid.

(19) Các chất chủ vận Octopaminergic, ví dụ amitraz.

(20) Các chất ức chế vận chuyển electron Complex-III, ví dụ hydrametylnon; hoặc axequinoxyl; hoặc fluacrypyrim.

(21) Các chất ức chế vận chuyển electron Complex-I, ví dụ từ nhóm thuốc trừ nhện METI, ví dụ, fenazaquin, fenpyroximat, pyrimidifen, pyridaben, tebufenpyrad và tolfenpyrad hoặc rotenon (Derris).

(22) Các chất phong bế kênh natri cổng điện thế, ví dụ indoxacarb hoặc metaflumizon.

(23) Các chất ức chế axetyl-CoA carboxylaza, ví dụ axit tetronic và dẫn xuất của axit tetramic, ví dụ, spirodiclofen, spiromesifen và spirotetramat.

(24) Các chất ức chế vận chuyển electron Complex-IV, ví dụ phosphin, ví dụ, nhôm phosphua, canxi phosphua, phosphin và kẽm phosphua hoặc xyanua.

(25) Các chất ức chế vận chuyển electron Complex-II, ví dụ xyenopyrafen và xyflumetofen.

(28) Các chất tác động thụ thể Ryanodin, ví dụ diamit, ví dụ, clorantraniliprol, xyantraniliprol và flubendiamit,

Các thành phần hoạt tính khác, ví dụ afidopyropen, azadirachtin, benclothiaz, benzoximat, bifenazat, bromopropylat, chinomethionat, cryolit, dicofol, diflovidazin, fluensulfon, flometoquin, flufenerim, flufenoxystrobin, flufiprol, fluopyram, flupyradifuron, fufenozid, heptafluthrin, imidaclothiz, iprodion, meperfluthrin, paichongding, pyflubumid, pyrifluquinazon, pyriminostrobin, tetrametylfluthrin và iodometan; và cả các chế phẩm dựa trên Bacillus firmus (I-1582, BioNeem, Votivo), và cả các hợp chất sau: 3-brom-N-{2-brom-4-clo-6-[(1-xyclopropyletyl)carbamoyl]phenyl}-1-(3-clopyridin-2-yl)-1H-pyrazol-5-carboxamit (theo WO2005/077934) và 1-{2-flo-4-metyl-5-[(2,2,2-trifloetyl)sulphinyl] phenyl}-3-(triflometyl)-1H-1,2,4-triazol-5-amin (theo WO2006/043635), {1'-[(2E)-3-(4-clophenyl)prop-2-en-1-yl]-5-flospiro[indol-3,4'-piperidin]-1(2H)-yl}(2-clopyridin-4-yl)metanon (theo WO2003/106457), 2-clo-N-[2-{1-[(2E)-3-(4-clophenyl)prop-2-en-1-yl]piperidin-4-yl}-4-(triflometyl) phenyl]isonicotinamit (theo WO2006/003494), 3-(2,5-dimetylphenyl)-4-hydroxy-8-metoxy-1,8-diazaspiro[4.5]dec-3-en-2-on (theo

WO2009/049851), 3-(2,5-dimetylphenyl)-8-metoxy-2-oxo-1,8-diazaspiro[4.5]dec-3-en-4-yl-etylcacbonat (theo WO2009/049851), 4-(but-2-yn-1-yloxy)-6-(3,5-dimetylpiperidin-1-yl)-5-flopyrimidin (theo WO2004/099160), 4-(but-2-yn-1-yloxy)-6-(3-clophenyl)pyrimidin (theo WO2003/076415), PF1364 (CAS Reg. No. 1204776-60-2), 4-[5-(3,5-diclophenyl)-5-(triflometyl)-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl]-2-metyl-N-{2-oxo-2-[(2,2,2-trifloetyl)amino]etyl}benzamit (theo WO2005/085216), 4-{5-[3-clo-5-(triflometyl)phenyl]-5-(triflometyl)-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl}-N-{2-oxo-2-[(2,2,2-trifloetyl)amino]etyl}-1-naphtamit (theo WO2009/002809), metyl 2-[2-({[3-bromo-1-(3-clopyridin-2-yl)-1H-pyrazol-5-yl]cacbonyl}amino)-5-clo-3-metylbenzoyl]-2-metylhydrazincarboxylat (theo WO2005/085216), metyl 2-[2-({[3-bromo-1-(3-clopyridin-2-yl)-1H-pyrazol-5-yl]cacbonyl}amino)-5-xyano-3-metylbenzoyl]-2-etylhydrazincarboxylat (theo WO2005/085216), metyl 2-[2-({[3-bromo-1-(3-clopyridin-2-yl)-1H-pyrazol-5-yl]cacbonyl}amino)-5-xyano-3-metylbenzoyl]-2-metylhydrazincarboxylat (theo WO2005/085216), metyl 2-[3,5-dibromo-2-({[3-bromo-1-(3-clopyridin-2-yl)-1H-pyrazol-5-yl]cacbonyl}amino)benzoyl]-2-etylhydrazincarboxylat (theo WO2005/085216), 1-(3-clopyridin-2-yl)-N-[4-xyano-2-metyl-6-(metylcarbamoyl)phenyl]-3-{[5-(triflometyl)-2H-tetrazol-2-yl]metyl}-1H-pyrazol-5-carboxamit (theo WO2010/069502), N-[2-(5-amino-1,3,4-thiadiazol-2-yl)-4-clo-6-metylphenyl]-3-bromo-1-(3-clopyridin-2-yl)-1H-pyrazol-5-carboxamit (theo CN102057925), 3-clo-N-(2-xyanopropan-2-yl)-N-[4-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)-2-metylphenyl]phthalamit (theo WO2012/034472), 8-clo-N-[(2-clo-5-metoxyphenyl)sulphonyl]-6-(triflometyl)imidazo[1,2-a]pyridin-2-carboxamit (theo WO2010/129500), 4-[5-(3,5-diclophenyl)-5-(triflometyl)-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl]-2-metyl-N-(1-oxidothietan-3-yl)benzamit (theo WO2009/080250), 4-[5-(3,5-diclophenyl)-5-(triflometyl)-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl]-2-metyl-N-(1-oxidothietan-3-yl)benzamit (theo WO2012/029672), 1-[(2-clo-1,3-thiazol-5-yl)metyl]-4-oxo-3-phenyl-4H-pyrido[1,2-a]pyrimidin-1-ium-2-olate (theo WO2009/099929), 1-[(6-clopyridin-3-yl)metyl]-4-oxo-3-phenyl-4H-pyrido[1,2-a]pyrimidin-1-ium-2-olate (theo WO2009/099929), (5S,8R)-1-[(6-clopyridin-3-yl)metyl]-9-nitro-2,3,5,6,7,8-hexahydro-1H-5,8-epoxyimidazo[1,2-a]azepin (theo WO2010/069266), (2E)-1-[(6-clopyridin-3-yl)metyl]-N'-nitro-2-pentylidenhydrazincarboximidamit (theo WO2010/060231), 4-(3-{2,6-diclo-4-[(3,3-

dicloprop-2-en-1-yl)oxy]phenoxy}propoxy)-2-metoxy-6-(triflometyl)pyrimidin (theo CN101337940), N-[2-(tert-butylcarbamoyl)-4-clo-6-metylphenyl]-1-(3-clopyridin-2-yl)-3-(flometoxy)-1H-pyrazol-5-carboxamit (theo WO2008/134969).

Thuốc diệt nấm

Các thành phần hoạt tính được đưa ra ở đây bằng tên chung của chúng là đã biết và được mô tả, ví dụ, trong tài liệu "Pesticide Manual" hoặc trên Internet (ví dụ: http://www.alanwood.net/pesticides).

(1) Các chất ức chế sinh tổng hợp ergosterol, ví dụ (1.1) aldimorph, (1.2) azaconazol, (1.3) bitertanol, (1.4) bromuconazol, (1.5) xyproconazol, (1.6) diclobutrazol, (1.7) difenoconazol, (1.8) diniconazol, (1.9) diniconazol-M, (1.10) dodemorph, (1.11) dodemorph axetat, (1.12) epoxiconazol, (1.13) etaconazol, (1.14) fenarimol, (1.15) fenbuconazol, (1.16) fenhexamid, (1.17) fenpropidin, (1.18) fenpropimorph, (1.19) fluquinconazol, (1.20) flurprimidol, (1.21) flusilazol, (1.22) flutriafol, (1.23) furconazol, (1.24) furconazol-xis, (1.25) hexaconazol, (1.26) imazalil, (1.27) imazalil sulphat, (1.28) imibenconazol, (1.29) ipconazol, (1.30) metconazol, (1.31) myclobutanil, (1.32) naftifin, (1.33) nuarimol, (1.34) oxpoconazol, (1.35) paclobutrazol, (1.36) pefurazoat, (1.37) penconazol, (1.38) piperalin, (1.39) prochloraz, (1.40) propiconazol, (1.41) prothioconazol, (1.42) pyributicarb, (1.43) pyrifenox, (1.44) quinconazol, (1.45) simeconazol, (1.46) spiroxamin, (1.47) tebuconazol, (1.48) terbinafin, (1.49) tetraconazol, (1.50) triadimefon, (1.51) triadimenol, (1.52) tridemorph, (1.53) triflumizol, (1.54) triforin, (1.55) triticonazol, (1.56) uniconazol, (1.57) uniconazol-P, (1.58) viniconazol, (1.59) voriconazol, (1.60) 1-(4-clophenyl)-2-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)xycloheptanol, (1.61) metyl 1-(2,2-dimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-1-yl)-1H-imidazol-5-carboxylat, (1.62) N'-{5-(diflometyl)-2-metyl-4-[3-(trimetylsilyl)propoxy]phenyl}-N-etyl-N-metylimidoformamit, (1.63) N-etyl-N-metyl-N'-{2-metyl-5-(triflometyl)-4-[3-(trimetylsilyl)propoxy]phenyl}imidoformamit và (1.64) O-[1-(4-metoxyphenoxy)-3,3-dimetylbutan-2-yl]-1H-imidazol-1-carbothioat, (1.65) pyrisoxazol.

(2) Các chất ức chế hô hấp (chất ức chế chuỗi hô hấp), ví dụ (2.1) bixafen, (2.2) boscalid, (2.3) carboxin, (2.4) diflumetorim, (2.5) fenfuram, (2.6) fluopyram, (2.7) flutolanil, (2.8) fluxapyroxad, (2.9) furametpyr, (2.10) furmexyclox, (2.11) isopyrazam

hỗn hợp raxemat syn-epime 1RS,4SR,9RS và hỗn hợp raxemat anti-empime 1RS,4SR,9SR, (2.12) isopyrazam (raxemat anti-empime), (2.13) isopyrazam (chất đồng phân đối ảnh anti-epime 1R,4S,9S), (2.14) isopyrazam (chất đồng phân đối ảnh anti-epime 1S,4R,9R), (2.15) isopyrazam (raxemat syn-epime 1RS,4SR,9RS), (2.16) isopyrazam (chất đồng phân đối ảnh syn-epime1R,4S,9R), (2.17) isopyrazam (chất đồng phân đối ảnh syn-epime 1S,4R,9S), (2.18) mepronil, (2.19) oxycarboxin, (2.20) penflufen, (2.21) penthiopyrad, (2.22) sedaxan (2.23) thifluzamit, (2.24) 1-metyl-N-[2-(1,1,2,2-tetrafloetoxy)phenyl]-3-(triflometyl)-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.25) 3-(diflometyl)-1-metyl-N-[2-(1,1,2,2-tetrafloetoxy)phenyl]-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.26) 3-(diflometyl)-N-[4-flo-2-(1,1,2,3,3,3-hexaflopropoxy)phenyl]-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.27) N-[1-(2,4-diclophenyl)-1-metoxypropan-2-yl]-3-(diflometyl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.28) 5,8-diflo-N-[2-(2-flo-4-{[4-(triflometyl)pyridin-2-yl]oxy}phenyl) etyl]quinazolin-4-amin, (2.29) benzovindiflupyr, (2.30) N-[(1S,4R)-9-(diclometylen)-1,2,3,4-tetrahydro-1,4-methanonaphtalen-5-yl]-3-(diflometyl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit và (2.31) N-[(1R,4S)-9-(diclometylen)-1,2,3,4-tetrahydro-1,4-methanonaphtalen-5-yl]-3-(diflometyl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.32) 3-(diflometyl)-1-metyl-N-(1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl)-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.33) 1,3,5-trimetyl-N-(1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl)-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.34) 1-metyl-3-(triflometyl)-N-(1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl)-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.35) 1-metyl-3-(triflometyl)-N-[(3R)-1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.36) 1-metyl-3-(triflometyl)-N-[(3S)-1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.37) 3-(diflometyl)-1-metyl-N-[(3S)-1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.38) 3-(diflometyl)-1-metyl-N-[(3R)-1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.39) 1,3,5-trimetyl-N-[(3R)-1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.40) 1,3,5-trimetyl-N-[(3S)-1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.41) benodanil, (2.42) 2-clo-N-(1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl)pyridin-3-carboxamit, (2.43) isofetamid

(3) Các chất ức chế hô hấp (chất ức chế chuỗi hô hấp) mà hoạt động trên phức III của chuỗi hô hấp, ví dụ (3.1) ametoctradin, (3.2) amisulbrom, (3.3) azoxystrobin, (3.4)

cyazofamid, (3.5) coumetoxystrobin, (3.6) coumoxystrobin, (3.5) dimoxystrobin, (3.8) enestroburin, (3.9) famoxadon, (3.10) fenamidon, (3.11) flufenoxystrobin, (3.12) fluoxastrobin, (3.13) kresoxim-metyl, (3.14) metominostrobin, (3.15) orysastrobin, (3.16) picoxystrobin, (3.17) pyraclostrobin, (3.18) pyrametostrobin, (3.19) pyraoxystrobin, (3.20) pyribencarb, (3.21) triclopyricarb, (3.22) trifloxystrobin, (3.23) (2E)-2-(2-{[6-(3-clo-2-metylphenoxy)-5-flopyrimidin-4-yl]oxy}phenyl)-2-(metoxyimino)-N-metylethanamit, (3.24) (2E)-2-(metoxyimino)-N-metyl-2-(2-{[({(1E)-1-[3-(triflometyl)phenyl]etyliden}amino)oxy]metyl}phenyl) ethanamit, (3.25) (2E)-2-(metoxyimino)-N-metyl-2-{2-[(E)-({1-[3-(triflometyl)phenyl]etoxy} imino)metyl]phenyl}ethanamit, (3.26) (2E)-2-{2-[({[(1E)-1-(3-{[(E)-1-flo-2-phenylethenyl]oxy} phenyl)etyliden]amino}oxy)metyl]phenyl}-2-(metoxyiminò)-N-metylethanamit, (3.27) (2E)-2-{2-[({[(2E,3E)-4-(2,6-diclophenyl)but-3-en-2-yliden]amino}oxy)metyl]phenyl}-2-(metoxyimino)-N-metylethanamit, (3.28) 2-clo-N-(1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl)pyridin-3-carboxamit, (3.29) 5-metoxy-2-metyl-4-(2-{[({(1E)-1-[3-(triflometyl)phenyl]etyliden}amino)oxy]metyl}phenyl)-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-on, (3.30) metyl (2E)-2-{2-[({xyclopropyl[(4-metoxyphenyl)imino]metyl} sulphanyl)metyl]phenyl}-3-metoxyprop-2-enoat, (3.31) N-(3-etyl-3,5,5-trimetylxyclohexyl)-3-(formylamino)-2-hydroxybenzamit, (3.32) 2-{2-[(2,5-dimetylphenoxy)metyl]phenyl}-2-metoxy-N-metylaxetamit, (4) các chất ức chế nguyên phân và phân chia tế bào, ví dụ (4.1) benomyl, (4.2) carbendazim, (4.3) clorfenazol, (4.4) diethofencarb, (4.5) ethaboxam, (4.6) fluopicolid, (4.7) fuberidazol, (4.8) pencycuron, (4.9) thiabendazol, (4.10) thiophanat-metyl, (4.11) thiophanat, (4.12) zoxamit, (4.13) 5-clo-7-(4-metylpiperidin-1-yl)-6-(2,4,6-triflophenyl)[1,2,4]triazolo[1,5-a]pyrimidin và (4.14) 3-clo-5-(6-clopyridin-3-yl)-6-metyl-4-(2,4,6-triflophenyl)pyridazin.

(5) Các hợp chất có hoạt tính ở nhiều vị trí, ví dụ (5.1) hỗn hợp Bordeaux, (5.2) captafol, (5.3) captan, (5.4) clorothalonil, (5.5) các chế phẩm chứa đồng như đồng hydroxit, (5.6) đồng naphtenat, (5.7) đồng oxit, (5.8) đồng oxyclorua, (5.9) đồng sulphat, (5.10) dichlofluanid, (5.11) dithianon, (5.12) dodin, (5.13) bazơ tự do dodin, (5.14) ferbam, (5.15) fluorfolpet, (5.16) folpet, (5.17) guazatin, (5.18) guazatine axetat, (5.19) iminoctadin, (5.20) iminoctadin albesilat, (5.21) iminoctadin triaxetat, (5.22) mancopper, (5.23) mancozeb, (5.24) maneb, (5.25) metiram, (5.26) kẽm metiram,

(5.27) đồng-oxin, (5.28) propamidin, (5.29) propineb, (5.30) lưu huỳnh và các chế phẩm chứa lưu huỳnh, ví dụ canxi polysulphua, (5.31) thiram, (5.32) tolylfluanid, (5.33) zineb, (5.34) ziram và (5.35) anilazin.

(6) Các chất gây ra tính kháng, ví dụ (6.1) axibenzolar-S-metyl, (6.2) isotianil, (6.3) probenazol, (6.4) tiadinil và (6.5) laminarin.

(7) Các chất ức chế sinh tổng hợp axit amin và protein, ví dụ (7.1), (7.2) blastixidin-S, (7.3) xyprodinil, (7.4) kasugamyxin, (7.5) kasugamyxin hydroclorua hydrat, (7.6) mepanipyrim, (7.7) pyrimethanil, (7.8) 3-(5-flo-3,3,4,4-tetrametyl-3,4-dihydroisoquinolin-1-yl)quinolin và (7.9) oxytetraxyclin và (7.10) streptomyxin.

(8) Các chất ức chế sản xuất ATP, ví dụ (8.1) fentin axetat, (8.2) fentin clorua, (8.3) fentin hydroxit và (8.4) silthiofam.

(9) Các chất ức chế sinh tổng hợp thành tế bào, ví dụ (9.1) benthiavalicarb, (9.2) dimethomorph, (9.3) flumorph, (9.4) iprovalicarb, (9.5) mandipropamid, (9.6) polyoxin, (9.7) polyoxorim, (9.8) validamyxin A, (9.9) valifenalat và (9.10) polyoxin B.

(10) Các chất ức chế sinh tổng hợp lipid và màng, ví dụ (10.1) biphenyl, (10.2) chlorneb, (10.3) dicloran, (10.4) edifenphos, (10.5) etridiazol, (10.6) iodocarb, (10.7) iprobenfos, (10.8) isoprothiolan (10.9) propamocarb, (10.10) propamocarb hydroclorua, (10.11) prothiocarb, (10.12) pyrazophos, (10.13) quintozen, (10.14) tecnazen và (10.15) tolclofos-metyl.

(11) Các chất ức chế sinh tổng hợp melanin, ví dụ (11.1) carpropamid, (11.2) dicloxymet, (11.3) fenoxanil, (11.4) fthalid, (11.5) pyroquilon, (11.6) trixyclazol và (11.7) 2,2,2-trifloetyl {3-metyl-1-[(4-metylbenzoyl)amino]butan-2-yl}carbamat.

(12) Các chất ức chế sinh tổng hợp axit nucleic, ví dụ (12.1) benalaxyl, (12.2) benalaxyl-M (kiralaxyl), (12.3) bupirimat, (12.4) clozylacon, (12.5) dimethirimol, (12.6) ethirimol, (12.7) furalaxyl, (12.8) hymexazol, (12.9) metalaxyl, (12.10) metalaxyl-M (mefenoxam), (12.11) ofurace, (12.12) oxadixyl, (12.13) axit oxolinic và (12.14) octhilinon.

(13) Các chất ức chế tín hiệu truyền tính trạng, ví dụ (13.1) chlozolinat, (13.2) fenpiclonil, (13.3) fludioxonil, (13.4) iprodion, (13.5) procymidon, (13.6) quinoxyfen, (13.7) vinclozolin và (13.8) proquinazid.

(14) Các chất tách cặp, ví dụ (14.1) binapacryl, (14.2) dinocap, (14.3) ferimzon, (14.4) fluazinam và (14.5) meptyldinocap.

(15) Các hợp chất khác, ví dụ (15.1) benthiazol, (15.2) bethoxazin, (15.3) capsimyxin, (15.4) carvon, (15.5) chinomethionat, (15.6) pyriofenon (chlazafenon), (15.7) cufraneb, (15.8) cyflufenamid, (15.9) cymoxanil, (15.10) cyprosulfamit, (15.11) dazomet, (15.12) debacarb, (15.13) diclophen, (15.14) diclomezin, (15.15) difenzoquat, (15.16) difenzoquat metylsulphat, (15.17) diphenylamin, (15.18) EcoMate, (15.19) fenpyrazamin, (15.20) flumetover, (15.21) fluorimid, (15.22) flusulfamit, (15.23) flutianil, (15.24) fosetyl-nhôm, (15.25) fosetyl-canxi, (15.26) fosetyl-natri, (15.27) hexaclobenzen, (15.28) irumamyxin, (15.29) methasulfocarb, (15.30) metyl isothioxyanat, (15.31) metrafenon, (15.32) mildiomyxin, (15.33) natamyxin, (15.34) nicken dimetyldithiocarbamat, (15.35) nitrothal-isopropyl, (15.36) octhilinon, (15.37) oxamocarb, (15.38) oxyfenthiin, (15.39) pentaclophenol và muối của nó, (15.40) phenothrin, (15.41) axit phosphoric và muối của nó, (15.42) propamocarb-fosetylat, (15.43) propanosin-natri, (15.44) pyrimorph, (15.45) (2E)-3-(4-tert-butylphenyl)-3-(2-clopyridin-4-yl)-1-(morpholin-4-yl)prop-2-en-1-on, (15.46) (2Z)-3-(4-tert-butylphenyl)-3-(2-clopyridin-4-yl)-1-(morpholin-4-yl)prop-2-en-1-on, (15.47) pyrolnitrin, (15.48) tebufloquin, (15.49) tecloftalam, (15.50) tolnifanid, (15.51) triazoxit, (15.52) trichlamit, (15.53) zarilamid, (15.54) (3S,6S,7R,8R)-8-benzyl-3-[({3-[(isobutyryloxy)metoxy]-4-metoxypyridin-2-yl}cacbonyl)amino]-6-metyl-4,9-dioxo-1,5-dioxonan-7-yl 2-metylpropanoat, (15.55) 1-(4-{4-[(5R)-5-(2,6-diflophenyl)-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl]-1,3-thiazol-2-yl}piperidin-1-yl)-2-[5-metyl-3-(triflometyl)-1H-pyrazol-1-yl]etanon, (15.56) 1-(4-{4-[(5S)-5-(2,6-diflophenyl)-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl]-1,3-thiazol-2-yl}piperidin-1-yl)-2-[5-metyl-3-(triflometyl)-1H-pyrazol-1-yl]etanon, (15.57) 1-(4-{4-[5-(2,6-diflophenyl)-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl]-1,3-thiazol-2-yl}piperidin-1-yl)-2-[5-metyl-3-(triflometyl)-1H-pyrazol-1-yl]etanon, (15.58) 1-(4-metoxyphenoxy)-3,3-dimetylbutan-2-yl 1H-imidazol-1-carboxylat, (15.59) 2,3,5,6-tetraclo-4-(metylsulphonyl)pyridin, (15.60) 2,3-dibutyl-6-clothieno[2,3-d]pyrimidin-4(3H)-on,

(15.61) 2,6-dimetyl-1H,5H-[1,4]dithiino[2,3-c:5,6-c']dipyrole-1,3,5,7(2H,6H)-tetron, (15.62) 2-[5-metyl-3-(triflometyl)-1H-pyrazol-1-yl]-1-(4-{4-[(5R)-5-phenyl-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl]-1,3-thiazol-2-yl}piperidin-1-yl)etanon, (15.63) 2-[5-metyl-3-(triflometyl)-1H-pyrazol-1-yl]-1-(4-{4-[(5S)-5-phenyl-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl]-1,3-thiazol-2-yl}piperidin-1-yl)etanon, (15.64) 2-[5-metyl-3-(triflometyl)-1H-pyrazol-1-yl]-1-{4-[4-(5-phenyl-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl)-1,3-thiazol-2-yl]piperidin-1-yl}etanon, (15.65) 2-butoxy-6-iodo-3-propyl-4H-chromen-4-on, (15.66) 2-clo-5-[2-clo-1-(2,6-diflo-4-metoxyphenyl)-4-metyl-1H-imidazol-5-yl]pyridin, (15.67) 2-phenylphenol và muối, (15.68) 3-(4,4,5-triflo-3,3-dimetyl-3,4-dihydroisoquinolin-1-yl)quinolin, (15.69) 3,4,5-triclopyridin-2,6-dicacbonitril, (15.70) 3-clo-5-(4-clophenyl)-4-(2,6-diflophenyl)-6-metylpyridazin, (15.71) 4-(4-clophenyl)-5-(2,6-diflophenyl)-3,6-dimetylpyridazin, (15.72) 5-amino-1,3,4-thiadiazole-2-thiol, (15.73) 5-clo-N'-phenyl-N'-(prop-2-yn-1-yl)thiophen-2-sulphonohydrazid, (15.74) 5-flo-2-[(4-flobenzyl)oxy]pyrimidin-4-amin, (15.75) 5-flo-2-[(4-metylbenzyl)oxy]pyrimidin-4-amin, (15.76) 5-metyl-6-octyl[1,2,4]triazolo[1,5-a]pyrimidin-7-amin, (15.77) etyl (2Z)-3-amino-2-xyano-3-phenylacrylate, (15.78) N'-(4-{[3-(4-clobenzyl)-1,2,4-thiadiazol-5-yl]oxy}-2,5-dimetylphenyl)-N-etyl-N-metylimidoformamit, (15.79) N-(4-clobenzyl)-3-[3-metoxy-4-(prop-2-yn-1-yloxy)phenyl]propanamit, (15.80) N-[(4-clophenyl)(xyano)metyl]-3-[3-metoxy-4-(prop-2-yn-1-yloxy)phenyl]propanamit, (15.81) N-[(5-bromo-3-clopyridin-2-yl)metyl]-2,4-diclonicotinamit, (15.82) N-[1-(5-bromo-3-clopyridin-2-yl)etyl]-2,4-diclonicotinamit, (15.83) N-[1-(5-bromo-3-clopyridin-2-yl)etyl]-2-flo-4-iodonicotinamit, (15.84) N-{(E)-[(xyclopropylmetoxy)imino][6-(diflometoxy)-2,3-diflophenyl]metyl}-2-phenylaxetamit, (15.85) N-{(Z)-[(xyclopropylmetoxy)imino][6-(diflometoxy)-2,3-diflophenyl]metyl}-2-phenylaxetamit, (15.86) N'-{4-[(3-tert-butyl-4-xyano-1,2-thiazol-5-yl)oxy]-2-clo-5-metylphenyl}-N-etyl-N-metylimidoformamit, (15.87) N-metyl-2-(1-{[5-metyl-3-(triflometyl)-1H-pyrazol-1-yl]axetyl}piperidin-4-yl)-N-(1,2,3,4-tetrahydronaphtalen-1-yl)-1,3-thiazol-4-carboxamit, (15.88) N-metyl-2-(1-{[5-metyl-3-(triflometyl)-1H-pyrazol-1-yl]axetyl}piperidin-4-yl)-N-[(1R)-1,2,3,4-tetrahydronaphtalen-1-yl]-1,3-thiazol-4-carboxamit, (15.89) N-metyl-2-(1-{[5-metyl-3-(triflometyl)-1H-pyrazol-1-yl]axetyl}piperidin-4-yl)-N-[(1S)-1,2,3,4-tetrahydronaphtalen-1-yl]-1,3-thiazol-4-carboxamit, (15.90) pentyl {6-[({[(1-metyl-1H-tetrazol-5-yl)(phenyl) metylen]amino}oxy)metyl]pyridin-2-yl}carbamat, (15.91) axit

phenazin-1-carboxylic, (15.92) quinolin-8-ol, (15.93) quinolin-8-ol sulphat (2:1), (15.94) tert-butyl {6-[({[(1-metyl-1H-tetrazol-5-yl)(phenyl)metylen]amino}oxy)metyl]pyridin-2-yl}carbamat, (15.95) 1-metyl-3-(triflometyl)-N-[2'-(triflometyl)biphenyl-2-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.96) N-(4'-clobiphenyl-2-yl)-3-(diflometyl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.97) N-(2',4'-diclobiphenyl-2-yl)-3-(diflometyl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.98) 3-(diflometyl)-1-metyl-N-[4'-(triflometyl)biphenyl-2-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.99) N-(2',5'-diflobiphenyl-2-yl)-1-metyl-3-(triflometyl)-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.100) 3-(diflometyl)-1-metyl-N-[4'-(prop-1-yn-1-yl)biphenyl-2-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.101) 5-flo-1,3-dimetyl-N-[4'-(prop-1-yn-1-yl)biphenyl-2-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.102) 2-clo-N-[4'-(prop-1-yn-1-yl)biphenyl-2-yl]nicotinamit, (15.103) 3-(diflometyl)-N-[4'-(3,3-dimetylbut-1-yn-1-yl)biphenyl-2-yl]-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.104) N-[4'-(3,3-dimetylbut-1-yn-1-yl)biphenyl-2-yl]-5-flo-1,3-dimetyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.105) 3-(diflometyl)-N-(4'-etynylbiphenyl-2-yl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.106) N-(4'-etynylbiphenyl-2-yl)-5-flo-1,3-dimetyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.107) 2-clo-N-(4'-etynylbiphenyl-2-yl)nicotinamit, (15.108) 2-clo-N-[4'-(3,3-dimetylbut-1-yn-1-yl)biphenyl-2-yl]nicotinamit, (15.109) 4-(diflometyl)-2-metyl-N-[4'-(triflometyl)biphenyl-2-yl]-1,3-thiazol-5-carboxamit, (15.110) 5-flo-N-[4'-(3-hydroxy-3-metylbut-1-yn-1-yl)biphenyl-2-yl]-1,3-dimetyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.111) 2-clo-N-[4'-(3-hydroxy-3-metylbut-1-yn-1-yl)biphenyl-2-yl]nicotinamit, (15.112) 3-(diflometyl)-N-[4'-(3-metoxy-3-metylbut-1-yn-1-yl)biphenyl-2-yl]-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.113) 5-flo-N-[4'-(3-metoxy-3-metylbut-1-yn-1-yl)biphenyl-2-yl]-1,3-dimetyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.114) 2-clo-N-[4'-(3-metoxy-3-metylbut-1-yn-1-yl)biphenyl-2-yl]nicotinamit, (15.115) (5-bromo-2-metoxy-4-metylpyridin-3-yl)(2,3,4-trimetoxy-6-metylphenyl)metanon, (15.116) N-[2-(4-{[3-(4-clophenyl)prop-2-yn-1-yl]oxy}-3-metoxyphenyl)etyl]-N2-(metylsulphonyl)valinamit, axit (15.117) 4-oxo-4-[(2-phenyletyl)amino]butanoic, (15.118) but-3-yn-1-yl {6-[({[(Z)-(1-metyl-1H-tetrazol-5-yl)(phenyl)metylen]amino}oxy)metyl]pyridin-2-yl}carbamat, (15.119) 4-amino-5-flopyrimidin-2-ol (dạng chất đồng phân hỗ biến: 4-amino-5-flopyrimidin-2(1H)-on), (15.120) propyl 3,4,5-trihydroxybenzoat, (15.121) 1,3-dimetyl-N-(1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl)-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.122) 1,3-dimetyl-N-[(3R)-1,1,3-

trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.123) 1,3-dimetyl-N-[(3S)-1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.124) [3-(4-clo-2-flophenyl)-5-(2,4-diflophenyl)-1,2-oxazol-4-yl](pyridin-3-yl)metanol, (15.125) (S)-[3-(4-clo-2-flophenyl)-5-(2,4-diflophenyl)-1,2-oxazol-4-yl](pyridin-3-yl)metanol, (15.126) (R)-[3-(4-clo-2-flophenyl)-5-(2,4-diflophenyl)-1,2-oxazol-4-yl](pyridin-3-yl)metanol, (15.127) 2-{[3-(2-clophenyl)-2-(2,4-diflophenyl)oxiran-2-yl]metyl}-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (15.128) 1-{[3-(2-clophenyl)-2-(2,4-diflophenyl)oxiran-2-yl]metyl}-1H-1,2,4-triazol-5-yl thioxyanat, (15.129) 5-(allylsulphanyl)-1-{[3-(2-clophenyl)-2-(2,4-diflophenyl)oxiran-2-yl]metyl}-1H-1,2,4-triazol, (15.130) 2-[1-(2,4-diclophenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimetylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (15.131) 2-{[rel(2R,3S)-3-(2-clophenyl)-2-(2,4-diflophenyl)oxiran-2-yl]metyl}-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (15.132) 2-{[rel(2R,3R)-3-(2-clophenyl)-2-(2,4-diflophenyl)oxiran-2-yl]metyl}-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (15.133) 1-{[rel(2R,3S)-3-(2-clophenyl)-2-(2,4-diflophenyl)oxiran-2-yl]metyl}-1H-1,2,4-triazol-5-yl thioxyanat, (15.134) 1-{[rel(2R,3R)-3-(2-clophenyl)-2-(2,4-diflophenyl)oxiran-2-yl]metyl}-1H-1,2,4-triazol-5-yl thioxyanat, (15.135) 5-(allylsulphanyl)-1-{[rel(2R,3S)-3-(2-clophenyl)-2-(2,4-diflophenyl)oxiran-2-yl]metyl}-1H-1,2,4-triazol, (15.136) 5-(allylsulphanyl)-1-{[rel(2R,3R)-3-(2-clophenyl)-2-(2,4-diflophenyl)oxiran-2-yl]metyl}-1H-1,2,4-triazol, (15.137) 2-[(2S,4S,5S)-1-(2,4-diclophenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimetylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (15.138) 2-[(2R,4S,5S)-1-(2,4-diclophenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimetylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (15.139) 2-[(2R,4R,5R)-1-(2,4-diclophenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimetylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (15.140) 2-[(2S,4R,5R)-1-(2,4-diclophenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimetylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (15.141) 2-[(2S,4S,5R)-1-(2,4-diclophenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimetylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (15.142) 2-[(2R,4S,5R)-1-(2,4-diclophenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimetylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (15.143) 2-[(2R,4R,5S)-1-(2,4-diclophenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimetylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (15.144) 2-[(2S,4R,5S)-1-(2,4-diclophenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimetylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (15.145) 2-flo-6-(triflometyl)-N-(1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl)benzamit, (15.146) 2-(6-benzylpyridin-2-yl)quinazolin, (15.147) 2-[6-(3-flo-

4-metoxyphenyl)-5-metylpyridin-2-yl]quinazolin, (15.148) 3-(4,4-diflo-3,3-dimetyl-3,4-dihydroisoquinolin-1-yl)quinolin, (15.149) axit abscisic, (15.150) 3-(diflometyl)-N-metoxy-1-metyl-N-[1-(2,4,6-triclophenyl)propan-2-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.151) N'-[5-bromo-6-(2,3-dihydro-1H-inden-2-yloxy)-2-metylpyridin-3-yl]-N-etyl-N-metylimidoformamit, (15.152) N'-{5-bromo-6-[1-(3,5-diflophenyl)etoxy]-2-metylpyridin-3-yl}-N-etyl-N-metylimidoformamit, (15.153) N'-{5-bromo-6-[(1R)-1-(3,5-diflophenyl)etoxy]-2-metylpyridin-3-yl}-N-etyl-N-metylimidoformamit, (15.154) N'-{5-bromo-6-[(1S)-1-(3,5-diflophenyl)etoxy]-2-metylpyridin-3-yl}-N-etyl-N-metylimidoformamit, (15.155) N'-{5-bromo-6-[(xis-4-isopropylxyclohexyl)oxy]-2-metylpyridin-3-yl}-N-etyl-N-metylimidoformamit, (15.156) N'-{5-bromo-6-[(trans-4-isopropylxyclohexyl)oxy]-2-metylpyridin-3-yl}-N-etyl-N-metylimidoformamit, (15.157) N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-N-(2-isopropylbenzyl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.158) N-xyclopropyl-N-(2-xyclopropylbenzyl)-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.159) N-(2-tert-butylbenzyl)-N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.160) N-(5-clo-2-etylbenzyl)-N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.161) N-(5-clo-2-isopropylbenzyl)-N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.162) N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-N-(2-etyl-5-flobenzyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.163) N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-N-(5-flo-2-isopropylbenzyl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.164) N-xyclopropyl-N-(2-xyclopropyl-5-flobenzyl)-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.165) N-(2-xyclopentyl-5-flobenzyl)-N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.166) N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-N-(2-flo-6-isopropylbenzyl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.167) N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-N-(2-etyl-5-metylbenzyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.168) N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-N-(2-isopropyl-5-metylbenzyl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.169) N-xyclopropyl-N-(2-xyclopropyl-5-metylbenzyl)-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.170) N-(2-tert-butyl-5-metylbenzyl)-N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.171) N-[5-clo-2-(triflometyl)benzyl]-N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.172) N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-N-[5-metyl-2-(triflometyl)benzyl]-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.173) N-[2-clo-6-

(triflometyl)benzyl]-N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.174) N-[3-clo-2-flo-6-(triflometyl)benzyl]-N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.175) N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-N-(2-etyl-4,5-dimetylbenzyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.176) N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-N-(2-isopropylbenzyl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-carbothioamit, (15.177) 3-(diflometyl)-N-(7-flo-1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.178) 3-(diflometyl)-N-[(3R)-7-flo-1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl]-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.179) 3-(diflometyl)-N-[(3S)-7-flo-1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl]-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.180) N'-(2,5-dimetyl-4-phenoxyphenyl)-N-etyl-N-metylimidoformamit, (15.181) N'-{4-[(4,5-diclo-1,3-thiazol-2-yl)oxy]-2,5-dimetylphenyl}-N-etyl-N-metylimidoformamit, (15.182) N-(4-clo-2,6-diflophenyl)-4-(2-clo-4-flophenyl)-1,3-dimetyl-1H-pyrazol-5-amin. Tất cả các thành phần trộn cùng được đề cập trong các nhóm từ (1) đến (15), trong trường hợp có thể, có thể tạo muối với các bazơ hoặc axit thích hợp nếu chúng có khả năng tạo muối như vậy trên cơ sở các nhóm chức của chúng.

Thuốc trừ sâu sinh học làm thành phần phối trộn

Các hợp chất có công thức (I) có thể được kết hợp với các thuốc trừ sâu sinh học.

Các thuốc trừ sâu sinh học bao gồm đặc biệt là vi khuẩn, nấm, nấm men, chiết phẩm từ thực vật và các sản phẩm được tạo ra từ vi sinh vật, bao gồm protein và các sản phẩm chuyển hóa thứ cấp.

Các thuốc trừ sâu sinh học bao gồm vi khuẩn như vi khuẩn tạo bào tử, vi khuẩn định vị ở rễ và vi khuẩn hoạt động dưới dạng thuốc diệt côn trùng, thuốc diệt nấm hoặc thuốc diệt giun tròn sinh học.

Ví dụ về các vi khuẩn mà được sử dụng hoặc có thể được sử dụng làm thuốc trừ sâu sinh học là:

Bacillus amyloliquefaciens, chủng FZB42 (DSM 231179), hoặc *Bacillus cereus,* đặc biệt là *B. cereus* chủng CNCM I-1562 hoặc *Bacillus firmus*, chủng I-1582 (Số truy cập CNCM I-1582) hoặc *Bacillus pumilus*, đặc biệt là chủng GB34 (Số truy cập ATCC

700814) và chủng QST2808 (Số truy cập NRRL B-30087), hoặc *Bacillus subtilis*, đặc biệt là chủng GB03 (Số truy cập ATCC SD-1397), hoặc *Bacillus subtilis* chủng QST713 (Số truy cập NRRL B-21661) hoặc *Bacillus subtilis* chủng OST 30002 (Số truy cập NRRL B-50421) *Bacillus thuringiensis*, đặc biệt là *B. thuringiensis* subspecies *israelensis* (serotype H-14), chủng AM65-52 (Số truy cập ATCC 1276), hoặc *B. thuringiensis subsp. aizawai*, đặc biệt là chủng ABTS-1857 (SD-1372), hoặc *B. thuringiensis subsp. kurstaki* chủng HD-1, hoặc *B. thuringiensis subsp. tenebrionis* chủng NB 176 (SD-5428), *Pasteuria penetrans*, *Pasteuria spp.* (Rotylenchulus reniformis nematode)-PR3 (Số truy cập ATCC SD-5834), *Streptomyces microflavus* chủng AQ6121 (= QRD 31.013, NRRL B-50550), *Streptomyces galbus* chủng AQ 6047 (Số truy cập NRRL 30232).

Ví dụ về nấm và nấm men mà được sử dụng hoặc có thể được sử dụng làm thuốc trừ sâu sinh học là:

Beauveria bassiana, đặc biệt là chủng ATCC 74040, *Coniothyrium minitans*, đặc biệt là chủng CON/M/91-8 (Số truy cập DSM-9660), *Lecanicillium spp.*, đặc biệt là chủng HRO LEC 12, *Lecanicillium lecanii*, (trước đây gọi là *Verticillium lecanii*), đặc biệt là chủng KV01, *Metarhizium anisopliae*, đặc biệt là chủng F52 (DSM3884/ ATCC 90448), *Metschnikowia fructicola*, đặc biệt là chủng NRRL Y-30752, *Paecilomyces fumosoroseus (*hiện nay là: *Isaria fumosorosea)*, đặc biệt là chủng IFPC 200613, hoặc chủng Apopka 97 (Số truy cập ATCC 20874), *Paecilomyces lilacinus*, đặc biệt là *P. lilacinus* chủng 251 (AGAL 89/030550), *Talaromyces flavus*, đặc biệt là chủng V117b, *Trichoderma atroviride*, đặc biệt là chủng SC_1 (Số truy cập CBS 122089), *Trichoderma harzianum*, đặc biệt là *T. harzianum rifai T39* (Số truy cập CNCM I-952).

Ví dụ về các virut mà được sử dụng hoặc có thể được sử dụng làm thuốc trừ sâu sinh học là:

Virut hạt (granulosis virus - GV) trên *Adoxophyes orana* (sâu bướm đục trái cây mùa hè), virut hạt (GV) trên *Cydia pomonella* (bướm đêm đục trái), virut đa diện nhân (nuclear polyhedrosis virus - NPV) trên *Helicoverpa armigera* (sâu bướm đục quả nang cây bông), mNPV trên *Spodoptera exigua* (sâu xanh hại củ cải đường), mNPV trên *Spodoptera frugiperda* (sâu xanh mùa thu), NPV trên *Spodoptera littoralis* (sâu ăn

lá bông châu Phi).

Cũng bao gồm các vi khuẩn và nấm mà được bổ sung dưới dạng tiêm vào thực vật hoặc bộ phận của thực vật hoặc cơ quan của thực vật và, nhờ tác dụng của các đặc tính cụ thể của chúng, thúc đẩy sự sinh trưởng của thực vật và thể trạng của thực vật. Ví dụ bao gồm:

Agrobacterium spp., *Azorhizobium caulinodans*, *Azospirillum spp.*, *Azotobacter spp.*, *Bradyrhizobium spp.*, *Burkholderia spp.*, đặc biệt là *Burkholderia cepacia* (trước đây gọi là *Pseudomonas cepacia*), *Gigaspora spp.*, hoặc *Gigaspora monosporum*, *Glomus spp.*, *Laccaria spp.*, *Lactobacillus buchneri*, *Paraglomus spp.*, *Pisolithus tinctorus*, *Pseudomonas spp.*, *Rhizobium spp.*, đặc biệt là *Rhizobium trifolii*, *Rhizopogon spp.*, *Scleroderma spp.*, *Suillus spp.*, *Streptomyces spp.*

Chất an toàn làm thành phần phối trộn

Các hợp chất có công thức (I) có thể được kết hợp với các chất an toàn, ví dụ benoxacor, cloquintocet (-mexyl), xyometrinil, xyprosulfamit, diclormid, fenchlorazol (-etyl), fenclorim, flurazol, fluxofenim, furilazol, isoxadifen (-etyl), mefenpyr (-dietyl), anhydrit naphtalic, oxabetrinil, 2-metoxy-N-({4-[(metylcarbamoyl)amino] phenyl}sulphonyl)benzamit (CAS 129531-12-0), 4-(dicloaxetyl)-1-oxa-4-azaspiro[4.5]decan (CAS 71526-07-3), 2,2,5-trimetyl-3-(dicloaxetyl)-1,3-oxazolidin (CAS 52836-31-4).

Thực vật và các bộ phận của thực vật

Mọi thực vật và các bộ phận của thực vật đều có thể được xử lý theo sáng chế. Thực vật được hiểu là mọi thực vật và quần thể thực vật, như các thực vật hoang dại mong muốn và không mong muốn hoặc cây trồng (bao gồm các cây trồng có trong tự nhiên), ví dụ ngũ cốc (lúa mỳ, gạo, tiểu hắc mạch, đại mạch, lúa mạch đen, yến mạch), ngô, đậu tương, khoai tây, củ cải đường, mía, cà chua, đậu Hà Lan và các loại rau khác, ngô, thuốc lá, cải dầu, và cả các cây lấy quả (với táo, lê, chanh và nho). Các cây trồng có thể là thực vật thu được bằng cách nhân giống thông thường và các phương pháp tối ưu hóa hoặc bằng các phương pháp công nghệ sinh học và thao tác di truyền hoặc kết hợp các phương pháp này, bao gồm các thực vật chuyển gen và bao gồm các cây trồng có thể được bảo vệ hoặc không bởi quyền của người nhân giống thực vật. Bộ

phận của thực vật được hiểu là tất cả các bộ phận và cơ quan của thực vật trên mặt đất và dưới đất, như chồi, lá, hoa và rễ, ví dụ như lá, lá kim, cuống, thân, hoa, thể quả, quả và hạt, và cả củ, rễ và thân rễ. Các bộ phận của thực vật cũng có thể bao gồm các nguyên liệu sau thu hoạch và các nguyên liệu sinh dưỡng và các nguyên liệu nhân giống sinh sản, ví dụ cành giâm, củ, thân rễ, cành ghép và hạt.

Việc xử lý thực vật và các bộ phận của thực vật theo sáng chế bằng các hợp chất có công thức (I) theo cách trực tiếp hoặc bằng cách để chúng hoạt động trên vùng xung quanh, môi trường sống hoặc không gian bảo quản của chúng, bằng các phương pháp xử lý thông thường ví dụ ngâm, phun, bay hơi, phun sương, phân tán, quét, tiêm, và, trong trường hợp nguyên liệu nhân giống, đặc biệt là trong trường hợp hạt, của bằng cách phủ một hoặc nhiều lớp phủ.

Như đã nêu trên, theo sáng chế có thể xử lý mợi thực vật và bộ phận của chúng. Theo một phương án được ưu tiên, các loài thực vật hoang dại và cây trồng, hoặc các thực vật thu được bằng cách nhân giống sinh học thông thường, như lai chéo hoặc dung hợp tế bào trần, và các bộ phận của nó, được xử lý. Theo một phương án được ưu tiên khác, thực vật chuyển gen và cây trồng thu được bằng các phương pháp thao tác di truyền, nếu thích hợp kết hợp với các phương pháp truyền thống (các sinh vật biến đổi gen), và bộ phận của chúng được xử lý. Thuật ngữ "bộ phân" hoặc "bộ phận của thực vật" hoặc "bộ phận thực vật" đã được giải thích trên đây. Đặc biệt ưu tiên theo sáng chế là việc xử lý cây trồng thường có trong thương mại tương ứng hoặc các cây đang dùng. Cây trồng được hiểu là thực vật có các đặc tính mới ("đặc điểm") và đã thu được bằng cách nhân giống truyền thống, bằng cách gây đột biến hoặc bằng các kỹ thuật ADN tái tổ hợp. Chúng có thể là cây trồng, giống cây trồng, kiểu sinh học hoặc kiểu gen.

Thực vật chuyển gen, xử lý hạt và các hiện tượng kết hợp

Thực vật hoặc cây trồng chuyển gen được ưu tiên (thu được bằng thao tác di truyền) cần xử lý theo sáng chế bao gồm tất cả các thực vật mà, nhờ các cải biến di truyền, có được nguyên liệu di truyền mà tạo ra các đặc điểm hữu dụng đặc biệt có lợi cho các thực vật này. Ví dụ về các đặc tính như vậy là sức sinh trưởng thực vật tốt hơn, khả năng chịu nhiệt độ cao hoặc thấp tăng, khả năng chịu hạn hoặc các mức nước hoặc độ mặn của đất tăng, hiệu suất ra hoa tăng, khả năng thu hoạch dễ dàng hơn, chín

nhanh, hiệu suất cao, chất lượng cao hơn và/hoặc giá trị dinh dưỡng cao hơn của sản phẩm sau thu hoạch, thời gian bảo quản và/hoặc khả năng chế biến sản phẩm sau thu hoạch tốt hơn. Được nhấn mạnh hơn nữa và đặc biệt ví dụ về các đặc tính này là khả năng kháng của thực vật chống lại động vật và vi sinh vật gây hại tăng, như chống lại côn trùng, nhện, giun tròn, ve bét, sên trần và ốc sên, ví dụ, nhờ độc tốc được tạo ra trong thực vật, cụ thể là các độc tố được tạo ra trong thực vật bằng nguyên liệu di truyền từ Bacillus thuringiensis (ví dụ bằng các gen CryIA(a), CryIA(b), CryIA(c), CryIIA, CryIIIA, CryIIIB2, Cry9c Cry2Ab, Cry3Bb và CryIF và cả tổ hợp của chúng), và cả khả năng kháng của thực vật chống lại nấm, vi khuẩn và/hoặc gây bệnh ở thực vật tăng, ví dụ, nhờ hệ thống kháng tập nhiễm (systemic acquired resistance - SAR), systemin, phytoalexin, các chất kích kháng bảo vệ thực vật và các gen kháng và tương ứng là các protein và độc tố được biểu hiện, và cả khả năng kháng tăng của thực vật với các thành phần có hoạt tính diệt cỏ nhất định, ví dụ imidazolinon, sulphonylure, glyphosat hoặc phosphinothrixin (ví dụ gen "PAT"). Các gen mà tạo ra các đặc điểm mong muốn cần quan tâm cũng có thể có mặt kết hợp với nhau trong thực vật chuyển gen. Ví dụ về thực vật chuyển gen bao gồm các cây trồng quan trọng, như ngũ cốc (lúa mỳ, gạo, tiểu hắc mạch, đại mạch, lúa mạch đen, yến mạch), ngô, đậu tương, khoai tây, củ cải đường, mía, cà chua, đậu Hà Lan và các loại rau khác, ngô, thuốc lá, cải dầu và cả cây lấy quả (với các quả táo, lê, chanh và nho), đặc biệt nhấn mạnh ngô, đậu tương, lúa mỳ, gạo, khoai tây, ngô, mía, thuốc lá và cải dầu. Các đặc điểm đặc biệt được nhấn mạnh là khả năng kháng của thực vật với côn trùng, nhện, giun tròn và sên trần và ốc sên tăng.

Bảo vệ mùa màng – các loại xử lý

Việc xử lý thực vật và bộ phận của thực vật bằng các hợp chất có công thức (I) là theo cách trực tiếp hoặc bằng hoạt động của chúng lên khu vực xung quanh, môi trường sống hoặc không gian bảo quản bởi các phương pháp xử lý thông thường, ví dụ bằng cách ngâm, phun, phun sương, tưới, bay hơi, rắc bụi, phun mù, rắc, tạo bọt, quét, phết, tiêm, tưới nước (rảy nước), tưới ngâm và, trong trường hợp nguyên liệu nhân giống, đặc biệt là trong trường hợp hạt, cả bằng cách xử lý hạt khô, xử lý hạt ướt, xử lý huyền phù, tạo vỏ, phủ bằng một hoặc nhiều lớp phủ, v.v.. cũng có thể sử dụng các

hợp chất có công thức (I) bằng phương pháp thể tích siêu nhỏ hoặc tiêm dạng sử dụng hoặc bản thân hợp chất có công thức (I) vào đất.

Cách xử lý trực tiếp được ưu tiên là đưa lên lá, nghĩa là các hợp chất có công thức (I) được đưa lên lá, trong đó tần suất xử lý và tỷ lệ áp dụng cần được điều chỉnh theo mức độ phá hoại của sinh vật gây hại cần quan tâm.

Trong trường hợp các hợp chất có hoạt tính hệ thống, các hợp chất có công thức (I) cũng có thể đi vào thực vật qua hệ thống rễ. Sau đó các thực vật được xử lý bằng hoạt động của các hợp chất có công thức (I) lên môi trường sống của thực vật. Điều này có thể thực hiện được, ví dụ, bằng cách rảy nước, hoặc bằng cách trộn vào đất hoặc dung dịch dinh dưỡng, nghĩa là chỗ trồng thực vật (ví dụ đất hoặc hệ thống thủy canh) được tẩm các hợp chất có công thức (I) ở dạng lỏng, hoặc bằng cách đưa vào đất, nghĩa là các hợp chất có công thức (I) được đưa ở dạng rắn (ví dụ ở dạng hạt) vào chỗ trồng thực vật. Trong trường hợp cây lúa gạo, cũng có thể thực hiện việc này bằng cách định lượng hợp chất có công thức (I) ở dạng sử dụng rắn (ví dụ dưới dạng hạt) vào ruộng lúa ngập nước.

Xử lý hạt

Việc phòng trừ động vật gây hại bằng cách xử lý hạt của thực vật đã biết đến từ lâu và được cải thiện liên tục. Tuy nhiên, việc xử lý hạt gây ra hàng loạt các vấn đề mà không thể luôn được giải quyết theo cách thỏa mãn. Do đó, có mong muốn phát triển các phương pháp bảo vệ hạt và và thực vật đang nảy mầm mà không cần đến, hoặc ít nhất giảm đáng kể, việc sử dụng các thuốc trừ sâu bổ sung trong quá trình bảo quản, sau khi gieo hạt hoặc sau khi thực vật nhú lên. Ngoài ra, cũng có thể mong muốn tối ưu hóa lượng thành phần hoạt tính được sử dụng để bảo vệ tối ưu hạt và thực vật đang nảy mầm khỏi sự tấn công của động vật gây hại, nhưng không làm thương tổn bản thân thực vật bởi thành phần hoạt tính được sử dụng. Cụ thể, các phương pháp để xử lý hạt cũng cần tính đến các đặc tính diệt côn trùng hoặc trừ nhện thực chất của thực vật chuyển gen kháng hoặc chịu được sinh vật gây hại để đạt được sự bảo vệ tối ưu đối với hạt và thực vật đang nảy mầm với chi phí trên các sản phẩm bảo vệ mùa màng tối thiểu.

Do đó, sáng chế cũng đề cập, cụ thể hơn, đến phương pháp bảo vệ hạt và thực vật đang nảy mầm khỏi sự tấn công của sinh vật gây hại, bằng cách xử lý hạt bằng một

trong số các hợp chất có công thức (I). Phương pháp theo sáng chế để bảo vệ hạt và thực vật đang nảy mầm chống lại sự tấn công của sinh vật gây hại còn bao gồm phương pháp trong đó hạt được xử lý đồng thời trong cùng một hoạt động hoặc lần lượt bằng hợp chất có công thức (I) và thành phần phối trộn. Phương pháp này cũng bao gồm phương pháp trong đó hạt được xử lý ở các thời điểm khác nhau bằng hợp chất có công thức (I) và thành phần phối trộn.

Sáng chế cũng đề cập đến việc sử dụng các hợp chất có công thức (I) để xử lý hạt để bảo vệ hạt và thực vật thu được khỏi động vật gây hại.

Sáng chế cũng đề cập đến hạt mà đã được xử lý bằng hợp chất có công thức (I) để bảo vệ khỏi động vật gây hại. Sáng chế cũng đề cập đến hạt mà đã được xử lý đồng thời bằng hợp chất có công thức (I) và thành phần phối trộn. Sáng chế cũng đề cập đến hạt mà đã được xử lý ở các thời điểm khác nhau bằng hợp chất có công thức (I) và thành phần phối trộn. Trong trường hợp hạt mà đã được xử lý ở các thời điểm khác nhau bằng hợp chất có công thức (I) và thành phần phối trộn, các chất riêng rẽ có thể có trên hạt trong các lớp khác nhau. Trong trường hợp này, các lớp chứa hợp chất có công thức (I) và các thành phần phối trộn có thể tùy ý được tách riêng bằng lớp trung gian. Sáng chế cũng đề cập đến hạt trong đó hợp chất có công thức (I) và thành phần phối trộn đã được sử dụng làm một phần của lớp bao hoặc lớp tiếp theo hoặc các lớp tiếp theo ngoài lớp bao.

Sáng chế cũng đề cập đến hạt mà, sau khi xử lý bằng hợp chất có công thức (I), được bao màng để ngăn ngừa sự bào mòn của bụi bẩn trên hạt.

Một ưu điểm có thể có khi một trong số các hợp chất có công thức (I) hoạt động hệ thống là ở chỗ việc xử lý hạt không chỉ bảo vệ bản thân hạt mà còn cả cây thu được từ đó, sau khi nhú, khỏi động vật gây hại. Theo cách này, có thể tránh được việc xử lý trung gian mùa màng ở thời điểm geio hoặc ngay sau đó.

Ưu điểm tiếp theo ở chỗ việc xử lý hạt bằng hợp chất có công thức (I) có thể tăng cường khả năng nảy mầm và nhú của hạt được xử lý.

Việc các hợp chất có công thức (I) cũng có thể đặc biệt được sử dụng cho hạt giống chuyển gen cũng có thể coi là ưu điểm.

Các hợp chất có công thức (I) cũng có thể được sử dụng kết hợp với các chế phẩm công nghệ tín hiệu, mà dẫn đến, ví dụ, sự định khu tốt hơn của các sinh vật cộng sinh, ví dụ rhizobia, mycorrhizae và/hoặc vi khuẩn hoặc nấm nội sinh thực vật, và/hoặc sự cố định nitơ tối ưu.

Các hợp chất có công thức (I) thích hợp để bảo vệ hạt của giống thực vật bất kỳ mà được sử dụng trong nông nghiệp, trong nhà kính, trong rừng hoặc trong làm vườn. Cụ thể hơn, hạt bao gồm hạt ngũ cốc (ví dụ lúa mỳ, đại mạch, lúa mạch đen, kê và yến mạch), ngô, ngô, đậu tương, gạo, khoai tây, hướng dương, cà phê, thuốc lá, cây cải dầu, hạt cải dầu, củ cải đường (ví dụ củ cải đường và củ cải đường cho chăn nuôi), lạc, rau (ví dụ cà chua, dưa chuột, đậu, rau họ cải, hành và xà lách), cây lấy quả, bãi cỏ và cây cảnh. Đặc biệt có ý nghĩa là việc xử lý hạt ngũ cốc (như lúa mỳ, đại mạch, lúa mạch đen và yến mạch), ngô, đậu tương, ngô, cây cải dầu, hạt cải dầu và gạo.

Như đã nêu trên, việc xử lý hạt chuyển gen bằng hợp chất có công thức (I) cũng có ý nghĩa đặc biệt. Việc này bao gồm hạt của thực vật mà thường chứa ít nhất một gen khác loại mà điều khiển sự biểu hiện polypeptit có đặc tính cụ thể diệt côn trùng và/hoặc trừ nhện. Các gen khác loại trong hạt chuyển có thể thu được từ vi sinh vật như Bacillus, Rhizobium, Pseudomonas, Serratia, Trichoderma, Clavibacter, Glomus hoặc Gliocladium. Sáng chế đặc biệt thích hợp để xử lý hạt chuyển gen chứa ít nhất một gen khác loại có nguồn gốc từ Bacillus sp. Gen khác loại này tốt hơn nữa là thu được từ Bacillus thuringiensis.

Trong ngữ cảnh của sáng chế, hợp chất có công thức (I) được đưa lên hạt. Tốt hơn là hạt được xử ý ở trạng thái trong đó nó đủ ổn định để không bị thương tổn trong quá trình xử lý. Nói chung, hạt có thể được xử lý ở thời điểm bất kỳ từ khi thu hoạch đến khi gieo. Tùy ý sử dụng hạt đã được tách từ cây và tách khỏi lõi, vỏ cứng, cuống, vỏ, lông hoặc thịt quả. Ví dụ, có thể sử dụng hạt đã thu hoạch, làm sạch và làm khô đến hàm lượng ẩm cho phép bảo quản. Theo cách khác, cũng có thể sử dụng hạt mà, sau khi làm khô, đã được xử lý bằng, ví dụ, nước và sau đó làm khô lại, ví dụ trẻ hóa (priming).

Nói chung, trong việc xử lý hạt, cần đảm bảo rằng lượng hợp chất có công thức (I) và/hoặc các chất phụ gia khác được đưa lên hạt được chọn sao cho khả năng nảy mầm của hạt không bị suy giảm và cây mọc từ đó không bị thương tổn. Cũng cần đảm

bảo điều này đặc biệt trong trường hợp các thành phần hoạt tính có thể thể hiện các tác dụng độc thực vật ở các tỷ lệ áp dụng nhất định.

Các hợp chất có công thức (I) thường được áp dụng trên hạt trong các chế phẩm thích hợp. Các chế phẩm thích hợp và quy trình xử lý hạt đã được người có hiểu biết trung bình về lĩnh vực này biết.

Các hợp chất có công thức (I) có thể được chuyển thành chế phẩm xử lý hạt thông thường, như dung dịch, nhũ tương, huyền phù, bột, bọt, huyền phù đặc hoặc các chế phẩm phủ khác dùng cho hạt, và cả các chế phẩm ULV.

Các chế phẩm này được sản xuất theo cách đã biết, bằng cách trộn các hợp chất có công thức (I) với các chất phụ gia thông thường, ví dụ các chất độn và dung môi hoặc chất pha loãng thông thường, chất tạo màu, chất làm ẩm, chất phân tán, chất nhũ hóa, chất chống tạo bọt, chất bảo quản, chất làm đặc thứ cấp, chất kết dính, gibberelin và cả nước.

Các chất tạo màu hữu dụng mà có thể có trong chế phẩm xử lý hạt thuận tiện theo sáng chế là tất cả các chất màu thông thường cho mục đích này. Cũng có thể sử dụng các thuốc nhuộm, mà ít tan trong nước, hoặc chất màu, mà tan trong nước. Ví dụ bao gồm chất màu đã biết với tên gọi Rhodamin B, C.I. Pigment Red 112 và C.I. Solvent Red 1.

Các chất làm ẩm hữu dụng mà có thể có trong chế phẩm xử lý hạt theo sáng chế là tất cả các chất thúc đẩy sự làm ẩm và thường được sử dụng để điều chế các thành phần có hoạt tính hóa nông. Ưu tiên việc sử dụng alkyl naphtalensulphonat, như diisopropyl hoặc diisobutyl naphtalensulphonat.

Các chất phân tán và/hoặc chất nhũ hóa hữu dụng mà có thể có trong các chế phẩm xử lý hạt thuận tiện theo sáng chế là tất cả các chất phân tán không chứa ion, chứa anion và cation thường dùng để điều chế các thành phần có hoạt tính hóa nông. Ưu tiên việc sử dụng chất phân tán không chứa ion hoặc chứa anion hoặc hỗn hợp các chất phân tán không chứa ion hoặc chứa anion. Các chất phân tán không chứa ion thích hợp bao gồm các polyme khối etylen oxit/propylen oxit cụ thể, alkylphenol polyglycol ete và tristryrylphenol polyglycol ete, và các dẫn xuất được phosphat hóa

hoặc sulphat hóa của chúng. Các chất phân tán chứa anion đặc biệt là lignosulphonat, các muối của axit polyacrylic và các sản phẩm ngưng tụ arylsulphonat/formaldehyt.

Các chất chống tạo bọt mà có thể có trong các chế phẩm xử lý hạt thuận tiện theo sáng chế là tất cả các chất ức chế bọt thường dùng để điều chế các thành phần có hoạt tính hóa nông. Các chất chống tạo bọt silicon và magie stearat có thể được ưu tiên sử dụng.

Các chất bảo quản mà có thể có trong các chế phẩm xử lý hạt thuận tiện theo sáng chế là tất cả các chất thuận tiện cho mục đích này trong các chế phẩm hóa nông. Ví dụ bao gồm diclophen và benzyl alcohol hemiformal.

Các chất làm đặc thứ cấp mà có thể có trong các chế phẩm xử lý hạt thuận tiện theo sáng chế là tất cả các chất thể được sử dụng cho mục đích này trong các chế phẩm hóa nông. Các ví dụ được ưu tiên bao gồm các dẫn xuất xenluloza, dẫn xuất axit acrylic, xanthan, đất sét biến tính và silic oxit mịn.

Các chất kết dính hữu dụng mà có thể có trong các chế phẩm xử lý hạt thuận tiện theo sáng chế là tất cả các chất liên kết thông thường dùng được trong các sản phẩm tưới lên hạt. Các ví dụ được ưu tiên bao gồm polyvinylpyrolidon, polyvinyl axetat, rượu polyvinylic và tyloza.

Các gibberellin mà có thể có trong các chế phẩm xử lý hạt thuận tiện theo sáng chế tốt hơn là các gibberellin A1, A3 (= axit gibberelic), A4 và A7; đặc biệt ưu tiên việc sử dụng axit gibberelic. Các gibberellin là đã biết (xem R. Wegler "Chemie der Pflanzenschutz- und Schädlingsbekämpfungsmittel" [Chemistry of the Crop Protection Compositions và Pesticides], vol. 2, Springer Verlag, 1970, p. 401-412).

Các chế phẩm xử lý hạt thuận tiện theo sáng chế có thể được sử dụng để xử lý nhiều loại hạt khác nhau, trực tiếp hoặc sau khi pha loãng bằng nước. Chẳng hạn, các thể đặc hoặc chế phẩm thu được từ đó bằng cách pha loãng bằng nước có thể được sử dụng để xử lý hạt ngũ cốc, như lùa mỳ, đại mạch, lúa mạch đen, yến mạch, và tiểu hắc mạch, và cả hạt ngô, gạo, cải dầu, đậu Hà Lan, đậu, ngô, hướng dương, đậu tương và củ cải đường, hoặc nhiều hạt giống rau khác nhau. Các chế phẩm xử lý hạt thuận tiện theo sáng chế, hoặc dạng sử dụng pha loãng của chúng, cũng có thể được sử dụng để xử lý hạt thực vật chuyển gen.

Để xử lý hạt bằng các chế phẩm xử lý hạt thuận tiện theo sáng chế, hoặc các dạng sử dụng được điều chế từ đó, tất cả các máy trộn dùng được thông thường để xử lý hạt đều hữu dụng. Đặc biệt, quy trình xử lý hạt là đưa hạt vào máy trộn vận hành từng mẻ hoặc liên tục, bổ sung lượng chế phẩm xử lý hạt mong muốn cụ thể như vậy hoặc sau khi pha loãng trước bằng nước, và trộn đến khi chế phẩm được phân bố đồng đều trên hạt. Nếu thích hợp, tiếp theo là vận hành làm khô.

Tỷ lệ áp dụng của các chế phẩm xử lý hạt thuận tiện theo sáng chế có thể thay đổi trong khoảng tương đối rộng. Tỷ lệ này tùy thuộc vào hàm lượng các hợp chất có công thức (I) cụ thể trong chế phẩm và loại hạt. Tỷ lệ áp dụng của hợp chất có công thức (I) thường nằm trong khoảng từ 0,001 đến 50 g trên một kilogram hạt, tốt hơn là nằm trong khoảng từ 0,01 đến 15 g trên một kilogram hạt.

Sử dụng trong lĩnh vực sức khỏe động vật

Trong lĩnh vực sức khỏe động vật, tức là lĩnh vực thú y, các thành phần hoạt tính theo sáng chế hoạt động chống lại các sinh vật ký sinh trên động vật, đặc biệt là ngoại ký sinh trùng hoặc, theo một phương án khác, nội ký sinh trùng. Thuật ngữ "nội ký sinh trùng" bao gồm đặc biệt là giun sán như án dây, giun tròn hoặc sán lá, và động vật nguyên sinh như trùng bào tử. Các ngoại ký sinh trùng thường và tốt hơn là động vật chân khớp, đặc biệt là côn trùng như ruồi (chích và liếm), ấu trùng ruồi ký sinh, rận, chấy, mạt chim, bọ chét và tương tự; hoặc bọ mát như ve, ví dụ ve vỏ cứng hoặc ve vỏ mềm, hoặc bét như cái ghẻ, mò, bét ký sinh ở chim và tương tự, và cả các ngoại ký sinh trùng trong nước như động vật chân chèo.

Trong lĩnh vực thú y, các hợp chất có công thức (I) có độc tính đẳng nhiệt có lợi sẽ thích hợp để phòng trừ ký sinh trùng có trong nhân giống động vật và chăn nuôi động vật ở vật nuôi, động vật giống, đọng vật trong vườn thú, động vật phòng thí nghiệm, động vật thí nghiệm và thú nuôi. Chúng hoạt động chống lại tất cả hoặc các giai đoạn phát triển cụ thể của ký sinh trùng.

Động vật nuôi trong nông nghiệp bao gồm, ví dụ, động vật có vú như cừu, dê, ngựa, lừa, lạc đà, trâu, thỏ, tuần lộc, hươu hoang, và đặc biệt là gia súc và lợn; gia cầm như gà tây, vịt, ngỗng, và đặc biệt là gà; cá và động vật giáp xác, ví dụ trong thủy sản, và cả côn trùng như ong.

Thú nuôi bao gồm, ví dụ, động vật có vú, như chuột đồng, chuột lang, chuột cống, chuột nhắt, sóc sin-sin, chồn sương, và đặc biệt là chó, mèo, chim cảnh, bò sát, động vật lưỡng cư và cá cảnh.

Theo một phương án được ưu tiên, các hợp chất có công thức (I) được sử dụng cho động vật có vú.

Theo một phương án được ưu tiên khác, các hợp chất có công thức (I) được sử dụng cho chim, tức là chim cảnh và đặ biệt là gia cầm.

Việc sử dụng các hợp chất có công thức (I) để phòng trừ động vật ký sinh được dự định để làm giảm hoặc ngăn ngừa các bệnh, các trường hợp tử vong và giảm hiệu suất (trong trường hợp động vật lấy thịt, sữa, len, da, trứng, mật ong và tương tự), sao cho có thể quản lý động vật kinh tế hơn và đơn giản hơn và đạt được sức khỏe động vật tốt hơn.

Liên quan đến lĩnh vực sức khỏe động vật, thuật ngữ "phòng trừ" hoặc "việc phòng trừ" có nghĩa là các hợp chất có công thức (I) hữu hiệu để làm giảm tỷ lệ mắc ký sinh trùng cụ thể ở động vật bị nhiễm ký sinh trùng như vậy đến mức độ không có hại. Cụ thể hơn, "việc phòng trừ" trong ngữ cảnh này nghĩa là hợp chất có công thức (I) có thể tiêu diệt ký sinh trùng tương ứng, ức chế sự sinh trưởng của nó, hoặc ức chế sự tăng sinh của nó.

Các ký sinh trùng này bao gồm:

Từ bộ Anoplurida, ví dụ, Haematopinus spp., Linognathus spp., Pediculus spp., Phthirus spp., Solenopotes spp.; ví dụ cụ thể là: Linognathus setosus, Linognathus vituli, Linognathus ovillus, Linognathus oviformis, Linognathus pedalis, Linognathus stenopsis, Haematopinus asini macrocephalus, Haematopinus eurysternus, Haematopinus suis, Pediculus humanus capitis, Pediculus humanus corporis, Phylloera vastatrix, Phthirus pubis, Solenopotes capillatus;

Từ bộ Mallophagida và các bộ phụ Amblycerina và Ischnocerina, ví dụ, Trimenopon spp., Menopon spp., Trinoton spp., Bovicola spp., Werneckiella spp., Lepikentron spp., Damalina spp., Trichodectes spp., Felicola spp.; ví dụ cụ thể là: Bovicola bovis, Bovicola ovis, Bovicola limbata, Damalina bovis, Trichodectes canis, Felicola subrostratus, Bovicola caprae, Lepikentron ovis, Werneckiella equi;

Từ bộ Diptera và các bộ phụ Nematocerina và Brachycerina, ví dụ, Aedes spp., Anopheles spp., Culex spp., Simulium spp., Eusimulium spp., Phlebotomus spp., Lutzomyia spp., Culicoides spp., Chrysops spp., Odagmia spp., Wilhelmia spp., Hybomitra spp., Atylotus spp., Tabanus spp., Haematopota spp., Philipomyia spp., Braula spp., Musca spp., Hydrotaea spp., Stomoxys spp., Haematobia spp., Morellia spp., Fannia spp., Glossina spp., Calliphora spp., Lucilia spp., Chrysomyia spp., Wohlfahrtia spp., Sarcophaga spp., Oestrus spp., Hypoderma spp., Gasterophilus spp., Hippobosca spp., Lipoptena spp., Melophagus spp., Rhinoestrus spp., Tipula spp.; ví dụ cụ thể là: Aedes aegypti, Aedes albopictus, Aedes taeniorhynchus, Anopheles gambiae, Anopheles maculipennis, Calliphora erythrocephala, Chrysozona pluvialis, Culex quinquefasciatus, Culex pipiens, Culex tarsalis, Fannia canicularis, Sarcophaga carnaria, Stomoxys calcitrans, Tipula paludosa, Lucilia cuprina, Lucilia sericata, Simulium reptans, Phlebotomus papatasi, Phlebotomus longipalpis, Odagmia ornata, Wilhelmia equina, Boophthora erythrocephala, Tabanus bromius, Tabanus spodopterus, Tabanus atratus, Tabanus sudeticus, Hybomitra ciurea, Chrysops caecutiens, Chrysops relictus, Haematopota pluvialis, Haematopota italica, Musca autumnalis, Musca domestica, Haematobia irritans irritans, Haematobia irritans exigua, Haematobia stimulans, Hydrotaea irritans, Hydrotaea albipuncta, Chrysomya chloropyga, Chrysomya bezziana, Oestrus ovis, Hypoderma bovis, Hypoderma lineatum, Przhevalskiana silenus, Dermatobia hominis, Melophagus ovinus, Lipoptena capreoli, Lipoptena cervi, Hippobosca variegata, Hippobosca equina, Gasterophilus intestinalis, Gasterophilus haemorroidalis, Gasterophilus inermis, Gasterophilus nasalis, Gasterophilus nigricornis, Gasterophilus pecorum, Braula coeca;

Từ bộ Siphonapterida, ví dụ, Pulex spp., Ctenocephalides spp., Tunga spp., Xenopsylla spp., Ceratophyllus spp.; ví dụ cụ thể là: Ctenocephalides canis, Ctenocephalides felis, Pulex irritans, Tunga penetrans, Xenopsylla cheopis;

Từ bộ Heteropterida, ví dụ, Cimex spp., Triatoma spp., Rhodnius spp., Panstrongylus spp.

Từ bộ Blattarida, ví dụ, Blatta orientalis, Periplaneta americana, Blattela germanica và Supella spp. (ví dụ Suppella longipalpa);

Từ lớp phụ Acari (Acarina) và các bộ Meta- và Mesostigmata, ví dụ, Argas spp., Ornithodorus spp., Otobius spp., Ixodes spp., Amblyomma spp., Rhipicephalus (Boophilus) spp., Dermacentor spp., Haemophysalis spp., Hyalomma spp., Dermanyssus spp., Rhipicephalus spp. (the original genus of multihost ticks), Ornithonyssus spp., Pneumonyssus spp., Raillietia spp., Pneumonyssus spp., Sternostoma spp., Varroa spp., Acarapis spp.; ví dụ cụ thể là: Argas persicus, Argas reflexus, Ornithodorus moubata, Otobius megnini, Rhipicephalus (Boophilus) microplus, Rhipicephalus (Boophilus) decoloratus, Rhipicephalus (Boophilus) annulatus, Rhipicephalus (Boophilus) calceratus, Hyalomma anatolicum, Hyalomma aegypticum, Hyalomma marginatum, Hyalomma transiens, Rhipicephalus evertsi, Ixodes ricinus, Ixodes hexagonus, Ixodes canisuga, Ixodes pilosus, Ixodes rubicundus, Ixodes scapularis, Ixodes holocyclus, Haemaphysalis concinna, Haemaphysalis punctata, Haemaphysalis cinnabarina, Haemaphysalis otophila, Haemaphysalis leachi, Haemaphysalis longicorni, Dermacentor marginatus, Dermacentor reticulatus, Dermacentor pictus, Dermacentor albipictus, Dermacentor andersoni, Dermacentor variabilis, Hyalomma mauritanicum, Rhipicephalus sanguineus, Rhipicephalus bursa, Rhipicephalus appendiculatus, Rhipicephalus capensis, Rhipicephalus turanicus, Rhipicephalus zambeziensis, Amblyomma americanum, Amblyomma variegatum, Amblyomma maculatum, Amblyomma hebraeum, Amblyomma cajennense, Dermanyssus gallinae, Ornithonyssus bursa, Ornithonyssus sylviarum, Varroa jacobsoni;

Từ bộ Actinedida (Prostigmata) và Acaridida (Astigmata), ví dụ, Acarapis spp., Cheyletiella spp., Ornithocheyletia spp., Myobia spp., Psorergates spp., Demodex spp., Trombicula spp., Listrophorus spp., Acarus spp., Tyrophagus spp., Caloglyphus spp., Hypodectes spp., Pterolichus spp., Psoroptes spp., Chorioptes spp., Otodectes spp., Sarcoptes spp., Notoedres spp., Knemidocoptes spp., Cytodites spp. và Laminosioptes spp.; ví dụ cụ thể là: Cheyletiella yasguri, Cheyletiella blakei, Demodex canis, Demodex bovis, Demodex ovis, Demodex caprae, Demodex equi, Demodex caballi, Demodex suis, Neotrombicula autumnalis, Neotrombicula desaleri, Neoschongastia xerothermobia, Trombicula akamushi, Otodectes cynotis, Notoedres cati, Sarcoptis canis, Sarcoptes bovis, Sarcoptes ovis, Sarcoptes rupicaprae (=S. caprae), Sarcoptes equi, Sarcoptes suis, Psoroptes ovis, Psoroptes cuniculi, Psoroptes equi, Chorioptes

bovis, Psoergates ovis, Pneumonyssoidic mange, Pneumonyssoides caninum, Acarapis woodi.

Từ lớp phụ động vật chân chèo với bộ Siphonostomatoida cụ thể là chi Lepeophtheirus và Caligus; loài Lepeophtheirus salmonis, Caligus elongatus và Caligus clemensi có thể là ví dụ và được đặc biệt ưu tiên.

Nói chung, các thành phần hoạt tính theo sáng chế có thể được sử dụng trực tiếp khi chúng được sử dụng để điều trị cho động vật. Tốt hơn nếu chúng được sử dụng (dùng) ở dạng dược phẩm mà có thể chứa cá tá dược và/hoặc các chất phụ trợ dược dụng đã biết trong lĩnh vực này.

Trong lĩnh vực sức khỏe động vật và chăn nuôi động vật, các thành phần hoạt tính được sử dụng (= dùng) theo cách đã biết, bằng cách dùng trong ruột ở dạng, ví dụ, viên nén, viên nang, thuốc nước, liều thú y, hạt mịn, hồ, liều bolus, qua quá trình lưu chuyển của thức ăn và thuốc đạn, bằng cách dùng ngoài đường tiêu hóa, ví dụ tiêm (trong bắp, dưới da, trong tĩnh mạch, trong màng bụng, không kể những đường dùng khác), mảnh ghép, bằng cách dùng đường mũi, bằng cách dùng đường da ở dạng, ví dụ, ngâm hoặc tắm, phun, đổ lên và chấm lên, rửa và rắc bột, và cả bằng sự hỗ trợ của các vật dụng đúc chứa thành phần hoạt tính, như vòng cổ, thẻ đánh dấu tai, thẻ đánh dấu đuôi, dải đeo ở chi, dây thòng lọng, các dụng cụ đánh dấu, v.v.. Các thành phần hoạt tính có thể được bào chế trong dầu gội đầu hoặc các chế phẩm thích hợp dùng được trong sol khí hoặc phun không có áp, ví dụ phun bằng bơm và phun sương,

Trong trường hợp sử dụng cho động vật nuôi, gia cầm, thú nuôi, v.v., các thành phần hoạt tính theo sáng chế có thể được sử dụng dưới dạng chế phẩm (ví dụ bột, bột làm ẩm được (wettable powders - "WP"], nhũ tương, các thể đặc tạo nhũ tương được (emulsifiable concentrates - "EC"], các chế phẩm chảy tự do, các dung dịch đồng thể và các thể đặc dạng huyền phù (suspension concentrates - "SC"]), chứa các thành phần hoạt tính với lượng từ 1% đến 80% trọng lượng, trực tiếp hoặc sau khi pha loãng (ví dụ pha loãng 100 đến 10000 lần), hoặc chúng có thể được sử dụng dưới dạng bể hóa chất.

Trong trường hợp sử dụng trong lĩnh vực sức khỏe động vật, các thành phần hoạt tính theo sáng chế, để mở rộng phổ hoạt động, có thể được sử dụng kết hợp với các chất có tác dụng hiệp đồng, chất chống thấm hoặc các thành phần hoạt tính khác

thích hợp, ví dụ thuốc trừ nhện, thuốc diệt côn trùng, thuốc diệt ký sinh trùng, thuốc diệt động vật nguyên sinh. Các thành phần phối trộn tiềm năng cho các hợp chất có công thức (I) theo sáng chế có thể, trong trường hợp ứng dụng trong lĩnh vực sức khỏe động vật, là một hoặc nhiều hợp chất từ các nhóm (In-1) đến (In-25).

(In-1) Chất ức chế axetylcholinesteraza (AChE), ví dụ carbamat, ví dụ, alanycarb, aldicarb, bendiocarb, benfuracarb, butocarboxim, butoxycarboxim, carbaryl, carbofuran, carbosulfan, ethiofencarb, fenobucarb, formetanate, furathiocarb, isoprocarb, methiocarb, methomyl, metolcarb, oxamyl, pirimicarb, propoxur, thiodicarb, thiofanox, triazamate, trimethacarb, XMC và xylylcarb; ở đây đặc biệt ưu tiên, để ứng dụng chống lại ngoại ký sinh trùng, bendiocarb, carbaryl, methomyl, promacyl và propoxur; hoặc

Các hợp chất phosphat hữu cơ, ví dụ, axephat, azamethiphos, azinphos (-metyl, -etyl), cadusafos, chloretoxyfos, chlorfenvinphos, chlormephos, chlorpyrifos (-metyl), coumaphos, xyanophos, demeton-S-metyl, diazinon, dichlorvos/DDVP, dicrotophos, dimethoat, dimetylvinphos, disulfoton, EPN, ethion, ethoprophos, famphur, fenamiphos, fenitrothion, fenthion, fosthiazat, heptenophos, isofenphos, isopropyl O-(metoxyaminothiophosphoryl) salicylat, isoxathion, malathion, mecarbam, methamidophos, methidathion, mevinphos, monocrotophos, naled, omethoat, oxydemeton-metyl, parathion, parathion-metyl, phenthoat, phorat, phosalone, phosmet, phosphamidon, phoxim, pirimiphos (-metyl), profenofos, propetamphos, prothiofos, pyraclofos, pyridaphenthion, quinalphos, sulfotep, tebupirimfos, temephos, terbufos, tetrachlorvinphos, thiometon, triazophos, triclorfon và vamidothion; ở đây đặc biệt ưu tiên, để ứng dụng chống lại ngoại ký sinh trùng, azamethiphos, chlorfenvinphos, chlorpyrifos, coumaphos, cythioat, diazinon (dimpylate), dichlorvos (DDVP), dicrotophos, dimethoat, ethion (diethion), famphur (famophos), fenitrothion, fenthion (MPP), heptenophos, malathion, naled, phosmet (PMP, phtalofos) phoxim, propetamphos, temephos, tetrachlorvinphos (CVMP) và triclorfon/metrifonat.

(In-2) Chất đối kháng kênh clorua cổng GABA, ví dụ các hợp chất clo hữu cơ, ví dụ, bromoxyclen, chlordane và endosulfan (alpha-), heptachlor, lindane và toxaphen; ở đây đặc biệt ưu tiên, để ứng dụng chống lại ngoại ký sinh trùng, endosulfan (alpha-) và lindan; hoặc

Các fiprol (phenylpyrazol), ví dụ, axetoprol, ethiprol, fipronil, pyrafluprol, pyriprol, rizazol; ở đây đặc biệt ưu tiên, để ứng dụng chống lại ngoại ký sinh trùng, fipronil và pyriprol; hoặc

Các arylisoxazolin, arylpyrolin, arylpyrolidin, ví dụ, fluralaner (theo WO2009/2024541, ví dụ 11-1; cả các hợp chất trong WO2012007426, WO2012042006, WO2012042007, WO2012107533, WO2012120135, WO2012165186, WO2012155676, WO2012017359, WO2012127347, WO2012038851, WO2012120399, WO2012156400, WO2012163959, WO2011161130, WO2011073444, WO2011092287, WO2011075591, WO2011157748, WO 2007/075459, WO 2007/125984, WO 2005/085216, WO 2009/002809), afoxolaner (ví dụ trong WO2011149749) và các arylpyrolin có liên quan về mặt cấu trúc (đã biết, ví dụ, từ WO2009/072621, WO 2010020522, WO 2009112275, WO 2009097992, WO 2009072621, JP 2008133273, JP 2007091708), hoặc arylpyrolidines (ví dụ trong WO2012004326, WO2012035011, WO2012045700, WO 2010090344, WO 2010043315, WO 2008128711, JP 2008110971), và các hợp chất từ nhóm gọi là metadiamit (đã biết, ví dụ, từ WO2012020483, WO2012020484, WO2012077221, WO2012069366, WO2012175474, WO2011095462, WO2011113756, WO2011093415, WO2005073165); ở đây đặc biệt ưu tiên, để ứng dụng chống lại ngoại ký sinh trùng, afoxolaner và fluaralaner.

(In-3) Các chất điều biến kênh natri/chất phong bế kênh natri cổng điện thế, ví dụ pyrethroid, ví dụ, acrinathrin, allethrin (d-xis-trans, d-trans), bifenthrin, bioallethrin, bioallethrin S-xyclopentenyl, bioresmethrin, xycloprothrin, cyfluthrin (beta-), cyhalothrin (gamma-, lambda-), cypermethrin (alpha-, beta-, theta-, zeta-), cyphenothrin [đồng phân (1*R*)-*trans*], deltamethrin, dimefluthrin, empenthrin [(*EZ*)-(1*R*) isomer], esfenvalerat, etofenprox, fenpropathrin, fenvalerat, flucythrinat, flumethrin, fluvalinate (tau-), halfenprox, imiprothrin, metofluthrin, permethrin, phenothrin [(1*R*)-trans isomer], prallethrin, profluthrin, pyrethrins (pyrethrum), resmethrin, RU 15525, silafluofen, tefluthrin, tetramethrin [(1*R*) isomer)], tralomethrin, transfluthrin và ZXI 8901; ở đây đặc biệt ưu tiên, để ứng dụng chống lại ngoại ký sinh trùng, các pyrethroid typ I allethrin, bioallethrin, permethrin, phenothrin, resmethrin, tetramethrin và các pyrethroid typ II (alphaxyanopyrethroid) alpha-

cypermethrin, cyfluthrin (beta-), cyhalothrin (lambda-), cypermethrin (alpha-, zeta-), deltamethrin, fenvalerat, flucythrinat, flumethrin, fluvalinat (tau-), và các pyrethroid không chứa este etofenprox và silafluofen; hoặc các hợp chất clo hữu cơ, ví dụ, DDT hoặc metoxychlor. Các thành phần hoạt tính nhóm này rất đặc biệt thích hợp làm thành phần phối trộn, vì chúng có hoạt tính chống tiếp xúc kéo dài và do đó kéo dài phổ hoạt tính để bao gồm thành phần này.

(In-4) Các chất chủ vận thụ thể nicotinergic axetylcholin, ví dụ neonicotinoid, ví dụ, acetamiprid, clothianidin, dinotefuran, imidacloprid, imidaclothin, nitenpyram, thiacloprid, thiamethoxam; ở đây đặc biệt ưu tiên, để ứng dụng chống lại ngoại ký sinh trùng, clothianidin, dinotefuran, imidacloprid, nitenpyram và thiacloprid; hoặc nicotin.

(In-5) Các chất điều biến (chủ vận) thụ thể allosteric axetylcholin, ví dụ spinosyn, ví dụ, spinetoram và spinosad; ở đây đặc biệt ưu tiên, để ứng dụng chống lại ngoại ký sinh trùng, spinosad và spinetoram .

(In-6) Các chất hoạt hóa kênh clorua, ví dụ avermectin/milbemyxin, ví dụ, abamectin, doramectin, emamectin benzoat, eprinomectin, ivermectin, latidectin, lepimectin, milbemyxin oxime, milbemectin, moxidectin và selamectin; indol terpenoid, ví dụ các dẫn xuất axit nodulisporic, đặc biệt là axit nodulisporic A; ở đây đặc biệt ưu tiên, để ứng dụng chống lại ngoại ký sinh trùng, doramectin, eprinomectin, ivermectin, milbemyxin oxime, moxidectin, selamectin và axit nodulisporic A.

(In-7) Các chất tương tự hormon Juvenile, ví dụ hydropren (S-), kinopren, methopren (S-); hoặc fenoxycarb; pyriproxyfen; ở đây đặc biệt ưu tiên, để ứng dụng chống lại ngoại ký sinh trùng, methopren (S-) và pyriproxyfen.

(In-8) Các chất ức chế sự sinh trưởng của ve bét, ví dụ, clofentezin, diflovidazin, hexythiazox, etoxazol; ở đây đặc biệt ưu tiên, để ứng dụng chống lại ngoại ký sinh trùng, etoxazol.

(In-9) Các chất chủ vận thụ thể Slo-1 và latrophilin, ví dụ các depsipeptit vòng, ví dụ, emodepsit và tiền chất PF1022A của nó (theo EP 382173, hợp chất I); ở đây đặc biệt ưu tiên, để ứng dụng chống lại ngoại ký sinh trùng, emodepsit.

(In-10) Các chất ức chế sự phosphoryl hóa oxy hóa, chất bẻ gãy ATP, ví dụ diafenthiuron.

(In-12) Các chất đối kháng thụ thể nicotinergic axetylcholin, ví dụ bensultap, cartap (hydroclorua), thiocylam, và thiosultap (natri).

(In-13) Các chất ức chế sinh tổng hợp chitin, typ 0, ví dụ benzoylure, ví dụ, bistrifluron, chlorfluazuron, diflubenzuron, fluxycloxuron, flufenoxuron, hexaflumuron, lufenuron, novaluron, noviflumuron, teflubenzuron và triflumuron; ở đây đặc biệt ưu tiên, để ứng dụng chống lại ngoại ký sinh trùng, diflubenzuron, fluazuron, lufenuron và triflumuron.

(In-14) Các chất ức chế sinh tổng hợp chitin, typ 1, ví dụ buprofezin.

(In-15) Các chất ức chế lột xác, ví dụ cyromazin và dicyclanil; ở đây đặc biệt ưu tiên, để ứng dụng chống lại ngoại ký sinh trùng, cyromazin và dicyclanil.

(In-16) Chất chủ vận/chất bẻ gãy ecdyson, ví dụ diacylhydrazin, ví dụ, chromafenozit, halofenozit, metoxyfenozit và tebufenozit.

(In-17) Các chất chủ vận octopaminergic, ví dụ amitraz, cymiazol, chlordimeform và demiditraz; ở đây đặc biệt ưu tiên, để ứng dụng chống lại ngoại ký sinh trùng, amitraz, cymiazol và demiditraz.

(In-18) Các chất ức chế vận chuyển electron Complex-III, ví dụ hydrametylnon; acequinocyl; fluacrypyrim.

(In-19) Các chất ức chế vận chuyển electron Complex-I, ví dụ từ nhóm thuốc trừ nhện METI, ví dụ, fenazaquin, fenpyroximate, pyrimidifen, pyridaben, tebufenpyrad, tolfenpyrad; ở đây đặc biệt ưu tiên, để ứng dụng chống lại ngoại ký sinh trùng, fenpyroximate, pyrimidifen và tolfenpyrad;

(In-20) Các chất phong bế kênh natri cổng điện thế, ví dụ indoxacarb và metaflumizon; ở đây đặc biệt ưu tiên, để ứng dụng chống lại ngoại ký sinh trùng, indoxacarb và metaflumizon.

(In-21) Các chất ức chế axetyl-CoA carboxylaza, ví dụ các dẫn xuất axit tetronic, ví dụ, spirodiclofen và spiromesifen; hoặc các dẫn xuất axit tetramic, ví dụ, spirotetramat.

(In-22) Các chất ức chế vận chuyển electron Complex-II, ví dụ cyenopyrafen.

(In-23) Các chất tác động thụ thể ryanodin, ví dụ các diamit, ví dụ, flubendiamit, chlorantraniliprol (Rynaxypyr), cyantraniliprol (Cyazypyr) và cả 3-bromo-N-{2-

bromo-4-clo-6-[(1-xyclopropyletyl) carbamoyl]phenyl}-1-(3-clopyridin-2-yl)-1H-pyrazol-5-carboxamit (theo WO2005/077934) hoặc metyl 2-[3,5-dibromo-2-({[3-bromo-1-(3-clopyridin-2-yl)-1H-pyrazol-5-yl]cacbonyl}amino)benzoyl]-1,2-dimetylhydrazincarboxylat (theo WO2007/043677).

(In-24) Các thành phần hoạt tính khác với cơ chế hoạt động chưa biết rõ, ví dụ azadirachtin, amidoflumet, benzoximat, bifenazat, chinomethionat, cryolit, cyflumetofen, dicofol, fluensulfon (5-clo-2-[(3,4,4-triflobut-3-en-1-yl)sulphonyl]-1,3-thiazol), flufenerim, pyridalyl và pyrifluquinazon; và các chế phẩm khác dựa trên Bacillus firmus (I-1582, BioNeem, Votivo) và các hoạt chất đã biết sau: 4-{[(6-bromopyrid-3-yl)metyl](2-floetyl)amino}furan-2(5H)-on (theo WO 2007/115644), 4-{[(6-flopyrid-3-yl)metyl](2,2-difloetyl)amino}furan-2(5H)-on (theo WO 2007/115644), 4-{[(2-clo-1,3-thiazol-5-yl)metyl](2-floetyl)amino}furan-2(5H)-on (theo WO 2007/115644), 4-{[(6-clopyrid-3-yl)metyl](2-floetyl)amino}furan-2(5H)-on (theo WO 2007/115644), 4-{[(6-clopyrid-3-yl)metyl](2,2-difloetyl)amino}furan-2(5H)-on (theo WO 2007/115644), 4-{[(6-clo-5-flopyrid-3-yl)metyl] (metyl)amino}furan-2(5H)-on (theo WO 2007/115643), 4-{[(5,6-diclopyrid-3-yl)metyl](2-floetyl)amino}furan-2(5H)-on (theo WO 2007/115646), 4-{[(6-clo-5-flopyrid-3-yl)metyl] (xyclopropyl)amino}furan-2(5H)-on (theo WO 2007/115643), 4-{[(6-clopyrid-3-yl)metyl] (xyclopropyl)amino}furan-2(5H)-on (theo EP-A-0 539 588), 4-{[(6-clopyrid-3-yl)metyl] (metyl)amino}furan-2(5H)-on (theo EP-A-0 539 588), [(6-clopyridin-3-yl)metyl](metyl)oxido-λ^4-sulphanylidenxyanamit (theo WO 2007/149134), [1-(6-clopyridin-3-yl)etyl](metyl)oxido-λ^4-sulphanylidenxyanamit (theo WO 2007/149134), [(6-triflometylpyridin-3-yl)metyl](metyl)oxido-λ^4-sulphanylidenxyanamit (theo WO 2007/095229), sulfoxaflor (cũng theo WO 2007/149134), 11-(4-clo-2,6-dimetylphenyl)-12-hydroxy-1,4-dioxa-9-azadispiro [4.2.4.2]tetradec-11-en-10-on (theo WO 2006/089633), 3-(4'-flo-2,4-dimetylbiphenyl-3-yl)-4-hydroxy-8-oxa-1-azaspiro[4.5]dec-3-en-2-on (theo WO 2008/067911), 1-[2-flo-4-metyl-5-[(2,2,2-trifloetyl)sulphinyl]phenyl]-3-(triflometyl)-1H-1,2,4-triazol-5-amin (theo WO 2006/043635), [(3S,4aR,12R,12aS,12bS)-3-[(xyclopropylcacbonyl)oxy]-6,12-dihydroxy-4,12b-dimetyl-11-oxo-9-(pyridin-3-yl)-1,3,4,4a,5,6,6a,12,12a,12b-decahydro-2H,11H-benzo[f]pyrano[4,3-b]chromen-4-yl]metyl xyclopropanecarboxylat (theo WO 2006/129714), 2-xyano-3-(diflometoxy)-

N-etyl-benzenesulphonamit (theo WO 2005/035486), N-[1-(2,3-dimetylphenyl)-2-(3,5-dimetylphenyl)etyl]-4,5-dihydro-2-thiazolamin (theo WO 2008/104503); penigequinolon A (theo EP 2248422 (hợp chất I) và WO 2009/060015 (hợp chất 11).

(In-25) Các chất có tác dụng hiệp đồng thích hợp trong trường hợp sử dụng cùng với các thuốc diệt ngoại ký sinh trùng ở đây bao gồm MGK264 (*N*-octylbixycloheptencarboxamit), piperonyl butoxit (PBO) và verbutin; ở đây đặc biệt ưu tiên piperonyl butoxit và MGK264.

Ngoài các nhóm này, cũng có thể sử dụng các chất chống thấm ngắn hạn trong hỗn hợp hoặc ứng dụng kết hợp. Ví dụ là DEET (N,N-dietyl-3-metylbenzamit), icaridin (axit 1-piperidinecarboxylic), (1S, 20S)-2-metylpiperidinyl-3-xyclohexen-1-carboxamit (SS220), indalon (butyl 3,4-dihydro-2, 2-dimetyl-4-oxo-2H-pyran-6-carboxylat), dihydronepetalacton, nootkaton, IR3535 (este etyl của axit 3-[N-butyl-N-axetyl]-aminopropionic), 2-etylhexan-1,3-diol, (1R,2R,5R)-2-(2-hydroxypropan-2-yl)-5-metyl-xyclohexan-1-ol, dimetyl benzen-1,2-dicarboxylat, axit dodecanoic, undecan-2-on, N,N-dietyl-2-phenylaxetamit và các tinh dầu hoặc các thành phần thực vật khác với hoạt tính chống thấm đã biết, ví dụ borneol, callicarpenal, 1,8-cineol (eucalyptol), carvacrol, b-citronellol, a-copaen, coumarin (hoặc các dẫn xuất tổng hợp của nó theo US20120329832). Icaridin, indalon và IR3535 (este etyl của axit 3-[N-butyl-N-axetyl]-aminopropionic) đặc biệt được ưu tiên để sử dụng chống lại các ngoại ký sinh trùng.

Từ các nhóm (I-1) đến (I-25) nêu trên, ưu tiên các nhóm sau làm thành phần phối trộn: (In-2), (In-3), (In-4), (In-5), (In-6), (In-17), (In-25).

Các ví dụ được đặc biệt ưu tiên về các hoạt chất diệt côn trùng hoặc trừ nhện, các chất có tác dụng hiệp đồng hoặc chất chống thấm làm thành phần phối trộn cho các hợp chất có công thức (I) theo sáng chế là afoxolaner, allethrin, amitraz, bioallethrin, chlothianidin, cyfluthrin (beta-), cyhalothrin (lambda-), cymiazol, cypermethrin (alpha-, zeta-), cyphenothrin, deltamethrin, demiditraz, dinotefuran, doramectin, eprinomectin, etofenprox, fenvalerate, fipronil, fluazuron, flucythrinate, flumethrin, fluralaner, fluvalinat (tau-), icaridin, imidacloprid, ivermectin, MGK264, milbemyxin oxim, moxidectin, nitenpyram, permethrin, phenothrin, piperonyl butoxit,

pyriprol, resmethrin, selamectin, silafluofen, spinetoram, spinosad, tetramethrin, thiacloprid.

Phòng trừ vật trung gian truyền bệnh

Các hợp chất có công thức (I) cũng có thể được sử dụng để phòng trừ vật trung gian truyền bệnh. Trong ngữ cảnh của Sáng chế, vật trung gian truyền bệnh là động vật chân khớp, đặc biệt là côn trùng hoặc nhện, có khả năng truyền mầm bệnh, ví dụ, virut, giun, sinh vật đơn bào và vi khuẩn, từ nguồn (thực vật, động vật, người, v.v.) đến sinh vật chủ. Các mầm bệnh có thể được truyền theo cách cơ học (ví dụ bệnh mắt hột do ruồi không đốt) đến sinh vật chủ hoặc sau khi tiêm (ví dụ các ký sinh trùng sốt rét do muỗi) vào sinh vật chủ.

Ví dụ về vật trung gian truyền bệnh và các bệnh hoặc mầm bệnh mà chúng truyền là:

1) Muỗi

- Muỗi Anopheles: bệnh sốt rét, bệnh giun chỉ;

- Muỗi Culex: Bệnh viêm não Nhật Bản, bệnh giun chỉ, các bệnh do virut khác, truyền giun;

- Muỗi Aedes: bệnh sốt vàng, bệnh sốt xuất huyết, bệnh giun chỉ, các bệnh do virut khác;

- Muỗi Simuliidae: truyền giun, cụ thể là Onchocerca volvulus;

2) Rận: nhiễm trùng da, sốt phát ban hấy rận;

3) Bọ chét: bệnh dịch hạch, sốt phát ban bọ chuột;

4) Ruồi: bệnh ngủ (trypanosomiasis); bệnh tả, các bệnh do vi khuẩn khác;

5) Bét: bệnh nhiễm bét, sốt phát ban chấy rận, phát ban do rickettsia, bệnh sốt thỏ, bệnh viêm não Saint Louis, bệnh viêm não do ve (tick-borne encephalitis - TBE), bệnh sốt xuất huyết Crimean–Congo, Bệnh Borrelia;

6) Ve: Bệnh Borellia như Borrelia duttoni, bệnh viêm não do ve, bệnh sốt Q (Coxiella burnetii), bệnh Babesia (Babesia canis canis).

Ví dụ về các vật trung gian truyền bệnh trong ngữ cảnh của sáng chế là côn trùng, ví dụ rệp, ruồi, rầy lá hoặc bọ trĩ, mà có thể truyền các virut gây bệnh ở thực vật cho cây. Các vật trung gian truyền bệnh khác có thể truyền virut gây bệnh ở thực vật là nhện đỏ, rận, bọ hung và giun tròn.

Ví dụ tiếp theo về các vật trung gian truyền bệnh trong ngữ cảnh của sáng chế là côn trùng và nhện như muỗi, đặc biệt là các chi Aedes, Anopheles, ví dụ A. gambiae, A. arabiensis, A. funestus, A. dirus (sót rét) và Culex, rận, bọ chét, ruồi, bét và ve, mà có thể truyền các mầm bệnh cho động vật và/hoặc người.

Cũng có thể phòng trừ các vật trung gian truyền bệnh nếu các hợp chất có công thức (I) phá vỡ được tính kháng.

Các hợp chất có công thức (I) thích hợp để sử dụng trong việc ngăn ngừa các bệnh và/hoặc mầm bệnh truyền bởi vật trung gian truyền bệnh. Do đó, khía cạnh tiếp theo của sáng chế là việc sử dụng các hợp chất có công thức (I) để phòng trừ các vật trung gian truyền bệnh, ví dụ trong nông nghiệp, làm vườn, lâm nghiệm, trong vườn và các tiện ích thư giãn khác, và cả trong việc bảo vệ vật liệu và sản phẩm được bảo quản.

Bảo vệ vật liệu công nghiệp

Các hợp chất có công thức (I) thích hợp để bảo vệ vật liệu công nghiệp chống lại sự tấn công hoặc phá hủy của côn trùng, ví dụ từ bộ Coleoptera, Hymenoptera, Isoptera, Lepidoptera, Psocoptera và Zygentoma.

Vật liệu công nghiệp trong ngữ cảnh này được hiểu là các vật liệu vô tri, như tốt hơn là chất dẻo, chất kết dính, hồ, giấy và thẻ, da, gỗ, sản phẩm gỗ đã xử lý và các chế phẩm phủ. Việc sử dụng sáng chế để bảo vệ gỗ là đặc biệt được ưu tiên.

Theo một phương án tiếp theo, các hợp chất có công thức (I) được sử dụng cùng với ít nhất một thuốc diệt côn trùng và/hoặc ít nhất một thuốc diệt nấm khác.

Theo một phương án tiếp theo, các hợp chất có công thức (I) ở dạng thuốc trừ sâu dùng được luôn, nghĩa là chúng có thể được đưa lên vật liệu cần quan tâm mà không cần thay đổi gì nữa. Các thuốc diệt côn trùng hoặc thuốc diệt nấm thích hợp khác là các chất đã nêu trên đây.

Bất ngờ là, cũng đã phát hiện rằng các hợp chất có công thức (I) có thể được sử dụng để bảo vệ các đối tượng tiếp xúc với nước mặn hoặc nước lợ, đặc biệt là tàu thủy, sàng, lưới, công trình xây dựng, hệ thống thả neo và các hệ thống phát tín hiệu, chống lại mảng bám. Cũng có thể sử dụng các hợp chất có công thức (I), một mình hoặc kết hợp với các thành phần hoạt tính khác, như các tác nhân chống tạo mảng bám.

Phòng trừ động vật gây hại trong lĩnh vực vệ sinh

Các hợp chất có công thức (I) thích hợp để phòng trừ động vật gây hại trong lĩnh vực vệ sinh. Cụ thể hơn, sáng chế có thể được sử dụng trong lĩnh vực gia đình, trong lĩnh vực vệ sinh và trong việc bảo vệ sản phẩm bảo quản, cụ thể là để phòng trừ côn trùng, nhện và bét gặp phải trong các không gian đóng, ví dụ nhà ở, nhà xưởng, văn phòng, cabin của phương tiện giao thông. Để phòng trừ động vật gây hại, các hợp chất có công thức (I) được sử dụng một mình hoặc kết hợp với các thành phần hoạt tính và/hoặc các chất phụ trợ khác. Tốt hơn nếu chúng được sử dụng trong sản phẩm diệt côn trùng trong nhà. Các hợp chất có công thức (I) hữu hiệu chống lại các loài mẫn cảm và kháng, và chống lại tất cả các giai đoạn phát triển.

Các sinh vật gây hại này bao gồm, ví dụ, sinh vật gây hại từ nhóm Arachnida, từ các bộ Scorpiones, Araneae và Opiliones, từ các lớp Chilopoda và Diplopoda, từ lớp Insecta bộ Blattodea, từ các bộ Coleoptera, Dermaptera, Diptera, Heteroptera, Hymenoptera, Isoptera, Lepidoptera, Phthiraptera, Psocoptera, Saltatoria hoặc Orthoptera, Siphonaptera và Zygentoma và từ lớp Malacostraca bộ Isopoda.

Việc ứng dụng được thực hiện, ví dụ, trong sol khí, các sản phẩm phun không có áp, ví dụ phun bằng bơm và phun sương, các hệ thống phun mù tự động, máy tạo mù, bọt, gel, các sản phẩm bay hơi với viên nén bay hơi làm từ xenluloza hoặc chất dẻo, các chất lỏng bay hơi, gel và các màng bay hơi, các chất bay hơi điều khiển bằng cánh quạt, các hệ bay hơi không dùng năng lượng, hoặc thụ động, giấy diệt bướm đêm, túi diệt bướm đêm và gel diệt bướm đêm, dưới dạng hạt mịn hoặc bụi, trong bả để rắc hoặc trong các hộp bả.

Quy trình điều chế

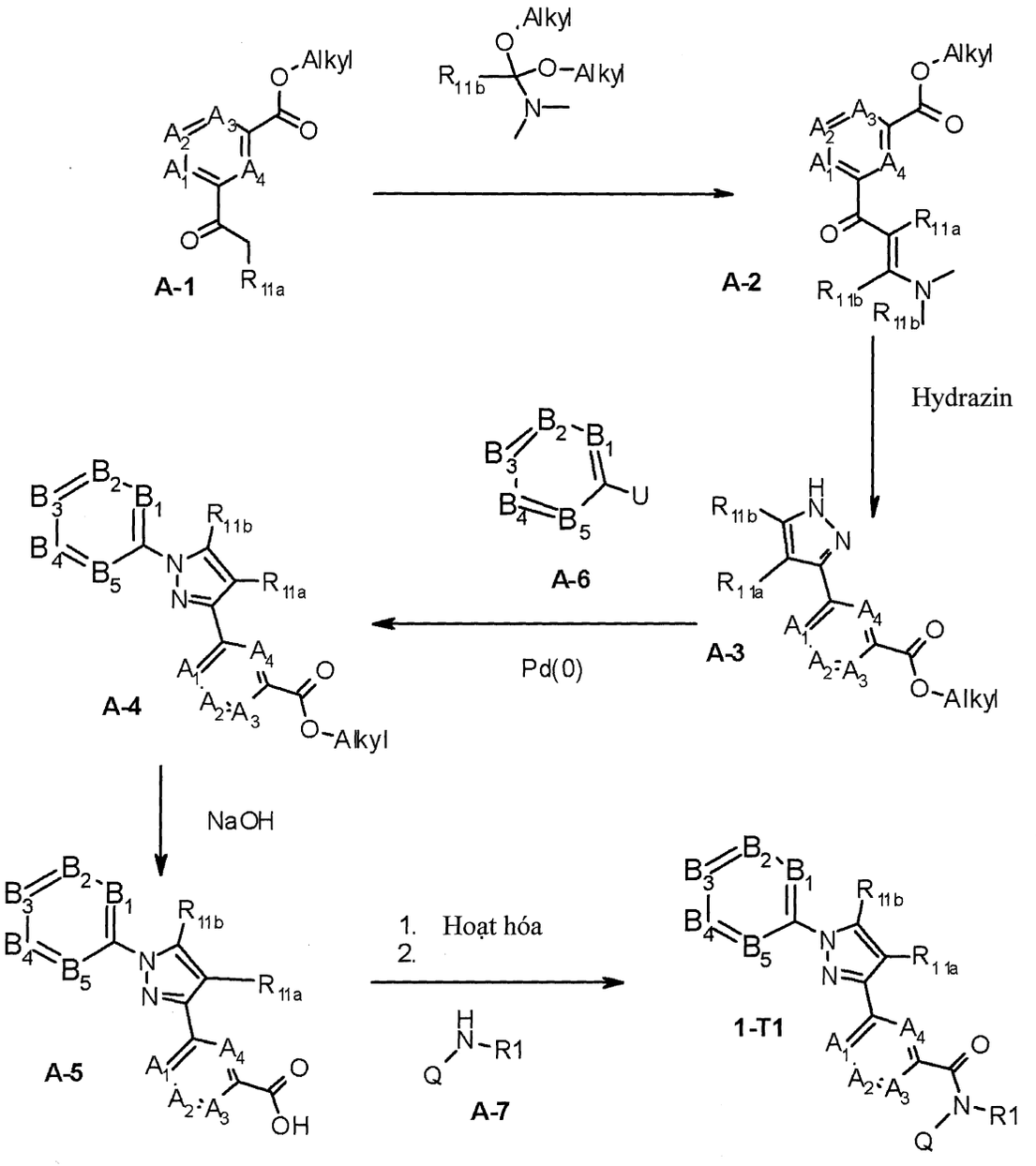
Các hợp chất theo sáng chế có thể được điều chế bằng các phương pháp thông thường mà người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực này đã biết.

Các hợp chất có công thức cấu trúc (I-T1) và (I-T2) có thể được điều chế bằng các phương pháp đã được mô tả trong tài liệu cho các hợp chất tương tự:

Quy trình I-T1

Các hợp chất có công thức cấu trúc (I-T1) có thể được điều chế bằng quy trình được đưa ra trong Sơ đồ phản ứng 1.

Sơ đồ phản ứng 1:



Các nhóm A_1-A_4, B_1-B_5, alkyl, Q, R^1 và R^{11} mỗi nhóm là như được xác định trên đây. U là, ví dụ, brom, iot hoặc triflat. Các hợp chất ban đầu có công thức cấu trúc (A-1) (ví dụ WO 2004/099146, p. 75-76) và (A-7) (ví dụ US 5,739,083 trang 10, US

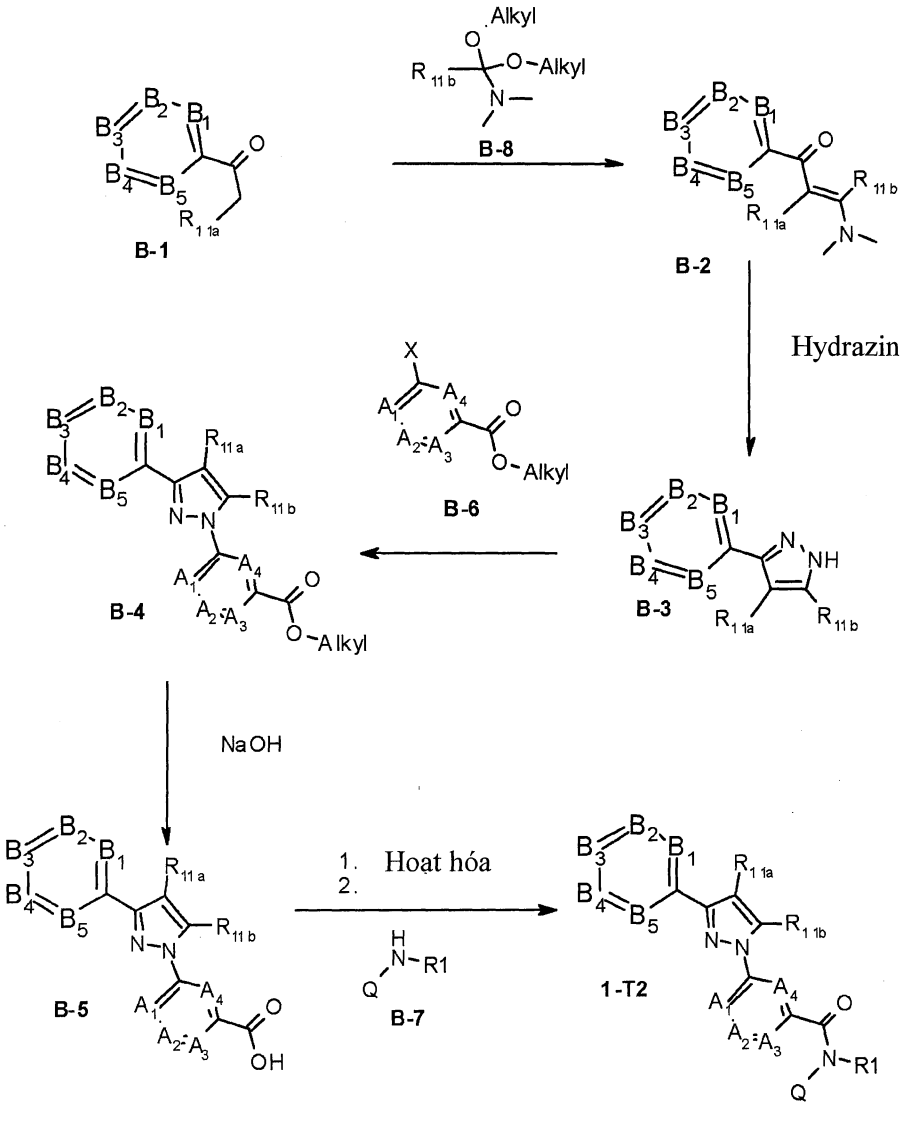
2003/187233A1, p. 6) là đã biết hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết.

Các hợp chất có công thức chung (A-2) có thể được điều chế tương tự các phương pháp theo tài liệu từ các hợp chất có công thức chung (A-1) và các carboxamit axetal (B-8) (ví dụ WO 2013/009791, p. 50, Ví dụ 43; WO 2004/099146, p. 75-76). Các hợp chất có công thức chung (A-3) có thể được điều chế tương tự các phương pháp theo tài liệu từ các hợp chất có công thức chung (A-2) và hydrazin (ví dụ WO 2013/009791, p. 50, Ví dụ 43; WO 2004/099146, p. 75-76). Các hợp chất có công thức chung (A-4) có thể được điều chế tương tự các phương pháp theo tài liệu từ các hợp chất có công thức chung (A-3) và (A-6) (ví dụ WO 2013/009791, p. 50, Ví dụ 44). Các hợp chất có công thức chung (A-5) có thể được điều chế tương tự như các quy trình theo tài liệu bằng cách thủy phân este từ các hợp chất có công thức chung (A-4) (xem, ví dụ, WO 2010/051926 hoặc WO 2010/133312). Các hợp chất có công thức chung (I-T1) theo sáng chế có thể được điều chế tương tự như các phương pháp kết hợp peptit theo tài liệu từ các nguyên liệu ban đầu (A-5) và (A-7) (ví dụ WO 2010/051926 hoặc WO 2010/133312).

Quy trình I-T2

Các hợp chất có công thức cấu trúc (I-T2) có thể được điều chế bằng quy trình được đưa ra trong Sơ đồ phản ứng 2.

Sơ đồ phản ứng 2:

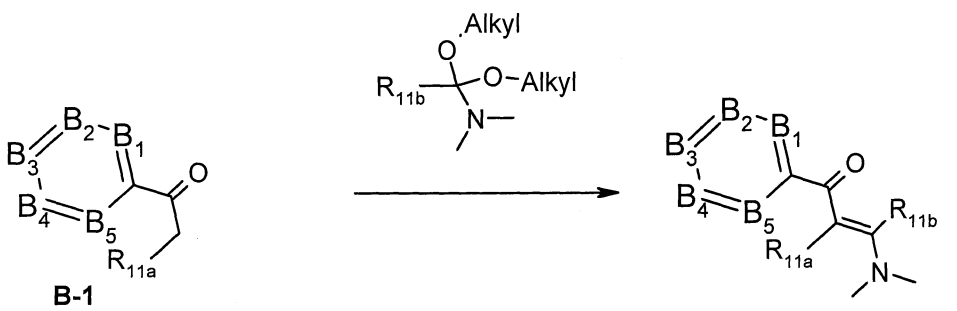


Các nhóm A_1 to A_4, B_1 to B_5, alkyl, Q, R^1 và R^{11} mỗi nhóm là như được xác định trên đây. X là, ví dụ, Cl, Br, I hoặc axit boronic hoặc gốc este boronic. Các hợp chất ban đầu có công thức cấu trúc (B-1) (ví dụ Filler, Robert; Kong, Zhengrong; Zhang, Zhaoxu; Sinha, Arun Kr.; Li, Xiaofang Journal of Fluorine Chemistry, 80 (1996) p. 71 – 76; US2003/187233, p. 14, Ví dụ 21) và (B-6) là đã biết hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết.

Các hợp chất có công thức chung (B-2) có thể được điều chế tương tự các phương pháp theo tài liệu từ các hợp chất có công thức chung (B-1) và các carboxamit axetal (B-8) (ví dụ WO 2006/044505, Hợp chất 60, Phần A; WO 2012/4604, Hợp chất trung gian 2). Các hợp chất có công thức chung (B-3) có thể được điều chế tương tự các phương pháp theo tài liệu từ các hợp chất có công thức chung (B-2) và hydrazin

(ví dụ WO 2013/009791, p. 50, Ví dụ 43; WO 2004/099146, p. 75-76). Các hợp chất có công thức chung (B-4) có thể được điều chế tương tự các phương pháp theo tài liệu từ các hợp chất có công thức chung (B-3) và (B-6) (ví dụ WO 2013/009791, p. 50, Ví dụ 44, X = Br). Các hợp chất có công thức chung (B-5) có thể được điều chế tương tự như các quy trình theo tài liệu bằng cách thủy phân este từ các hợp chất có công thức chung (B-4) (ví dụ WO 2010/051926 hoặc WO 2010/133312). Các hợp chất có công thức chung (I-T1) theo sáng chế có thể được điều chế tương tự như các phương pháp kết hợp peptit theo tài liệu từ các nguyên liệu ban đầu (B-5) và (B-7) (ví dụ WO 2010/051926 hoặc WO 2010/133312).

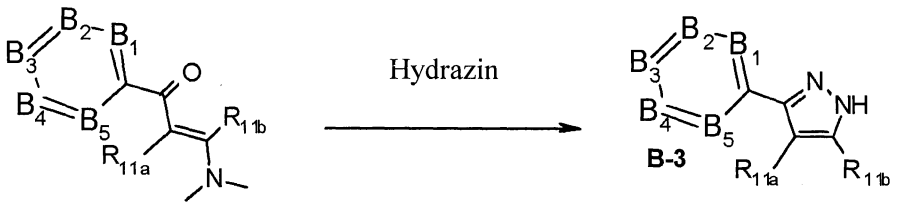
Giai đoạn 1 Dialkylaminoalkenyl hóa



(B-1) (B-8) (B-2)

Các hợp chất có công thức chung (B-2) có thể được điều chế tương tự các phương pháp theo tài liệu từ các nguyên liệu ban đầu có công thức cấu trúc (B-1) và (B-8). Các nhóm B^1-B^5, alkyl và R^{11} mỗi nhóm là như được xác định trên đây. Các hợp chất ban đầu có công thức cấu trúc (B-1) (ví dụ Filler, Robert; Kong, Zhengrong; Zhang, Zhaoxu; Sinha, Arun Kr.; Li, Xiaofang Journal of Fluorine Chemistry, 80 (1996) p. 71 – 76; US2003/187233, p. 14, Ví dụ 21 [0294], US5739083, Ví dụ 6) là đã biết hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết. Phản ứng được tiến hành bằng cách cho các hợp chất (B-1) phản ứng với các hợp chất (B-8) trong các điều kiện đã biết theo tài liệu cho các phản ứng tương tự (ví dụ EP1204323, p. 25, Ví dụ 13).

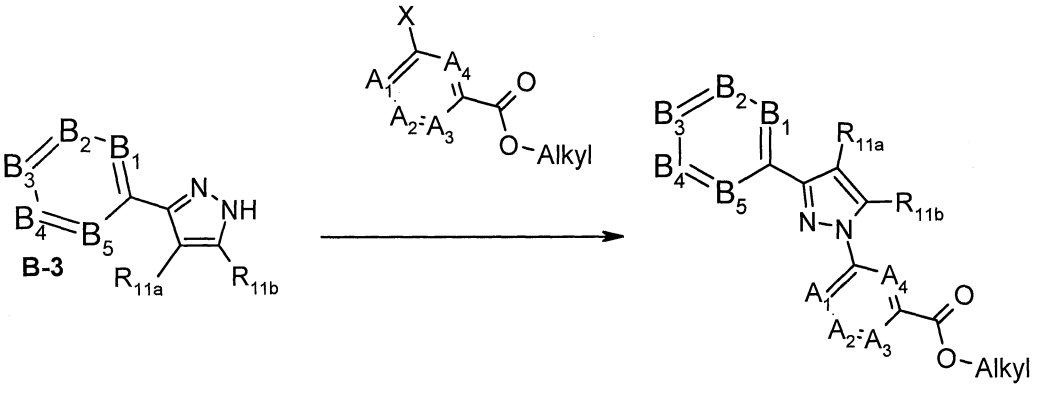
Giai đoạn 2 Đóng vòng pyrazol



(B-2) (B-3)

Các hợp chất có công thức chung (B-2) có thể được điều chế tương tự các phương pháp theo tài liệu từ các nguyên liệu ban đầu có công thức cấu trúc (B-2) và hydrazin. Các nhóm B^1-B^5 và R^{11} mỗi nhóm là như được xác định trên đây. Việc điều chế các hợp chất ban đầu có công thức cấu trúc (B-2) được mô tả trên đây. Phản ứng được tiến hành bằng cách cho các hợp chất (B-2) phản ứng với hydrazin trong các điều kiện đã biết theo tài liệu cho các phản ứng tương tự (EP1382603, Ví dụ 3, p. 43)

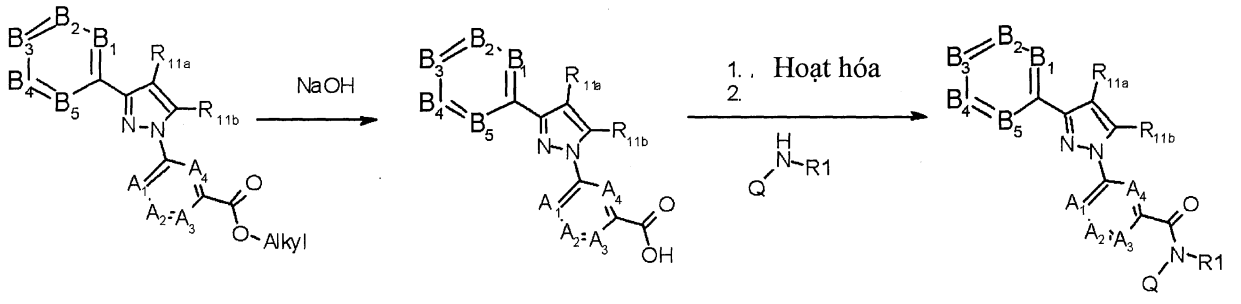
Giai đoạn 3 Kết hợp aryl



(B-3) (B-6) (B-4)

Các hợp chất có công thức chung (B-4) có thể được điều chế tương tự các phương pháp theo tài liệu từ các nguyên liệu ban đầu có công thức cấu trúc (B-3) và (B-6). Các nhóm A^1-A^4, B^1-B^5, alkyl, R^1 và R^{11} mỗi nhóm là như được xác định trên đây. X là axit boronic hoặc gốc este boronic. Việc điều chế các hợp chất ban đầu có công thức cấu trúc (B-3) được mô tả trên đây. Các hợp chất có công thức chung (B-6) có bán trên thị trường hoặc có thể được điều chế bằng các quy trình mà người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực này đã biết. Phản ứng được tiến hành trong các điều kiện đã biết theo tài liệu cho các phản ứng tương tự (WO2009140342, p. 96).

Giai đoạn 4, 5 Thủy phân, amit hóa



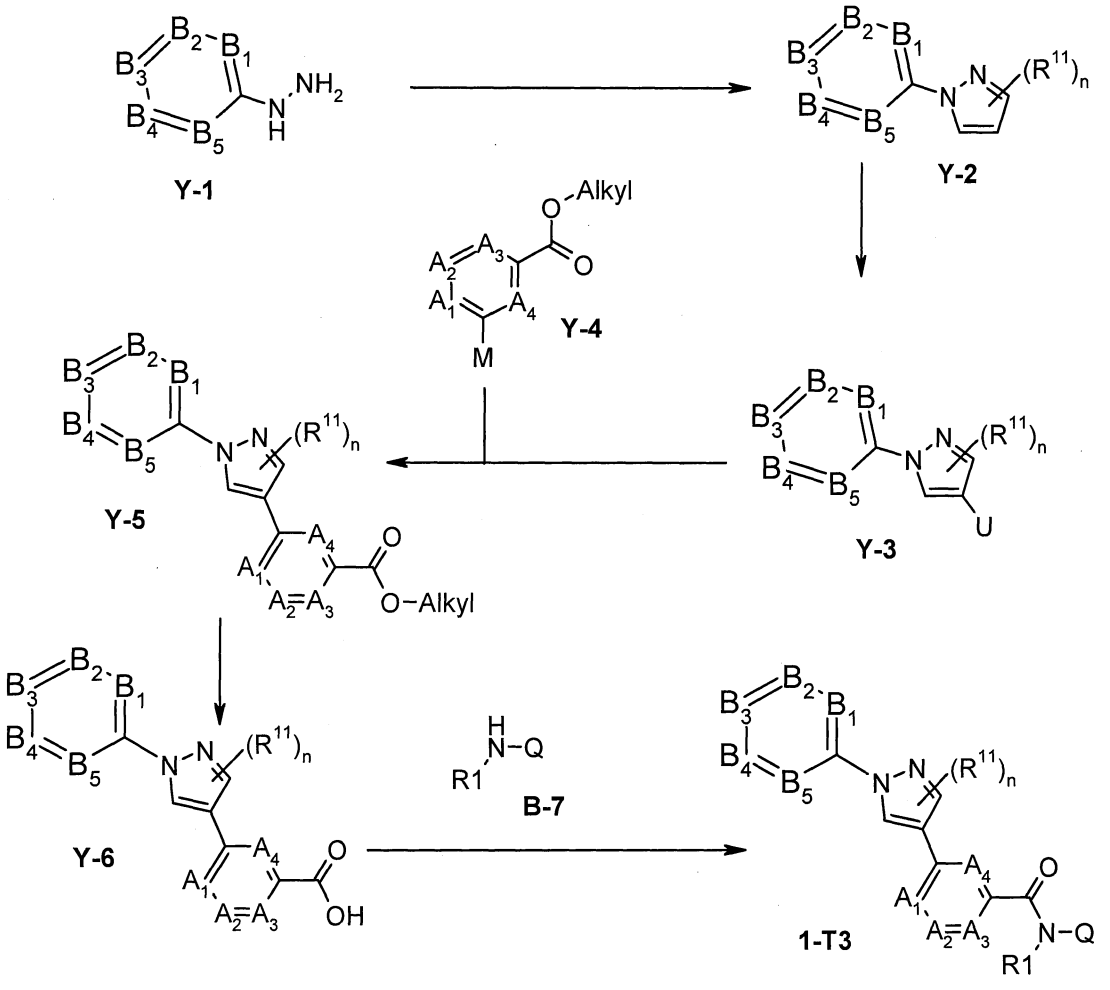
(B4) (B5) (B7) (I-T2)

Các hợp chất có công thức chung (I-T2) theo sáng chế có thể được điều chế tương tự như các phương pháp kết hợp peptit theo tài liệu từ các nguyên liệu ban đầu (B5) và (B7) [WO2010-051926; WO2010-133312]. Các hợp chất có công thức chung (B5) có thể được điều chế tương tự như các quy trình theo tài liệu bằng cách thủy phân este từ các hợp chất có công thức chung (B4) [WO2010-051926; WO2010-133312]. Các nhóm A^1-A^4, B^1-B^5, alkyl, Q, R^1 và R^{11} mỗi nhóm là như được xác định trên đây. Việc điều chế các hợp chất có công thức cấu trúc (B-7) được mô tả trên đây.

Quy trình I-T3

Các hợp chất có công thức cấu trúc (I-T3) có thể được điều chế bằng quy trình được đưa ra trong Sơ đồ phản ứng 3a.

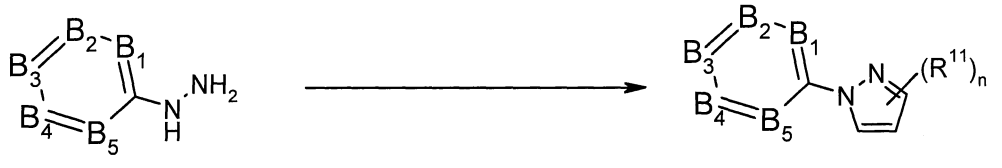
Sơ đồ phản ứng 3a



Các nhóm A_1 to A_4, B_1 to B_5, alkyl, Q, R^1, n và R^{11} mỗi nhóm là như được xác định trên đây. M là, ví dụ, axit boronic, este boronic hoặc trifloboronat. U là, ví dụ, brom, iot hoặc triflat. X là, ví dụ, Cl, Br, I.

Giai đoạn 1 Pyrazol

Giai đoạn 1 của quy trình điều chế các hợp chất theo sáng chế (1-T3):



Y-1 Y-2

Các hợp chất có công thức chung (Y-2) theo sáng chế có thể được điều chế tương tự các phương pháp theo tài liệu từ các nguyên liệu ban đầu có công thức cấu trúc (Y-1). Các nhóm B_1-B_5 và R^{11} mỗi nhóm là như được xác định trên đây. Các hợp

chất ban đầu có công thức cấu trúc (Y1) là đã biết hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết. Các ví dụ bao gồm [2,6-diclo-4-(triflometyl)phenyl]hydrazin, [3-clo-5-(triflometyl)-2-pyridyl]hydrazin, [2,6-diclo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl) etyl]phenyl]hydrazin, [2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl] hydrazin, [2-metyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometyl)phenyl] hydrazin hoặc [2-clo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometyl)phenyl] hydrazin. Chúng có thể được điều chế, ví dụ, bằng các phương pháp được mô tả trong US 2003/187233, p. 13; Haga, Takahiro et al., Heterocycles, 22 (1984), p. 117-124.

Giai đoạn 2 Iodopyrazol

Giai đoạn 2 của quy trình điều chế các hợp chất theo sáng chế (1-T3):

Y-2 Y-3

Các nhóm B_1-B_5, n và R^{11} mỗi nhóm là như được xác định trên đây. U là, ví dụ, brom hoặc iot.

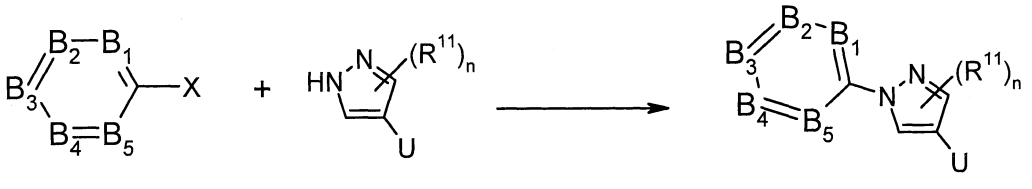
Các hợp chất có công thức cấu trúc (Y-3) là, ví dụ, 1-(2,6-diclo-4-triflometylphenyl)-4-iodopyrazol, 3-clo-2-(4-iodopyrazol-1-yl)-5-(triflometyl)pyridin (CAS RN: 8611-89-2), 1-(2,6-diclo-4-heptafloisopropylphenyl)-4-iodopyrazol, 1-(2,6-dimetyl-4-heptafloisopropylphenyl)-4-iodopyrazol, 1-[2-metyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometyl)phenyl]-4-iodopyrazol, 1-[2-clo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometyl)phenyl]-4-iodopyrazol hoặc 1-[2-etyl-6-metyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]-4-iodopyrazol.

Các hợp chất có công thức chung (Y-3) theo sáng chế được điều chế bằng cách cho các pyrazol có công thức cấu trúc (Y-2) phản ứng với các tác nhân halogen hóa. Các nhóm B^1 đến B^5 và R^{11} mỗi nhóm là như được xác định trên đây. Các hợp chất halogen hóa thích hợp mà người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực này đã biết, ví dụ clo, brom, iot N-closucxinimit, N-bromsucxinimit, N-iodosucxinimit, 1,3-diclo-5,5-dimetylhydantoin, 1,3-dibromo-5,5-dimetylhydantoin, natri hypoclorit và iot

monoclorua. Ưu tiên việc sử dụng brom, iot và iodosucxinimit. Có thể có lợi nếu tiến hành phản ứng với sự có mặt của chất oxy hóa, ví dụ, hydro peroxit. Phản ứng tuân theo các điều kiện theo tài liệu, ví dụ Guo Li et al., Tetrahedron Letters 48 (2007), 4595-4599; Mary M. Kim et al., Tetrahedron Letters 49 (2008), 4026-4028.

Cách kết hợp với pyrazol khác

Theo cách khác, các hợp chất có công thức cấu trúc Y-3 cũng có thể được điều chế bằng các phương pháp theo tài liệu qua kết hợp trực tiếp iodopyrazol với các aryl halogenua thích hợp (ví dụ Sammelson, Robert E. et al., J. of Organic Chemistry, 68 (2003), 8075-8079).



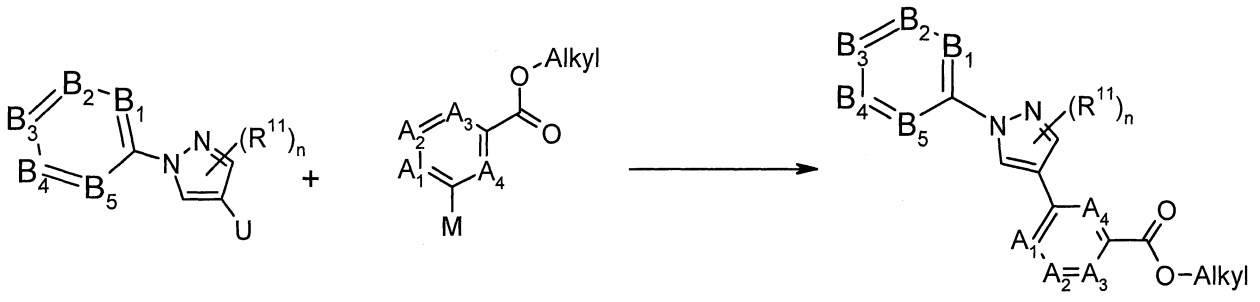
(Y-8) (Y-9) (Y-3)

Các nhóm B_1 to B_5, n và R^{11} mỗi nhóm là như được xác định trên đây. X là, ví dụ, a halogen. U là, ví dụ, brom, iot hoặc triflat.

Các hợp chất ban đầu có công thức cấu trúc (Y-8) là đã biết hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết. Các ví dụ bao gồm 2-bromo-1,3-diclo-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]benzen, 2-bromo-1,3-dimetyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]benzen, 2-bromo-1-etyl-3-metyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl) etyl]benzen, 2-bromo-1-clo-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-3-(triflometyl) benzen, 2-bromo-1-metyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-3-(triflometyl)benzen, 2-bromo-1-clo-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-3-(triflometoxy)benzen, 2-bromo-1-metyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-3-(triflometoxy)benzen. Chúng có thể được điều chế, ví dụ, bằng các phương pháp được mô tả trong EP1253128, trang 8-10.

Giai đoạn 3 Kết hợp axit boronic

Giai đoạn 3 của quy trình điều chế các hợp chất theo sáng chế (1-T3):

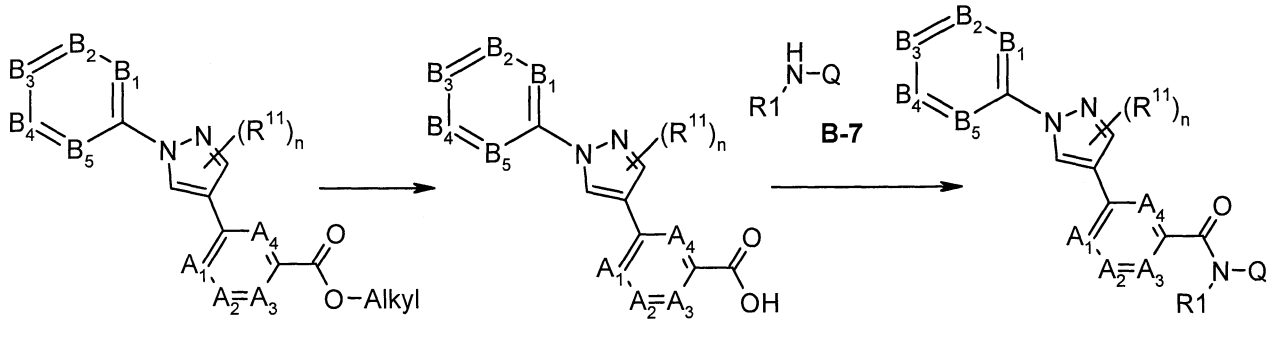


(Y-3) (Y-4) (Y-5)

Các nhóm A_1 to A_4, B_1 to B_5, alkyl, n và R^{11} mỗi nhóm là như được xác định trên đây. U là, ví dụ, brom, iot hoặc triflat khi M là axit boronic, este boronic hoặc trifloboronat; hoặc U là, ví dụ, axit boronic, este boronic hoặc trifloboronat khi M là brom, iot hoặc triflat.

Các hợp chất có công thức chung (Y-5) theo sáng chế có thể được điều chế bằng các phương pháp theo tài liệu, bằng các phản ứng có xúc tác paladi từ các chất đồng phản ứng (Y-3) và (Y-4) (ví dụ WO 2005/040110 hoặc WO 2009/089508). Các hợp chất có công thức chung (Y-4) có bán trên thị trường hoặc có thể được điều chế bằng các quy trình mà người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực này đã biết.

Giai đoạn 4, 5 Thủy phân, amit hóa



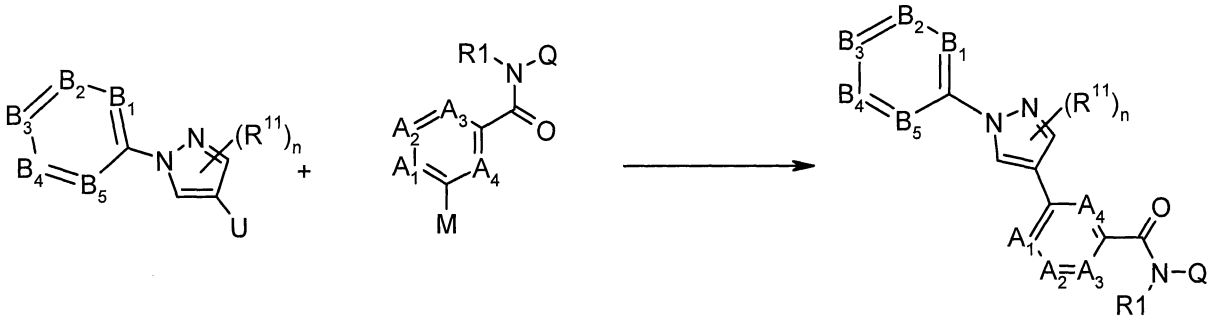
(Y-5) (Y-6) (I-T3)

Các hợp chất có công thức chung (I-T3) theo sáng chế có thể được điều chế tương tự như các phương pháp kết hợp peptit theo tài liệu từ các nguyên liệu ban đầu (Y-6) và (Y-7) (ví dụ WO 2010/051926 hoặc WO 2010/133312). Các hợp chất có công thức chung (Y-6) có thể được điều chế tương tự như các quy trình theo tài liệu bằng cách thủy phân este từ các hợp chất có công thức chung (Y-5) (ví dụ WO 2010/051926 hoặc WO 2010/133312). Các nhóm A_1 to A_4, B_1 to B_5, alkyl, Q, R^1 và R^{11} mỗi nhóm là như được xác định trên đây.

Giai đoạn 3 cách khác: Kết hợp với amit

Theo cách khác, các hợp chất theo sáng chế (I-T3) có thể được điều chế bằng quy trình điều chế chung 3b.

Sơ đồ phản ứng 3b



(Y-3) (Y-10) (I-T3)

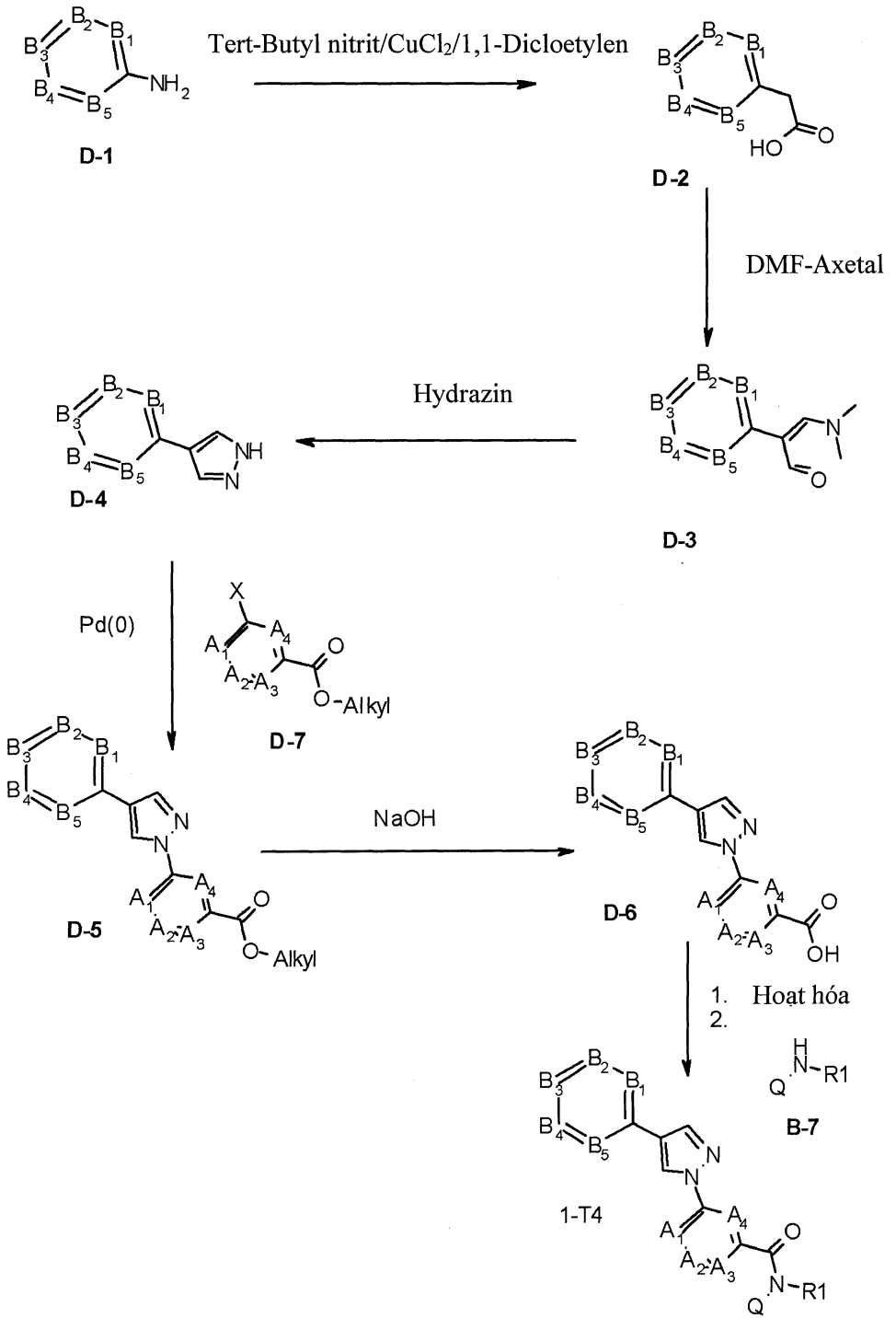
Các nhóm A_1 to A_4, B_1 to B_5, alkyl, Q, R^1, n và R^{11} mỗi nhóm là như được xác định trên đây. U là brom, iot hoặc triflat khi M là axit boronic, este boronic hoặc trifloboronat. U là axit boronic, este boronic hoặc trifloboronat khi M là brom, iot hoặc triflat.

Các hợp chất có công thức chung (I-T3) theo sáng chế có thể được điều chế bằng các phương pháp theo tài liệu, bằng các phản ứng có xúc tác paladi từ các chất đồng phản ứng (Y-3) và (Y-10) (ví dụ WO 2005/040110 hoặc WO 2009/089508). Các hợp chất có công thức chung (Y-10) có bán trên thị trường hoặc có thể được điều chế bằng các quy trình mà người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực này đã biết. Việc điều chế các hợp chất có công thức cấu trúc (Y-3) đã được mô tả trên đây.

Quy trình I-T4

Các hợp chất có công thức cấu trúc (I-T4) có thể được điều chế bằng quy trình được đưa ra trong Sơ đồ phản ứng 4.

Sơ đồ phản ứng 4



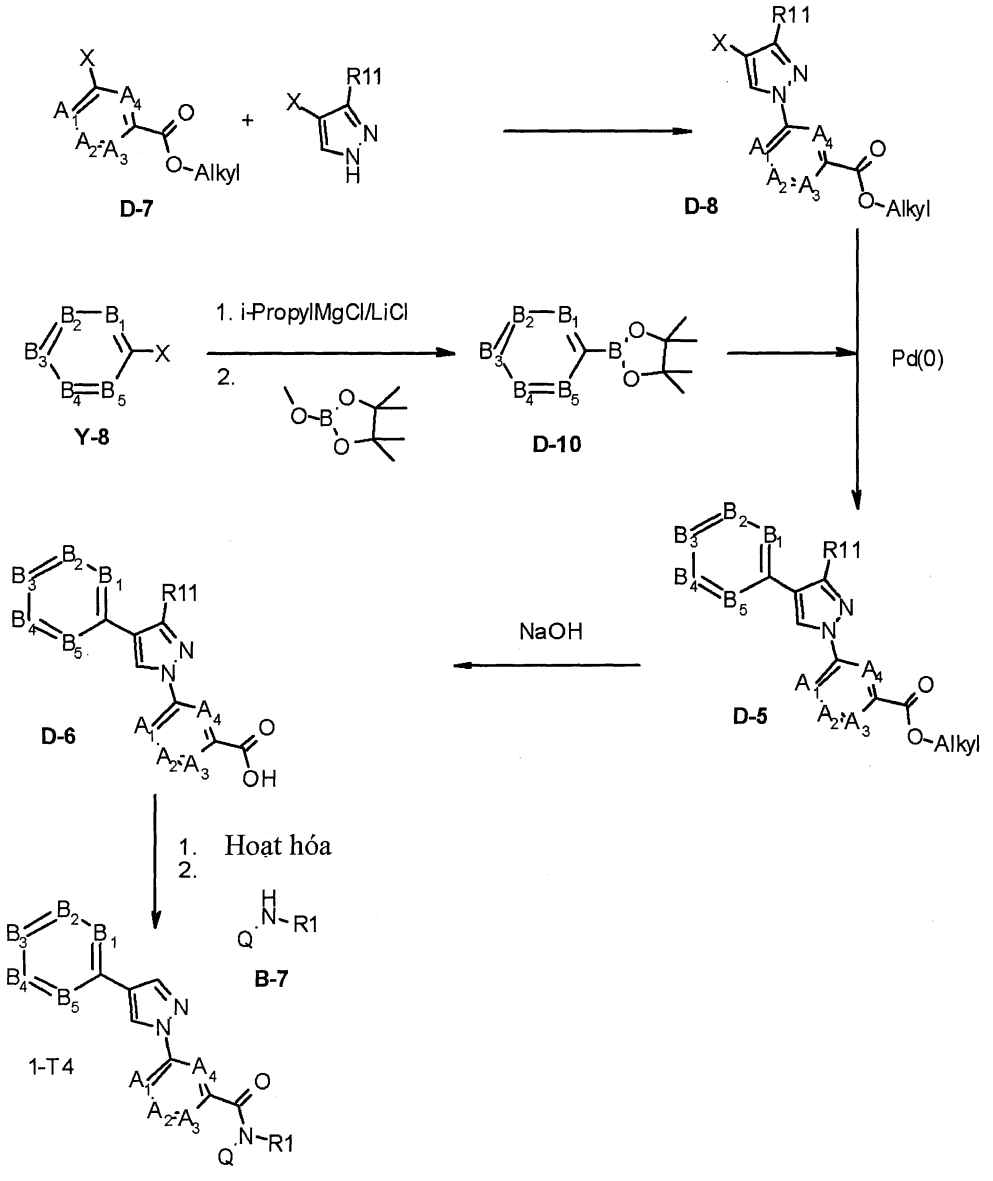
Các nhóm A_1 đến A_4, B_1 đến B_5, alkyl, Q và R^1 mỗi nhóm là như được xác định trên đây. X là Cl, Br, I. Các hợp chất ban đầu có công thức cấu trúc (D-1) (ví dụ EP2319830, p. 330) và (D-7) là đã biết hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết.

Các phản ứng có thể được tiến hành bằng các quy trình được mô tả trong tài liệu, ví dụ WO 2012/149236, Majumder, Supriyo et al., Advanced Synthesis and Catalysis, 351 (2009), 2013-2023, hoặc US 5,061,705.

Các hợp chất có công thức chung (D2) có thể được điều chế tương tự các phương pháp theo tài liệu từ các hợp chất có công thức chung (D1) (ví dụ WO2008148868A1, p. 87). Các hợp chất có công thức chung (D3) có thể được điều chế tương tự như các phản ứng theo tài liệu từ các hợp chất có công thức chung (D2) và muối imini (ví dụ Knorr, Rudolf; Loew, Peter; Hassel, Petra; Bronberger, Hildegard Journal of Organic Chemistry, 49 (1984) p. 1288-1290). Các hợp chất có công thức chung (D4) có thể được điều chế tương tự các phương pháp theo tài liệu từ các hợp chất có công thức chung (D3) và hydrazin (ví dụ WO2008080969 A1, p. 102-103, Ví dụ 104). Các hợp chất có công thức chung (D5) có thể được điều chế tương tự các phương pháp theo tài liệu từ các hợp chất có công thức chung (D4) và (D7) (ví dụ WO2013009791, p. 50, Ví dụ 44). Các hợp chất có công thức chung (D6) có thể được điều chế tương tự như các quy trình theo tài liệu bằng cách thủy phân este từ các hợp chất có công thức chung (D5) [WO2010-051926; WO2010-133312]. Các hợp chất có công thức chung (I-T4) theo sáng chế có thể được điều chế tương tự như các phương pháp kết hợp peptit theo tài liệu từ các nguyên liệu ban đầu (D6) và (D8) [WO2010-051926; WO2010-133312].

Các hợp chất có công thức cấu trúc (I-T4) theo cách khác có thể được điều chế bằng quy trình được đưa ra trong Sơ đồ phản ứng 5.

Sơ đồ phản ứng 5:

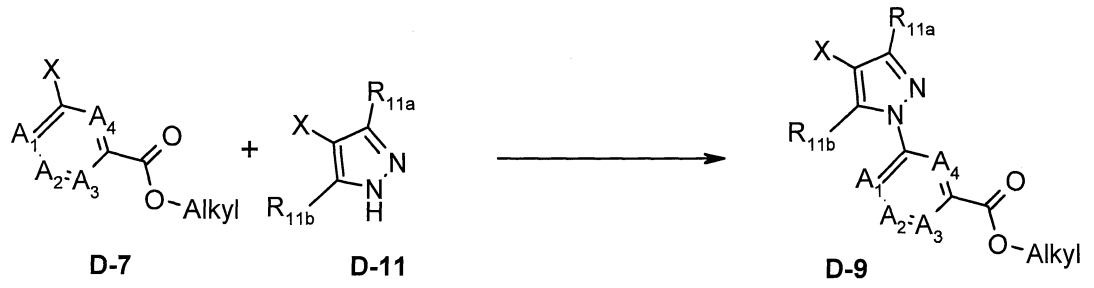


The A_1 to A_4, B_1 to B_5, alkyl, Q, R^1 và R^{11} radicals mỗi nhóm là as defined herein. X is Cl, Br, I. Các hợp chất ban đầu có công thức cấu trúc (D-7), (D-9) và (D-11) (ví dụ EP1253128, p. 8-10) là đã biết, và một số có bán trên thị trường hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết.

Các phản ứng có thể được tiến hành bằng các quy trình được mô tả trong tài liệu:

Giai đoạn 1 Kết hợp pyrazol

Giai đoạn 1 của quy trình điều chế các hợp chất theo sáng chế (I-T4):



D-7 D-11 D-9

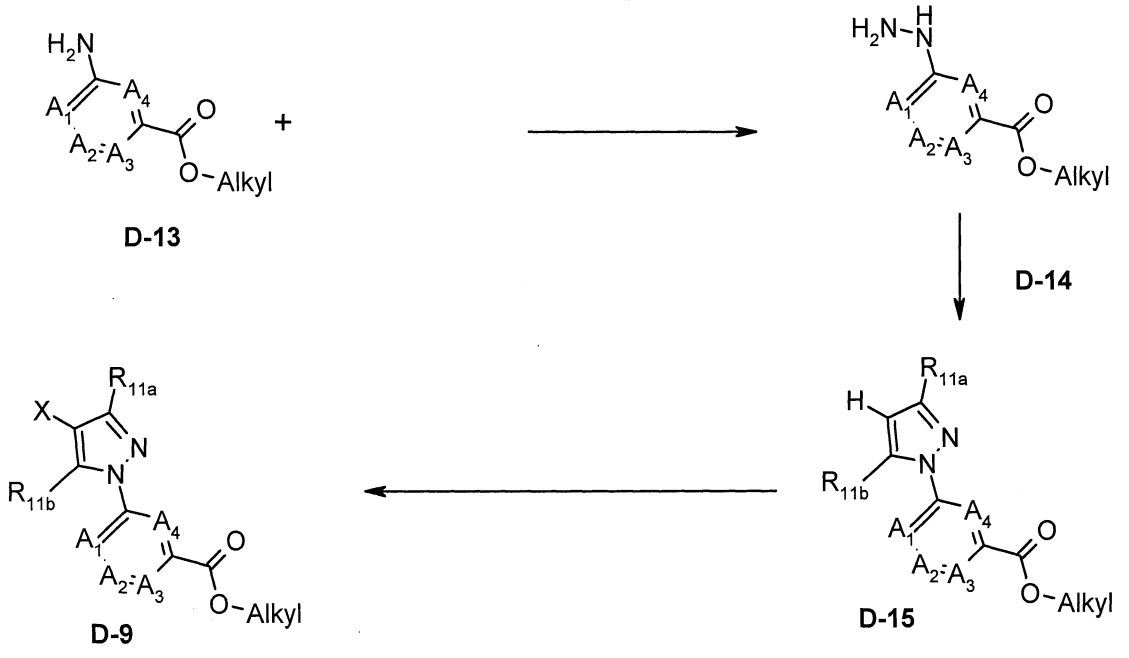
Các hợp chất có công thức chung (D-9) có thể được điều chế tương tự các phương pháp theo tài liệu từ các nguyên liệu ban đầu có công thức cấu trúc (D-7) và (D-11). Các nhóm A^1-A^4, alkyl và X mỗi nhóm là như được xác định trên đây. Các hợp chất ban đầu có công thức cấu trúc (D-7) là đã biết (ví dụ WO2004099146A1, p. 68-69) hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết. Các ví dụ bao gồm: metyl 2-clo-5-iodobenzoat, etyl 2-bromo-5-iodobenzoat, metyl 5-bromo-2-clo-3-flobenzoat, etyl 5-bromo-2-clonicotinat. Các hợp chất ban đầu có công thức cấu trúc (D-11) là đã biết và một số trong chúng có bán trên thị trường hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết. Các ví dụ bao gồm 4-bromopyrazol, 4-bromo-3-metylpyrazol, 4-bromo-3,5-dimetylpyrazol và 4-bromo-3-(triflometyl)pyrazol.

The as yet unknown compounds (D-9) có thể được điều chế tương tự như các quy trình đã biết để kết nối pyrazol với các hệ vòng thơm (ví dụ WO2013009791, p. 50, Ví dụ 44).

Cách khác để điều chế pyrazol

Theo cách khác, các hợp chất có công thức chung (D9) theo sáng chế có thể thu được thông qua con đường được đưa ra trong Sơ đồ phản ứng 6.

Sơ đồ phản ứng 6:



Các nhóm A_1 đến A_4, alkyl và R^{11} mỗi nhóm là như được xác định trên đây. X là Cl, Br, I. Các hợp chất ban đầu có công thức cấu trúc (D-13) là đã biết (ví dụ WO2004099146A1, p. 68-69) hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết. Các ví dụ bao gồm: metyl 5-amino-2-clobenzoat, etyl 5-amino-2-clobenzoat, metyl 5-amino-2-clo-3-flobenzoat, etyl 5-amino-2-clonicotinat.

Các hợp chất chưa biết (D-14) có thể được điều chế tương tự như các quy trình đã biết để điều chế aryl hydrazin (ví dụ WO 2004058731, p. 65).

Các hợp chất có công thức chung (D-15) theo sáng chế có thể được điều chế tương tự các phương pháp theo tài liệu từ các nguyên liệu ban đầu có công thức cấu trúc (D-14). Các nhóm A_1 đến A_4, alkyl và R^{11} mỗi nhóm là như được xác định trên đây. Các hợp chất ban đầu có công thức cấu trúc (D-14) là đã biết hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết. Các ví dụ bao gồm metyl 2-clo-5-hydrazinobenzoat, etyl 2-clo-5-hydrazinobenzoat, metyl 2-clo-3-flo-5-hydrazinobenzoat, etyl 2-clo-5-hydrazinonicotinat. Phản ứng có thể được tiến hành tương tự như các điều kiện để đóng vòng pyrazol đã biết theo tài liệu (ví dụ Sachweh, Volker; Langhals, Heinz Chemische Berichte, 119 (1986) 1627-1639).

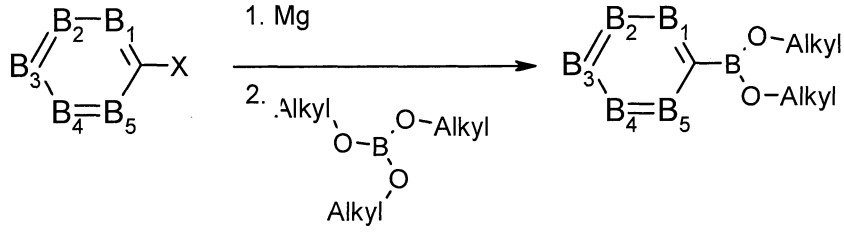
Các hợp chất có công thức chung (D9) theo sáng chế được điều chế bằng cách cho các pyrazol có công thức cấu trúc (D-15) phản ứng với các tác nhân halogen hóa.

Các nhóm A_1 đến A_4, alkyl và R^{11} mỗi nhóm là như được xác định trên đây. Các hợp chất được ưu tiên có công thức cấu trúc (D15) bao gồm metyl 2-clo-5-(pyrazol-1-yl)benzoat, etyl 2-clo-5-(pyrazol-1-yl)benzoat, metyl 2-clo-3-flo-5-(pyrazol-1-yl)benzoat, etyl 2-clo-5-(pyrazol-1-yl)-nicotinat.

Các hợp chất halogen hóa thích hợp là mà người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực này đã biết, ví dụ ví dụ, clo, brom, iot, N-closucxinimit, N-bromosucxinimit, N-iodosucxinimit, 1,3-diclo-5,5-dimetylhydantoin, 1,3-dibromo-5,5-dimetylhydantoin, natri hypoclorit và iot monoclorua. Ưu tiên việc sử dụng brom, iot, bromosucxinimit và iodosucxinimit. Có thể có lợi nếu tiến hành phản ứng với sự có mặt của chất oxy hóa, ví dụ, hydro peroxit. Phản ứng tuân theo các điều kiện theo tài liệu, ví dụ Guo Li et al., Tetrahedron Letters 48 (2007), 4595-4599; Mary M. Kim et al., Tetrahedron Letters 49 (2008), 4026-4028.

Giai đoạn 2 Este boronic

Giai đoạn 2: Điều chế các hợp chất ban đầu có công thức cấu trúc (D12)



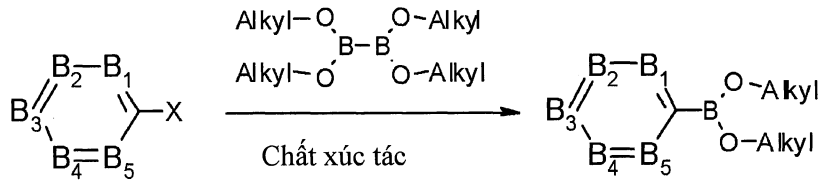
(Y-8) (D-16) (D-12)

Các hợp chất có công thức chung (D-12) theo sáng chế có thể được điều chế tương tự các phương pháp theo tài liệu (Chien, Yuh-Yih; Chou, Meng-Yen; Leung, Man-Kit; Liao, Yuan-Li; Lin, Chang-Chih; Wong, Ken-Tsung; Journal of Organic Chemistry, 67 (2002) p. 1041-1044) từ các nguyên liệu ban đầu có công thức cấu trúc (D-10) qua phản ứng với magie và sau đó là phản ứng với các este boric có công thức cấu trúc (D-16).

Các nhóm B^1-B^5 và alkyl mỗi nhóm là như được xác định trên đây.

Các este boric có công thức cấu trúc (D-13) được sử dụng trong phản ứng là đã biết hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết. Các ví dụ bao gồm trimetyl borat, trietyl borat và 2-metoxy-4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan.

Theo cách khác, các hợp chất có công thức chung (D-12) theo sáng chế có thể được điều chế tương tự các phương pháp theo tài liệu (Tang, Wenjun; Keshipeddy, Santosh; Zhang, Yongda; Wei, Xudong; Savoie, Jolaine; Patel, Nitinchandra D.; Yee, Nathan K.; Senanayake, Chris H.; Organic Letters, 13 (2011) S. 1366-1369) từ các nguyên liệu ban đầu có công thức cấu trúc (D-10) qua phản ứng với các diboran có công thức cấu trúc (D-14) với sự có mặt của chất xúc tác.

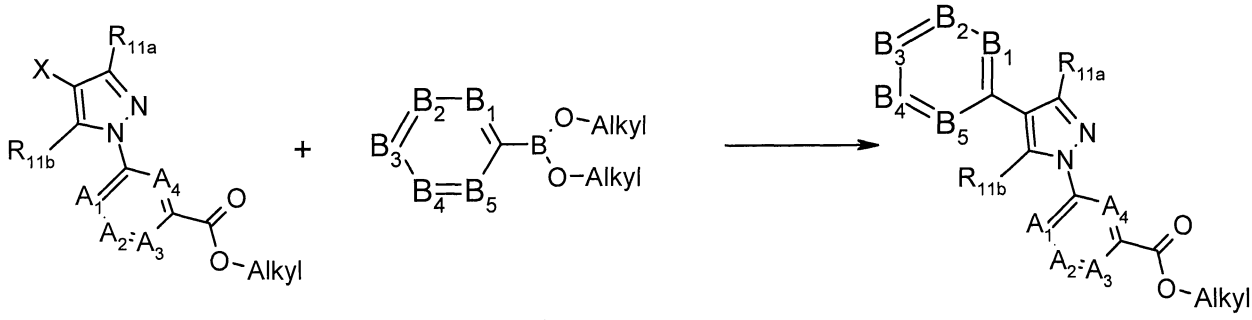


(Y-8) (D-17) (D-12)

Các este boric có công thức cấu trúc (D-17) được sử dụng trong phản ứng là đã biết hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết. Các ví dụ bao gồm 4,4,5,5-tetrametyl-2-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1,3,2-dioxaborolan (bis(pinacolato)diboron).

Các chất xúc tác được sử dụng có thể, cụ thể, là các hợp chất và phức chất của paladi và Cu(I).

Giai đoạn 3 Kết hợp aryl



(D-9) (D-12) (D-5)

Các hợp chất có công thức chung (D-5) theo sáng chế được điều chế bằng cách cho các hợp chất có công thức cấu trúc (D-9) phản ứng với các este boronic có công thức cấu trúc (D-12).

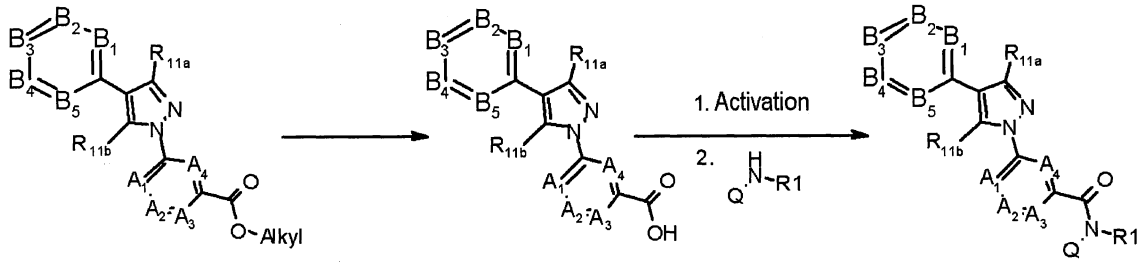
Các nhóm A^1-A^4, B^1-B^5, R^{11}, alkyl và X mỗi nhóm là như được xác định trên đây.

Việc điều chế các hợp chất có công thức cấu trúc (D-9) và (D-12) được mô tả trên đây.

Ví dụ về các hợp chất có công thức cấu trúc (D-9) bao gồm: metyl 5-(4-bromopyrazol-1-yl)-2-clobenzoat, metyl 5-(4-iodopyrazol-1-yl)-2-clobenzoat, etyl 5-(4-bromo-3-metylpyrazol-1-yl)-2-clobenzoat, metyl 5-(4-bromo-3-(triflometyl)pyrazol-1-yl)-2-clobenzoat, metyl 5-(4-bromo-3-(triflometyl)pyrazol-1-yl)-2-clobenzoat, metyl 5-(4-bromo-3,5-dimetylpyrazol-1-yl)-2-clobenzoat và etyl 5-(4-bromo-3-metylpyrazol-1-yl)-2-clonicotinat.

Phản ứng được tiến hành trong các điều kiện được mô tả trong tài liệu, ví dụ WO 2005040110 hoặc WO 2009089508.

Giai đoạn 4, 5 Thủy phân, amit hóa



(D-5) (D-6) (D-8) (I-T4)

Các hợp chất có công thức chung (I-T4) theo sáng chế có thể được điều chế tương tự như các phương pháp kết hợp peptit theo tài liệu từ các nguyên liệu ban đầu (D-6) và (D-8) [WO2010051926; WO2010133312]. Các hợp chất có công thức chung (D-6) có thể được điều chế tương tự như các quy trình theo tài liệu bằng cách thủy phân este từ các hợp chất có công thức chung (D-5) [WO2010-051926; WO2010133312]. Các nhóm A_1-A_4, B_1-B_5, alkyl, Q, R^1 và R^{11} mỗi nhóm là như được xác định trên đây. Việc điều chế các hợp chất có công thức cấu trúc (D5) được mô tả trên đây.

(I-T5): Các hợp chất có công thức (I-T5) có thể được điều chế, ví dụ, tương tự như trong tài liệu Friedrich, L.E. et al. Journal of Organic Chemistry, 43 (1978), 34-38; hoặc tài liệu Huettel, R. et al. Chemische Berichte, 93 (1960), p. 1425-1432; hoặc tài liệu Sato, T et al., Bulletin of the Chemical Society of Japan, 41 (1968), p. 3017-3018.

(I-T8): Các hợp chất có công thức (I-T8) có thể được điều chế, ví dụ, tương tự như trong EP 1 405 636, Ví dụ 5; hoặc EP 2 301 538, p. 162; hoặc tài liệu Schmidt, Bernd et al., European Journal of Organic Chemistry, (2011), p. 4814-4822.

(I-T9): Các hợp chất có công thức (I-T9) có thể được điều chế, ví dụ, tương tự như trong tài liệu Ma, Shengming et al., Chemistry-A European Journal, 9 (2003), p. 2447-2456.

(I-T10): Các hợp chất có công thức (I-T10) có thể được điều chế, ví dụ, tương tự như trong EP 2 301 538, p. 162.

(I-T11): Các hợp chất có công thức (I-T11) có thể được điều chế, ví dụ, tương tự như trong EP 2 301 538, p. 165.

(I-T12): Các hợp chất có công thức (I-T12) có thể được điều chế, ví dụ, tương tự như trong EP 2 301 538, p. 164.

(I-T13): Các hợp chất có công thức (I-T13) có thể được điều chế, ví dụ, tương tự như trong EP 2 301 538, p. 164.

(I-T14): Các hợp chất có công thức (I-T14) có thể được điều chế, ví dụ, tương tự như trong tài liệu Hibi, Shigeki et al., Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters, 10 (2000), p. 623–626 hoặc tài liệu Wang, Xiang et al. Journal of Organic Chemistry, 72 (2007), 1476-1479; EP1405636, trang 31.

(I-T15): Các hợp chất có công thức (I-T15) có thể được điều chế, ví dụ, tương tự như trong tài liệu Chattopadhyay, Buddhadeb et al., Organic Letters, 13 (2011), p. 3746-3749.

(I-T16): Các hợp chất có công thức (I-T16) có thể được điều chế, ví dụ, tương tự như trong tài liệu Campi, Eva M. et al. Tetrahedron Letters, 32 (1991), p. 1093-1094; hoặc tài liệu Thompson, Benjamin B. et al., Organic Letters, 13 (2011), p. 3289-3291; hoặc tài liệu Kloetzel et al. Journal of the American Chemical Society, 79 (1957), p. 4222; hoặc tài liệu Chi, Yonggui Robin et al., Journal of the American Chemical Society, 135 (2013), p. 8113-8116.

(I-T18): Các hợp chất có công thức (I-T18) có thể được điều chế, ví dụ, tương tự như trong EP 2 311 455, p. 150; hoặc tài liệu Balaban, A.T. et al. Tetrahedron, 19 (1963), p. 2199-2207.

(I-T19): Các hợp chất có công thức (I-T19) có thể được điều chế, ví dụ, tương tự như trong WO 2004/14366, p. 108.

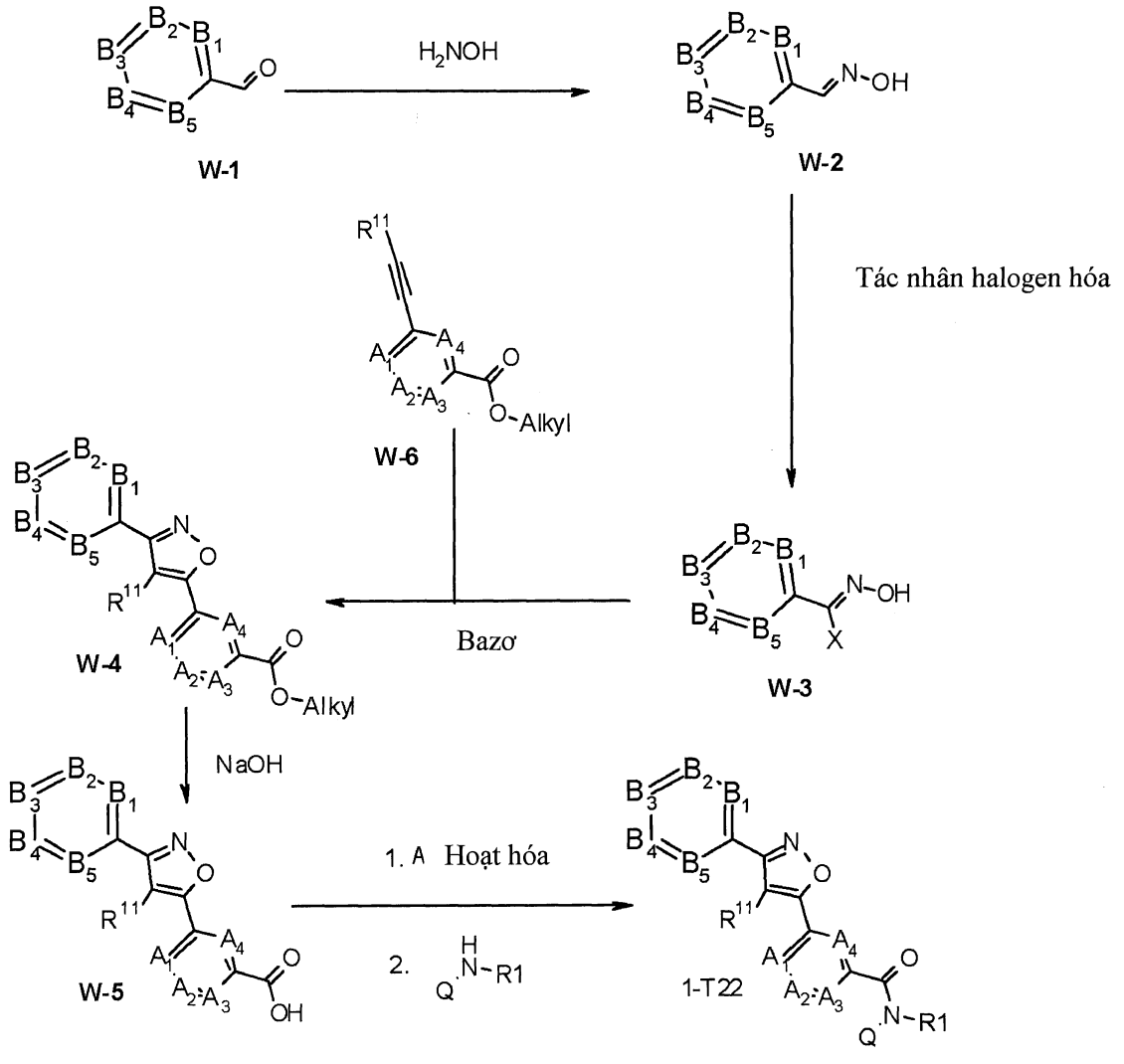
(I-T20): Các hợp chất có công thức (I-T20) có thể được điều chế, ví dụ, tương tự như trong tài liệu Araki, Hiroshi; Katoh, Tadashi; Inoue, Munenori; Synlett, (2006), p. 555-558; US 6,545,009, p. 27, Ví dụ 1.

(I-T21): Các hợp chất có công thức (I-T21) có thể được điều chế, ví dụ, tương tự như trong WO 2004/72050, p. 13; hoặc US 6,545,009, p. 27.

Quy trình I-T22

Các hợp chất có công thức cấu trúc (I-T22) có thể được điều chế bằng quy trình được đưa ra trong Sơ đồ 7.

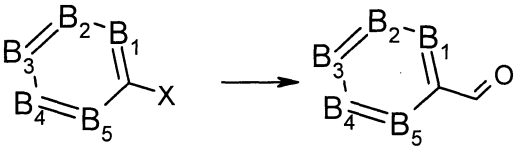
Sơ đồ phản ứng 7:



Các nhóm A_1-A_4, B_1-B_5, alkyl, Q, R^1 và R^{11} mỗi nhóm là như được xác định trên đây. X là Cl, Br, I. Các hợp chất ban đầu có công thức cấu trúc (W-1) và (W-6) là đã biết (W1 ví dụ, US 2011/53904 p. 19, W6 ví dụ, WO 2012/175474, p. 117-118) hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết. Các phản ứng được tiến hành tương tự như các điều kiện được đưa ra để điều chế các hợp chất (I-T23).

Giai đoạn 1 Aldehyt

Giai đoạn 1 của quy trình điều chế các hợp chất theo sáng chế (I-T22):



(W1) (W2)

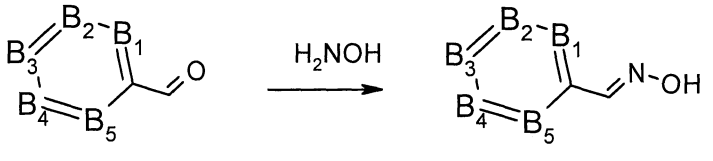
Các hợp chất có công thức chung (W2) theo sáng chế có thể được điều chế tương tự các phương pháp theo tài liệu (US5739083, Ví dụ 2; WO2011/23667, p. 34) từ các nguyên liệu ban đầu có công thức cấu trúc (W1).

Các nhóm B^1-B^5 và X mỗi nhóm là như được xác định trên đây. X là, ví dụ, clo, brom hoặc iot.

Các hợp chất ban đầu có công thức cấu trúc (B1) là đã biết hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết. Các ví dụ bao gồm 2-bromo-1,3-diclo-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]benzen, 2-bromo-1,3-dimetyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]benzen, 2-bromo-1-etyl-3-metyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl) etyl]benzen, 2-bromo-1-clo-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-3-(triflometyl) benzen, 2-bromo-1-metyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-3-(triflometyl)benzen, 2-bromo-1-clo-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-3-(triflometoxy)benzen, 2-bromo-1-metyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-3-(triflometoxy)benzen, 1,3-dimetyl-2-iodo-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl] benzen, 2-iodo-1-metyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-3-(triflometyl)benzen. Chúng có thể được điều chế, ví dụ, bằng các phương pháp được mô tả trong EP1253128, trang 8-10.

Giai đoạn 2 Oxim

Giai đoạn 2 của quy trình điều chế các hợp chất theo sáng chế (1-T22):



(W2) (W3)

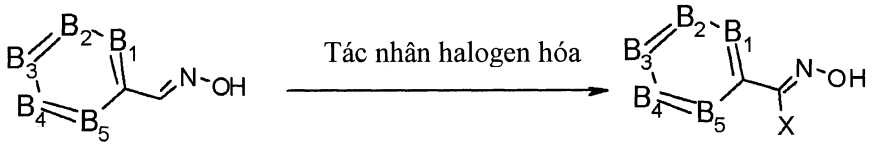
Các hợp chất có công thức chung (W3) theo sáng chế có thể được điều chế tương tự các phương pháp theo tài liệu từ các nguyên liệu ban đầu có công thức cấu trúc (W2). Các nhóm B_1-B_5 mỗi nhóm là như được xác định trên đây. Việc điều chế các hợp chất ban đầu có công thức cấu trúc (W2) được mô tả trên đây. Các ví dụ bao gồm 2,6-diclo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]benzaldehyt, 2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]benzaldehyt, 2-etyl-6-metyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]benzaldehyt, 2-clo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-

(triflometyl)benzaldehyt, 2-metyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometyl)benzaldehyt, 2-clo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometoxy)benzaldehyt, 2-metyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometoxy)benzaldehyt. Việc điều chế chúng được mô tả trên đây.

Các hợp chất có công thức cấu trúc (W3) là mới. Các hợp chất chưa biết (W3) có thể được điều chế tương tự như các quy trình đã biết để điều chế oxim từ aldehyt (H. Metzger in Houben-Weyl, volume X/4, trang 55 ff., Georg Thieme Verlag Stuttgart 1968). Các hợp chất có công thức cấu trúc (W3) có thể ở dạng các chất đồng phân lập thể tinh khiết, nhưng cả ở dạng hỗn hợp của các chất đồng phân lập thể.

Giai đoạn 3 Hydroxamyl clorua

Giai đoạn 3 của quy trình điều chế các hợp chất theo sáng chế (1-T22):



(W3) (W4)

Các hợp chất có công thức chung (W4) theo sáng chế được điều chế bằng cách cho oxim có công thức cấu trúc (W3) phản ứng với các tác nhân halogen hóa.

Các nhóm B1-B5 mỗi nhóm là như được xác định trên đây. X là clo, brom hoặc iot.

Các hợp chất có công thức cấu trúc (W4) thông thường là, ví dụ, 2,6-diclo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 2-etyl-6-metyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 2-clo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometyl)-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 2-metyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometyl)-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 2-clo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometoxy)-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 2-metyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometoxy)-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 2-metyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometyl)-N-hydroxybenzimidoyl bromua.

Các hợp chất halogen hóa thích hợp mà người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực này đã biết, ví dụ clo, brom, iot, N-closucxinimit, N-bromosucxinimit, N-iodosucxinimit, 1,3-diclo-5,5-dimetylhydantoin, 1,3-dibromo-5,5-dimetylhydantoin, benzyltrimetylamoni tetracloiodat và natri hypoclorit. Ưu tiên việc sử dụng các tác nhân clo hóa.

Phản ứng có thể được tiến hành bằng cách sử dụng các dung môi thích hợp.

Các chất pha loãng hoặc dung môi hữu dụng để tiến hành các quy trình theo sáng chế về nguyên tắc bao gồm tất cả các dung môi hữu cơ trơ trong điều kiện phản ứng cụ thể. Các ví dụ bao gồm: các hydrohalocacbon (ví dụ hydroclocacbon, như tetraetylen, tetracloetan, diclopropan, metylen clorua, diclobutan, cloroform, cacbon tetraclorua, tricloetan, tricloetylen, pentacloetan, diflobenzen, 1,2-dicloetan, clobenzen, bromobenzen, diclobenzen, clotoluen, triclobenzen), các rượu (ví dụ metanol, etanol, isopropanol, butanol), các ete (ví dụ etyl propyl ete, metyl tert-butyl ete, n-butyl ete, anisole, phenetole, xyclohexyl metyl ete, dimetyl ete, dietyl ete, dipropyl ete, diisopropyl ete, di-n-butyl ete, diisobutyl ete, diisoamyl ete, etylen glycol dimetyl ete, tetrahydrofuran, dioxan, diclodietyl ete và polyete của etylen oxit và/hoặc propylen oxit), các amin (ví dụ trimetyl-, trietyl-, tripropyl-, tributylamin, N-metylmorpholin, pyridin và tetrametylendiamin), các nitrohydrocacbon (ví dụ nitrometan, nitroetan, nitropropan, nitrobenzen, clonitrobenzen, o-nitrotoluen; các nitril như axetonitril, propionitril, butyronitril, isobutyronitril, benzonitril, m-clobenzonitril), tetrahydrothiophen dioxit, dimetyl sulphoxit, tetrametylen sulphoxit, dipropyl sulphoxit, benzyl metyl sulphoxit, diisobutyl sulphoxit, dibutyl sulphoxit, diisoamyl sulphoxit, sulphones (ví dụ dimetyl, dietyl, dipropyl, dibutyl, diphenyl, dihexyl, metyl etyl, etyl propyl, etyl isobutyl và pentametylen sulphon), các hydrocacbon béo, vòng béo hoặc thơm (ví dụ pentan, hexan, heptan, octan, nonan và các hydrocacbon kỹ thuật), và cả các hợp chất gọi là "cồn trắng" với các thành phần có điểm sôi trong khoảng từ, ví dụ, 40°C đến 250°C, xymen, các phân đoạn dầu mỏ với điểm sôi trong khoảng từ 70°C đến 190°C, xyclohexan, metylxyclohexan, ete dầu mỏ, ligroin, octan, benzen, toluen, clobenzen, bromobenzen, nitrobenzen, xylen, các este (ví dụ metyl, etyl, butyl và isobutyl axetat, dimetyl, dibutyl và etylen cacbonat); các amit (ví dụ hexametylenphosphoramit, formamit, N-metylformamit, N,N-

dimetylformamit, N,N-dipropylformamit, N,N-dibutylformamit, N-metylpyrolidin, N-metylcaprolactam, 1,3-dimetyl-3,4,5,6-tetrahydro-2(1H)-pyrimidin, octylpyrolidon, octylcaprolactam, 1,3-dimetyl-2-imidazolinedion, N-formylpiperidin, N,N'-1,4-diformylpiperazin) và các keton (ví dụ axeton, axetophenon, metyl etyl keton, metyl butyl keton).

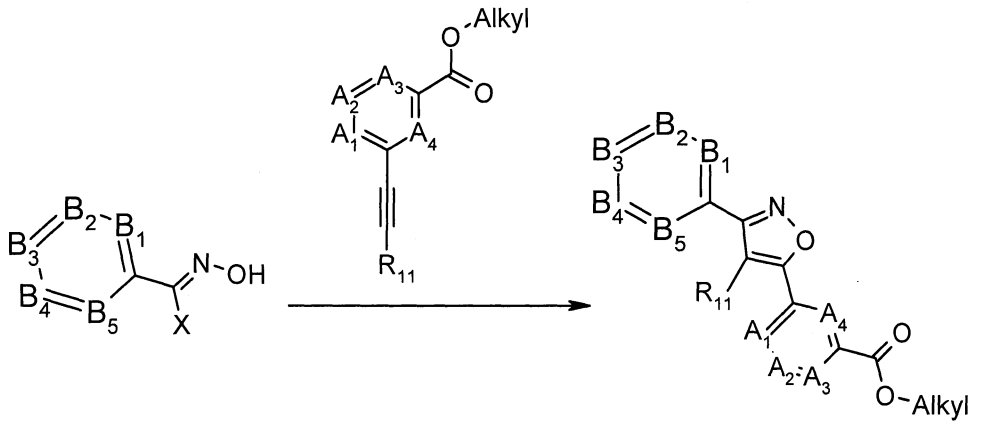
Các chất pha loãng được ưu tiên sử dụng có thể là dung môi bất kỳ mà không làm hỏng phản ứng, ví dụ nước. Các ví dụ hữu dụng là các hydrocacbon thơm như benzen, toluen, xylen hoặc clobenzen; các hydrocacbon được halogen hóa như diclometan, cloroform, 1,2-dicloetan hoặc cacbon tetraclorua, các ete mạch hở hoặc vòng như dietyl ete, dioxan, tetrahydrofuran hoặc 1,2-dimetoxyetan; các este như etyl axetat và butyl axetat; các keton, ví dụ axeton, metyl isobutyl keton và xyclohexanon; các amit như dimetylformamit và dimetylaxetamit, N-metylpyrolidon; các nitril như axetonitril hoặc propionitril; và các dung môi trơ khác như 1,3-dimetyl-2-imidazolidinon; các dung môi này có thể được sử dụng một mình hoặc kết hợp 2 hoặc nhiều dung môi.

Phản ứng có thể được thực hiện trong khoảng nhiệt độ rộng. Thông thường, phản ứng được tiến hành trong khoảng nhiệt độ từ -78°C đến 200°C, tốt hơn là ở nhiệt độ từ -10 đến 150°C. Phản ứng có thể được thực hiện ở áp suất tăng hoặc giảm. Nhưng tốt hơn nếu phản ứng được tiến hành dưới áp suất chuẩn. Thời gian phản ứng nằm trong khoảng từ 0,1 đến 72 giờ, tốt hơn là từ 1 đến 24 giờ.

Để thực hiện phản ứng, 1 đến 3 mol, tốt hơn là 1 đến 1,5 mol, tác nhân halogen hóa được sử dụng trên mỗi mol hợp chất có công thức cấu trúc (W3) trong dung môi, ví dụ dimetylformamit (DMF).

Giai đoạn 4 Đóng vòng

Giai đoạn 4 của quy trình điều chế các hợp chất theo sáng chế (1-T22):



(W4) (W8) (W5)

Các hợp chất có công thức chung (W5) theo sáng chế được điều chế bằng cách cho hydroxamyl clorua có công thức cấu trúc (W4) phản ứng với axetylen có công thức cấu trúc (W8).

Các nhóm A_1-A_4, B_1-B_5, R^{11} và alkyl mỗi nhóm là như được xác định trên đây. X là halogen, như clo, brom, iot.

Việc điều chế các hợp chất có công thức cấu trúc (W4) được mô tả trên đây. Các hợp chất có công thức cấu trúc (W4) thường là, ví dụ, 2,6-diclo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 2-etyl-6-metyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 2-clo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometyl)-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 2-metyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometyl)-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 2-clo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometoxy)-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 2-metyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometoxy)-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 2-metyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometyl)-N-hydroxybenzimidoyl bromua.

Các hợp chất có công thức cấu trúc (W8) là đã biết (WO2012107434, p. 103) hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp theo tài liệu (Chinchilla, Rafael; Najera, Carmen, Chemical Society Reviews (2011), 40(10), 5084-5121, Chinchilla, Rafael; Najera, Carmen, Chemical Reviews (Washington, DC, United States) (2007), 107(3), 874-922). Các hợp chất có công thức cấu trúc (W8) thường là, ví dụ, metyl 2-

clo-5-etynylbenzoat, etyl 2-bromo-5-etynylbenzoat, metyl 2-clo-5-etynyl-3-flobenzoat, etyl 2-clo-5-etynylnicotinat, etyl 5-etynyl-2-metylnicotinat.

Phản ứng có thể được tiến hành bằng cách sử dụng các dung môi thích hợp.

Các chất pha loãng hoặc dung môi hữu dụng để tiến hành các quy trình theo sáng chế về nguyên tắc bao gồm tất cả các dung môi hữu cơ mà trơ trong điều kiện phản ứng cụ thể. Các ví dụ bao gồm: các hydrohalocacbon (ví dụ hydroclocacbon, như tetraetylen, tetracloetan, diclopropan, metylen clorua, diclobutan, cloroform, cacbon tetraclorua, tricloetan, tricloetylen, pentacloetan, diflobenzen, 1,2-dicloetan, clobenzen, bromobenzen, diclobenzen, clotoluen, triclobenzen), các rượu (ví dụ metanol, etanol, isopropanol, butanol), các ete (ví dụ etyl propyl ete, metyl tert-butyl ete, n-butyl ete, anisol, phenetol, xyclohexyl metyl ete, dimetyl ete, dietyl ete, dipropyl ete, diisopropyl ete, di-n-butyl ete, diisobutyl ete, diisoamyl ete, etylen glycol dimetyl ete, tetrahydrofuran, dioxan, diclodietyl ether và các polyete của etylen oxit và/hoặc propylen oxit), các amin (ví dụ trimetyl-, trietyl-, tripropyl-, tributylamin, N-metylmorpholin, pyridin và tetrametylendiamin), các nitrohydrocacbon (ví dụ nitrometan, nitroetan, nitropropan, nitrobenzen, clonitrobenzen, o-nitrotoluen; các nitril như axetonitril, propionitril, butyronitril, isobutyronitril, benzonitril, m-clobenzonitril), tetrahydrothiophen dioxit, dimetyl sulphoxit, tetrametylen sulphoxit, dipropyl sulphoxit, benzyl metyl sulphoxit, diisobutyl sulphoxit, dibutyl sulphoxit, diisoamyl sulphoxit, các sulphon (ví dụ dimetyl, dietyl, dipropyl, dibutyl, diphenyl, dihexyl, metyl etyl, etyl propyl, etyl isobutyl và pentametylen sulphon), các hydrocacbon béo, vòng béo hoặc thơm (ví dụ pentan, hexan, heptan, octan, nonan và các hydrocacbon kỹ thuật), và cả các hợp chất gọi là "cồn trắng" với các thành phần với điểm sôi nằm trong khoảng từ, ví dụ, 40°C đến 250°C, xymen, các phân đoạn dầu mỏ với điểm sôi nằm trong khoảng từ 70°C đến 190°C, xyclohexan, metylxyclohexan, ete dầu mỏ, ligroin, octan, benzen, toluen, clobenzen, bromobenzen, nitrobenzen, xylen, các este (ví dụ metyl, etyl, butyl và isobutyl axetat, dimetyl, dibutyl và etylen cacbonat); các amit (ví dụ hexametylenphosphoramit, formamit, N-metylformamit, N,N-dimetylformamit, N,N-dipropylformamit, N,N-dibutylformamit, N-metylpyrolidin, N-metylcaprolactam, 1,3-dimetyl-3,4,5,6-tetrahydro-2(1H)-pyrimidin, octylpyrolidon, octylcaprolactam, 1,3-dimetyl-2-imidazolinedion, N-formylpiperidin,

N,N'-1,4-diformylpiperazin) và các keton (ví dụ axeton, axetophenon, metyl etyl keton, metyl butyl keton).

Các chất pha loãng được ưu tiên sử dụng có thể là dung môi bất kỳ mà không làm hỏng phản ứng, ví dụ nước. Các ví dụ hữu dụng là các hydrocacbon thơm như benzen, toluen, xylen hoặc clobenzen; các hydrocacbon được halogen hóa như diclometan, cloroform, 1,2-dicloetan hoặc cacbon tetraclorua, các ete mạch hở hoặc vòng như dietyl ete, dioxan, tetrahydrofuran hoặc 1,2-dimetoxyetan; các este như etyl axetat và butyl axetat; các keton, ví dụ axeton, metyl isobutyl keton và xyclohexanon; các amit như dimetylformamit và dimetylaxetamit, N-metylpyrolidon; các nitril như axetonitril hoặc propionitril; và các dung môi trơ khác như 1,3-dimetyl-2-imidazolidinon; các dung môi này có thể được sử dụng một mình hoặc kết hợp 2 hoặc nhiều dung môi.

Trong phản ứng của các hợp chất có công thức cấu trúc (W4) với các axetylen có công thức cấu trúc (W8), có thể bổ sung bazơ. Các ví dụ bao gồm các hợp chất kim loại kiềm thổ hoặc kim loại kiềm (ví dụ hydroxit, hydrit, oxit và cacbonat của lithi, natri, kali, magie, canxi và bari), các bazơ amidin hoặc bazơ guanidin (ví dụ 7-metyl-1,5,7-triazabixyclo[4.4.0]dec-5-en (MTBD); diazabixyclo[4.3.0]nonen (DBN), diazabixyclo[2.2.2]octan (DABCO), 1,8-diazabixyclo[5.4.0]undexen (DBU), xyclohexyltetrabutylguanidin (CyTBG), xyclohexyltetrametylguanidin (CyTMG), N,N,N,N-tetrametyl-1,8-naphtalendiamin, pentametylpiperidin) và các amin, đặc biệt là tertiary amin (ví dụ trietylamin, trimetylamin, tribenzylamin, triisopropylamin, tributylamin, trixyclohexylamin, triamylamin, trihexylamin, N,N-dimetylanilin, N,N-dimetyltoluidin, N,N-dimetyl-p-aminopyridin, N-metylpyrolidin, N-metylpiperidin, N-metylimidazol, N-metylpyrazol, N-metylmorpholin, N-metylhexametylendiamin, pyridin, 4-pyrolidinopyridin, 4-dimetylaminopyridin, quinolin, β-picolin, β-picolin, isoquinolin, pyrimidin, acridin, N,N,N',N'-tetrametylendiamin, N,N,N',N'-tetraetylendiamin, quinoxalin, N-propyldiisopropylamin, N-etyldiisopropylamin, N,N'-dimetylxyclohexylamin, 2,6-lutidin, 2,4-lutidin hoặc trietylendiamin).

Chất trợ phản ứng bazơ được ưu tiên sử dụng có thẻ là bazơ hữu cơ như trietylamin, etyldiisopropylamin, tri-n-butylamin, pyridin và 4-dimetylaminopyridin; ngoài ra, có thể sử dụng, ví dụ, các bazơ sau: hydroxit kim loại kiềm, ví dụ natri

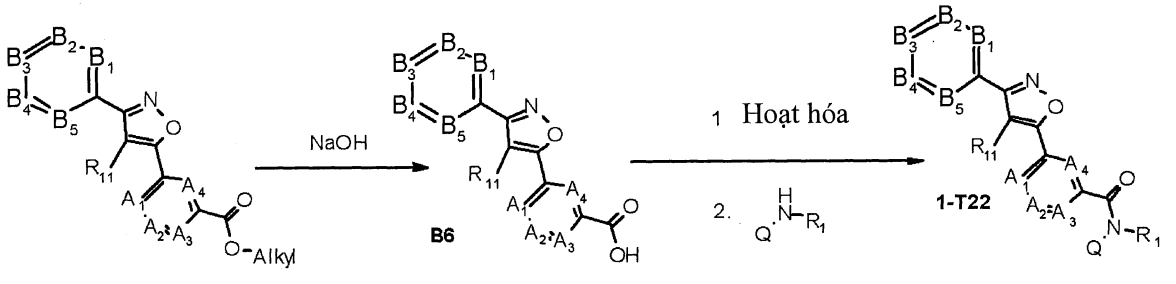
hydroxit và kali hydroxit; các cacbonat như natri hydrocacbonat và kali cacbonat; các phosphat như dikali hydrophosphat và trinatri phosphat.

Phản ứng có thể được thực hiện trong khoảng nhiệt độ rộng. Thông thường, phản ứng được tiến hành trong khoảng nhiệt độ từ -78°C đến 200°C, tốt hơn là ở nhiệt độ từ -10 đến 150°C. Phản ứng có thể được thực hiện dưới áp suất tăng hoặc giảm. Nhưng tốt hơn nếu phản ứng được tiến hành dưới áp suất chuẩn. Thời gian phản ứng nằm trong khoảng từ 0,1 đến 72 giờ, tốt hơn là từ 1 đến 24 giờ.

Để tiến hành phản ứng, ví dụ, 1-2 đương lượng mol của các hợp chất có công thức cấu trúc (W8) và 1 đương lượng mol bazơ đến không quá dư một chút trên mỗi mol hợp chất có công thức cấu trúc (W4) được cho phản ứng trong dung môi, ví dụ dimetylformamit (DMF).

Giai đoạn 3 và 4 để điều chế các hợp chất có công thức cấu trúc (W5) có thể được tiến hành theo các bước riêng rẽ hoặc dưới dạng phản ứng trong cùng một bình.

Giai đoạn 5, 6 Thủy phân, amit hóa



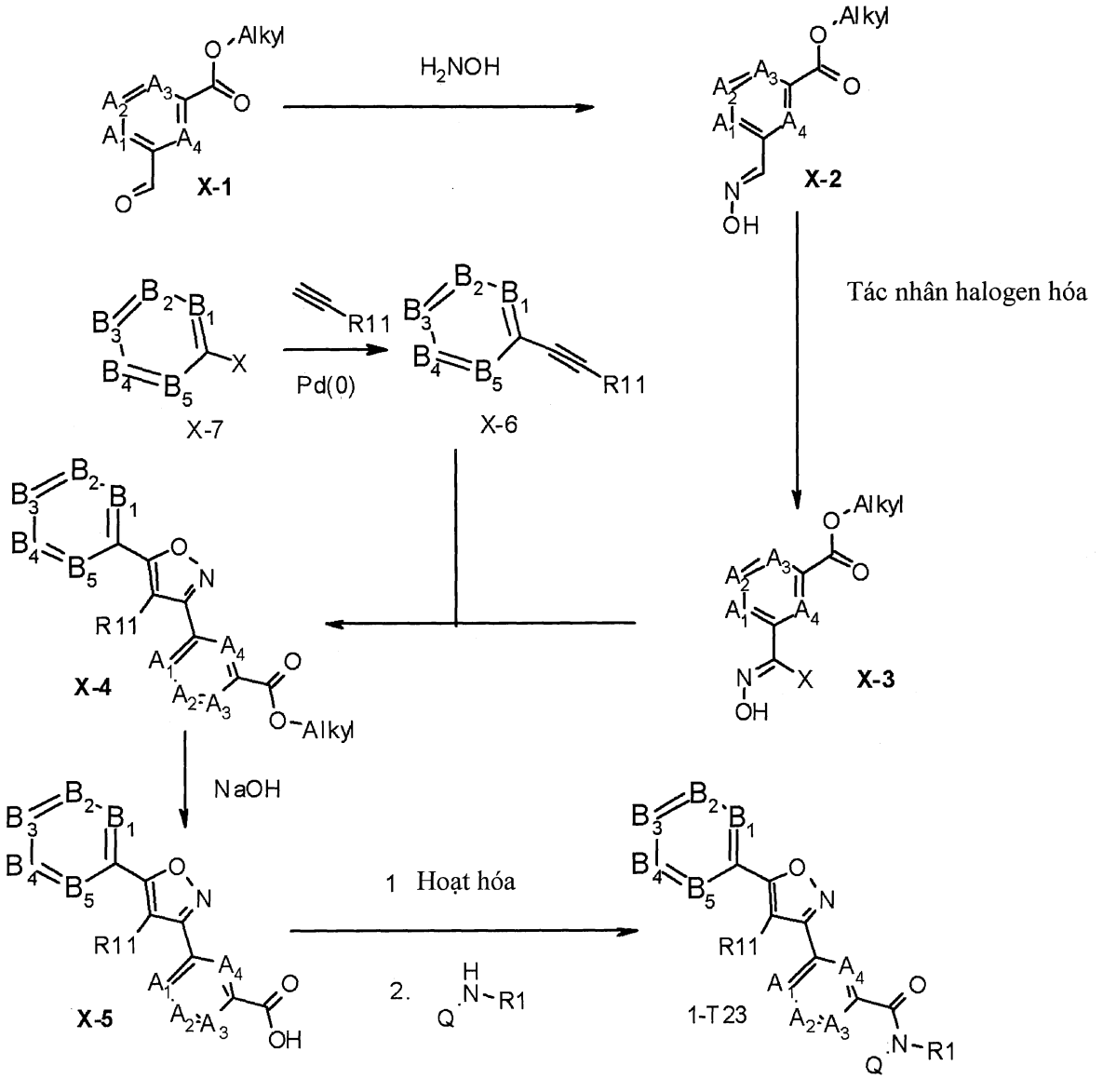
(W5) (W6) (B7) (1-T22)

Các hợp chất có công thức chung (I-T22) theo sáng chế có thể được điều chế tương tự như các phương pháp kết hợp peptit theo tài liệu từ các nguyên liệu ban đầu (W6) và (W9) (WO2010051926; WO2010133312). Các hợp chất có công thức chung (W6) có thể được điều chế tương tự như các quy trình theo tài liệu bằng cách thủy phân este từ các hợp chất có công thức chung (W5) (WO2010051926; WO2010133312). Các nhóm A_1-A_4, B_1-B_5, alkyl, Q, R^1 và R^{11} mỗi nhóm là như được xác định trên đây.

Quy trình I-T23

Các hợp chất có công thức cấu trúc (I-T23) có thể được điều chế bằng quy trình được đưa ra trong Sơ đồ phản ứng 8.

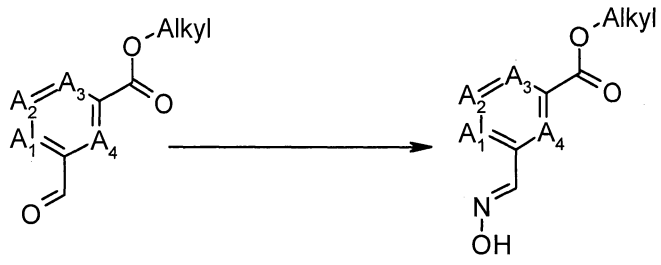
Sơ đồ phản ứng 8:



Các nhóm A_1-A_4, B_1-B_5, alkyl, Q, R^1 và R^{11} mỗi nhóm là như được xác định trên đây. X là, ví dụ, Cl, Br, I.

Giai đoạn 1 Oxim

Giai đoạn 1 của quy trình điều chế các hợp chất theo sáng chế (I-T23):



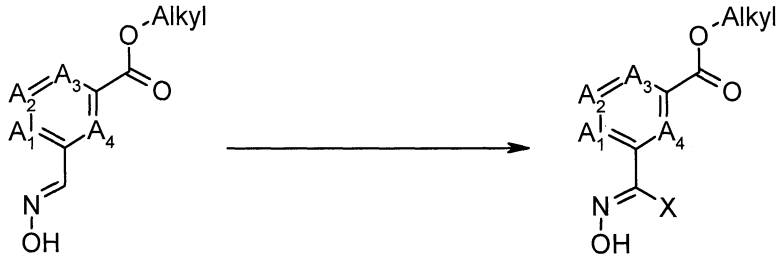
X-1 X-2

Các hợp chất có công thức chung (X-2) theo sáng chế có thể được điều chế tương tự các phương pháp theo tài liệu từ các nguyên liệu ban đầu có công thức cấu trúc (X-1). Các nhóm A^1-A^4 và alkyl mỗi nhóm là như được xác định trên đây. Các hợp chất ban đầu có công thức cấu trúc (X-1) là đã biết hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết. Các ví dụ bao gồm 3-carbometoxybenzaldehyt, 3-carbometoxy-4-clobenzaldehyt, 3-carbometoxy-4-bromobenzaldehyt, 3-carbometoxy-4-flobenzaldehyt, 3-carbometoxy-4-clo-5-flobenzaldehyt và các este etyl tương ứng. Chúng có thể được điều chế, ví dụ, bằng các phương pháp được mô tả trong WO 2010/011584, p. 19-20; Journal of Organic Chemistry, 76 (2011), p. 1062 – 1071; WO 2012/114268, p. 137; Journal of the American Chemical Society, 108 (1986), p. 452-461.

Các hợp chất chưa biết (X-2) có thể được điều chế tương tự như các quy trình đã biết để điều chế oxim từ aldehyt (H. Metzger in Houben-Weyl, volume X/4, p. 55 ff., Georg Thieme Verlag Stuttgart 1968). Các hợp chất có công thức cấu trúc (X-2) có thể ở dạng các chất đồng phân lập thể tinh khiết, nhưng cả ở dạng hỗn hợp của các chất đồng phân lập thể.

Giai đoạn 2 Hydroxamyl clorua

Giai đoạn 2 của quy trình điều chế các hợp chất theo sáng chế (I-T23):



X-2 X-3

Các hợp chất có công thức chung (X-3) theo sáng chế được điều chế bằng cách cho các oxim có công thức cấu trúc (X-2) phản ứng với các tác nhân halogen hóa.

Các nhóm A_1-A_4 và alkyl mỗi nhóm là như được xác định trên đây.

Các hợp chất có công thức cấu trúc (X-3) thường là, ví dụ, carbometoxy-4-clo-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 3-carbometoxy-4-flo-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 3-carbometoxy-4-clo-5-flo-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 3-carbometoxy-4-bromo-N-hydroxybenzimidoyl clorua.

Các hợp chất halogen hóa thích hợp là mà người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực này đã biết, ví dụ clo, brom, iot, N-closucxinimit, N-bromosucxinimit, N-iodosucxinimit, 1,3-diclo-5,5-dimetylhydantoin, 1,3-dibromo-5,5-dimetylhydantoin, benzyltrimetylamoni tetracloiodat và natri hypoclorit. Ưu tiên việc sử dụng các chất phản ứng clo hóa.

Các chất pha loãng hoặc dung môi hữu dụng để tiến hành các quy trình theo sáng chế về nguyên tắc bao gồm tất cả các dung môi hữu cơ mà trơ trong điều kiện phản ứng cụ thể. Các ví dụ bao gồm: các hydrohalocacbon (ví dụ các hydroclocacbon, như tetraetylen, tetracloetan, diclopropan, metylen clorua, diclobutan, cloroform, cacbon tetraclorua, tricloetan, tricloetylen, pentacloetan, diflobenzen, 1,2-dicloetan, clobenzen, bromobenzen, diclobenzen, clotoluen, triclobenzen), các rượu (ví dụ metanol, etanol, isopropanol, butanol), các ete (ví dụ etyl propyl ete, metyl tert-butyl ete, n-butyl ete, anisole, phenetol, xyclohexyl metyl ete, dimetyl ete, dietyl ete, dipropyl ete, diisopropyl ete, di-n-butyl ete, diisobutyl ete, diisoamyl ete, etylen glycol dimetyl ete, tetrahydrofuran, dioxan, diclodietyl ete và các polyete của etylen oxit và/hoặc propylen oxit), các amin (ví dụ trimetyl-, trietyl-, tripropyl-, tributylamin, N-metylmorpholin, pyridin và tetrametylendiamin), các nitrohydrocacbon (ví dụ nitrometan, nitroetan, nitropropan, nitrobenzen, clonitrobenzen, o-nitrotoluen; các nitril như axetonitril, propionitril, butyronitril, isobutyronitril, benzonitril, m-clobenzonitril), tetrahydrothiophen dioxit, dimetyl sulphoxit, tetrametylen sulphoxit, dipropyl sulphoxit, benzyl metyl sulphoxit, diisobutyl sulphoxit, dibutyl sulphoxit, diisoamyl sulphoxit, các sulphon (ví dụ dimetyl, dietyl, dipropyl, dibutyl, diphenyl, dihexyl, metyl etyl, etyl propyl, etyl isobutyl và pentametylen sulphon), các hydrocacbon béo, vòng béo hoặc thơm (ví dụ pentan, hexan, heptan, octan, nonan và

các hydrocacbon kỹ thuật), và cả các hợp chất gọi là "cồn trắng" với các thành phần với điểm sôi nằm trong khoảng từ, ví dụ, 40°C đến 250°C, xymen, các phân đoạn dầu mỏ với điểm sôi nằm trong khoảng từ 70°C đến 190°C, xyclohexan, metylxyclohexan, ete dầu mỏ, ligroin, octan, benzen, toluen, clobenzen, bromobenzen, nitrobenzen, xylen, các este (ví dụ metyl, etyl, butyl và isobutyl axetat, dimetyl, dibutyl và etylen cacbonat); các amit (ví dụ hexametylenephosphoramit, formamit, N-metylformamit, N,N-dimetylformamit, N,N-dipropylformamit, N,N-dibutylformamit, N-metylpyrolidin, N-metylcaprolactam, 1,3-dimetyl-3,4,5,6-tetrahydro-2(1H)-pyrimidin, octylpyrolidon, octylcaprolactam, 1,3-dimetyl-2-imidazolinedion, N-formylpiperidin, N,N'-1,4-diformylpiperazin) và các keton (ví dụ axeton, axetophenon, metyl etyl keton, metyl butyl keton).

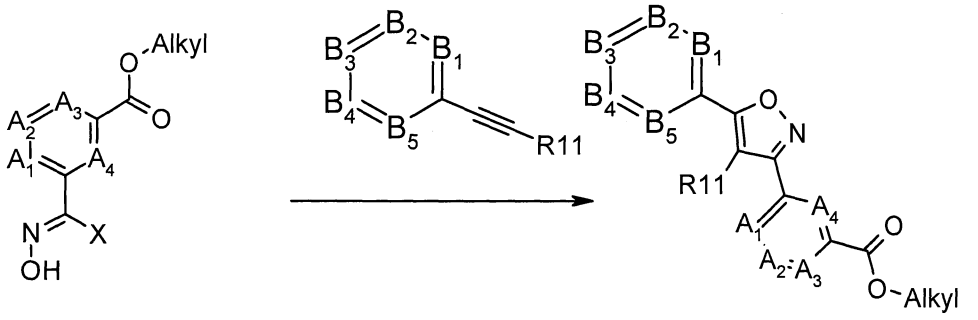
Các chất pha loãng được ưu tiên sử dụng có thể là dung môi bất kỳ mà không làm hỏng phản ứng, ví dụ nước. Các ví dụ hữu dụng là các hydrocacbon thơm như benzen, toluen, xylen hoặc clobenzen; các hydrocacbon được halogen hóa như diclometan, cloroform, 1,2-dicloetan hoặc cacbon tetraclorua, các ete mạch hở hoặc vòng như dietyl ete, dioxan, tetrahydrofuran hoặc 1,2-dimetoxyetan; các este như etyl axetat và butyl axetat; các keton, ví dụ axeton, metyl isobutyl keton và xyclohexanon; các amit như dimetylformamit và dimetylaxetamit, N-metylpyrolidon; các nitril như axetonitril hoặc propionitril; và các dung môi trơ khác như 1,3-dimetyl-2-imidazolidinon; các dung môi này có thể được sử dụng một mình hoặc kết hợp 2 hoặc nhiều dung môi.

Phản ứng có thể được thực hiện trong khoảng nhiệt độ rộng. Thông thường, phản ứng được tiến hành trong khoảng nhiệt độ từ -78°C đến 200°C, tốt hơn là ở nhiệt độ từ -10 đến 150°C. Phản ứng có thể được thực hiện dưới áp suất tăng hoặc giảm. Nhưng tốt hơn nếu phản ứng được tiến hành dưới áp suất chuẩn. Thời gian phản ứng nằm trong khoảng từ 0,1 đến 72 giờ, tốt hơn là từ 1 đến 24 giờ.

To perform the reaction, 1 to 3 mol, tốt hơn là 1 to 1.5 mol, of halogenating agent are used per mole of the compound có công thức cấu trúc (X-2) in a dung môi, ví dụ dimetylformamit (DMF).

Giai đoạn 3 Đóng vòng

Giai đoạn 3 của quy trình điều chế các hợp chất theo sáng chế (1-T23):



X-3 X-6 X-4

Các hợp chất có công thức chung (X-4) theo sáng chế được điều chế bằng cách cho các hydroxamyl clorua có công thức cấu trúc (X-3) phản ứng với các axetylen có công thức cấu trúc (X-6).

Các nhóm A^1-A^4, B^1-B^5, R^{11} và alkyl mỗi nhóm là như được xác định trên đây.

Các hợp chất có công thức cấu trúc (X-3) thường là, ví dụ, carbometoxy-4-clo-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 3-carbometoxy-4-flo-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 3-carbometoxy-4-clo-5-flo-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 3-carbometoxy-4-bromo-N-hydroxybenzimidoyl clorua.

Các chất pha loãng hoặc dung môi hữu dụng để tiến hành các quy trình theo sáng chế về nguyên tắc bao gồm tất cả các dung môi hữu cơ mà trơ trong điều kiện phản ứng cụ thể. Các ví dụ bao gồm: các hydrohalocacbon (ví dụ các hydroclocacbon, như tetraetylen, tetracloetan, diclopropan, metylen clorua, diclobutan, cloroform, cacbon tetraclorua, tricloetan, tricloetylen, pentacloetan, diflobenzen, 1,2-dicloetan, clobenzen, bromobenzen, diclobenzen, clotoluen, triclobenzen), các rượu (ví dụ metanol, etanol, isopropanol, butanol), các ete (ví dụ etyl propyl ete, metyl tert-butyl ete, n-butyl ete, anisol, phenetol, xyclohexyl metyl ete, dimetyl ete, dietyl ete, dipropyl ete, diisopropyl ete, di-n-butyl ete, diisobutyl ete, diisoamyl ete, etylen glycol dimetyl ete, tetrahydrofuran, dioxan, diclodietyl ete và các polyete của etylen oxit và/hoặc propylene oxit), các amin (ví dụ trimetyl-, trietyl-, tripropyl-, tributylamin, N-metylmorpholin, pyridin và tetrametylendiamin), các nitrohydrocacbon (ví dụ nitrometan, nitroetan, nitropropan, nitrobenzen, clonitrobenzen, o-nitrotoluen; các nitril như axetonitril, propionitril, butyronitril, isobutyronitril, benzonitril, m-clobenzonitril), tetrahydrothiophen dioxit, dimetyl sulphoxit, tetrametylen sulphoxit, dipropyl sulphoxit, benzyl metyl sulphoxit, diisobutyl sulphoxit, dibutyl sulphoxit,

diisoamyl sulphoxit, các sulphon (ví dụ dimetyl, dietyl, dipropyl, dibutyl, diphenyl, dihexyl, metyl etyl, etyl propyl, etyl isobutyl và pentametylen sulphon), các hydrocacbon béo, vòng béo hoặc thơm (ví dụ pentan, hexan, heptan, octan, nonan và các hydrocacbon kỹ thuật), và cả các hợp chất gọi là "cồn trắng" với các thành phần với điểm sôi nằm trong khoảng từ, ví dụ, 40°C đến 250°C, xymen, các phân đoạn dầu mỏ với điểm sôi nằm trong khoảng từ 70°C đến 190°C, xyclohexan, metylxyclohexan, ete dầu mỏ, ligroin, octan, benzen, toluen, clobenzen, bromobenzen, nitrobenzen, xylen, các este (ví dụ metyl, etyl, butyl và isobutyl axetat, dimetyl, dibutyl và etylen cacbonat); các amit (ví dụ hexametylenephosphoramit, formamit, N-metylformamit, N,N-dimetylformamit, N,N-dipropylformamit, N,N-dibutylformamit, N-metylpyrolidin, N-metylcaprolactam, 1,3-dimetyl-3,4,5,6-tetrahydro-2(1H)-pyrimidin, octylpyrolidon, octylcaprolactam, 1,3-dimetyl-2-imidazolinedion, N-formylpiperidin, N,N'-1,4-diformylpiperazin) và các keton (ví dụ axeton, axetophenon, metyl etyl keton, metyl butyl keton).

Các chất pha loãng được ưu tiên sử dụng có thể là dung môi bất kỳ mà không làm hỏng phản ứng, ví dụ nước. Các ví dụ hữu dụng là các hydrocacbon thơm như benzen, toluen, xylen hoặc clobenzen; các hydrocacbon được halogen hóa như diclometan, cloroform, 1,2-dicloetan hoặc cacbon tetraclorua, các ete mạch hở hoặc vòng như dietyl ete, dioxan, tetrahydrofuran hoặc 1,2-dimetoxyetan; các este như etyl axetat và butyl axetat; các keton, ví dụ axeton, metyl isobutyl keton và xyclohexanon; các amit như dimetylformamit và dimetylaxetamit, N-metylpyrolidon; các nitril như axetonitril hoặc propionitril; và các dung môi trơ khác như 1,3-dimetyl-2-imidazolidinon; các dung môi này có thể được sử dụng một mình hoặc kết hợp 2 hoặc nhiều dung môi.

Trong phản ứng của các hợp chất có công thức cấu trúc (X-3) với các axetylen có công thức cấu trúc (X-6), có thể bổ sung bazơ. Các ví dụ bao gồm các hợp chất kim loại kiềm thổ hoặc kim loại kiềm (ví dụ hydroxit, hydrit, oxit và cacbonat của lithi, natri, kali, magie, canxi và bari), các bazơ amidin hoặc bazơ guanidin (ví dụ 7-metyl-1,5,7-triazabixyclo[4.4.0]dec-5-en (MTBD); diazabixyclo[4.3.0]nonen (DBN), diazabixyclo[2.2.2]octan (DABCO), 1,8-diazabixyclo[5.4.0]undexen (DBU), xyclohexyltetrabutylguanidin (CyTBG), xyclohexyltetrametylguanidin (CyTMG),

N,N,N,N-tetrametyl-1,8-naphtalendiamin, pentametylpiperidin) và các amin, đặc biệt là các amin bậc bốn (ví dụ trietylamin, trimetylamin, tribenzylamin, triisopropylamin, tributylamin, trixyclohexylamin, triamylamin, trihexylamin, N,N-dimetylanilin, N,N-dimetyltoluidin, N,N-dimetyl-p-aminopyridin, N-metylpyrolidin, N-metylpiperidin, N-metylimidazol, N-metylpyrazol, N-metylmorpholin, N-metylhexametylendiamin, pyridin, 4-pyrolidinopyridin, 4-dimetylaminopyridin, quinolin, α-picolin, β-picolin, isoquinolin, pyrimidin, acridin, N,N,N',N'-tetrametylendiamin, N,N,N',N'-tetraetylendiamin, quinoxalin, N-propyldiisopropylamin, N-etyldiisopropylamin, N,N'-dimetylxyclohexylamin, 2,6-lutidin, 2,4-lutidin hoặc trietylendiamin).

Chất trợ phản ứng bazơ được ưu tiên sử dụng có thể là bazơ hữu cơ như trietylamin, etyldiisopropylamin, tri-n-butylamin, pyridin và 4-dimetylaminopyridin; ngoài ra, có thể sử dụng, ví dụ, các bazơ sau: hydroxit kim loại kiềm, ví dụ natri hydroxit và kali hydroxit; các cacbonat như natri hydrocacbonat và kali cacbonat; các phosphat như dikali hydrophosphat và trinatri phosphat.

Phản ứng có thể được thực hiện trong khoảng nhiệt độ rộng. Thông thường, phản ứng được tiến hành trong khoảng nhiệt độ từ -78°C đến 200°C, tốt hơn là ở nhiệt độ từ -10 đến 150°C. Phản ứng có thể được thực hiện dưới áp suất tăng hoặc giảm. Nhưng tốt hơn nếu phản ứng được tiến hành dưới áp suất chuẩn. Thời gian phản ứng nằm trong khoảng từ 0,1 đến 72 giờ, tốt hơn là từ 1 đến 24 giờ.

Để tiến hành phản ứng, ví dụ, 1-2 đương lượng mol các hợp chất có công thức cấu trúc (X-6) và 1 đương lượng mol bazơ đến không quá dư chút ít trên mỗi mol hợp chất có công thức cấu trúc (X-3) được cho phản ứng trong dung môi, ví dụ dimetylformamit (DMF).

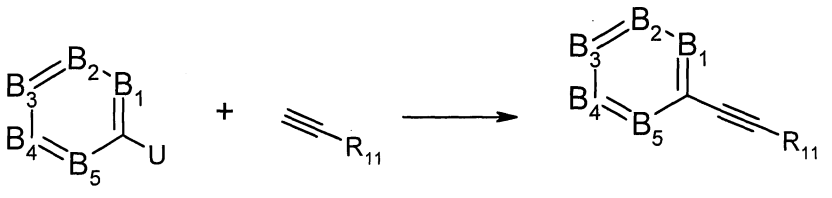
Giai đoạn 2 và 3 để điều chế các hợp chất có công thức cấu trúc (X-4) có thể được tiến hành theo các bước riêng rẽ hoặc dưới dạng phản ứng trong cùng một bình.

Giai đoạn 4, 5 Thủy phân, amit hóa

Các giai đoạn cuối (giai đoạn 4 và 5) để điều chế các hợp chất theo sáng chế (1-T23), thủy phân este carboxylic (X-4) và amit hóa axit carboxylic X-5, có thể được tiến hành theo các quy trình chung được mô tả trên đây (Sơ đồ phản ứng) để thủy phân este và amit hóa axit carboxylic.

Giai đoạn 6 Điều chế axetylen

Giai đoạn 6 Điều chế các hợp chất ban đầu có công thức cấu trúc (X-6)



X-7 X-8 X-6

Các nhóm B_1-B_5, R^{11} và U mỗi nhóm là như được xác định trên đây. U là, ví dụ, brom, iot hoặc triflat.

Các hợp chất có công thức chung (X-6) theo sáng chế có thể được điều chế tương tự các phương pháp theo tài liệu (Chinchilla, Rafael et al., Chemical Society Reviews (2011), 40(10), p. 5084-5121, Chinchilla, Rafael et al., Chemical Reviews (Washington, DC, United States) (2007), 107(3), p. 874-922) từ các nguyên liệu ban đầu có công thức cấu trúc (X-7) có xúc tác bằng các chất xúc tác kim loại chuyển tiếp chứa paladi và đồng.

Các hợp chất ban đầu có công thức cấu trúc (X-7) là đã biết hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết. Các ví dụ bao gồm 2-bromo-1,3-diclo-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]benzen, 2-bromo-1,3-dimetyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]benzen, 2-bromo-1-etyl-3-metyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl) etyl]benzen, 2-bromo-1-clo-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-3-(triflometyl) benzen, 2-bromo-1-metyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-3-(triflometyl)benzen, 2-bromo-1-clo-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-3-(triflometoxy)benzen, 2-bromo-1-metyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-3-(triflometoxy)benzen. Chúng có thể được điều chế, ví dụ, bằng các phương pháp được mô tả trong EP 1 253 128, trang 8-10.

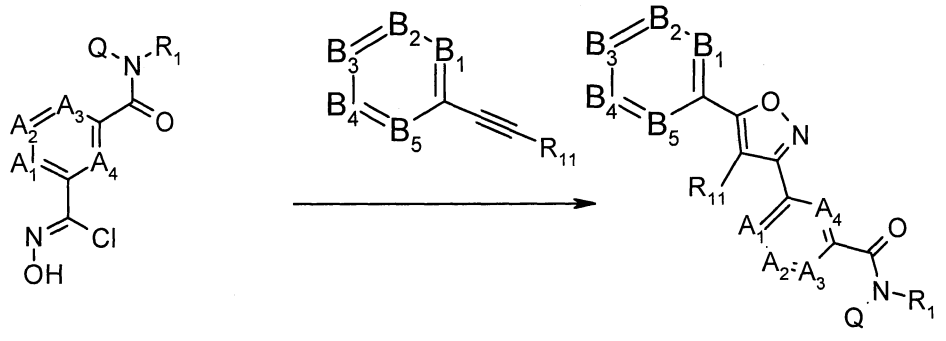
Các hợp chất ban đầu có công thức cấu trúc (X-8) là đã biết hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết. Nếu R^6=H, trong quy trình này có thể sử dụng nhóm báo vệ hơn là R^6. Các nhóm bảo vệ thích hợp là, ví dụ, trimetylsilyl, trietylsilyl và dimetylhydroxymetyl. Các nhóm bảo vệ thích hợp khác để đưa vào và tách ra được mô tả trong tài liệu [xem danh mục Greene's protective groups in organic synthesis,

4th edition, P. G. M. Wuts, T. W. Greene, John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, 2007, pages 927-933.]

Giai đoạn 3 Cách khác để kết hợp với amit

Theo cách khác, các hợp chất theo sáng chế (I-T23) có thể được điều chế bằng quy trình điều chế chung B (Sơ đồ phản ứng 9).

Sơ đồ phản ứng 9:



X-9 X-6 X-4

Các nhóm A_1-A_4, B_1-B_5, Q, R^1 và R^{11} mỗi nhóm là như được xác định trên đây.

Các hợp chất có công thức chung (X-4) theo sáng chế được điều chế bằng cách cho các hydroxamyl clorua có công thức cấu trúc (X-9) phản ứng với các axetylen có công thức cấu trúc (X-6).

Việc điều chế các hợp chất có công thức cấu trúc (X-6) được mô tả trên đây. Các hợp chất có công thức cấu trúc (X-9) được điều chế theo cách tương tự như cách điều chế các hợp chất có công thức cấu trúc (X-3) được mô tả trên đây.

Các hợp chất có công thức cấu trúc (X-3) thông thường là, ví dụ, 4-clo-3-(xyclopropylcarbamoyl)-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 3-(xyclopropylcarbamoyl)-4-flo-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 4-clo-3-(xyclopropylcarbamoyl)-5-flo-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 4-bromo-3-(xyclopropylcarbamoyl)-N-hydroxybenzimidoyl clorua.

(I-T24): Các hợp chất có công thức (I-24) có thể được điều chế, ví dụ, theo cách tương tự trong tài liệu Furukawa, Hirotoshi et al. Heterocycles, 79 (2009), p. 303-309; US 6,545,009, p. 34, Ví dụ 111.

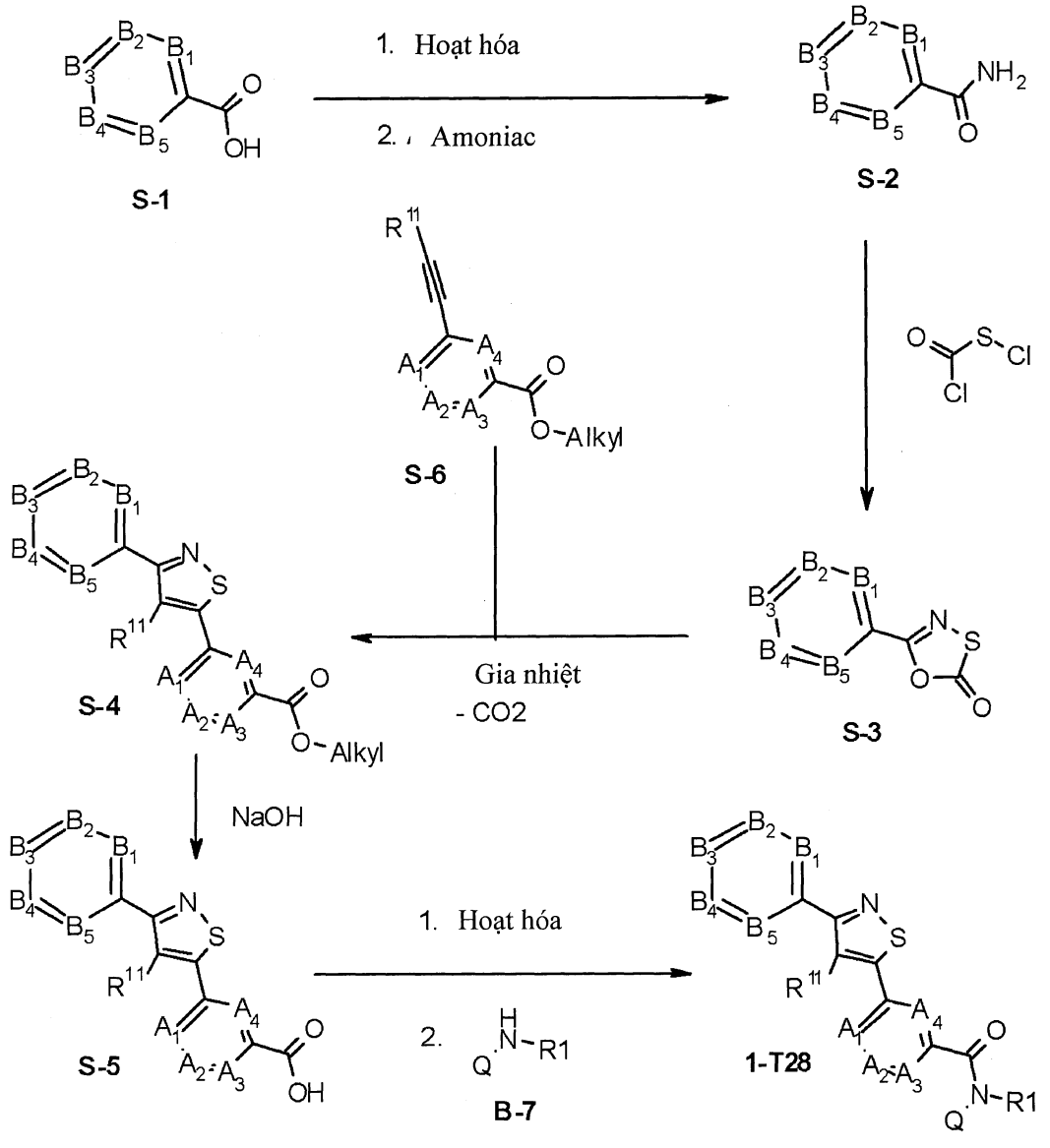
(I-T25): Các hợp chất có công thức (I-25) có thể được điều chế, ví dụ, theo cách tương tự trong WO 2004/14366, p. 113.

(I-T26): Các hợp chất có công thức (I-26) có thể được điều chế, ví dụ, theo cách tương tự trong tài liệu Chihiro, Masatoshi et al., Journal of Medicinal Chemistry, 38 (1995), p. 353-358.

(I-T27): Các hợp chất có công thức (I-27) có thể được điều chế, ví dụ, theo cách tương tự trong US 6,545,009, p. 31, Ví dụ 74.

Các hợp chất có công thức cấu trúc (I-T28) có thể được điều chế bằng quy trình được đưa ra trong Sơ đồ phản ứng 10.

Sơ đồ phản ứng 10

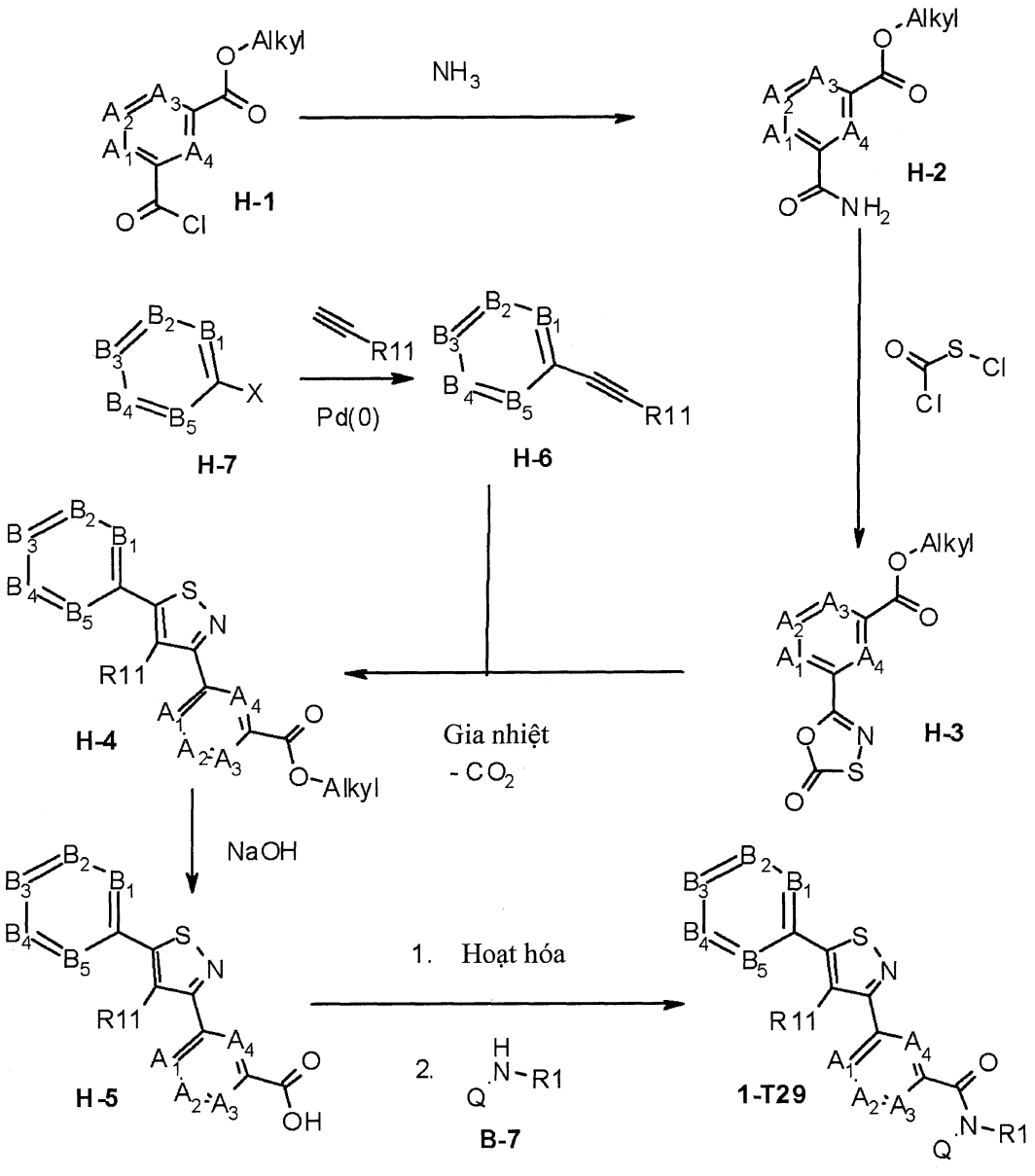


Các nhóm A^1-A^4, B^1-B^5, alkyl, Q, R^1 và R^{11} mỗi nhóm là như được xác định trên đây. Các hợp chất ban đầu có công thức cấu trúc (S-1) là đã biết (ví dụ US 5,739,083 p. 10, hoặc WO 2012/175474, p. 117-118) hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết. Các phản ứng được tiến hành trong các điều kiện được đưa ra trong tài liệu (ví dụ, Abdelrahman S. Mayhoub et al., Bioorg. Med. Chem. 20 (2012) p. 2427-2434 hoặc WO 2009/023372).

Quy trình I-T29

Các hợp chất có công thức cấu trúc (I-T29) có thể được điều chế bằng quy trình được đưa ra trong Sơ đồ phản ứng 11.

Sơ đồ phản ứng 3:



Các nhóm A^1-A^4, B^1-B^5, alkyl, Q, R^1 và R^{11} mỗi nhóm là như được xác định trên đây. Các hợp chất ban đầu có công thức cấu trúc (H-1) và (H-7) là đã biết (ví dụ US 3,725,417 p. 7 hoặc WO 2012/175474, p. 117-118) hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết. Các phản ứng được tiến hành trong các điều kiện được đưa ra trong tài liệu (ví dụ Abdelrahman S. Mayhoub et al., Bioorg. Med. Chem. 20 (2012) p. 2427-2434 hoặc WO 2009/023372).

Quy trình I-T30

(I-T30): Các hợp chất có công thức (I-T30) có thể được điều chế, ví dụ, tương tự như trong WO 2011/9484, p. 104; hoặc tài liệu Gamber, Gabriel G. et al., Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters, 21 (2011), p. 1447-1451.

(I-T31): Các hợp chất có công thức (I-T31) có thể được điều chế, ví dụ, tương tự như trong tài liệu Bishop, Brian C. et al., Synthesis, (2004), p. 43-52; hoặc Heller, Stephen T. et al., Organic Letters, 8 (2006), p. 2675-2678; hoặc Baddar, F.G. et al. Journal of Heterocyclic Chemistry, 15 (1978), p. 385-393.

(I-T32): Các hợp chất có công thức (I-T32) có thể được điều chế, ví dụ, tương tự như trong tài liệu Joo, Jung Min et al., Journal of Organic Chemistry, 75 (2010), p. 4911-4920.

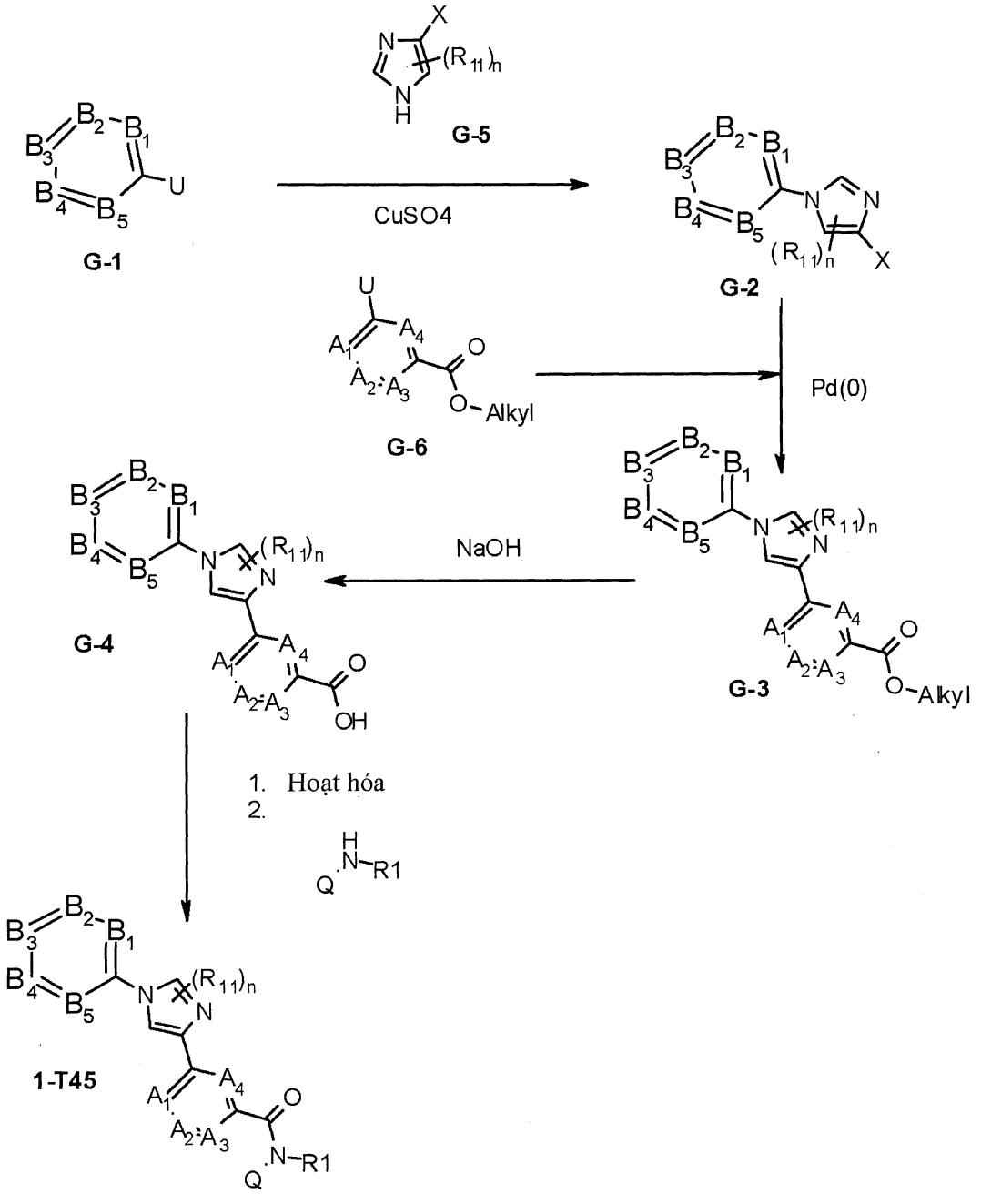
(I-T33): Các hợp chất có công thức (I-T33) có thể được điều chế, ví dụ, tương tự như trong tài liệu Joo, Jung Min et al., Journal of Organic Chemistry, 75 (2010), p. 4911-4920; hoặc WO 2004/91610, p. 70.

(I-T34): Các hợp chất có công thức (I-T34) có thể được điều chế, ví dụ, tương tự như trong tài liệu Al-Tel, Taleb et al., Journal of Medicinal Chemistry, 54 (2011), p. 8373-8385.

(I-T35): Các hợp chất có công thức (I-T35) có thể được điều chế, ví dụ, tương tự như trong tài liệu Yang, Shu-wie et al., Bioorganic và Medicinal Chemistry Letters, 21 (2011), p. 182-185; hoặc Kennedy, Andrew J. et al, Journal of Medicinal Chemistry, 54 (2011), p. 3524-3548.

Các hợp chất có công thức cấu trúc (I-T45) có thể được điều chế bằng quy trình được đưa ra trong Sơ đồ phản ứng 12.

Sơ đồ phản ứng 12



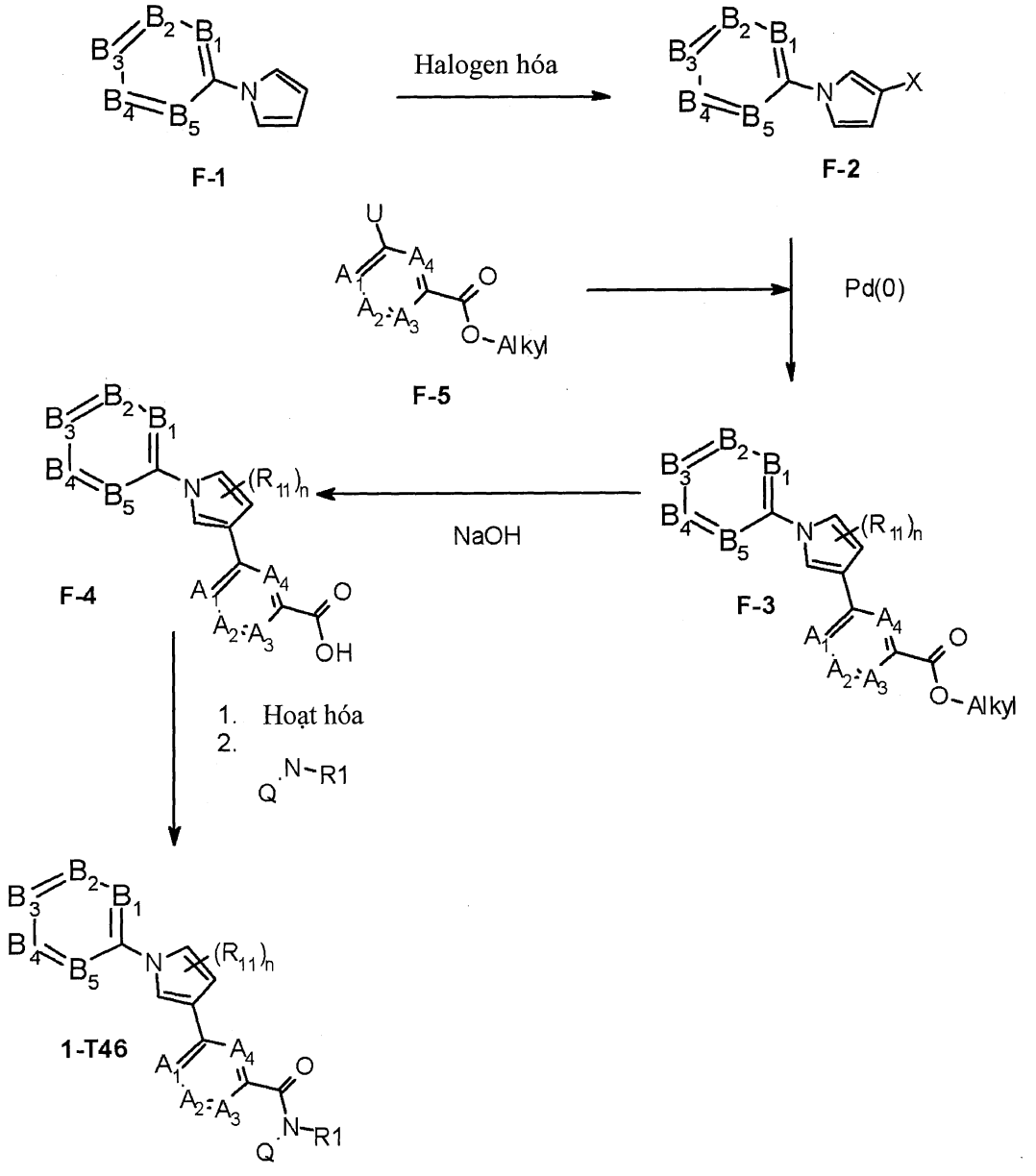
Các nhóm A_1-A_4, B_1-B_5, alkyl, Q, R^1 và R^{11} mỗi nhóm là như được xác định trên đây. U là axit boronic, este boronic hoặc trifloboronat. X là brom, iot hoặc triflat. Các hợp chất ban đầu có công thức cấu trúc (G-1), (G-5) và (G6) là đã biết hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết.

Các phản ứng có thể được tiến hành bằng các quy trình được mô tả trong tài liệu (xem, ví dụ Giai đoạn G1->G2 US 2013/0012532, p. 29).

Quy trình I-T46

Các hợp chất có công thức cấu trúc (I-T46) có thể được điều chế bằng quy trình được đưa ra trong Sơ đồ phản ứng 13.

Sơ đồ phản ứng 13



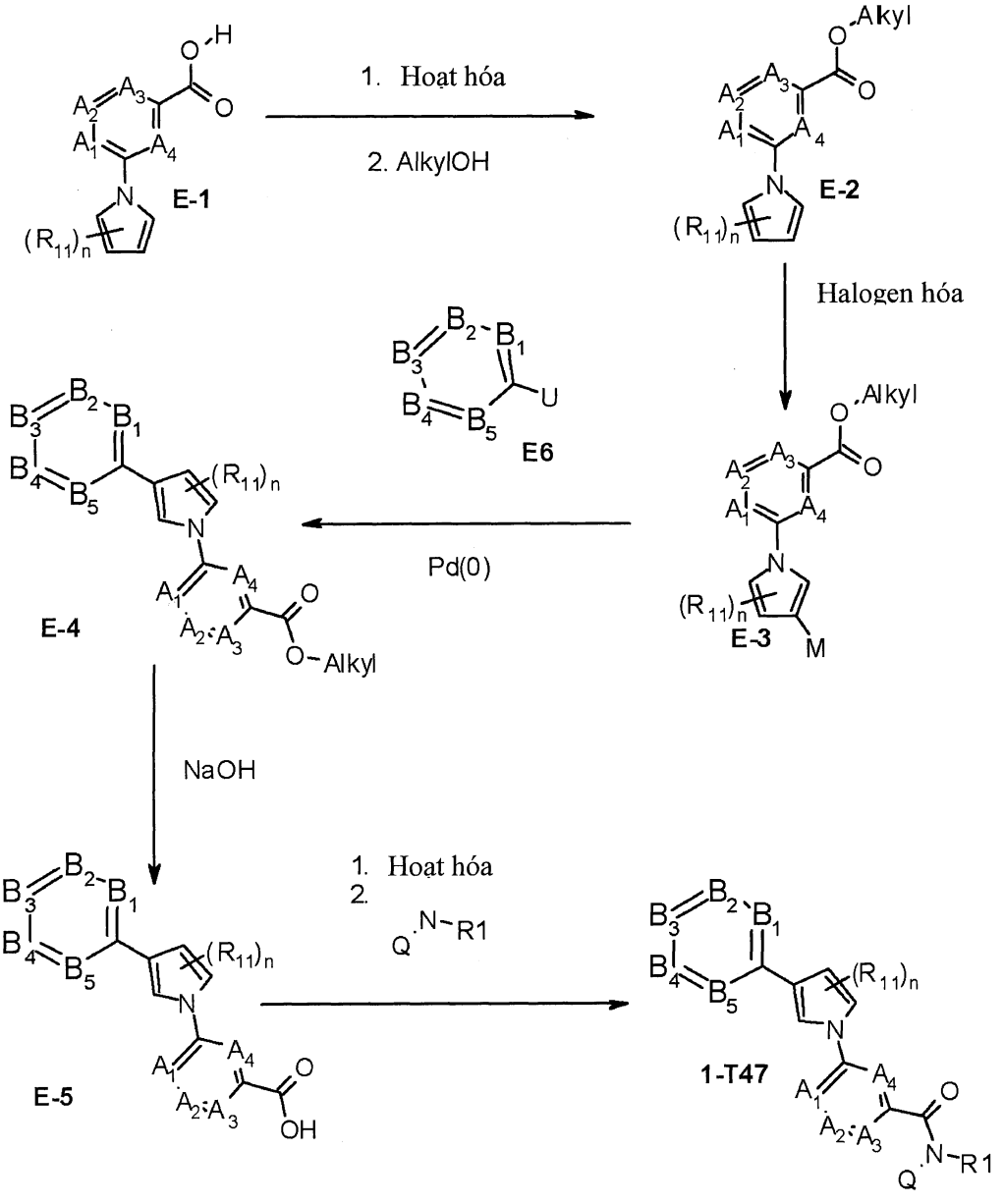
Các nhóm A_1-A_4, B_1-B_5, alkyl, Q, R^1 và R^{11} mỗi nhóm là như được xác định trên đây. U là axit boronic, este boronic hoặc trifloboronat. X là brom, iot hoặc triflat. Các hợp chất ban đầu có công thức cấu trúc (F-1) và (F-5) là đã biết (ví dụ F-1: Hulcoop, David G. et al., Organic Letters, 9 (2007), p. 1761-1764) hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết.

[469] Các phản ứng có thể được tiến hành bằng các quy trình được mô tả trong tài liệu, ví dụ US 2009/209476, p. 18-19.

Quy trình I-T47

Các hợp chất có công thức cấu trúc (I-T47) có thể được điều chế bằng quy trình được đưa ra trong Sơ đồ phản ứng 14.

Sơ đồ phản ứng 14



Các nhóm A_1-A_4, B_1-B_5, alkyl, Q, R^1 và R^{11} mỗi nhóm là như được xác định trên đây. U là brom, iot hoặc triflat khi M là axit boronic, este boronic hoặc trifloboronat. U là axit boronic, este boronic hoặc trifloboronat khi M là brom, iot hoặc

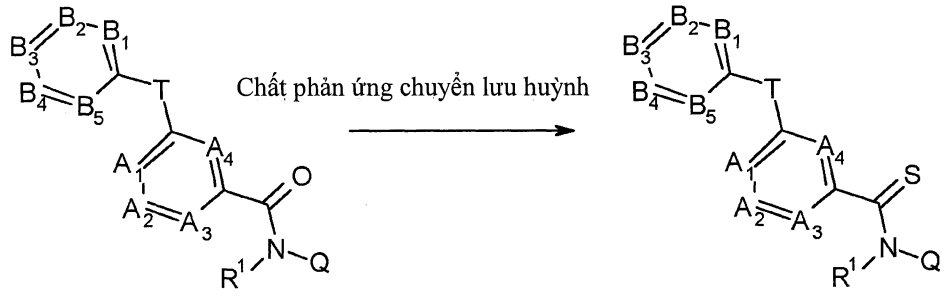
triflat. Các hợp chất ban đầu có công thức cấu trúc (E-1) và (E-6) là đã biết (ví dụ Liu, Kun et al., Journal of Medicinal Chemistry, 51 (2008), p. 7843-7854; hoặc Cornet, Stephanie M. et al., Transactions, (2003), p. 4395-4405), hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết.

Các phản ứng có thể được tiến hành bằng các quy trình được mô tả trong tài liệu, ví dụ US 2009/209476, p. 18-19.

Quy trình điều chế các thioamit

Các hợp chất có công thức cấu trúc (Ii) có thể được điều chế bằng quy trình được đưa ra trong Sơ đồ phản ứng 15 từ các hợp chất có công thức cấu trúc (Ih) qua phản ứng với các chất phản ứng chuyển lưu huỳnh.

Sơ đồ phản ứng 15:



(Ih) (2) (Ii)

Các nhóm A_1-A_4, B_1-B_5, alkyl, Q, T và R^1 mỗi nhóm là như được xác định trên đây. Chất phản ứng chuyển lưu huỳnh (2) được sử dụng có thể, ví dụ, là P_4S_{10} hoặc chất phản ứng Lawesson (2,4-bis(4-metoxyphenyl)-1,3,2,4-dithiadiphosphetan 2,4-disulphua).

Việc điều chế các hợp chất (Ih) được mô tả trên đây.

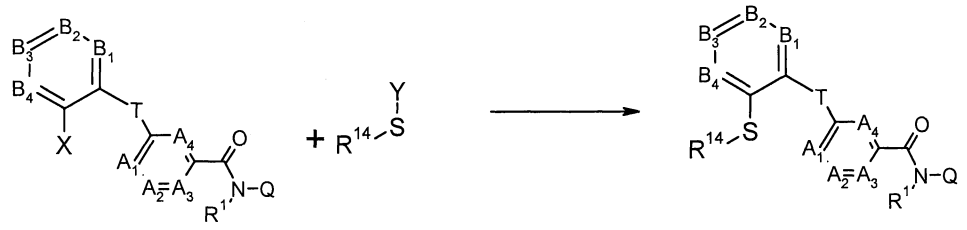
Các chất phản ứng chuyển lưu huỳnh có bán trên thị trường hoặc có thể được điều chế bằng các quy trình mà người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực này đã biết hoặc tương tự như các quy trình này.

Phản ứng được tiến hành tương tự các phương pháp theo tài liệu để chuyển lưu huỳnh vào các hợp chất cacbonamit *(ví dụ* WO2012056372, p. 77; WO2003066050, p. 31).

Quy trình điều chế (Ik)

Các hợp chất (Ik) theo sáng chế có thể được điều chế bằng quy trình được đưa ra trong Sơ đồ phản ứng 16 từ các hợp chất (Ij) qua phản ứng với các hợp chất lưu huỳnh có công thức cấu trúc (Y-3).

Sơ đồ phản ứng 16



(Ij) (Y-3) (Ik)

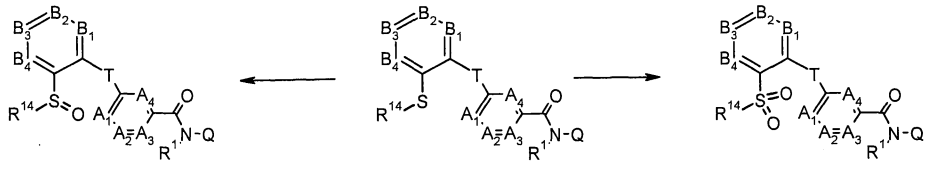
Các nhóm A_1 đến A_4, B_1 đến B4, alkyl, Q, R^1, n và R^{11} mỗi nhóm là như được xác định trên đây. X là nhóm rời chuyển thích hợp, ví dụ flo, clo, brom hoặc iot. R^{14} là C_1-C_6-alkyl tùy ý được thế. Y là hydro hoặc kim loại kiềm, ví dụ natri hoặc lithi.

Phản ứng được tiến hành tương tự các phương pháp theo tài liệu để đưa các nhóm Alkylthio vào hệ vòng thơm [ví dụ, Organometallics 1989, 8(5), 1303-1308; WO1998056761, Ví dụ 63, p. 97].

Quy trình điều chế (Ika) và (Ikb)

Các hợp chất theo sáng chế (Ika) và (Ikb) có thể được điều chế bằng quy trình được đưa ra trong Sơ đồ phản ứng 17 từ các hợp chất có công thức cấu trúc (Ik) qua phản ứng với các chất phản ứng oxy hóa.

Sơ đồ phản ứng 17:



(Ika) (Ik) (Ikb)

Các nhóm A_1 đến A_4, B_1 đến B_4, alkyl, Q, R^1, n và R^{11} mỗi nhóm là như được xác định trên đây. R^{14} là C_1-C_6-alkyl tùy ý được thế.

Việc điều chế các hợp chất có công thức cấu trúc (Ik) được mô tả trên đây.

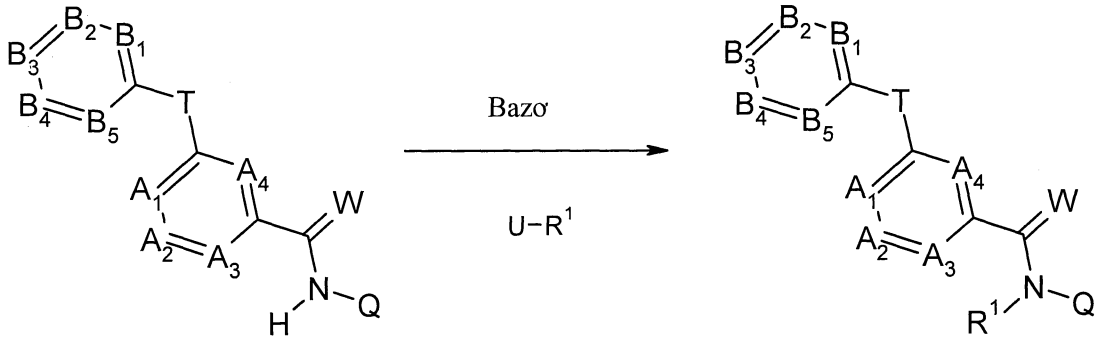
Các tác nhân oxy hóa được sử dụng có thể là các chất phản ứng mà người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực này đã biết từ tài liệu để điều chế sulphoxit và sulphon. Chúng có bán trên thị trường hoặc có thể được điều chế bằng các quy trình mà người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực này đã biết hoặc tương tự như các quy trình này. Các ví dụ bao gồm: hydro peroxit, axit peroxyaxetic, axit 3-cloperbenzoic và axit trifloperoxyaxetic.

Phản ứng được tiến hành tương tự các phương pháp theo tài liệu để điều chế sulphoxit và sulphon [các dẫn xuất sulphoxit: WO2006/097766; WO2005/019151; các dẫn xuất sulphon: WO2008/125214; WO2005/121087].

Quy trình điều chế các hợp chất N-alkyl

Các hợp chất có công thức cấu trúc (I) có thể được điều chế bằng quy trình được đưa ra trong Sơ đồ phản ứng 18 từ các hợp chất có công thức cấu trúc (Im) qua phản ứng với các tác nhân alkyl hóa.

Sơ đồ phản ứng 18:



(Im) (I)

Các nhóm A_1-A_4, B_1-B_5, alkyl và Q mỗi nhóm là như được xác định trên đây. U là, ví dụ, brom, iot hoặc triflat. R^1 trong từng trường hợp chủ yếu hoặc thứ yếu, là C_1-C_6-alkyl, C_3-C_6-alkenyl, C_3-C_6-alkynyl, C_4-C_7-xycloalkyl, C_1-C_6-alkylcacbonyl, C_1-C_6-alkoxycacbonyl, aryl-(C_1-C_3)-alkyl, heteroaryl-(C_1-C_3)-alkyl tùy ý được thế. W là oxy.

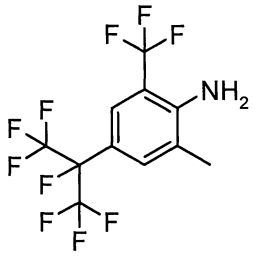
Các hợp chất có cấu trúc U-R^1 có bán trên thị trường hoặc theo tài liệu, hoặc có thể được điều chế tương tự các phương pháp theo tài liệu. Các ví dụ bao gồm: metyl clorua, metyl bromua, metyl iodua, dimetyl sulphat, metyl triflat, etyl bromua, etyl iodua, dietyl sulphat và etyl triflat.

Các bazơ được sử dụng cho phản ứng có bán trên thị trường. Các ví dụ bao gồm các hợp chất kim loại kiềm thổ và kim loại kiềm (ví dụ hydroxit, hydrit, oxit và cacbonat của lithi, natri, kali, magie, canxi và bari), ví dụ natri hydrua, natri hydroxit và kali hydroxit; cacbonat như natri hydrocacbonat và kali cacbonat.

Phản ứng được tiến hành tương tự các phương pháp theo tài liệu để *N*-alkyl hóa các amit bậc hai (ví dụ G.L. Gisele, A. Lüttringhaus, Synthesis (1971) p. 266, xem đánh giá trong tài liệu của B.C. Challis, J.A. Challis: The Chemistry of Functional Groups, The Chemistry of Amits, S. Patai, J. Zabicky, editors, Interscience Publishers, London, 1970, p. 734 ff).

Điều chế nguyên liệu ban đầu 4-heptafloisopropyl-2-metyl-6-triflometylanilin

Nguyên liệu ban đầu 4-heptafloisopropyl-2-metyl-6-triflometylanilin có công thức cấu trúc (D-1a) cho đến nay chưa được mô tả trong tài liệu. Việc điều chế có thể được tiến hành bằng 2 quy trình khác nhau.

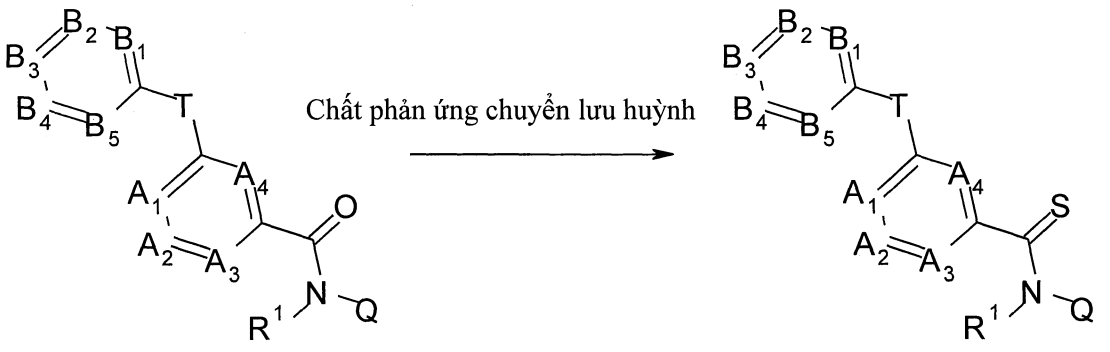


D-1a

Quy trình điều chế thioamit

Các hợp chất có công thức cấu trúc (Ii) có thể được điều chế bằng quy trình được mô tả trong Sơ đồ phản ứng 15 từ các hợp chất có công thức cấu trúc (Ih) bằng phản ứng với các chất phản ứng chuyển lưu huỳnh.

Sơ đồ phản ứng 15



(Ih) (2) (Ii)

Các nhóm A_1-A_4, B_1-B_5, alkyl, Q, T, và R^1 mỗi nhóm là như được xác định trên đây. Các chất phản ứng chuyển lưu huỳnh (2) được sử dụng có thể, ví dụ, là P_4S_{10} hoặc chất phản ứng Lawesson (2,4-bis(4-metoxyphenyl)-1,3,2,4-dithiadiphosphetan 2,4-disulphua).

Việc điều chế các hợp chất (Ih) được mô tả trên đây.

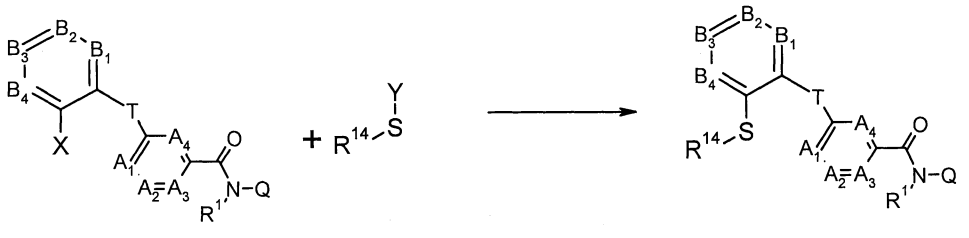
Các chất phản ứng chuyển lưu huỳnh có bán trên thị trường hoặc có thể được điều chế bằng các quy trình mà người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực này đã biết hoặc tương tự như các quy trình này.

Phản ứng được tiến hành tương tự các phương pháp theo tài liệu để chuyển lưu huỳnh vào các cacbonamit *(ví dụ* WO2012056372, p. 77; WO2003066050, p. 31).

Quy trình điều chế (Ik)

Các hợp chất theo sáng chế (Ik) có thể được điều chế bằng quy trình được đưa ra trong Sơ đồ phản ứng 16 từ các hợp chất (Ij) bằng phản ứng với các hợp chất lưu huỳnh có công thức cấu trúc (Y-3).

Sơ đồ phản ứng 16



(Ij) (Y-3) (Ik)

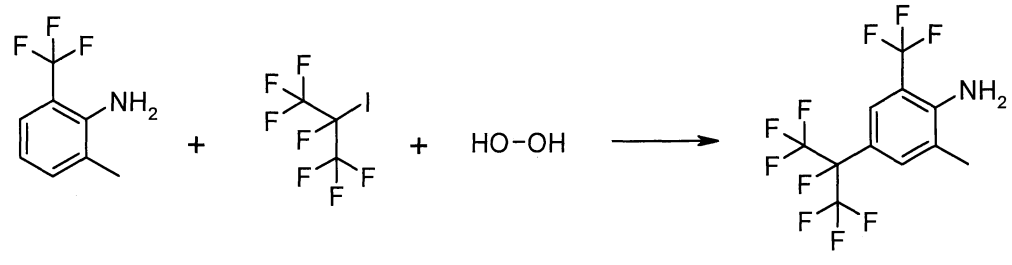
Các nhóm A_1 đến A_4, B_1 đến B_4, alkyl, Q, R^1, n và R^{11} mỗi nhóm là như được xác định trên đây. X là nhóm rời chuyển thích hợp, ví dụ flo, clo, brom hoặc iot. R^{14} là C_1-C_6-alkyl tùy ý được thế. Y là hydro hoặc kim loại kiềm, ví dụ natri hoặc lithi.

Phản ứng được tiến hành tương tự các phương pháp theo tài liệu để đưa các nhóm Alkylthio vào các hợp chất thơm [ví dụ, Organometallics 1989, 8(5), 1303-1308; WO1998056761, Ví dụ 63, p. 97].

Quy trình 1:

4-Heptafloisopropyl-2-metyl-6-triflometylanilin có công thức cấu trúc (K-1) có thể được điều chế từ 2-metyl-6-triflometylanilin bằng quy trình được đưa ra trong Sơ đồ phản ứng 1, bằng phản ứng với heptafloisopropyl iodua với sự có mặt của hydro peroxit.

Sơ đồ phản ứng 4



K-1

2-metyl-6-triflometylanilin là theo tài liệu (John P. Chupp, Terry M. Balthazor, Michael J. Miller, và Mark J. Pozzo, J. Org. Chem. 49 (1984),4711-4716 hoặc Thomas E. Nickson J. Org. Chem. 51 (1986) 3903-3904), và heptafloisopropyl iodua có bán trên thị trường.

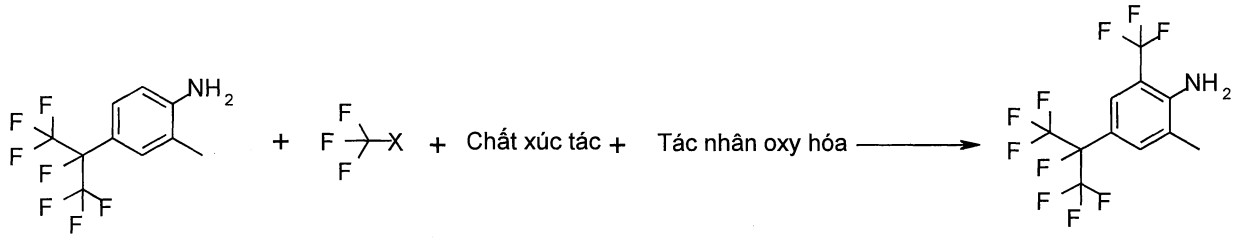
Phản ứng được tiến hành tương tự như các quy trình đã biết để triflometyl hóa các hợp chất thơm (Tatsuhito Kino, Yu Nagase, Yuhki Ohtsuka, Kyoko Yamamoto, Daisuke Uraguchi, Kenji Tokuhisa and Tetsu Yamakawa, Journal of Fluorine Chemistry 131 (2010) 98–105).

Quy trình 2

Ngoài ra, 4-heptafloisopropyl-2-metyl-6-triflometylanilin có công thức cấu trúc (K-1) có thể được điều chế từ 4-heptafloisopropyl-2-metylanilin bằng quy trình được

đưa ra trong Sơ đồ 2, bằng phản ứng với natri triflometylsulphinat với sự có mặt của các tác nhân oxy hóa và các chất xúc tác kim loại chuyển tiếp.

Sơ đồ phản ứng 5



D-1a

X là Br, I, $NaSO_2^-$ (natri triflometylsulphinat), KSO_2^- (kali triflometylsulphinat). Đặc biệt ưu tiên natri triflometylsulphinat.

4-Heptafloisopropyl-2-metylanilin là đã biết (US2004/92762).

Các chất xúc tác thích hợp là các kim loại chuyển tiếp như sắt(II) sulphat, sắt(III) nitrat, copper(II) triflat hoặc feroxen . Đặc biệt ưu tiên sắt(II) sulphat.

Cụ thể, các tác nhân oxy hóa thích hợp là peroxit như hydro peroxit, tert-butyl hydroperoxit hoặc natri peroxodisulphat, kali peroxodisulphat, natri peroxomonosulphat hoặc kali peroxomonosulphat. Đặc biệt ưu tiên tert-butyl hydroperoxit.

Khi thực hiện phản ứng, có thể sử dụng các dung môi thích hợp.

Các chất pha loãng hoặc dung môi hữu dụng để thực hiện các quy trình theo sáng chế về nguyên tắc bao gồm tất cả các dung môi hữu cơ mà trơ trong điều kiện phản ứng cụ thể. Các ví dụ bao gồm: các nitril như axetonitril, propionitril, butyronitril, isobutyronitril; nước, tetrahydrothiophen dioxit, dimetyl sulphoxit, tetrametylen sulphoxit, dipropyl sulphoxit, diisobutyl sulphoxit, dibutyl sulphoxit, diisoamyl sulphoxit, các sulphon (ví dụ dimetyl, dietyl, dipropyl, dibutyl, dihexyl, metyl etyl, etyl propyl, etyl isobutyl và pentametylen sulphon); các hydrocacbon béo, vòng béo (ví dụ pentan, hexan, heptan, octan, nonan và các hydrocacbon kỹ thuật), và cả các hợp chất gọi là "cồn trắng" có các thành phần với điểm sôi nằm trong khoảng từ, ví dụ, 40°C đến 250°C, các phân đoạn dầu mỏ với điểm sôi nằm trong khoảng từ 70°C đến 190°C, xyclohexan, metylxyclohexan, ete dầu mỏ, ligroin, octan.

Các chất pha loãng được ưu tiên sử dụng có thể là dung môi bất kỳ mà không làm hỏng phản ứng, ví dụ nước; các nitril như axetonitril, propionitril, butyronitril, isobutyronitril. Các dung môi có thể được sử dụng một mình hoặc kết hợp 2 hoặc nhiều dung môi.

Các bazơ có thể được sử dụng trong phản ứng. Các ví dụ bao gồm các hợp chất kim loại kiềm thổ hoặc kim loại kiềm (ví dụ hydroxit, hydrit, oxit và cacbonat của lithi, natri, kali, magie, canxi và bari).

Chất trợ phản ứng bazơ được ưu tiên sử dụng có thể là natri hydrocacbonat; ngoài ra, ví dụ, có thể sử dụng các bazơ sau: hydroxit kim loại kiềm, ví dụ natri hydroxit và kali hydroxit; cacbonat như natri hydrocacbonat và kali cacbonat; phosphat như natri dihydrophosphat, dikali hydrophosphat và trinatri phosphat.

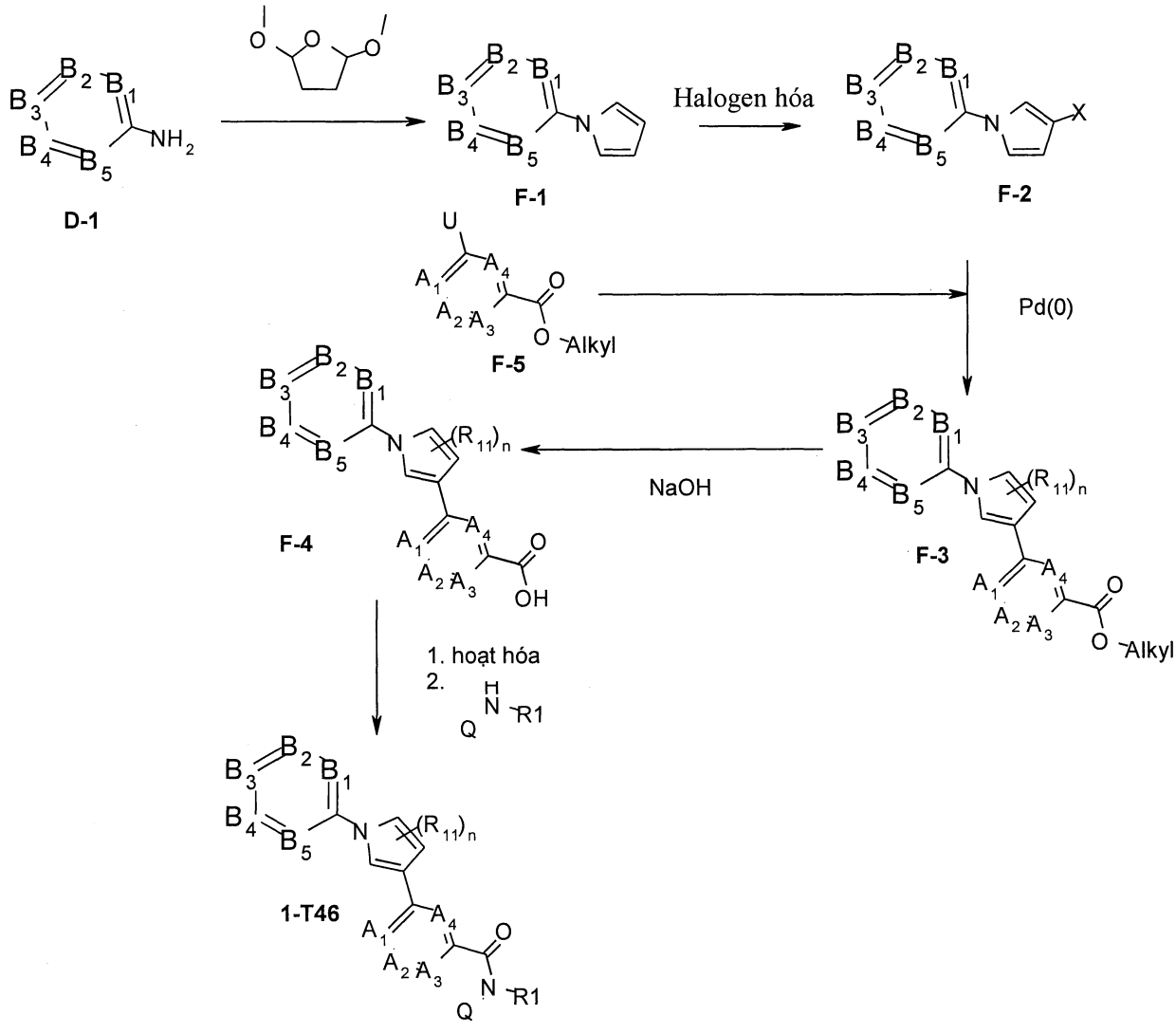
Phản ứng có thể được tiến hành trong khoảng nhiệt độ rộng. Phản ứng thường được tiến hành trong khoảng nhiệt độ từ -78 đến 200°C, tốt hơn là ở nhiệt độ từ -10 đến 150°C. Phản ứng có thể được thực hiện dưới áp suất tăng hoặc giảm. Nhưng tốt hơn nếu phản ứng được tiến hành dưới áp suất chuẩn. Thời gian phản ứng nằm trong khoảng từ 0,1 và 72 giờ, tốt hơn là từ 1 đến 24 giờ.

Để tiến hành phản ứng, 1 đến 10 mol, tốt hơn là 1 đến 4 mol tác nhân triflometyl hóa; 1 đến 20 mol, tốt hơn là 1 đến 8 mol tác nhân oxy hóa và 0,01 đến 1 mol, tốt hơn là 0,05 đến 0,4 mol chất xúc tác trên mỗi mol 4-heptafloisopropyl-2-metyl-6-triflometylanilin được sử dụng trong dung môi hoặc hỗn hợp dung môi, ví dụ hỗn hợp axetonitril và nước.

Quy trình I-T46 mở rộng

Các hợp chất có công thức cấu trúc (I-T46) có thể được điều chế bằng quy trình được đưa ra trong the Sơ đồ phản ứng.

Sơ đồ phản ứng 6

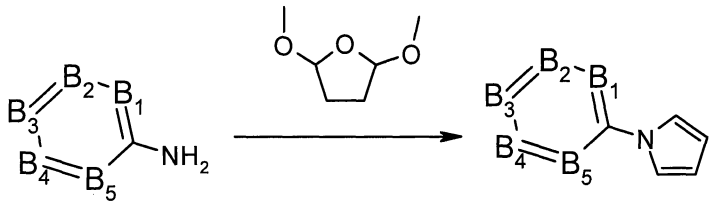


Các nhóm A_1-A_4, B_1-B_5, alkyl, Q, R^1 và R^{11} mỗi nhóm là như được xác định trên đây. U là axit boronic, este boronic hoặc trifloboronat. X là brom, iot hoặc triflat. Các hợp chất ban đầu có công thức cấu trúc (F-1) và (F-5) là đã biết (ví dụ F-1: Hulcoop, David G. et al., Organic Letters, 9 (2007), p. 1761-1764, Supporting information pages 1 ff.), hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết (ví dụ từ D-1).

Các phản ứng có thể được tiến hành bằng các quy trình được mô tả trong tài liệu, ví dụ, US2009/209476, p. 18-19.

Giai đoạn 1 Đóng vòng pyrol

Giai đoạn 1 của quy trình điều chế các hợp chất theo sáng chế (I-T46):

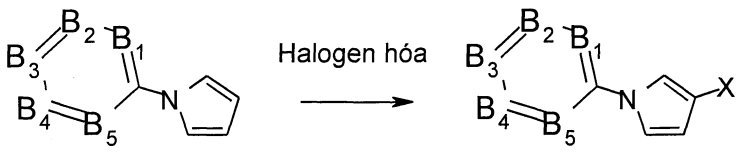


D-1 F-1b F-1

Các hợp chất có công thức chung (F-1) theo sáng chế có thể được điều chế tương tự các phương pháp theo tài liệu từ các nguyên liệu ban đầu có công thức cấu trúc (D-1) và (F-1b). Các nhóm B^1-B^5 mỗi nhóm là như được xác định trên đây. Các hợp chất có công thức cấu trúc (D-1) là theo tài liệu (ví dụ US2002/198399, WO2009/30457, trang 28) hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp theo tài liệu. Hợp chất (F1-b) có bán trên thị trường. Đại diện thông thường của các hợp chất có công thức cấu trúc (D-1) bao gồm 2-amino-1,3-diclo-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]benzen, 2-amino-1,3-dimetyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)-etyl]benzen, 2-amino-1-etyl-3-metyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]benzen, 2-amino-1-clo-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-3-(triflometyl)benzen, 2-amino-1-metyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-3-(triflometyl)benzen, 2- amino -1-clo-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-3-(triflometoxy)benzen, 2-amino-1-metyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-3-(triflometoxy)benzen. Phản ứng được tiến hành trong các điều kiện đã biết cho các hợp chất tương tự trong tài liệu (ví dụ Hulcoop, David G. et al., Organic Letters, 9 (2007), p. 1761-1764, Supporting information pages 1 ff.)

Giai đoạn 2 Halogen hóa

Giai đoạn 1 của quy trình điều chế các hợp chất theo sáng chế (I-T46):



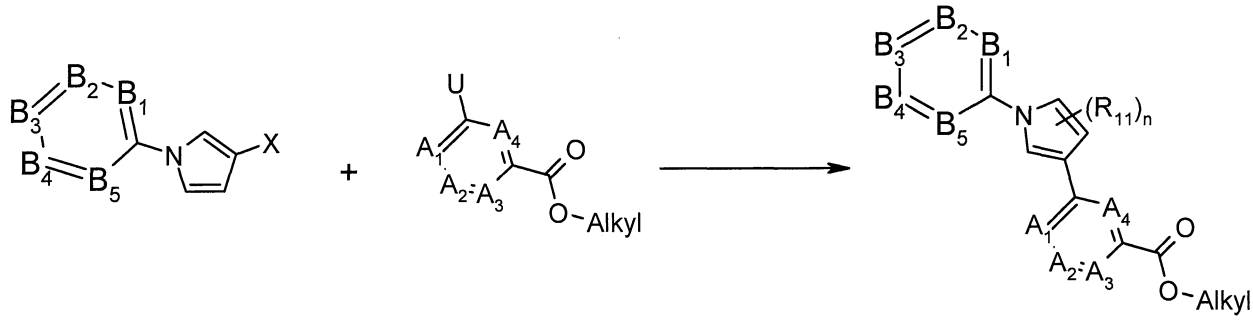
F-1 F-2

Các hợp chất có công thức chung (F-2) có thể được điều chế tương tự các phương pháp theo tài liệu từ các nguyên liệu ban đầu có công thức cấu trúc (F-1) bằng cách halogen hóa. Các nhóm B^1-B^5 mỗi nhóm là như được xác định trên đây. Các hợp chất có công thức cấu trúc (F-1) là theo tài liệu (ví dụ F-1: Hulcoop, David G. et al., Organic Letters, 9 (2007), p. 1761-1764, Supporting information page 1 ff.) hoặc có thể được điều chế bằng phương pháp được mô tả trên đây. Đại diện thông thường của các hợp chất có công thức cấu trúc (F-1) bao gồm 1-[2,6-diclo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrol, 1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl) etyl]phenyl]pyrol, 1-[2-etyl-6-metyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl) etyl]phenyl] pyrol, 1-[2-clo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometyl)phenyl]pyrol, 1-[2-metyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometyl)phenyl]pyrol, 1-[1-clo-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometoxy)phenyl] pyrol, 1-[1-metyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometoxy)phenyl]pyrol.

Các hợp chất halogen hóa thích hợp là các hợp chất mà người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực này đã biết, ví dụ brom, iot, N-bromosucxinimit, N-iodosucxinimit, 1,3-dibromo-5,5-dimetylhydantoin và benzyltrimetylamoni tetracloiodat. Ưu tiên việc sử dụng brom, iot và iodosucxinimit. Phản ứng tuân theo các điều kiện theo tài liệu (ví dụ Tatsuta; Itoh Bulletin of the Chemical Society of Japan, 67 (1994) 1449-1455).

Giai đoạn 3 Kết hợp axit boronic

Giai đoạn 3 của quy trình điều chế các hợp chất theo sáng chế (I-T46):

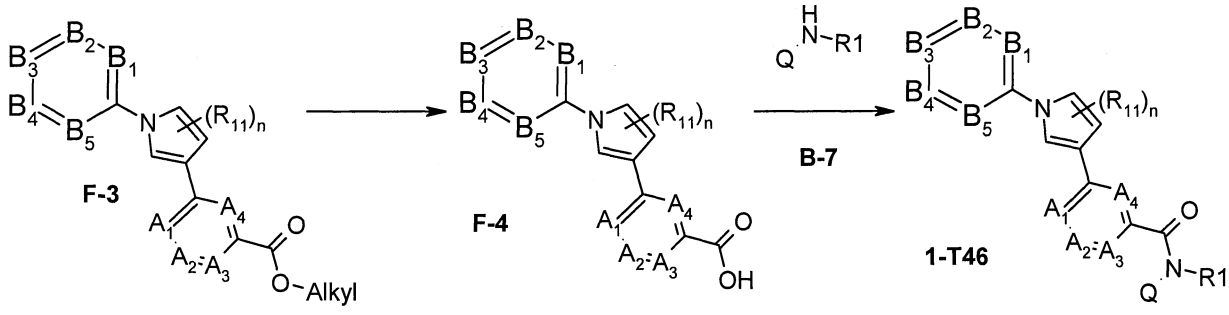


F-2 F-5 F-3

Các nhóm A_1 đến A_4, B_1 đến B_5, alkyl, n và R^{11} mỗi nhóm là như được xác định trên đây. U là, ví dụ, axit boronic, este boronic hoặc trifloboronat, X là brom, iot hoặc triflat.

Các hợp chất có công thức chung (F-3) theo sáng chế có thể được điều chế bằng các quy trình theo tài liệu bằng các phản ứng có xúc tác paladi từ các chất đồng phản ứng có công thức cấu trúc chung (F-2) và (F-5) (ví dụ WO 2005/040110 hoặc WO 2009/089508). Các hợp chất có công thức chung (F-5) có bán trên thị trường hoặc có thể được điều chế bằng các quy trình mà người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực này đã biết.

Giai đoạn 4, 5 thủy phân, amit hóa



Các hợp chất có công thức chung (I-T46) theo sáng chế có thể được điều chế tương tự như các phương pháp kết hợp peptit theo tài liệu từ các nguyên liệu ban đầu (F-4) và (B-7) (ví dụ WO 2010/051926 hoặc WO 2010/133312). Các hợp chất có công thức chung (F-4) có thể được điều chế tương tự như các quy trình theo tài liệu bằng cách thủy phân este từ các hợp chất có công thức chung (F-3) (ví dụ WO 2010/051926 hoặc WO 2010/133312). Các nhóm A_1 đến A_4, B_1 đến B_5, alkyl, Q, R^1 và R^{11} mỗi nhóm là như được xác định trên đây.

Q

Theo một phương án được ưu tiên hơn Q trong hợp chất có công thức (I) hoặc (Ia‘‘) hoặc (IT-2) hoặc (I-T3) hoặc (I-T4) hoặc (I-T22) hoặc (I-T23) hoặc (I-T46) là C_1-C_4-alkyl, 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetylamino)etyl, C_1-C_4-alkyl được thế flo hoặc 1-xyanopropyl- hoặc pyridin như 2,2,2-trifloetyl, 2,2-difloetyl, 3,3,3-triflopropyl, pyridin-2-ylmetyl hoặc (1-xyanoxyclopropyl)metyl; C_3-C_4-xycloalkyl như xyclopropyl hoặc xyclobutyl; C_3-C_4-xycloalkyl tùy ý được thế như xyclopropyl được thế C_1-C_4-alkyl tùy ý được thế flo (ví dụ 1-triflometyl-xyclopropyl, 1-tert-butylxyclopropyl), 1-thiocarbamoylxyclopropyl, 1-carbamoylxyclopropyl, 1-xyanoxyclopropyl, trans-2-floxyclopropyl, xis-2-floxyclopropyl; C_4-C_6-heteroxycloalkyl như oxetan-3-yl, thietan-3-yl, 1-oxidothietan-3-yl, hoặc 1,1-dioxidothietan-3-yl; hoặc từng trường hợp benzyl

tùy ý được thế C_1-C_4-alkyl; pyrazol (như N-metylpyrazol-3-yl), pyridin; metylsulphonyl; hoặc 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetylamino)etyl.

Theo một phương án đặc biệt được ưu tiên Q trong hợp chất có công thức (I) hoặc (Ia‘‘) hoặc (IT-2) hoặc (I-T3) hoặc (I-T4) hoặc (I-T22) hoặc (I-T23) hoặc (I-T46) là C_1-C_3-alkyl được thế flo như 2,2,2-trifloetyl hoặc 3,3,3-triflopropyl; xyclopropyl; xyclopropyl tùy ý được thế xyano-, C_1-C_4-alkyl- như 1-xyanoxyclopropyl hoặc 1-triflometylxyclopropyl; thietan-3-yl; hoặc 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetyl)aminoetyl.

Công thức (I)

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó T là T2, T3, T4, T22, T23 hoặc T46 và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [9].

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó T là T2, T3, T4, T22, T23 hoặc T46 và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [9].

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó T là T2 hoặc T4 và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [9].

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó T là T3 hoặc T46 và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [9].

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó T là T22 hoặc T23 và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [9].

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó T là T2, T3, T4, T22, T23 hoặc T46, B3 là C-R^8 và R^8 là (C_1-C_6)-alkyl, (C_1-C_6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl, mỗi nhóm được thế, trong đó các phần tử thế được chọn từ halogen và hydroxyl, trong đó ít nhất một phần tử thế là halogen và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [9].

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó T là T2, T3, T4, T22, T23 hoặc T46, B3 là C-R^8 và R^8 là (C_1-C_6)-alkyl, (C_1-C_6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl, mỗi nhóm trong đó được thế, trong đó các phần tử thế được chọn từ halogen và hydroxyl, trong đó ít nhất một phần tử thế là halogen và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [9].

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó T là T2 hoặc T4, B3 là C-R^8 và R^8 là (C_1-C_6)-alkyl, (C_1-C_6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl, mỗi nhóm trong số đó được thế, trong đó các phần tử thế được chọn từ halogen và hydroxyl, trong đó ít nhất một phần tử thế là halogen và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [9].

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó T là T3 hoặc T46, B3 là C-R^8 và R^8 là (C_1-C_6)-alkyl, (C_1-C_6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl, mỗi nhóm trong số đó được thế, trong đó các phần tử thế được chọn từ halogen và hydroxyl, trong đó ít nhất một phần tử thế là halogen và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [9].

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó T là T22 hoặc T23, B3 là C-R^8 và R^8 là (C_1-C_6)-alkyl, (C_1-C_6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl, mỗi nhóm trong số đó được thế, trong đó các phần tử thế được chọn từ halogen và hydroxyl, trong đó ít nhất một phần tử thế là halogen và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [9]. Trong ngữ cảnh này, theo một phương án được đặc biệt ưu tiên, sáng chế đề cập đến các hợp chất trong đó R^8 là (C_1-C_6)-alkyl, (C_1-C_6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl được perflo hóa, tốt nhất là (C_1-C_4)-alkyl, (C_1-C_4)-alkoxy được perflo hóa.

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó T là T2, T3, T4, T22, T23 hoặc T46, B3 là C-R^8 và R^8 là (C_1-C_6)-alkyl, (C_1-C_6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl, mỗi nhóm trong số đó được thế, trong đó các phần tử thế được chọn từ halogen và hydroxyl, trong đó ít nhất một phần tử thế là halogen, tốt hơn nữa là trong đó R^8 là (C_1-C_6)-alkyl, (C_1-C_6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl được perflo hóa, tốt nhất là (C_1-C_4)-alkyl, (C_1-C_4)-alkoxy được perflo hóa, trong đó B_1, B_2, B_4 và B_5 lần lượt là CR^6, CR^7, CR^9 và CR^{10} trong đó R^6, R^7, R^9 và R^{10} mỗi nhóm độc lập là H, halogen, xyano, nitro, hoặc C_1-C_4-alkyl, C_3-C_4-

xycloalkyl, C_1-C_4-alkoxy, *N*-alkoxyiminoalkyl, C_1-C_4-alkylsulphanyl, C_1-C_4-alkylsulphinyl, C_1-C_4-alkylsulphonyl, *N*-C_1-C_4-alkylamino, *N,N*-di-C_1-C_4-alkylamino, mỗi nhóm trong số đó được thế bằng ít nhất một phần tử thế được chọn từ halogen và hydroxyl, trong đó ít nhất một phần tử thế là halogen, và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [9]. Theo một phương án được ưu tiên khác, R^6 và R^{10} mỗi nhóm là halogen (như Cl, Br hoặc F), mỗi C_1-C_3-alkyl, hoặc mỗi C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen, ví dụ C_1-C_3-alkyl được perflo hóa (perflometyl, perfloetyl hoặc perflopropyl).

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó T là T2, T3, T4, T22, T23 hoặc T46, B3 là C-R^8 và R^8 là (C_1-C_6)-alkyl, (C_1-C_6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl, mỗi nhóm trong số đó được thế, trong đó các phần tử thế được chọn từ halogen và hydroxyl, trong đó ít nhất một phần tử thế is halogen, tốt hơn nữa là trong đó R^8 là (C_1-C_6)-alkyl, (C_1-C_6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl được perflo hóa, tốt nhất là (C_1-C_4)-alkyl, (C_1-C_4)-alkoxy được perflo hóa, trong đó B_1, B_2 và B_4 lần lượt là CR^6, CR^7 và CR^9 và B^5là N, trong đó R^6, R^7 và R^9 mỗi nhóm độc lập là H, halogen, xyano, nitro, hoặc C_1-C_4-alkyl, C_3-C_4-xycloalkyl, C_1-C_4-alkoxy, *N*-alkoxyiminoalkyl, C_1-C_4-alkylsulphanyl, C_1-C_4-alkylsulphinyl, C_1-C_4-alkylsulphonyl, *N*-C_1-C_4-alkylamino, *N,N*-di-C_1-C_4-alkylamino, mỗi nhóm trong số đó được thế bằng ít nhất một phần tử thế được chọn từ halogen và hydroxyl, trong đó ít nhất một phần tử thế là halogen, và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [9].

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó T là T2, T3, T4, T22, T23 hoặc T46, B3 là C-R^8 và R^8 là (C_1-C_6)-alkyl, (C_1-C_6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl, mỗi nhóm trong số đó được thế, trong đó các phần tử thế được chọn từ halogen và hydroxyl, trong đó ít nhất một phần tử thế là halogen, tốt hơn nữa là trong đó R^8 là (C_1-C_6)-alkyl, (C_1-C_6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl được perflo hóa, tốt nhất là (C_1-C_4)-alkyl, (C_1-C_4)-alkoxy được perflo hóa, trong đó B_1, B_2, B_4 và B_5 lần lượt là CR^6, CR^7, CR^9 và CR^{10} trong đó R^6, R^7, R^9 và R^{10} mỗi nhóm độc lập là H, halogen, xyano, nitro, hoặc C_1-C_4-alkyl, C_3-C_4-xycloalkyl, C_1-C_4-alkoxy, *N*-alkoxyiminoalkyl, C_1-C_4-alkylsulphanyl, C_1-C_4-alkylsulphinyl, C_1-C_4-alkylsulphonyl, *N*-C_1-C_4-alkylamino, *N,N*-di-C_1-C_4-alkylamino,

mỗi nhóm trong số đó được thế bằng ít nhất một phần tử thế được chọn từ halogen và hydroxyl, trong đó ít nhất một phần tử thế là halogen, mỗi R^{11} độc lập là H, amino (NH_2) hoặc xyano, tốt hơn là H, W là O, R^1 là H, metyl, etyl, n-propyl, isopropyl, n-butyl, isobutyl, s-butyl, t-butyl, tốt hơn là H hoặc metyl, và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [9]. Theo một phương án được ưu tiên khác, R^6 và R^{10} mỗi nhóm là halogen (như Cl, Br hoặc F), mỗi C_1-C_3-alkyl, hoặc mỗi C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen, ví dụ C_1-C_3-alkyl được perflo hóa (perflometyl, perfloetyl hoặc perflopropyl).

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó T là T2, T3, T4, T22, T23 hoặc T46, B3 là C-R^8 và R^8 là (C_1-C_6)-alkyl, (C_1-C_6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl, mỗi nhóm trong số đó được thế, trong đó các phần tử thế được chọn từ halogen và hydroxyl, trong đó ít nhất một phần tử thế là halogen, tốt hơn nữa là trong đó R^8 là (C_1-C_6)-alkyl, (C_1-C_6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl được perflo hóa, tốt nhất là (C_1-C_4)-alkyl, (C_1-C_4)-alkoxy được perflo hóa, trong đó B_1, B_2 và B_4 lần lượt là CR^6, CR^7 và CR^9 và B^5 là N, trong đó R^6, R^7 và R^9 mỗi nhóm độc lập là H, halogen, xyano, nitro, hoặc C_1-C_4-alkyl, C_3-C_4-xycloalkyl, C_1-C_4-alkoxy, *N*-alkoxyiminoalkyl, C_1-C_4-alkylsulphanyl, C_1-C_4-alkylsulphinyl, C_1-C_4-alkylsulphonyl, *N*-C_1-C_4-alkylamino, *N,N*-di-C_1-C_4-alkylamino, mỗi nhóm trong số đó được thế bằng ít nhất một phần tử thế được chọn từ halogen và hydroxyl, trong đó ít nhất một phần tử thế là halogen, mỗi R^{11} độc lập là H, amino (NH_2) hoặc xyano, tốt hơn là H, W là O, R^1 là H, metyl, etyl, n-propyl, isopropyl, n-butyl, isobutyl, s-butyl, t-butyl, tốt hơn là H hoặc metyl, và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [9].

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó T là T2, T3, T4, T22, T23 hoặc T46, B3 là C-R^8 và R^8 là (C_1-C_6)-alkyl, (C_1-C_6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl, mỗi nhóm trong số đó được thế, trong đó các phần tử thế được chọn từ halogen và hydroxyl, trong đó ít nhất một phần tử thế là halogen, tốt hơn nữa là trong đó R^8 là (C_1-C_6)-alkyl, (C_1-C_6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl được perflo hóa, tốt nhất là (C_1-C_4)-alkyl, (C_1-C_4)-alkoxy được perflo hóa, trong đó B_1, B_2, B_4 và B_5 lần lượt là CR^6, CR^7, CR^9 và CR^{10} trong đó R^6, R^7, R^9 và R^{10} mỗi nhóm độc lập là H, halogen, xyano, nitro, hoặc C_1-C_4-alkyl, C_3-C_4-

xycloalkyl, C_1-C_4-alkoxy, *N*-alkoxyiminoalkyl, C_1-C_4-alkylsulphanyl, C_1-C_4-alkylsulphinyl, C_1-C_4-alkylsulphonyl, *N*-C_1-C_4-alkylamino, *N,N*-di-C_1-C_4-alkylamino, mỗi nhóm trong số đó được thế bằng ít nhất một phần tử thế được chọn từ halogen và hydroxyl, trong đó ít nhất một phần tử thế là halogen, mỗi R^{11} độc lập là H, amino (NH_2) hoặc xyano, tốt hơn là H, W là O, R^1 là H, metyl, etyl, n-propyl, isopropyl, n-butyl, isobutyl, s-butyl, t-butyl, tốt hơn là H hoặc metyl, Q là C_1-C_4-alkyl, 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetylamino)etyl, C_1-C_4-alkyl được thế flo- hoặc 1-xyanopropyl- hoặc pyridin- như 2,2,2-trifloetyl, 2,2-difloetyl, 3,3,3-triflopropyl, pyridin-2-ylmetyl hoặc (1-xyanoxyclopropyl)metyl; C_3-C_4-xycloalkyl như xyclopropyl hoặc xyclobutyl; C_3-C_4-xycloalkyl tùy ý được thế như xyclopropyl được thế C_1-C_4-alkyl tùy ý được thế flo (ví dụ 1-triflometylxyclopropyl, 1-tert-butylxyclopropyl), 1-thiocarbamoylxyclopropyl, 1-carbamoylxyclopropyl, 1-xyanoxyclopropyl, trans-2-floxyclopropyl, xis-2-floxyclopropyl; C_4-C_6-heteroxycloalkyl như oxetan-3-yl, thietan-3-yl, 1-oxidothietan-3-yl, hoặc 1,1-dioxidothietan-3-yl; hoặc trong từng trường hợp là benzyl được thế C_1-C_4-alkyl; pyrazol (như N-metylpyrazol-3-yl), pyridin; metylsulphonyl; hoặc 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetylamino)etyl, tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được thế flo như 2,2,2-trifloetyl hoặc 3,3,3-triflopropyl; xyclopropyl; tùy ý được thế xyclopropyl như 1-xyanoxyclopropyl hoặc 1-triflometylxyclopropyl, thietan-3-yl; hoặc 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetyl)aminoetyl, và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [9]. Theo một phương án được ưu tiên khác, R^6 và R^{10} mỗi nhóm là halogen (như Cl, Br hoặc F), mỗi C_1-C_3-alkyl, hoặc mỗi C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen, ví dụ C_1-C_3-alkyl được perflo hóa (perflometyl, perfloetyl hoặc perflopropyl).

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó T là T2, T3, T4, T22, T23 hoặc T46, B3 là C-R^8 và R^8 là (C_1-C_6)-alkyl, (C_1-C_6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl, mỗi nhóm trong số đó được thế, trong đó các phần tử thế được chọn từ halogen và hydroxyl, trong đó ít nhất một phần tử thế là halogen, tốt hơn nữa là trong đó R^8 là (C_1-C_6)-alkyl, (C_1-C_6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl được perflo hóa, tốt nhất là (C_1-C_4)-alkyl, (C_1-C_4)-alkoxy được perflo hóa, trong đó B_1, B_2 và B_4 lần lượt là CR^6, CR^7 và CR^9 và B^5 là N, trong đó R^6, R^7 và R^9 mỗi nhóm độc lập là H, halogen, xyano, nitro, hoặc C_1-C_4-alkyl, C_3-C_4-xycloalkyl, C_1-C_4-alkoxy, *N*-alkoxyiminoalkyl, C_1-C_4-alkylsulphanyl, C_1-C_4-alkylsulphinyl, C_1-C_4-alkylsulphonyl, *N*-C_1-C_4-alkylamino, *N,N*-di-C_1-C_4-alkylamino, mỗi nhóm trong số

đó được thế bằng ít nhất một phần tử thế được chọn từ halogen và hydroxyl, trong đó ít nhất một phần tử thế là halogen, mỗi R^{11} độc lập là H, amino (NH_2) hoặc xyano, tốt hơn là H, W là O, R^1 là H, metyl, etyl, n-propyl, isopropyl, n-butyl, isobutyl, s-butyl, t-butyl, tốt hơn là H hoặc metyl, Q là C_1-C_4-alkyl, 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetylamino)etyl, C_1-C_4-alkyl được thế flo- hoặc 1-xyanopropyl- hoặc pyridin- như 2,2,2-trifloetyl, 2,2-difloetyl, 3,3,3-triflopropyl, pyridin-2-ylmetyl hoặc (1-xyanoxyclopropyl)metyl; C_3-C_4-xycloalkyl như xyclopropyl hoặc xyclobutyl; C_3-C_4-xycloalkyl tùy ý được thế như xyclopropyl được thế C_1-C_4-alkyl tùy ý được thế flo (ví dụ 1-triflometylxyclopropyl, 1-tert-butylxyclopropyl), 1-thiocarbamoylxyclopropyl, 1-carbamoylxyclopropyl, 1-xyanoxyclopropyl, trans-2-floxyclopropyl, xis-2-floxyclopropyl; C_4-C_6-heteroxycloalkyl như oxetan-3-yl, thietan-3-yl, 1-oxidothietan-3-yl, hoặc 1,1-dioxidothietan-3-yl; hoặc trong từng trường hợp là benzyl tùy ý được thế C_1-C_4-alkyl tùy ý được thế flo; pyrazol (như N-metylpyrazol-3-yl), pyridin; metylsulphonyl; hoặc 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetylamino)etyl, tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được thế flo như 2,2,2-trifloetyl hoặc 3,3,3-triflopropyl; xyclopropyl; xyclopropyl tùy ý được thế như 1-xyanoxyclopropyl hoặc 1-triflometylxyclopropyl, thietan-3-yl; hoặc 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetyl)aminoetyl, và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [9].

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó T là T2, T3, T4, T22, T23 hoặc T46, B3 là C-R^8 và R^8 là (C_1-C_6)-alkyl, (C_1-C_6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl, mỗi nhóm trong số đó được thế, trong đó các phần tử thế được chọn từ halogen và hydroxyl, trong đó ít nhất một phần tử thế là halogen, tốt hơn nữa là trong đó R^8 là (C_1-C_6)-alkyl, (C_1-C_6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl được perflo hóa, tốt nhất là (C_1-C_4)-alkyl, (C_1-C_4)-alkoxy được perflo hóa, trong đó B_1, B_2, B_4 và B_5 lần lượt là CR^6, CR^7, CR^9 và CR^{10} trong đó R^6, R^7, R^9 và R^{10} mỗi nhóm độc lập là H, halogen, xyano, nitro, hoặc C_1-C_4-alkyl, C_3-C_4-xycloalkyl, C_1-C_4-alkoxy, *N*-alkoxy-iminoalkyl, C_1-C_4-alkylsulphanyl, C_1-C_4-alkylsulphinyl, C_1-C_4-alkylsulphonyl, *N*-C_1-C_4-alkylamino, *N,N*-di-C_1-C_4-alkylamino, mỗi nhóm trong số đó được thế bằng ít nhất một phần tử thế được chọn từ halogen và hydroxyl, trong đó ít nhất một phần tử thế là halogen, mỗi R^{11} độc lập là H, amino (NH_2) hoặc xyano, tốt hơn là H, W là O, R^1 là H, metyl, etyl, n-propyl, isopropyl, n-butyl, isobutyl, s-butyl, t-butyl, tốt hơn là H hoặc metyl, Q là C_1-C_4-alkyl, 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetyl-amino)etyl, C_1-C_4-alkyl được thế flo- hoặc 1-xyanopropyl- hoặc

pyridin- như 2,2,2-trifloetyl, 2,2-diflo-etyl, 3,3,3-triflopropyl, pyridin-2-ylmetyl hoặc (1-xyanoxyclopropyl)metyl; C_3-C_4-xycloalkyl như xyclopropyl hoặc xyclobutyl; C_3-C_4-xycloalkyl tùy ý được thế như xyclopropyl được thế C_1-C_4-alkyl tùy ý được thế flo (ví dụ 1-triflometylxyclopropyl, 1-tert-butylxyclo-propyl), 1-thiocarbamoylxyclopropyl, 1-carbamoylxyclopropyl, 1-xyanoxyclopropyl, trans-2-flo-xyclopropyl, xis-2-floxyclopropyl; C_4-C_6-heteroxycloalkyl như oxetan-3-yl, thietan-3-yl, 1-oxidothietan-3-yl, hoặc 1,1-dioxidothietan-3-yl; hoặc trong từng trường hợp là benzyl được thế C_1-C_4-alkyl; pyrazol (như N-metylpyrazol-3-yl), pyridin; metylsulphonyl; hoặc 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetylamino)etyl, tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được thế flo như 2,2,2-trifloetyl hoặc 3,3,3-triflopropyl; xyclopropyl; xyclopropyl tùy ý được thế như 1-xyanoxyclopropyl hoặc 1-triflometylxyclopropyl, thietan-3-yl; hoặc 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetyl)-aminoetyl, A_1 là CR^2 hoặc N, A_2 là CR^3 hoặc N, A_3 là CR^4 và A_4 là CR^5 hoặc N, trong đó R^2 là H, C_1-C_4-alkyl hoặc halogen (như metyl, F, Cl hoặc H), R^3 là H hoặc C_1-C_4-alkyl được halogen hóa (như H hoặc $-CF_3$), R^4 là H, C_1-C_4-alkyl, C_1-C_4-alkylamin (như $-NH-CH_3$), xyclopropylamin, C_1-C_4-alkoxy (như $-O-CH_3$), C_1-C_4-alkoxy-C_1-C_4-alkylamin (như $NH-CH_2-CH_2-O-CH_3$) hoặc halogen (như F hoặc Cl). Theo một phương án được ưu tiên khác, R^6 và R^{10} mỗi nhóm là halogen (như Cl, Br hoặc F), mỗi C_1-C_3-alkyl, hoặc mỗi C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen, ví dụ C_1-C_3-alkyl được perflo hóa (perflometyl, perfloetyl hoặc perflopropyl).

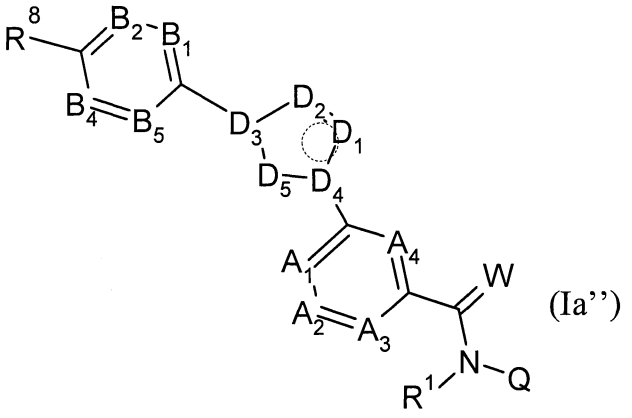
Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó T là T2, T3, T4, T22, T23 hoặc T46, B3 là C-R^8 và R^8 là (C_1-C_6)-alkyl, (C_1-C_6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl, mỗi nhóm trong số đó được thế, trong đó các phần tử thế được chọn từ halogen và hydroxyl, trong đó ít nhất một phần tử thế là halogen, tốt hơn nữa là trong đó R^8 là (C_1-C_6)-alkyl, (C_1-C_6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl được perflo hóa, tốt nhất là (C_1-C_4)-alkyl được perflo hóa, (C_1-C_4)-alkoxy, trong đó B_1, B_2 và B_4 lần lượt là CR^6, CR^7 và CR^9 và B^5 là N, trong đó R^6, R^7 và R^9 mỗi nhóm độc lập là H, halogen, xyano, nitro, hoặc C_1-C_4-alkyl, C_3-C_4-xycloalkyl, C_1-C_4-alkoxy, *N*-alkoxyiminoalkyl, C_1-C_4-alkylsulphanyl, C_1-C_4-alkylsulphinyl, C_1-C_4-alkylsulphonyl, *N*-C_1-C_4-alkylamino, *N,N*-di-C_1-C_4-alkylamino, mỗi nhóm trong số đó được thế bằng ít nhất một phần tử thế được chọn từ halogen và hydroxyl, trong đó ít nhất một phần tử thế là halogen, mỗi R^{11} độc lập là H, amino (NH_2) hoặc xyano, tốt hơn là H, W là O, R^1 là H, metyl, etyl, n-propyl, isopropyl, n-

butyl, isobutyl, s-butyl, t-butyl, tốt hơn là H hoặc metyl, Q là C_1-C_4-alkyl, 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetylamino)etyl, C_1-C_4-alkyl được thế flo- hoặc 1-xyanopropyl- hoặc pyridin- như 2,2,2-trifloetyl, 2,2-difloetyl, 3,3,3-triflopropyl, pyridin-2-ylmetyl hoặc (1-xyano-xyclopropyl)metyl; C_3-C_4-xycloalkyl như xyclopropyl hoặc xyclobutyl; C_3-C_4-xycloalkyl tùy ý được thế như xyclopropyl được thế C_1-C_4-alkyl tùy ý được thế flo (ví dụ 1-triflometylxyclopropyl, 1-tert-butylxyclopropyl), 1-thiocarbamoylxyclopropyl, 1-carbamoyl-xyclopropyl, 1-xyanoxyclopropyl, trans-2-floxyclopropyl, xis-2-floxyclopropyl; C_4-C_6-hetero-xycloalkyl như oxetan-3-yl, thietan-3-yl, 1-oxidothietan-3-yl, hoặc 1,1-dioxidothietan-3-yl; hoặc trong từng trường hợp tuyd ý là benzyl được thế C_1-C_4-alkyl; pyrazol (như N-metylpyrazol-3-yl), pyridin; metylsulphonyl; hoặc 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetylamino)etyl, tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được thế C_1-C_4-alkyl như 2,2,2-trifloetyl hoặc 3,3,3-triflopropyl; xyclopropyl; xyclopropyl tùy ý được thế như 1-xyanoxyclopropyl hoặc 1-triflometylxyclopropyl, thietan-3-yl; hoặc 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetyl)aminoetyl, A_1 là CR^2 hoặc N, A_2 là CR^3 hoặc N, A_3 là CR^4 và A_4 là CR^5 hoặc N, trong đó R^2 là H, C_1-C_4-alkyl hoặc halogen (như metyl, F, Cl hoặc H), R^3 là H hoặc C_1-C_4-alkyl được halogen hóa (như H hoặc $-CF_3$), R^4 là H, C_1-C_4-alkyl, C_1-C_4-alkylamin (như $-NH-CH_3$), xyclopropylamin, C_1-C_4-alkoxy (như $-O-CH_3$), C_1-C_4-alkoxy-C_1-C_4-alkylamin (như $NH-CH_2-CH_2-O-CH_3$) hoặc halogen (như F hoặc Cl).

Theo một phương án được ưu tiên khác, R^6 là C_1-C_3-alkyl được perflo hóa (ví dụ perflometyl) và R^{10} là Cl, Br hoặc F, tốt hơn nữa là Cl hoặc Br.

Công thức (Ia'')

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (Ia'')


(Ia'')

trong đó một D được chọn từ D1 và D2 là N và D tương ứng khác được chọn từ D1 và D2 là O; hoặc D4 là N và một D được chọn từ D1 và D5 là N; hoặc D3 là N và D1, D2 và D5 mỗi nhóm là C-R^{11} và D4 là C, và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [12].

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (Ia'') trong đó R^8 là (C_1-C_6)-alkyl, (C_1-C_6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl, mỗi nhóm trong số đó được thế, trong đó các phần tử thế được chọn từ halogen và hydroxyl, trong đó ít nhất một phần tử thế là halogen, và một D được chọn từ D1 và D2 là N và D còn lại khác được chọn từ D1 và D2 là O; hoặc D4 là N và một D được chọn từ D1 và D5 là N; hoặc D3 là N và D1, D2 và D5 mỗi nhóm là C-R^{11} và D4 là C, và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [12].

Theo một phương án được ưu tiên, không quá một (1) trong số các nhóm B_1 đến B_5 là N (nói cách khác: một (1) trong số B_1 đến B_5 là N); hoặc no (0) B_1 đến B_5 là N (B_1 đến B_5 là CR^6, CR^7, CR^8, CR^9 và CR^{10}).

Theo một phương án được ưu tiên khác, R^6, R^7, R^9 và R^{10} (nếu nhóm B tương ứng là CR) mỗi nhóm độc lập là H, halogen, xyano, nitro, trong từng trường hợp là C_1-C_4-alkyl, C_3-C_4-xycloalkyl, C_1-C_4-alkoxy, *N*-alkoxyiminoalkyl, C_1-C_4-alkylsulphanyl, C_1-C_4-alkylsulphinyl, C_1-C_4-alkylsulphonyl, *N*-C_1-C_4-alkylamin, *N,N*-di-C_1-C_4-alkylamin tùy ý được thế.

Theo một phương án được ưu tiên khác, R^6, R^7, R^9 và R^{10} mỗi nhóm độc lập là H, halogen, xyano, nitro, metyl, etyl, flometyl, diflometyl, clodiflometyl, triflometyl, 2,2,2-trifloetyl, metoxy, etoxy, n-propoxy, 1-metyletoxy, flometoxy, diflometoxy, clodiflometoxy, dicloflometoxy, triflometoxy, 2,2,2-trifloetoxy, 2-clo-2,2-difloetoxy,

pentafloetoxy, N-metoxyiminometyl, 1-(N-metoxyimino)etyl, metylsulphanyl, triflometylsulphanyl, metylsulphonyl, metylsulphinyl, triflometylsulphonyl, triflometylsulphinyl.

Theo một phương án được ưu tiên khác, R^6 và R^{10} mỗi nhóm độc lập là H, halogen (đặc biệt là clo, brom, flo), xyano, nitro, metyl, etyl, diflometyl, clodiflometyl, triflometyl, metoxy, etoxy, 1-metyletoxy, diflometoxy, clodiflometoxy, dicloflometoxy, triflometoxy, 2,2,2-trifloetoxy, 2-clo-2,2-difloetoxy, metylsulphanyl, triflometylsulphanyl, metylsulphonyl, metylsulphinyl, triflometylsulphonyl, triflometylsulphinyl.

Theo một phương án được ưu tiên khác, R^6 và R^{10} là các phần tử thế được mô tả trong bản mô tả, nhưng R^6 và R^{10} trong một hợp chất không đồng thời là H. Nói cách khác, nếu R^6 trong hợp chất là H, R^{10} là một trong số các phần tử thế khác được mô tả trong bản mô tả, và ngược lại.

Theo một phương án được ưu tiên khác, R^6 và R^{10} mỗi nhóm là một phần tử thế được chọn từ halogen (tốt hơn là Cl, Br hoặc F), C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen, C_1-C_3-alkoxy hoặc C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen.

Theo một phương án được ưu tiên khác, R^6 và R^{10} mỗi nhóm là halogen (như Cl, Br hoặc F), mỗi C_1-C_3-alkyl, hoặc mỗi C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen, ví dụ C_1-C_3-alkyl được perflo hóa (perflometyl, perfloetyl hoặc perflopropyl).

Theo một phương án được ưu tiên khác, R^6 là C_1-C_3-alkyl được perflo hóa (ví dụ perflometyl) và R^{10} là Cl, Br hoặc F, tốt hơn nữa là Cl hoặc Br.

T46 – metyl

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là metyl, T là T46, R^{11} trong T46 là H, W là O và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [0113] ff.

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là metyl, T là T46, R^{11} trong T46 là H, W là O, A_1 là CR^2, A_2 là CR^3 hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CR^5, B_1 là CR^6, B_2 là CR^7, B_3 là CR^8, B_4 là CR^9, B_5 là CR^{10} và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [0113] ff.

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là metyl, T là T46, R^{11} trong T46 là H, W là O, A_1 là CH, A_2 là CH hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CH, B_1 là CR^6, B_2 là CH, B_3 là CR^8, B_4 là CH, B_5 là CR^{10}, trong đó R^6 và R^{10} mỗi nhóm là một phần tử thế được chọn từ halogen (tốt hơn là clo, brom hoặc flo), C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen, C_1-C_3-alkoxy hoặc C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [0113] ff.

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là metyl, T là T46, R^{11} trong T46 là H, W là O, A_1 là CH, A_2 là CH hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CH, B_1 là CR^6, B_2 là CH, B_3 là CR^8, B_4 là CH, B_5 là CR^{10}, trong đó R^6 và R^{10} mỗi nhóm là một phần tử thế được chọn từ halogen (tốt hơn là clo, brom hoặc flo), C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen, C_1-C_3-alkoxy hoặc C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [0113] ff.

T46 - H

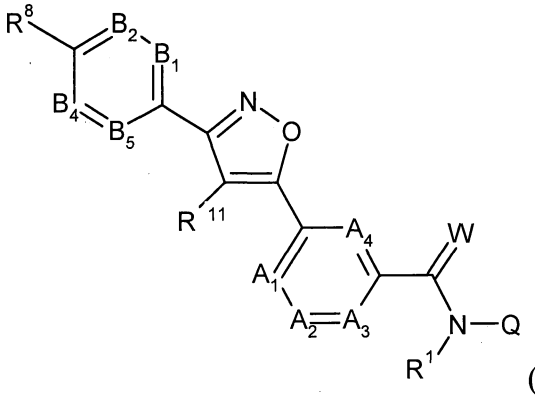
Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là H, T là T46, R^{11} trong T46 là H, W là O và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [0112].

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là H, T là T46, R^{11} trong T46 là H, W là O, A_1 là CR^2, A_2 là CR^3 hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CR^5, B_1 là CR^6, B_2 là CR^7, B_3 là CR^8, B_4 là CR^9, B_5 là CR^{10} và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [0113] ff.

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là H, T là T46, R^{11} trong T46 là H, W là O, A_1 là CH, A_2 là CH hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CH, B_1 là CR^6, B_2 là CH, B_3 là CR^8, B_4 là CH, B_5 là CR^{10}, trong đó R^6 và R^{10} mỗi nhóm là một phần tử thế được chọn từ halogen (tốt hơn là clo, brom hoặc flo), C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen, C_1-C_3-alkoxy hoặc C_1-C_3-alkoxy được thế bằng halogen và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [0113] ff.

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là H, T là T46, R^{11} trong T46 là H, W là O, A_1 là CH, A_2 là CH hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CH, B_1 là CR^6, B_2 là CH, B_3 là CR^8, B_4 là CH, B_5 là CR^{10}, trong đó R^6 và R^{10} mỗi nhóm là một phần tử thế được chọn từ halogen (tốt hơn là clo, brom hoặc flo), C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkyl được thế bằng halogen, C_1-C_3-alkoxy hoặc được thế bằng halogen C_1-C_3-alkoxy và tất cả các thông số khác là như được xác định trong đoạn [85] và đoạn [0113] ff.

Theo một phương án tiếp theo, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I-T46):



(I-T46)

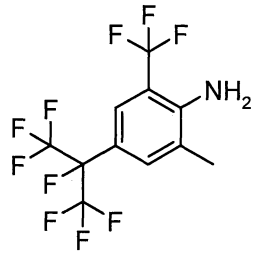
trong đó

R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, R^{11} Q và W từng nhóm được xác định như mô tả trong bản mô tả, trong đó không quá một nhóm được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 là N và không quá một nhóm được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N; hoặc trong đó một hoặc hai nhóm được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 có thể là N và không quá một nhóm được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4, và B_5 là N.

Theo một phương án tiếp theo, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I-T2), (I-T3), (I-T4), (I-T22), (I-T23) hoặc (I-T46) trong đó R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, Q và W mỗi nhóm là như được mô tả trong đoạn [0120].

Theo một phương án tiếp theo, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I-T2), (I-T3), (I-T4), (I-T22), (I-T23) hoặc (I-T46) trong đó R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, Q và W mỗi nhóm là như được mô tả trong đoạn [0121].

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến hợp chất D-1a

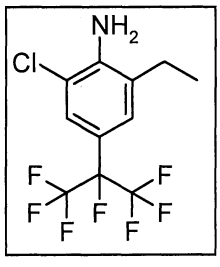


D-1a

Theo một phương án tiếp theo, sáng chế đề cập đến việc sử dụng hợp chất D-1a để điều chế các hợp chất có công thức (I).

Theo một phương án tiếp theo, sáng chế đề cập đến quy trình điều chế hợp chất có công thức (I), tốt hơn là trong đó T = T4, bao gồm việc sử dụng hợp chất D-1a, tốt hơn là trong trình tự phản ứng theo Sơ đồ phản ứng 4.

Theo một phương án tiếp theo, sáng chế đề cập đến hợp chất D-1b

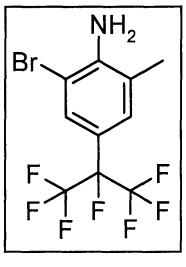


D-1b

Theo một phương án tiếp theo, sáng chế đề cập đến việc sử dụng hợp chất D-1b để điều chế các hợp chất có công thức (I).

Theo một phương án tiếp theo, sáng chế đề cập đến quy trình điều chế hợp chất có công thức (I), tốt hơn là trong đó T = T4, bao gồm việc sử dụng hợp chất D-1b, tốt hơn là trong trình tự phản ứng theo Sơ đồ phản ứng 4.

Theo một phương án tiếp theo, sáng chế đề cập đến hợp chất D-1c



D-1c

Theo một phương án tiếp theo, sáng chế đề cập đến việc sử dụng hợp chất D-1c để điều chế các hợp chất có công thức (I).

Theo một phương án tiếp theo, sáng chế đề cập đến quy trình điều chế hợp chất có công thức (I), tốt hơn là trong đó T = T4, bao gồm việc sử dụng hợp chất D-1c, tốt hơn là trong trình tự phản ứng theo Sơ đồ phản ứng 4.

Theo một phương án tiếp theo, sáng chế đề cập đến hợp chất 2-(3,5-diclo-4-hydrazinophenyl)-1,1,1,3,3,3-hexaflopropan-2-ol.

Theo một phương án tiếp theo, sáng chế đề cập đến việc sử dụng hợp chất 2-(3,5-diclo-4-hydrazino-phenyl)-1,1,1,3,3,3-hexaflopropan-2-ol để điều chế các hợp chất có công thức (I).

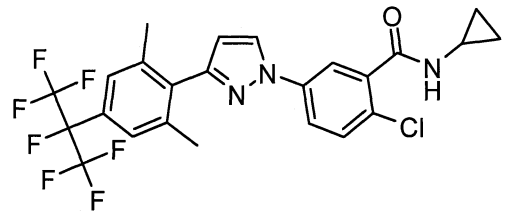
Theo một phương án tiếp theo, sáng chế đề cập đến quy trình điều chế hợp chất có công thức (I), tốt hơn là trong đó T = T4, bao gồm việc sử dụng hợp chất 2-(3,5-diclo-4-hydrazino-phenyl)-1,1,1,3,3,3-hexaflopropan-2-ol, tốt hơn là trong trình tự phản ứng theo Sơ đồ phản ứng 4.

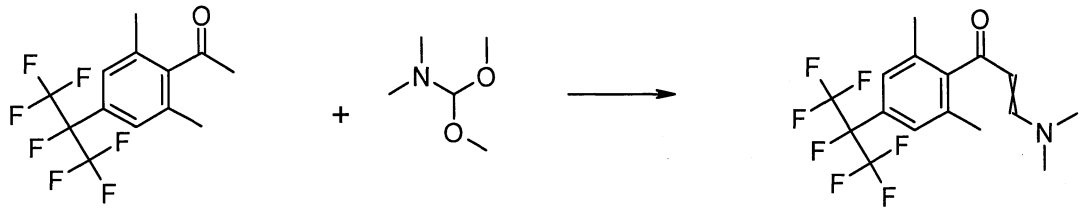
Ví dụ thực hiện sáng chế

Thử nghiệm

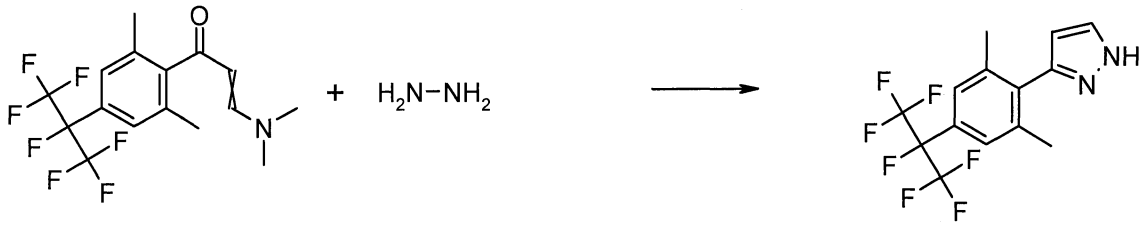
Quy trình điều chế I-T2

Ví dụ I-T2-1



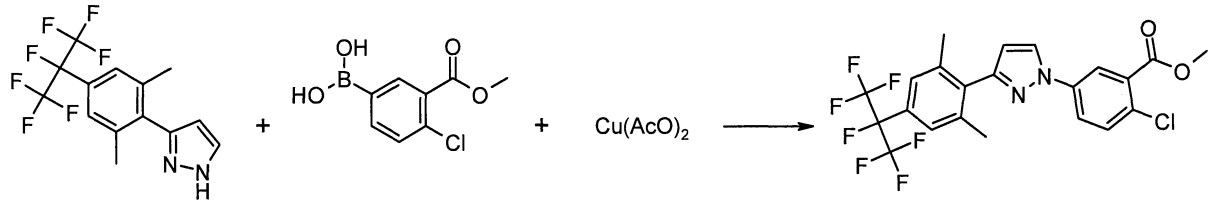


710 mg (2,24 mmol) 1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]etanon được bổ sung vào 401 mg (3,36 mmol) N,N-dimetylformamit dimetyl axetal, và hỗn hợp này được đun nóng đến hồi lưu trong 5 giờ. Để làm sạch, hỗn hợp này được làm mát chút ít và tất cả các thành phần dễ bay hơi được làm bay hơi trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Phần còn lại được sắc ký bằng cách sử dụng cột chứa 40 g silica gel với gradien trong xyclohexan/etyl axetat từ 90:10 đến 50:50 (thể tích/thể tích). Thu được 675 mg 3-(dimetylamino)-1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl) etyl]phenyl]prop-2-en-1-on.

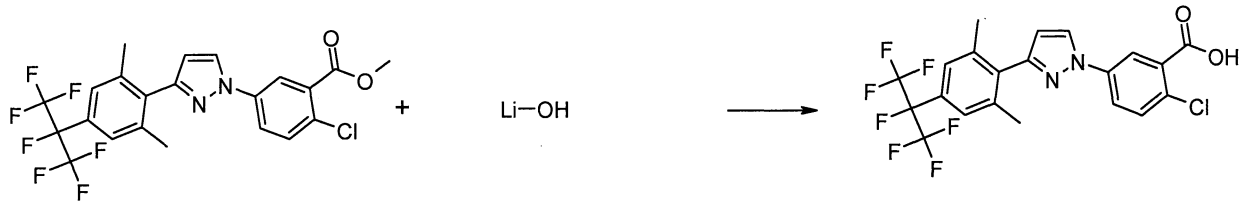


1,2 g (3,23 mmol) 3-(dimetylamino)-1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl] phenyl]prop-2-en-1-on được bổ sung vào 15,5 ml etanol, và 170 mg (3,39 mmol) hydrazin hydrat và 192 mg (3,2 mmol) axit axetic băng được bổ sung vào. Hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 7 giờ. sau đó 170 mg (3,39

mmol) hydrazin hydrat tiếp theo được bổ sung vào và hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 4 giờ nữa. Vì việc chuyển hóa vẫn chưa hoàn thành, 190 mg (3,2 mmol) axit axetic băng được bổ sung vào và hỗn hợp này được khuấy ở 60°C trong 17 giờ. Để làm sạch, hỗn hợp này được cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm và phần còn lại được phân tách giữa etyl axetat và nước. Pha hữu cơ được lấy ra, rửa bằng nước, làm khô bằng natri sulphat và cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. 1,04 g (3-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]-1H-pyrazol còn lại dưới dạng phần còn lại.

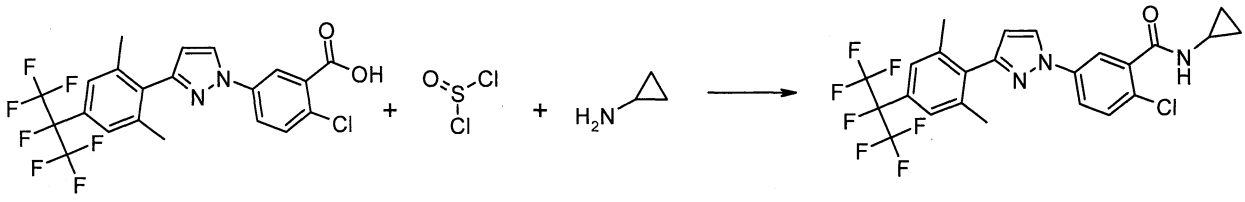


23 ml diclometan, 353 mg (4,46 mmol) pyridin, 609 mg (3,35 mmol) đồng(II) axetat, 958 mg (4,46 mmol) axit 3-carboxymetyl-4-clophenylboronic và 760 mg (2,23 mmol) (3-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]-1H-pyrazol ban đầu được nạp và sau đó 1,1 g hạt rây phân tử 3 Å mới nghiền được bổ sung vào. Sau đó, hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 20 giờ. Để làm sạch, hỗn hợp này được lọc qua lớp kieselguhr và rửa kỹ bằng diclometan. Dịch lọc được cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Để tinh chế, phương pháp sắc ký đầu tiên bằng cách sử dụng cột chứa 40 g silica gel với gradien trong xyclohexan/etyl axetat từ 95:5 đến 75:25 (thể tích/thể tích) được dùng. Các phân đoạn chứa sản phẩm được cô đặc và sắc ký bằng cách sử dụng cột thứ hai chứa 40 g silica gel với chất giải hấp toluen. Sau khi cô đặc, thu được 628 mg metyl 2-clo-5-[3-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-1-yl]benzoat.



609 mg (1,19 mmol) metyl 2-clo-5-[3-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-1-yl]benzoat ban đầu được nạp trong hỗn hợp chứa 14 ml dioxan và 5 ml nước, 53 mg (1,25 mmol) lithi hydroxit hydrat được bổ sung vào và

hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng. Sau 2 giờ, 25 mg (0,6 mmol) lithi hydroxit hydrat tiếp theo được bổ sung vào và hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong một giờ nữa. Sau đó, các thành phần dễ bay hơi được lấy ra trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Phần còn lại được phân tách giữa axit clohydric loãng và diclometan. Pha hữu cơ được lấy ra và pha nước được chiết hai lần bằng diclometan. Các pha hữu cơ hỗn hợp sau đó được rửa bằng dung dịch nước natri clorua bão hòa, làm khô bằng natri sulphat và cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Thu được 554 mg axit 2-clo-5-[3-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-1-yl]benzoic dưới dạng phần còn lại.

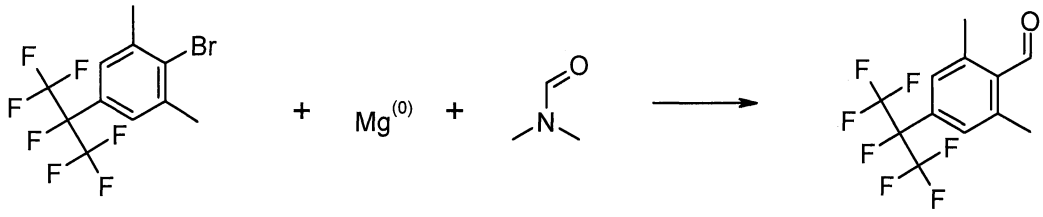


100 mg (0,2 mmol) axit 2-clo-5-[3-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl) etyl]phenyl]pyrazol-1-yl]benzoic ban đầu được nạp trong 2 ml toluen khô, sau đó 120 mg (1 mmol) thionyl clorua (SOCl2) và 1 giọt dimetylformamit (DMF) được bổ sung vào, và hỗn hợp này được đun nóng đến hồi lưu. Sau khi kết thúc giải phóng khí, hỗn hợp này được khuấy trong điều kiện hồi lưu trong 30 phút nữa và sau đó cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Phần còn lại được hòa tan trong 1 ml diclometan khô và bổ sung từng giọt vào dung dịch chứa 29 mg (0,5 mmol) xyclopropylamin trong 1 ml diclometan ở 0°C. Sau đó, hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 2 giờ. Để làm sạch, hỗn hợp này được rót vào dung dịch nước natri hydrocacbonat 5%, và pha hữu cơ được lấy ra, rửa bằng dung dịch nước natri clorua bão hòa, làm khô bằng natri sulphat và cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Để tinh chế, phương pháp sắc ký được dùng bằng cách sử dụng cột chứa 40 g silica gel với gradien trong xyclohexan/etyl axetat từ 90:10 đến 50:50 (thể tích/thể tích). Thu được 159,5 mg 2-clo-N-xyclopropyl-5-[3-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-1-yl]benzamit (hợp chất I-T2-1).

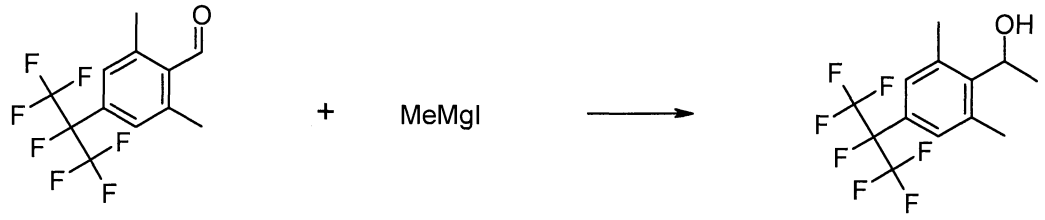
HPLC-MS[a)]: logP = 4,9, khối (m/z) = 534 [M+H]+.

^{1}H NMR (400 MHz, d_3-axetonitril): δ (ppm) = 8,29 (d, J=2,5 Hz, 1 H), 7,82-7,85 (m, 2H), 7,52 (d, J=8,8 Hz, 1 H), 7,44 (s, 2 H), 6,97 (s (rộng), 1 H (N-H)), 6,54 (d, J=2,5 Hz, 1 H), 2,82-2,86 (m, 1H), 0,74-0,79 (m, 2 H), 0,59-0,61 (m, 2 H).

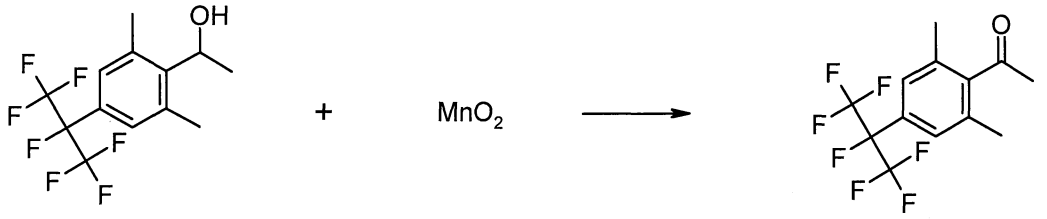
Điều chế các hợp chất ban đầu:



271 mg (11,1 mg nguyên tử) phoi tiện magie ban đầu được nạp, phủ lên bằng chút ít tetrahydrofuran khô và, sau khi bổ sung vài giọt dung dịch chứa 3 g (8,49 mmol) 2-bromo-1,3-dimetyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]benzen (được điều chế theo US2003/187233, p. 6, Ví dụ 2/4 [0080]) trong 10 ml tetrahydrofuran khô, một chút iot được bổ sung vào. Để bắt đầu phản ứng, hỗn hợp này được đun nóng đến 60°C. Sau khi phản ứng đã bắt đầu, phần dung dịch còn lại chứa 2-bromo-1,3-dimetyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]benzen được bổ sung từng giọt ở 60°C. Sau khi kết thúc việc bổ sung, hỗn hợp này được khuấy ở 60°C trong một giờ nữa. Sau đó, hỗn hợp này được làm mát đến 0°C bằng bể nước đá, và 1,86 g (25,4 mmol) N,N-dimetylformamit, hòa tan trong 5 ml tetrahydrofuran khô, được bổ sung vào từng giọt. Sau đó, hỗn hợp này được khuấy mà không làm mát đến khi hỗn hợp này đạt nhiệt độ trong phòng. Để làm sạch, hỗn hợp này được rót vào dung dịch nước amoni clorua bão hòa. Các pha được tách; pha nước được chiết bằng etyl axetat. Các pha hữu cơ hỗn hợp được rửa bằng dung dịch nước natri clorua bão hòa, làm khô bằng natri sulphat và cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. 2,34 g 2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]benzaldehyt còn lại dưới dạng phần cặn, được sử dụng trong giai đoạn tiếp theo mà không cần tinh chế.



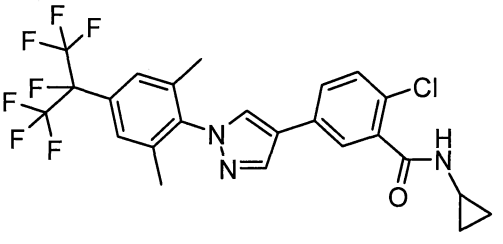
2,34 g (7,74 mmol) 2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]benzaldehyt ban đầu được nạp trong 15,5 ml tetrahydrofuran khô, và 2,58 ml (7,74 mmol) dung dịch metylmagie iodua trong dietyl ete 3M được bổ sung vào từng giọt trong khi làm mát bằng bể nước đá. Sau đó, hỗn hợp này được khuấy mà không làm mát trong một giờ nữa. Để làm sạch, hỗn hợp này được rót vào 100 ml dung dịch nước amoni clorua bão hòa. Hỗn hợp này được chiết hai lần bằng etyl axetat. Các pha hữu cơ hỗn hợp được rửa bằng dung dịch nước natri clorua bão hòa, làm khô bằng natri sulphat và cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Phần còn lại được sắc ký bằng cách sử dụng cột 40 g chứa silica gel với gradien trong xyclohexan/etyl axetat từ 90:10 đến 70:30 (thể tích/thể tích), và tạo ra 1,0 g 1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]etanol.



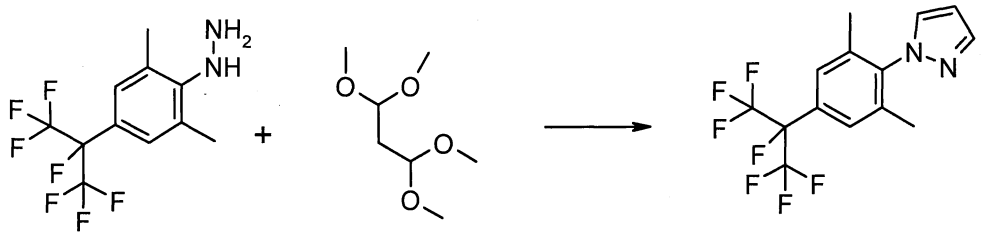
1,49 g (4,68 mmol) 1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]etanol ban đầu được nạp trong 84 ml toluen, và 10,8 g (124 mmol) mangan(IV) oxit được bổ sung vào. Hỗn hợp này được đun nóng đến hồi lưu trong khi khuấy trong một giờ. Tiếp theo là làm mát, lọc qua lớp kieselguhr và rửa kỹ bằng etyl axetat. Dịch lọc được cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Phần còn lại được sắc ký bằng cách sử dụng cột chứa 50 g silica gel với gradien trong xyclohexan/etyl axetat từ 95:5 đến 70:30 (thể tích/thể tích). Thu được 1,03 g 1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]etanon.

Quy trình điều chế I-T3

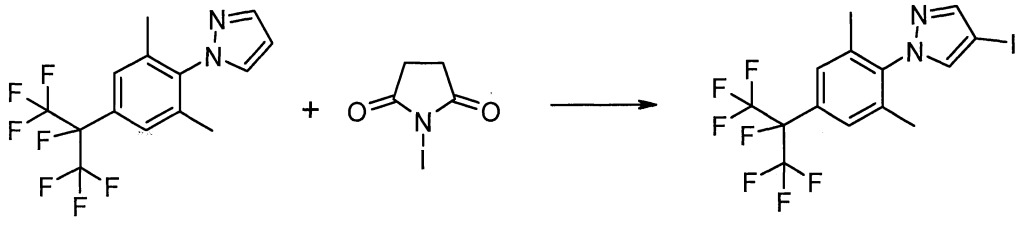
Ví dụ I-T3-1:



Việc điều chế tiền chất [2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl) etyl]phenyl]hydrazin được mô tả trong tài liệu (US 2003/187233).

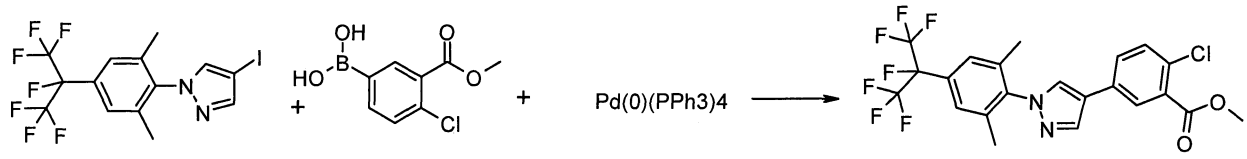


Bình 25ml ban đầu được nạp 3,41 g (11,2 mmol) [2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]hydrazin (bazơ tự do) trong 13 ml etanol. Sau đó, 1,84 g (11,2 mmol) tetrametoxypropan và tiếp theo là 0,55 g (5,6 mmol) axit sulphuric 96% được bổ sung vào. Hỗn hợp phản ứng được đun nóng đến hồi lưu trong 2 giờ. Etanol được làm bay hơi trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Phần còn lại được phân tách giữa etyl axetat và dung dịch nước natri hydrocacbonat bão hòa. Pha hữu cơ được lấy ra, làm khô bằng natri sulphat và cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Phần còn lại được chưng cất trong Kugelrohr dưới áp suất giảm ở 100 Pa (1 mbar) và 150°C, và tạo ra 2,5 g 1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol.

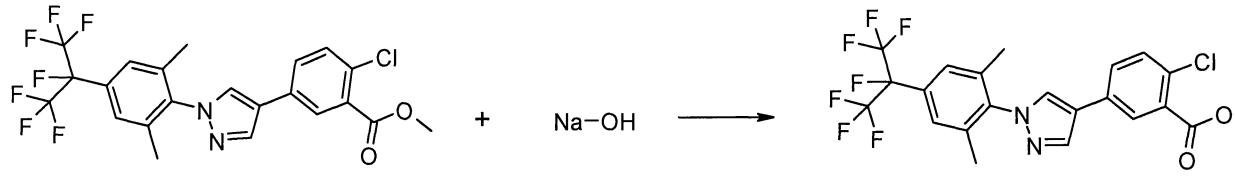


Bình 250ml ban đầu được nạp 2,5 g (7,34 mmol) 1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol trong 30 ml axetonitril, và 8,3 g (36,9 mmol) N-iodosucxinimit trong 50 ml axetonitril được bổ sung vào từng giọt. Tiếp đó, hỗn hợp này được đun nóng đến hồi lưu. Để làm sạch, hỗn hợp này được cô đặc, và phần còn lại được phân tách giữa nước và etyl axetat. Pha hữu cơ được lấy ra, đầu tiên rửa bằng dung dịch nước natri hydrosulphit bão hòa, sau đó bằng dung dịch natri clorua bão hòa, làm khô bằng natri sulphat và cô đặc. Phần còn lại được tinh chế bằng phương pháp sắc ký với silica gel bằng gradien từ 90:10 đến 70:30 (thể tích/thể tích) trong xyclohexan/etyl axetat. Sau khi cô đặc các phân đoạn chứa sản phẩm, thu được

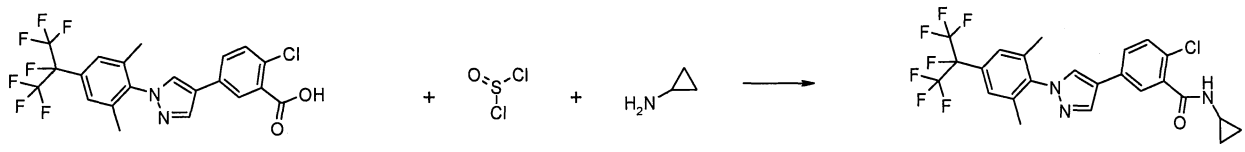
2,5 g phần còn lại, chứa 1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]-4-iodopyrazol và một ít toluen.



Bình 100 ml ban đầu được nạp 280 mg (0,6 mmol) 1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]-4-iodopyrazol và 0,129 g (0,60 mmol) axit [4-clo-3-(metoxycacbonyl)phenyl]boronic trong 21 ml isopropanol, và cuối cùng là 1,84 ml (1,84 mmol) dung dịch natri hydrocacbonat 1M đã đuổi khí được bổ sung vào, 0,035 g (0,03 mmol) tetrakis(triphenylphosphine)paladi (0) được bổ sung vào. Sau đó, hỗn hợp này được đun nóng đến hồi lưu. Để làm sạch, hỗn hợp này được cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay, và phần còn lại được phân tách giữa nước và etyl axetat. Pha hữu cơ được lấy ra, rửa một lần bằng dung dịch natri clorua bão hòa và cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Phần còn lại được tinh chế bằng phương pháp sắc ký bằng silica gel với gradien từ 90:10 đến 70:30 (thể tích/thể tích) trong xyclohexan/etyl axetat, và tạo ra 151 mg metyl 2-clo-5-[1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-4-yl]benzoat.



0,151 g (0,29 mmol) metyl 2-clo-5-[1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-4-yl]benzoat ban đầu được nạp trong 11 ml metanol, và 0,3 ml (0,3 mmol) dung dịch natri hydroxit 1M được bổ sung vào. Tiếp theo, hỗn hợp này được đun nóng đến hồi lưu trong 6 giờ, dung môi dư được làm bay hơi dưới áp suất giảm, và phần còn lại được thu hồi up bằng axit clohydric loãng và chiết ba lần bằng etyl axetat. Các phần chiết hỗn hợp được rửa bằng dung dịch natri clorua bão hòa, làm khô bằng natri sulphat và cô đặc, và tạo ra 130 mg axit 2-clo-5-[1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-4-yl]benzoic.

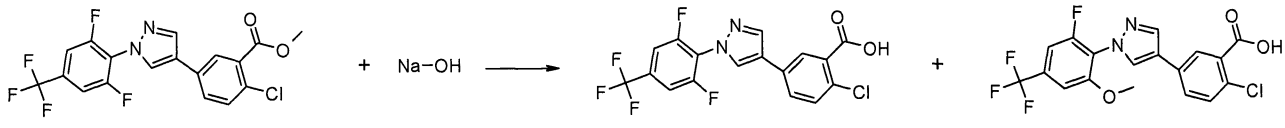


0,134 g (0,27 mmol) axit 2-clo-5-[1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-4-yl]benzoic được hòa tan trong 1,26 ml toluen, và 0,161 g (1,35 mmol) thionyl clorua được bổ sung vào. Hỗn hợp này được đun nóng đến 80°C trong 2 giờ. Sau đó cô đặc dưới áp suất giảm. Phần còn lại được hòa tan trong 1,26 ml diclometan và bổ sung từng giọt vào dung dịch chứa 39 mg (0,67 mmol) xyclopropylamin trong 0,63 ml diclometan ở 0°C trong khi làm mát, và dung dịch này được làm mát. Để làm sạch, dung dịch nước natri dihydrophosphat 5% được bổ sung vào, và pha hữu cơ được lấy ra, làm khô bằng natri sulphat và cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Phần còn lại được tách bằng silica gel với gradien xyclohexan/etyl axetat từ 9:1 đến 7:3 (thể tích/thể tích), và tạo ra 46 mg 2-clo-N-xyclopropyl-5-[1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-4-yl]benzamit (hợp chất I-T3-1).

HPLC-MS[a)]: logP = 4,36, khối lượng (m/z) = 534 [M+H]+.

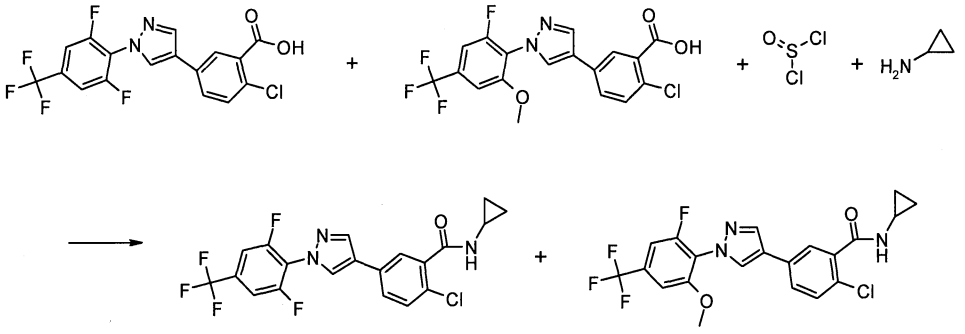
^{1}H NMR (400 MHz, d_3-axetonitril): δ = 8,11 (s, 1 H), 8,06 (s, 1 H), 7,68 (d, J1=2,2 Hz, 1 H), 7,62-7,65 (dd, J1=8,4 Hz, J2=2,2 Hz, 1H), 7,45 (d, J=8,4 Hz, 1 H), 6,9 (s (rộng), 1 H (N-H)), 3,97 (s, 3 H), 2,82-2,88 (m, 1H), 0,76-0,8 (m, 2 H), 0,57-0,61 (m, 2 H).

Ví dụ I-T3-48 và IT-T3-50



2,46 g (5,9 mmol) metyl 2-clo-5-[1-[2,6-diflo-4-(triflometyl)phenyl]pyrazol-4-yl]benzoat ban đầu được nạp trong 127 ml metanol, và 5,9 mg (5,9 mmol) dung dịch natri hydroxit 1M được bổ sung vào. Hỗn hợp này được đun nóng đến hồi lưu trong 2 giờ. Sau đó, hỗn hợp này được làm mát, và phần lớn metanol được loại bỏ trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Phần còn lại dạng nước được chiết bằng diclometan. Phần chiết được loại bỏ. Pha nước được chỉnh đến độ pH = 1 bằng axit clohydric 33% và chiết hai lần bằng diclometan. Các phần chiết hỗn hợp được rửa bằng dung dịch nước natri clorua bão hòa, làm khô bằng natri sulphat và cô đặc. Thu

được 1,41 g phần còn lại dưới dạng hỗn hợp 45:55 (các vùng LC-MS) chứa axit 2-clo-5-[1-[2,6-diflo-4-(triflometyl)phenyl]pyrazol-4-yl]benzoic và axit 2-clo-5-[1-[2-flo-6-metoxy-4-(triflometyl)phenyl]pyrazol-4-yl]benzoic.



700 mg (khoảng 1,7 mmol) hỗn hợp 45:55 (các vùng LC-MS) chứa axit 2-clo-5-[1-[2,6-diflo-4-(triflometyl)phenyl]pyrazol-4-yl]benzoic và axit 2-clo-5-[1-[2-flo-6-metoxy-4-(triflometyl)phenyl]pyrazol-4-yl]benzoic được hòa tan trong 6,6 ml toluen, và 1,34 g (8,7 mmol) thionyl clorua được bổ sung vào. Hỗn hợp này được đun nóng đến 80°C trong 2 giờ. Sau đó, tất cả các thành phần dễ bay hơi được rút ra trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Phần còn lại được hòa tan trong 3,3 ml diclometan và bổ sung từng giọt vào dung dịch chứa 248 mg (4,34 mmol) xyclopropylamin trong 3,3 ml diclometan ở 0°C. Sau đó, hỗn hợp này được khuấy mà không làm mát trong 2 giờ. Sau đó, dung dịch này được rửa bằng dung dịch nước natri dihydrophosphat 5%, làm khô bằng natri sulphat và cô đặc. Phần còn lại được sắc ký bằng cách sử dụng cột chứa 40 g silica gel với gradien trong xyclohexan/etyl axetat từ 90:10 đến 50:50 (thể tích/thể tích). Thu được 240 mg 2-clo-N-xyclopropyl-5-[1-[2,6-diflo-4-(triflometyl)phenyl]pyrazol-4-yl]benzamit (Ví dụ I-T3-48)

HPLC-MS[a)]: logP = 3,2, khối lượng (m/z) = 442 [M+H]+.

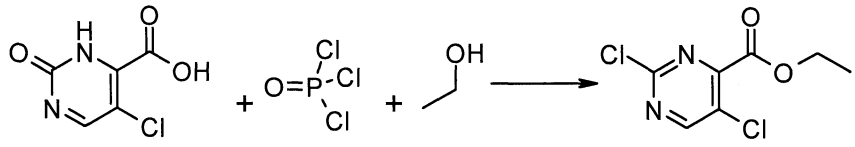
^{1}H NMR (400 MHz, d_3-axetonitril): δ (ppm) = 8,26 (s, 1 H), 8,19 (s, 1H), 7,61-7,69 (m, 4H), 7,46 (d, J = 8,3 Hz, 1H), 6,94 (s, 1 H (rộng)), 2,82-2,88 (m, 1H), 0,75-0,80 (m, 2 H), 0,58-0,62 (m, 2 H).

và 2-clo-N-xyclopropyl-5-[1-[2-flo-6-metoxy-4-(triflometyl)phenyl]pyrazol-4-yl]benzamit (Ví dụ I-T3-50).

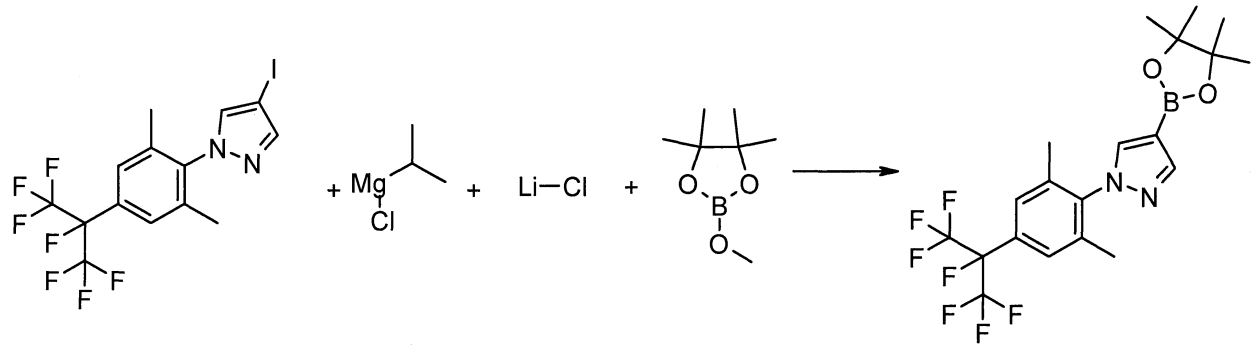
HPLC-MS[a)]: logP = 3,1, khối lượng (m/z) = 454 [M+H]+.

^{1}H NMR (400 MHz, d_3-axetonitril): δ (ppm) = 8,13 (s, 1 H), 8,11 (s, 1H), 7,67 (d, J = 2,2 Hz, 1 H), 7,62 (dd, J_1 = 8,3 Hz, J_2 = 2,2 Hz, 1 H), 7,45 (d, J = 8,3 Hz, 1H), 7,32 (s, 1 H), 7,30 (s, 1 H), 6,91 (s, 1 H (rộng)), 3,90 (s, 3 H), 2,83-2,87 (m, 1H), 0,75-0,79 (m, 2 H), 0,57-0,61 (m, 2 H).

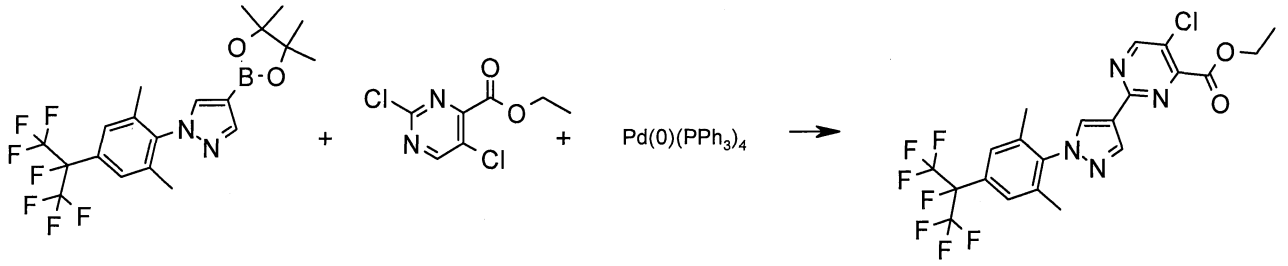
Ví dụ I-T3-121:



4,6 ml (49,6 mmol) phospho oxyclorua ban đầu được nạp và 1,3 g (7,44 mmol) axit 5-clo-2-oxo-1H-pyrimidin-6-carboxylic (có bán trên thị trường, hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp theo tài liệu (ví dụ Gacek, Michel; Ongstad, Leif; Undheim, Kjell; Acta Chemica Scandinavica, Series B: Organic Chemistry và Biochemistry B33(2), (1979), p. 150-1)) được đưa vào. Hỗn hợp này được đun nóng dần dần và giữ trong điều kiện hồi lưu trong 2 giờ. Sau đó, hỗn hợp này được làm mát chút ít và phospho oxyclorua dư được rút ra trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. 20 ml etanol khô được bổ sung vào phần còn lại, và sau đó, hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng qua đêm. Sau đó, etanol được rút ra trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Phần còn lại được thu hồi trong diclometan và rửa ba lần bằng dung dịch nước natri hydrocacbonat bão hòa. Các pha nước được chiết lại bằng diclometan, sau đó các pha hữu cơ hỗn hợp được rửa bằng dung dịch nước natri clorua bão hòa, làm khô bằng natri sulphat và cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Phần còn lại được sắc ký bằng cách sử dụng cột chứa 15 g silica gel vớigradien từ xyclohexan tinh khiết đến 50:50 (thể tích/thể tích) xyclohexan/etyl axetat, và tạo ra 115 mg etyl 2,5-diclopyrimidin-4-carboxylat.

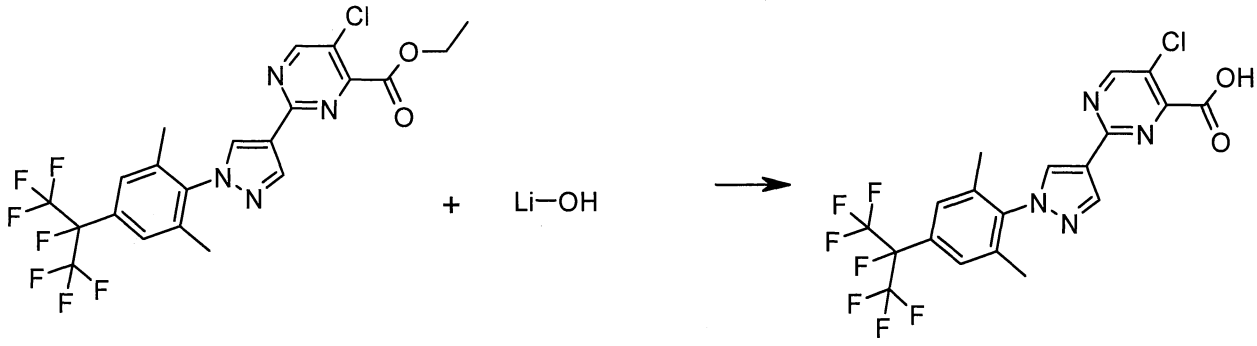


Bình ba cổ 25 ml đã đuổi khí ban đầu được nạp 5,94 ml (7,72 mmol) dung dịch 1,3 M chứa phức i-propylmagie clorua/lithi clorua, và dung dịch 4-iodo-1-[2-metyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometyl)phenyl]pyrazol (xem ví dụ I-T3-1 để điều chế) trong 3,4 ml tetrahydrofuran khô được bổ sung từng giọt. Khuấy hỗn hợp này ở nhiệt độ trong phòng liên tục qua đêm, và sau đó hỗn hợp này được làm mát đến -20°C và 1,63 g (10,2 mmol) 2-metoxy-4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan được bổ sung vào từng giọt. Hỗn hợp này được khuấy ở 0-10°C trong 1 giờ nữa. Để làm sạch, hỗn hợp này được rót vào 30 ml dung dịch nước amoni clorua bão hòa và pha loãng bằng xyclohexan. Các pha được tách; pha nước được chiết lại bằng xyclohexan. Các pha hữu cơ hỗn hợp đầu tiên được rửa bằng dung dịch nước natri hydrocacbonat bão hòa và sau đó bằng dung dịch nước natri clorua bão hòa, làm khô bằng natri sulphat và cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. sau khi sắc ký bằng cách sử dụng cột 40 g chứa silica gel với gradien từ xyclohexan tinh khiết đến không quá 80:20 (thể tích/thể tích) xyclohexan/etyl axetat, thu được 0,6 g 1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]-4-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyrazol.

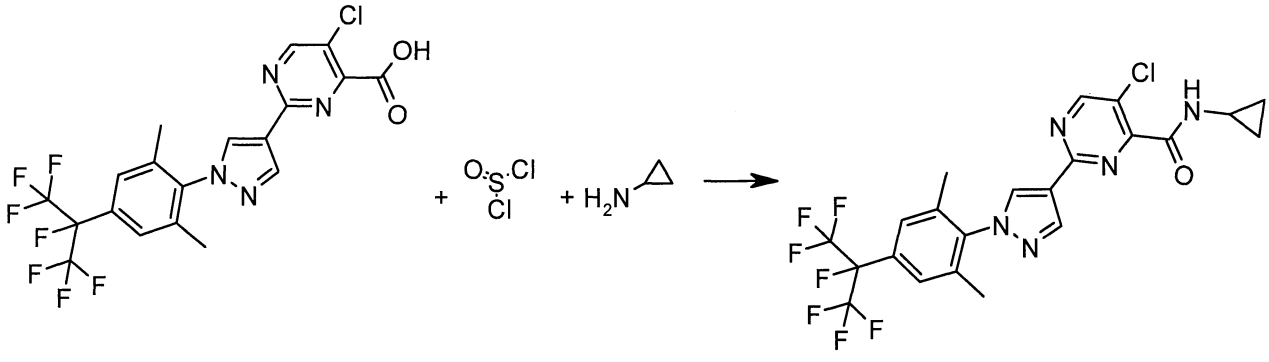


155 mg (0,7 mmol) etyl 2,5-diclopyrimidin-4-carboxylat và 327 mg (0,7 mmol) 1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]-4-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyrazol ban đầu được nạp trong 25 ml dioxan, và 234 mg (2,2 mmol) natri cacbonat và 1,25 ml nước được bổ sung vào. Hỗn hợp này được đuổi khí bằng argon và sau đó 81 mg (0,07 mmol) tetrakis(triphenylphosphine)paladi(0) được bổ sung vào. Hỗn hợp này được đuổi khí một lần nữa bằng argon và khuấy ở 100°C qua đêm. Sáng hôm sau, hỗn hợp này được làm mát và dung môi được rút ra trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Phần còn lại được phân tách giữa nước và etyl axetat. Pha hữu cơ được lấy ra, rửa một lần bằng dung dịch nước natri clorua bão hòa và sau đó cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Để tinh

chế, dùng phương pháp sắc ký bằng cách sử dụng cột chứa 15 g silica gel và gradien từ xyclohexan tinh khiết đến hỗn hợp 70:30 (thể tích/thể tích) xyclohexan/etyl axetat. Thu được 120 mg xetyl 5-clo-2-[1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-4-yl]pyrimidin-4-carboxylat.



0,120 g (0,23 mmol) etyl 5-clo-2-[1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-4-yl]pyrimidin-4-carboxylat ban đầu được nạp trong hỗn hợp chứa 4,1 ml dioxan và 1,44 ml nước, và 31 mg (0,74 mmol) lithi hydroxit monohydrat được bổ sung vào. Tiếp theo, hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 4 giờ, sau đó dung môi dư được làm bay hơi dưới áp suất giảm, và phần còn lại được thu hồi bằng axit clohydric loãng và chiết ba lần bằng diclometan. Các phần chiết hỗn hợp được rửa bằng dung dịch nước natri clorua bão hòa, làm khô bằng natri sulphat và cô đặc, và tạo ra 115 mg axit 5-clo-2-[1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-4-yl]pyrimidin-4-carboxylic thô.



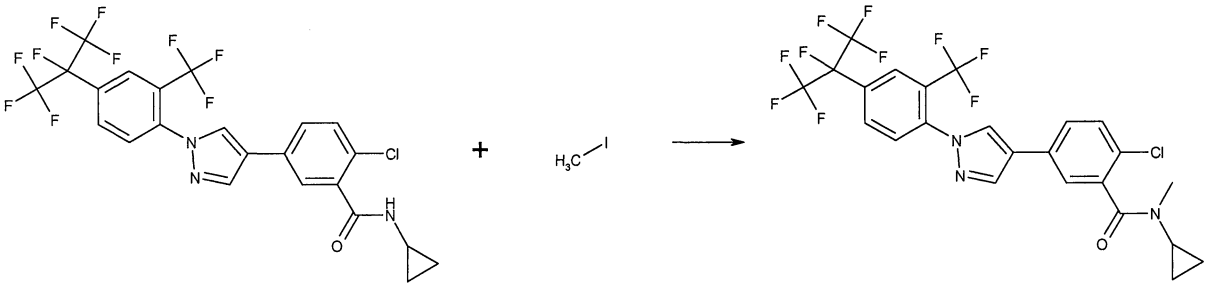
0,110 g (0,22 mmol) axit 5-clo-2-[1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-4-yl]pyrimidin-4-carboxylic thô được hòa tan trong 2 ml toluen, và 0,132 g (1,1 mmol) thionyl clorua và một giọt dimetylformamit được bổ sung vào. Hỗn hợp này được đun nóng đến 80°C trong 2 giờ. Sau đó cô đặc dưới áp suất giảm. Phần còn lại được hòa tan trong 1 ml diclometan và bổ sung từng giọt vào

dung dịch chứa 32 mg (0.55 mmol) xyclopropylamin trong 1 ml diclometan ở 0°C trong khi làm mát, và sau đó, hỗn hợp này được khuấy mà không làm mát trong 2 giờ. Để làm sạch, dung dịch nước natri dihydrophosphat 5% được bổ sung vào, và pha hữu cơ được lấy ra, làm khô bằng natri sulphat và cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Phần còn lại được tách bằng cách sử dụng cột chứa 15 g silica gel với gradien xyclohexan/etyl axetat từ 9:1 đến 7:3 (thể tích/thể tích), và tạo ra 49 mg 5-clo-N-xyclopropyl-2-[1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-4-yl]pyrimidin-4-carboxamit (hợp chất I-T3-121).

HPLC-MS[a)]: logP = 4,5, khối lượng (m/z) = 536 [M+H]+.

^{1}H NMR (400 MHz, d_3-axetonitril): δ (ppm) = 8,84 (s, 1 H), 8,46 (s, 1 H), 8,44 (s, 1H), 7,87 (s, 1 H (rộng)), 7,55 (s, 2 H), 2,84-2,91 (m, 1 H), 2,2 (s, 6 H), 0,79-0,83 (m, 2 H), 0,64-0,68 (m, 2 H).

Ví dụ I-T3-134:



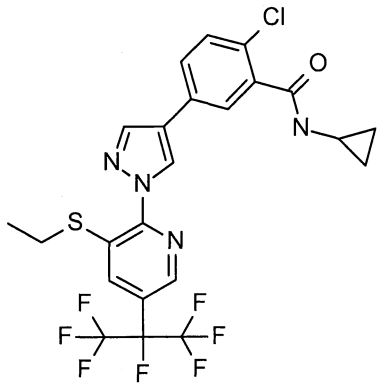
Bổ sung 49,3 mg (0,08 mmol) 2-clo-N-xyclopropyl-5-{1-[4-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)-2-(triflometyl)phenyl]-1H-pyrazol-4-yl}benzamit được làm mát đến 0°C vào hỗn hợp được làm mát chứa 6,5 mg (0,163 mmol) natri hydrua (60% trong dầu khoáng) trong 2 ml tetrahydrofuran khan. Sau 30 phút, 35 mg (0,24 mmol) metyl iodua được bổ sung vào, và hỗn hợp này được khuấy ở 0°C và trong 1 giờ, sau đó làm ấm đến nhiệt độ trong phòng trong khoảng thời gian 1 giờ và khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 14 giờ nữa. Sau đó, hỗn hợp này được bổ sung vào nước và chiết bằng etyl axetat, pha hữu cơ được làm khô bằng natri sulphat và dung môi được loại bỏ dưới áp suất giảm. Phần còn lại được tinh chế bằng phương pháp sắc ký trên silica gel (C_18) đảo pha với nước/axetonitril (gradien) làm chất giải hấp. Thu được 40,0 mg (0,068 mmol, 78%) 2-clo-N-xyclopropyl-5-[5-[2,6-diclo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]isoxazol-3-yl]benzamit (hợp chất I-T3-134).

HPLC-MS[a)]: logP = 4,88, khối lượng (m/z) = 588 [M+H]+.

^{1}H NMR (400 MHz, d_6-DMSO): δ (ppm) = 8,82 (s, 1 H), 8,43 (s, 1 H), 8,25 (d, 1H), 8,11 (d, 1 H), 8,06 (d, 1 H), 7,81 (d, 1 H), 7,75 (m, 1 H), 7,54 (d, 1 H), 3,02 (s, 3 H), 2,72 (m, 1 H), 0,55 (m, 2 H), 0,46 (m, 2 H).

Ví dụ I-T3-156:

2-clo-N-xyclopropyl-5-{1-[3-(etylsulphanyl)-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)pyridin-2-yl]-1H-pyrazol-4-yl}benzamit



2-(4-Bromo-1H-pyrazol-1-yl)-3-clo-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)pyridin

1,0 g (3,16 mmol) 2,3-diclo-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)pyridin được bổ sung từng giọt vào huyền phù chứa 0,51 g (3,48 mmol) 4-bromo-1H-pyrazol và 2,58 g (7,91 mmol) xesi cacbonat trong 10,0 ml dimetylformamit có chất lượng hóa chất phân tích. Hỗn hợp phản ứng được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 3 giờ. Sau đó, hỗn hợp phản ứng được pha loãng bằng etyl axetat và sau đó rửa bằng dung dịch nước amoni clorua bán bão hòa. Sau đó, pha nước được chiết lặp lại bằng etyl axetat, và sau đó các pha hữu cơ hỗn hợp được rửa bằng nước cất và dung dịch natri clorua bão hòa. Pha hữu cơ được làm khô bằng magie sulphat, lọc và cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Sản phẩm thô được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột trên silica gel.

Tạo ra 1,34 g (3,14 mmol) 2-(4-bromo-1*H*-pyrazol-1-yl)-3-clo-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)pyridin dưới dạng dầu không màu.

HPLC-MS[a)]: logP = 4,74, khối lượng (m/z) = 428 $[M+H]^+$.

^{1}H NMR (400 MHz, D6-DMSO): 8,90 (s, 1H), 8,67 (s, 1H), 8,63 (d, 1H), 8,06 (s, 1H).

2-clo-5-{1-[3-clo-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)pyridin-2-yl]-1*H*-pyrazol-4-yl}-*N*-xyclopropylbenzamit

150 mg (0,35 mmol) 2-(4-bromo-1*H*-pyrazol-1-yl)-3-clo-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)pyridin, 136 mg (0,42 mmol) 2-clo-N-xyclopropyl-5-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzamit, 59 mg (0,70 mmol) natri hydrocacbonat và 20 mg of tetrakis(triphenylphosphine)paladi (0,01 mmol) được hòa tan trong hỗn hợp chứa 1,5 ml dioxan và 0,5 ml nước cất. Các dung môi được bão hòa argon trong 30 phút trước khi sử dụng, bằng cách cho khí argon đi qua các dung môi này. Hỗn hợp phản ứng được đun nóng trong bể dầu đến 100°C trong 16 giờ. Sau khi hỗn hợp phản ứng đã được làm mát đến nhiệt độ trong phòng, hỗn hợp này được trộn với nước và sản phẩm thô được chiết lặp đi lặp lại bằng etyl axetat. Các pha hữu cơ hỗn hợp được làm khô qua magie sulphat và lọc qua silica gel. Các dung môi được loại bỏ trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Sản phẩm thô được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột trên silica gel.

Tạo ra 25 mg (0,05 mmol) 2-clo-5-{1-[3-clo-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)pyridin-2-yl]-1*H*-pyrazol-4-yl}-*N*-xyclopropylbenzamit dưới dạng chất rắn không màu.

HPLC-MS[a)]: logP = 4,08, khối lượng (m/z) = 541 $[M+H]^+$.

1H NMR (400 MHz, D6-DMSO): 9,02(s,1H), 8,89(s,1H), 8,61(d,1H), 8,54-8,52(m,1H), 8,50(s,1H), 7,83-7,81(m,2H), 7,52(d,1H), 2,87-2,81(m,1H), 0,74-0,65(m,2H), 0,60-0,50(m,2H)

2-clo-N-xyclopropyl-5-{1-[3-(etylsulphanyl)-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)pyridin-2-yl]-1*H*-pyrazol-4-yl}benzamit

300 mg (0,55 mmol) 2-clo-5-{1-[3-clo-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)pyridin-2-yl]-1*H*-pyrazol-4-yl}-*N*-xyclopropylbenzamit được hòa tan trong 5,0 ml DMF tuyệt đối và làm mát bằng bể đá khô/axeton. Bổ sung từng giọt dung dịch chứa 81,6 mg (0,97 mmol) natri etanthiolat trong 5 ml DMF tuyệt đối vào hỗn hợp phản ứng đã làm mát. Sau 3 giờ, hỗn hợp phản ứng được làm ấm đến nhiệt độ trong phòng và rót cẩn thận vào nước. Sản phẩm thô được chiết lặp đi lặp lại etyl axetat. Các pha hữu cơ hỗn hợp được rửa bằng dung dịch nước natri clorua bão hòa, làm khô qua

magie sulphat và lọc, và cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Sản phẩm thô được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột trên silica gel.

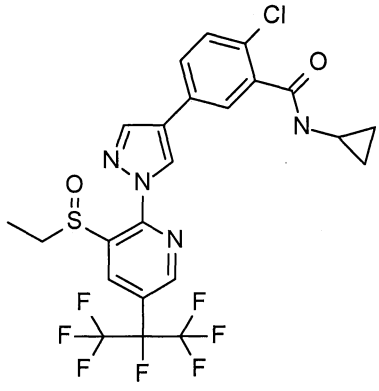
Tạo ra 226 mg (0,40 mmol) 2-clo-N-xyclopropyl-5-{1-[3-(etylsulphanyl)-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)pyridin-2-yl]-1*H*-pyrazol-4-yl}benzamit dưới dạng chất rắn không màu.

HPLC-MS[a)]: logP = 4,69, khối lượng (m/z) = 567 $[M+H]^+$.

1H NMR (400 MHz, D6-DMSO): 9,08 (d, 1H), 8,59 (d, 1H), 8,53 (d, 1H), 8,47 (s, 1H), 8,02 (d, 1H), 7,85-7,82 (m, 2H), 7,53-7,50 (m, 1H), 3,08 (q, 2H), 2,87-2,81 (m, 1H), 1,22 (t, 3H), 0,74-0,69 (m, 2H), 0,58-0,54 (m, 2H).

Ví dụ I-T3-157:

2-clo-N-xyclopropyl-5-{1-[3-(etylsulphinyl)-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)pyridin-2-yl]-1*H*-pyrazol-4-yl}benzamit



100 mg (0,17 mmol) 2-clo-N-xyclopropyl-5-{1-[3-(etylsulphanyl)-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)pyridin-2-yl]-1*H*-pyrazol-4-yl}benzamit được hòa tan trong 10,0 ml diclometan và làm mát bằng bể nước đá, 43,5 mg axit 3-cloperbenzoic được bổ sung vào theo từng phần. Hỗn hợp phản ứng được khuấy trong khi làm mát bằng nước đá trong 2 giờ. Hỗn hợp phản ứng được trộn với 5 ml dung dịch natri hydroxit 1N. Sau 5 phút, pha nước được loại bỏ. Sau khi kiểm tra các peroxit, pha hữu cơ được cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Sản phẩm thô được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột trên silica gel.

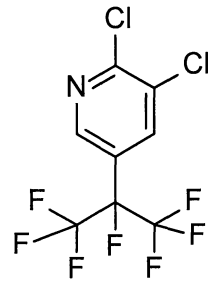
Tạo ra 61 mg 2-clo-N-xyclopropyl-5-{1-[3-(etylsulphinyl)-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)pyridin-2-yl]-1*H*-pyrazol-4-yl}benzamit dưới dạng chất rắn không màu.

HPLC-MS[a)]: logP = 3,79, khối lượng (m/z) = 583 $[M+H]^+$.

1H NMR (400 MHz, D6-DMSO): 9,36 (s, 1H), 8,96 (d, 1H), 8,63 (s, 1H), 8,58 (s, 1H), 8,53 (d, 1H), 7,91 (s, 1H), 7,89 (d, 1H), 7,53 (d, 1H), 3,45-3,30 (m, 1H beneath water), 2,95-2,88 (m ,1H), 2,86-2,81 (m, 1H), 1,08 (t, 3H), 0,74-0,69 (m, 2H), 0,60-0,50 (m, 2H).

Điều chế các hợp chất ban đầu

2,3-Diclo-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)pyridin



Giai đoạn thứ nhất: 3-clo-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)pyridin-2-amin

130,6 g (750 mmol) natri dithionit được bổ sung vào hỗn hợp được làm mát đến 0-5°C chứa 64,3 g (500 mmol) 3-clopyridin-2-amin , 222 g (750 mmol) 1,1,1,2,3,3,3-heptaflo-2-iodopropan và 126 g (1500 mmol) natri hydrocacbonat trong 2000 ml hỗn hợp axetonitril/nước 3:1 (thể tích/thể tích) trong khí bảo vệ. Hỗn hợp phản ứng được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 48 giờ. Sau đó axetonitril được loại bỏ trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Phần còn lại được pha loãng bằng 500 ml nước. Sản phẩm thô được chiết lặp đi lặp lại từ pha nước bằng etyl axetat. Các pha hữu cơ hỗn hợp được làm khô qua natri sulphat, lọc và sau đó cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Sản phẩm thô được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột trên silica gel.

Giai đoạn thứ hai: 3-clo-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)pyridin-2(1H)-on

5,8 g (19,5 mmol) 3-clo-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)pyridin-2-amin được hòa tan trong 150 ml axit sulphuric (20%, trọng lượng/trọng lượng) và làm mát đến 0-5°C. Dung dịch này được trộn với 2,7 g (40 mmol) natri nitrit theo từng phần. Hỗn hợp phản ứng được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 16 giờ. Sản phẩm thô được chiết lặp đi lặp lại từ hỗn hợp phản ứng bằng diclometan (DCM). Các pha hữu cơ

hỗn hợp được làm khô qua natri sulphat, lọc và sau đó cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Sản phẩm thô được sử dụng trong giai đoạn tiếp theo mà không cần tinh chế.

Giai đoạn thứ ba: 2,3-Diclo-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)pyridin

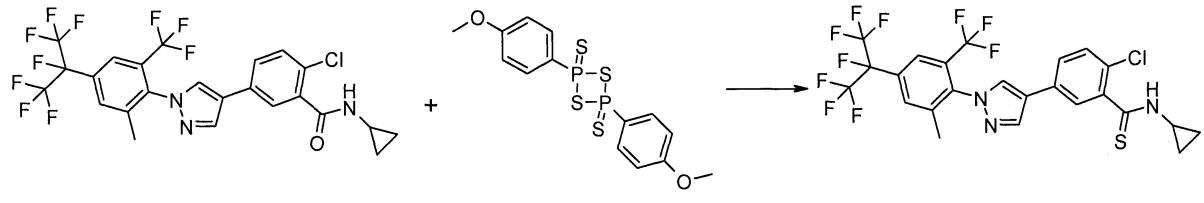
15,4 g (51,7 mmol) 3-clo-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)pyridin-2(1H)-on và 150 ml phosphoryl clorua được đun nóng đến 105°C trong 5 giờ. Hỗn hợp phản ứng được trung hòa cẩn thận bằng dung dịch natri hydrocacbonat. Sản phẩm thô được chiết lặp đi lặp lại từ hỗn hợp phản ứng bằng DCM. Các pha hữu cơ hỗn hợp được rửa bằng dung dịch nước natri clorua bão hòa, làm khô qua natri sulphat và lọc và sau đó cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Thu được sản phẩm bằng cách chưng cất chân không (điểm sôi 40°C ở áp suất 100 Pa (1 mbar)).

Tạo ra 14,8 g 2,3-diclo-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)pyridin dưới dạng chất lỏng không màu.

MS: khối lượng (m/z) = 315 $[M]^+$.

1H NMR (400 MHz, d1-cloroform): 8,48 (s, 1H), 7,95 (s, 1H).

Ví dụ I-T3-161:



294 mg (0,5 mmol) 2-clo-N-xyclopropyl-5-[1-[2-metyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometyl)phenyl]pyrazol-4-yl]benzamit ban đầu được nạp trong hỗn hợp chứa 0,5 ml triclometan không chứa etanol và 1,5 ml 1,2-dimetoxyetan, và 101 mg (0,25 mmol) Chất phản ứng Lawesson (2,4-bis(4-metoxyphenyl)-1,3,2,4-dithiadiphosphetan 2,4-disulphua) được bổ sung vào. Hỗn hợp này được đun nóng đến 50°C trong 4 giờ. Sau đó, hỗn hợp này được làm mát và dung môi được rút ra trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Phần còn lại được phân tách giữa etyl axetat và dung dịch nước natri hydrocacbonat bão hòa; pha nước được chiết lại một lần bằng etyl axetat. Các pha hữu cơ hỗn hợp được làm khô bằng natri sulphat và cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Để tinh chế, dùng phương pháp

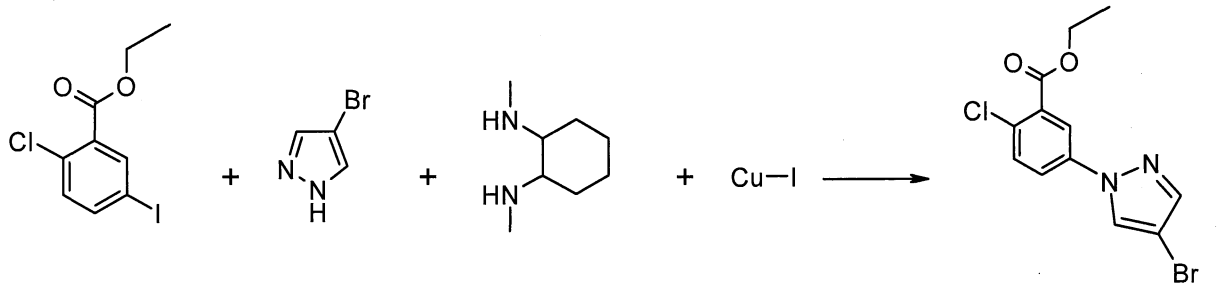
sắc ký bằng cách sử dụng cột chứa 40 g silica gel với gradien trong xyclohexan/etyl axetat từ 90:10 đến 50:50 (thể tích/thể tích). Thu được 248 mg 2-clo-N-xyclopropyl-5-[1-[2-metyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometyl)phenyl]pyrazol-4-yl]benzenecarbothioamit (hợp chất I-T3-161).

HPLC-MS[a)]: logP = 5,0, khối lượng (m/z) = 604 [M+H]+.

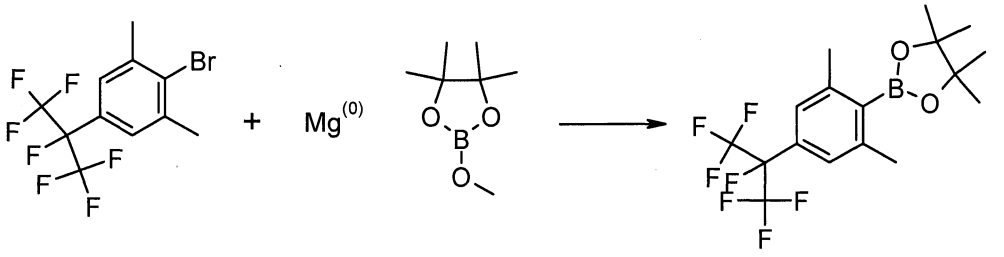
^{1}H-NMR (400 MHz, d_3-axetonitril): δ (ppm) = 8,62 (s, 1 H (rộng)), 8,14 (s, 1 H), 8,10 (s, 1H), 8,0 (s, 1 H), 7,95 (s, 1 H), 7,63 (d, J=2,2 Hz, 1 H), 7,57-7,60 (m, 1 H), 7,42 (d, J=8,4 Hz, 1 H), 3,02 (s, 3 H), 3,37-3,44 (m, 1 H), 0,92-0,95 (m, 2 H), 0,74-0,78 (m, 2 H).

Quy trình điều chế I-T4

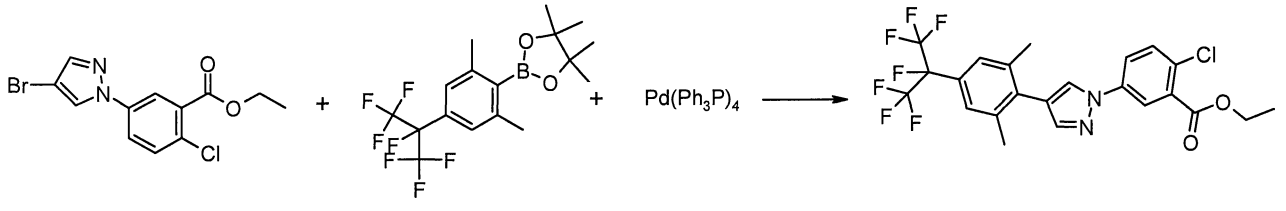
Ví dụ I-T4-1:



3,81 g (12,2 mmol) etyl 2-clo-5-iodobenzoat ban đầu được nạp trong 37 ml dimetylformamit, và 2,885 g (19,6 mmol) 4-bromopyrazol, 5,09 g (36,8 mmol) kali cacbonat mới nghiền, 0,349 g (2,4 mmol) 1,2-bis(metylamino)xyclohexan (raxemic, trans) và 0,234 g (1,22 mmol) đồng(I) iodua được bổ sung vào. Hỗn hợp này được đuổi khí bằng argon và sau đó đun nóng đến hồi lưu trong một giờ. Để làm sạch, hỗn hợp này được làm mát, rót vào 100 ml nước và chiết hai lần bằng 100 ml etyl axetat mỗi lần. Các pha hữu cơ hỗn hợp được rửa hai lần bằng 100 ml nước và sau đó bằng dung dịch natri clorua bão hòa, làm khô bằng natri sulphat và cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Để tinh chế, phần còn lại được sắc ký bằng cột 120 g chứa silica gel với gradien xyclohexan/etyl axetat từ 90:10 đến 70:30 (thể tích/thể tích). Thu được 1,41 g etyl 5-(4-bromopyrazol-1-yl)-2-clobenzoat.



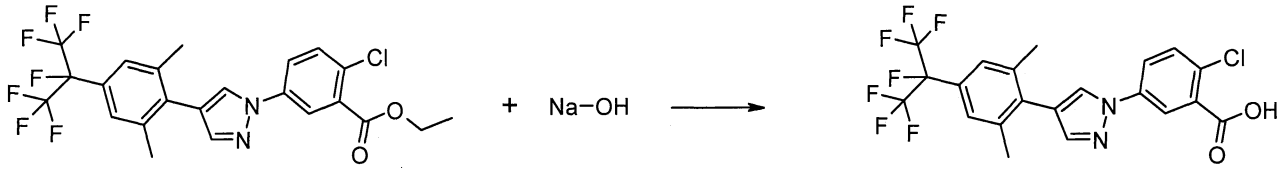
0,158 g (6,49 mg) phoi tiện magie được phủ bằng 1,5 ml tetrahydrofuran khan. Vài giọt dung dịch chứa 1,75 g (4,95 mmol) 2-bromo-1,3-dimetyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]benzen (được điều chế theo US2003/187233, p. 6) trong 2,5 ml tetrahydrofuran khan được bổ sung vào. Để bắt đầu phản ứng, một lượng nhỏ iot được bổ sung vào và hỗn hợp này được đun nóng đến khoảng 55°C. Sau khi phản ứng đã bắt đầu, phần dung dịch còn lai chứa 2-bromo-1,3-dimetyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]benzen được bổ sung từng giọt ở nhiệt độ 55°C. Sau khi kết thúc việc bổ sung, tiếp tục khuấy ở 55°C trong 1 giờ nữa, sau đó hỗn hợp này được làm mát đến 0°C và dung dịch chứa 2-metoxy-4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan trong 2,5 ml tetrahydrofuran khan được bổ sung từng giọt. Sau đó hỗn hợp này được để cho trở về nhiệt độ trong phòng. Để làm sạch, hỗn hợp này được rót vào dung dịch nước amoni clorua bão hòa. Các pha được tách, pha nước được chiết lại bằng etyl axetat, sau đó các pha hữu cơ hỗn hợp được rửa bằng dung dịch nước natri clorua bão hòa, làm khô bằng natri sulphat và cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Phần còn lại được chưng cất trong thiết bị Kugelrohr ở độ chân không 100 Pa (1 mbar) và 220°C. Thu được 1,85 g 2-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]-4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan.



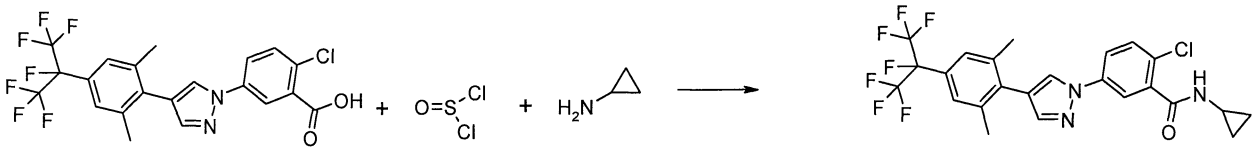
0,947 g (2,87 mmol) etyl 5-(4-bromopyrazol-1-yl)-2-clobenzoat và 1,15 g (2,87 mmol) 2-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]-4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan ban đầu được nạp trong 62 ml isopropanol, và 8,7 ml (8,7 mmol) dung dịch nước natri hydrocacbonat 1M đã đuổi khí được bổ sung vào. Hỗn hợp này được đuổi khí bằng argon và 0,166 g (0,14 mmol)

tetrakis(triphenylphosphine)paladi(0) được bổ sung vào và hỗn hợp này được đun nóng đến hồi lưu qua đêm.

Để làm sạch, hỗn hợp này được cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm, và phần còn lại được phân tách giữa nước và etyl axetat. Pha hữu cơ được lấy ra; pha nước được chiết lại bằng etyl axetat. Các pha hữu cơ hỗn hợp sau đó được rửa một lần bằng dung dịch nước natri clorua bão hòa và cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Thu được 1,17 g etyl 2-clo-5-[4-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-1-yl]benzoat thô dưới dạng phần còn lại.



1,76 g (3,36 mmol) etyl 2-clo-5-[4-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-1-yl]benzoat ban đầu được nạp trong 72 ml metanol, và 4,03 ml (4,03 mmol) dung dịch natri hydroxit 1M được bổ sung vào. Sau đó hỗn hợp này được đun nóng đến hồi lưu trong 3 giờ. Để làm sạch, hỗn hợp này được cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm, và phần còn lại được thu hồi bằng axit clohydric loãng và chiết ba lần bằng etyl axetat. Các phần chiết hỗn hợp được rửa bằng dung dịch natri clorua bão hòa, làm khô bằng natri sulphat và cô đặc, và tạo ra 1,36 g axit 2-clo-5-[4-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-1-yl]benzoic thô.



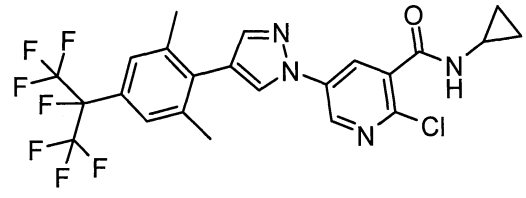
1,36 g (2,76 mmol) axit 2-clo-5-[4-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-1-yl]benzoic thô được hòa tan trong 14 ml toluen khan, 1 ml (13,8 mmol) thionyl clorua được bổ sung vào và sau đó hỗn hợp này được đun nóng đến 80°C trong 2 giờ. Sau đó, hỗn hợp này được cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm, 1 ml toluen khan được bổ sung vào và hỗn hợp này được cô đặc lại. Thu được 1,4 g clorua axit khan dưới dạng phần còn lại. 0,7 g phần còn lại được hòa tan trong 5 ml diclometan và bổ sung từng giọt vào dung dịch chứa

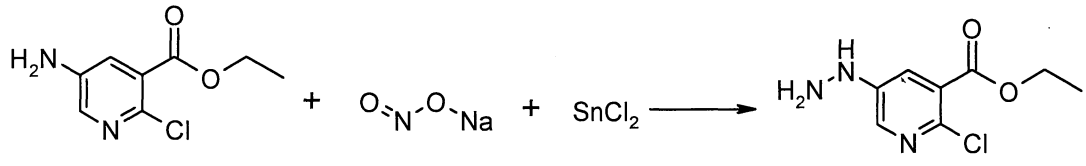
0,195 g (3,41 mmol) xyclopropylamin trong 2 ml diclometan ở nhiệt độ trong phòng. Hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 2 giờ nữa, sau đó rót vào 20 ml dung dịch nước natri dihydrophosphat 5%. Pha hữu cơ được lấy ra và rửa bằng dung dịch natri clorua bão hòa, làm khô bằng natri sulphat và cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Phần còn lại được tinh chế bằng hai lần chạy sắc ký bằng cách sử dụng cột chứa 15 g silica gel với gradien xyclohexan/etyl axetat từ 90:10 đến 50:50 (thể tích/thể tích). Thu được 91 mg (1,36 mmol) N-xyclopropyl-2-clo-5-[4-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-1-yl]benzamit (hợp chất I-T4-1).

HPLC-MSa): logP = 4,74, khối lượng (m/z) = 534 [M+H]+.

^{1}H NMR (400 MHz, d3-axetonitril): δ = (ppm) 8,17 (s, 1 H), 7,86 (s, 1 H), 7,84 (d, J1=2,7 Hz, 1 H), 7,69 (s, 1 H), 7,54(d, J1=8,8 Hz, 1H), 7,44 (s, 2 H), 6,97 (s (rộng), 1 H (N-H)), 2,83-2,87 (m, 1H), 2,25 (s, 6 H), 0,76-0,8 (m, 2 H), 0,58-0,62 (m, 2 H).

Ví dụ I-T4-3:

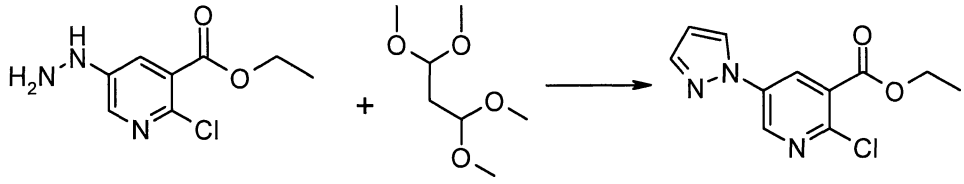




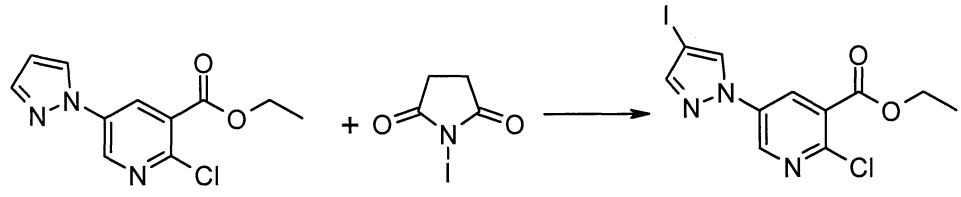
2 g (9,96 mmol) etyl 5-amino-2-clonicotinat (có bán trên thị trường) ban đầu được nạp trong 8,6 ml dung dịch nước axit clohydric 33%, và hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 30 phút, Sau đó, 7 ml nước được bổ sung vào và hỗn hợp này được làm mát đến 0°C bằng bể nước đá. Bổ sung vào hỗn hợp này từng giọt dung dịch chứa 750 mg (10,8 mmol) natri nitrit trong 6,92 ml nước trong vòng 30 phút. Nhiệt độ được giữ dưới +5°C bằng bể nước đá. Tiếp tục khuấy ở 0°C trong 15 phút.

Bình thứu hai ban đầu được nạp 5,77 g (25,5 mmol) tin(II) clorua dihydrat trong 24 ml dung dịch nước axit clohydric 16%, và huyền phù muối diazoni dược điều chế trên đây được sung từ từ từng giọt ở 0°C. Tiếp tục khuấy ở 0°C trong 1 giờ. Sau

đó, 50 ml axetonitril và 40 ml dung dịch nước natri clorua bão hòa được bổ sung vào. Các pha được tạo ra được tách. Pha nước được chiết hai lần bằng 50 ml axetonitril mỗi lần. Các pha hữu cơ hỗn hợp được làm khô bằng natri sulphat và cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Thu được phần còn lại là 10,7 g etyl 2-clo-5-hydrazinonicotinat thô.

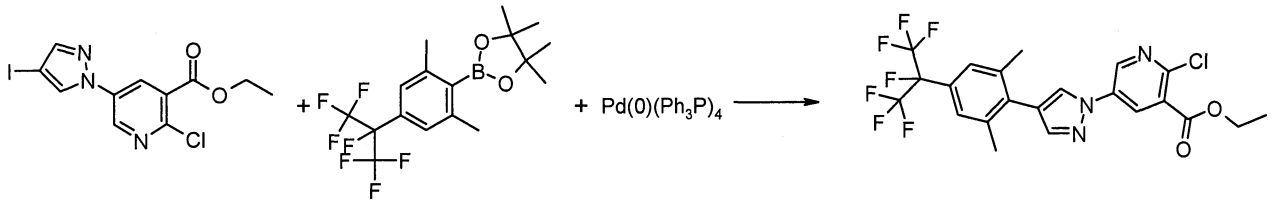


10,7 g etyl 2-clo-5-hydrazinonicotinat thô ban đầu được nạp trong 50 ml etanol, sau đó 1,63 g (9,92 mmol) 1,1,3,3-tetrametoxypropan và 487 mg 96% axit sulphuric được bổ sung vào. Sau đó, hỗn hợp này được đun nóng đến hồi lưu trong 2 giờ. Phần lớn etanol được loại bỏ trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm, và phần còn lại được phân tách giữa dung dịch nước natri hydrocacbonat bão hòa và etyl axetat. Pha hữu cơ được lấy ra, rửa bằng dung dịch nước natri clorua bão hòa, làm khô qua natri sulphat và cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Phần còn lại được sắc ký bằng cách sử dụng cột chứa 15 g silica gel và gradien từ xyclohexan tinh khiết đến 50:50 (thể tích/thể tích) xyclohexan/etyl axetat. Thu được 396 mg etyl 2-clo-5-(pyrazol-1-yl)nicotinat.

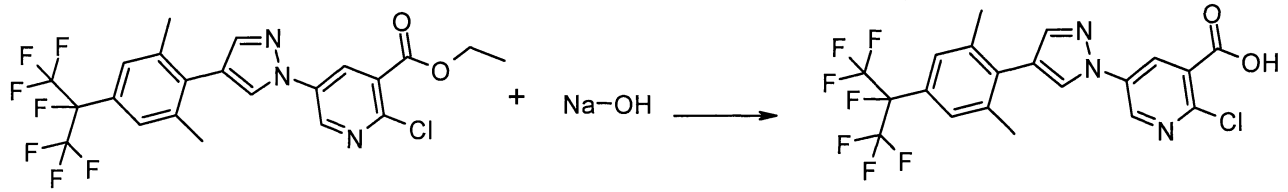


396 mg (1,57 mmol) etyl 2-clo-5-(pyrazol-1-yl)-nicotinat ban đầu được nạp trong 10 ml axetonitril, và 1,062 g (4,72 mmol) N-iodosucxinimit được bổ sung vào. Tiếp theo, hỗn hợp này được đun nóng trong điều kiện hồi lưu trong argon trong 3 giờ. Hỗn hợp này được làm mát chút ít và dung môi được loại bỏ trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Phần còn lại được phân tách giữa nước và etyl axetat. Pha hữu cơ được lấy ra, đầu tiên rửa bằng dung dịch nước natri hydrosulphit bão hòa sau đó bằng dung dịch nước natri hydrocacbonat bão hòa và cuối cùng bằng dung dịch nước natri clorua bão hòa, làm khô bằng natri sulphat và cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu

quay dưới áp suất giảm. Phần còn lại được sắc ký bằng cách sử dụng cột chứa 15 g silica gel và gradien từ xyclohexan tinh khiết đến 50:50 (thể tích/thể tích) xyclohexan/etyl axetat.

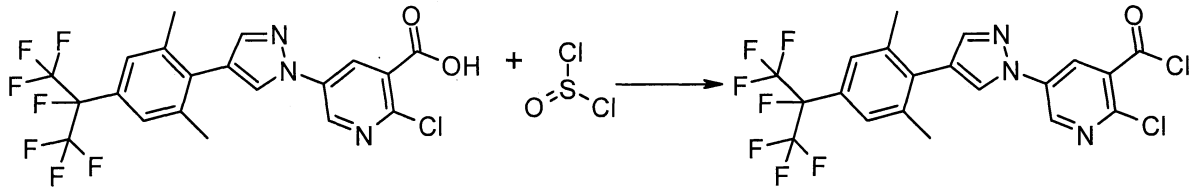


401 mg (1,06 mmol) etyl 2-clo-5-(4-iodopyrazol-1-yl)pyridin-3-carboxylat và 425 mg (1,06 mmol) 2-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]-4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan ban đầu được nạp trong 23 ml isopropanol, và 3,24 ml (3,24 mmol) dung dịch nước natri hydrocacbonat 1M đã đuổi khí và 61 mg (0,05 mmol) tetrakis(triphenylphosphine)paladi(0) được bổ sung vào. Hỗn hợp này được đuổi khí một lần nữa bằng argon và đun nóng đến hồi lưu qua đêm. Sau đó, hỗn hợp này được làm mát và các thành phần dễ bay hơi được rút ra trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Phần còn lại được phân tách giữa nước và etyl axetat. Pha hữu cơ được lấy ra, rửa một lần bằng dung dịch nước natri clorua bão hòa và cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Thu được 415 mg etyl 2-clo-5-[4-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-1-yl]pyridin-3-carboxylat thô.

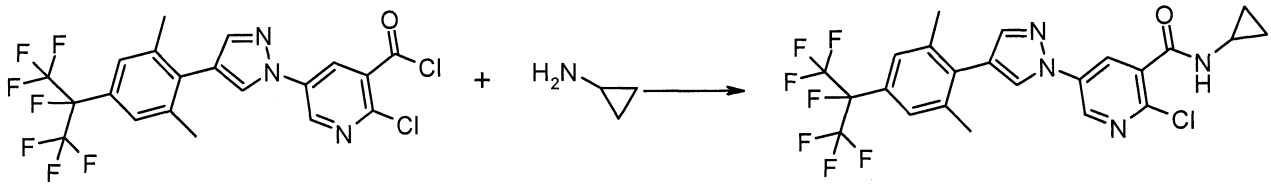


416 mg (0,79 mmol) etyl 2-clo-5-[4-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl) etyl]phenyl]pyrazol-1-yl]pyridin-3-carboxylat thô được hòa tan trong 16,9 ml metanol, và 0,952 ml (0,95 mmol) dung dịch natri hydroxit 1M được bổ sung vào. Hỗn hợp này được đun nóng trong điều kiện hồi lưu trong 6 giờ, sau đó làm mát và cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Phần còn lại được phân tách giữa etyl axetat và axit clohydric loãng. Pha nước được chiết lại hai lần bằng etyl axetat. Các pha hữu cơ hỗn hợp được rửa bằng dung dịch nước natri clorua bão hòa, làm khô bằng natri sulphat và cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất

giảm. Thu được 380 mg axit 2-clo-5-[4-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-1-yl]pyridin-3-carboxylic thô.



380 mg (0,76 mmol) axit 2-clo-5-[4-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl) etyl]phenyl]pyrazol-1-yl]pyridin-3-carboxylic thô được hòa tan trong toluen, và 456 mg (3,83 mmol) thionyl clorua được bổ sung vào. Hỗn hợp này được đun nóng đến 80°C trong 2 giờ và sau đó cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Thu được 400 mg 2-clo-5-[4-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-1-yl]pyridin-3-cacbonyl clorua.



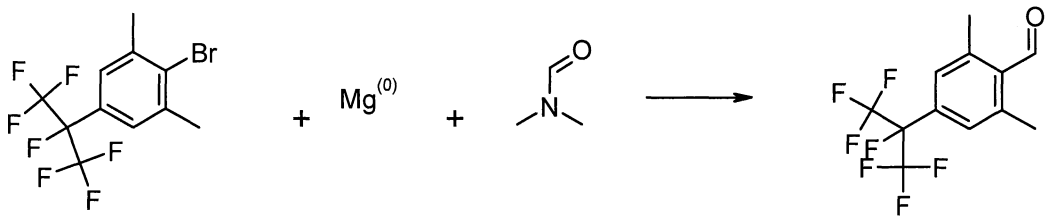
138 mg (0,26 mmol) 2-clo-5-[4-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl] phenyl] pyrazol-1-yl]pyridin-3-cacbonyl clorua được hòa tan trong 1 ml diclometan và bổ sung từng giọt vào dung dịch chứa 38 mg xyclopropylamin trong 1 ml diclometan ở nhiệt độ trong phòng. Hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 2 giờ nữa. Sau đó hỗn hợp này được rửa bằng dung dịch natri dihydrophosphat 5% và sau đó bằng dung dịch nước natri clorua bão hòa, làm khô bằng natri sulphat và cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Để tinh chế, dùng phương pháp sắc ký bằng cách sử dụng cột chứa 15 g silica gel với gradien trong xyclohexan/etyl axetat từ 90:10 đến 50:50 (thể tích/thể tích). Thu được 30 mg 2-clo-N-xyclopropyl-5-[4-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-1-yl]pyridin-3-carboxamit.

HPLC-MSa): logP = 4,42, khối lượng (m/z) = 534 [M+H]+.

^{1}H NMR (400 MHz, d3-axetonitril): δ (ppm) = 8,92 (d, J = 2,8 Hz, 1 H), 8,22 (d, J1=2,8 Hz, 1 H), 8,20 (s, 1 H), 7,75(s, 1H), 7,44 (s, 2 H), 5,1 (s (rộng), 1 H (N-H)), 2,84-2,88 (m, 1H), 2,25 (s, 6 H), 0,78-0,81 (m, 2 H), 0,59-0,63 (m, 2 H).

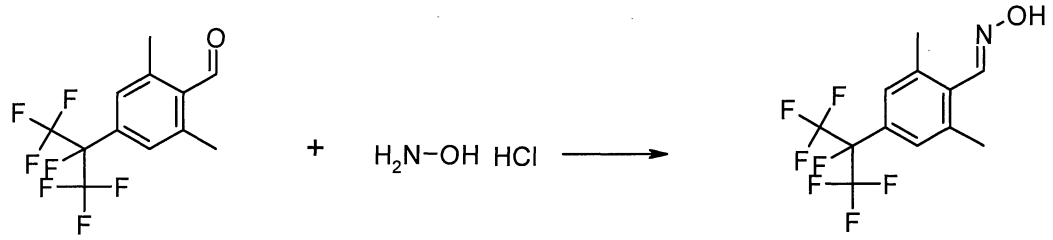
Quy trình điều chế I-T22

Ví dụ I-T22-1:



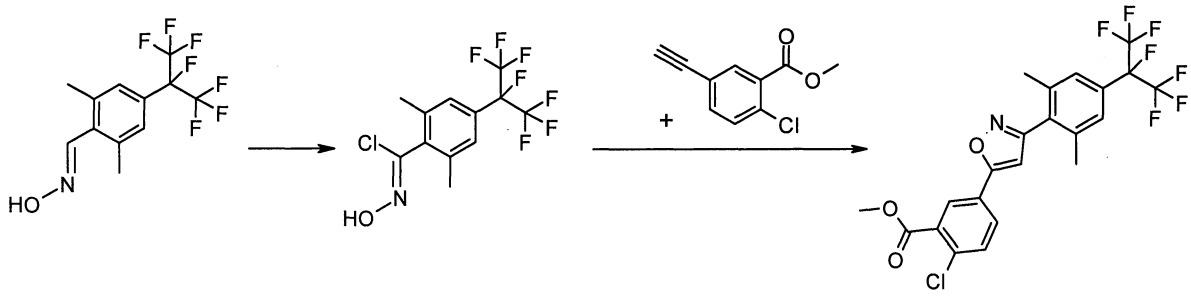
Việc điều chế 2,6-dimetyl-4-heptafloisopropylbromobenzen được mô tả trong US2003/187233, p. 6 [0080].

Trong bình ba cổ 25 ml, 158 mg (6,5 mg nguyên tử) phoi tiện magie được phủ bằng tetrahydrofuran (THF) khan. Sau đó vài giọt dung dịch chứa 1,75 g (4,95 mmol) 2,6-dimetyl-4-heptafloisopropylbromobenzen trong 2,5 ml THF khan được bổ sung vào. Để bắt đầu phản ứng, một lượng nhỏ iot được bổ sung vào và hỗn hợp này được đun nóng đến khoảng 60°C. Sau khi phản ứng đã bắt đầu, phần còn lại của dung dịch chứa 2,6-dimetyl-4-heptafloisopropylbromobenzen được bổ sung từng giọt ở khoảng 60°C. Sau khi kết thúc việc bổ sung, tiếp tục khuấy ở 60°C trong một giờ nữa, sau đó hỗn hợp này được làm mát đến 0°C và dung dịch chứa 1,09 g (14,8 mmol) dimetylformamit in 2,5 ml dry THF được bổ sung từng giọt. Sau đó hỗn hợp này được để cho trở về nhiệt độ trong phòng. Để làm sạch, dung dịch nước amoni clorua bão hòa dư được bổ sung vào, các pha được tách, và pha nước được chiết lại bằng etyl axetat. Các pha hữu cơ hỗn hợp được rửa bằng dung dịch natri clorua bão hòa, làm khô bằng natri sulphat và cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Còn lại 1,3 g 2,6-dimetyl-4-heptafloisopropylbenzaldehyt thô (độ tinh khiết khoảng 80%) dưới dạng phần còn lại, được sử dụng tiếp mà không cần tinh chế.

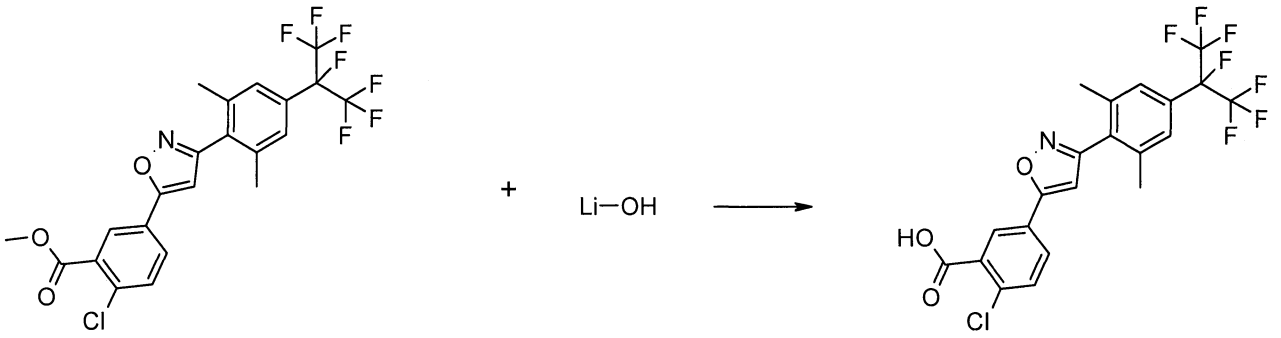


1,3 g (khoảng 3,44 mmol) 2,6-dimetyl-4-heptafloisopropylbenzaldehyt thô được hòa tan trong 26 ml metanol, 361 mg (4,3 mmol) natri hydrocacbonat được bổ sung vào và hỗn hợp này được làm mát to 0°C. Sau đó, 1,2 g (17,2 mmol)

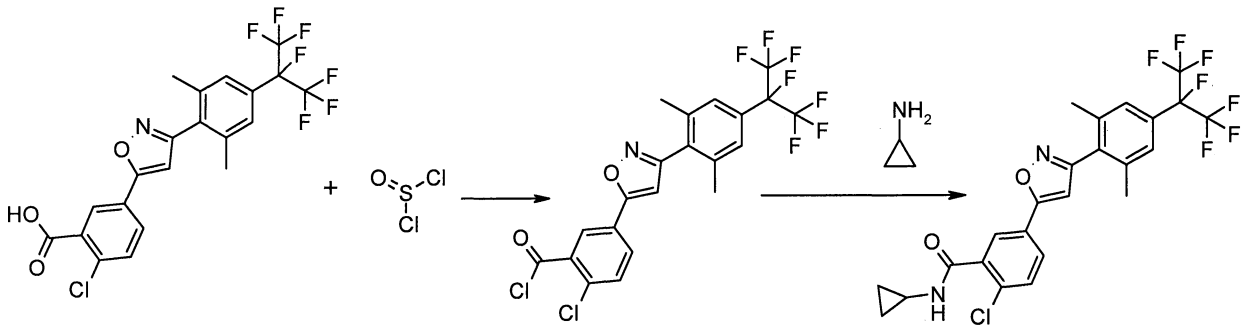
hydroxylamoni clorua được bổ sung vào và hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng qua đêm. Để làm sạch, hỗn hợp này được cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm, và phần còn lại được thu hồi trong 100 ml etyl axetat. Các thành phần không tan được lọc ra và dịch lọc được cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Sau đó phần còn lại được tinh chế bằng phương pháp sắc ký bằng cách sử dụng cột 40 g chứa silica và gradien từ xyclohexan tinh khiết đến 70:30 (thể tích/thể tích) xyclohexan/etyl axetat. Thu được 0,5 g 2,6-dimetyl-4-heptafloisopropylbenzaldehyt oxim.



505 mg (1,59 mmol) 2,6-dimetyl-4-heptafloisopropylbenzaldehyt oxim ban đầu được nạp trong 3,5 ml dimetylformamit (DMF), và 234 mg (1,75 mmol) N-closucxinimit được bổ sung vào, Hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 3,5 giờ. Sau đó hỗn hợp này được làm mát đến 0°C và dung dịch chứa 310 mg (1,59 mmol) metyl 2-clo-5-etynylbenzoat (được điều chế theo WO2012/107434, p, 103) trong 1,5 ml DMF được bổ sung từng giọt, tiếp theo là 355 mg (3,5 mmol) trietylamin. Sau đó, hỗn hợp phản ứng được khuấy ở nhiệt độ trong phòng qua đêm. Để làm sạch, hỗn hợp này được rót vào nước và chiết hai lần bằng diclometan, và các phần chiết hỗn hợp được rửa bằng nước, làm khô bằng natri sulphat và cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Để tinh chế, dùng phương pháp tinh chế bằng cách sử dụng cột 40 g chứa silica gel và gradien từ xyclohexan tinh khiết đến 80:20 (thể tích/thể tích) xyclohexan/etyl axetat. Thu được 488 mg metyl 2-clo-5-[3-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]isoxazol-5-yl]benzoat.



0,8 g (1,56 mmol) metyl 2-clo-5-[3-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl] isoxazol-5-yl]benzoat ban đầu được nạp trong hỗn hợp chứa 18 ml dioxan và 6,5 ml nước, 86 mg (2,04 mmol) lithi hydroxit monohydrat được bổ sung vào và hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng qua đêm. Để làm sạch, hỗn hợp này được cô đặc dưới áp suất giảm và phần còn lại được phân tách giữa hỗn hợp chứa axit clohydric loãng và diclometan. Pha hữu cơ được lấy ra; pha nước đầu tiên được chiết bằng diclometan, sau đó bằng etyl axetat. Các pha hữu cơ hỗn hợp được rửa bằng dung dịch nước natri clorua bão hòa, làm khô bằng natri sulphat và cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Thu được 680 mg axit 2-clo-5-[3-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]isoxazol-5-yl]benzoic.



680 mg axit (1,37 mmol) 2-clo-5-[3-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl) etyl]phenyl] isoxazol-5-yl]benzoic được hòa tan trong 7 ml toluen, và 0,5 ml (6,89 mmol) thionyl clorua được bổ sung vào. Hỗn hợp này được đun nóng đến 80°C trong hai giờ và sau đó cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. 200 mg (0,38 mmol) clorua axit thô thu được được hòa tan trong 1 ml diclometan và bổ sung từng giọt vào dung dịch chứa 56 mg (0,97 mmol) xyclopropylamin trong 0,95 ml diclometan ở nhiệt độ trong phòng. Sau đó, hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng qua đêm. Để làm sạch, hỗn hợp này được rót vào dung dịch nước natri dihydrophosphat 5%, và pha hữu cơ được lấy ra, làm khô bằng natri sulphat và cô đặc

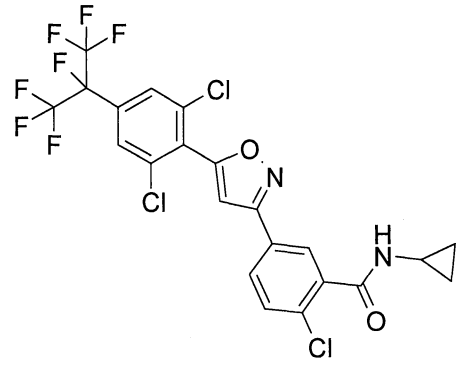
trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Để tinh chế, phần còn lại được sắc ký bằng cách sử dụng cột chứa 15 g silica gel và gradien từ xyclohexan tinh khiết đến 80:20 (thể tích/thể tích) xyclohexan/etyl axetat. Thu được 165 mg 2-clo-N-xyclopropyl-5-[3-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]isoxazol-5-yl]benzamit (hợp chất I-T22-1).

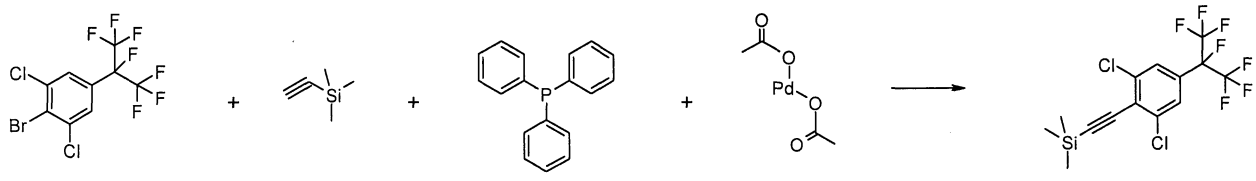
HPLC-MS[a)]: logP = 4,75, khối lượng (m/z) = 535 [M+H]+.

^{1}H NMR (400 MHz, d_3-axetonitril): δ (ppm) = 7,93 (d, J=2,2 Hz, 1 H), 7,89 (dd, J1=8,4 Hz, J2=2,2 Hz, 1H), 7,6 (d, J=8,4 Hz, 1H), 7,49 (s, 2 H), 7,03 (s (rộng), 1 H (N-H)), 6,86 (s, 1 H), 2,83-2,88 (m, 1H), 0,75-0,79 (m, 2 H), 0,59-0,62 (m, 2 H).

Quy trình điều chế I-T23

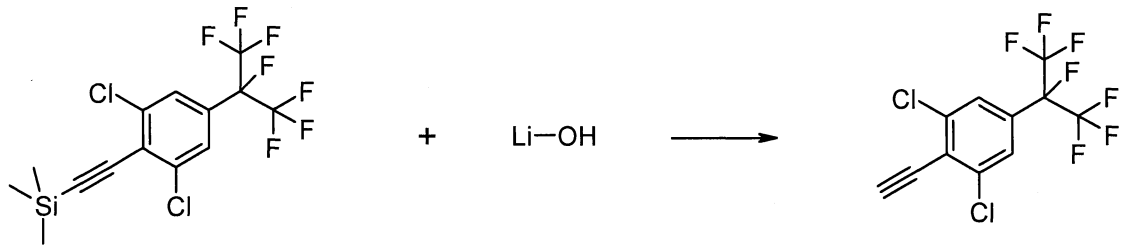
Ví dụ I-T23-1:





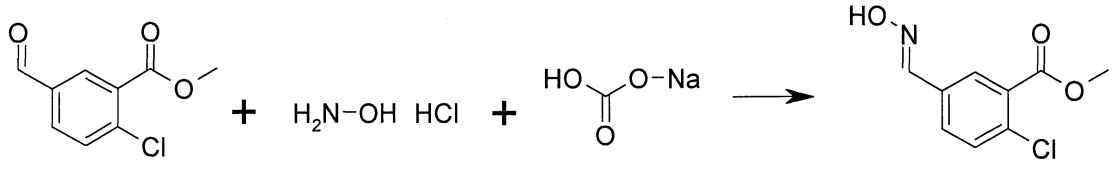
3 g (7,61 mmol) 2-bromo-1,3-diclo-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]benzen (để điều chế xem EP 1 253 128, trang 10), 1,21 g (12,3 mmol) etynyltrimetylsilan, 86 mg (0,38 mmol) paladi(II) axetat và 260 mg (1,0 mmol) triphenylphosphin ban đầu được nạp trong 20 ml dry trietylamin và đun nóng đến hồi lưu. Sau khi cô đặc thể tích này trong thiết bị bay hơi kiểu quay ở 30°C, phần còn lại được trộn với 20 ml dung dịch natri hydrocacbonat bão hòa và chiết ba lần bằng diclometan. Các phần chiết hỗn hợp được rửa bằng dung dịch nước NaH2PO4 5% và sau đó bằng dung dịch natri clorua bão hòa. Sau khi làm khô dung dịch bằng natri sulphat và cô đặc thể tích này trong thiết bị bay hơi kiểu quay ở 30°C, tinh chế bằng

cách sắc ký trên silica gel với chất giải hấp là xyclohexan. Tạo ra 1,4 g 2-[2,6-diclo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]etynyltrimetylsilan với độ tinh khiết khoảng 50% (vùng LC-MS).

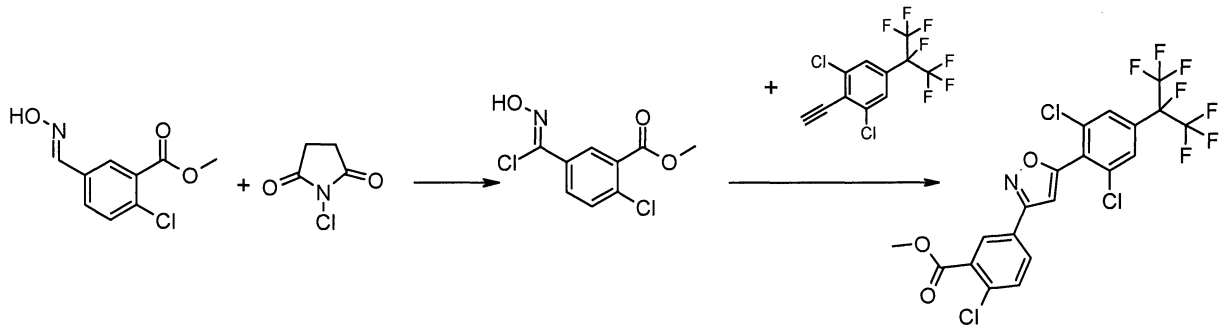


1,4 g (3,4 mmol) 2-[2,6-diclo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl] etynyltrimetylsilan được hòa tan trong 7 ml tetrahydrofuran, và hỗn hợp chứa 7 ml metanol và 214 mg (5,1 mmol) lithi hydroxit monohydrat được bổ sung vào ở nhiệt độ trong phòng. Dung dịch phản ứng được cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay và phần còn lại được thu hồi bằng hỗn hợp chứa diclometan và nước. Pha hữu cơ được lấy ra, làm khô bằng natri sulphat và cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm, và tạo ra 880 mg 1,3-diclo-2-etynyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]benzen khoảng 50%.

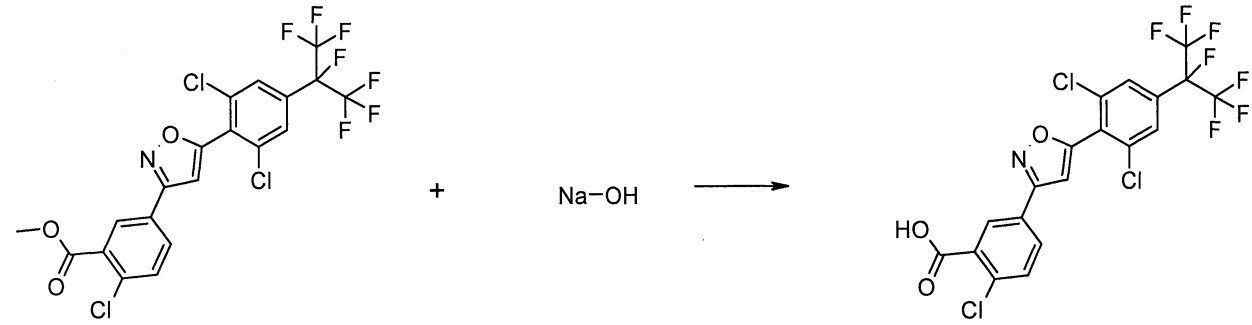
Việc điều chế 4-clo-3-carbometoxybenzaldehyt đã được mô tả trong tài liệu (xem, ví dụ, WO 2010/011584, p. 19-20).



4,1 g (20,6 mmol) 4-clo-3-carbometoxybenzaldehyt được hòa tan trong 82 ml metanol, 1,734 mg (20,6 mmol) natri hydrocacbonat được bổ sung vào và hỗn hợp này được làm mát đến 0°C. Sau đó, 5,738 g (82,5 mmol) hydroxylamin hydroclorua được bổ sung vào và hỗn hợp này được khuấy. Để làm sạch, hỗn hợp này được cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay, và phần còn lại được thu hồi trong 100 ml etyl axetat. Các chất rắn được lọc ra và dịch lọc được cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Để tinh chế, phần còn lại được sắc ký bằng silica gel với gradien trong 9:1 đến 7:3 (thể tích/thể tích) xyclohexan/etyl axetat, và tạo ra 2,68 g etyl 2-clo-5-[(E)-hydroxyiminometyl]benzoat.

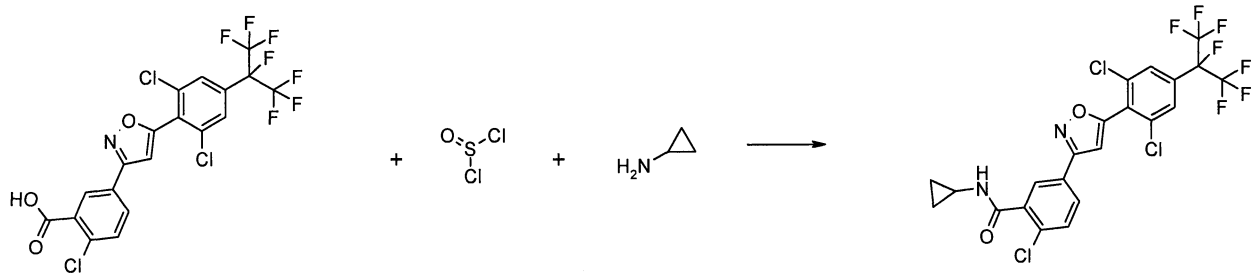


277 mg (1,29 mmol) etyl 2-clo-5-[(E)-hydroxyiminometyl]benzoat ban đầu được nạp trong 4,6 ml dimetylformamit, 381 mg (2,84 mmol) N-closucxinimit được bổ sung vào, và hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng. Sau đó hỗn hợp này được làm mát đến 0°C bằng bể nước đá, và dung dịch chứa 880 mg (nồng độ khoảng 50%, 1,29 mmol) 1,3-diclo-2-etynyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]benzen trong 1,5 ml dimetylformamit được bổ sung từng giọt, tiếp theo là 289 mg (2,85 mmol) trietylamin. Hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng. Để làm sạch, phản ứng được pha loãng bằng nước và chiết hai lần bằng diclometan. Các phần chiết hỗn hợp được rửa bằng nước, làm khô bằng natri sulphat và cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay. Phần còn lại được tinh chế bằng hai làn chạy sắc ký trên silica với gradien từ xyclohexan tinh khiết đến 80:20 (thể tích/thể tích) xyclohexan/etyl axetat làm chất giải hấp, và tạo ra 410 mg metyl 2-clo-5-[5-[2,6-diclo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]isoxazol-3-yl]benzoat.



410 mg (0,74 mmol) metyl 2-clo-5-[5-[2,6-diclo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]isoxazol-3-yl]benzoat ban đầu được nạp trong 21 ml metanol, 0,74 ml (0,74 mmol) dung dịch natri hydroxit 1M được bổ sung vào và hỗn hợp này được khuấy trong điều kiện hồi lưu. Tiếp theo, metanol được loại bỏ trong thiết bị bay hơi kiểu quay. Phần còn lại được trộn với axit clohydric loãng và chiết ba lần bằng etyl axetat. Các phần chiết hỗn hợp được làm khô bằng natri sulphat và cô đặc trong thiết

bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Thu được 405 mg axit 2-clo-5-[5-[2,6-diclo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]isoxazol-3-yl]benzoic dưới dạng phần còn lại.

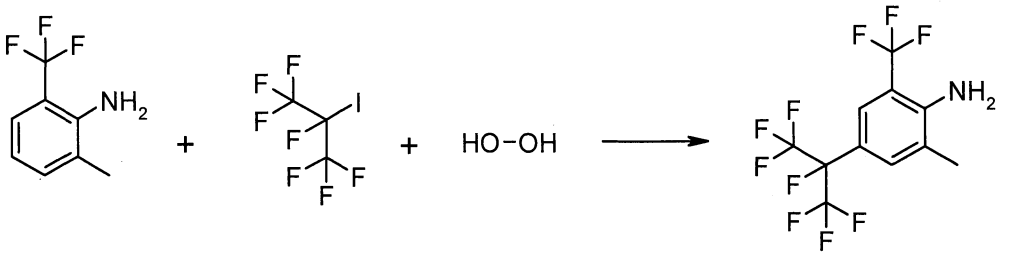


125 mg (0,23 mmol) axit 2-clo-5-[5-[2,6-diclo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]isoxazol-3-yl]benzoic được hòa tan trong 1,1 ml toluen khan, và 0,14 g (1,16 mmol) thionyl clorua được bổ sung vào. Hỗn hợp này được đun nóng đến 80°C và sau đó cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay. Phần còn lại được hòa tan trong 0,25 ml diclometan và bổ sung từng giọt vào dung dịch chứa 33 mg (0,58 mmol) xyclopropylamin trong 0,75 ml diclometan ở 0°C, và hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 2 giờ. Để làm sạch, 5% dung dịch nước natri dihydrophosphat được bổ sung vào và sau đó pha hữu cơ được lấy ra. Pha hữu cơ này được làm khô bằng natri sulphat và cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay. Phần còn lại được tinh chế bằng phương pháp sắc ký với silica gel và 70:30 (thể tích/thể tích) xyclohexan/etyl axetat làm chất giải hấp. Thu được 49 mg 2-clo-N-xyclopropyl-5-[5-[2,6-diclo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl] phenyl]isoxazol-3-yl]benzamit (hợp chất I-T23-1).

HPLC-MS[a)]: logP = 4,96, khối lượng (m/z) = 575 [M+H]+.

^{1}H NMR (400 MHz, d_3-axetonitril): δ = 7,96 (s, 1 H), 7,94-7,96 (dd, J1=8,4 Hz, J2=2,2 Hz, 1H), 7,86 (s, 2 H), 7,6 (d, J1=7,6 Hz, J2=1,2, 1 H), 7,15 (s, 1 H), 6,9 (s (rộng), 1 H (N-H)), 3,97 (s, 3 H), 2,83-2,88 (m, 1H), 0,75-0,79 (m, 2 H), 0,58-0,62 (m, 2 H).

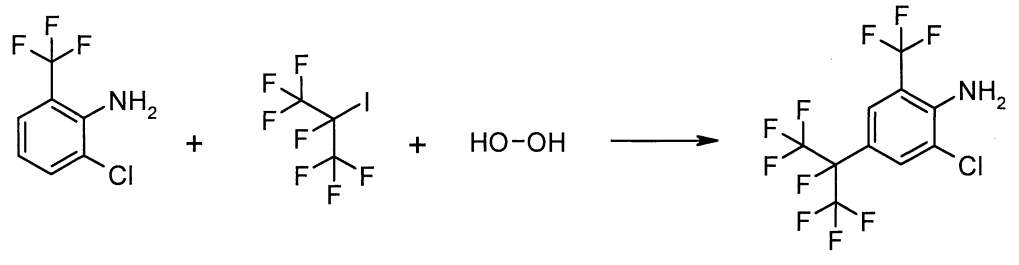
Quy trình 1 Ví dụ 4-heptafloisopropyl-2-metyl-6-triflometylanilin



D-1a

Bình ba cổ ban đầu được nạp 17,48 g (100 mmol) 2-metyl-6-triflometylanilin trong 498 ml dimetyl sulphoxit, và sau đó 44,3 g (21,095 ml, 150 mmol) 2-iodoheptaflopropan, 29,9 ml (29,9 mmol) dung dịch sắt(II) sulphat 1M trong nước và 5,43 ml (104 mmol) axit sulphuric 96% được bổ sung vào. Sau đó hỗn hợp này được đuổi khí bằng argon và sau đó bơm xy lanh được sử dụng để bổ sung từng giọt 20,4 ml dung dịch nước hydro peroxit 30% trong vòng 15 phút. Nhiệt độ tăng lên 54°C. Về cuối quá trình bổ sung từng giọt, hỗn hợp này được đun nóng nhanh đến 60°C. Hỗn hợp này được khuấy trong 20 phút nữa mà không đun nóng, trong quá tình này nhiệt độ giảm xuống 36°C. Để làm sạch, hỗn hợp này được rót vào dung dịch nước natri hydrocacbonat bão hòa và sản phẩm được chiết bằng etyl axetat. Các phần chiết hỗn hợp đầu tiên được rửa bằng nước và sau đó bằng dung dịch nước natri clorua bão hòa, làm khô bằng natri sulphat và cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Để tinh chế, dùng phương pháp sắc ký theo hai phần qua cột chứa 120 g silica gel và gradien từ xyclohexan tinh khiết đến 95:5 xyclohexan/etyl axetat (thể tích/thể tích). Thu được 18,9 g 4-heptafloisopropyl-2-metyl-6-triflometylanilin.

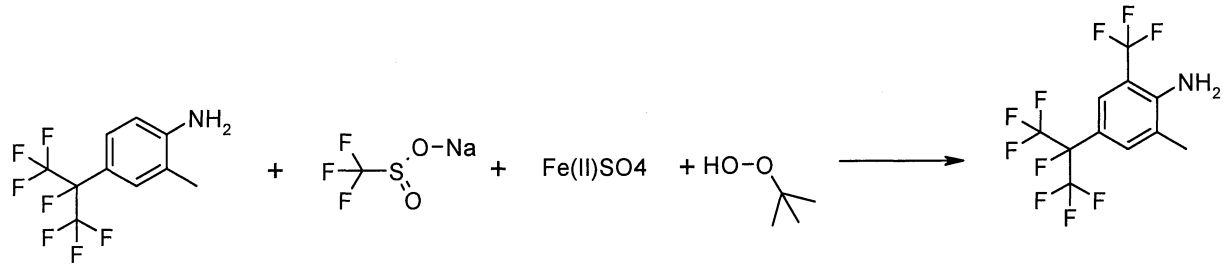
Tương tự, 2-clo-4-heptafloisopropyl-6-triflometylanilin cũng có thể thu được từ 2-clo-6-triflometylanilin và 2-iodoheptaflopropan:



Bình ba cổ ban đầu được nạp 30 g (0,153 mol) 2-clo-6-triflometylanilin (có bán trên thị trường) trong 765 ml dimetyl sulphoxit (DMSO), và sau đó 68,1 g (0,23 mol)

2-iodoheptaflopropan, 46 ml dung dịch nước sắt(II) sulphat 1M và 15,4 g axit sulphuric 98% được bổ sung vào. Hỗn hợp này được đuổi khí bằng argon và sau đó bơm xylanh được dùng để bổ sung từng giọt 34,8 g dung dịch nước hydro peroxit 30% trong vòng 30 phút. Trong thời gian này, nhiệt độ tăng lên 70°C. Hỗn hợp này được khuấy trong 20 phút nữa, trong thời gian này nhiệt độ giảm xuống 30°C. Sau đó, hỗn hợp phản ứng được rót vào dung dịch nước natri hydrocacbonat bão hòa và chiết bằng etyl axetat. Các phần chiết hỗn hợp đầu tiên được rửa bằng nước, sau đó bằng dung dịch nước bisulphit bão hòa và dung dịch nước natri clorua bão hòa, làm khô bằng natri sulphat và cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Để tinh chế, dùng phương pháp sắc ký bằng cách sử dụng cột chứa 330 g silica gel và gradien từ xyclohexan tinh khiết đến 90:10 (thể tích/thể tích) xyclohexan/etyl axetat. Thu được 46,1 g 2-clo-4-heptafloisopropyl-6-triflometylanilin.

Quy trình 2 Ví dụ 4-heptafloisopropyl-2-metyl-6-triflometylanilin



D-1a

Trong bình ba cổ 1000 ml, 25 g (91 mmol) 4-heptafloisopropyl-2-metylanilin được bổ sung vào hỗn hợp chứa 363,4 ml nước và 181,7 ml axetonitril. Sau đó 27,3 ml (27,3 mmol) dung dịch nước sắt(II) sulphat 1M và 31,19 g (200 mmol) natri triflometylsulphinat được bổ sung vào. Hỗn hợp này được phủ bằng argon và sau đó 35,1 g (273 mmol) dung dịch nước tert-butyl hydroperoxit 70% được định lượng đưa vào bằng bơm xylanh trong vòng 4,5 giờ mà không làm mát. Nhiệt độ tăng lên 34°C. Sau khi kết thúc việc bổ sung, khuấy tiếp trong 1 giờ nữa. Để làm sạch, hỗn hợp này được rót vào 425 ml dung dịch nước natri hydrosulphit bão hòa và khuấy trong 15 phút. Sau đó 425 ml dung dịch natri hydro cacbonat bão hòa được bổ sung vào và hỗn hợp này được chiết ba lần bằng etyl axetat. Các pha hữu cơ hỗn hợp đầu tiên được rửa bằng nước và sau đó bằng dung dịch nước natri clorua bão hòa, làm khô bằng natri sulphat và cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Sản phẩm thô được sắc ký theo hai phần bằng cách sử dụng cột chứa 120 g silica gel và gradien

xyclohexan/etyl axetat từ 95:5 đến 85:15 (thể tích/thể tích). Thu được 19,5 g 4-heptafloisopropyl-2-metyl-6-triflometylanilin.

HPLC-MS[a)]: logP = 4,67

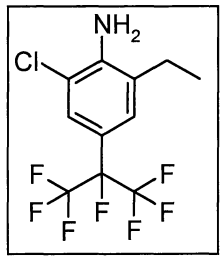
GC/MS: khối lượng (m/z) = 343, thời gian lưu: 2,98 phút, chỉ số Kovats: 1089

(Agilent 6890 GC, HP5979 MSD, 10m DB-1, iD=0,18mm, FILM=0,4µm, tiêm:250°C, không đổi, tốc độ chảy: 1,6mm/phút He. Det.:MSD:280°C, FID: 320°C, Lò:50°C(1 phút) - 40°C/phút - 320°C (3,25 phút))

^{1}H NMR (AV400, 400 MHz, d_3-axetonitril): δ (ppm) = 7,50 (s, 1 H), 7,48 (s, 1H), 5,03 (s, 2H, rộng), 2,23 (s, 3 H).

Điều chế nguyên liệu ban đầu 2-clo-6-etyl-4-heptafloisopropylanilin

Nguyên liệu ban đầu 2-clo-6-etyl-4-heptafloisopropylanilin có công thức cấu trúc (D-1b) chưa được mô tả trong tài liệu. Hợp chất này có thể được điều chế bằng các phương pháp clo hóa đã biết từ 2-etyl-4-heptafloisopropylanilin, theo tài liệu (ví dụ US2002/198399).



D-1b

4,9 g (16,9 mmol) 2-etyl-4-heptafloisopropylanilin (được điều chế theo US2002/198399) ban đầu được nạp trong 100 ml cloroform, hỗn hợp này được đun nóng đến 45-50°C, và sau đó 2,18 ml (26,7 mmol) sulphuryl clorua, hòa tan trong 400 ml cloroform, được bổ sung từ từ từng giọt. Hỗn hợp này được khuấy ở 50°C qua đêm, sau đó 0,34 ml (4,2 mmol) sulphuryl clorua hòa tan trong 2 ml cloroform được bổ sung thêm từng giọt và hỗn hợp này được khuấy ở 50°C trong 3 giờ nữa. Sau đó, hỗn hợp này được làm mát và dung môi được rút ra trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Phần còn lại được thu hồi trong diclometan, đầu tiên rửa bằng natri hydrosulphit và sau đó bằng dung dịch natri hydroxit loãng, và làm khô bằng natri sulphat, và dung môi được loại bỏ bằng chứng cất trong thiết bị bay hơi kiểu quay

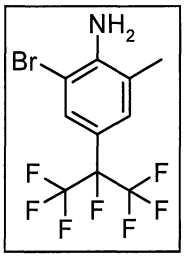
dưới áp suất giảm. Để tinh chế, dùng phương pháp sắc ký bằng cách sử dụng cột chứa 120 g silica gel với gradien từ xyclohexan tinh khiết đến 90:10 xyclohexan/etyl axetat (thể tích/thể tích). Thu được 4,25 g 2-clo-6-etyl-4-heptafloisopropylanilin.

HPLC-MS[a)]: logP = 4,67, khối lượng (m/z) = 324 [M+H]+.

^{1}H NMR (AV400, 400 MHz, d_3-axetonitril): δ (ppm) = 7,84 (s, 1 H), 7,82 (s, 1H), 7,53-7,56 (s, 2H, broad), 2,37 (q, J = 7,6 Hz, 2 H), 1,06 (t, J = 7,6 Hz, 3 H).

Điều chế nguyên liệu ban đầu 2-bromo-6-metyl-4-heptafloisopropylanilin

Nguyên liệu ban đầu 2-bromo-6-metyl-4-heptafloisopropylanilin có công thức cấu trúc (D-1c) chưa được mô tả trong tài liệu. Hợp chất này có thể được điều chế bằng các phương pháp brom hóa đã biết (ví dụ EP2319830, p. 327) từ 2-metyl-4-heptafloisopropylanilin, theo tài liệu (ví dụ US2004/92762).



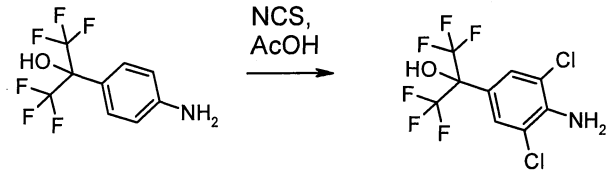
D-1c

3,4 g (12,356 mmol) 2-metyl-4-heptafloisopropylanilin được hòa tan trong 27 ml dimetylformamit, sau đó 2,44 g (13,6 mmol) N-bromosucxinimit được bổ sung vào và hỗn hợp này được khuấy ở 60°C trong 1 giờ. Hỗn hợp này được làm mát, trộn với nước và chiết ba lần bằng 15 ml n-hexan mỗi lần. Các pha hữu cơ hỗn hợp được rửa bằng nước, làm khô bằng natri sulphat và cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Phương pháp sắc ký sử dụng cột 120 g chứa silica gel với gradien bắt đầu bằng xyclohexan tinh khiết đến 90:10 xyclohexan/etyl axetat (thể tích/thể tích) tạo ra 2,44 g 2-bromo-6-etyl-4-heptafloisopropylanilin.

HPLC-MS[a)]: logP = 4,38, khối lượng (m/z) = 354 [M+H]+.

^{1}H NMR (AV400, 400 MHz, d_3-axetonitril): δ (ppm) = 7,51 (s, 1 H), 7,23 (s, 1H), 4,86 (s, 2H, broad), 2,23 (s, 3 H).

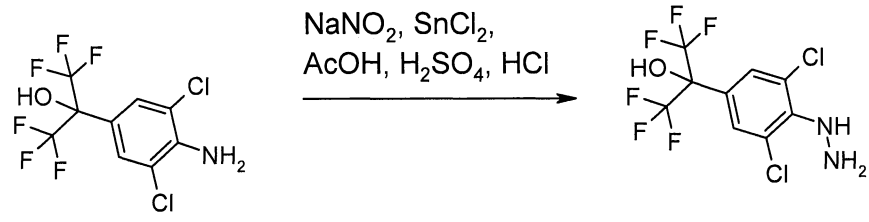
Điều chế hợp chất ban đầu 2-(3,5-diclo-4-hydrazinophenyl)-1.1,1.3.3,3-hexaflopropan-2-ol



Bổ sung *N*-closucxinimit (2,71 g, 20,2 mmol) vào dung dịch chứa 2-(4-aminophenyl)-1,1,1,3,3,3-hexaflopropan-2-ol (2,50 g, 9,64 mmol) (preparation, ví dụ, W. A. Sheppard, *J. Am. Chem. Soc.* 1965, *87*, 2410–2420) trong axit axetic băng (40 ml), ở nhiệt độ trong phòng. Hỗn hợp này được khuấy ở 75°C trong 3 giờ và sau đó ở nhiệt độ trong phòng trong 14 giờ. Tiếp theo, hỗn hợp này được bổ sung vào nước và chiết bằng EtOAc. Pha hữu cơ được rửa bằng nước và dung dịch nước $NaHCO_3$ bão hòa và làm khô qua magie sulphat. Sau khi dung môi đã được loại bỏ, phần còn lại được thu hồi trong MTBE và các chất rắn được lọc ra. Dịch lọc được cô đặc dưới áp suất giảm và sản phẩm thô được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột trên SiO_2 (gradien *n*-hexan/EtOAc). Thu được 2,89 g (91%) 2-(4-amino-3,5-dichlorphenyl)-1,1,1,3,3,3-hexaflopropan-2-ol.

HPLC-MS[a)]: logP = 3,04, khối lượng (m/z) = 328 $[M+H]^+$.

^1H NMR (400 MHz, d_3-axetonitril): δ = 5,13 (br s, 2 H), 6,02 (br s, 1 H), 7,51 (s, 2 H).



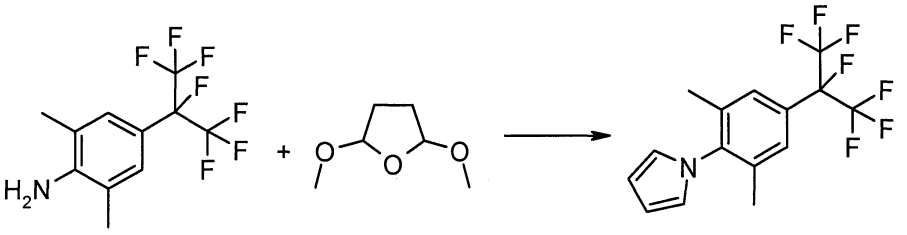
Bổ sung vào dung dịch được đun nóng đến 55°C chứa 2-(4-amino-3,5-dichlorphenyl)-1,1,1,3,3,3-hexaflo-propan-2-ol (1,88 g, 5,73 mmol) trong 5 ml axit axetic từng giọt dung dịch chứa natri nitrit (455 mg, 6,59 mmol) trong 2,5 ml axit sulphuric, và hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ này trong một giờ nữa. Tiếp theo, hỗn hợp này được làm mát đến 0°C và dung dịch chứa thiếc(II) clorua (3,37 g, 17,7 mmol) trong HCl đặc (10 ml) được bổ sung từng giọt. Hỗn hợp này được khuấy ở 0°C trong một giờ nữa, sau đó đặc vào nước đá, kiềm hóa bằng dung dịch natri hydroxit và chiết bằng EtOAc. Pha hữu cơ được rửa bằng dung dịch natri clorua bão hòa và làm

khô qua magie sulphat, và dung môi được loại bỏ dưới áp suất giảm. Thu được 1,41 g (độ tinh khiết 90%, 64% lý thuyết) hợp chất 2-(3,5-diclo-4-hydrazinophenyl)-1,1,1,3,3,3-hexaflopropan-2-ol.

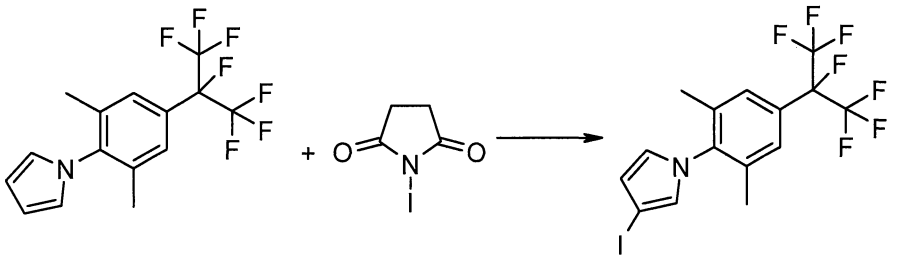
HPLC-MS[a)]: logP = 1,92, khối lượng (m/z) = 343 $[M+H]^+$.

^{1}H NMR (600 MHz, d_3-axetonitril): δ = 4,14 (br s, 2 H), 5,90 (br s, 1 H), 6,50 (br s, 1 H), 7,58 (s, 2 H).

Các ví dụ I-T46-1

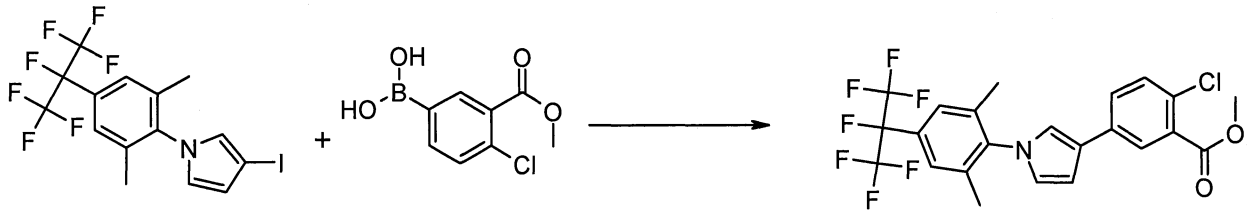


10 g (34,6 mmol) 2,6-Dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]anilin ban đầu được nạp trong 60 ml axit axetic băng, và 5,02 g (38,04 mmol) 2,6-dimetoxy-tetrahydrofuran được bổ sung vào. Dung dịch thu được được đun nóng ở 120°C trong hai giờ. Tiếp theo, dung dịch này được làm mát chút ít và các thành phần dễ bay hơi được làm bay hơi trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Phần còn lại được khuấy với nước và các chất rắn được lọc ra bằng cách lọc hút. Sau đó, bánh lọc được hòa tan trong diclometan, và dung dịch này được làm khô bằng natri sulphat và cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Thu được 10,38 g 1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrol.

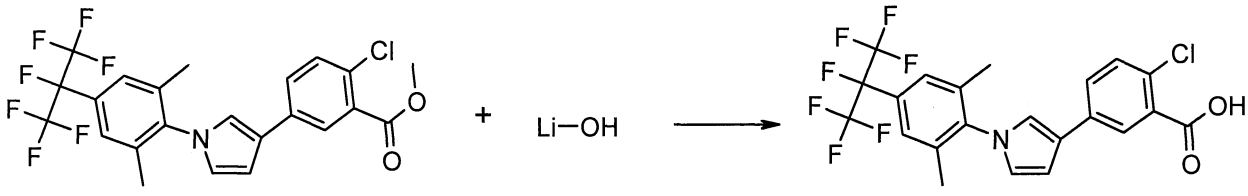


1,5 g (4,293 mmol) 1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl) etyl]phenyl]-pyrol được hòa tan trong 60 ml n-hexan, và 966 mg (4,3 mmol) N-iodosucxinimit được bổ sung vào. Tiếp theo, hỗn hợp này được để cho trở về nhiệt độ trong phòng và khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 6 ngày. Sau đó 242 mg (1,1 mmol) N-iodosucxinimit được bổ sung tiếp vào và hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong

phòng qua đêm. Tiếp theo, dung dịch nước natri hydrosulphit dư và chút ít etyl axetat được bổ sung vào. Pha hữu cơ được lấy ra và đầu tiên được rửa hai lần bằng dung dịch nước natri hydrosulphit, sau đó bằng dung dịch natri clorua bão hòa, làm khô bằng natri sulphat và cô đặc. Để tinh chế, dùng phương pháp sắc ký bằng cách sử dụng cột chứa 120 g silica gel và gradien từ xyclohexan tinh khiết đến 95:5 xyclohexan/etyl axetat (thể tích/thể tích). Thu được 453 mg hỗn hợp chứa 1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]-3-iodopyrol 80% và 1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]-2-iodopyrol 16%.

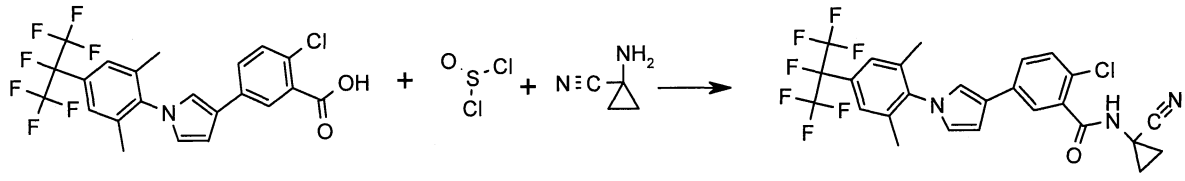


998 mg (1,696 mmol) hỗn hợp chứa 1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]-3-iodopyrol 80% và 1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]-2-iodopyrol 16% và 364 mg axit (1,7 mmol) 4-clo-3-(metoxy-cacbonyl)phenylboronic ban đầu được nạp trong 10 ml 2-propanol. Sau đó, không khí được thay thế bằng argon, và 5,2 ml dung dịch nước natri hydrocacbonat 1M và 98 mg (0,085 mmol) tetrakis(triphenylphosphine)paladi(0) được bổ sung vào trong argon. Tiếp theo, hỗn hợp này được đun nóng đến hồi lưu trong 3 giờ. Để làm sạch, hỗn hợp này được làm mát chút ít, sau đó cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Phần còn lại được phân tách giữa etyl axetat và nước. Pha hữu cơ được lấy ra, rửa bằng dung dịch natri clorua bão hòa và cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Thu được 1,57 g metyl 2-clo-5-[1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrol-3-yl]benzoat thô.



416 mg (0,33 mmol, độ tinh khiết khoảng 40%) metyl 2-clo-5-[1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrol-3-yl]benzoat thô đầu tiên được nạp trong hỗn hợp chứa 18 ml dioxan và 6 ml nước, và 61 mg (1,46 mmol) lithi hydroxit

hydrat được bổ sung vào. Hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng đến khi hòa tan hoàn toàn, sau đó đun nóng trong điều kiện hồi lưu trong 2 giờ. Sau đó hỗn hợp này cô đặc trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm, và phần còn lại được trộn với chút ít nước và điều chỉnh đến độ pH=1 bằng axit clohydric đặc. Sau đó hỗn hợp này chiết hai lần bằng etyl axetat, và các phần chiết hỗn hợp được rửa bằng dung dịch natri clorua bão hòa, làm khô bằng natri sulphat và cô đặc. Còn lại 207 mg axit 2-clo-5-[1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrol-3-yl]-benzoic thô dưới dạng phần còn lại.

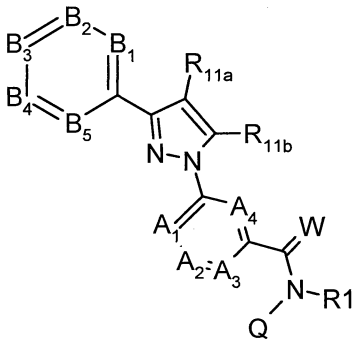


137 mg (0,11 mmol, độ tinh khiết khoảng 38%) axit 2-clo-5-[1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrol-3-yl]benzoic được hòa tan trong 15 ml toluen, và 230 mg (1,93 mmol) thionyl clorua được bổ sung vào. Hỗn hợp này được đun nóng đến hồi lưu trong 3 giờ. Sau đó, tất cả các thành phần dễ bay hơi được rút ra trong thiết bị bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Phần còn lại được thu hồi trong 4 ml diclometan và bổ sung từng giọt vào hỗn hợp chứa 82 mg (0,69 mmol) 1-xyanoxyclopropylamin hydroclorua và 98 mg (0,96 mmol) trietylamin trong 2 ml diclometan ở 0°C. Tiếp theo, hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng qua đêm. Để làm sạch, hỗn hợp này được rửa bằng dung dịch nước natri dihydrophosphat 5%, sau đó bằng dung dịch natri clorua bão hòa, và pha hữu cơ được làm khô bằng natri sulphat và cô đặc. Phần còn lại được sắc ký bằng cách sử dụng cột chứa 15 g silica gel và xyclohexan/etyl axetat 85:15 (thể tích/thể tích). Các phân đoạn chứa sản phẩm được cô đặc và tinh chế bằng phương pháp HPLC điều chế (Zorbax Eclipse Plus C_{18} 1,8 µm, 50x4,6mm trong gradien axetonitril/dung dịch nước H_3PO_4 0,1%. Thu được 13 mg 2-clo-N-xyclopropyl-5-[1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrol-3-yl]benzamit (hợp chất I-T46-1).

HPLC-MS[a)]: logP = 4,90, khối lượng (m/z) = 558 [M+H]+.

^{1}H NMR (400 MHz, d_3-axetonitril): δ = 7,63-7,67 (m, 2 H), 7,56 (s (rộng), 1 H (N-H)), 7,51 (s, 2H), 7,41 (d, J=8,3 Hz, 1 H), 7,16-7,17 (m, 1 H), 6,75-6,77 (m, 1 H), 6,72-6,73 (m, 1 H), 2,14 (s, 6H), 1,55-1,59 (m, 2 H), 1,32-1,39 (m, 2 H).

Bảng I-T2



I-T2

B_2 và B_4 = C-H, W = O

Ví dụ số	B_1	B_3	B_5	R_1	$R^{11}{}_a$	$R^{11}{}_b$	A_1	A_2	A_3	A_4	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] a)1)
I-T2-1	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	xyclopropyl	4,9	534
I-T2-2	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	1-(xyano)xyclopropyl	4,8	559

Ví dụ số	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] a)1)
I-T3-1	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,4	534
I-T3-2	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4,7	577
I-T3-3	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,2	559
I-T3-4	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	thietan-3-yl	4,7	566
I-T3-5	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(triflometyl)xyclopropyl	4,6	602
I-T3-6	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	2-oxo-2-(2,2,2-trifloetylamino)-etyl	4,1	633
I-T3-7	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	xyclopropyl	3,4	501
I-T3-8	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	3,4	526
I-T3-9	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-H	CF	O	H	xyclopropyl	4,3	518
I-T3-10	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-H	CF	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,2	543
I-T3-11	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-Cl	C-H	C-F	C-H	O	H	xyclopropyl	4,9	552
I-T3-12	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-Cl	C-H	C-F	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,7	577
I-T3-13	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	CF	C-H	C-H	C-H	O	H	xyclopropyl	4,5	518

Ví dụ số	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] a)1)
I-T3-14	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	CF	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,5	552
I-T3-15	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-CF_3	C-H	C-H	O	H	xyclopropyl	4,9	568
I-T3-16	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-CH_3	C-H	C-H	C-H	O	H	xyclopropyl	4,4	514
I-T3-17	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	CF	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,4	577
I-T3-18	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-CF_3	C-H	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,7	593
I-T3-19	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	CF	C-H	C-H	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,3	543
I-T3-20	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,8	535
I-T3-21	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	3,7	560
I-T3-22	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-H	C-F	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,1	583
I-T3-23	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,2	599
I-T3-24	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,3	574
I-T3-25	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4,7	616
I-T3-26	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	$CH_2CH_2CF_3$	4,7	630

Ví dụ số	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] a)1)
I-T3-27	C-CH_3	C-CF_3	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	3,4	499
I-T3-28	C-CH_3	C-CF_3	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	H	O	H	xyclopropyl	3,5	474
I-T3-29	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	xyclopropyl	3,3	541
I-T3-30	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	3,2	566
I-T3-31	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,3	540
I-T3-32	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4,7	582
I-T3-33	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	$CH_2CH_2CF_3$	4,7	596
I-T3-34	C-OCF_3	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,6	615
I-T3-35	C-OCF_3	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,7	590
I-T3-36	C-OCF_3	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	5,0	632
I-T3-37	C-OCF_3	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	thietan-3-yl	4,9	622
I-T3-38	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,5	559
I-T3-39	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,6	534
I-T3-40	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4,9	576

Ví dụ số	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] a)1)
I-T3-41	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	thietan-3-yl	4,9	566
I-T3-42	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,8	575
I-T3-43	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	3,8	600
I-T3-44	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,7	548
I-T3-45	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	5,0	590
I-T3-46	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,6	573
I-T3-47	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	thietan-3-yl	5,0	580
I-T3-48	C-F	C-CF_3	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,2	442
I-T3-49	C-F	C-CF_3	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	3,2	467
I-T3-50	C-F	C-CF_3	C-OCH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,1	454
I-T3-51	C-F	C-CF_3	C-OCH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	3,1	479
I-T3-52	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,3	574
I-T3-53	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,3	599
I-T3-54	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,4	588

Ví dụ số	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] a)1)
I-T3-55	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,3	613
I-T3-56	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,4	608
I-T3-57	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,3	633
I-T3-58	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4,7	650
I-T3-59	C-Cl	C-CF_3	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	3,1	466
I-T3-60	C-Cl	C-CF_3	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,2	441
I-T3-61	C-F	C-i-C_3F_7	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,0	542
I-T3-62	C-F	C-i-C_3F_7	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	3,9	567
I-T3-63	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,4	554
I-T3-64	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,2	579
I-T3-65	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-F	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,4	577
I-T3-66	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-F	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,6	591
I-T3-67	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-F	O	H	xyclopropyl	4,4	552
I-T3-68	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-F	O	H	xyclopropyl	4,6	566

Ví dụ số	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] a)1)
I-T3-69	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-H	C-F	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,3	557
I-T3-70	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-H	C-F	O	H	xyclopropyl	4,3	532
I-T3-71	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,5	593
I-T3-72	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,6	568
I-T3-73	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-F	O	H	xyclopropyl	4,5	592
I-T3-74	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-H	C-F	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,1	543
I-T3-75	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-H	C-F	O	H	xyclopropyl	4,2	518
I-T3-76	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	3,4	540
I-T3-77	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	xyclopropyl	3,4	515
I-T3-78	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	3,2	526
I-T3-79	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	xyclopropyl	3,3	501
I-T3-80	C-C_2H_5	C-C_2F_5	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,2	523
I-T3-81	C-C_2H_5	C-C_2F_5	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,3	498
I-T3-82	C-C_2H_5	C-C_2F_5	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4,0	540

Ví dụ số	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] a)1)
I-T3-83	C-C_2H_5	C-C_2F_5	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	thietan-3-yl	4,6	530
I-T3-84	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4,7	630
I-T3-85	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	thietan-3-yl	4,7	620
I-T3-86	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-Br	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,5	598
I-T3-87	C-Cl	C-OCF_3	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	3,6	515
I-T3-88	C-Cl	C-OCF_3	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,6	490
I-T3-89	C-Cl	C-OCF_3	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	3,5	481
I-T3-90	C-Cl	C-OCF_3	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,6	456
I-T3-91	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	xyclopropyl	3,3	555
I-T3-92	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	3,4	580
I-T3-93	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(tert.butyl)xycloprop yl	4,7	588
I-T3-94	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(tert.butyl)xycloprop yl	4,7	602
I-T3-95	C-Cl	C-CF_3	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	3,1	500

Ví dụ số	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] a)1)
I-T3-96	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	xyclopropyl	3,3	515
I-T3-97	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	3,4	540
I-T3-98	C-Cl	C-CF_3	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,1	475
I-T3-99	C-Cl	C-CF_3	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	3,5	489
I-T3-100	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	4,4	589
I-T3-101	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	4,4	549
I-T3-102	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	1-(xyano)xyclopropyl	4,3	614
I-T3-103	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	1-(xyano)xyclopropyl	4,3	574
I-T3-104	C-C_2H_5	C-i-C_3F_8	C-H	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,2	535
I-T3-105	C-C_2H_5	C-i-C_3F_8	C-H	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,1	560
I-T3-106	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,0	589
I-T3-107	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	4,5	603
I-T3-108	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,0	614
I-T3-109	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,2	549
I-T3-110	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-	4,1	574

Ví dụ số	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] a)1)
												(xyano)xyclopropyl		
I-T3-111	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	1-(xyano)xyclopropyl	4,4	628
I-T3-112	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,0	609
I-T3-113	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	4,0	623
I-T3-114	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,0	634
I-T3-115	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	1-(xyano)xyclopropyl	3,8	554
I-T3-116	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	1-(xyano)xyclopropyl	4,3	648
I-T3-117	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	xyclopropyl	3,5	569
I-T3-118	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	3,8	583
I-T3-119	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	3,6	594
I-T3-120	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	3,6	529
I-T3-121	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	N	C-H	C-Cl	N	O	H	xyclopropyl	4,5	536
I-T3-122	C-Cl	C-CF_3	N	H	H	C-H	C-H	C-H	C-H	O	H	xyclopropyl	3,0	407
I-T3-123	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	1-(xyano)xyclopropyl	3,9	608

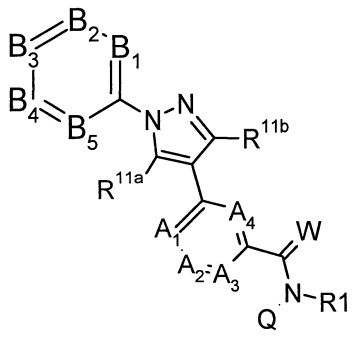
Ví dụ số	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] a)1)
I-T3-124	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	xyclopropyl	3,5	589
I-T3-125	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	3,8	614
I-T3-126	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	CN	NH_2	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,1	639
I-T3-127	C-Cl	C-CF_3	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	xyclopropyl	2,5	455
I-T3-128	C-Cl	C-CF_3	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	2,8	469
I-T3-129	C-Cl	C-CF_3	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	2,6	480
I-T3-130	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	3,8	603
I-T3-131	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	1-(xyano)xyclopropyl	3,9	628
I-T3-132	C-Cl	C-CF_3	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	1-(xyano)xyclopropyl	2,9	494
I-T3-133	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	3,7	569
I-T3-134	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	4,9	588
I-T3-135	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-(1-pyrolidinyl)	C-H	O	H	xyclopropyl	4,3	610
I-T3-136	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-$NHCH_3$	C-H	O	H	xyclopropyl	3,5	570

Ví dụ số	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] a)1)
I-T3-137	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-NH-xyclopropyl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,4	596
I-T3-138	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-NH-$CH_2CH_2OCH_3$	C-H	O	H	xyclopropyl	4,1	614
I-T3-139	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-xyclopropyl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,1	566
I-T3-140	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-xyclopropyl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,2	541
I-T3-141	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-OCH_3	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,4	556
I-T3-142	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-xyclopropyl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	4,6	555
I-T3-143	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-OCH_3	C-H	O	H	xyclopropyl	4,6	531
I-T3-144	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-OCH_3	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	4,4	545
I-T3-145	C-Cl	C-CF_3	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	C_2H_5	xyclopropyl	3,8	503
I-T3-146	C-Cl	C-CF_3	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	N-metyl-pyrazol-3-yl	2,8	515

Ví dụ số	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] a)1)
I-T3-147	C-Cl	C-CF_3	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	C_2H_5	4,0	443
I-T3-148	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Br	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,5	652
I-T3-149	C-CF_3	C-CF_3	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	3,5	500
I-T3-150	C-CF_3	C-CF_3	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,6	475
I-T3-151	C-Cl	C-i-C_3F_7	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,0	566
I-T3-152	C-Cl	C-i-C_3F_7	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,1	541
I-T3-153	C-$S(O)C_2H_5$	C-i-C_3F_7	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	3,7	608
I-T3-154	C-$S(O_2)C_2H_5$	C-i-C_3F_7	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	3,8	624
I-T3-155	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Br	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,4	677
I-T3-156	C-SC_2H_5	C-i-C_3F_7	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,7	567
I-T3-157	C-$S(O)C_2H_5$	C-i-C_3F_7	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,8	583
I-T3-158	C-	C-i-C_3F_7	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,9	599

Ví dụ số	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	$logP^{a)}$	Khối lượng [m/z] a)1)
	$S(O_2)C_2H_5$													
I-T3-159	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(thiocarbamoyl)-xyclopropyl	3,8	668
I-T3-160	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Br	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,0	653
I-T3-161	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	S	H	xyclopropyl	5,0	604
I-T3-162	C-OCF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,6	624
I-T3-163	C-OCF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,5	649

Bảng I-T3



I-T3

B_2 và B_4 = C-H

Ví dụ số	**B_1**	**B_2**	**B_3**	**B_4**	**B_5**	**R^{11a}**	**R^{11b}**	**A_1**	**A_2**	**A_3**	**A_4**	**W**	**R1**	**Q**	**logP[a)]**	**Khối lượng [m/z] [a)1)]**
I-T3-1	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,4	534
I-T3-2	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4,7	577
I-T3-3	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	4,2	559
I-T3-4	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	thietan-3-yl	4,7	566

Ví dụ số	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] [a)1)]
I-T3-5	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(triflometyl)-xyclopropyl	4,6	602
I-T3-6	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	2-oxo-2-(2,2,2-trifloetylamino)-etyl	4,1	633
I-T3-7	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	xyclopropyl	3,4	501
I-T3-8	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	3,4	526
I-T3-9	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-H	C-F	O	H	xyclopropyl	4,3	518
I-T3-10	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-H	C-F	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	4,2	543
I-T3-11	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-Cl	C-H	C-F	C-H	O	H	xyclopropyl	4,9	552
I-T3-12	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-Cl	C-H	C-F	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	4,7	577
I-T3-13	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-F	C-H	C-H	C-H	O	H	xyclopropyl	4,5	518
I-T3-14	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-F	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,5	552
I-T3-15	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-CF3	C-H	C-H	O	H	xyclopropyl	4,9	568

Ví dụ số	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] [a)1)]
I-T3-16	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-CH_3	C-H	C-H	C-H	O	H	xyclopropyl	4,4	514
I-T3-17	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-F	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	4,4	577
I-T3-18	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-CF_3	C-H	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	4,7	593
I-T3-19	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-F	C-H	C-H	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	4,3	543
I-T3-20	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,8	535
I-T3-21	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	3,7	560
I-T3-22	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-H	C-F	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	4,1	583
I-T3-23	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	4,2	599
I-T3-24	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,3	574
I-T3-25	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4,7	616
I-T3-26	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	$CH_2CH_2CF_3$	4,7	630
I-T3-27	C-CH_3	C-H	C-CF_3	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	3,4	499

Ví dụ số	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] [a)1)]
I-T3-28	C-CH_3	C-H	C-CF_3	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,5	474
I-T3-29	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	xyclopropyl	3,3	541
I-T3-30	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	3,2	566
I-T3-31	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,3	540
I-T3-32	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4,7	582
I-T3-33	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	$CH_2CH_2CF_3$	4,7	596
I-T3-34	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	4,6	615
I-T3-35	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,7	590
I-T3-36	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	5,0	632
I-T3-37	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	thietan-3-yl	4,9	622
I-T3-38	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	4,5	559
I-T3-39	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,6	534

Ví dụ số	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] [a)1)]
I-T3-40	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4,9	576
I-T3-41	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	thietan-3-yl	4,9	566
I-T3-42	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,8	575
I-T3-43	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	3,8	600
I-T3-44	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,7	548
I-T3-45	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	5,0	590
I-T3-46	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	4,6	573
I-T3-47	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	thietan-3-yl	5,0	580
I-T3-48	C-F	C-H	C-CF3	C-H	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,2	442
I-T3-49	C-F	C-H	C-CF3	C-H	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	3,2	467
I-T3-50	C-F	C-H	C-CF3	C-H	C-OCH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,1	454
I-T3-51	C-F	C-H	C-CF3	C-H	C-OCH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	3,1	479

Ví dụ số	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] [a)1)]
I-T3-52	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,3	574
I-T3-53	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	4,3	599
I-T3-54	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,4	588
I-T3-55	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	4,3	613
I-T3-56	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,4	608
I-T3-57	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	4,3	633
I-T3-58	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4,7	650
I-T3-59	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	3,1	466
I-T3-60	C-Cl	C-H	C-CF3	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,2	441
I-T3-61	C-F	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,0	542
I-T3-62	C-F	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	3,9	567
I-T3-63	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,4	554

Ví dụ số	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] [a)1)]
I-T3-64	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	4,2	579
I-T3-65	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-F	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	4,3	577
I-T3-66	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-F	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	4,6	591
I-T3-67	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-F	O	H	xyclopropyl	4,4	552
I-T3-68	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-F	O	H	xyclopropyl	4,8	566
I-T3-69	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-H	C-F	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	4,5	557
I-T3-70	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-H	C-F	O	H	xyclopropyl	4,7	532
I-T3-71	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	4,5	593
I-T3-72	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,6	568
I-T3-73	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-F	O	H	xyclopropyl	4,5	592
I-T3-74	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-H	C-F	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	4,5	543
I-T3-75	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-H	C-F	O	H	xyclopropyl	4,7	518

Ví dụ số	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] [a)1)]
I-T3-76	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	3,4	540
I-T3-77	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	xyclopropyl	3,4	515
I-T3-78	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	3,8	526
I-T3-79	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	xyclopropyl	3,3	501
I-T3-80	C-C_2H_5	C-H	C-C_2F_5	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	4,2	523
I-T3-81	C-C_2H_5	C-H	C-C_2F_5	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,3	498
I-T3-82	C-C_2H_5	C-H	C-C_2F_5	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4,0	540
I-T3-83	C-C_2H_5	C-H	C-C_2F_5	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	thietan-3-yl	4,6	530
I-T3-84	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4,7	630
I-T3-85	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	thietan-3-yl	4,7	620
I-T3-86	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Br	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,5	598
I-T3-87	C-Cl	C-H	C-OCF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	3,6	515

Ví dụ số	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] [a)1)]
I-T3-88	C-Cl	C-H	C-OCF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,6	490
I-T3-89	C-Cl	C-H	C-OCF_3	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	3,5	481
I-T3-90	C-Cl	C-H	C-OCF_3	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,6	456
I-T3-91	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	xyclopropyl	3,3	555
I-T3-92	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	3,4	580
I-T3-93	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(tert.butyl)xyclo-propyl	4,7	588
I-T3-94	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(tert.butyl)xyclo-propyl	4,7	602
I-T3-95	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	3,1	500
I-T3-96	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	xyclopropyl	3,3	515
I-T3-97	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	3,4	540
I-T3-98	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,1	475
I-T3-99	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	3,5	489

Ví dụ số	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] [a)1)]
I-T3-100	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	4,4	589
I-T3-101	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	4,4	549
I-T3-102	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	1-(xyano)xyclo-propyl	4,3	614
I-T3-103	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	1-(xyano)xyclo-propyl	4,3	574
I-T3-104	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_8	C-H	C-H	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,2	535
I-T3-105	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_8	C-H	C-H	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	4,1	560
I-T3-106	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,0	589
I-T3-107	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	4,5	603
I-T3-108	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	4,0	614
I-T3-109	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,2	549
I-T3-110	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	4,1	574
I-T3-111	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	1-(xyano)xyclo-propyl	4,4	628

Ví dụ số	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] [a)1)]
I-T3-112	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,0	609
I-T3-113	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	4,0	623
I-T3-114	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	4,0	634
I-T3-115	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	1-(xyano)xyclo-propyl	3,8	554
I-T3-116	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	1-(xyano)xyclo-propyl	4,3	648
I-T3-117	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	xyclopropyl	3,5	569
I-T3-118	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	3,8	583
I-T3-119	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	3,6	594
I-T3-120	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	3,6	529
I-T3-121	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	N	C-H	C-Cl	N	O	H	xyclopropyl	4,5	536
I-T3-122	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-H	C-H	O	H	xyclopropyl	3,0	407
I-T3-123	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	1-(xyano)xyclo-propyl	3,9	608

Ví dụ số	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] [a)1)]
I-T3-124	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	xyclopropyl	3,5	589
I-T3-125	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	3,8	614
I-T3-126	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	CN	NH_2	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	4,1	639
I-T3-127	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	xyclopropyl	2,5	455
I-T3-128	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	2,8	469
I-T3-129	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	2,6	480
I-T3-130	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	3,8	603
I-T3-131	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	1-(xyano)xyclo-propyl	3,9	628
I-T3-132	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	1-(xyano)xyclo-propyl	2,9	494
I-T3-133	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	3,7	569
I-T3-134	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	4,9	588

Ví dụ số	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] [a)1)]
I-T3-135	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-(1-pyrolidinyl)	C-H	O	H	xyclopropyl	4,3	610
I-T3-136	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-$NHCH_3$	C-H	O	H	xyclopropyl	3,5	570
I-T3-137	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-NH-xyclopropyl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,4	596
I-T3-138	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-NH-$CH_2CH_2OCH_3$	C-H	O	H	xyclopropyl	4,1	614
I-T3-139	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-xyclopropyl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,1	566
I-T3-140	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-xyclopropyl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,2	541
I-T3-141	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-OCH_3	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,4	556
I-T3-142	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-xyclopropyl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	4,6	555
I-T3-143	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-OCH_3	C-H	O	H	xyclopropyl	4,6	531

Ví dụ số	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] [a)1)]
I-T3-144	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-OCH_3	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	4,4	545
I-T3-145	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	C_2H_5	xyclopropyl	3,8	503
I-T3-146	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	N-metyl-pyrazol-3-yl	2,8	515
I-T3-147	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	C_2H_5	4,0	443
I-T3-148	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Br	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,5	652
I-T3-149	C-CF_3	C-H	C-CF_3	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	3,5	500
I-T3-150	C-CF_3	C-H	C-CF_3	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,6	475
I-T3-151	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	4,0	566
I-T3-152	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,1	541
I-T3-153	C-$S(O)C_2H_5$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	3,7	608
I-T3-154	C-$S(O_2)C_2H_5$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	3,8	624
I-T3-155	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Br	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	4,4	677

Ví dụ số	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] [a)1)]
I-T3-156	C-SC_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,7	567
I-T3-157	C-$S(O)C_2H_5$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,8	583
I-T3-158	C-$S(O_2)C_2H_5$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,9	599
I-T3-159	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(thiocarbamoyl)-xyclopropyl	3,8	668
I-T3-160	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Br	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,0	653
I-T3-161	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	S	H	xyclopropyl	5,0	604
I-T3-162	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,6	624
I-T3-163	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	4,5	649
I-T3-164	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-CN	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	3,1	490
I-T3-165	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Br	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	3,9	678
I-T3-166	C-SCH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	4,3	578

Ví dụ số	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] [a)1)]
I-T3-167	C-SC_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	4,6	592
I-T3-168	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-NO_2	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,3	485
I-T3-169	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-NO_2	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	3,2	510
I-T3-170	C-SC_2H_5	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	3,7	525
I-T3-171	C-SCH_2CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	4,5	646
I-T3-172	C-SC_2H_5	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,9	500
I-T3-173	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-OCH_3	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	4,4	585
I-T3-174	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-CN	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,1	465
I-T3-175	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-I	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,5	646
I-T3-176	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-I	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	4,4	671
I-T3-177	C-SC_2H_5	C-H	C-CF_3	C-H	C-CN	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	3,4	516
I-T3-178	C-$S(O_2)C_2H_5$	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,2	532

Ví dụ số	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] [a)1)]
I-T3-179	C-$S(O)C_2H_5$	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,0	516
I-T3-180	C-$S(O_2)C_2H_5$	C-H	C-CF_3	C-H	C-CN	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	2,8	523
I-T3-181	C-$S(O)C_2H_5$	C-H	C-CF_3	C-H	C-CN	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	2,7	507
I-T3-182	C-$S(O)C_2H_5$	C-H	C-CF_3	C-H	C-CN	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	3,0	541
I-T3-183	C-$S(O_2)C_2H_5$	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	3,1	557
I-T3-184	C-Cl	C-F	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,6	492
I-T3-185	C-Cl	C-F	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	3,6	517
I-T3-186	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,6	458
I-T3-187	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	3,3	483
I-T3-188	C-F	C-F	C-CF_3	C-F	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	3,4	503
I-T3-189	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,3	625
I-T3-190	C-$S(O_2)C_2H_5$	C-H	C-CF_3	C-H	C-CN	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	2,9	548

Ví dụ số	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] [a)1)]
I-T3-191	C-SC_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-SC_2H_5	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	4,7	651
I-T3-192	C-SC_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	4,5	625
I-T3-193	C-CHF_2	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,4	590
I-T3-194	C-F	C-F	C-CF_3	C-F	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(carbamoyl)-xyclopropyl	2,8	521
I-T3-195	C-$S(O)C_2H_5$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	3,8	641
I-T3-196	C-$OCHF_2$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,9	607
I-T3-197	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	(1-xyano-xyclo-propyl)metyl	4,0	628
I-T3-198	C-$S(O_2)C_2H_5$	C-H	C-i-C_3F_8	C-H	C-$S(O_2)C_2H_5$	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	3,7	715
I-T3-199	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	(1-xyano-xyclo-propyl)metyl	1,17 min[b)]	648
I-T3-200	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	4,1	650
I-T3-201	C-$S(O_2)C_2H_5$	C-H	C-i-C_3F_8	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	4,0	657

Ví dụ số	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] [a)1)]
I-T3-202	C-SC_2H_5	C-H	C-i-C_3F_8	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	4,5	605
I-T3-203	C-SC_2H_5	C-H	C-i-C_3F_8	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,6	580
I-T3-204	C-CN	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	3,9	580
I-T3-205	C-CN	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,5	566
I-T3-206	C-$S(O)C_2H_5$	C-H	C-i-C_3F_8	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	3,6	621
I-T3-207	C-CN	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	3,5	591
I-T3-208	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	4,6	639
I-T3-209	C-$S(O_2)C_2H_5$	C-H	C-i-C_3F_8	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	3,8	637
I-T3-210	C-$S(O_2)C_2H_5$	C-H	C-i-C_3F_8	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,9	612
I-T3-211	C-OC_2H_5	C-H	C-i-C_3F_9	C-H	C-OC_2H_5	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	4,7	609
I-T3-212	C-I	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	4,3	691

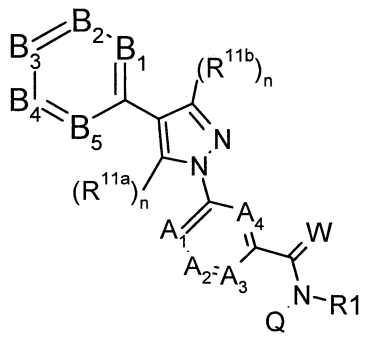
Ví dụ số	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] [a)1)]
I-T3-213	C-I	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,4	666
I-T3-214	C-$OCHF_2$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,3	606
I-T3-215	C-$OCHF_2$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	4,1	631
I-T3-216	C-$OCHF_2$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	4,7	620
I-T3-217	C-$OCHF_2$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	4,2	621
I-T3-218	C-$OCHF_2$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	3,7	632
I-T3-219	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	5,1	638
I-T3-220	C-Cl	C-H	C-$C(CF_3)_2$OH	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	3,4	587
I-T3-221	C-Cl	C-H	C-$C(CF_3)_2$OH	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,0	573
I-T3-222	C-Cl	C-H	C-$C(CF_3)_2$OH	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	3,0	598

Ví dụ số	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] [a)1)]
I-T3-223	C-Cl	C-H	C-$C(CF_3)_2$OH	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	1-(xyano)xyclo-propyl	3,3	612
I-T3-224	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-I	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,7	716
I-T3-225	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-I	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	5,2	729
I-T3-226	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-I	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	4,6	740
I-T3-227	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-I	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,5	700
I-T3-228	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-I	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclo-propyl	4,4	725
I-T3-229	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-I	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	5,1	714

* b) Thời gian lưu được đo bằng:

Thiết bị: hệ thống Waters ACQUITY SQD UPLC; Cột: Waters Acquity UPLC HSS T3 1,8 µ 50 x 1 mm; Chất giải hấp A: 1 l nước + 0,25 ml axit formic nồng độ 99%; Chất giải hấp B: 1 l axetonitril + 0,25 ml axit formic nồng độ 99%; Gradien: 0,0 phút 90% A → 1,2 phút 5% A → 2,0 phút 5% A; Lò: 50°C; tốc độ dòng: 0,40 ml/phút; phát hiện bằng UV: 208-400 nm.

Bảng I-T4

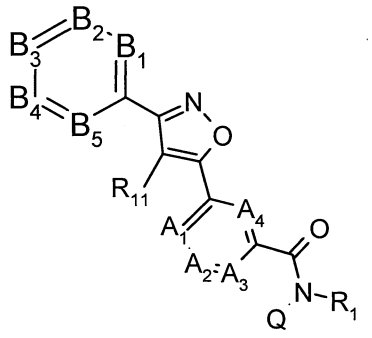


I-T4

B_2 và B_4 = C-H

Ví dụ số	B_1	B_3	B_5	R_1	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R_1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] [a)1)]
I-T4-1	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,7	534
I-T4-2	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,6	559
I-T4-3	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,4	535
I-T4-4	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,3	560

Bảng I-T22

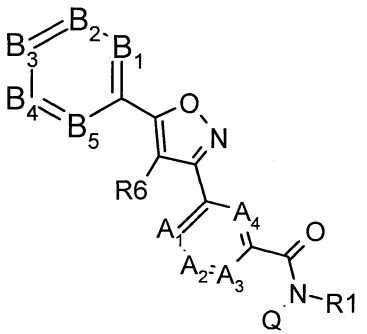


I-T22

B_2 và B_4 = C-H, W = O

Ví dụ số	B_1	B_3	B_5	R_1	R^{11}	A_1	A_2	A_3	A_4	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] a)1)
I-T22-1	C-CH3	C-i-C_3F_7	C-CH3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	xyclopropyl	4,8	535
I-T22-2	C-CH3	C-i-C_3F_7	C-CH3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	1-(xyano)xyclopropyl	4,6	560
I-T22-3	C-CH3	C-i-C_3F_7	C-CH3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	CH2CF3	5	577
I-T22-4	C-CF3	C-i-C_3F_7	C-CH3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	1-(xyano)xyclopropyl	4,4	615
I-T22-5	C-CF3	C-i-C_3F_7	C-CH3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	xyclopropyl	4,9	589
I-T22-6	C-CF3	C-i-C_3F_7	C-CH3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	xyclopropyl	4,5	590
I-T22-7	C-CF3	C-i-C_3F_7	C-CH3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	1-(xyano)xyclopropyl	4,7	614

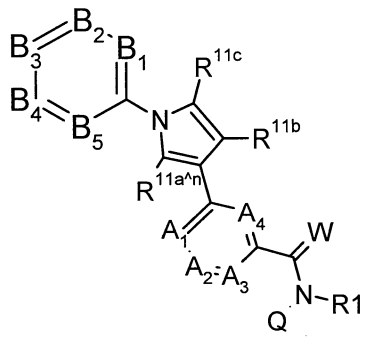
Bảng I-T23



B_2 và B_4 = C-H

Ví dụ số	**B_1**	**B_3**	**B_5**	**R^1**	**R^{11}**	**A_1**	**A_2**	**A_3**	**A_4**	**W**	**Q**	**log$P^{a)}$**	**Khối lượng [m/z] a)1)**
I-T23-1	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	xyclopropyl	5,0	575
I-T23-2	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	1-(xyano)xyclopropyl	4,8	600

Bảng I-T46



I-T46

B_2 và B_4 = C-H

Ví dụ số	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	R^{11c}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R_1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] [a)1)]
I-T46-1	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano) xyclopropyl	4,9	558
I-T46-2	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	5,0	533
I-T46-3	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	5,0	588
I-T46-4	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,5	574
I-T46-5	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano) xyclopropyl	4,4	599
I-T46-6	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	1-(xyano) xyclopropyl	4,8	613

Dữ liệu NMR của các ví dụ chọn lọc

Dữ liệu ^{1}H NMR của các ví dụ chọn lọc được báo cáo ở dạng danh sách đỉnh ^{1}H NMR. Đối với mỗi đỉnh tín hiệu, đầu tiên giá trị δ tính theo ppm và sau đó cương đọ tín hiệu trong ngoặc tròn được liệt kê. Các cặp số giá trị δ– cương độ tín hiệu đối với các đỉnh tín hiệu khác nhau được liệt kê cách nhau bằng dấu phẩy.

Do đó, danh sách đỉnh cho một ví dụ có dạng:

δ_1 (cường độ$_1$); δ_2 (cường độ $_2$);……..; δ_i (cường độ $_i$);……; δ_n (cường độ $_n$)

Cường độ của các tín hiệu nhọn tương ứng với độ cao của tín hiệu trong ví dụ được in ra của phổ NMR tính theo cm và thể hiện tỷ lệ thực tế giữa các cường độ tín hiệu. Trong trường hợp các tín hiệu rộng, một số đỉnh hoặc phần giữa của tín hiệu và cương độ tương ứng của nó có thể được thể hiện có so sánh với tín hiệu có cường độ mạnh nhất trong phổ.

Để hiệu chỉnh độ dịch chuyển hóa học của phổ ^{1}H NMR, các tác giả sáng chế sử dụng tetrametylsilan và/hoặc độ dịch chuyển hóa học của dung môi, cụ thể trong trường hợp các phổ được đo trong DMSO. Do đó, đỉnh tetrametylsilan có thể nhưng không cần thiết phải có mặt trong danh sách đỉnh NMR.

Danh sách các đỉnh ^{1}H NMR tương tự với các bản in ^{1}H NMR truyền thống và do đó thường chứa tất cả các đỉnh được liệt kê theo cách thể hiện NMR truyền thống.

Ngoài ra, giống như các bản in ^{1}H NMR truyền thống, chúng có thể thể hiện các tín hiệu của dung môi, các tín hiệu của các chất đồng phân lập thể của các hợp chất đích, mà cũng tạo thành một phần của đối tượng theo sáng chế, và/hoặc các đỉnh của tạp chất.

trong việc báo cáo các tín hiệu của hợp chất trong khoảng delta của các dung môi và/hoặc nước, danh sách các đỉnh 1H NMR của các tác giả sáng chế thể hiện các đỉnh dung môi thường gặp, ví dụ các đỉnh của DMSO trong DMSO-D6 và đỉnh của nước, mà thường có cường độ trung bình cao.

Các đỉnh của các chất đồng phân lập thể của hợp chất đích và/hoặc các đỉnh của tạp chất thường có cường độ trung bình thấp so với các đỉnh của các hợp chất đích (ví dụ với độ tinh khiết > 90%).

Các chất đồng phân lập thể và/hoặc tạp chất như vật có thể đặc trưng cho quy trình điều chế cụ thể. Do đó, đỉnh của chúng có thể giúp, trong trường hợp này, nhận

dạng sự lặp lại của quy trình điều chế của các tác giả sáng chế có liên quan đến "dấu vân tay của sản phẩm phụ".

Việc tính toàn chuyên môn các đỉnh của các hợp chất đích bằng các phương pháp đã biết (MestreC, mô phỏng ACD, cả bằng các giá trị được dự đoán được đánh giá bằng thực nghiệm) có thể, nếu cần, tách các đỉnh của các hợp chất đích, tùy ý sử dụng các bộ lọc cường độ. Việc tách này có thể tương tự với việc chọn đỉnh tương ứng trong cách thể hiện 1H NMR truyền thống.

Chi tiết hơn về danh sách các đỉnh 1H NMR có thể xem trong tài liệu Research Disclosure Database Number 564025.

Ví dụ I-T2-1: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,297 (5,2); 8,291 (5,1); 7,846 (9,6); 7,825 (3,3); 7,818 (2,0); 7,545 (3,5); 7,525 (2,9); 7,523 (2,8); 7,443 (9,1); 6,977 (1,2); 6,544 (5,1); 6,538 (4,9); 4,085 (0,4); 4,068 (1,3); 4,050 (1,4); 4,032 (0,5); 3,440 (0,4); 3,374 (0,4); 2,862 (0,8); 2,853 (1,2); 2,844 (1,9); 2,834 (1,8); 2,826 (1,3); 2,816 (0,9); 2,240 (41,5); 2,150 (23,6); 2,086 (3,2); 1,972 (6,1); 1,965 (1,2); 1,958 (2,9); 1,953 (13,9); 1,947 (24,8); 1,941 (32,9); 1,934 (22,7); 1,928 (11,7); 1,436 (16,0); 1,269 (0,5); 1,221 (1,6); 1,204 (3,1); 1,186 (1,5); 0,790 (1,0); 0,778 (3,2); 0,773 (4,1); 0,760 (4,2); 0,755 (3,2); 0,743 (1,4); 0,614 (1,3); 0,604 (3,7); 0,597 (3,9); 0,593 (3,4); 0,588 (3,3); 0,575 (1,0); 0,000 (3,0)
Ví dụ I-T2-2: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ = 8,311 (4,9); 8,304 (5,0); 7,898 (10,0); 7,878 (3,3); 7,872 (2,0); 7,624 (2,0); 7,583 (3,2); 7,561 (2,8); 7,444 (9,7); 6,555 (4,9); 6,549 (4,9); 5,447 (0,7); 4,086 (0,5); 4,068 (1,6); 4,050 (1,6); 4,032 (0,6); 2,240 (45,7); 2,146 (80,1); 2,114 (0,7); 2,108 (0,7); 2,102 (0,5); 1,972 (7,1); 1,964 (3,1); 1,958 (8,0); 1,953 (36,5); 1,946 (65,9); 1,940 (87,5); 1,934 (62,1); 1,928 (33,1); 1,775 (0,4); 1,769 (0,6); 1,763 (0,4); 1,591 (2,0); 1,576 (5,7); 1,569 (5,7); 1,556 (2,8); 1,516 (0,4); 1,437 (16,0); 1,410 (0,4); 1,369 (2,8); 1,356 (5,7); 1,349 (6,0); 1,334 (2,1); 1,296 (0,3); 1,269 (1,9); 1,222 (1,9); 1,204 (3,6); 1,186 (1,8); 0,000 (4,5)
Ví dụ I-T3-1: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,118 (11,7); 8,061 (12,6); 7,689 (7,9); 7,683 (8,6); 7,667 (0,7); 7,652 (4,9); 7,646 (3,5); 7,631 (5,5); 7,625 (4,3); 7,535 (16,0); 7,463 (7,8); 7,442 (6,2); 6,895 (2,5); 4,068 (0,8); 4,050 (0,8); 3,912 (0,7); 2,881 (0,5); 2,871 (1,5); 2,862 (2,1); 2,853 (3,2); 2,844 (3,2); 2,835 (2,2); 2,826 (1,5); 2,816 (0,5); 2,270 (0,5); 2,261 (0,3); 2,143 (107,9); 2,138 (145,5); 2,111 (71,2); 1,972 (5,1); 1,964 (10,3); 1,958 (27,0); 1,952 (94,0); 1,946 (160,4); 1,940 (199,1); 1,934 (136,5); 1,928 (68,3); 1,780 (0,5); 1,774 (0,9); 1,768 (1,1); 1,762 (0,8); 1,756 (0,4); 1,437

(13,0); 1,271 (1,0); 1,222 (1,0); 1,204 (1,9); 1,186 (0,9); 0,794 (1,7); 0,782 (6,4); 0,777 (7,2); 0,764 (7,9); 0,759 (5,7); 0,747 (2,4); 0,725 (0,3); 0,610 (2,4); 0,600 (7,1); 0,592 (7,5); 0,588 (6,7); 0,584 (5,9); 0,571 (1,7); 0,146 (0,4); 0,000 (86,0); -0,008 (5,2); -0,150 (0,4)
Ví dụ I-T3-2: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,131 (12,6); 8,084 (13,3); 7,735 (7,6); 7,729 (9,9); 7,710 (5,2); 7,704 (3,5); 7,689 (5,8); 7,683 (4,6); 7,537 (16,0); 7,514 (8,9); 7,493 (7,4); 7,458 (1,9); 4,140 (1,8); 4,124 (2,1); 4,117 (5,8); 4,100 (5,9); 4,093 (6,2); 4,077 (5,9); 4,069 (2,6); 4,053 (2,1); 3,914 (0,6); 2,891 (0,7); 2,773 (0,6); 2,480 (0,7); 2,475 (1,3); 2,470 (1,8); 2,466 (1,3); 2,461 (0,7); 2,325 (0,4); 2,273 (1,9); 2,221 (979,0); 2,115 (79,7); 2,097 (1,4); 1,973 (3,4); 1,966 (10,4); 1,960 (22,6); 1,954 (102,7); 1,948 (182,7); 1,942 (241,3); 1,936 (167,3); 1,930 (87,0); 1,783 (0,7); 1,777 (1,1); 1,770 (1,5); 1,764 (1,1); 1,758 (0,6); 1,437 (15,2); 1,296 (0,5); 1,270 (1,7); 1,222 (0,7); 1,204 (1,3); 1,186 (0,6); 0,146 (0,3); 0,008 (2,7); 0,000 (69,9); -0,008 (3,3)
Ví dụ I-T3-3: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,129 (2,6); 8,075 (2,6); 7,738 (1,6); 7,732 (2,0); 7,701 (1,1); 7,696 (0,8); 7,681 (1,2); 7,675 (1,1); 7,572 (0,5); 7,536 (3,2); 7,496 (1,8); 7,475 (1,5); 2,146 (33,6); 2,113 (16,5); 1,972 (0,4); 1,964 (2,4); 1,958 (5,6); 1,953 (29,5); 1,946 (53,8); 1,940 (72,5); 1,934 (50,1); 1,928 (25,8); 1,769 (0,4); 1,599 (0,8); 1,585 (1,9); 1,578 (2,0); 1,564 (1,1); 1,437 (16,0); 1,359 (1,1); 1,345 (2,0); 1,338 (2,0); 1,324 (0,8); 1,269 (0,6); 0,008 (1,9); 0,000 (51,3); -0,009 (2,0)
Ví dụ I-T3-4: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,132 (5,7); 8,077 (6,1); 7,719 (3,4); 7,714 (4,3); 7,678 (2,2); 7,673 (1,8); 7,657 (2,6); 7,652 (2,3); 7,537 (7,8); 7,515 (1,0); 7,495 (1,0); 7,486 (4,3); 7,465 (3,3); 5,338 (0,9); 5,316 (1,8); 5,296 (1,8); 5,274 (1,0); 3,544 (2,3); 3,521 (4,7); 3,499 (3,1); 3,370 (3,0); 3,349 (4,6); 3,346 (4,3); 3,325 (2,4); 2,469 (0,4); 2,274 (0,4); 2,206 (300,4); 2,154 (0,5); 2,115 (36,2); 1,973 (1,3); 1,966 (3,0); 1,960 (6,3); 1,954 (30,3); 1,948 (55,1); 1,942 (73,7); 1,935 (52,5); 1,929 (28,5); 1,776 (0,4); 1,770 (0,5); 1,764 (0,4); 1,437 (16,0); 1,269 (1,6); 1,222 (0,3); 1,204 (0,6); 0,008 (0,7); 0,000 (20,8)
Ví dụ I-T3-5: ^{1}H-NMR (601,6 MHz, CD3CN): δ= 8,125 (8,3); 8,124 (8,5); 8,072 (9,3); 8,071 (9,2); 7,680 (16,0); 7,677 (5,7); 7,668 (5,3); 7,664 (3,0); 7,537 (9,4); 7,485 (4,7); 7,482 (2,1); 7,473 (1,9); 7,470 (4,3); 7,461 (2,3); 2,146 (139,0); 2,113 (53,4); 2,060 (0,5); 2,056 (0,9); 2,052 (1,3); 2,048 (0,9); 2,044 (0,4); 1,966 (5,4); 1,958 (14,4); 1,953 (16,2); 1,950 (93,5); 1,945 (166,6); 1,941 (244,5); 1,937 (162,8); 1,933 (81,9); 1,924 (1,3); 1,835 (0,5); 1,831 (0,9); 1,827 (1,4); 1,822 (0,9); 1,818 (0,5); 1,393 (2,4); 1,383 (5,5); 1,380 (5,9); 1,370 (3,2); 1,343 (0,4); 1,269 (0,6); 1,251 (1,3); 1,248 (1,4); 1,238 (4,5); 1,228 (1,0); 1,225 (1,0); 0,096 (0,4); 0,005 (3,0); 0,000 (105,8); -0,006 (3,3); -

0,100 (0,4)
Ví dụ I-T3-6: ^{1}H-NMR (601,6 MHz, CD3CN): δ= 8,130 (11,9); 8,129 (12,8); 8,082 (13,1); 8,081 (13,4); 7,809 (8,6); 7,805 (9,0); 7,697 (5,1); 7,693 (4,8); 7,683 (5,9); 7,679 (5,7); 7,538 (13,6); 7,508 (9,3); 7,494 (8,0); 7,304 (1,1); 7,295 (1,9); 7,286 (1,1); 7,069 (1,2); 4,045 (16,0); 4,036 (15,9); 3,973 (1,6); 3,962 (1,8); 3,957 (5,2); 3,946 (5,2); 3,941 (5,5); 3,930 (5,3); 3,926 (2,0); 3,915 (1,8); 2,220 (0,4); 2,153 (19,3); 2,115 (73,8); 2,104 (1,0); 2,052 (0,4); 2,006 (0,4); 1,966 (1,4); 1,958 (3,8); 1,953 (4,5); 1,950 (25,7); 1,945 (45,5); 1,941 (67,9); 1,937 (46,1); 1,933 (22,7); 1,827 (0,4); 1,268 (1,1); 0,005 (0,8); 0,000 (28,7); -0,006 (0,9)
Ví dụ I-T3-7: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,043 (1,2); 9,038 (1,2); 8,803 (1,3); 8,798 (1,3); 8,672 (3,2); 8,648 (0,9); 8,638 (0,9); 8,405 (3,2); 8,390 (1,1); 8,384 (1,9); 8,379 (1,0); 8,316 (0,3); 7,602 (3,5); 3,902 (9,7); 3,330 (83,7); 3,243 (0,6); 3,169 (0,4); 2,903 (0,3); 2,893 (0,5); 2,885 (0,7); 2,875 (0,7); 2,867 (0,4); 2,857 (0,3); 2,676 (0,4); 2,672 (0,5); 2,667 (0,4); 2,525 (1,4); 2,512 (30,7); 2,507 (61,4); 2,503 (80,2); 2,498 (57,8); 2,494 (27,6); 2,334 (0,3); 2,329 (0,5); 2,325 (0,3); 2,131 (16,0); 1,909 (0,3); 0,763 (0,4); 0,750 (1,1); 0,745 (1,6); 0,733 (1,5); 0,727 (1,3); 0,716 (0,6); 0,619 (0,6); 0,608 (1,7); 0,602 (1,4); 0,598 (1,4); 0,593 (1,2); 0,580 (0,4); 0,000 (9,2)
Ví dụ I-T3-8: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,538 (2,0); 9,102 (1,4); 9,097 (1,4); 8,827 (1,4); 8,823 (1,5); 8,695 (3,2); 8,444 (1,1); 8,439 (1,9); 8,434 (1,2); 8,424 (3,3); 7,605 (3,8); 3,902 (6,0); 3,374 (0,4); 3,330 (90,4); 3,243 (0,4); 3,169 (2,1); 2,676 (0,4); 2,672 (0,6); 2,667 (0,5); 2,542 (0,5); 2,507 (75,8); 2,503 (97,5); 2,498 (74,7); 2,334 (0,4); 2,329 (0,6); 2,325 (0,5); 2,132 (16,0); 1,628 (0,7); 1,614 (2,0); 1,607 (2,1); 1,594 (0,9); 1,347 (0,9); 1,334 (2,1); 1,327 (2,1); 1,313 (0,7); 0,000 (8,2)
Ví dụ I-T3-9: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,508 (2,0); 8,506 (2,0); 8,473 (1,0); 8,463 (1,0); 8,276 (2,2); 7,895 (0,5); 7,876 (1,0); 7,861 (0,5); 7,592 (4,1); 7,399 (0,5); 7,383 (1,0); 7,368 (0,7); 7,305 (1,1); 7,286 (1,7); 7,266 (0,7); 3,902 (5,7); 3,330 (72,5); 3,243 (0,4); 3,175 (0,4); 3,162 (0,3); 2,875 (0,4); 2,865 (0,5); 2,857 (0,7); 2,847 (0,7); 2,838 (0,5); 2,828 (0,3); 2,672 (0,5); 2,507 (63,9); 2,503 (80,2); 2,329 (0,5); 2,114 (16,0); 0,725 (0,4); 0,707 (1,8); 0,695 (1,7); 0,689 (1,5); 0,678 (0,6); 0,556 (0,6); 0,545 (1,8); 0,539 (1,8); 0,530 (1,6); 0,518 (0,5); 0,000 (6,1)
Ví dụ I-T3-10: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,369 (2,0); 8,535 (1,8); 8,532 (1,9); 8,290 (2,0); 7,968 (0,4); 7,965 (0,5); 7,949 (0,9); 7,946 (0,9); 7,931 (0,5); 7,927 (0,5); 7,595 (3,9); 7,479 (0,4); 7,475 (0,4); 7,459 (0,9); 7,443 (0,6); 7,440 (0,5); 7,352 (1,0); 7,333 (1,7); 7,314 (0,8); 3,903 (8,2); 3,372 (0,4); 3,329 (104,6); 3,243 (0,6); 3,175 (0,3); 2,675 (0,4); 2,671 (0,5); 2,667 (0,4); 2,541 (0,5); 2,507

(70,8); 2,502 (89,6); 2,498 (66,7); 2,333 (0,4); 2,329 (0,5); 2,324 (0,4); 2,115 (16,0); 1,598 (0,8); 1,584 (2,0); 1,577 (2,1); 1,564 (0,9); 1,292 (0,9); 1,278 (2,1); 1,272 (2,2); 1,257 (0,8); 1,169 (0,3); 1,068 (0,4); 0,007 (0,4); 0,000 (7,5); -0,008 (0,4)
Ví dụ I-T3-11: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,522 (0,9); 8,512 (0,9); 8,500 (3,3); 8,211 (3,2); 7,818 (1,8); 7,799 (1,8); 7,646 (1,8); 7,621 (1,8); 7,590 (3,5); 3,902 (3,1); 3,330 (117,7); 3,304 (0,3); 2,861 (0,3); 2,851 (0,4); 2,842 (0,7); 2,832 (0,7); 2,824 (0,4); 2,676 (0,4); 2,671 (0,5); 2,667 (0,3); 2,525 (1,5); 2,511 (29,4); 2,507 (58,1); 2,502 (75,7); 2,498 (54,9); 2,493 (26,6); 2,334 (0,3); 2,329 (0,5); 2,324 (0,3); 2,127 (16,0); 0,733 (0,4); 0,720 (1,2); 0,715 (1,7); 0,703 (1,6); 0,697 (1,3); 0,685 (0,6); 0,575 (0,6); 0,564 (1,7); 0,558 (1,5); 0,554 (1,4); 0,548 (1,3); 0,536 (0,4); 0,000 (7,9)
Ví dụ I-T3-12: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,396 (1,8); 8,522 (3,2); 8,223 (3,2); 7,906 (1,6); 7,887 (1,6); 7,712 (1,6); 7,687 (1,6); 7,593 (3,7); 3,903 (2,7); 3,332 (98,2); 2,672 (0,5); 2,542 (0,4); 2,507 (67,0); 2,503 (83,7); 2,498 (62,0); 2,334 (0,4); 2,329 (0,5); 2,325 (0,4); 2,129 (16,0); 1,604 (0,8); 1,590 (2,0); 1,583 (2,1); 1,570 (0,9); 1,312 (0,9); 1,299 (2,0); 1,292 (2,0); 1,278 (0,8); 0,000 (7,1)
Ví dụ I-T3-13: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,514 (1,8); 8,510 (1,9); 8,480 (0,9); 8,470 (0,9); 8,285 (2,1); 8,226 (0,8); 8,220 (0,8); 8,207 (0,8); 8,202 (0,8); 7,767 (0,4); 7,762 (0,5); 7,755 (0,5); 7,749 (0,6); 7,746 (0,6); 7,740 (0,5); 7,734 (0,5); 7,728 (0,4); 7,595 (3,7); 7,402 (0,9); 7,380 (0,9); 7,375 (1,0); 7,354 (0,8); 3,902 (1,5); 3,444 (0,4); 3,425 (0,6); 3,405 (1,1); 3,353 (438,8); 3,292 (0,5); 3,273 (0,3); 2,864 (0,5); 2,855 (0,7); 2,846 (0,7); 2,837 (0,5); 2,827 (0,3); 2,678 (0,4); 2,673 (0,5); 2,669 (0,4); 2,509 (61,5); 2,504 (78,8); 2,500 (57,5); 2,335 (0,4); 2,331 (0,5); 2,327 (0,4); 2,121 (16,0); 0,746 (0,4); 0,733 (1,2); 0,728 (1,7); 0,716 (1,6); 0,710 (1,3); 0,699 (0,6); 0,602 (0,6); 0,592 (1,7); 0,585 (1,6); 0,576 (1,3); 0,564 (0,4)
Ví dụ I-T3-14: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,600 (1,8); 8,596 (1,8); 8,536 (1,1); 8,525 (1,1); 8,352 (1,9); 7,977 (1,6); 7,960 (1,6); 7,594 (3,7); 7,437 (1,7); 7,411 (1,7); 3,902 (4,8); 3,332 (129,0); 2,826 (0,4); 2,817 (0,7); 2,807 (0,7); 2,799 (0,4); 2,789 (0,3); 2,676 (0,4); 2,672 (0,5); 2,667 (0,4); 2,511 (32,0); 2,507 (61,8); 2,503 (79,3); 2,498 (57,6); 2,494 (28,2); 2,334 (0,3); 2,329 (0,5); 2,325 (0,4); 2,115 (16,0); 0,733 (0,4); 0,720 (1,2); 0,715 (1,6); 0,703 (1,5); 0,697 (1,3); 0,685 (0,5); 0,567 (0,5); 0,557 (1,7); 0,551 (1,5); 0,547 (1,4); 0,541 (1,3); 0,529 (0,4); 0,000 (6,1)
Ví dụ I-T3-15: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,711 (3,3); 8,694 (1,1); 8,684 (1,0); 8,450 (3,3); 8,369 (1,8); 8,174 (1,8); 7,971 (1,8); 7,601 (3,9); 3,903 (1,0); 3,331 (150,2); 2,910 (0,3); 2,901 (0,5); 2,892 (0,7); 2,882 (0,7); 2,874 (0,5); 2,865 (0,4); 2,672 (0,5); 2,507 (59,3); 2,503 (74,7); 2,499 (55,2); 2,334 (0,4);

2,330 (0,5); 2,133 (16,0); 0,769 (0,4); 0,755 (1,3); 0,751 (1,7); 0,738 (1,6); 0,733 (1,4); 0,721 (0,6); 0,630 (0,6); 0,620 (1,8); 0,613 (1,7); 0,604 (1,4); 0,592 (0,4)
Ví dụ I-T3-16: ^{1}H-NMR (601,6 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,439 (0,8); 8,433 (0,9); 8,344 (3,1); 8,343 (3,2); 8,082 (3,2); 8,081 (3,3); 7,912 (1,7); 7,909 (1,7); 7,670 (0,9); 7,667 (0,9); 7,657 (1,0); 7,654 (1,0); 7,600 (3,4); 7,368 (1,3); 7,354 (1,2); 3,376 (0,5); 3,367 (1,1); 3,351 (401,9); 3,328 (0,5); 3,324 (0,5); 2,997 (3,2); 2,856 (0,4); 2,850 (0,7); 2,844 (0,7); 2,838 (0,4); 2,831 (0,3); 2,618 (0,4); 2,615 (0,6); 2,612 (0,4); 2,543 (5,5); 2,524 (1,0); 2,521 (1,3); 2,518 (1,2); 2,509 (30,4); 2,506 (67,4); 2,503 (93,3); 2,500 (68,5); 2,497 (31,5); 2,438 (7,5); 2,390 (0,4); 2,387 (0,6); 2,384 (0,4); 2,146 (16,0); 0,715 (0,4); 0,707 (1,2); 0,703 (1,6); 0,695 (1,5); 0,692 (1,3); 0,684 (0,5); 0,590 (0,6); 0,583 (1,6); 0,579 (1,4); 0,576 (1,3); 0,572 (1,3); 0,564 (0,4); 0,000 (2,6)
Ví dụ I-T3-17: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,576 (0,4); 9,437 (2,3); 8,736 (0,7); 8,625 (1,7); 8,621 (1,8); 8,472 (0,7); 8,411 (0,4); 8,375 (1,8); 8,372 (1,9); 8,316 (0,5); 8,243 (0,4); 8,030 (1,7); 8,013 (1,6); 7,993 (0,3); 7,597 (3,8); 7,547 (1,7); 7,521 (1,9); 4,036 (1,1); 3,903 (6,7); 3,630 (0,4); 3,623 (0,4); 3,614 (0,4); 3,608 (0,3); 3,597 (0,3); 3,392 (0,7); 3,332 (259,6); 3,287 (0,3); 3,175 (0,4); 3,162 (0,5); 3,155 (0,4); 3,145 (0,5); 3,138 (0,4); 3,127 (0,5); 3,056 (0,4); 3,022 (4,3); 2,751 (0,4); 2,690 (1,7); 2,676 (0,8); 2,672 (1,1); 2,667 (0,9); 2,525 (3,7); 2,511 (72,5); 2,507 (143,5); 2,503 (187,7); 2,498 (136,4); 2,494 (66,3); 2,338 (0,4); 2,334 (0,8); 2,329 (1,1); 2,325 (0,8); 2,134 (3,5); 2,116 (16,0); 1,614 (0,5); 1,607 (1,1); 1,593 (1,9); 1,586 (2,0); 1,573 (0,8); 1,344 (0,5); 1,337 (0,5); 1,310 (0,9); 1,296 (1,9); 1,289 (2,1); 1,274 (3,8); 1,259 (6,5); 1,244 (6,0); 1,225 (1,2); 0,008 (0,5); 0,000 (16,5); -0,009 (0,5)
Ví dụ I-T3-18: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,576 (2,0); 8,736 (3,2); 8,472 (3,3); 8,411 (1,7); 8,316 (0,3); 8,243 (1,6); 7,994 (1,6); 7,605 (3,6); 3,903 (10,2); 3,372 (0,7); 3,333 (152,4); 3,243 (1,3); 3,175 (0,4); 3,162 (0,4); 2,690 (0,4); 2,676 (0,4); 2,672 (0,6); 2,667 (0,4); 2,542 (0,6); 2,525 (1,9); 2,512 (39,2); 2,507 (77,8); 2,503 (101,6); 2,498 (73,7); 2,494 (35,7); 2,334 (0,4); 2,330 (0,6); 2,325 (0,4); 2,134 (16,0); 2,116 (0,5); 1,629 (0,7); 1,614 (1,8); 1,607 (2,0); 1,594 (0,9); 1,358 (0,9); 1,345 (1,9); 1,338 (2,0); 1,323 (0,7); 1,259 (0,5); 1,244 (0,4); 1,017 (0,6); 1,001 (0,6); 0,000 (9,1)
Ví dụ I-T3-19: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,367 (1,9); 8,537 (1,8); 8,534 (1,9); 8,300 (2,2); 8,277 (0,8); 8,271 (0,9); 8,259 (0,9); 8,253 (0,8); 7,796 (0,4); 7,791 (0,5); 7,784 (0,5); 7,778 (0,6); 7,775 (0,6); 7,769 (0,6); 7,763 (0,5); 7,757 (0,5); 7,598 (3,8); 7,457 (0,8); 7,435 (0,8); 7,430 (1,0); 7,409 (0,7); 3,903 (4,8); 3,335 (104,3); 2,672 (0,4); 2,542 (0,3); 2,507 (54,0); 2,503 (69,3); 2,499 (52,7); 2,330 (0,4); 2,122 (16,0); 1,609 (0,8); 1,595 (2,0); 1,588 (2,1); 1,575 (0,9); 1,323 (0,9); 1,309 (2,0); 1,303

(2,1); 1,288 (0,8); 0,000 (5,6)
Ví dụ I-T3-20: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,816 (2,3); 8,810 (2,3); 8,695 (3,4); 8,681 (1,1); 8,670 (1,1); 8,451 (3,4); 8,184 (2,3); 8,178 (2,2); 7,601 (3,8); 3,903 (7,0); 3,333 (173,9); 3,289 (0,4); 3,242 (0,9); 3,175 (0,6); 3,162 (0,5); 2,859 (0,4); 2,850 (0,7); 2,840 (0,7); 2,832 (0,4); 2,822 (0,3); 2,676 (0,4); 2,671 (0,5); 2,667 (0,4); 2,542 (0,4); 2,511 (34,1); 2,507 (66,3); 2,502 (85,9); 2,498 (63,0); 2,494 (31,0); 2,333 (0,4); 2,329 (0,5); 2,325 (0,4); 2,132 (0,7); 2,117 (16,0); 1,016 (0,4); 1,001 (0,4); 0,755 (0,5); 0,742 (1,3); 0,737 (1,7); 0,725 (1,6); 0,719 (1,4); 0,707 (0,5); 0,564 (0,6); 0,553 (1,7); 0,547 (1,6); 0,543 (1,5); 0,538 (1,4); 0,526 (0,4); 0,000 (7,1)
Ví dụ I-T3-21: ^{1}H-NMR (600,1 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,593 (1,8); 8,868 (2,3); 8,864 (2,3); 8,709 (3,3); 8,456 (3,4); 8,262 (2,3); 8,258 (2,2); 7,603 (3,7); 3,388 (0,4); 3,383 (0,4); 3,381 (0,5); 3,369 (0,8); 3,340 (1164,0); 2,994 (0,7); 2,617 (0,6); 2,615 (0,8); 2,612 (0,6); 2,542 (39,9); 2,523 (1,4); 2,520 (1,7); 2,517 (1,8); 2,508 (48,7); 2,505 (103,1); 2,502 (140,8); 2,499 (100,9); 2,497 (46,2); 2,389 (0,6); 2,386 (0,8); 2,383 (0,6); 2,117 (16,0); 1,636 (0,8); 1,627 (2,0); 1,622 (2,1); 1,613 (0,8); 1,288 (0,9); 1,278 (1,9); 1,274 (2,1); 1,264 (0,8); 0,005 (0,8); 0,000 (21,9); -0,006 (0,7)
Ví dụ I-T3-22: ^{1}H-NMR (400,1 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,397 (6,5); 8,682 (5,3); 8,677 (5,1); 8,405 (7,9); 8,366 (0,3); 8,087 (16,0); 8,060 (0,3); 8,041 (0,7); 7,981 (1,7); 7,966 (2,6); 7,963 (2,7); 7,948 (1,5); 7,944 (1,4); 7,763 (0,3); 7,505 (1,2); 7,501 (1,3); 7,486 (2,7); 7,470 (1,8); 7,466 (1,6); 7,384 (0,6); 7,374 (3,1); 7,365 (1,1); 7,355 (5,1); 7,345 (0,8); 7,336 (2,3); 5,761 (0,8); 3,348 (68,6); 3,028 (1,2); 2,875 (1,0); 2,712 (0,4); 2,671 (0,3); 2,542 (99,6); 2,507 (38,4); 2,502 (50,3); 2,498 (38,2); 2,368 (0,4); 2,087 (0,3); 1,601 (2,4); 1,587 (6,3); 1,580 (6,5); 1,567 (2,8); 1,288 (3,1); 1,275 (6,2); 1,268 (6,6); 1,254 (2,5); 1,234 (0,8); 1,169 (0,9); 0,146 (0,3); 0,000 (72,5); -0,008 (4,9); -0,150 (0,4)
Ví dụ I-T3-23: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,202 (5,5); 8,187 (0,5); 8,161 (5,9); 8,146 (0,5); 7,931 (0,4); 7,900 (9,0); 7,886 (0,8); 7,739 (3,5); 7,734 (4,4); 7,720 (0,5); 7,707 (2,6); 7,701 (1,9); 7,686 (3,0); 7,680 (2,5); 7,648 (1,5); 7,507 (4,1); 7,486 (3,4); 4,360 (0,5); 4,342 (0,5); 4,086 (1,0); 4,068 (2,9); 4,050 (3,0); 4,032 (1,1); 2,162 (61,1); 2,149 (10,3); 2,120 (0,4); 2,114 (0,4); 2,108 (0,5); 2,102 (0,4); 1,972 (13,4); 1,965 (4,8); 1,959 (8,2); 1,953 (30,5); 1,947 (52,3); 1,940 (68,1); 1,934 (48,2); 1,928 (27,3); 1,769 (0,4); 1,596 (1,8); 1,581 (4,5); 1,574 (4,4); 1,561 (2,8); 1,437 (16,0); 1,422 (1,2); 1,401 (0,5); 1,371 (0,6); 1,361 (2,6); 1,353 (1,9); 1,347 (4,6); 1,341 (4,6); 1,336 (1,5); 1,326 (2,3); 1,268 (1,6); 1,222 (3,7); 1,204 (7,2); 1,186 (3,8); 0,000 (2,2)
Ví dụ I-T3-24: ^{1}H-NMR (600,1 MHz, CD3CN): δ= 8,189 (6,2); 8,144 (6,7); 7,897 (10,1); 7,690 (3,8); 7,687 (4,5); 7,652 (2,6); 7,648 (2,1);

7,638 (2,8); 7,634 (2,4); 7,471 (4,4); 7,457 (3,7); 6,891 (1,0); 5,446 (2,0); 4,077 (2,0); 4,065 (6,2); 4,053 (6,2); 4,041 (2,1); 2,864 (0,8); 2,857 (1,1); 2,852 (1,7); 2,845 (1,7); 2,839 (1,1); 2,833 (0,8); 2,129 (55,4); 2,054 (0,5); 2,050 (0,7); 2,046 (0,5); 1,971 (27,5); 1,963 (6,3); 1,955 (8,8); 1,951 (10,1); 1,947 (46,9); 1,943 (78,2); 1,939 (115,2); 1,935 (77,9); 1,931 (39,3); 1,922 (0,5); 1,828 (0,4); 1,824 (0,6); 1,820 (0,4); 1,437 (16,0); 1,270 (0,4); 1,216 (7,4); 1,204 (14,6); 1,192 (7,3); 0,786 (1,0); 0,777 (2,8); 0,774 (3,6); 0,765 (3,6); 0,762 (2,7); 0,754 (1,2); 0,606 (1,1); 0,599 (2,9); 0,598 (2,9); 0,595 (3,0); 0,591 (2,8); 0,588 (2,8); 0,580 (0,9); 0,005 (2,1); 0,000 (69,9); -0,006 (2,2)
Ví dụ I-T3-25: ^{1}H-NMR (601,6 MHz, CD3CN): δ= 8,201 (9,9); 8,163 (10,8); 7,899 (16,0); 7,738 (5,9); 7,734 (7,4); 7,710 (4,2); 7,706 (3,3); 7,696 (4,6); 7,693 (4,0); 7,522 (6,8); 7,508 (5,8); 7,328 (1,4); 7,265 (0,6); 7,251 (1,5); 7,239 (1,1); 7,195 (1,4); 7,183 (1,0); 7,162 (0,5); 7,150 (0,7); 5,446 (1,0); 4,127 (1,3); 4,116 (1,5); 4,111 (4,2); 4,100 (4,3); 4,095 (4,5); 4,085 (4,3); 4,080 (1,7); 4,069 (1,4); 2,328 (5,9); 2,134 (32,5); 2,132 (53,6); 2,058 (0,4); 2,054 (0,6); 2,050 (1,0); 2,046 (0,7); 1,971 (1,2); 1,964 (7,9); 1,955 (12,2); 1,951 (13,8); 1,947 (67,1); 1,943 (113,1); 1,939 (165,4); 1,935 (111,4); 1,931 (56,0); 1,833 (0,5); 1,829 (0,7); 1,825 (0,9); 1,821 (0,7); 1,437 (5,7); 1,269 (0,8); 1,204 (0,6); 1,192 (0,3); 0,000 (1,4)
Ví dụ I-T3-26: ^{1}H-NMR (601,6 MHz, CD3CN): δ= 8,222 (8,5); 8,184 (9,2); 8,183 (8,4); 7,933 (13,8); 7,743 (5,6); 7,739 (6,7); 7,712 (3,8); 7,709 (3,0); 7,699 (4,2); 7,695 (3,6); 7,530 (6,3); 7,516 (5,4); 7,228 (0,3); 7,216 (0,4); 7,172 (1,1); 5,481 (0,5); 4,022 (0,9); 3,653 (2,8); 3,641 (6,5); 3,631 (6,6); 3,620 (2,9); 2,605 (0,6); 2,594 (1,2); 2,586 (2,0); 2,582 (0,9); 2,575 (3,7); 2,568 (2,2); 2,564 (2,1); 2,556 (3,9); 2,549 (0,9); 2,545 (2,0); 2,538 (1,3); 2,527 (0,6); 2,505 (0,6); 2,502 (1,0); 2,499 (1,4); 2,496 (1,0); 2,361 (1,2); 2,216 (233,1); 2,214 (233,8); 2,213 (216,8); 2,211 (239,7); 2,210 (216,4); 2,206 (358,9); 2,092 (0,7); 2,088 (1,2); 2,084 (1,6); 2,080 (1,2); 2,076 (0,6); 2,005 (1,3); 1,998 (14,1); 1,990 (21,9); 1,985 (26,7); 1,982 (121,7); 1,978 (205,2); 1,973 (304,1); 1,969 (210,4); 1,965 (107,9); 1,867 (0,7); 1,863 (1,2); 1,859 (1,7); 1,855 (1,2); 1,850 (0,6); 1,470 (16,0); 1,303 (0,4); 1,237 (0,6); 0,033 (1,8)
Ví dụ I-T3-27: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,439 (6,6); 8,693 (9,5); 8,441 (9,4); 8,317 (0,9); 8,274 (16,0); 7,807 (2,2); 7,802 (3,8); 7,792 (5,8); 7,786 (9,9); 7,569 (5,1); 7,553 (1,2); 7,546 (4,2); 4,020 (0,3); 3,568 (10,9); 3,328 (401,1); 2,675 (2,2); 2,671 (2,9); 2,666 (2,2); 2,506 (372,0); 2,502 (465,0); 2,497 (338,4); 2,333 (2,3); 2,328 (2,9); 2,324 (2,1); 1,989 (1,3); 1,615 (2,4); 1,601 (6,2); 1,594 (6,2); 1,581 (2,5); 1,398 (5,4); 1,287 (2,8); 1,274 (6,1); 1,267 (6,2); 1,253 (2,2); 1,235 (0,4); 1,192 (0,4); 1,175 (0,7); 1,157 (0,4); 0,146 (0,7); 0,000 (164,4); -0,008 (7,8); -0,150 (0,8)

Ví dụ I-T3-28: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,684 (0,4); 8,672 (9,5); 8,535 (3,2); 8,524 (3,2); 8,453 (0,3); 8,427 (9,5); 8,271 (16,0); 7,749 (2,3); 7,744 (3,3); 7,723 (12,2); 7,519 (4,6); 7,498 (3,9); 4,056 (0,5); 4,038 (1,4); 4,020 (1,4); 4,002 (0,5); 3,568 (7,8); 3,329 (74,2); 2,857 (0,9); 2,848 (1,3); 2,839 (1,9); 2,829 (2,0); 2,820 (1,3); 2,811 (0,9); 2,801 (0,3); 2,676 (0,4); 2,671 (0,6); 2,667 (0,4); 2,524 (1,5); 2,511 (34,6); 2,507 (68,9); 2,502 (89,7); 2,498 (64,3); 2,493 (30,8); 2,333 (0,4); 2,329 (0,6); 2,324 (0,4); 1,989 (6,1); 1,397 (15,9); 1,193 (1,6); 1,175 (3,1); 1,157 (1,6); 0,728 (1,3); 0,716 (3,7); 0,711 (4,9); 0,698 (4,7); 0,693 (3,9); 0,681 (1,6); 0,561 (1,7); 0,551 (5,1); 0,544 (4,7); 0,535 (4,1); 0,523 (1,2); 0,008 (1,4); 0,000 (37,7); -0,008 (1,4)
Ví dụ I-T3-29: ^{1}H-NMR (400,1 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,042 (6,2); 9,036 (6,0); 8,962 (0,4); 8,831 (6,4); 8,826 (6,3); 8,807 (9,8); 8,678 (3,3); 8,668 (3,2); 8,507 (9,6); 8,478 (0,5); 8,385 (3,9); 8,379 (6,4); 8,374 (3,5); 8,111 (16,0); 3,368 (0,3); 3,367 (0,3); 3,365 (0,4); 3,362 (0,5); 3,361 (0,6); 3,360 (0,6); 3,357 (0,7); 3,356 (0,8); 3,350 (1,8); 3,330 (278,8); 3,313 (3,5); 3,309 (2,7); 3,308 (2,6); 3,306 (2,5); 3,297 (1,0); 3,295 (1,0); 3,294 (0,9); 3,287 (0,6); 3,284 (0,5); 3,281 (0,4); 3,279 (0,4); 3,277 (0,4); 2,915 (0,4); 2,905 (1,0); 2,896 (1,5); 2,887 (2,2); 2,877 (2,3); 2,869 (1,5); 2,859 (1,1); 2,849 (0,4); 2,711 (0,4); 2,671 (0,3); 2,565 (0,4); 2,564 (0,5); 2,563 (0,5); 2,562 (0,6); 2,560 (0,7); 2,559 (0,8); 2,558 (0,9); 2,557 (1,1); 2,555 (1,4); 2,542 (109,1); 2,533 (2,6); 2,532 (2,3); 2,530 (2,0); 2,529 (1,9); 2,528 (1,8); 2,527 (1,8); 2,525 (1,9); 2,524 (2,0); 2,523 (2,0); 2,511 (15,9); 2,507 (30,0); 2,502 (38,9); 2,498 (28,5); 2,494 (14,2); 2,368 (0,4); 2,130 (0,7); 1,234 (0,5); 0,765 (1,4); 0,752 (4,2); 0,747 (5,5); 0,735 (5,4); 0,729 (4,4); 0,717 (2,0); 0,696 (0,3); 0,618 (2,1); 0,608 (5,9); 0,602 (5,4); 0,592 (4,5); 0,580 (1,5); 0,146 (0,5); 0,022 (0,4); 0,021 (0,5); 0,020 (0,6); 0,019 (0,7); 0,017 (0,7); 0,016 (0,9); 0,008 (6,5); 0,000 (110,7); -0,009 (5,4); -0,013 (2,0); -0,014 (1,7); -0,015 (1,6); -0,016 (1,4); -0,018 (1,3); -0,019 (1,2); -0,020 (1,1); -0,021 (1,0); -0,023 (1,0); -0,024 (0,9); -0,025 (0,9); -0,026 (0,8); -0,027 (0,7); -0,029 (0,7); -0,031 (0,5); -0,034 (0,5); -0,035 (0,4); -0,036 (0,4); -0,150 (0,5)
Ví dụ I-T3-30: ^{1}H-NMR (400,1 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,562 (6,5); 9,101 (6,1); 9,095 (6,1); 8,989 (0,4); 8,855 (6,3); 8,850 (6,4); 8,829 (9,9); 8,5253 (9,7); 8,5245 (9,7); 8,496 (0,5); 8,438 (3,7); 8,432 (6,4); 8,427 (3,6); 8,115 (16,0); 5,759 (0,5); 3,361 (0,8); 3,329 (283,9); 2,712 (0,5); 2,671 (0,4); 2,568 (0,3); 2,567 (0,4); 2,565 (0,4); 2,564 (0,5); 2,563 (0,5); 2,562 (0,6); 2,560 (0,7); 2,559 (0,7); 2,558 (0,9); 2,557 (1,0); 2,555 (1,2); 2,554 (1,5); 2,542 (137,6); 2,533 (2,7); 2,532 (2,2); 2,530 (2,0); 2,529 (1,9); 2,528 (1,8); 2,527 (1,7); 2,525 (1,8); 2,524 (1,8); 2,523 (1,9); 2,511 (16,2); 2,507 (31,6); 2,502 (41,8); 2,498 (30,6); 2,493 (15,2); 2,368 (0,5); 1,631 (2,6); 1,617 (6,5); 1,610 (6,6); 1,597 (3,0); 1,348 (3,1); 1,334 (6,6); 1,328 (6,6); 1,313 (2,5); 1,234 (0,4); 0,146 (0,5);

0,026 (0,3); 0,025 (0,4); 0,024 (0,4); 0,022 (0,5); 0,021 (0,6); 0,020 (0,6); 0,019 (0,7); 0,016 (0,9); 0,008 (5,8); 0,000 (109,7); -0,008 (4,9); -0,014 (1,3); -0,015 (1,2); -0,016 (1,1); -0,018 (1,0); -0,019 (0,9); -0,020 (0,9); -0,023 (0,7); -0,024 (0,6); -0,025 (0,6); -0,027 (0,5); -0,029 (0,4); -0,030 (0,4); -0,031 (0,4); -0,150 (0,5)
Ví dụ I-T3-31: ^{1}H-NMR (601,6 MHz, CD3CN): δ= 19,953 (0,4); 8,476 (0,6); 8,461 (16,0); 8,193 (0,3); 8,170 (0,6); 8,156 (14,9); 8,148 (0,5); 8,052 (0,3); 7,934 (7,1); 7,931 (7,2); 7,901 (0,6); 7,866 (5,7); 7,852 (8,0); 7,779 (4,3); 7,765 (3,1); 7,707 (9,8); 7,703 (11,5); 7,689 (0,7); 7,669 (6,5); 7,665 (5,3); 7,655 (7,3); 7,651 (6,3); 7,609 (0,4); 7,477 (11,0); 7,463 (9,5); 6,905 (2,4); 3,912 (2,1); 2,873 (0,6); 2,866 (1,9); 2,860 (2,7); 2,854 (4,1); 2,848 (4,3); 2,842 (2,7); 2,836 (2,0); 2,830 (0,7); 2,145 (513,7); 2,068 (0,6); 2,064 (0,6); 2,060 (3,3); 2,056 (5,5); 2,052 (8,1); 2,048 (5,6); 2,044 (2,9); 1,966 (31,6); 1,958 (83,8); 1,953 (98,4); 1,950 (560,5); 1,945 (964,6); 1,941 (1429,4); 1,937 (989,8); 1,933 (503,8); 1,925 (8,1); 1,843 (0,3); 1,835 (3,0); 1,831 (5,4); 1,827 (7,9); 1,823 (5,4); 1,818 (2,7); 1,340 (0,3); 1,285 (0,7); 1,269 (2,9); 1,123 (0,4); 0,882 (0,7); 0,790 (2,5); 0,782 (6,8); 0,779 (9,4); 0,770 (9,0); 0,767 (7,4); 0,759 (3,0); 0,744 (0,4); 0,732 (0,4); 0,636 (0,4); 0,609 (2,9); 0,601 (7,4); 0,598 (7,8); 0,595 (7,3); 0,592 (7,5); 0,583 (2,4); 0,097 (2,5); 0,005 (17,5); 0,000 (598,4); -0,006 (20,1); -0,100 (2,5)
Ví dụ I-T3-32: ^{1}H-NMR (601,6 MHz, CD3CN): δ= 19,978 (0,8); 8,505 (16,0); 8,234 (0,7); 8,197 (15,1); 7,962 (7,3); 7,933 (1,0); 7,901 (6,0); 7,887 (8,2); 7,812 (4,3); 7,798 (3,2); 7,785 (9,1); 7,781 (11,3); 7,755 (6,0); 7,752 (4,8); 7,742 (6,5); 7,738 (5,8); 7,557 (10,5); 7,543 (9,3); 7,451 (1,9); 7,284 (1,2); 7,272 (0,9); 7,228 (1,1); 7,216 (0,9); 7,183 (0,6); 5,481 (0,6); 4,162 (2,0); 4,151 (2,3); 4,147 (6,6); 4,136 (6,5); 4,131 (7,2); 4,120 (6,5); 4,115 (3,0); 4,104 (2,2); 3,946 (0,8); 2,497 (1,3); 2,361 (4,7); 2,211 (114,1); 2,208 (135,0); 2,203 (158,6); 2,200 (140,9); 2,198 (164,0); 2,092 (0,8); 2,088 (1,1); 2,084 (1,6); 2,080 (1,1); 1,997 (12,7); 1,989 (19,6); 1,985 (22,3); 1,981 (108,3); 1,977 (181,4); 1,973 (268,0); 1,969 (184,4); 1,965 (94,6); 1,862 (1,0); 1,858 (1,5); 1,854 (1,1); 1,303 (1,1); 0,033 (2,1)
Ví dụ I-T3-33: ^{1}H-NMR (601,6 MHz, CD3CN): δ= 8,489 (10,8); 8,221 (0,7); 8,184 (10,0); 7,966 (4,8); 7,932 (1,1); 7,902 (4,0); 7,888 (5,4); 7,813 (3,0); 7,799 (2,1); 7,759 (6,4); 7,755 (7,3); 7,725 (4,1); 7,722 (3,2); 7,712 (4,4); 7,708 (3,5); 7,533 (7,0); 7,519 (5,9); 7,111 (1,4); 3,659 (3,4); 3,648 (7,7); 3,637 (7,6); 3,626 (3,3); 2,609 (0,8); 2,598 (1,4); 2,591 (2,3); 2,579 (4,4); 2,572 (2,5); 2,568 (2,5); 2,561 (4,4); 2,549 (2,4); 2,542 (1,5); 2,531 (0,8); 2,184 (375,5); 2,182 (324,4); 2,181 (324,2); 2,177 (394,7); 2,173 (444,9); 2,092 (1,2); 2,088 (2,1); 2,084 (3,3); 2,080 (2,2); 2,076 (1,1); 1,998 (27,5); 1,990 (42,2); 1,985 (47,1); 1,981 (234,7); 1,977 (393,2); 1,973 (581,0); 1,969 (400,8); 1,965

(207,8); 1,867 (1,2); 1,863 (2,2); 1,859 (3,3); 1,855 (2,2); 1,850 (1,2); 1,471 (16,0); 1,303 (1,3); 0,033 (3,4)
Ví dụ I-T3-34: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,493 (16,0); 8,193 (15,4); 8,099 (0,4); 8,087 (6,7); 8,065 (8,0); 7,850 (4,4); 7,827 (4,3); 7,815 (7,2); 7,752 (9,3); 7,747 (11,6); 7,720 (6,3); 7,715 (4,4); 7,699 (7,2); 7,694 (5,8); 7,569 (4,2); 7,514 (10,8); 7,493 (8,8); 4,012 (0,8); 3,891 (0,5); 3,458 (0,5); 3,452 (0,5); 3,236 (1,8); 3,067 (0,5); 3,056 (0,5); 2,848 (0,4); 2,140 (115,1); 2,120 (1,0); 2,114 (1,4); 2,108 (1,6); 2,102 (1,2); 2,095 (0,6); 1,972 (1,7); 1,965 (8,4); 1,958 (21,0); 1,953 (103,8); 1,947 (185,9); 1,940 (245,9); 1,934 (166,9); 1,928 (84,5); 1,781 (0,6); 1,775 (1,1); 1,769 (1,5); 1,763 (1,0); 1,756 (0,6); 1,605 (4,6); 1,591 (11,9); 1,584 (11,8); 1,570 (6,0); 1,530 (0,8); 1,437 (6,2); 1,407 (0,7); 1,367 (6,3); 1,353 (11,8); 1,346 (12,0); 1,332 (4,7); 1,294 (0,6); 1,269 (5,1); 1,204 (0,6); 0,882 (0,6); 0,146 (1,2); 0,008 (11,5); 0,000 (282,0); -0,009 (9,7); -0,150 (1,3)
Ví dụ I-T3-35: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,496 (0,7); 8,480 (16,0); 8,182 (15,3); 8,181 (14,8); 8,087 (6,6); 8,065 (7,9); 7,848 (4,7); 7,825 (4,8); 7,812 (7,7); 7,702 (9,9); 7,697 (11,9); 7,670 (6,9); 7,664 (4,9); 7,649 (7,8); 7,643 (6,3); 7,481 (10,8); 7,460 (8,6); 6,929 (2,9); 2,887 (0,7); 2,877 (2,1); 2,868 (2,9); 2,859 (4,5); 2,849 (4,5); 2,841 (2,9); 2,831 (2,1); 2,822 (0,7); 2,467 (0,4); 2,463 (0,5); 2,458 (0,4); 2,153 (188,6); 2,120 (0,8); 2,114 (1,1); 2,108 (1,3); 2,102 (0,9); 2,096 (0,5); 1,972 (2,2); 1,965 (8,7); 1,959 (23,3); 1,953 (95,7); 1,947 (167,7); 1,941 (215,6); 1,934 (146,4); 1,928 (73,1); 1,781 (0,5); 1,775 (0,9); 1,769 (1,2); 1,763 (0,8); 1,757 (0,4); 1,437 (6,9); 1,269 (0,6); 1,204 (0,5); 0,800 (2,4); 0,788 (7,7); 0,783 (9,7); 0,770 (10,2); 0,765 (7,3); 0,753 (3,1); 0,731 (0,4); 0,713 (0,4); 0,656 (0,4); 0,646 (0,4); 0,617 (3,3); 0,605 (8,7); 0,599 (9,2); 0,595 (8,3); 0,590 (7,6); 0,577 (2,2); 0,522 (0,3); 0,146 (1,0); 0,000 (233,4); -0,009 (9,6); -0,150 (1,0)
Ví dụ I-T3-36: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,496 (16,0); 8,192 (15,3); 8,093 (6,4); 8,071 (7,7); 7,850 (4,3); 7,827 (4,3); 7,814 (7,1); 7,749 (9,1); 7,743 (11,5); 7,726 (6,8); 7,721 (4,1); 7,706 (7,6); 7,700 (5,6); 7,532 (10,3); 7,511 (8,3); 7,340 (2,4); 4,149 (2,3); 4,132 (2,8); 4,125 (7,1); 4,109 (7,4); 4,102 (7,4); 4,085 (7,2); 4,078 (2,6); 4,061 (2,3); 2,137 (51,6); 2,120 (0,6); 2,114 (0,9); 2,108 (1,0); 2,102 (0,7); 2,095 (0,4); 1,965 (6,7); 1,958 (18,2); 1,953 (74,7); 1,946 (129,6); 1,940 (165,9); 1,934 (111,8); 1,928 (55,4); 1,781 (0,4); 1,775 (0,7); 1,769 (1,0); 1,763 (0,6); 1,437 (3,7); 1,270 (0,3); 0,146 (0,8); 0,008 (11,2); 0,000 (188,1); -0,009 (6,3); -0,150 (0,8)
Ví dụ I-T3-37: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,518 (0,5); 8,490 (16,0); 8,238 (0,5); 8,193 (14,9); 8,090 (6,7); 8,069 (7,7); 7,850 (4,2); 7,827 (4,0); 7,814 (6,7); 7,735 (9,2); 7,729 (11,3); 7,717 (0,4); 7,696 (6,1); 7,690 (4,5); 7,675 (7,0); 7,669 (5,9); 7,587 (0,4); 7,536 (0,3); 7,514 (0,6); 7,504 (11,0); 7,494 (0,6); 7,483 (9,1);

7,459 (1,7); 7,445 (1,6); 6,694 (0,4); 6,666 (0,3); 5,364 (0,6); 5,343 (2,4); 5,322 (4,7); 5,301 (4,6); 5,280 (2,4); 5,259 (0,7); 4,006 (0,5); 3,589 (0,4); 3,567 (0,4); 3,549 (6,1); 3,545 (3,8); 3,525 (11,4); 3,507 (4,3); 3,503 (7,9); 3,379 (8,1); 3,375 (5,1); 3,358 (11,5); 3,355 (10,8); 3,338 (3,6); 3,334 (6,2); 3,067 (0,5); 2,848 (0,5); 2,472 (0,5); 2,468 (1,0); 2,463 (1,3); 2,458 (1,0); 2,453 (0,5); 2,264 (0,3); 2,245 (0,4); 2,151 (305,9); 2,120 (1,6); 2,114 (2,3); 2,107 (2,8); 2,101 (2,0); 2,095 (1,0); 2,022 (1,9); 2,003 (0,5); 1,964 (14,6); 1,958 (33,8); 1,952 (185,3); 1,946 (333,6); 1,940 (449,3); 1,934 (307,4); 1,928 (157,3); 1,915 (1,9); 1,781 (1,0); 1,775 (1,8); 1,768 (2,5); 1,762 (1,7); 1,756 (0,8); 1,269 (2,1); 0,146 (3,1); 0,025 (0,7); 0,008 (22,9); 0,000 (696,9); -0,009 (23,3); -0,150 (3,1)
Ví dụ I-T3-38: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,238 (7,9); 8,119 (7,5); 7,748 (4,6); 7,742 (5,7); 7,729 (4,0); 7,711 (3,1); 7,706 (2,3); 7,690 (3,5); 7,685 (2,8); 7,666 (1,4); 7,644 (2,6); 7,595 (5,4); 7,574 (4,0); 7,500 (5,1); 7,479 (4,2); 4,068 (1,0); 4,050 (1,0); 4,032 (0,3); 2,800 (1,9); 2,781 (5,9); 2,762 (6,0); 2,744 (2,0); 2,139 (27,7); 2,120 (0,5); 2,113 (0,5); 2,107 (0,6); 2,101 (0,4); 1,972 (4,6); 1,964 (2,9); 1,958 (7,5); 1,952 (33,5); 1,946 (58,9); 1,940 (77,3); 1,933 (53,2); 1,927 (27,2); 1,774 (0,4); 1,768 (0,5); 1,762 (0,3); 1,601 (2,2); 1,587 (6,0); 1,580 (6,0); 1,566 (3,0); 1,526 (0,4); 1,402 (0,3); 1,362 (3,0); 1,348 (6,0); 1,342 (6,1); 1,327 (2,3); 1,270 (1,6); 1,221 (1,2); 1,204 (2,3); 1,186 (1,1); 1,113 (7,7); 1,095 (16,0); 1,076 (7,4); 0,146 (1,1); 0,008 (13,7); 0,000 (231,5); -0,009 (10,7); -0,150 (1,1)
Ví dụ I-T3-39: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,226 (8,7); 8,120 (0,4); 8,108 (8,2); 7,726 (4,1); 7,700 (4,7); 7,694 (5,9); 7,680 (0,5); 7,663 (4,5); 7,657 (3,5); 7,642 (6,1); 7,637 (5,3); 7,593 (5,2); 7,572 (2,8); 7,467 (5,6); 7,447 (4,6); 6,927 (1,4); 3,874 (0,7); 3,051 (0,4); 2,938 (0,4); 2,875 (0,9); 2,865 (1,4); 2,857 (2,1); 2,847 (2,1); 2,838 (1,4); 2,829 (1,0); 2,819 (0,3); 2,798 (2,0); 2,780 (6,2); 2,761 (6,4); 2,742 (2,2); 2,463 (0,4); 2,160 (108,1); 2,120 (0,8); 2,114 (0,9); 2,108 (1,0); 2,101 (0,7); 2,095 (0,4); 1,972 (0,6); 1,964 (3,4); 1,958 (8,7); 1,952 (47,6); 1,946 (86,2); 1,940 (115,8); 1,934 (80,2); 1,928 (41,7); 1,781 (0,4); 1,775 (0,5); 1,768 (0,7); 1,762 (0,5); 1,437 (6,6); 1,270 (1,4); 1,112 (7,8); 1,102 (1,0); 1,093 (16,0); 1,074 (7,6); 0,797 (1,2); 0,784 (3,7); 0,779 (4,7); 0,766 (4,9); 0,761 (3,7); 0,749 (1,7); 0,614 (1,6); 0,602 (4,5); 0,596 (4,5); 0,592 (4,0); 0,587 (4,0); 0,574 (1,2); 0,146 (1,3); 0,008 (10,2); 0,007 (10,2); 0,000 (266,8); -0,008 (11,5); -0,150 (1,3)
Ví dụ I-T3-40: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,241 (8,2); 8,240 (8,8); 8,117 (8,2); 7,746 (4,6); 7,741 (6,2); 7,727 (4,2); 7,718 (3,5); 7,712 (2,4); 7,697 (3,6); 7,691 (3,1); 7,664 (1,4); 7,642 (2,6); 7,597 (5,2); 7,576 (2,7); 7,516 (5,5); 7,495 (4,5); 7,352 (0,9); 4,144 (1,2); 4,128 (1,3); 4,121 (3,6); 4,104 (3,6); 4,097 (3,8);

4,081 (3,6); 4,074 (1,4); 4,057 (1,2); 2,800 (2,0); 2,781 (6,2); 2,763 (6,3); 2,744 (2,1); 2,153 (11,7); 2,149 (14,3); 1,971 (0,5); 1,964 (1,3); 1,958 (3,1); 1,952 (16,8); 1,946 (30,8); 1,940 (41,6); 1,934 (28,7); 1,927 (14,8); 1,436 (10,4); 1,268 (0,4); 1,114 (7,8); 1,095 (16,0); 1,076 (7,6); 0,146 (0,6); 0,008 (4,4); 0,000 (116,7); -0,008 (5,1); -0,150 (0,6)
Ví dụ I-T3-41: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,239 (7,9); 8,122 (7,5); 7,732 (8,1); 7,727 (9,3); 7,689 (3,0); 7,684 (2,4); 7,668 (4,6); 7,663 (4,2); 7,644 (2,6); 7,598 (4,8); 7,577 (2,6); 7,491 (5,3); 7,470 (4,9); 5,342 (1,2); 5,320 (2,4); 5,300 (2,4); 5,279 (1,2); 3,548 (3,0); 3,524 (6,0); 3,502 (4,1); 3,374 (4,1); 3,371 (2,6); 3,354 (6,0); 3,351 (5,6); 3,330 (3,2); 2,803 (1,9); 2,784 (5,9); 2,765 (6,0); 2,746 (2,1); 2,468 (0,8); 2,464 (0,9); 2,459 (0,7); 2,156 (336,8); 2,120 (1,6); 2,114 (2,0); 2,107 (2,3); 2,101 (1,6); 2,095 (1,0); 1,964 (10,5); 1,958 (27,4); 1,952 (132,9); 1,946 (239,9); 1,940 (318,6); 1,934 (221,8); 1,928 (114,5); 1,781 (0,8); 1,775 (1,4); 1,769 (1,9); 1,762 (1,3); 1,756 (0,7); 1,437 (0,8); 1,269 (2,2); 1,115 (7,6); 1,096 (16,0); 1,078 (7,4); 0,146 (3,8); 0,008 (39,2); 0,000 (832,6); -0,008 (44,8); -0,150 (4,0)
Ví dụ I-T3-42: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,830 (5,8); 8,821 (4,0); 8,815 (4,0); 8,694 (1,8); 8,683 (1,8); 8,548 (5,3); 8,547 (5,5); 8,315 (0,6); 8,192 (4,1); 8,186 (3,9); 8,107 (8,4); 3,902 (16,0); 3,333 (334,0); 3,243 (1,4); 3,175 (0,9); 3,162 (0,9); 2,870 (0,5); 2,861 (0,7); 2,852 (1,1); 2,842 (1,1); 2,833 (0,7); 2,824 (0,5); 2,680 (0,3); 2,676 (0,7); 2,672 (0,9); 2,667 (0,7); 2,662 (0,3); 2,542 (0,6); 2,525 (2,7); 2,511 (58,6); 2,507 (116,6); 2,502 (152,6); 2,498 (110,8); 2,493 (53,8); 2,338 (0,3); 2,334 (0,7); 2,329 (0,9); 2,325 (0,7); 1,909 (0,5); 1,016 (0,6); 1,001 (0,6); 0,757 (0,7); 0,744 (2,0); 0,739 (2,8); 0,727 (2,6); 0,721 (2,2); 0,709 (0,9); 0,566 (0,9); 0,555 (2,6); 0,549 (2,4); 0,545 (2,3); 0,540 (2,2); 0,528 (0,7); 0,008 (0,5); 0,000 (16,2); -0,009 (0,5)
Ví dụ I-T3-43: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,603 (7,1); 8,876 (6,9); 8,870 (6,9); 8,843 (10,4); 8,833 (0,4); 8,554 (10,3); 8,315 (0,8); 8,280 (7,0); 8,274 (6,8); 8,110 (16,0); 3,903 (14,5); 3,434 (0,4); 3,333 (565,4); 3,045 (0,5); 2,869 (0,5); 2,676 (1,3); 2,671 (1,7); 2,667 (1,3); 2,662 (0,7); 2,542 (1,5); 2,524 (5,6); 2,511 (106,6); 2,507 (206,6); 2,502 (266,2); 2,498 (191,5); 2,493 (91,5); 2,338 (0,5); 2,334 (1,1); 2,329 (1,5); 2,325 (1,1); 1,643 (2,4); 1,629 (5,7); 1,622 (6,0); 1,609 (2,6); 1,298 (2,9); 1,284 (5,7); 1,277 (6,1); 1,263 (2,3); 1,249 (0,4); 1,236 (0,4); 0,008 (0,8); 0,000 (22,4); -0,009 (0,7)
Ví dụ I-T3-44: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,115 (9,4); 8,071 (10,0); 7,690 (6,4); 7,685 (6,3); 7,668 (1,1); 7,653 (3,9); 7,632 (4,2); 7,586 (0,3); 7,549 (8,1); 7,509 (0,4); 7,463 (5,6); 7,442 (4,5); 6,896 (2,5); 4,068 (0,5); 4,051 (0,5); 2,871 (1,3); 2,862 (1,9); 2,853 (2,6); 2,844 (2,5); 2,835 (1,9); 2,826 (1,2); 2,816 (0,5); 2,452 (2,7); 2,434 (7,4); 2,415 (7,5); 2,396 (2,8); 2,251 (0,5); 2,143 (127,4); 2,113 (3,7);

2,092 (29,0); 1,971 (7,1); 1,952 (73,0); 1,946 (111,8); 1,943 (112,2); 1,940 (130,1); 1,937 (90,9); 1,934 (90,5); 1,928 (48,4); 1,774 (0,6); 1,768 (0,7); 1,437 (3,1); 1,221 (0,7); 1,204 (1,2); 1,186 (0,6); 1,082 (8,3); 1,063 (16,0); 1,044 (7,9); 0,794 (1,7); 0,780 (6,1); 0,777 (6,2); 0,764 (6,6); 0,747 (2,1); 0,726 (0,4); 0,610 (2,4); 0,600 (6,7); 0,592 (7,0); 0,572 (1,7); 0,535 (0,4); 0,528 (0,3); 0,524 (0,3); 0,147 (1,4); 0,000 (240,4); -0,149 (1,3)
Ví dụ I-T3-45: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,126 (9,0); 8,092 (9,4); 7,735 (4,9); 7,730 (6,5); 7,710 (3,2); 7,705 (2,4); 7,689 (3,6); 7,684 (3,1); 7,549 (5,9); 7,542 (5,8); 7,513 (5,6); 7,492 (4,6); 7,422 (1,5); 4,140 (1,2); 4,123 (1,5); 4,116 (3,7); 4,100 (3,9); 4,093 (4,1); 4,076 (3,7); 4,069 (1,6); 4,052 (1,2); 3,545 (1,6); 2,464 (1,4); 2,455 (2,7); 2,436 (6,7); 2,417 (6,9); 2,398 (2,4); 2,378 (0,9); 2,253 (0,5); 2,221 (1,4); 2,176 (369,0); 2,126 (0,6); 2,120 (0,7); 2,114 (1,0); 2,108 (1,5); 2,094 (27,0); 1,953 (71,9); 1,947 (129,9); 1,941 (173,4); 1,935 (125,8); 1,928 (67,7); 1,781 (0,4); 1,775 (0,7); 1,769 (1,1); 1,763 (0,7); 1,757 (0,4); 1,436 (9,9); 1,269 (0,4); 1,102 (0,5); 1,084 (8,0); 1,065 (16,0); 1,046 (7,7); 1,025 (0,5); 0,146 (2,0); 0,000 (393,0); -0,150 (2,0)
Ví dụ I-T3-46: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,127 (4,1); 8,085 (4,4); 7,738 (2,5); 7,732 (3,1); 7,702 (1,6); 7,697 (1,2); 7,681 (1,8); 7,676 (1,5); 7,625 (0,9); 7,551 (2,4); 7,543 (2,3); 7,495 (2,9); 7,474 (2,3); 2,453 (1,1); 2,435 (3,1); 2,416 (3,2); 2,397 (1,1); 2,158 (61,0); 2,114 (0,4); 2,108 (0,5); 2,092 (12,6); 1,964 (2,0); 1,958 (4,9); 1,953 (25,4); 1,946 (45,6); 1,940 (61,1); 1,934 (42,3); 1,928 (21,8); 1,769 (0,4); 1,598 (1,2); 1,583 (3,1); 1,576 (3,1); 1,563 (1,6); 1,437 (16,0); 1,358 (1,6); 1,345 (3,1); 1,338 (3,2); 1,323 (1,3); 1,269 (1,8); 1,083 (4,2); 1,064 (8,8); 1,045 (4,0); 0,146 (0,7); 0,017 (0,4); 0,008 (5,9); 0,000 (150,8); -0,009 (6,1); -0,150 (0,7)
Ví dụ I-T3-47: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,128 (3,6); 8,084 (3,8); 7,721 (2,0); 7,715 (2,5); 7,678 (1,2); 7,673 (1,0); 7,657 (1,4); 7,652 (1,2); 7,551 (2,1); 7,544 (2,1); 7,485 (2,4); 7,464 (2,2); 5,338 (0,6); 5,316 (1,1); 5,296 (1,1); 5,275 (0,6); 3,544 (1,4); 3,520 (2,8); 3,498 (1,8); 3,370 (1,7); 3,349 (2,6); 3,346 (2,4); 3,325 (1,4); 2,456 (0,9); 2,437 (2,6); 2,418 (2,7); 2,399 (0,9); 2,166 (9,4); 2,153 (19,8); 2,107 (0,4); 2,095 (10,7); 1,964 (1,2); 1,958 (3,1); 1,952 (15,2); 1,946 (27,1); 1,940 (36,2); 1,934 (25,2); 1,928 (13,1); 1,437 (16,0); 1,085 (3,2); 1,066 (6,7); 1,047 (3,1); 0,146 (0,4); 0,008 (3,9); 0,000 (86,8); -0,008 (4,3); -0,150 (0,5)
Ví dụ I-T3-48: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,261 (10,8); 8,206 (0,8); 8,193 (16,0); 7,692 (9,7); 7,686 (12,3); 7,675 (1,0); 7,657 (6,5); 7,652 (4,9); 7,637 (9,5); 7,630 (13,3); 7,608 (11,0); 7,475 (11,5); 7,455 (9,1); 6,940 (2,5); 3,911 (0,6); 2,882 (0,7); 2,872 (2,0); 2,863 (2,8); 2,854 (4,4); 2,845 (4,3); 2,836 (2,9); 2,827 (2,0); 2,817 (0,7); 2,467 (0,3); 2,463 (0,4); 2,163 (117,4); 2,120 (0,3); 2,114 (0,5); 2,108

(0,7); 2,102 (0,5); 1,972 (1,7); 1,965 (3,3); 1,959 (8,5); 1,953 (43,3); 1,947 (77,6); 1,941 (103,6); 1,934 (71,4); 1,928 (36,7); 1,775 (0,4); 1,769 (0,6); 1,763 (0,4); 1,437 (2,0); 1,269 (0,7); 1,221 (0,4); 1,204 (0,7); 1,186 (0,3); 0,795 (2,4); 0,783 (7,5); 0,778 (9,7); 0,765 (10,2); 0,760 (7,3); 0,748 (3,3); 0,726 (0,4); 0,708 (0,4); 0,654 (0,4); 0,644 (0,4); 0,614 (3,3); 0,604 (8,6); 0,597 (9,0); 0,593 (7,8); 0,588 (7,7); 0,575 (2,3); 0,514 (0,4); 0,146 (1,3); 0,026 (0,4); 0,008 (10,5); 0,000 (259,4); -0,009 (10,3); -0,150 (1,2)
Ví dụ I-T3-49: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,277 (10,6); 8,206 (16,0); 7,740 (9,1); 7,735 (12,1); 7,709 (6,2); 7,704 (4,7); 7,688 (7,6); 7,683 (7,1); 7,669 (3,6); 7,645 (1,5); 7,631 (10,9); 7,611 (10,7); 7,574 (0,5); 7,510 (11,0); 7,500 (0,6); 7,489 (9,0); 7,475 (0,4); 7,221 (0,4); 5,448 (8,3); 4,034 (0,9); 3,914 (1,0); 3,906 (0,7); 3,897 (0,5); 2,469 (1,1); 2,464 (1,5); 2,460 (1,1); 2,243 (0,4); 2,175 (509,2); 2,120 (1,2); 2,114 (1,7); 2,108 (2,0); 2,102 (1,5); 2,096 (0,9); 1,965 (8,1); 1,959 (21,5); 1,953 (116,7); 1,947 (211,5); 1,941 (284,4); 1,934 (197,6); 1,928 (103,4); 1,781 (0,8); 1,775 (1,3); 1,769 (1,8); 1,763 (1,3); 1,757 (0,7); 1,635 (0,4); 1,598 (4,6); 1,584 (12,3); 1,577 (12,3); 1,563 (6,3); 1,523 (0,8); 1,437 (0,7); 1,403 (0,8); 1,363 (6,4); 1,349 (12,1); 1,342 (12,8); 1,328 (4,9); 1,290 (0,6); 1,270 (2,7); 1,206 (1,3); 1,190 (1,2); 0,882 (0,3); 0,146 (3,5); 0,008 (26,4); 0,000 (693,0); -0,008 (31,4); -0,048 (0,4); -0,150 (3,5)
Ví dụ I-T3-50: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,131 (3,8); 8,120 (0,3); 8,108 (3,8); 7,670 (2,4); 7,664 (2,9); 7,636 (1,7); 7,630 (1,2); 7,615 (1,9); 7,609 (1,6); 7,462 (2,8); 7,441 (2,1); 7,320 (3,0); 7,300 (1,2); 6,909 (0,6); 4,085 (0,5); 4,068 (1,4); 4,050 (1,4); 4,032 (0,5); 3,901 (16,0); 2,870 (0,5); 2,861 (0,7); 2,852 (1,1); 2,843 (1,1); 2,834 (0,7); 2,825 (0,5); 2,147 (64,0); 2,114 (0,3); 2,107 (0,4); 1,972 (6,8); 1,964 (3,1); 1,958 (6,8); 1,952 (27,1); 1,946 (46,5); 1,940 (60,6); 1,934 (41,2); 1,928 (20,8); 1,768 (0,3); 1,437 (1,1); 1,221 (1,7); 1,204 (3,2); 1,186 (1,6); 0,793 (0,6); 0,781 (1,8); 0,776 (2,3); 0,763 (2,4); 0,758 (1,7); 0,746 (0,8); 0,610 (0,9); 0,599 (2,1); 0,593 (2,1); 0,589 (1,9); 0,584 (1,8); 0,571 (0,5); 0,146 (0,7); 0,008 (9,0); 0,000 (144,6); -0,009 (5,4); -0,150 (0,7)
Ví dụ I-T3-51: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,206 (0,4); 8,147 (3,5); 8,120 (3,6); 7,717 (2,2); 7,712 (2,8); 7,686 (1,6); 7,680 (1,3); 7,675 (0,4); 7,665 (2,0); 7,659 (1,9); 7,654 (0,6); 7,644 (0,5); 7,630 (0,5); 7,610 (0,3); 7,503 (0,4); 7,495 (2,6); 7,482 (0,3); 7,474 (2,1); 7,321 (2,8); 7,302 (1,1); 4,068 (0,9); 4,050 (0,9); 3,902 (16,0); 2,170 (60,8); 2,114 (0,4); 2,108 (0,5); 2,102 (0,3); 1,972 (4,1); 1,965 (2,3); 1,959 (5,7); 1,953 (31,1); 1,947 (56,0); 1,940 (74,9); 1,934 (51,0); 1,928 (25,9); 1,775 (0,3); 1,769 (0,4); 1,595 (1,1); 1,581 (2,7); 1,574 (2,7); 1,560 (1,5); 1,437 (1,0); 1,359 (1,5); 1,346 (2,7); 1,339 (2,8); 1,324 (1,1); 1,222 (1,1); 1,204 (2,1); 1,186 (1,0); 1,140 (0,5); 1,132 (0,6); 0,928 (0,6); 0,921 (0,6); 0,146 (0,8); 0,008 (7,0); 0,000 (187,7); -0,009 (6,3); -0,150 (0,8)

Ví dụ I-T3-52: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,276 (6,4); 8,163 (0,3); 8,151 (6,6); 8,149 (7,0); 8,128 (3,5); 8,104 (1,6); 8,082 (1,8); 7,863 (2,9); 7,842 (2,4); 7,694 (4,0); 7,689 (5,1); 7,680 (0,5); 7,660 (3,0); 7,654 (2,2); 7,639 (3,3); 7,633 (2,8); 7,474 (4,9); 7,454 (3,9); 6,935 (1,1); 4,086 (0,7); 4,068 (2,0); 4,050 (2,1); 4,032 (0,7); 2,873 (0,8); 2,863 (1,2); 2,855 (1,8); 2,845 (1,9); 2,836 (1,2); 2,827 (0,9); 2,165 (66,0); 2,163 (75,8); 1,972 (9,5); 1,965 (1,3); 1,959 (3,0); 1,953 (16,9); 1,947 (30,5); 1,941 (41,0); 1,935 (28,3); 1,928 (14,5); 1,436 (16,0); 1,269 (0,5); 1,221 (2,5); 1,204 (4,8); 1,186 (2,4); 0,796 (1,0); 0,784 (2,9); 0,778 (3,9); 0,766 (4,1); 0,761 (3,0); 0,748 (1,4); 0,613 (1,4); 0,602 (3,5); 0,596 (3,5); 0,592 (3,2); 0,587 (3,2); 0,574 (1,0); 0,008 (2,1); 0,000 (62,9); -0,009 (2,3)
Ví dụ I-T3-53: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,291 (3,8); 8,162 (4,2); 8,130 (2,0); 8,108 (0,9); 8,086 (1,0); 7,866 (1,8); 7,844 (1,5); 7,742 (2,5); 7,736 (3,2); 7,709 (2,0); 7,703 (1,5); 7,688 (2,7); 7,682 (2,4); 7,506 (3,0); 7,485 (2,4); 2,196 (8,5); 2,183 (24,4); 1,972 (1,1); 1,965 (0,6); 1,959 (1,4); 1,954 (7,8); 1,947 (14,2); 1,941 (19,1); 1,935 (13,1); 1,929 (6,7); 1,599 (1,3); 1,585 (3,1); 1,578 (3,1); 1,564 (1,7); 1,436 (16,0); 1,362 (1,7); 1,349 (3,0); 1,342 (3,1); 1,327 (1,3); 1,204 (0,6); 0,008 (1,6); 0,000 (44,8); -0,009 (1,6)
Ví dụ I-T3-54: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,162 (0,9); 8,153 (15,7); 8,108 (12,4); 7,996 (6,8); 7,952 (7,0); 7,683 (9,7); 7,678 (12,2); 7,666 (0,8); 7,650 (6,7); 7,644 (4,9); 7,629 (7,9); 7,624 (6,4); 7,513 (0,4); 7,469 (11,7); 7,448 (9,3); 6,931 (2,4); 5,448 (0,6); 4,235 (0,4); 4,218 (0,4); 4,086 (0,6); 4,068 (1,8); 4,057 (0,4); 4,050 (1,8); 4,032 (0,6); 2,879 (0,8); 2,870 (2,2); 2,860 (2,8); 2,852 (4,7); 2,842 (4,7); 2,834 (2,9); 2,824 (2,2); 2,814 (0,7); 2,473 (0,6); 2,468 (1,0); 2,463 (1,4); 2,459 (1,0); 2,454 (0,5); 2,276 (0,4); 2,264 (0,4); 2,245 (0,6); 2,226 (0,8); 2,159 (388,9); 2,116 (47,5); 2,108 (3,9); 2,101 (1,9); 2,095 (1,0); 2,050 (0,8); 2,035 (0,7); 2,017 (1,1); 1,998 (1,0); 1,972 (9,4); 1,964 (12,6); 1,958 (30,5); 1,953 (165,9); 1,946 (298,2); 1,940 (398,5); 1,934 (272,4); 1,928 (139,0); 1,915 (1,9); 1,781 (0,9); 1,775 (1,6); 1,769 (2,3); 1,762 (1,6); 1,756 (0,8); 1,509 (0,3); 1,437 (13,5); 1,341 (0,4); 1,307 (1,0); 1,289 (1,9); 1,269 (16,0); 1,222 (2,4); 1,204 (4,5); 1,186 (2,2); 0,898 (0,7); 0,881 (2,2); 0,864 (1,0); 0,793 (2,4); 0,780 (7,3); 0,775 (9,5); 0,762 (10,1); 0,757 (6,9); 0,745 (3,2); 0,723 (0,5); 0,705 (0,5); 0,650 (0,4); 0,640 (0,5); 0,631 (0,5); 0,626 (0,6); 0,610 (3,5); 0,600 (7,9); 0,598 (7,8); 0,593 (8,2); 0,588 (7,1); 0,583 (7,2); 0,571 (2,4); 0,523 (0,3); 0,393 (0,5); 0,385 (0,5); 0,381 (0,5); 0,376 (0,5); 0,146 (3,4); 0,008 (28,7); 0,000 (825,5); -0,009 (28,8); -0,030 (0,5); -0,150 (3,4)
Ví dụ I-T3-55: ^{1}H-NMR (601,6 MHz, CD3CN): δ= 8,166 (3,1); 8,165 (3,2); 8,124 (2,4); 8,000 (1,2); 7,954 (1,2); 7,732 (2,0); 7,729 (2,3);

7,697 (1,3); 7,693 (1,1); 7,683 (1,5); 7,679 (1,3); 7,499 (2,3); 7,485 (2,0); 2,180 (8,0); 2,177 (8,1); 2,175 (8,7); 2,172 (9,0); 2,169 (10,1); 2,167 (8,6); 2,163 (12,2); 2,117 (8,6); 1,973 (0,6); 1,966 (0,7); 1,958 (1,9); 1,954 (2,1); 1,950 (12,7); 1,946 (22,2); 1,942 (32,1); 1,938 (21,1); 1,934 (10,5); 1,591 (1,0); 1,581 (2,2); 1,577 (2,2); 1,568 (1,1); 1,436 (16,0); 1,354 (1,2); 1,345 (2,2); 1,341 (2,3); 1,331 (1,0); 1,204 (0,4); 0,005 (1,3); 0,000 (42,8); -0,006 (1,2)
Ví dụ I-T3-56: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,210 (7,6); 8,194 (0,9); 8,186 (15,9); 8,185 (16,0); 8,161 (0,7); 8,149 (14,1); 8,059 (7,6); 7,686 (9,6); 7,681 (12,3); 7,653 (6,8); 7,647 (5,0); 7,632 (7,9); 7,626 (6,5); 7,517 (0,3); 7,473 (11,6); 7,452 (9,1); 6,900 (2,7); 2,878 (0,7); 2,869 (2,1); 2,859 (2,9); 2,851 (4,6); 2,841 (4,6); 2,832 (2,9); 2,823 (2,2); 2,813 (0,7); 2,136 (41,9); 2,120 (0,5); 2,113 (0,6); 2,107 (0,8); 2,101 (0,5); 2,086 (0,4); 1,964 (15,3); 1,958 (9,2); 1,952 (49,0); 1,946 (88,5); 1,940 (118,3); 1,934 (80,8); 1,927 (41,2); 1,915 (0,5); 1,774 (0,5); 1,768 (0,7); 1,762 (0,5); 1,270 (0,4); 0,792 (2,4); 0,780 (7,2); 0,775 (9,6); 0,762 (10,1); 0,757 (7,0); 0,745 (3,3); 0,723 (0,4); 0,705 (0,4); 0,650 (0,4); 0,640 (0,4); 0,610 (3,3); 0,600 (8,0); 0,599 (8,0); 0,593 (8,4); 0,589 (7,4); 0,584 (7,5); 0,571 (2,4); 0,520 (0,4); 0,146 (0,9); 0,008 (7,4); 0,000 (218,3); -0,009 (7,6); -0,150 (0,9)
Ví dụ I-T3-57: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,211 (2,2); 8,197 (4,2); 8,163 (3,5); 8,060 (2,1); 7,735 (2,4); 7,730 (3,0); 7,704 (1,6); 7,699 (1,1); 7,683 (1,8); 7,678 (1,5); 7,553 (1,2); 7,508 (2,8); 7,487 (2,3); 2,133 (61,2); 2,113 (0,8); 2,107 (0,9); 2,101 (0,7); 2,095 (0,4); 1,964 (4,3); 1,958 (11,3); 1,952 (55,5); 1,946 (99,8); 1,940 (134,0); 1,934 (93,4); 1,927 (48,7); 1,774 (0,6); 1,768 (0,8); 1,762 (0,5); 1,596 (1,1); 1,582 (3,0); 1,575 (3,1); 1,561 (1,6); 1,437 (16,0); 1,361 (1,6); 1,348 (3,0); 1,341 (3,1); 1,326 (1,2); 1,269 (0,3); 0,146 (1,1); 0,008 (9,0); 0,000 (233,2); -0,009 (12,0); -0,150 (1,0)
Ví dụ I-T3-58: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,212 (1,1); 8,196 (2,4); 8,168 (2,0); 8,062 (1,1); 7,732 (1,4); 7,727 (2,0); 7,710 (1,1); 7,704 (0,7); 7,689 (1,2); 7,683 (1,0); 7,523 (1,8); 7,502 (1,4); 4,139 (0,4); 4,123 (0,4); 4,116 (1,2); 4,099 (1,2); 4,092 (1,3); 4,076 (1,2); 4,068 (0,5); 4,052 (0,4); 2,154 (2,8); 2,152 (3,0); 1,958 (0,6); 1,952 (3,2); 1,946 (5,8); 1,940 (7,8); 1,934 (5,3); 1,928 (2,7); 1,436 (16,0); 0,008 (0,5); 0,000 (14,4); -0,009 (0,5)
Ví dụ I-T3-59: ^{1}H-NMR (601,6 MHz, d_6-DMSO): δ= 19,976 (2,1); 9,451 (11,5); 9,045 (16,0); 8,978 (7,7); 8,792 (7,9); 8,789 (7,8); 8,502 (16,0); 8,320 (2,2); 7,918 (8,4); 7,914 (11,9); 7,904 (7,1); 7,900 (4,5); 7,890 (6,8); 7,886 (5,6); 7,573 (10,3); 7,560 (9,7); 4,034 (1,6); 4,022 (1,5); 3,338 (576,9); 2,615 (4,0); 2,524 (5,6); 2,521 (7,1); 2,518 (8,3); 2,509 (220,0); 2,506 (474,2); 2,503 (654,0); 2,500 (473,2); 2,497 (216,3); 2,387 (3,5); 1,990 (4,8); 1,615 (4,4); 1,606 (10,1); 1,602 (10,7); 1,593 (4,6); 1,398 (2,2);

1,300 (4,9); 1,291 (9,5); 1,286 (10,1); 1,277 (4,3); 1,175 (3,1); 0,096 (2,5); 0,005 (23,7); 0,000 (635,1); -0,006 (20,4); -0,100 (2,7)
Ví dụ I-T3-60: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, $CDCl_3$): δ= 8,687 (8,6); 8,685 (8,5); 8,596 (15,9); 8,577 (0,6); 8,173 (8,6); 8,168 (8,5); 8,114 (16,0); 7,901 (10,7); 7,896 (11,0); 7,567 (5,3); 7,561 (5,3); 7,555 (1,2); 7,546 (7,0); 7,540 (6,9); 7,483 (0,4); 7,426 (11,9); 7,406 (8,9); 7,264 (25,7); 6,415 (3,4); 5,301 (12,8); 2,991 (0,6); 2,982 (1,7); 2,973 (3,0); 2,964 (4,1); 2,955 (4,1); 2,946 (3,1); 2,937 (1,8); 2,928 (0,7); 1,601 (5,6); 1,378 (1,1); 1,333 (0,6); 1,327 (0,4); 1,285 (1,1); 1,255 (5,4); 0,938 (2,5); 0,921 (10,0); 0,907 (9,8); 0,903 (8,2); 0,890 (3,5); 0,880 (1,2); 0,868 (0,9); 0,862 (0,7); 0,850 (0,9); 0,836 (0,6); 0,742 (0,4); 0,733 (0,4); 0,703 (3,0); 0,689 (8,1); 0,685 (8,5); 0,680 (8,2); 0,676 (7,9); 0,662 (2,4); 0,557 (0,5); 0,551 (0,5); 0,008 (0,6); 0,000 (19,7); -0,008 (1,0)
Ví dụ I-T3-61: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,266 (6,2); 8,208 (0,5); 8,195 (8,9); 7,692 (5,7); 7,687 (6,8); 7,678 (0,7); 7,658 (3,7); 7,652 (2,8); 7,637 (4,3); 7,632 (3,5); 7,593 (5,8); 7,572 (5,8); 7,475 (6,2); 7,454 (4,9); 6,962 (1,7); 5,449 (0,9); 4,086 (0,3); 4,068 (1,1); 4,050 (1,1); 4,032 (0,4); 2,882 (0,4); 2,873 (1,2); 2,863 (1,6); 2,855 (2,6); 2,845 (2,6); 2,837 (1,7); 2,827 (1,2); 2,817 (0,4); 2,181 (57,5); 1,972 (4,8); 1,965 (1,5); 1,959 (3,8); 1,953 (16,3); 1,947 (29,0); 1,941 (37,9); 1,935 (26,4); 1,929 (13,7); 1,436 (16,0); 1,268 (0,8); 1,221 (1,3); 1,204 (2,5); 1,186 (1,2); 0,795 (1,3); 0,783 (4,5); 0,777 (5,6); 0,765 (5,9); 0,760 (4,4); 0,747 (1,8); 0,615 (1,8); 0,605 (5,0); 0,603 (5,0); 0,598 (5,5); 0,593 (4,9); 0,588 (4,6); 0,576 (1,4); 0,000 (58,7); -0,009 (3,0)
Ví dụ I-T3-62: ^{1}H-NMR (601,6 MHz, CD3CN): δ= 8,282 (5,8); 8,209 (9,7); 7,742 (5,2); 7,738 (6,1); 7,705 (3,5); 7,702 (2,9); 7,692 (4,0); 7,688 (3,5); 7,644 (0,8); 7,594 (5,2); 7,580 (5,1); 7,506 (6,4); 7,493 (5,6); 2,197 (13,4); 2,194 (14,8); 2,191 (16,6); 2,188 (16,2); 2,186 (16,6); 2,184 (16,2); 2,181 (15,5); 2,179 (16,7); 1,973 (1,0); 1,967 (1,1); 1,959 (2,7); 1,954 (3,0); 1,951 (18,5); 1,947 (31,7); 1,942 (46,4); 1,938 (30,9); 1,934 (15,5); 1,594 (2,6); 1,584 (6,6); 1,580 (6,4); 1,571 (3,2); 1,544 (0,3); 1,436 (16,0); 1,359 (3,2); 1,350 (6,2); 1,345 (6,8); 1,336 (2,7); 1,266 (0,4); 1,204 (0,5); 0,005 (1,2); 0,000 (39,8); -0,006 (1,3)
Ví dụ I-T3-63: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,666 (5,1); 8,523 (1,9); 8,512 (2,0); 8,389 (5,2); 7,850 (2,9); 7,814 (2,7); 7,736 (1,2); 7,730 (1,9); 7,710 (7,1); 7,511 (2,5); 7,490 (2,1); 3,327 (42,2); 2,856 (0,5); 2,846 (0,8); 2,838 (1,2); 2,828 (1,2); 2,819 (0,8); 2,810 (0,5); 2,671 (0,4); 2,506 (46,0); 2,502 (59,6); 2,498 (46,8); 2,438 (0,6); 2,329 (0,4); 2,203 (0,6); 2,188 (12,9); 1,398 (16,0); 0,727 (0,7); 0,714 (2,3); 0,709 (3,0); 0,697 (2,8); 0,691 (2,5); 0,680 (0,9); 0,560 (0,9); 0,549 (3,0); 0,543 (3,1); 0,534 (2,7); 0,522 (0,7); 0,000 (42,2)

Ví dụ I-T3-64: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,432 (2,1); 8,689 (2,8); 8,404 (2,9); 7,853 (1,5); 7,816 (1,5); 7,795 (0,6); 7,789 (1,2); 7,780 (1,7); 7,775 (2,6); 7,560 (1,6); 7,552 (0,4); 7,538 (1,4); 3,327 (22,2); 2,507 (17,7); 2,502 (23,3); 2,498 (17,9); 2,436 (0,3); 2,189 (6,9); 1,989 (0,4); 1,615 (0,7); 1,600 (1,8); 1,594 (1,9); 1,581 (0,8); 1,398 (16,0); 1,284 (0,8); 1,270 (1,8); 1,264 (2,0); 1,249 (0,7); 0,008 (0,7); 0,000 (19,4)
Ví dụ I-T3-65: ^{1}H-NMR (500,1 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,726 (2,4); 8,559 (1,7); 8,556 (1,8); 8,306 (2,2); 7,930 (0,7); 7,914 (1,5); 7,897 (0,8); 7,588 (3,9); 7,467 (1,5); 7,450 (1,4); 3,305 (13,5); 2,508 (2,9); 2,504 (6,0); 2,501 (8,2); 2,497 (6,1); 2,494 (3,0); 2,106 (16,0); 1,645 (0,8); 1,634 (2,0); 1,628 (2,1); 1,617 (0,8); 1,239 (1,1); 1,228 (2,0); 1,222 (2,1); 1,211 (0,8); 0,000 (5,4)
Ví dụ I-T3-66: ^{1}H-NMR (400,2 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,726 (4,5); 8,587 (3,6); 8,583 (3,6); 8,305 (4,5); 7,934 (1,5); 7,913 (3,1); 7,892 (1,7); 7,597 (3,1); 7,562 (3,1); 7,468 (3,1); 7,447 (2,9); 5,753 (0,4); 3,427 (0,5); 3,307 (130,4); 3,283 (0,9); 3,236 (0,8); 2,669 (0,5); 2,504 (61,2); 2,500 (82,9); 2,496 (61,6); 2,431 (1,1); 2,412 (3,4); 2,394 (3,5); 2,375 (1,2); 2,327 (0,5); 2,322 (0,4); 2,087 (16,0); 1,987 (0,6); 1,648 (1,6); 1,634 (4,0); 1,628 (4,2); 1,614 (1,7); 1,463 (0,4); 1,240 (2,1); 1,227 (4,0); 1,220 (4,2); 1,206 (1,5); 1,174 (0,4); 1,031 (5,0); 1,012 (10,6); 0,993 (4,8); 0,146 (0,6); 0,008 (5,8); 0,000 (128,9); -0,150 (0,6)
Ví dụ I-T3-67: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,778 (1,2); 8,767 (1,2); 8,544 (1,7); 8,539 (1,8); 8,297 (2,1); 7,876 (0,8); 7,855 (1,5); 7,834 (0,8); 7,593 (3,9); 7,418 (1,5); 7,397 (1,4); 3,903 (3,9); 3,331 (120,3); 2,855 (0,5); 2,846 (0,7); 2,836 (0,7); 2,827 (0,5); 2,818 (0,3); 2,676 (0,5); 2,671 (0,7); 2,667 (0,6); 2,524 (2,0); 2,511 (45,1); 2,507 (87,8); 2,502 (113,1); 2,498 (83,2); 2,333 (0,5); 2,329 (0,7); 2,324 (0,5); 2,120 (0,9); 2,105 (16,0); 0,752 (0,4); 0,739 (1,3); 0,734 (1,7); 0,721 (1,7); 0,716 (1,4); 0,704 (0,5); 0,522 (0,6); 0,511 (1,6); 0,505 (1,6); 0,501 (1,5); 0,496 (1,5); 0,483 (0,5); 0,000 (6,3)
Ví dụ I-T3-68: ^{1}H-NMR (500,1 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,752 (2,4); 8,743 (2,4); 8,561 (3,4); 8,558 (3,7); 8,289 (4,4); 7,868 (1,5); 7,851 (3,0); 7,834 (1,6); 7,597 (3,0); 7,563 (3,0); 7,411 (3,0); 7,394 (2,9); 3,304 (38,0); 2,861 (0,6); 2,854 (0,9); 2,847 (1,4); 2,839 (1,4); 2,831 (0,9); 2,824 (0,7); 2,507 (6,9); 2,504 (14,1); 2,500 (19,4); 2,497 (14,5); 2,493 (7,2); 2,426 (1,2); 2,411 (3,5); 2,396 (3,6); 2,381 (1,2); 2,101 (1,1); 2,089 (16,0); 1,029 (5,5); 1,013 (11,1); 0,998 (5,0); 0,746 (0,9); 0,736 (2,7); 0,732 (3,5); 0,722 (3,4); 0,718 (2,8); 0,708 (1,0); 0,521 (1,1); 0,512 (3,3); 0,508 (3,3); 0,505 (3,1); 0,500 (3,1); 0,490 (0,9); 0,006 (0,7); 0,000 (14,7); -0,007 (0,6)

Ví dụ I-T3-69: ^{1}H-NMR (400,2 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,352 (4,3); 8,553 (4,2); 8,286 (4,4); 7,965 (1,0); 7,946 (2,0); 7,927 (1,1); 7,601 (3,3); 7,567 (3,5); 7,478 (0,9); 7,460 (2,0); 7,444 (1,3); 7,350 (2,0); 7,331 (3,4); 7,312 (1,5); 3,342 (0,4); 3,308 (118,1); 3,290 (0,6); 2,669 (0,3); 2,504 (47,2); 2,500 (55,9); 2,496 (39,1); 2,443 (1,2); 2,425 (3,6); 2,406 (3,6); 2,387 (1,2); 2,327 (0,3); 2,097 (16,0); 1,595 (1,7); 1,581 (4,8); 1,574 (4,3); 1,561 (1,8); 1,293 (2,0); 1,279 (4,8); 1,273 (4,3); 1,258 (1,6); 1,236 (0,8); 1,041 (4,9); 1,022 (10,0); 1,003 (4,6); 0,000 (32,0); -0,008 (1,3)
Ví dụ I-T3-70: ^{1}H-NMR (400,2 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,528 (3,4); 8,524 (3,6); 8,456 (1,7); 8,445 (1,7); 8,270 (4,0); 7,896 (0,9); 7,891 (0,9); 7,877 (1,7); 7,873 (1,8); 7,858 (1,0); 7,854 (0,9); 7,598 (2,8); 7,565 (2,8); 7,403 (0,8); 7,399 (0,8); 7,384 (1,7); 7,368 (1,2); 7,364 (1,1); 7,303 (2,5); 7,284 (3,9); 7,265 (1,7); 3,309 (77,4); 2,875 (0,6); 2,866 (0,8); 2,857 (1,3); 2,847 (1,4); 2,839 (0,8); 2,829 (0,6); 2,509 (11,1); 2,505 (23,7); 2,500 (33,3); 2,496 (24,3); 2,491 (11,5); 2,442 (1,1); 2,423 (3,4); 2,404 (3,5); 2,386 (1,2); 2,096 (16,0); 1,236 (0,6); 1,040 (5,1); 1,021 (11,2); 1,002 (5,0); 0,725 (0,9); 0,712 (2,5); 0,707 (3,5); 0,695 (3,3); 0,689 (2,7); 0,677 (1,2); 0,557 (1,2); 0,546 (3,4); 0,540 (3,0); 0,536 (2,8); 0,530 (2,8); 0,518 (0,9); 0,008 (0,7); 0,000 (21,2); -0,009 (0,8)
Ví dụ I-T3-71: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,160 (3,6); 8,139 (3,7); 7,764 (2,0); 7,739 (2,0); 7,733 (2,7); 7,704 (1,3); 7,699 (1,2); 7,683 (3,4); 7,678 (2,3); 7,553 (1,2); 7,502 (2,4); 7,481 (1,9); 3,060 (0,5); 2,851 (0,5); 2,520 (0,8); 2,501 (2,5); 2,482 (2,5); 2,463 (0,9); 2,134 (30,8); 2,114 (0,4); 2,107 (0,5); 2,101 (0,4); 1,964 (2,0); 1,958 (4,9); 1,952 (28,1); 1,946 (52,7); 1,940 (72,6); 1,934 (52,6); 1,928 (28,4); 1,768 (0,4); 1,762 (0,3); 1,598 (1,0); 1,583 (2,5); 1,577 (2,7); 1,563 (1,4); 1,437 (16,0); 1,361 (1,3); 1,347 (2,7); 1,340 (2,9); 1,326 (1,1); 1,102 (3,5); 1,083 (7,4); 1,064 (3,4); 0,146 (0,4); 0,008 (3,1); 0,000 (97,3); -0,150 (0,4)
Ví dụ I-T3-72: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,150 (5,4); 8,130 (5,6); 7,764 (2,7); 7,689 (4,2); 7,684 (6,5); 7,655 (1,9); 7,650 (1,5); 7,634 (2,2); 7,629 (1,9); 7,469 (3,6); 7,448 (2,9); 6,939 (0,9); 2,871 (0,6); 2,862 (0,9); 2,853 (1,4); 2,843 (1,4); 2,834 (1,0); 2,825 (0,6); 2,518 (1,2); 2,499 (3,7); 2,480 (3,8); 2,462 (1,4); 2,168 (77,5); 2,114 (0,3); 2,108 (0,4); 1,965 (1,9); 1,959 (4,8); 1,953 (25,8); 1,947 (47,0); 1,941 (63,4); 1,935 (44,6); 1,929 (23,7); 1,769 (0,4); 1,437 (16,0); 1,100 (5,0); 1,081 (10,2); 1,062 (4,8); 0,794 (0,8); 0,781 (2,3); 0,776 (3,1); 0,763 (3,2); 0,758 (2,4); 0,746 (1,1); 0,611 (1,0); 0,600 (2,8); 0,594 (2,9); 0,590 (2,6); 0,585 (2,6); 0,572 (0,8); 0,146 (0,3); 0,008 (2,6); 0,000 (69,9); -0,008 (4,3); -0,149 (0,3)
Ví dụ I-T3-73: ^{1}H-NMR (400,1 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,77 (0,0325); 8,76 (0,0329); 8,67 (0,0447); 8,40 (0,0688); 8,07 (0,1396); 7,89 (0,0039);

7,88 (0,0202); 7,87 (0,0405); 7,43 (0,0406); 7,42 (0,0383); 3,78 (0,0029); 3,59 (0,0071); 3,30 (1,0000); 3,17 (0,0044); 3,16 (0,0042); 2,85 (0,0123); 2,84 (0,0187); 2,83 (0,0088); 2,64 (0,0025); 2,50 (0,4120); 2,37 (0,0016); 1,24 (0,0054); 0,73 (0,0482); 0,72 (0,0467); 0,71 (0,0149); 0,52 (0,0154); 0,50 (0,0420); 0,49 (0,0128); 0,12 (0,0012); 0,00 (0,2886); -0,12 (0,0012)
Ví dụ I-T3-74: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,381 (5,5); 8,653 (5,5); 8,317 (0,7); 8,293 (5,6); 7,988 (1,2); 7,984 (1,3); 7,969 (2,4); 7,965 (2,4); 7,950 (1,4); 7,946 (1,3); 7,747 (4,4); 7,734 (1,5); 7,713 (7,2); 7,706 (4,3); 7,683 (0,7); 7,493 (1,1); 7,489 (1,2); 7,474 (2,5); 7,458 (1,6); 7,454 (1,5); 7,362 (3,0); 7,343 (5,1); 7,324 (2,2); 3,903 (11,7); 3,333 (264,8); 3,267 (0,3); 3,174 (0,6); 3,162 (0,6); 2,802 (1,7); 2,783 (5,4); 2,765 (5,5); 2,746 (1,8); 2,676 (1,4); 2,672 (1,9); 2,667 (1,4); 2,542 (1,1); 2,525 (5,6); 2,511 (121,2); 2,507 (238,9); 2,503 (309,3); 2,498 (228,5); 2,494 (115,5); 2,334 (1,3); 2,329 (1,8); 2,325 (1,4); 1,603 (2,2); 1,589 (5,6); 1,582 (6,0); 1,569 (2,6); 1,298 (2,8); 1,285 (5,7); 1,278 (6,1); 1,264 (2,3); 1,237 (0,5); 1,060 (7,3); 1,042 (16,0); 1,023 (7,2); 0,008 (0,6); 0,000 (17,6); -0,008 (0,7)
Ví dụ I-T3-75: ^{1}H-NMR (400,2 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,621 (4,9); 8,618 (5,3); 8,463 (2,4); 8,452 (2,4); 8,277 (5,0); 8,274 (5,4); 7,913 (1,3); 7,909 (1,4); 7,894 (2,4); 7,890 (2,5); 7,875 (1,4); 7,871 (1,3); 7,742 (4,3); 7,730 (1,5); 7,709 (7,2); 7,702 (4,2); 7,679 (0,7); 7,416 (1,1); 7,412 (1,2); 7,397 (2,4); 7,381 (1,7); 7,377 (1,6); 7,313 (3,4); 7,294 (5,4); 7,275 (2,3); 3,333 (0,6); 3,324 (0,5); 3,307 (125,1); 3,285 (0,5); 2,879 (0,8); 2,870 (1,2); 2,861 (1,9); 2,851 (1,9); 2,842 (1,2); 2,833 (0,9); 2,822 (0,4); 2,798 (1,7); 2,780 (5,3); 2,761 (5,5); 2,742 (1,8); 2,509 (17,8); 2,505 (38,4); 2,500 (54,1); 2,496 (39,8); 2,491 (19,1); 2,327 (0,3); 1,235 (0,5); 1,061 (7,3); 1,042 (16,0); 1,023 (7,1); 0,729 (1,2); 0,716 (3,4); 0,711 (4,8); 0,699 (4,5); 0,693 (3,7); 0,682 (1,6); 0,562 (1,6); 0,552 (4,7); 0,546 (4,2); 0,542 (4,0); 0,536 (3,9); 0,524 (1,2); 0,008 (1,4); 0,000 (45,5); -0,009 (1,9)
Ví dụ I-T3-76: ^{1}H-NMR (400,1 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,531 (3,2); 9,102 (3,2); 9,096 (3,3); 8,822 (3,2); 8,817 (3,3); 8,727 (5,1); 8,442 (1,9); 8,436 (3,4); 8,428 (5,4); 7,617 (2,1); 7,582 (2,1); 5,759 (16,0); 3,568 (2,8); 3,437 (0,3); 3,424 (0,4); 3,326 (355,3); 3,303 (1,2); 2,711 (0,5); 2,675 (0,6); 2,670 (0,7); 2,667 (0,5); 2,557 (0,4); 2,554 (0,7); 2,552 (0,9); 2,551 (1,1); 2,541 (159,1); 2,530 (1,2); 2,528 (1,0); 2,527 (1,0); 2,524 (1,3); 2,510 (33,8); 2,506 (67,9); 2,502 (90,5); 2,497 (63,3); 2,493 (29,5); 2,458 (0,9); 2,440 (2,5); 2,421 (2,5); 2,402 (0,9); 2,368 (0,6); 2,333 (0,6); 2,329 (0,7); 2,324 (0,6); 2,111 (12,0); 2,086 (1,1); 1,629 (1,2); 1,615 (2,9); 1,608 (3,2); 1,595 (1,5); 1,346 (1,4); 1,332 (2,9); 1,325 (3,2); 1,311 (1,1); 1,072 (0,6); 1,055 (1,3); 1,048 (4,1); 1,037 (0,9); 1,029 (8,8); 1,010 (3,8); 0,008 (2,0); 0,000 (66,6); -0,008 (2,4); -0,014 (0,4)

Ví dụ I-T3-77: ^{1}H-NMR (400,1 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,043 (4,2); 9,038 (4,3); 8,798 (4,2); 8,793 (4,4); 8,705 (6,6); 8,645 (1,9); 8,635 (2,0); 8,409 (6,8); 8,389 (2,6); 8,384 (4,6); 8,379 (2,6); 7,613 (2,8); 7,580 (2,9); 5,759 (4,7); 3,327 (158,6); 2,902 (0,6); 2,892 (1,0); 2,884 (1,5); 2,874 (1,5); 2,866 (1,0); 2,856 (0,7); 2,671 (0,4); 2,541 (65,9); 2,511 (20,9); 2,506 (42,9); 2,502 (59,0); 2,498 (43,4); 2,493 (22,4); 2,458 (2,1); 2,438 (3,5); 2,419 (3,4); 2,401 (1,3); 2,367 (0,3); 2,329 (0,4); 2,110 (16,0); 2,086 (1,2); 1,989 (0,4); 1,072 (0,4); 1,055 (1,0); 1,048 (5,3); 1,029 (11,6); 1,010 (5,3); 0,763 (0,9); 0,750 (2,3); 0,745 (3,4); 0,733 (3,3); 0,727 (2,8); 0,716 (1,4); 0,617 (1,2); 0,607 (3,5); 0,600 (3,1); 0,591 (2,8); 0,579 (1,0); 0,008 (1,3); 0,000 (40,7); -0,008 (2,2)
Ví dụ I-T3-78: ^{1}H-NMR (400,1 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,542 (5,5); 9,127 (5,7); 9,122 (5,9); 8,857 (8,8); 8,834 (5,6); 8,829 (5,9); 8,472 (3,3); 8,467 (5,7); 8,461 (3,2); 8,434 (8,9); 7,757 (4,0); 7,724 (7,7); 7,699 (0,6); 5,759 (5,9); 4,020 (0,4); 3,611 (0,6); 3,568 (1,5); 3,426 (0,9); 3,326 (364,4); 3,303 (1,4); 3,235 (1,3); 2,821 (1,6); 2,802 (5,1); 2,783 (5,1); 2,765 (1,7); 2,711 (0,6); 2,670 (0,9); 2,666 (0,7); 2,541 (164,7); 2,510 (48,8); 2,506 (100,5); 2,502 (137,3); 2,497 (98,8); 2,493 (47,9); 2,367 (0,6); 2,329 (0,8); 1,989 (1,5); 1,633 (2,1); 1,619 (5,2); 1,612 (5,6); 1,599 (2,4); 1,350 (2,6); 1,337 (5,3); 1,330 (5,5); 1,316 (2,0); 1,234 (0,4); 1,192 (0,4); 1,174 (0,8); 1,156 (0,5); 1,146 (0,5); 1,069 (7,2); 1,050 (16,0); 1,032 (7,1); 0,146 (0,4); 0,008 (2,9); 0,000 (90,5); -0,008 (3,5)
Ví dụ I-T3-79: ^{1}H-NMR (500,1 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,064 (5,0); 9,059 (5,1); 8,821 (8,9); 8,811 (5,2); 8,807 (5,3); 8,630 (2,5); 8,622 (2,5); 8,413 (3,8); 8,408 (13,3); 7,748 (4,3); 7,738 (1,8); 7,721 (6,6); 7,712 (3,8); 7,695 (0,9); 5,752 (1,0); 3,305 (76,3); 3,281 (0,4); 2,910 (0,4); 2,902 (0,9); 2,895 (1,3); 2,888 (2,0); 2,880 (2,0); 2,873 (1,3); 2,865 (1,0); 2,858 (0,4); 2,813 (1,7); 2,798 (5,5); 2,783 (5,6); 2,768 (1,9); 2,508 (13,7); 2,504 (28,5); 2,501 (39,3); 2,497 (29,3); 2,494 (14,5); 1,908 (2,7); 1,236 (0,5); 1,068 (7,4); 1,053 (16,0); 1,038 (7,3); 0,761 (1,2); 0,751 (3,5); 0,747 (4,8); 0,737 (4,6); 0,733 (3,8); 0,723 (1,6); 0,620 (1,6); 0,612 (4,7); 0,607 (4,4); 0,604 (4,2); 0,599 (4,0); 0,589 (1,2); 0,006 (1,3); 0,000 (30,6); -0,007 (1,4)
Ví dụ I-T3-80: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,128 (2,6); 8,082 (2,8); 7,736 (1,6); 7,731 (2,1); 7,701 (1,1); 7,696 (0,8); 7,680 (1,2); 7,675 (1,1); 7,608 (0,4); 7,562 (1,4); 7,549 (1,4); 7,494 (1,9); 7,473 (1,5); 2,448 (0,6); 2,429 (1,9); 2,410 (2,0); 2,391 (0,7); 2,164 (9,8); 2,155 (20,2); 2,088 (7,6); 1,965 (1,0); 1,959 (2,5); 1,953 (13,9); 1,946 (25,4); 1,940 (34,2); 1,934 (24,1); 1,928 (12,6); 1,598 (0,8); 1,583 (2,0); 1,577 (2,0); 1,563 (1,1); 1,437 (16,0); 1,358 (1,0); 1,345 (2,0); 1,338 (2,1); 1,323 (0,8); 1,268 (0,7); 1,092 (2,7); 1,073 (5,7); 1,054 (2,6); 0,008 (1,1); 0,000 (34,6); -0,009 (1,5)
Ví dụ I-T3-81: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):

δ= 8,115 (7,2); 8,067 (7,4); 7,688 (4,4); 7,683 (5,6); 7,667 (0,5); 7,652 (3,0); 7,646 (2,4); 7,631 (3,5); 7,625 (3,0); 7,560 (4,1); 7,546 (4,1); 7,462 (5,2); 7,441 (4,2); 6,903 (1,2); 2,880 (0,3); 2,871 (0,9); 2,861 (1,3); 2,853 (2,1); 2,843 (2,1); 2,835 (1,3); 2,825 (1,0); 2,815 (0,4); 2,447 (1,8); 2,428 (5,5); 2,409 (5,7); 2,390 (1,9); 2,141 (55,3); 2,120 (1,0); 2,113 (0,9); 2,107 (1,0); 2,101 (0,9); 2,086 (21,5); 1,964 (4,2); 1,958 (10,5); 1,952 (54,5); 1,946 (98,5); 1,940 (132,1); 1,934 (92,1); 1,927 (48,4); 1,774 (0,5); 1,768 (0,8); 1,762 (0,5); 1,437 (1,3); 1,270 (1,0); 1,090 (7,7); 1,071 (16,0); 1,052 (7,4); 0,794 (1,1); 0,781 (3,3); 0,776 (4,4); 0,763 (4,7); 0,758 (3,4); 0,746 (1,6); 0,610 (1,5); 0,598 (3,8); 0,592 (4,0); 0,588 (3,6); 0,583 (3,6); 0,571 (1,1); 0,146 (1,8); 0,031 (0,4); 0,030 (0,4); 0,0272 (0,4); 0,0265 (0,4); 0,026 (0,4); 0,022 (0,6); 0,008 (16,0); 0,000 (381,4); -0,009 (18,6); -0,150 (1,8)
Ví dụ I-T3-82: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,127 (7,5); 8,085 (7,7); 7,734 (4,3); 7,729 (5,7); 7,708 (3,2); 7,703 (2,2); 7,688 (3,6); 7,682 (2,9); 7,561 (3,9); 7,548 (3,8); 7,512 (5,3); 7,491 (4,4); 7,365 (0,9); 4,141 (1,1); 4,124 (1,2); 4,117 (3,5); 4,100 (3,5); 4,093 (3,7); 4,077 (3,5); 4,070 (1,3); 4,053 (1,2); 2,462 (0,4); 2,457 (0,4); 2,450 (1,8); 2,431 (5,5); 2,412 (5,7); 2,393 (1,9); 2,150 (76,9); 2,120 (0,5); 2,113 (0,7); 2,107 (0,8); 2,101 (0,8); 2,090 (21,3); 1,964 (3,5); 1,958 (8,4); 1,952 (45,7); 1,946 (82,9); 1,940 (111,8); 1,934 (77,5); 1,927 (40,4); 1,774 (0,4); 1,768 (0,6); 1,762 (0,4); 1,437 (1,0); 1,269 (1,0); 1,093 (7,7); 1,074 (16,0); 1,055 (7,4); 0,146 (1,4); 0,008 (11,1); 0,000 (291,0); -0,009 (12,7); -0,150 (1,4)
Ví dụ I-T3-83: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,128 (7,9); 8,079 (8,4); 7,719 (4,9); 7,713 (6,1); 7,677 (3,1); 7,671 (2,5); 7,656 (3,5); 7,650 (3,1); 7,562 (4,8); 7,548 (4,7); 7,484 (5,6); 7,463 (5,1); 7,436 (1,2); 5,447 (1,2); 5,337 (1,3); 5,316 (2,5); 5,295 (2,5); 5,274 (1,3); 4,068 (0,4); 4,050 (0,4); 3,543 (3,2); 3,540 (2,1); 3,520 (6,4); 3,498 (4,2); 3,370 (4,2); 3,367 (2,8); 3,350 (6,2); 3,346 (5,9); 3,326 (3,3); 2,462 (0,3); 2,451 (2,0); 2,432 (6,0); 2,413 (6,2); 2,394 (2,1); 2,150 (115,6); 2,120 (0,5); 2,114 (0,7); 2,107 (0,9); 2,091 (23,5); 1,972 (1,9); 1,964 (3,0); 1,958 (7,9); 1,952 (39,4); 1,946 (71,5); 1,940 (96,0); 1,934 (68,4); 1,928 (36,7); 1,774 (0,4); 1,768 (0,6); 1,762 (0,4); 1,437 (2,7); 1,268 (1,0); 1,221 (0,4); 1,204 (0,8); 1,186 (0,4); 1,094 (7,8); 1,075 (16,0); 1,056 (7,5); 0,146 (1,1); 0,008 (9,8); 0,000 (220,9); -0,150 (1,1)
Ví dụ I-T3-84: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,162 (9,4); 8,125 (7,5); 7,997 (4,3); 7,952 (4,4); 7,729 (4,8); 7,724 (6,8); 7,707 (3,5); 7,701 (2,3); 7,686 (3,9); 7,680 (3,2); 7,519 (6,1); 7,498 (4,9); 7,348 (1,3); 4,140 (1,3); 4,123 (1,4); 4,116 (3,9); 4,100 (3,9); 4,092 (4,2); 4,076 (3,9); 4,069 (1,7); 4,052 (1,4); 2,146 (92,5); 2,120 (27,2); 2,108 (1,6); 2,101 (0,9); 2,095 (0,5); 1,971 (0,9); 1,964 (3,5); 1,958 (9,1); 1,952 (47,9); 1,946 (87,4); 1,940 (118,0); 1,934 (83,5); 1,928 (44,7); 1,774 (0,5); 1,768 (0,7); 1,762

(0,5); 1,437 (16,0); 1,270 (0,6); 0,146 (0,9); 0,008 (6,8); 0,000 (179,6); -0,008 (10,9); -0,150 (0,9)
Ví dụ I-T3-85: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,163 (5,2); 8,118 (4,2); 7,998 (2,5); 7,953 (2,5); 7,716 (3,0); 7,710 (3,7); 7,675 (1,9); 7,669 (1,5); 7,654 (2,2); 7,648 (1,9); 7,490 (3,5); 7,469 (2,8); 7,418 (0,8); 7,400 (0,8); 5,335 (0,8); 5,314 (1,6); 5,293 (1,6); 5,272 (0,8); 3,542 (2,0); 3,538 (1,3); 3,518 (4,0); 3,496 (2,6); 3,370 (2,6); 3,367 (1,7); 3,349 (3,8); 3,346 (3,6); 3,326 (2,0); 2,133 (15,0); 2,120 (15,4); 2,101 (0,5); 1,971 (1,1); 1,964 (1,7); 1,958 (4,3); 1,952 (19,7); 1,946 (35,3); 1,940 (47,2); 1,934 (33,6); 1,927 (18,1); 1,437 (16,0); 1,204 (0,4); 0,146 (0,4); 0,008 (3,9); 0,000 (78,7); -0,150 (0,4)
Ví dụ I-T3-86: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,252 (0,3); 8,146 (2,7); 8,110 (0,4); 8,102 (2,9); 7,899 (1,3); 7,708 (1,4); 7,690 (1,7); 7,685 (2,2); 7,655 (1,2); 7,649 (0,9); 7,634 (1,5); 7,628 (1,4); 7,468 (2,2); 7,447 (1,8); 6,891 (0,5); 2,871 (0,4); 2,862 (0,5); 2,853 (0,8); 2,843 (0,8); 2,835 (0,5); 2,825 (0,4); 2,415 (1,0); 2,171 (8,3); 2,132 (10,6); 1,971 (0,5); 1,964 (1,1); 1,958 (2,6); 1,952 (13,9); 1,946 (25,2); 1,940 (34,0); 1,933 (23,7); 1,927 (12,5); 1,437 (16,0); 1,269 (0,4); 0,794 (0,4); 0,781 (1,3); 0,776 (1,7); 0,764 (1,8); 0,758 (1,3); 0,746 (0,6); 0,611 (0,6); 0,599 (1,5); 0,593 (1,6); 0,589 (1,4); 0,584 (1,4); 0,571 (0,5); 0,008 (2,3); 0,000 (63,9); -0,009 (3,1)
Ví dụ I-T3-87: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,171 (11,0); 8,170 (11,0); 8,122 (12,2); 8,120 (11,4); 7,729 (6,8); 7,724 (8,7); 7,697 (4,9); 7,691 (3,7); 7,676 (5,6); 7,670 (4,6); 7,606 (16,0); 7,604 (15,8); 7,551 (3,2); 7,500 (8,3); 7,479 (6,7); 5,446 (0,7); 4,085 (0,6); 4,068 (2,0); 4,050 (2,0); 4,032 (0,7); 3,240 (0,6); 2,132 (42,8); 2,119 (0,5); 2,113 (0,7); 2,107 (0,9); 2,101 (0,6); 2,095 (0,3); 1,971 (9,0); 1,964 (4,0); 1,958 (10,1); 1,952 (56,8); 1,946 (103,2); 1,940 (138,6); 1,933 (95,2); 1,927 (49,0); 1,914 (0,7); 1,780 (0,3); 1,774 (0,6); 1,768 (0,8); 1,762 (0,6); 1,595 (3,6); 1,581 (8,5); 1,574 (8,5); 1,560 (4,6); 1,520 (0,5); 1,437 (11,1); 1,400 (0,6); 1,360 (4,7); 1,346 (8,6); 1,340 (8,8); 1,325 (3,6); 1,317 (0,8); 1,287 (0,4); 1,269 (1,4); 1,221 (2,5); 1,204 (4,7); 1,186 (2,3); 0,146 (1,8); 0,008 (14,1); 0,000 (400,9); -0,009 (15,1); -0,150 (1,8)
Ví dụ I-T3-88: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,160 (10,6); 8,111 (11,3); 7,681 (6,2); 7,675 (7,9); 7,647 (3,9); 7,642 (3,1); 7,627 (4,5); 7,621 (4,0); 7,605 (16,0); 7,467 (7,2); 7,447 (5,7); 6,936 (2,0); 5,448 (0,4); 4,067 (0,5); 4,049 (0,5); 2,879 (0,4); 2,869 (1,3); 2,860 (2,0); 2,851 (2,8); 2,842 (2,9); 2,833 (2,0); 2,824 (1,4); 2,814 (0,5); 2,467 (1,2); 2,462 (1,7); 2,458 (1,3); 2,253 (0,6); 2,226 (0,4); 2,158 (239,6); 2,120 (1,0); 2,113 (1,3); 2,107 (1,6); 2,101 (1,2); 2,095 (0,7); 1,971 (3,4); 1,964 (8,0); 1,958 (20,3); 1,952 (98,7); 1,946 (178,8); 1,940 (240,6); 1,934 (170,9); 1,928 (91,2); 1,781 (0,5);

1,774 (1,0); 1,768 (1,3); 1,762 (1,0); 1,756 (0,5); 1,437 (3,0); 1,269 (0,9); 1,221 (0,5); 1,203 (1,0); 1,185 (0,5); 0,792 (1,7); 0,779 (4,8); 0,774 (6,6); 0,761 (6,5); 0,756 (5,1); 0,744 (2,2); 0,610 (2,2); 0,599 (6,0); 0,592 (6,3); 0,583 (5,4); 0,571 (1,6); 0,146 (3,3); 0,007 (29,1); 0,000 (640,2); -0,150 (3,3)
Ví dụ I-T3-89: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,437 (11,1); 8,788 (15,9); 8,367 (16,0); 8,317 (0,8); 7,986 (0,4); 7,903 (6,6); 7,897 (6,7); 7,824 (9,1); 7,810 (13,0); 7,805 (11,4); 7,802 (13,2); 7,797 (8,0); 7,791 (3,7); 7,614 (3,7); 7,610 (3,5); 7,591 (2,9); 7,588 (2,9); 7,560 (9,0); 7,551 (1,7); 7,546 (1,5); 7,537 (7,7); 3,903 (8,5); 3,332 (418,5); 3,174 (0,7); 3,162 (0,6); 2,676 (2,0); 2,671 (2,7); 2,667 (2,1); 2,541 (1,6); 2,507 (359,7); 2,502 (464,1); 2,498 (346,7); 2,333 (2,1); 2,329 (2,9); 2,325 (2,2); 1,618 (3,7); 1,604 (9,3); 1,597 (9,9); 1,584 (4,2); 1,543 (0,4); 1,327 (0,4); 1,287 (4,3); 1,274 (9,4); 1,267 (9,9); 1,253 (3,8); 1,234 (1,5); 1,215 (0,5); 1,181 (0,4); 1,177 (0,4); 0,861 (0,4); 0,853 (0,4); 0,843 (0,4); 0,834 (0,4); 0,824 (0,4); 0,813 (0,3); 0,008 (0,9); 0,000 (24,6); -0,008 (1,1)
Ví dụ I-T3-90: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,565 (0,4); 8,349 (0,6); 8,333 (14,0); 8,123 (0,6); 8,109 (13,1); 8,096 (0,6); 7,904 (0,4); 7,881 (0,4); 7,712 (8,7); 7,689 (16,0); 7,683 (10,7); 7,672 (1,0); 7,654 (5,5); 7,648 (4,2); 7,633 (6,1); 7,627 (5,3); 7,617 (5,0); 7,611 (5,5); 7,475 (0,5); 7,467 (9,7); 7,454 (0,7); 7,446 (9,4); 7,438 (3,3); 7,422 (2,4); 7,419 (2,6); 7,416 (2,5); 6,891 (2,1); 5,446 (0,4); 3,899 (0,6); 2,881 (0,6); 2,872 (1,7); 2,862 (2,4); 2,854 (3,8); 2,844 (3,9); 2,835 (2,5); 2,826 (1,8); 2,816 (0,6); 2,132 (62,2); 2,113 (1,1); 2,107 (1,3); 2,101 (0,9); 2,095 (0,5); 1,996 (0,3); 1,971 (0,9); 1,964 (5,7); 1,958 (14,2); 1,952 (81,0); 1,946 (147,9); 1,940 (200,1); 1,933 (139,4); 1,927 (72,6); 1,780 (0,5); 1,774 (0,8); 1,768 (1,1); 1,762 (0,8); 1,756 (0,4); 1,268 (2,3); 0,881 (0,3); 0,796 (2,0); 0,783 (5,8); 0,778 (7,9); 0,765 (8,2); 0,760 (6,0); 0,748 (2,8); 0,726 (0,4); 0,709 (0,4); 0,653 (0,3); 0,643 (0,3); 0,613 (2,8); 0,601 (6,7); 0,595 (7,1); 0,591 (6,3); 0,586 (6,3); 0,574 (2,0); 0,146 (2,4); 0,008 (17,6); 0,000 (508,1); -0,009 (24,9); -0,150 (2,4)
Ví dụ I-T3-91: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,837 (3,4); 8,831 (3,6); 8,747 (6,3); 8,532 (1,9); 8,521 (2,0); 8,474 (6,2); 8,100 (9,7); 7,954 (3,3); 7,949 (3,5); 4,109 (0,4); 4,095 (0,4); 3,904 (16,0); 3,335 (287,0); 3,267 (0,5); 3,243 (0,4); 3,174 (2,4); 3,162 (2,5); 2,877 (0,6); 2,868 (0,9); 2,859 (1,3); 2,849 (1,3); 2,840 (0,9); 2,831 (0,6); 2,676 (1,0); 2,671 (1,3); 2,667 (1,0); 2,507 (156,9); 2,502 (206,2); 2,498 (158,4); 2,334 (0,9); 2,329 (1,2); 2,325 (0,9); 1,258 (0,4); 1,002 (1,3); 0,986 (1,2); 0,740 (0,8); 0,727 (2,3); 0,722 (3,1); 0,710 (2,9); 0,704 (2,4); 0,693 (1,0); 0,568 (1,0); 0,558 (3,1); 0,552 (2,9); 0,548 (2,7); 0,542 (2,5); 0,530 (0,7); 0,000 (1,8)
Ví dụ I-T3-92: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,415 (4,9); 8,892 (4,2); 8,886 (4,4); 8,765 (7,6); 8,488 (7,3); 8,104 (11,7); 8,044 (4,2);

8,039 (4,3); 3,904 (16,0); 3,593 (0,4); 3,336 (427,9); 3,173 (1,6); 3,163 (1,6); 2,676 (1,4); 2,672 (1,7); 2,667 (1,3); 2,518 (32,9); 2,511 (114,6); 2,507 (211,5); 2,503 (266,6); 2,498 (196,7); 2,334 (1,1); 2,329 (1,5); 2,325 (1,1); 1,613 (1,8); 1,599 (4,5); 1,592 (4,8); 1,579 (2,0); 1,315 (2,1); 1,301 (4,6); 1,295 (4,7); 1,280 (1,7); 1,235 (0,3); 0,000 (2,1)
Ví dụ I-T3-93: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,187 (3,1); 8,146 (3,3); 7,899 (4,8); 7,653 (1,3); 7,648 (2,7); 7,639 (0,5); 7,624 (1,5); 7,618 (1,0); 7,462 (1,9); 7,441 (1,5); 7,115 (0,7); 5,449 (1,2); 4,068 (0,5); 4,050 (0,5); 2,174 (33,4); 1,972 (2,4); 1,965 (0,8); 1,959 (1,9); 1,953 (10,3); 1,947 (18,6); 1,941 (24,9); 1,934 (16,9); 1,928 (8,7); 1,448 (9,5); 1,437 (16,0); 1,270 (0,5); 1,221 (0,6); 1,204 (1,2); 1,186 (0,6); 0,837 (0,7); 0,824 (2,1); 0,820 (2,2); 0,808 (0,9); 0,673 (1,1); 0,661 (2,4); 0,656 (2,5); 0,644 (0,8); 0,008 (0,4); 0,000 (10,3); -0,009 (0,3)
Ví dụ I-T3-94: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,149 (5,3); 8,106 (4,3); 7,996 (2,3); 7,951 (2,4); 7,645 (2,3); 7,639 (5,5); 7,632 (0,8); 7,618 (2,7); 7,612 (1,8); 7,457 (3,0); 7,436 (2,4); 7,098 (1,2); 2,468 (0,4); 2,464 (0,5); 2,459 (0,4); 2,165 (184,2); 2,116 (15,3); 2,102 (0,5); 1,972 (1,1); 1,965 (3,0); 1,959 (7,6); 1,953 (41,5); 1,947 (74,8); 1,940 (100,0); 1,934 (68,4); 1,928 (35,0); 1,775 (0,4); 1,769 (0,6); 1,763 (0,4); 1,447 (16,0); 1,437 (3,0); 1,270 (2,2); 1,204 (0,3); 0,835 (1,1); 0,822 (3,7); 0,818 (3,8); 0,807 (1,5); 0,673 (1,8); 0,662 (4,3); 0,656 (4,3); 0,644 (1,3); 0,008 (1,2); 0,000 (38,1); -0,009 (1,4)
Ví dụ I-T3-95: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,596 (2,3); 8,893 (2,0); 8,887 (2,0); 8,791 (3,3); 8,545 (3,3); 8,315 (0,5); 8,300 (2,2); 8,294 (2,3); 8,283 (5,7); 4,038 (0,4); 4,020 (0,4); 3,322 (38,3); 2,671 (0,6); 2,502 (83,6); 2,328 (0,6); 1,989 (1,8); 1,643 (0,8); 1,628 (2,2); 1,621 (2,3); 1,609 (0,9); 1,398 (16,0); 1,298 (1,0); 1,285 (2,2); 1,278 (2,3); 1,264 (0,8); 1,193 (0,5); 1,175 (0,9); 1,157 (0,5); 0,146 (0,4); 0,000 (75,9); -0,150 (0,4)
Ví dụ I-T3-96: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,838 (2,0); 8,833 (2,0); 8,618 (3,2); 8,513 (1,0); 8,502 (1,0); 8,377 (3,3); 7,954 (1,9); 7,949 (1,9); 7,596 (3,6); 4,104 (0,3); 3,903 (10,1); 3,409 (0,5); 3,350 (346,6); 3,302 (0,5); 3,175 (1,8); 3,162 (1,8); 2,865 (0,4); 2,857 (0,7); 2,847 (0,7); 2,838 (0,4); 2,677 (0,4); 2,672 (0,6); 2,668 (0,4); 2,526 (1,8); 2,512 (37,4); 2,508 (74,7); 2,503 (97,3); 2,499 (71,2); 2,494 (35,6); 2,489 (12,6); 2,335 (0,4); 2,330 (0,6); 2,325 (0,5); 2,117 (16,0); 1,003 (0,6); 0,987 (0,6); 0,739 (0,5); 0,726 (1,2); 0,721 (1,7); 0,709 (1,6); 0,703 (1,3); 0,692 (0,6); 0,568 (0,6); 0,557 (1,7); 0,551 (1,5); 0,547 (1,4); 0,542 (1,4); 0,529 (0,4); 0,000 (0,7)
Ví dụ I-T3-97: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,395 (2,2); 8,892 (2,0); 8,886 (2,0); 8,640 (3,3); 8,391 (3,4); 8,040 (1,9); 8,035 (1,9);

7,599 (3,7); 4,108 (0,5); 4,095 (0,5); 3,904 (10,2); 3,333 (130,8); 3,174 (2,4); 3,161 (2,4); 2,676 (0,4); 2,671 (0,6); 2,667 (0,5); 2,541 (0,4); 2,525 (1,8); 2,511 (39,6); 2,507 (81,0); 2,502 (95,3); 2,498 (69,0); 2,493 (34,2); 2,334 (0,4); 2,329 (0,6); 2,324 (0,4); 2,118 (16,0); 1,613 (0,8); 1,599 (1,9); 1,592 (2,1); 1,579 (0,9); 1,311 (0,9); 1,297 (2,0); 1,291 (2,1); 1,276 (0,8); 1,002 (0,5); 0,987 (0,5); 0,000 (1,2)
Ví dụ I-T3-98: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,839 (6,0); 8,833 (6,2); 8,791 (0,5); 8,781 (9,8); 8,692 (3,1); 8,681 (3,2); 8,549 (0,5); 8,540 (9,8); 8,282 (16,0); 8,217 (6,2); 8,210 (6,1); 5,756 (1,1); 3,326 (37,2); 2,871 (0,8); 2,861 (1,2); 2,852 (1,8); 2,842 (1,9); 2,833 (1,2); 2,824 (0,9); 2,814 (0,3); 2,671 (0,4); 2,525 (0,9); 2,511 (20,9); 2,507 (43,3); 2,502 (58,6); 2,498 (44,1); 2,494 (22,5); 2,329 (0,4); 1,989 (0,4); 1,397 (0,4); 0,757 (1,2); 0,744 (3,4); 0,739 (4,7); 0,726 (4,5); 0,721 (3,8); 0,709 (1,5); 0,568 (1,5); 0,557 (4,5); 0,551 (4,2); 0,548 (4,1); 0,542 (3,9); 0,530 (1,2); 0,146 (0,5); 0,008 (3,4); 0,000 (97,0); -0,008 (4,2); -0,150 (0,5)
Ví dụ I-T3-99: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,851 (0,6); 8,845 (0,8); 8,840 (3,5); 8,834 (3,6); 8,770 (6,0); 8,525 (5,8); 8,337 (3,6); 8,331 (3,5); 8,283 (11,0); 8,226 (0,6); 8,220 (0,6); 3,328 (25,7); 3,030 (16,0); 2,798 (0,7); 2,790 (0,8); 2,781 (1,3); 2,771 (0,9); 2,758 (2,9); 2,543 (55,4); 2,525 (0,6); 2,508 (28,1); 2,503 (37,2); 2,499 (27,6); 0,814 (0,3); 0,773 (0,4); 0,604 (0,5); 0,585 (2,1); 0,576 (2,8); 0,566 (1,0); 0,543 (1,2); 0,532 (2,2); 0,514 (2,0); 0,501 (0,4); 0,495 (0,4); 0,008 (1,0); 0,000 (28,2); -0,008 (1,0)
Ví dụ I-T3-100: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,826 (5,3); 8,817 (2,9); 8,811 (2,8); 8,531 (4,2); 8,320 (2,7); 8,314 (2,7); 8,206 (0,4); 8,200 (0,4); 8,111 (7,7); 3,904 (16,0); 3,395 (0,6); 3,337 (288,8); 3,257 (0,4); 3,243 (0,4); 3,175 (0,9); 3,162 (1,0); 3,029 (12,3); 2,795 (0,5); 2,788 (0,6); 2,778 (1,0); 2,768 (0,8); 2,757 (2,2); 2,676 (0,8); 2,672 (1,1); 2,668 (0,8); 2,512 (73,1); 2,507 (138,1); 2,503 (175,3); 2,499 (129,8); 2,334 (0,7); 2,330 (1,0); 2,325 (0,7); 1,002 (1,0); 0,987 (1,0); 0,833 (0,4); 0,815 (0,3); 0,603 (0,4); 0,584 (1,7); 0,574 (2,2); 0,565 (0,8); 0,542 (0,9); 0,531 (1,7); 0,513 (1,5); 0,000 (1,8)
Ví dụ I-T3-101: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,828 (0,4); 8,823 (0,4); 8,815 (2,1); 8,809 (2,2); 8,690 (3,8); 8,442 (0,7); 8,435 (3,3); 8,293 (2,2); 8,287 (2,1); 8,190 (0,4); 8,184 (0,3); 7,603 (4,3); 3,904 (8,8); 3,339 (233,4); 3,175 (0,6); 3,162 (0,6); 3,027 (9,9); 2,795 (0,4); 2,787 (0,5); 2,778 (0,8); 2,768 (0,6); 2,756 (1,8); 2,676 (0,6); 2,672 (0,8); 2,667 (0,6); 2,512 (51,7); 2,507 (99,0); 2,503 (126,8); 2,498 (93,4); 2,494 (47,1); 2,334 (0,6); 2,330 (0,8); 2,325 (0,6); 2,130 (16,0); 2,122 (3,6); 1,002 (0,4); 0,987 (0,4); 0,583 (1,3); 0,574 (1,7); 0,565 (0,6); 0,543 (0,7); 0,531 (1,3); 0,514 (1,1);

0,000 (0,9)
Ví dụ I-T3-102: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,908 (0,7); 8,879 (2,4); 8,874 (2,4); 8,833 (4,2); 8,820 (1,2); 8,538 (3,8); 8,496 (1,0); 8,431 (0,7); 8,427 (0,7); 8,288 (2,4); 8,283 (2,4); 8,111 (9,5); 3,904 (16,0); 3,591 (0,4); 3,341 (514,4); 3,175 (1,0); 3,162 (1,0); 3,136 (2,9); 2,914 (11,4); 2,676 (1,1); 2,672 (1,5); 2,668 (1,1); 2,507 (189,0); 2,503 (242,9); 2,499 (186,3); 2,334 (1,1); 2,330 (1,5); 2,326 (1,1); 1,713 (2,7); 1,489 (2,0); 0,000 (2,0)
Ví dụ I-T3-103: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,907 (0,4); 8,878 (1,3); 8,872 (1,3); 8,702 (2,2); 8,685 (0,6); 8,443 (2,1); 8,406 (0,9); 8,270 (1,3); 8,264 (1,3); 7,604 (4,3); 3,904 (12,6); 3,395 (0,4); 3,338 (210,6); 3,270 (0,4); 3,256 (0,3); 3,175 (0,8); 3,162 (0,9); 3,133 (1,6); 2,915 (6,3); 2,676 (0,6); 2,672 (0,8); 2,668 (0,6); 2,525 (2,1); 2,507 (102,9); 2,503 (131,5); 2,498 (97,6); 2,334 (0,7); 2,330 (0,9); 2,325 (0,6); 2,122 (16,0); 1,718 (1,3); 1,713 (1,4); 1,484 (1,0); 1,002 (0,8); 0,987 (0,8); 0,000 (1,9)
Ví dụ I-T3-104: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,865 (9,2); 8,857 (0,5); 8,845 (6,3); 8,839 (6,4); 8,694 (3,1); 8,683 (3,1); 8,470 (0,5); 8,459 (9,4); 8,229 (6,5); 8,223 (6,4); 7,751 (4,6); 7,728 (0,3); 7,710 (11,3); 4,457 (0,4); 4,403 (0,4); 4,392 (0,4); 4,121 (0,3); 4,108 (1,0); 4,095 (1,0); 4,082 (0,4); 3,904 (15,4); 3,395 (0,4); 3,334 (355,6); 3,243 (0,4); 3,175 (4,8); 3,161 (4,8); 2,883 (0,3); 2,873 (0,9); 2,864 (1,2); 2,855 (1,9); 2,845 (1,9); 2,836 (1,2); 2,827 (0,9); 2,816 (0,5); 2,807 (1,7); 2,788 (5,3); 2,769 (5,4); 2,751 (1,8); 2,680 (0,6); 2,676 (1,1); 2,671 (1,4); 2,667 (1,1); 2,542 (1,0); 2,525 (4,5); 2,511 (90,6); 2,507 (178,4); 2,502 (231,0); 2,498 (168,2); 2,494 (82,9); 2,334 (1,0); 2,329 (1,4); 2,325 (1,0); 1,056 (7,2); 1,038 (16,0); 1,019 (7,1); 1,002 (1,6); 0,987 (1,5); 0,759 (1,2); 0,746 (3,5); 0,741 (4,8); 0,729 (4,5); 0,723 (3,7); 0,711 (1,5); 0,568 (1,5); 0,557 (4,5); 0,551 (4,3); 0,547 (4,0); 0,542 (3,9); 0,529 (1,2); 0,000 (3,5)
Ví dụ I-T3-105: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,606 (5,9); 8,899 (6,1); 8,893 (6,2); 8,882 (8,7); 8,466 (9,0); 8,308 (6,0); 8,302 (5,8); 7,753 (4,6); 7,730 (0,3); 7,712 (11,2); 3,904 (12,3); 3,332 (328,2); 3,175 (1,4); 3,161 (1,4); 3,047 (0,5); 2,866 (0,5); 2,807 (1,7); 2,789 (5,3); 2,770 (5,4); 2,751 (1,8); 2,676 (1,1); 2,671 (1,5); 2,667 (1,1); 2,524 (4,8); 2,511 (97,8); 2,507 (190,1); 2,502 (244,3); 2,498 (178,1); 2,493 (87,7); 2,333 (1,1); 2,329 (1,5); 2,324 (1,1); 1,650 (2,1); 1,636 (5,3); 1,629 (5,6); 1,616 (2,3); 1,295 (2,5); 1,281 (5,3); 1,275 (5,7); 1,260 (2,1); 1,055 (7,3); 1,037 (16,0); 1,018 (7,1); 0,000 (3,2)
Ví dụ I-T3-106: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,824 (4,0); 8,818 (4,1); 8,781 (4,7); 8,694 (1,9); 8,683 (1,9); 8,515 (6,0); 8,223 (2,4); 8,196 (4,1); 8,190 (4,0); 7,937 (2,5); 4,456 (0,3); 4,402 (0,4); 4,391 (0,4); 4,107 (0,7); 4,094

(0,8); 3,904 (16,0); 3,332 (223,1); 3,243 (0,4); 3,174 (4,3); 3,161 (4,4); 2,868 (0,5); 2,859 (0,8); 2,850 (1,2); 2,840 (1,2); 2,831 (0,8); 2,822 (0,6); 2,676 (0,9); 2,671 (1,2); 2,667 (0,9); 2,541 (0,7); 2,525 (3,7); 2,511 (78,4); 2,507 (154,9); 2,502 (201,4); 2,498 (148,3); 2,493 (74,4); 2,334 (0,9); 2,329 (1,2); 2,325 (0,9); 2,147 (13,7); 1,002 (1,6); 0,987 (1,6); 0,755 (0,8); 0,742 (2,2); 0,737 (3,1); 0,725 (2,9); 0,719 (2,4); 0,708 (1,0); 0,563 (1,0); 0,552 (2,9); 0,546 (2,7); 0,542 (2,6); 0,536 (2,5); 0,524 (0,8); 0,000 (2,7)
Ví dụ I-T3-107: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,833 (0,5); 8,826 (0,6); 8,819 (2,8); 8,813 (2,8); 8,770 (3,5); 8,503 (0,9); 8,495 (4,3); 8,312 (2,8); 8,306 (2,6); 8,223 (2,0); 8,207 (0,5); 8,201 (0,4); 7,939 (2,1); 3,904 (16,0); 3,332 (177,8); 3,175 (1,5); 3,162 (1,6); 3,027 (12,7); 2,794 (0,5); 2,787 (0,6); 2,778 (1,0); 2,767 (0,8); 2,760 (2,8); 2,751 (0,4); 2,676 (0,8); 2,672 (1,0); 2,667 (0,7); 2,525 (3,3); 2,511 (67,3); 2,507 (128,5); 2,503 (163,4); 2,498 (118,9); 2,494 (59,0); 2,334 (0,7); 2,329 (1,0); 2,325 (0,7); 2,158 (9,9); 1,002 (1,1); 0,987 (1,1); 0,830 (0,3); 0,813 (0,3); 0,606 (0,4); 0,586 (1,6); 0,577 (2,2); 0,568 (0,8); 0,545 (1,0); 0,534 (1,7); 0,516 (1,5); 0,000 (2,1)
Ví dụ I-T3-108: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,604 (5,0); 8,878 (4,1); 8,872 (4,2); 8,793 (5,7); 8,519 (7,0); 8,277 (4,3); 8,271 (4,2); 8,225 (3,2); 7,938 (3,2); 4,458 (0,3); 4,404 (0,4); 4,393 (0,4); 4,123 (0,4); 4,110 (1,1); 4,097 (1,1); 4,083 (0,4); 3,904 (16,0); 3,433 (0,4); 3,337 (510,1); 3,270 (0,6); 3,256 (0,4); 3,242 (0,4); 3,175 (4,2); 3,162 (4,3); 3,043 (0,4); 2,872 (0,4); 2,672 (1,4); 2,506 (184,9); 2,503 (232,7); 2,499 (181,4); 2,329 (1,4); 2,148 (15,6); 1,643 (1,6); 1,629 (4,1); 1,622 (4,4); 1,609 (1,8); 1,293 (1,8); 1,280 (4,1); 1,273 (4,3); 1,259 (1,6); 1,002 (1,2); 0,987 (1,2); 0,000 (0,9)
Ví dụ I-T3-109: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,821 (4,5); 8,815 (4,5); 8,727 (6,7); 8,683 (2,3); 8,672 (2,3); 8,456 (6,9); 8,191 (4,6); 8,185 (4,4); 7,611 (3,0); 7,577 (3,0); 4,112 (0,4); 4,099 (0,5); 3,904 (16,0); 3,433 (0,3); 3,422 (0,4); 3,341 (478,8); 3,283 (0,5); 3,272 (0,4); 3,269 (0,4); 3,257 (0,4); 3,243 (0,3); 3,175 (2,2); 3,162 (2,3); 2,868 (0,6); 2,858 (0,9); 2,850 (1,4); 2,840 (1,4); 2,831 (0,9); 2,821 (0,7); 2,676 (0,9); 2,672 (1,2); 2,667 (0,9); 2,542 (0,7); 2,525 (3,9); 2,511 (83,9); 2,507 (159,5); 2,503 (202,9); 2,498 (149,6); 2,443 (1,3); 2,424 (3,5); 2,405 (3,5); 2,387 (1,2); 2,334 (0,9); 2,330 (1,2); 2,325 (0,9); 2,096 (16,0); 1,169 (1,4); 1,035 (5,1); 1,016 (10,9); 1,002 (2,2); 0,997 (5,0); 0,987 (1,4); 0,755 (0,9); 0,742 (2,7); 0,737 (3,5); 0,725 (3,4); 0,719 (2,8); 0,708 (1,1); 0,563 (1,1); 0,553 (3,4); 0,547 (3,3); 0,543 (3,1); 0,537 (3,0); 0,525 (0,9); 0,000 (2,0)
Ví dụ I-T3-110: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,594 (4,6); 8,875 (3,8); 8,869 (3,9); 8,742 (6,3); 8,462 (6,5); 8,272 (3,9); 8,266 (3,9); 7,613 (3,3); 7,578 (3,3); 4,108 (0,5); 4,095 (0,5); 3,904 (12,4); 3,405 (0,3); 3,334 (307,0); 3,269 (0,5); 3,256 (0,4); 3,242 (0,4); 3,175 (2,2); 3,161 (2,3); 3,043 (0,4); 2,871 (0,4); 2,671

(1,3); 2,502 (210,6); 2,445 (1,6); 2,426 (3,6); 2,407 (3,7); 2,388 (1,4); 2,329 (1,3); 2,097 (16,0); 1,645 (1,5); 1,630 (4,1); 1,624 (4,4); 1,610 (1,8); 1,291 (1,8); 1,277 (4,2); 1,271 (4,6); 1,256 (1,7); 1,235 (0,5); 1,169 (1,0); 1,036 (4,8); 1,018 (10,0); 0,999 (5,0); 0,987 (1,2); 0,000 (2,4)
Ví dụ I-T3-111: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,917 (0,5); 8,913 (0,5); 8,882 (1,9); 8,876 (1,9); 8,782 (2,6); 8,753 (0,7); 8,503 (3,1); 8,461 (0,8); 8,419 (0,5); 8,414 (0,5); 8,284 (1,9); 8,279 (1,8); 8,223 (2,2); 7,938 (2,3); 3,904 (16,0); 3,334 (271,2); 3,175 (0,9); 3,162 (1,0); 3,131 (2,1); 2,919 (9,2); 2,676 (0,8); 2,672 (1,0); 2,667 (0,8); 2,525 (3,1); 2,511 (66,1); 2,507 (129,1); 2,503 (166,9); 2,498 (121,9); 2,494 (60,4); 2,334 (0,8); 2,329 (1,0); 2,325 (0,8); 2,149 (11,9); 1,718 (1,7); 1,712 (1,9); 1,487 (1,3); 0,000 (2,6)
Ví dụ I-T3-112: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,843 (5,5); 8,825 (4,0); 8,819 (4,0); 8,701 (2,1); 8,690 (2,0); 8,561 (6,3); 8,513 (3,0); 8,198 (3,9); 8,192 (3,8); 8,094 (2,9); 4,109 (0,4); 4,096 (0,5); 3,904 (16,0); 3,333 (218,4); 3,267 (0,4); 3,174 (2,5); 3,162 (2,6); 2,870 (0,6); 2,860 (0,9); 2,851 (1,3); 2,841 (1,3); 2,833 (0,9); 2,823 (0,6); 2,676 (0,9); 2,671 (1,2); 2,667 (0,9); 2,524 (3,8); 2,507 (149,9); 2,502 (194,0); 2,498 (144,0); 2,333 (0,9); 2,329 (1,2); 2,325 (0,9); 1,002 (1,2); 0,987 (1,2); 0,756 (0,8); 0,743 (2,5); 0,738 (3,3); 0,726 (3,1); 0,720 (2,6); 0,709 (1,0); 0,564 (1,0); 0,553 (3,2); 0,547 (3,1); 0,544 (2,9); 0,538 (2,8); 0,526 (0,8); 0,000 (2,3)
Ví dụ I-T3-113: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,831 (3,5); 8,818 (2,5); 8,812 (2,5); 8,547 (0,8); 8,540 (3,7); 8,512 (1,9); 8,325 (2,4); 8,319 (2,4); 8,213 (0,4); 8,207 (0,4); 8,096 (1,8); 3,904 (16,0); 3,381 (0,4); 3,332 (195,5); 3,175 (1,3); 3,161 (1,4); 3,028 (11,1); 2,794 (0,5); 2,787 (0,5); 2,777 (0,9); 2,767 (0,7); 2,760 (2,4); 2,676 (0,7); 2,672 (0,9); 2,667 (0,7); 2,525 (2,8); 2,511 (58,6); 2,507 (114,3); 2,502 (147,1); 2,498 (107,3); 2,494 (52,8); 2,334 (0,6); 2,329 (0,9); 2,325 (0,6); 1,002 (1,0); 0,987 (0,9); 0,585 (1,4); 0,577 (1,9); 0,568 (0,7); 0,545 (0,8); 0,534 (1,4); 0,516 (1,3); 0,000 (2,0)
Ví dụ I-T3-114: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,607 (2,4); 8,880 (2,4); 8,874 (2,4); 8,854 (3,1); 8,566 (3,7); 8,515 (1,6); 8,282 (2,4); 8,276 (2,4); 8,095 (1,6); 4,108 (0,4); 4,095 (0,4); 3,904 (16,0); 3,334 (175,5); 3,175 (2,1); 3,161 (2,1); 3,044 (0,5); 2,872 (0,5); 2,676 (0,6); 2,672 (0,8); 2,667 (0,6); 2,541 (0,5); 2,525 (2,4); 2,511 (50,8); 2,507 (99,8); 2,502 (129,1); 2,498 (94,9); 2,494 (47,4); 2,334 (0,6); 2,329 (0,7); 2,325 (0,6); 1,643 (0,8); 1,629 (2,0); 1,622 (2,2); 1,608 (0,9); 1,298 (1,0); 1,284 (2,0); 1,278 (2,2); 1,263 (0,8); 1,002 (0,9); 0,987 (0,8); 0,000 (1,0)
Ví dụ I-T3-115: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,898 (1,1); 8,630 (1,1); 8,376 (0,7); 7,972 (0,4); 7,595 (4,0); 3,903 (4,3); 3,328 (177,7);

2,876 (1,2); 2,675 (0,9); 2,671 (1,2); 2,667 (0,9); 2,541 (0,9); 2,506 (159,0); 2,502 (205,8); 2,498 (157,5); 2,385 (2,8); 2,333 (1,0); 2,329 (1,3); 2,324 (1,0); 2,122 (16,0); 1,686 (0,6); 1,487 (0,8); 0,000 (1,2)
Ví dụ I-T3-116: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,911 (1,0); 8,880 (3,4); 8,874 (3,4); 8,842 (5,1); 8,810 (1,3); 8,548 (5,6); 8,512 (4,5); 8,423 (0,9); 8,292 (3,4); 8,286 (3,4); 8,093 (4,3); 3,904 (4,9); 3,327 (229,2); 3,133 (3,9); 2,918 (16,0); 2,675 (1,2); 2,671 (1,6); 2,667 (1,3); 2,541 (1,5); 2,506 (202,4); 2,502 (261,5); 2,498 (200,6); 2,333 (1,1); 2,329 (1,5); 2,325 (1,2); 1,711 (3,8); 1,488 (2,6); -0,001 (1,3)
Ví dụ I-T3-117: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,837 (3,9); 8,832 (3,9); 8,696 (5,5); 8,528 (2,3); 8,517 (2,3); 8,440 (6,7); 8,213 (3,3); 7,955 (3,9); 7,949 (3,9); 7,929 (3,4); 3,904 (3,8); 3,328 (223,0); 2,875 (0,7); 2,865 (1,0); 2,857 (1,5); 2,847 (1,5); 2,838 (1,1); 2,828 (0,7); 2,671 (1,5); 2,502 (230,7); 2,329 (1,4); 2,145 (16,0); 0,738 (0,9); 0,720 (3,6); 0,708 (3,4); 0,702 (3,0); 0,691 (1,1); 0,566 (1,2); 0,555 (3,7); 0,549 (3,6); 0,540 (3,2); 0,527 (0,9); 0,000 (1,2)
Ví dụ I-T3-118: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,825 (3,2); 8,820 (3,1); 8,700 (5,9); 8,438 (7,3); 8,213 (3,4); 8,037 (3,0); 8,031 (3,0); 7,930 (3,5); 7,908 (0,5); 3,904 (11,1); 3,330 (239,1); 3,022 (14,7); 2,779 (0,4); 2,764 (0,9); 2,753 (1,3); 2,743 (1,0); 2,737 (1,0); 2,723 (2,0); 2,676 (1,0); 2,671 (1,3); 2,667 (1,0); 2,542 (1,0); 2,524 (4,1); 2,511 (78,7); 2,507 (153,6); 2,502 (199,9); 2,498 (148,4); 2,392 (13,3); 2,364 (1,8); 2,333 (0,9); 2,329 (1,2); 2,325 (0,9); 2,154 (16,0); 0,817 (0,5); 0,802 (0,5); 0,755 (0,6); 0,484 (4,8); 0,466 (2,5); 0,000 (1,4)
Ví dụ I-T3-119: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,408 (4,7); 8,892 (3,9); 8,886 (3,9); 8,716 (5,6); 8,452 (7,3); 8,217 (2,9); 8,041 (3,8); 8,035 (3,8); 7,932 (3,0); 3,904 (9,3); 3,330 (168,1); 3,175 (1,1); 3,162 (1,1); 2,676 (0,7); 2,671 (1,0); 2,667 (0,8); 2,541 (0,9); 2,511 (82,5); 2,507 (129,7); 2,502 (165,2); 2,498 (122,9); 2,333 (0,7); 2,329 (1,0); 2,325 (0,7); 2,147 (16,0); 1,612 (1,5); 1,598 (4,0); 1,591 (4,3); 1,578 (1,8); 1,312 (1,8); 1,299 (4,1); 1,292 (4,2); 1,278 (1,5); 0,000 (1,1)
Ví dụ I-T3-120: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,826 (1,6); 8,821 (1,6); 8,621 (4,1); 8,375 (3,7); 8,025 (1,5); 8,020 (1,6); 7,593 (4,8); 3,903 (7,6); 3,331 (235,6); 3,022 (7,6); 2,756 (0,7); 2,743 (0,5); 2,720 (1,0); 2,671 (1,1); 2,541 (0,9); 2,507 (130,2); 2,502 (168,8); 2,498 (127,0); 2,386 (6,8); 2,359 (0,9); 2,329 (1,0); 2,129 (16,0); 0,482 (2,7); 0,465 (1,4); 0,000 (1,0)
Ví dụ I-T3-121: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,836 (16,0); 8,460 (13,4); 8,441 (12,5); 7,871 (1,5); 7,554 (14,8); 2,909 (0,5); 2,899 (1,4); 2,890 (2,1); 2,881 (3,1); 2,871 (3,2); 2,862 (2,1); 2,853 (1,6); 2,843 (0,5); 2,469 (0,5); 2,464

(0,6); 2,460 (0,5); 2,287 (0,5); 2,263 (0,4); 2,245 (0,8); 2,226 (0,6); 2,164 (134,4); 2,128 (74,2); 2,108 (1,2); 2,102 (0,8); 2,096 (0,5); 1,976 (0,8); 1,965 (34,9); 1,959 (10,4); 1,953 (53,7); 1,947 (97,8); 1,941 (132,8); 1,935 (92,8); 1,928 (48,6); 1,829 (0,7); 1,781 (0,4); 1,775 (0,6); 1,769 (0,8); 1,763 (0,5); 1,540 (0,4); 1,470 (0,3); 1,429 (0,3); 1,320 (1,0); 1,269 (9,8); 1,135 (0,4); 0,897 (0,4); 0,881 (1,1); 0,864 (0,5); 0,834 (1,8); 0,821 (4,8); 0,816 (6,9); 0,803 (6,8); 0,798 (5,3); 0,786 (2,4); 0,764 (0,4); 0,746 (0,4); 0,721 (0,4); 0,710 (0,4); 0,681 (2,4); 0,669 (6,3); 0,663 (6,5); 0,659 (5,7); 0,653 (5,3); 0,641 (1,6); 0,000 (1,3)
Ví dụ I-T3-122: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,795 (7,1); 8,792 (7,1); 8,712 (16,0); 8,398 (7,3); 8,393 (7,2); 8,249 (14,8); 8,230 (0,4); 8,035 (5,4); 8,031 (10,0); 8,027 (5,8); 7,832 (3,6); 7,830 (4,9); 7,826 (3,7); 7,821 (2,0); 7,814 (5,0); 7,810 (5,4); 7,716 (5,3); 7,700 (3,9); 7,697 (5,2); 7,585 (0,4); 7,519 (5,8); 7,500 (9,9); 7,480 (4,3); 7,146 (1,9); 4,086 (0,4); 4,068 (1,3); 4,050 (1,3); 4,033 (0,5); 2,907 (0,6); 2,897 (1,9); 2,888 (2,8); 2,879 (4,2); 2,869 (4,1); 2,861 (2,8); 2,851 (2,0); 2,842 (0,7); 2,468 (0,7); 2,463 (0,9); 2,459 (0,7); 2,266 (0,3); 2,250 (0,4); 2,144 (668,5); 2,120 (3,2); 2,114 (4,0); 2,108 (5,1); 2,101 (3,3); 2,095 (1,7); 2,016 (0,5); 2,014 (0,5); 1,972 (7,8); 1,964 (22,3); 1,958 (55,1); 1,952 (312,9); 1,946 (568,6); 1,940 (766,2); 1,934 (526,3); 1,928 (270,3); 1,787 (0,4); 1,781 (1,7); 1,775 (3,2); 1,769 (4,4); 1,762 (3,0); 1,756 (1,5); 1,437 (5,8); 1,356 (0,3); 1,338 (0,6); 1,319 (0,4); 1,285 (0,5); 1,270 (2,2); 1,222 (1,6); 1,204 (3,0); 1,186 (1,6); 1,089 (0,9); 0,881 (0,4); 0,793 (2,2); 0,781 (6,2); 0,775 (8,7); 0,763 (8,9); 0,757 (6,5); 0,746 (3,2); 0,724 (0,5); 0,707 (0,5); 0,687 (0,5); 0,677 (0,4); 0,647 (3,3); 0,637 (8,3); 0,630 (8,0); 0,626 (7,0); 0,620 (6,8); 0,608 (2,2); 0,008 (1,7); 0,000 (60,4); -0,009 (2,1)
Ví dụ I-T3-123: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,894 (2,1); 8,708 (1,4); 8,439 (1,2); 8,213 (2,9); 7,984 (0,8); 7,930 (3,0); 3,904 (15,2); 3,331 (445,1); 3,174 (0,5); 3,161 (0,5); 3,121 (0,5); 2,877 (2,5); 2,675 (1,3); 2,671 (1,8); 2,667 (1,4); 2,542 (1,7); 2,506 (224,4); 2,502 (292,1); 2,498 (219,8); 2,389 (5,1); 2,333 (1,3); 2,329 (1,8); 2,325 (1,4); 2,148 (16,0); 1,687 (1,2); 1,492 (1,5); 1,416 (0,6); 1,249 (0,4); 1,235 (0,4); 0,000 (1,8)
Ví dụ I-T3-124: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,836 (5,2); 8,831 (5,2); 8,756 (7,5); 8,544 (2,8); 8,534 (2,9); 8,502 (4,3); 8,488 (8,8); 8,087 (4,0); 7,952 (5,0); 7,946 (5,0); 4,467 (0,8); 4,454 (2,0); 4,440 (0,8); 4,113 (0,5); 4,100 (0,5); 3,904 (16,0); 3,507 (0,4); 3,482 (0,5); 3,468 (0,5); 3,456 (0,5); 3,395 (5,7); 3,388 (4,9); 3,381 (6,3); 3,340 (838,4); 3,174 (2,4); 3,161 (2,3); 2,886 (0,3); 2,876 (0,9); 2,867 (1,2); 2,858 (1,9); 2,848 (1,9); 2,840 (1,3); 2,830 (0,9); 2,820 (0,4); 2,676 (1,6); 2,672 (2,1); 2,667 (1,7); 2,507 (264,8); 2,503 (344,8); 2,498 (274,4); 2,334 (1,5); 2,329 (2,0); 2,325 (1,5); 1,273 (0,4); 1,258 (0,8); 1,242 (0,8); 0,873 (0,4); 0,739 (1,2); 0,726 (3,4); 0,721 (4,6); 0,709 (4,3);

0,703 (3,7); 0,692 (1,5); 0,567 (1,5); 0,556 (4,6); 0,550 (4,3); 0,546 (4,1); 0,540 (3,8); 0,528 (1,1); 0,008 (2,2); 0,000 (60,2); -0,008 (2,5)
Ví dụ I-T3-125: ^{1}H-NMR (400,1 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,41 (0,0144); 8,89 (0,0123); 8,83 (0,0014); 8,77 (0,0184); 8,49 (0,0301); 8,23 (0,0012); 8,09 (0,0103); 8,03 (0,0119); 3,31 (1,0000); 2,54 (0,6709); 2,50 (0,2387); 1,59 (0,0138); 1,30 (0,0136); 0,15 (0,0007); 0,00 (0,1822); -0,16 (0,0004)
Ví dụ I-T3-126: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,406 (0,9); 8,069 (2,0); 7,667 (0,4); 7,646 (1,1); 7,621 (0,6); 7,616 (0,6); 7,538 (0,8); 7,533 (0,7); 6,479 (0,9); 3,322 (20,1); 2,524 (0,4); 2,519 (0,7); 2,511 (11,8); 2,506 (24,6); 2,502 (33,4); 2,497 (24,8); 2,493 (12,4); 1,989 (0,8); 1,608 (0,4); 1,594 (0,8); 1,587 (0,9); 1,574 (0,4); 1,398 (16,0); 1,291 (0,4); 1,278 (0,7); 1,271 (0,8); 1,257 (0,3); 1,175 (0,5); 0,008 (0,6); 0,000 (18,6); -0,009 (0,7)
Ví dụ I-T3-127: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,850 (5,1); 8,845 (5,4); 8,692 (9,2); 8,530 (3,1); 8,520 (3,2); 8,464 (9,2); 8,273 (16,0); 7,973 (5,1); 7,967 (5,3); 4,105 (0,5); 4,091 (0,5); 3,903 (5,0); 3,329 (87,9); 3,175 (1,9); 3,162 (1,8); 2,877 (0,8); 2,868 (1,2); 2,859 (1,9); 2,849 (1,9); 2,840 (1,3); 2,831 (0,9); 2,820 (0,3); 2,672 (0,6); 2,667 (0,5); 2,507 (79,2); 2,502 (111,9); 2,463 (0,7); 2,334 (0,5); 2,329 (0,6); 0,740 (1,1); 0,727 (3,5); 0,722 (4,8); 0,710 (4,4); 0,704 (4,0); 0,693 (1,5); 0,571 (1,5); 0,561 (4,6); 0,555 (4,7); 0,551 (4,6); 0,545 (4,2); 0,533 (1,1); 0,000 (0,4)
Ví dụ I-T3-128: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,840 (3,6); 8,835 (3,5); 8,698 (8,9); 8,465 (8,7); 8,272 (15,4); 8,058 (3,3); 8,053 (3,4); 7,922 (0,5); 3,903 (5,1); 3,328 (66,8); 3,175 (1,0); 3,162 (1,0); 3,026 (16,0); 2,891 (0,3); 2,784 (0,4); 2,767 (0,9); 2,756 (1,4); 2,746 (1,0); 2,721 (1,9); 2,676 (0,5); 2,672 (0,6); 2,667 (0,5); 2,542 (0,7); 2,511 (37,1); 2,507 (71,3); 2,503 (93,3); 2,498 (71,7); 2,395 (14,5); 2,369 (1,9); 2,334 (0,4); 2,329 (0,6); 2,325 (0,4); 0,819 (0,5); 0,803 (0,5); 0,758 (0,6); 0,481 (5,4); 0,463 (2,8); 0,000 (0,4)
Ví dụ I-T3-129: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,412 (6,2); 8,906 (4,7); 8,900 (5,0); 8,710 (9,0); 8,478 (8,5); 8,276 (16,0); 8,063 (4,7); 8,058 (4,9); 3,903 (5,3); 3,434 (0,4); 3,334 (71,6); 3,169 (3,4); 2,672 (0,8); 2,520 (27,6); 2,507 (94,6); 2,503 (122,2); 2,499 (100,6); 2,329 (0,7); 1,612 (1,9); 1,598 (5,2); 1,591 (5,7); 1,578 (2,3); 1,317 (2,3); 1,304 (5,3); 1,297 (5,6); 1,283 (1,9); 0,000 (0,4)
Ví dụ I-T3-130: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,821 (3,6); 8,815 (3,5); 8,760 (6,9); 8,499 (4,1); 8,484 (8,5); 8,085 (3,9); 8,046 (3,3); 8,040 (3,3); 7,911 (0,5); 3,904 (10,2); 3,327 (87,7); 3,176 (0,7); 3,163 (0,7); 3,025 (16,0); 2,779 (0,4); 2,768 (0,8); 2,762 (0,9); 2,753 (1,5); 2,742 (1,1); 2,736 (1,1); 2,724 (2,2); 2,676

(0,5); 2,672 (0,7); 2,667 (0,5); 2,525 (2,4); 2,512 (41,2); 2,507 (81,2); 2,503 (106,8); 2,498 (80,2); 2,494 (41,1); 2,398 (14,3); 2,369 (1,8); 2,334 (0,5); 2,330 (0,7); 2,325 (0,5); 0,820 (0,5); 0,803 (0,5); 0,757 (0,6); 0,485 (4,9); 0,467 (2,7); 0,000 (0,5)
Ví dụ I-T3-131: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,891 (3,3); 8,768 (2,3); 8,499 (5,4); 8,485 (2,0); 8,085 (4,9); 7,990 (1,3); 3,903 (16,0); 3,327 (119,4); 3,175 (0,8); 3,162 (0,9); 3,122 (0,7); 2,879 (3,8); 2,676 (0,7); 2,672 (1,0); 2,667 (0,8); 2,542 (0,7); 2,525 (3,3); 2,511 (61,8); 2,507 (121,8); 2,503 (160,9); 2,498 (122,6); 2,494 (64,2); 2,396 (8,3); 2,334 (0,8); 2,329 (1,0); 2,325 (0,8); 1,686 (1,8); 1,497 (2,2); 1,420 (0,8); 0,000 (0,7)
Ví dụ I-T3-132: ^{1}H-NMR (400,1 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,907 (3,3); 8,699 (3,2); 8,461 (1,9); 8,269 (16,0); 8,002 (1,1); 4,088 (0,5); 4,075 (0,5); 3,311 (245,5); 3,269 (0,3); 3,175 (2,1); 3,162 (2,1); 3,123 (0,6); 2,875 (3,1); 2,710 (0,5); 2,674 (0,4); 2,670 (0,5); 2,540 (120,2); 2,505 (48,9); 2,501 (64,0); 2,497 (45,6); 2,464 (0,3); 2,396 (8,6); 2,367 (0,8); 2,328 (0,5); 2,323 (0,4); 1,686 (1,6); 1,495 (2,0); 1,431 (0,8); 1,423 (0,8); 0,146 (0,4); 0,008 (3,2); 0,000 (89,8); -0,008 (4,5); -0,150 (0,4)
Ví dụ I-T3-133: ^{1}H-NMR (400,1 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,822 (3,7); 8,817 (3,4); 8,750 (9,7); 8,470 (9,1); 8,094 (15,1); 8,040 (3,3); 8,035 (3,3); 7,903 (0,4); 3,311 (86,3); 3,287 (0,3); 3,026 (16,0); 2,781 (0,4); 2,765 (1,0); 2,754 (1,5); 2,743 (1,1); 2,738 (1,1); 2,721 (1,6); 2,711 (0,7); 2,555 (0,4); 2,554 (0,5); 2,553 (0,6); 2,552 (0,7); 2,550 (0,8); 2,549 (1,0); 2,540 (89,5); 2,529 (0,7); 2,528 (0,6); 2,527 (0,6); 2,525 (0,6); 2,524 (0,6); 2,523 (0,6); 2,522 (0,6); 2,510 (12,1); 2,505 (23,8); 2,501 (31,3); 2,497 (21,3); 2,492 (9,9); 2,395 (14,5); 2,371 (1,7); 0,819 (0,4); 0,804 (0,5); 0,755 (0,6); 0,482 (5,8); 0,464 (3,0); 0,013 (0,3); 0,011 (0,4); 0,008 (2,1); 0,007 (1,4); 0,000 (61,4); -0,006 (1,7); -0,009 (2,2); -0,013 (0,4); -0,014 (0,3)
Ví dụ I-T3-134: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,823 (4,4); 8,427 (4,3); 8,403 (0,4); 8,263 (1,3); 8,242 (1,6); 8,112 (2,9); 8,071 (2,1); 8,050 (1,8); 7,818 (2,7); 7,813 (2,7); 7,760 (1,6); 7,755 (1,5); 7,747 (1,0); 7,739 (1,8); 7,734 (1,5); 7,724 (0,9); 7,560 (1,0); 7,553 (2,6); 7,540 (1,0); 7,532 (2,1); 3,327 (28,9); 3,321 (6,8); 3,015 (11,5); 2,766 (0,4); 2,756 (0,8); 2,748 (1,0); 2,740 (1,3); 2,730 (1,2); 2,716 (2,7); 2,676 (0,4); 2,673 (0,4); 2,507 (45,7); 2,503 (53,0); 2,499 (41,0); 2,330 (0,4); 2,076 (16,0); 2,068 (2,0); 1,170 (0,4); 0,820 (0,4); 0,812 (0,4); 0,804 (0,4); 0,757 (0,5); 0,748 (0,5); 0,559 (2,6); 0,551 (2,5); 0,503 (0,4); 0,472 (2,1); 0,455 (2,2); 0,000 (51,7); -0,009 (7,9)
Ví dụ I-T3-135: ^{1}H-NMR (400,1 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,547 (0,5); 8,505 (10,0); 8,454 (9,8); 8,448 (8,1); 8,442 (4,1); 8,281 (10,0); 8,068 (16,0); 7,686 (6,9); 7,680 (6,8); 3,568 (0,4); 3,410 (4,1); 3,394 (11,2); 3,378 (4,3); 3,309 (165,8);

3,286 (0,7); 2,832 (0,3); 2,822 (0,9); 2,812 (1,3); 2,804 (2,0); 2,794 (2,0); 2,785 (1,3); 2,776 (0,9); 2,765 (0,4); 2,710 (0,9); 2,674 (0,5); 2,669 (0,6); 2,665 (0,5); 2,560 (0,6); 2,540 (226,8); 2,523 (1,6); 2,509 (31,4); 2,505 (60,7); 2,500 (78,7); 2,496 (53,0); 2,492 (24,2); 2,366 (0,8); 2,332 (0,4); 2,327 (0,6); 2,323 (0,4); 1,887 (4,2); 1,871 (11,1); 1,854 (3,9); 1,235 (0,4); 0,704 (1,4); 0,691 (3,7); 0,686 (5,2); 0,674 (4,8); 0,668 (4,0); 0,657 (1,7); 0,547 (1,8); 0,536 (5,3); 0,530 (4,6); 0,526 (4,3); 0,520 (4,2); 0,508 (1,3); 0,146 (0,5); 0,008 (4,2); 0,000 (120,8); -0,008 (4,5); -0,150 (0,5)
Ví dụ I-T3-136: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,510 (2,6); 8,502 (7,1); 8,497 (6,4); 8,441 (8,5); 8,259 (8,4); 8,129 (2,2); 8,117 (2,5); 8,106 (1,0); 8,088 (5,7); 8,080 (16,0); 4,467 (1,4); 4,453 (4,0); 4,439 (1,5); 4,111 (0,4); 4,099 (0,4); 3,904 (15,8); 3,804 (0,4); 3,483 (0,4); 3,470 (0,5); 3,455 (0,4); 3,395 (8,9); 3,388 (7,6); 3,381 (9,5); 3,338 (810,3); 3,174 (1,7); 3,161 (1,6); 2,953 (0,4); 2,932 (11,5); 2,920 (11,5); 2,847 (0,4); 2,837 (0,9); 2,828 (1,3); 2,819 (1,9); 2,810 (1,9); 2,801 (1,3); 2,792 (0,9); 2,783 (0,4); 2,671 (2,2); 2,616 (0,3); 2,506 (280,8); 2,502 (354,5); 2,498 (275,8); 2,329 (2,2); 1,234 (0,6); 0,873 (0,6); 0,854 (0,5); 0,742 (1,0); 0,724 (4,4); 0,711 (4,1); 0,706 (3,6); 0,694 (1,4); 0,587 (1,5); 0,576 (4,6); 0,570 (4,4); 0,561 (3,8); 0,548 (1,1); 0,000 (48,0)
Ví dụ I-T3-137: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,543 (6,9); 8,537 (7,0); 8,455 (8,0); 8,364 (2,9); 8,356 (3,0); 8,268 (8,1); 8,118 (4,5); 8,113 (4,5); 8,083 (13,0); 4,467 (0,5); 4,453 (1,5); 4,439 (0,6); 4,112 (0,4); 4,099 (0,4); 3,904 (16,0); 3,483 (0,3); 3,469 (0,4); 3,433 (0,5); 3,407 (0,8); 3,395 (4,1); 3,388 (3,4); 3,381 (4,6); 3,338 (731,2); 3,174 (1,7); 3,161 (1,6); 2,955 (0,8); 2,852 (0,8); 2,844 (1,2); 2,835 (1,8); 2,826 (2,0); 2,818 (2,0); 2,809 (2,0); 2,800 (2,0); 2,791 (1,8); 2,782 (1,2); 2,772 (0,8); 2,676 (1,4); 2,672 (1,9); 2,667 (1,5); 2,507 (235,5); 2,502 (302,0); 2,498 (229,6); 2,333 (1,4); 2,329 (1,8); 2,325 (1,4); 1,237 (0,4); 0,873 (0,4); 0,854 (0,3); 0,765 (1,1); 0,753 (3,5); 0,748 (4,4); 0,736 (5,1); 0,731 (4,0); 0,718 (5,1); 0,706 (3,9); 0,700 (3,5); 0,689 (1,4); 0,582 (1,4); 0,571 (4,3); 0,565 (4,0); 0,556 (3,5); 0,544 (1,0); 0,466 (1,3); 0,455 (4,0); 0,450 (4,1); 0,445 (4,0); 0,440 (3,9); 0,428 (1,1); 0,000 (39,5)
Ví dụ I-T3-138: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,524 (1,8); 8,515 (1,9); 8,487 (3,8); 8,482 (3,9); 8,443 (6,4); 8,432 (1,1); 8,419 (1,9); 8,405 (1,0); 8,274 (0,4); 8,262 (6,3); 8,120 (4,0); 8,114 (3,6); 8,081 (10,3); 4,453 (0,7); 3,904 (16,0); 3,606 (1,0); 3,592 (3,0); 3,579 (3,7); 3,566 (1,8); 3,523 (3,7); 3,511 (4,9); 3,498 (1,9); 3,473 (0,5); 3,449 (0,3); 3,395 (2,5); 3,387 (2,3); 3,381 (2,9); 3,338 (556,7); 3,299 (28,1); 3,286 (1,6); 3,262 (0,8); 3,256 (0,7); 3,174 (0,9); 3,161 (0,9); 2,840 (0,6); 2,831 (0,9); 2,822 (1,3); 2,812 (1,4); 2,804 (0,9); 2,795 (0,6); 2,676 (1,4); 2,672 (2,0); 2,667 (1,4); 2,507 (219,1); 2,503 (282,2); 2,498 (210,9); 2,334 (1,2); 2,329 (1,7); 2,325 (1,3); 1,235 (0,5); 0,747

(0,8); 0,734 (2,3); 0,729 (3,2); 0,717 (2,9); 0,711 (2,6); 0,700 (1,0); 0,589 (1,1); 0,579 (3,3); 0,573 (3,0); 0,569 (3,0); 0,563 (2,7); 0,551 (0,9); 0,008 (1,7); 0,000 (45,2); -0,008 (1,8)
Ví dụ I-T3-139: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,474 (2,4); 8,837 (1,9); 8,831 (2,1); 8,602 (3,2); 8,355 (3,4); 7,970 (2,0); 7,965 (2,2); 7,596 (4,3); 4,467 (0,4); 4,453 (1,0); 4,440 (0,4); 3,904 (6,3); 3,423 (0,3); 3,395 (2,3); 3,387 (2,3); 3,381 (2,8); 3,340 (340,7); 3,174 (0,4); 3,161 (0,4); 3,063 (0,6); 2,880 (0,6); 2,672 (0,9); 2,668 (0,7); 2,507 (107,5); 2,503 (142,8); 2,498 (119,4); 2,329 (1,2); 2,325 (1,2); 2,312 (0,8); 2,299 (0,6); 2,292 (0,5); 2,110 (16,0); 1,615 (0,8); 1,601 (2,0); 1,594 (2,3); 1,581 (1,0); 1,324 (0,9); 1,310 (2,1); 1,304 (2,3); 1,289 (0,8); 1,257 (0,4); 1,243 (0,4); 1,168 (0,4); 0,993 (2,1); 0,982 (3,3); 0,962 (1,9); 0,000 (10,4)
Ví dụ I-T3-140: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,785 (2,0); 8,780 (1,9); 8,595 (1,3); 8,584 (4,5); 8,345 (3,4); 7,890 (2,0); 7,885 (1,9); 7,594 (4,2); 4,455 (0,3); 3,904 (3,2); 3,408 (0,5); 3,394 (1,3); 3,382 (1,7); 3,342 (322,7); 3,174 (0,4); 3,162 (0,4); 2,892 (0,5); 2,883 (0,7); 2,873 (0,7); 2,865 (0,5); 2,855 (0,4); 2,672 (0,7); 2,503 (110,1); 2,352 (0,4); 2,345 (0,5); 2,334 (1,3); 2,314 (0,5); 2,111 (16,0); 0,973 (1,9); 0,961 (1,8); 0,951 (1,9); 0,931 (1,6); 0,740 (0,4); 0,723 (1,7); 0,710 (1,7); 0,705 (1,4); 0,694 (0,6); 0,582 (0,6); 0,571 (1,8); 0,564 (1,8); 0,555 (1,5); 0,543 (0,4); 0,000 (8,3)
Ví dụ I-T3-141: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,093 (2,2); 8,668 (2,1); 8,662 (2,2); 8,577 (3,2); 8,327 (3,3); 8,314 (2,3); 8,308 (2,2); 7,593 (3,8); 3,969 (10,4); 3,904 (3,5); 3,409 (0,5); 3,343 (332,3); 3,285 (0,3); 2,676 (0,5); 2,672 (0,7); 2,668 (0,6); 2,525 (2,4); 2,512 (45,6); 2,507 (89,1); 2,503 (116,0); 2,498 (87,1); 2,334 (0,5); 2,330 (0,7); 2,325 (0,5); 2,121 (16,0); 1,602 (0,8); 1,587 (2,0); 1,581 (2,2); 1,567 (0,9); 1,305 (1,0); 1,292 (2,1); 1,285 (2,2); 1,271 (0,8); 0,008 (0,4); 0,000 (11,6); -0,008 (0,5)
Ví dụ I-T3-142: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,767 (2,0); 8,582 (3,2); 8,343 (3,2); 7,948 (2,0); 7,851 (0,3); 7,591 (5,1); 4,454 (0,8); 3,904 (4,5); 3,381 (3,9); 3,341 (346,8); 3,218 (0,4); 3,175 (0,5); 3,162 (0,4); 3,043 (7,9); 2,791 (1,0); 2,781 (0,9); 2,766 (1,5); 2,672 (1,0); 2,503 (159,1); 2,330 (1,0); 2,122 (16,0); 1,926 (0,6); 1,915 (0,9); 1,901 (0,7); 1,882 (0,4); 0,992 (1,5); 0,961 (2,3); 0,943 (2,0); 0,824 (0,4); 0,809 (0,4); 0,764 (0,5); 0,540 (2,1); 0,482 (1,7); 0,467 (1,6); 0,000 (14,1)
Ví dụ I-T3-143: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,608 (2,1); 8,602 (2,1); 8,556 (3,2); 8,308 (3,3); 8,266 (1,0); 8,256 (1,0); 8,227 (2,2); 8,221 (2,1); 7,590 (3,9); 3,948 (10,3); 3,904 (3,5); 3,395 (0,9); 3,343 (295,8); 3,175 (0,3); 2,873 (0,3); 2,863 (0,5); 2,855 (0,7); 2,845 (0,7); 2,837 (0,5); 2,827 (0,3); 2,676 (0,5); 2,672 (0,7); 2,668 (0,5); 2,507 (88,5); 2,503 (112,5); 2,498 (84,8); 2,334 (0,5); 2,329 (0,7); 2,325 (0,5); 2,120 (16,0); 0,740 (0,4); 0,727 (1,3); 0,722 (1,8); 0,709 (1,6); 0,704 (1,4); 0,692 (0,6);

0,580 (0,6); 0,570 (1,8); 0,564 (1,7); 0,554 (1,4); 0,542 (0,4); 0,008 (0,7); 0,000 (14,6)
Ví dụ I-T3-144: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,563 (2,0); 8,558 (2,0); 8,526 (3,6); 8,302 (3,3); 8,005 (1,9); 7,999 (2,0); 7,590 (4,6); 4,468 (0,3); 4,454 (0,8); 4,440 (0,3); 3,915 (9,8); 3,904 (7,4); 3,425 (0,4); 3,395 (2,6); 3,388 (2,3); 3,381 (3,0); 3,341 (345,9); 3,282 (0,4); 2,981 (8,7); 2,748 (0,5); 2,738 (0,8); 2,724 (0,6); 2,711 (0,3); 2,700 (0,9); 2,676 (0,7); 2,672 (0,9); 2,668 (0,8); 2,507 (111,1); 2,503 (144,6); 2,499 (113,9); 2,334 (0,6); 2,329 (0,8); 2,127 (16,0); 0,466 (3,1); 0,449 (1,7); 0,000 (11,6)
Ví dụ I-T3-145: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,848 (0,6); 8,841 (0,8); 8,835 (4,1); 8,829 (4,2); 8,781 (6,9); 8,537 (7,1); 8,316 (0,4); 8,283 (13,4); 8,274 (4,6); 8,257 (0,6); 8,251 (0,5); 3,424 (0,3); 3,409 (0,3); 3,398 (0,4); 3,387 (0,3); 3,371 (0,4); 3,324 (185,3); 2,776 (0,4); 2,764 (0,8); 2,759 (0,9); 2,750 (1,6); 2,739 (1,0); 2,733 (0,9); 2,722 (0,5); 2,675 (1,1); 2,671 (1,5); 2,667 (1,1); 2,524 (4,5); 2,506 (173,0); 2,502 (225,3); 2,497 (167,2); 2,333 (1,1); 2,329 (1,5); 2,324 (1,1); 1,398 (16,0); 1,238 (4,1); 1,220 (8,5); 1,202 (3,9); 1,120 (0,5); 1,102 (1,0); 1,085 (0,5); 0,951 (0,4); 0,935 (0,5); 0,577 (2,8); 0,549 (2,5); 0,532 (2,1); 0,146 (0,9); 0,008 (7,2); 0,000 (188,0); -0,008 (8,4); -0,150 (0,9)
Ví dụ I-T3-146: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 10,752 (3,5); 8,900 (3,6); 8,894 (3,7); 8,806 (5,3); 8,571 (5,2); 8,570 (5,2); 8,393 (3,7); 8,387 (3,6); 8,284 (8,3); 8,283 (8,3); 8,028 (4,8); 7,502 (4,8); 7,501 (5,0); 5,756 (5,9); 4,056 (0,5); 4,038 (1,6); 4,020 (1,6); 4,002 (0,5); 3,837 (16,0); 3,324 (33,1); 2,671 (0,4); 2,524 (1,0); 2,520 (1,4); 2,511 (20,1); 2,507 (41,3); 2,502 (54,9); 2,497 (40,1); 2,493 (19,7); 2,329 (0,4); 1,989 (6,9); 1,193 (1,9); 1,175 (3,8); 1,157 (1,9); 0,008 (1,9); 0,000 (58,8); -0,009 (2,2)
Ví dụ I-T3-147: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,999 (3,5); 8,993 (3,6); 8,778 (6,5); 8,499 (6,5); 8,384 (3,5); 8,378 (3,5); 8,279 (10,7); 5,757 (1,1); 4,384 (1,6); 4,366 (5,0); 4,348 (5,1); 4,331 (1,7); 3,894 (0,5); 3,324 (128,6); 2,714 (16,0); 2,675 (0,9); 2,671 (1,3); 2,666 (1,0); 2,524 (3,3); 2,511 (69,0); 2,506 (138,7); 2,502 (184,5); 2,498 (139,2); 2,333 (0,8); 2,329 (1,1); 2,325 (0,9); 1,989 (0,7); 1,377 (5,4); 1,360 (11,3); 1,342 (5,4); 1,234 (0,5); 1,175 (0,4); 0,146 (0,9); 0,008 (6,9); 0,000 (189,8); -0,150 (0,9)
Ví dụ I-T3-148: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,344 (1,0); 8,180 (2,1); 8,179 (2,0); 8,138 (1,8); 8,094 (1,0); 7,688 (1,2); 7,683 (1,6); 7,655 (0,9); 7,650 (0,6); 7,634 (1,0); 7,629 (0,8); 7,474 (1,5); 7,454 (1,2); 6,895 (0,4); 6,892 (0,4); 2,860 (0,4); 2,851 (0,6); 2,842 (0,6); 2,833 (0,4); 2,132 (17,4); 2,107 (0,3); 1,964 (1,5); 1,958 (3,8); 1,952 (20,1); 1,946 (36,2); 1,940 (48,4); 1,933 (33,3); 1,927 (17,3); 1,437 (16,0);

0,781 (1,0); 0,776 (1,2); 0,763 (1,3); 0,758 (0,9); 0,746 (0,4); 0,611 (0,4); 0,601 (1,1); 0,594 (1,2); 0,590 (1,0); 0,584 (1,0); 0,000 (2,5)
Ví dụ I-T3-149: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 18,228 (0,3); 18,070 (0,4); 11,873 (0,3); 9,464 (0,4); 9,435 (13,6); 9,407 (0,4); 9,265 (9,2); 9,168 (16,0); 8,869 (9,9); 8,544 (15,8); 8,514 (0,4); 8,316 (1,1); 8,148 (0,4); 8,012 (0,4); 7,945 (12,0); 7,931 (6,4); 7,910 (6,2); 7,905 (5,4); 7,850 (0,4); 7,843 (0,4); 7,839 (0,4); 7,702 (0,4); 7,639 (0,4); 7,582 (9,8); 7,561 (9,0); 7,543 (0,4); 3,637 (0,4); 3,591 (0,4); 3,572 (0,4); 3,547 (0,4); 3,535 (0,6); 3,512 (0,5); 3,469 (0,6); 3,434 (0,9); 3,392 (2,8); 3,344 (1316,4); 3,339 (765,9); 3,331 (992,7); 3,218 (1,0); 3,211 (0,9); 3,178 (0,5); 3,121 (0,3); 3,058 (0,3); 2,731 (0,4); 2,671 (5,7); 2,638 (0,4); 2,584 (0,4); 2,506 (689,3); 2,502 (847,8); 2,417 (1,1); 2,381 (0,8); 2,333 (4,7); 2,328 (5,7); 2,288 (0,4); 2,283 (0,4); 1,658 (0,3); 1,620 (4,0); 1,606 (11,5); 1,599 (12,3); 1,586 (5,4); 1,546 (0,6); 1,489 (0,4); 1,370 (0,3); 1,350 (0,7); 1,310 (5,0); 1,296 (11,9); 1,290 (12,3); 1,275 (4,4); 1,237 (0,5); 0,146 (2,0); 0,000 (404,8); -0,150 (2,2); -3,146 (0,3)
Ví dụ I-T3-150: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,265 (5,5); 9,179 (0,4); 9,144 (12,1); 9,086 (0,6); 8,868 (5,9); 8,863 (6,0); 8,554 (0,6); 8,536 (16,0); 8,525 (4,5); 8,504 (0,7); 8,316 (0,8); 8,292 (0,4); 7,872 (14,1); 7,866 (7,0); 7,855 (6,0); 7,850 (3,3); 7,569 (0,3); 7,534 (7,4); 7,527 (1,7); 7,518 (1,6); 7,511 (6,7); 3,568 (0,6); 3,468 (0,4); 3,455 (0,4); 3,444 (0,5); 3,341 (576,1); 3,339 (590,5); 3,331 (552,2); 2,875 (0,5); 2,864 (1,2); 2,855 (1,6); 2,846 (2,6); 2,836 (2,6); 2,828 (1,7); 2,818 (1,3); 2,807 (0,5); 2,676 (2,6); 2,672 (3,7); 2,667 (2,8); 2,662 (1,4); 2,580 (0,4); 2,525 (9,0); 2,520 (13,1); 2,511 (197,7); 2,507 (411,4); 2,502 (559,2); 2,498 (423,2); 2,493 (212,6); 2,458 (0,5); 2,334 (2,7); 2,329 (3,7); 2,325 (2,7); 0,736 (1,7); 0,724 (4,5); 0,718 (6,6); 0,706 (6,1); 0,700 (5,1); 0,689 (2,3); 0,650 (0,3); 0,608 (0,4); 0,578 (2,2); 0,568 (6,4); 0,562 (5,7); 0,558 (5,5); 0,552 (5,2); 0,540 (1,7); 0,146 (1,7); 0,030 (0,4); 0,024 (0,4); 0,017 (0,6); 0,008 (12,6); 0,000 (401,4); -0,009 (15,0); -0,150 (1,7)
Ví dụ I-T3-151: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,444 (12,0); 9,048 (16,0); 8,890 (7,0); 8,886 (7,3); 8,610 (8,1); 8,605 (7,8); 8,506 (15,9); 8,495 (0,3); 8,317 (4,4); 7,899 (6,5); 7,894 (13,4); 7,885 (2,6); 7,870 (6,7); 7,865 (4,8); 7,579 (9,1); 7,559 (8,2); 3,410 (0,4); 3,383 (0,7); 3,364 (1,2); 3,327 (1576,2); 3,293 (1,2); 2,694 (0,5); 2,676 (8,0); 2,671 (11,2); 2,667 (8,3); 2,643 (0,4); 2,630 (0,4); 2,623 (0,5); 2,599 (0,7); 2,524 (28,8); 2,520 (43,4); 2,511 (594,8); 2,507 (1217,9); 2,502 (1623,1); 2,498 (1195,4); 2,493 (589,7); 2,419 (0,6); 2,338 (3,7); 2,333 (7,9); 2,329 (11,1); 2,324 (8,1); 2,320 (4,0); 1,620 (3,9); 1,606 (9,5); 1,599 (10,3); 1,586 (4,4); 1,546 (0,4); 1,342 (0,4); 1,303 (4,6); 1,289 (9,5); 1,282 (10,2); 1,268 (3,8); 1,234 (0,6); 1,148 (0,9); 0,146 (8,7); 0,049 (0,4); 0,039 (0,7);

0,008 (63,6); 0,000 (1893,8); -0,009 (67,7); -0,035 (1,3); -0,045 (0,8); -0,088 (0,3); -0,150 (8,7)
Ví dụ I-T3-152: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,046 (0,6); 9,022 (16,0); 8,893 (8,5); 8,608 (9,0); 8,604 (8,5); 8,543 (6,0); 8,532 (6,0); 8,515 (0,9); 8,496 (15,9); 8,453 (0,3); 8,317 (2,0); 7,901 (0,4); 7,896 (0,4); 7,828 (8,6); 7,823 (11,4); 7,818 (11,0); 7,812 (8,2); 7,682 (0,3); 7,532 (8,5); 7,521 (2,4); 7,510 (7,5); 3,508 (0,4); 3,327 (1034,9); 3,230 (0,5); 3,210 (0,4); 2,874 (0,7); 2,864 (1,6); 2,854 (2,4); 2,846 (3,5); 2,836 (3,5); 2,827 (2,5); 2,817 (1,7); 2,807 (0,8); 2,671 (8,3); 2,622 (0,7); 2,608 (0,8); 2,506 (980,0); 2,502 (1179,0); 2,329 (8,1); 2,297 (0,4); 2,281 (0,3); 1,236 (0,7); 1,149 (0,6); 0,735 (2,2); 0,717 (8,7); 0,705 (8,5); 0,699 (7,0); 0,688 (2,9); 0,666 (0,5); 0,648 (0,4); 0,615 (0,3); 0,603 (0,4); 0,574 (3,0); 0,563 (9,1); 0,556 (9,0); 0,548 (7,5); 0,535 (2,1); 0,525 (0,5); 0,488 (0,3); 0,146 (5,2); 0,000 (1050,7); -0,150 (5,5)
Ví dụ I-T3-153: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,441 (7,1); 9,380 (9,1); 8,960 (4,8); 8,954 (5,0); 8,641 (9,2); 8,581 (3,9); 8,577 (3,9); 8,317 (0,9); 8,166 (1,1); 8,002 (5,1); 7,997 (6,5); 7,969 (3,3); 7,963 (2,5); 7,948 (3,5); 7,942 (3,0); 7,589 (6,2); 7,568 (5,7); 3,430 (0,6); 3,411 (1,9); 3,393 (2,3); 3,378 (2,6); 3,359 (2,8); 3,328 (240,7); 2,950 (0,6); 2,932 (2,1); 2,913 (2,4); 2,898 (2,1); 2,880 (1,9); 2,862 (0,5); 2,676 (1,9); 2,671 (2,7); 2,667 (2,0); 2,542 (1,0); 2,525 (6,6); 2,520 (10,2); 2,511 (145,4); 2,507 (298,6); 2,502 (396,9); 2,498 (292,6); 2,493 (144,6); 2,334 (1,9); 2,329 (2,6); 2,325 (1,9); 2,320 (1,0); 2,075 (0,6); 1,908 (0,5); 1,627 (2,3); 1,613 (5,6); 1,606 (6,0); 1,593 (2,7); 1,314 (2,6); 1,301 (5,6); 1,294 (5,9); 1,279 (2,3); 1,106 (7,4); 1,088 (16,0); 1,069 (7,2); 0,146 (2,3); 0,008 (17,1); 0,000 (509,3); -0,009 (19,8); -0,031 (0,4); -0,034 (0,4); -0,150 (2,3)
Ví dụ I-T3-154: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,448 (6,4); 9,231 (4,3); 9,226 (4,3); 9,186 (8,2); 8,634 (4,2); 8,629 (4,2); 8,596 (8,2); 8,317 (3,6); 7,954 (4,3); 7,949 (6,0); 7,934 (3,1); 7,929 (2,0); 7,913 (3,2); 7,908 (2,5); 7,595 (5,2); 7,574 (4,7); 4,152 (1,7); 4,133 (5,6); 4,115 (5,6); 4,096 (1,8); 3,459 (0,4); 3,445 (0,3); 3,436 (0,3); 3,328 (1346,5); 2,694 (0,4); 2,676 (6,7); 2,671 (9,0); 2,667 (6,9); 2,629 (0,5); 2,620 (0,5); 2,524 (24,4); 2,506 (1009,7); 2,502 (1305,6); 2,498 (988,2); 2,405 (0,6); 2,389 (0,6); 2,333 (6,4); 2,329 (8,7); 2,325 (6,5); 1,623 (2,1); 1,608 (5,2); 1,602 (5,6); 1,589 (2,4); 1,575 (0,5); 1,326 (6,4); 1,308 (16,0); 1,289 (11,7); 1,274 (2,1); 1,258 (0,6); 1,247 (0,5); 1,236 (0,7); 1,158 (0,5); 1,147 (0,4); 1,068 (0,8); 0,146 (6,9); 0,008 (62,7); 0,000 (1428,7); -0,059 (0,5); -0,080 (0,4); -0,101 (0,4); -0,150 (7,0)
Ví dụ I-T3-155: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,345 (0,9); 8,192 (1,8); 8,153 (1,5); 8,094 (0,9); 7,738 (1,0); 7,732 (1,3); 7,706 (0,6); 7,700 (0,5); 7,685 (0,7); 7,680 (0,6); 7,563 (0,4); 7,507 (1,1); 7,486 (0,9); 2,144 (6,2); 2,114

(0,5); 2,108 (0,4); 1,972 (1,1); 1,964 (1,1); 1,958 (2,8); 1,952 (14,4); 1,946 (26,2); 1,940 (35,3); 1,934 (25,1); 1,928 (13,6); 1,596 (0,5); 1,582 (1,3); 1,575 (1,3); 1,561 (0,7); 1,437 (16,0); 1,362 (0,6); 1,349 (1,3); 1,342 (1,4); 1,327 (0,5); 1,204 (0,5); 0,146 (0,8); 0,008 (7,0); 0,000 (147,1); -0,008 (10,2); -0,150 (0,7)
Ví dụ I-T3-156: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,077 (8,4); 9,076 (8,4); 8,593 (4,1); 8,589 (4,2); 8,540 (3,1); 8,529 (3,2); 8,471 (8,5); 8,469 (8,4); 8,317 (0,7); 8,019 (4,1); 8,015 (4,0); 7,848 (1,5); 7,843 (5,5); 7,839 (7,4); 7,834 (5,9); 7,826 (4,6); 7,820 (2,2); 7,526 (5,7); 7,517 (1,0); 7,513 (0,9); 7,504 (5,1); 3,328 (238,4); 3,109 (1,9); 3,091 (6,4); 3,072 (6,5); 3,054 (2,0); 2,874 (0,4); 2,864 (0,9); 2,854 (1,2); 2,846 (1,9); 2,836 (2,0); 2,827 (1,2); 2,818 (1,0); 2,808 (0,4); 2,676 (1,5); 2,671 (2,2); 2,667 (1,6); 2,662 (0,8); 2,525 (5,6); 2,520 (8,4); 2,511 (110,7); 2,507 (227,2); 2,502 (302,7); 2,498 (222,3); 2,493 (109,6); 2,338 (0,6); 2,334 (1,4); 2,329 (1,9); 2,324 (1,4); 2,320 (0,7); 1,398 (1,0); 1,235 (8,0); 1,217 (16,0); 1,198 (7,0); 0,736 (1,2); 0,723 (3,4); 0,718 (4,9); 0,706 (4,5); 0,700 (3,8); 0,688 (1,6); 0,577 (1,6); 0,566 (4,8); 0,560 (4,3); 0,556 (4,1); 0,550 (3,9); 0,538 (1,2); 0,146 (0,6); 0,008 (4,5); 0,000 (140,4); -0,009 (5,1); -0,150 (0,6)
Ví dụ I-T3-157: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,389 (0,4); 9,355 (9,8); 8,964 (5,4); 8,959 (5,4); 8,642 (0,5); 8,627 (9,7); 8,577 (4,7); 8,540 (3,8); 8,529 (3,8); 8,317 (1,2); 7,913 (12,3); 7,893 (4,1); 7,887 (2,8); 7,541 (4,9); 7,520 (4,4); 4,038 (0,9); 4,020 (0,8); 4,002 (0,4); 3,454 (0,4); 3,425 (0,9); 3,406 (2,4); 3,387 (2,9); 3,372 (3,7); 3,353 (5,7); 3,329 (694,0); 2,952 (0,7); 2,934 (2,2); 2,915 (2,5); 2,900 (2,2); 2,882 (2,0); 2,864 (1,6); 2,855 (1,6); 2,846 (2,3); 2,836 (2,3); 2,827 (1,6); 2,818 (1,1); 2,807 (0,5); 2,676 (3,2); 2,671 (4,1); 2,667 (3,2); 2,507 (462,3); 2,502 (589,8); 2,498 (442,8); 2,333 (2,8); 2,329 (3,8); 2,325 (2,8); 1,989 (3,4); 1,398 (1,9); 1,234 (0,7); 1,193 (1,0); 1,175 (1,8); 1,157 (0,9); 1,099 (7,6); 1,081 (16,0); 1,063 (7,3); 0,741 (1,3); 0,728 (4,0); 0,723 (5,4); 0,711 (5,1); 0,705 (4,3); 0,694 (1,7); 0,583 (1,8); 0,573 (5,5); 0,566 (5,3); 0,557 (4,5); 0,545 (1,3); 0,146 (0,3); 0,008 (3,2); 0,000 (63,6)
Ví dụ I-T3-158: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,234 (1,6); 9,229 (1,6); 9,165 (3,1); 8,632 (1,6); 8,627 (1,6); 8,584 (3,2); 8,547 (1,2); 8,536 (1,2); 7,875 (4,5); 7,871 (1,9); 7,857 (1,5); 7,852 (0,9); 7,548 (1,5); 7,543 (0,7); 7,529 (0,6); 7,525 (1,4); 4,151 (0,7); 4,132 (2,2); 4,114 (2,2); 4,095 (0,7); 3,329 (71,4); 2,867 (0,3); 2,857 (0,4); 2,849 (0,7); 2,839 (0,7); 2,830 (0,5); 2,821 (0,3); 2,676 (0,4); 2,672 (0,6); 2,667 (0,4); 2,525 (1,6); 2,511 (33,5); 2,507 (66,9); 2,502 (87,7); 2,498 (64,8); 2,494 (32,5); 2,334 (0,4); 2,329 (0,6); 2,325 (0,4); 1,398 (16,0); 1,324 (2,6); 1,306 (5,7); 1,287 (2,6); 1,236 (0,3); 0,738 (0,4); 0,725 (1,3); 0,720 (1,8); 0,708 (1,6); 0,702 (1,4); 0,691 (0,6); 0,580 (0,6); 0,569 (1,8); 0,563 (1,6); 0,554 (1,4); 0,541 (0,4); 0,008 (0,4); 0,000 (10,6); -0,008 (0,4)

Ví dụ I-T3-159: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,812 (2,8); 9,173 (7,1); 8,904 (2,9); 8,880 (0,5); 8,874 (0,4); 8,852 (1,7); 8,845 (2,6); 8,822 (6,9); 8,816 (7,2); 8,765 (9,2); 8,566 (0,7); 8,554 (1,9); 8,512 (5,8); 8,484 (11,2); 8,455 (6,7); 8,449 (6,6); 8,318 (0,7); 8,263 (1,1); 8,257 (1,1); 8,237 (0,4); 8,093 (5,7); 3,903 (16,0); 3,680 (2,8); 3,593 (0,6); 3,582 (0,9); 3,570 (0,7); 3,388 (0,9); 3,333 (306,9); 3,276 (1,0); 3,267 (1,3); 3,168 (13,0); 3,044 (0,4); 2,980 (0,9); 2,891 (2,0); 2,732 (1,7); 2,676 (1,9); 2,672 (2,6); 2,667 (1,9); 2,542 (0,9); 2,525 (6,2); 2,511 (158,8); 2,507 (322,0); 2,503 (423,2); 2,498 (311,3); 2,494 (156,1); 2,334 (2,0); 2,329 (2,7); 2,325 (2,1); 2,083 (0,4); 2,065 (0,3); 1,877 (2,4); 1,867 (5,7); 1,857 (6,2); 1,848 (2,6); 1,718 (0,4); 1,709 (0,4); 1,435 (0,4); 1,355 (0,6); 1,298 (0,6); 1,284 (0,5); 1,276 (0,6); 1,259 (3,3); 1,249 (6,9); 1,239 (9,7); 1,236 (9,6); 1,001 (0,6); 0,991 (0,5); 0,986 (0,5); 0,871 (0,5); 0,862 (0,6); 0,854 (1,3); 0,843 (0,5); 0,837 (0,7); 0,827 (0,3); 0,008 (0,7); 0,000 (25,7); -0,008 (1,0)
Ví dụ I-T3-160: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,728 (0,3); 8,722 (0,5); 8,704 (9,5); 8,698 (9,6); 8,524 (0,3); 8,353 (7,7); 8,234 (15,1); 8,219 (12,8); 8,100 (7,8); 8,052 (10,3); 8,046 (10,1); 7,603 (0,4); 7,592 (0,6); 7,560 (0,5); 7,537 (0,5); 7,495 (0,5); 7,490 (0,5); 7,342 (0,5); 7,067 (2,6); 5,449 (0,7); 4,054 (1,4); 3,893 (0,3); 3,441 (0,7); 3,375 (0,6); 3,241 (1,1); 3,154 (3,0); 3,070 (0,6); 2,886 (0,9); 2,876 (1,9); 2,867 (2,7); 2,858 (3,9); 2,849 (3,9); 2,840 (2,7); 2,831 (1,9); 2,821 (0,7); 2,600 (0,3); 2,590 (0,4); 2,531 (0,4); 2,470 (3,6); 2,465 (5,0); 2,460 (3,7); 2,432 (0,3); 2,425 (0,4); 2,394 (0,4); 2,368 (0,5); 2,359 (0,5); 2,329 (0,6); 2,316 (0,6); 2,289 (0,8); 2,261 (1,3); 2,257 (1,3); 2,255 (1,3); 2,243 (1,9); 2,178 (1072,5); 2,127 (0,9); 2,121 (1,9); 2,114 (3,1); 2,108 (4,0); 2,102 (2,8); 2,096 (1,6); 2,087 (0,7); 2,057 (0,4); 2,036 (0,7); 2,017 (1,1); 1,998 (1,2); 1,965 (20,6); 1,959 (52,5); 1,953 (270,7); 1,947 (487,5); 1,941 (651,6); 1,935 (450,7); 1,929 (234,0); 1,782 (1,4); 1,775 (2,7); 1,769 (3,6); 1,763 (2,5); 1,757 (1,3); 1,711 (2,4); 1,384 (0,4); 1,380 (0,8); 1,269 (16,0); 0,897 (0,7); 0,881 (1,8); 0,864 (0,9); 0,808 (2,2); 0,795 (6,8); 0,790 (8,9); 0,778 (9,1); 0,772 (6,9); 0,760 (3,0); 0,738 (0,4); 0,721 (0,4); 0,661 (0,4); 0,651 (0,4); 0,621 (3,0); 0,609 (8,1); 0,603 (8,3); 0,599 (7,4); 0,594 (7,1); 0,581 (2,1); 0,543 (0,5); 0,390 (0,4); 0,385 (0,5); 0,146 (8,5); 0,085 (0,4); 0,078 (0,5); 0,065 (0,5); 0,008 (68,5); 0,000 (1708,3); -0,009 (75,1); -0,049 (0,5); -0,058 (0,4); -0,150 (8,4)
Ví dụ I-T3-161: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,626 (2,2); 8,153 (1,1); 8,140 (16,0); 8,100 (13,1); 7,994 (7,6); 7,949 (7,7); 7,629 (9,3); 7,624 (11,5); 7,596 (6,2); 7,591 (4,8); 7,585 (2,3); 7,575 (7,4); 7,570 (6,0); 7,488 (0,5); 7,467 (0,4); 7,436 (11,0); 7,415 (8,4); 4,085 (1,8); 4,068 (5,5); 4,050 (5,6); 4,032 (1,9); 3,435 (0,7); 3,425 (1,5); 3,416 (1,9); 3,407 (3,0); 3,394 (2,9); 3,383 (1,8); 3,376 (1,3); 3,365 (0,6); 3,033 (0,5); 2,905 (0,4); 2,683 (0,6); 2,665 (0,6); 2,467 (0,8); 2,143 (2313,8); 2,117 (49,9); 2,108

(11,0); 2,101 (6,8); 2,095 (3,7); 1,972 (32,2); 1,964 (49,2); 1,958 (118,9); 1,953 (611,9); 1,946 (1099,9); 1,940 (1474,5); 1,934 (1019,6); 1,928 (525,2); 1,781 (2,8); 1,775 (5,7); 1,769 (7,9); 1,762 (5,4); 1,756 (2,4); 1,437 (7,6); 1,270 (1,1); 1,222 (6,5); 1,204 (13,0); 1,186 (6,4); 0,951 (2,0); 0,939 (6,4); 0,934 (8,6); 0,921 (8,9); 0,915 (6,5); 0,902 (2,8); 0,881 (0,8); 0,863 (0,6); 0,821 (0,5); 0,811 (0,4); 0,782 (2,8); 0,770 (7,8); 0,764 (8,1); 0,760 (6,9); 0,754 (6,8); 0,741 (1,9); 0,192 (0,4); 0,146 (19,2); 0,087 (1,0); 0,063 (1,5); 0,008 (155,4); 0,000 (3971,4); -0,009 (173,7); -0,068 (0,4); -0,150 (18,8)
Ví dụ I-T3-162: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,194 (6,9); 8,179 (6,7); 7,972 (3,4); 7,759 (3,0); 7,688 (3,5); 7,682 (4,6); 7,655 (2,4); 7,650 (1,8); 7,635 (2,7); 7,629 (2,4); 7,477 (4,3); 7,456 (3,4); 6,951 (1,1); 2,872 (0,7); 2,862 (1,1); 2,854 (1,6); 2,844 (1,6); 2,835 (1,1); 2,826 (0,8); 2,471 (0,3); 2,466 (0,5); 2,461 (0,3); 2,180 (199,2); 2,134 (0,5); 2,115 (0,5); 2,109 (0,6); 2,102 (0,4); 1,965 (2,7); 1,959 (6,7); 1,953 (37,6); 1,947 (69,0); 1,941 (93,6); 1,935 (65,6); 1,929 (34,4); 1,776 (0,4); 1,770 (0,5); 1,763 (0,4); 1,437 (16,0); 1,269 (0,4); 0,795 (0,9); 0,782 (2,6); 0,777 (3,6); 0,765 (3,7); 0,759 (2,8); 0,747 (1,2); 0,612 (1,2); 0,601 (3,3); 0,595 (3,4); 0,591 (3,1); 0,586 (3,0); 0,573 (0,9); 0,146 (1,5); 0,008 (10,7); 0,000 (294,5); -0,150 (1,5)
Ví dụ I-T3-163: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,205 (4,0); 8,190 (4,1); 7,973 (2,2); 7,760 (2,0); 7,736 (2,0); 7,731 (2,6); 7,704 (1,2); 7,700 (1,0); 7,684 (1,4); 7,679 (1,2); 7,600 (0,8); 7,509 (2,3); 7,488 (1,9); 2,161 (116,4); 2,121 (0,5); 2,114 (0,5); 2,108 (0,6); 2,102 (0,4); 1,963 (2,5); 1,952 (29,4); 1,946 (52,9); 1,941 (70,8); 1,934 (50,0); 1,928 (26,6); 1,769 (0,4); 1,598 (1,0); 1,583 (2,9); 1,576 (2,8); 1,563 (1,3); 1,436 (16,0); 1,362 (1,3); 1,348 (2,9); 1,341 (3,0); 1,327 (1,0); 1,269 (0,5); 0,145 (1,2); 0,000 (226,5); -0,150 (1,2)
Ví dụ I-T3-164: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,460 (5,0); 8,854 (7,4); 8,671 (4,0); 8,651 (4,0); 8,535 (7,4); 7,846 (1,3); 7,840 (3,0); 7,833 (4,3); 7,827 (5,4); 7,824 (4,4); 7,818 (1,5); 7,594 (4,1); 7,584 (0,8); 7,582 (0,8); 7,572 (3,6); 4,056 (1,2); 4,038 (3,7); 4,020 (3,7); 4,002 (1,3); 3,934 (1,6); 3,329 (39,1); 2,671 (0,4); 2,525 (1,1); 2,507 (42,6); 2,502 (56,3); 2,498 (42,6); 2,329 (0,4); 1,989 (16,0); 1,619 (1,7); 1,605 (4,3); 1,598 (4,6); 1,585 (1,9); 1,397 (5,6); 1,295 (2,0); 1,281 (4,2); 1,275 (4,5); 1,260 (1,6); 1,193 (4,2); 1,175 (8,4); 1,157 (4,1); 1,069 (10,8); 0,008 (1,8); 0,000 (48,4); -0,008 (2,3)
Ví dụ I-T3-165: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,748 (1,7); 8,742 (1,8); 8,353 (1,5); 8,243 (2,8); 8,228 (2,4); 8,116 (1,9); 8,110 (2,1); 8,101 (1,5); 7,706 (0,5); 3,236 (0,9); 3,070 (0,4); 2,883 (0,4); 2,284 (0,3); 2,154 (118,3); 2,120 (0,8); 2,114 (0,9); 2,108 (0,9); 2,102 (0,7); 2,095 (0,4); 1,972 (0,7); 1,965 (3,4); 1,958

(8,8); 1,953 (47,0); 1,946 (85,3); 1,940 (114,8); 1,934 (80,1); 1,928 (41,8); 1,775 (0,5); 1,769 (0,7); 1,763 (0,5); 1,612 (0,8); 1,597 (2,0); 1,591 (2,0); 1,577 (1,0); 1,437 (16,0); 1,370 (1,0); 1,356 (2,0); 1,349 (2,1); 1,334 (0,8); 1,269 (0,9); 0,146 (1,9); 0,008 (15,7); 0,000 (390,9); -0,009 (19,9); -0,150 (2,0)
Ví dụ I-T3-166: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,440 (11,8); 9,127 (15,9); 8,569 (7,7); 8,491 (16,0); 8,318 (2,5); 7,965 (7,6); 7,961 (7,7); 7,926 (7,5); 7,921 (12,0); 7,912 (6,7); 7,906 (3,4); 7,891 (6,2); 7,885 (4,8); 7,573 (10,1); 7,553 (9,2); 3,459 (0,4); 3,399 (0,7); 3,365 (1,8); 3,331 (1516,7); 3,298 (1,6); 2,701 (0,4); 2,694 (0,3); 2,676 (6,5); 2,671 (9,1); 2,667 (6,9); 2,638 (0,4); 2,576 (1,1); 2,529 (53,9); 2,520 (35,9); 2,511 (509,9); 2,507 (1041,8); 2,502 (1375,8); 2,498 (1016,8); 2,417 (0,5); 2,351 (0,6); 2,334 (6,6); 2,329 (9,1); 2,325 (6,8); 2,302 (0,3); 1,621 (3,9); 1,607 (9,8); 1,600 (10,6); 1,587 (4,4); 1,547 (0,4); 1,348 (0,4); 1,307 (4,5); 1,294 (9,7); 1,287 (10,6); 1,273 (3,7); 1,237 (0,4); 0,146 (3,4); 0,024 (0,3); 0,008 (24,7); 0,000 (766,8); -0,008 (29,5); -0,032 (0,8); -0,150 (3,5)
Ví dụ I-T3-167: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,440 (6,2); 9,103 (8,3); 9,094 (0,8); 8,587 (4,2); 8,479 (8,5); 8,317 (1,1); 8,021 (4,5); 7,917 (3,9); 7,911 (6,2); 7,903 (3,6); 7,898 (1,8); 7,882 (3,2); 7,877 (2,5); 7,597 (0,4); 7,574 (5,4); 7,554 (4,7); 3,329 (494,7); 3,110 (1,9); 3,092 (6,3); 3,074 (6,4); 3,056 (2,0); 2,871 (0,3); 2,676 (3,0); 2,671 (4,2); 2,667 (3,1); 2,524 (9,6); 2,507 (478,6); 2,502 (637,0); 2,498 (477,3); 2,408 (0,8); 2,333 (2,9); 2,329 (4,1); 2,325 (3,1); 1,621 (2,0); 1,607 (5,2); 1,600 (5,6); 1,587 (2,3); 1,306 (2,4); 1,293 (5,3); 1,286 (5,7); 1,272 (2,1); 1,261 (0,6); 1,235 (7,6); 1,217 (16,0); 1,199 (7,1); 0,146 (1,6); 0,008 (11,5); 0,000 (362,6); -0,008 (14,5); -0,026 (0,6); -0,150 (1,6)
Ví dụ I-T3-168: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,917 (4,0); 8,676 (2,2); 8,612 (2,2); 8,554 (1,4); 8,543 (1,4); 8,439 (4,1); 7,783 (0,8); 7,777 (1,6); 7,770 (2,3); 7,764 (3,0); 7,539 (2,1); 7,527 (0,4); 7,517 (1,8); 4,038 (0,4); 4,020 (0,4); 3,936 (2,3); 3,333 (40,9); 2,864 (0,4); 2,854 (0,6); 2,846 (0,8); 2,836 (0,8); 2,827 (0,6); 2,818 (0,4); 2,507 (26,6); 2,503 (34,6); 2,498 (26,4); 1,989 (1,7); 1,296 (0,7); 1,193 (0,5); 1,175 (0,9); 1,157 (0,5); 1,069 (16,0); 0,733 (0,5); 0,720 (1,6); 0,716 (2,1); 0,703 (2,0); 0,698 (1,8); 0,686 (0,7); 0,566 (0,7); 0,555 (2,1); 0,549 (2,0); 0,540 (1,8); 0,527 (0,6); 0,000 (11,0)
Ví dụ I-T3-169: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,461 (11,1); 9,416 (0,4); 8,936 (15,7); 8,681 (8,8); 8,616 (8,7); 8,450 (16,0); 7,833 (11,0); 7,827 (9,7); 7,820 (7,2); 7,652 (0,3); 7,589 (8,1); 7,578 (1,9); 7,567 (7,0); 7,556 (0,5); 4,038 (0,8); 4,020 (0,8); 3,937 (0,6); 3,333 (133,2); 2,672 (0,7); 2,503 (110,4); 2,330 (0,7); 1,989 (3,2); 1,622 (3,6); 1,607 (9,7); 1,601 (10,5); 1,587 (4,3); 1,563 (0,4); 1,556 (0,4); 1,547 (0,5);

1,334 (0,4); 1,314 (0,5); 1,300 (4,8); 1,294 (5,2); 1,281 (9,9); 1,274 (10,4); 1,259 (3,7); 1,235 (0,6); 1,193 (0,9); 1,175 (1,7); 1,157 (0,9); 1,069 (3,7); 0,000 (35,7)
Ví dụ I-T3-170: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,441 (1,5); 9,436 (2,4); 8,694 (1,7); 8,619 (3,2); 8,443 (1,7); 8,398 (3,2); 8,274 (2,8); 7,960 (1,6); 7,956 (1,6); 7,810 (0,9); 7,804 (2,1); 7,797 (2,3); 7,792 (2,9); 7,787 (3,1); 7,782 (0,9); 7,742 (1,6); 7,739 (1,6); 7,569 (1,0); 7,557 (2,1); 7,546 (1,3); 7,535 (1,8); 4,056 (1,2); 4,038 (3,6); 4,020 (3,7); 4,002 (1,2); 3,332 (35,6); 3,116 (0,7); 3,097 (2,3); 3,079 (2,4); 3,061 (0,7); 2,525 (0,5); 2,512 (10,5); 2,507 (21,4); 2,503 (28,1); 2,498 (20,5); 2,494 (9,9); 1,990 (16,0); 1,615 (1,1); 1,601 (2,8); 1,594 (2,9); 1,581 (1,3); 1,289 (1,3); 1,276 (2,8); 1,269 (3,0); 1,255 (1,1); 1,208 (2,7); 1,193 (5,6); 1,190 (6,2); 1,175 (9,2); 1,157 (4,2); 0,000 (3,5)
Ví dụ I-T3-171: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,443 (12,6); 9,162 (16,0); 8,676 (8,2); 8,530 (16,0); 8,412 (7,8); 8,317 (4,0); 7,937 (8,0); 7,932 (12,0); 7,921 (6,8); 7,915 (3,8); 7,900 (6,4); 7,895 (5,0); 7,716 (0,4); 7,584 (10,3); 7,563 (9,1); 4,358 (2,5); 4,332 (7,5); 4,306 (7,8); 4,280 (2,7); 4,104 (0,5); 4,079 (0,4); 3,496 (0,5); 3,480 (0,4); 3,466 (0,5); 3,452 (0,4); 3,396 (0,8); 3,329 (1554,1); 3,287 (1,0); 2,676 (8,0); 2,671 (11,1); 2,667 (8,6); 2,645 (0,6); 2,525 (28,7); 2,511 (614,7); 2,507 (1266,3); 2,502 (1687,1); 2,498 (1264,4); 2,389 (0,6); 2,380 (0,6); 2,333 (7,8); 2,329 (11,0); 2,325 (8,3); 2,256 (0,4); 2,075 (1,4); 1,623 (4,0); 1,608 (10,0); 1,601 (10,8); 1,588 (4,6); 1,548 (0,5); 1,347 (0,4); 1,306 (4,7); 1,293 (10,0); 1,286 (10,8); 1,272 (3,9); 1,234 (0,7); 0,146 (0,5); 0,017 (0,4); 0,008 (3,6); 0,000 (115,1); -0,008 (5,1); -0,150 (0,6)
Ví dụ I-T3-172: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,613 (0,3); 8,596 (8,4); 8,529 (2,9); 8,518 (3,0); 8,492 (0,7); 8,381 (8,5); 8,333 (0,6); 7,956 (4,4); 7,953 (4,4); 7,749 (2,3); 7,743 (4,8); 7,739 (5,0); 7,725 (13,2); 7,507 (4,3); 7,488 (2,3); 7,485 (3,1); 4,055 (1,2); 4,038 (3,6); 4,020 (3,7); 4,002 (1,2); 3,329 (51,5); 3,112 (1,9); 3,094 (6,1); 3,076 (6,1); 3,057 (2,0); 3,048 (0,4); 3,029 (0,9); 3,011 (0,9); 2,856 (0,8); 2,847 (1,1); 2,838 (1,8); 2,828 (1,8); 2,819 (1,1); 2,809 (0,9); 2,676 (0,4); 2,671 (0,5); 2,667 (0,4); 2,524 (1,3); 2,511 (30,4); 2,507 (60,9); 2,502 (79,7); 2,498 (58,7); 2,494 (29,4); 2,333 (0,4); 2,329 (0,5); 2,324 (0,4); 1,989 (16,0); 1,235 (0,4); 1,207 (6,8); 1,192 (7,1); 1,189 (14,7); 1,175 (10,4); 1,170 (7,2); 1,157 (4,7); 1,068 (0,4); 0,727 (1,1); 0,714 (3,3); 0,709 (4,6); 0,697 (4,3); 0,691 (3,7); 0,680 (1,5); 0,563 (1,5); 0,552 (4,6); 0,546 (4,3); 0,536 (3,8); 0,524 (1,1); 0,008 (2,2); 0,000 (61,3); -0,008 (2,4)
Ví dụ I-T3-173: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,653 (6,0); 8,567 (3,1); 8,561 (3,2); 8,401 (5,7); 8,091 (10,1); 8,013 (3,1); 8,007 (3,2); 7,957 (0,4); 6,579 (0,7); 5,409 (0,3); 3,923 (16,0); 3,592 (0,3); 3,367 (923,7); 2,985 (14,3); 2,767 (0,4); 2,740 (1,3); 2,725 (0,9); 2,704 (1,4); 2,674 (0,9); 2,509 (96,0); 2,505 (123,6);

2,501 (91,6); 2,332 (0,8); 2,074 (1,6); 1,271 (0,8); 1,169 (5,1); 0,467 (4,6); 0,450 (2,4); 0,008 (1,4); 0,000 (28,9)
Ví dụ I-T3-174: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,835 (7,5); 8,672 (3,0); 8,669 (4,0); 8,650 (3,9); 8,649 (3,9); 8,645 (2,9); 8,556 (2,5); 8,545 (2,5); 8,525 (7,6); 7,787 (1,7); 7,781 (2,9); 7,766 (4,0); 7,763 (11,3); 7,546 (3,2); 7,542 (1,7); 7,527 (1,5); 7,524 (2,8); 4,056 (1,2); 4,038 (3,6); 4,020 (3,7); 4,002 (1,2); 3,329 (59,6); 2,865 (0,7); 2,856 (0,9); 2,847 (1,4); 2,836 (1,5); 2,828 (0,9); 2,818 (0,7); 2,671 (0,4); 2,525 (1,0); 2,520 (1,6); 2,511 (21,0); 2,507 (42,8); 2,502 (56,7); 2,498 (41,2); 2,493 (19,8); 2,329 (0,4); 1,989 (16,0); 1,193 (4,3); 1,175 (8,7); 1,157 (4,2); 0,733 (1,0); 0,720 (2,7); 0,715 (3,8); 0,703 (3,5); 0,697 (2,9); 0,686 (1,3); 0,566 (1,3); 0,555 (3,7); 0,549 (3,3); 0,545 (3,1); 0,540 (3,0); 0,527 (0,9); 0,008 (1,4); 0,000 (40,4); -0,009 (1,3)
Ví dụ I-T3-175: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,146 (3,1); 8,082 (4,8); 7,714 (1,6); 7,697 (2,0); 7,692 (2,5); 7,663 (1,3); 7,658 (1,0); 7,642 (1,5); 7,637 (1,3); 7,472 (2,3); 7,451 (1,8); 6,931 (0,6); 2,873 (0,4); 2,864 (0,6); 2,855 (0,9); 2,845 (0,9); 2,837 (0,6); 2,827 (0,4); 2,165 (79,0); 2,115 (0,4); 2,108 (0,5); 2,102 (0,3); 1,965 (1,5); 1,959 (4,0); 1,953 (28,1); 1,947 (52,6); 1,941 (72,5); 1,935 (50,5); 1,929 (26,2); 1,769 (0,4); 1,437 (16,0); 0,796 (0,5); 0,783 (1,5); 0,778 (2,0); 0,765 (2,0); 0,760 (1,5); 0,748 (0,7); 0,613 (0,6); 0,601 (1,7); 0,595 (1,8); 0,591 (1,6); 0,586 (1,6); 0,574 (0,5); 0,000 (0,6)
Ví dụ I-T3-176: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 19,983 (0,4); 8,920 (0,7); 8,270 (0,3); 8,158 (11,0); 8,124 (0,4); 8,095 (11,8); 8,083 (6,1); 8,035 (0,7); 7,746 (6,2); 7,741 (7,8); 7,713 (9,2); 7,692 (4,8); 7,686 (4,4); 7,669 (3,3); 7,590 (0,6); 7,505 (6,9); 7,484 (5,7); 3,901 (3,1); 2,470 (2,5); 2,466 (3,4); 2,461 (2,6); 2,417 (1,0); 2,179 (1701,9); 2,153 (39,9); 2,121 (2,8); 2,115 (3,6); 2,109 (4,3); 2,103 (3,2); 2,096 (1,9); 2,034 (0,5); 1,965 (12,0); 1,954 (216,5); 1,947 (401,4); 1,941 (546,5); 1,935 (384,1); 1,929 (201,2); 1,782 (1,6); 1,776 (2,6); 1,770 (3,4); 1,764 (2,5); 1,599 (3,1); 1,584 (8,5); 1,577 (8,4); 1,564 (4,1); 1,524 (0,7); 1,437 (16,0); 1,401 (0,7); 1,362 (3,9); 1,349 (8,6); 1,342 (8,8); 1,327 (3,1); 1,268 (2,7); 0,882 (0,4); 0,000 (4,2)
Ví dụ I-T3-177: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,462 (7,5); 8,855 (1,9); 8,790 (8,8); 8,673 (1,1); 8,653 (1,1); 8,536 (1,9); 8,483 (8,9); 8,391 (4,5); 8,388 (4,6); 8,105 (4,5); 8,102 (4,5); 7,846 (0,5); 7,840 (1,0); 7,833 (2,8); 7,827 (5,2); 7,820 (5,9); 7,814 (7,0); 7,810 (5,4); 7,804 (1,9); 7,595 (1,3); 7,586 (5,5); 7,573 (1,8); 7,564 (4,6); 4,055 (0,5); 4,038 (1,4); 4,020 (1,4); 4,002 (0,5); 3,331 (91,4); 3,168 (2,0); 3,150 (6,5); 3,131 (6,6); 3,113 (2,0); 2,676 (0,5); 2,672 (0,7); 2,667 (0,5); 2,525 (1,8); 2,511 (39,2); 2,507 (78,6); 2,502 (103,0); 2,498 (76,1); 2,494 (38,1); 2,334 (0,5); 2,329 (0,7); 2,325 (0,5); 1,989 (6,1); 1,619 (2,5); 1,604 (6,3); 1,598 (6,8); 1,585 (2,8); 1,397 (5,9); 1,293 (2,9); 1,279

(6,3); 1,273 (6,7); 1,258 (2,4); 1,203 (7,5); 1,193 (2,5); 1,184 (16,0); 1,175 (4,1); 1,166 (7,2); 1,157 (2,0); 1,069 (0,5); 0,008 (2,2); 0,000 (62,2); -0,008 (2,5)
Ví dụ I-T3-178: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,730 (5,4); 8,726 (5,4); 8,701 (10,4); 8,556 (3,7); 8,545 (3,7); 8,483 (0,5); 8,463 (10,3); 8,318 (0,6); 8,268 (5,5); 8,264 (5,4); 7,760 (2,4); 7,754 (3,8); 7,736 (14,8); 7,524 (4,5); 7,505 (2,3); 7,502 (3,8); 4,055 (1,2); 4,037 (3,6); 4,020 (3,7); 4,002 (1,2); 3,460 (1,7); 3,442 (5,0); 3,424 (5,0); 3,405 (1,7); 3,329 (124,3); 2,868 (0,4); 2,858 (1,0); 2,848 (1,4); 2,840 (2,2); 2,830 (2,2); 2,821 (1,4); 2,811 (1,0); 2,802 (0,4); 2,675 (1,1); 2,671 (1,5); 2,667 (1,2); 2,541 (6,3); 2,506 (175,4); 2,502 (223,8); 2,498 (167,1); 2,333 (1,1); 2,329 (1,4); 2,324 (1,1); 1,989 (15,7); 1,235 (0,4); 1,193 (4,2); 1,175 (8,3); 1,157 (5,1); 1,150 (7,5); 1,132 (16,0); 1,113 (7,2); 0,728 (1,4); 0,715 (4,2); 0,710 (5,5); 0,698 (5,2); 0,692 (4,4); 0,681 (1,7); 0,561 (1,8); 0,551 (5,6); 0,545 (5,4); 0,535 (4,6); 0,523 (1,3); 0,146 (0,4); 0,000 (94,7); -0,008 (4,3); -0,150 (0,4)
Ví dụ I-T3-179: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,862 (9,5); 8,701 (0,4); 8,548 (3,2); 8,537 (3,2); 8,504 (0,4); 8,487 (10,0); 8,482 (5,1); 8,477 (4,7); 8,463 (0,4); 8,317 (1,4); 8,095 (4,8); 8,091 (4,8); 7,769 (2,1); 7,764 (3,9); 7,753 (5,3); 7,748 (11,5); 7,736 (0,7); 7,540 (5,3); 7,533 (1,3); 7,524 (1,3); 7,517 (4,5); 4,055 (1,0); 4,037 (3,2); 4,020 (3,2); 4,002 (1,1); 3,507 (0,3); 3,443 (0,4); 3,424 (0,4); 3,396 (0,5); 3,373 (0,8); 3,332 (779,0); 3,293 (0,7); 3,061 (0,5); 3,042 (1,8); 3,024 (2,1); 3,008 (2,2); 2,995 (0,5); 2,990 (2,0); 2,971 (0,6); 2,870 (0,4); 2,860 (0,9); 2,850 (1,3); 2,842 (2,0); 2,831 (2,1); 2,822 (1,3); 2,813 (1,0); 2,803 (0,4); 2,680 (1,3); 2,676 (2,7); 2,671 (3,7); 2,667 (2,8); 2,584 (1,0); 2,565 (2,6); 2,547 (3,3); 2,542 (5,6); 2,525 (10,0); 2,520 (15,4); 2,511 (205,0); 2,507 (417,5); 2,502 (550,6); 2,498 (403,5); 2,493 (198,2); 2,333 (2,6); 2,329 (3,6); 2,325 (2,7); 1,989 (13,8); 1,298 (0,3); 1,259 (0,5); 1,235 (0,9); 1,193 (3,9); 1,175 (7,6); 1,157 (3,8); 1,132 (0,6); 1,047 (7,2); 1,029 (16,0); 1,010 (6,9); 0,733 (1,3); 0,720 (3,5); 0,715 (5,2); 0,703 (4,7); 0,697 (4,1); 0,685 (1,7); 0,563 (1,7); 0,552 (5,0); 0,546 (4,7); 0,542 (4,4); 0,536 (4,2); 0,524 (1,3); 0,146 (1,1); 0,008 (8,8); 0,000 (281,7); -0,009 (10,6); -0,150 (1,1)
Ví dụ I-T3-180: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,105 (5,5); 9,100 (4,5); 8,889 (0,7); 8,871 (9,2); 8,581 (4,6); 8,570 (6,0); 8,564 (6,8); 8,559 (5,5); 8,545 (9,1); 8,317 (0,9); 7,817 (0,3); 7,812 (0,3); 7,774 (3,3); 7,768 (4,2); 7,755 (7,5); 7,751 (13,2); 7,553 (4,7); 7,548 (2,1); 7,535 (2,4); 7,530 (3,5); 4,055 (0,8); 4,037 (2,1); 4,020 (2,1); 4,002 (0,7); 3,559 (2,3); 3,541 (6,5); 3,523 (6,4); 3,504 (2,1); 3,334 (39,2); 3,328 (131,0); 2,866 (1,3); 2,856 (1,8); 2,847 (2,5); 2,837 (2,3); 2,829 (1,5); 2,819 (1,0); 2,809 (0,4); 2,676 (2,3); 2,671 (2,5); 2,667 (1,8); 2,621 (0,4); 2,507 (343,0); 2,502 (380,1); 2,498 (256,9); 2,333 (2,1); 2,329 (2,4); 2,324 (1,6); 1,995 (2,3); 1,989 (8,7); 1,298 (0,4); 1,258

(0,6); 1,249 (0,7); 1,236 (1,2); 1,193 (3,8); 1,181 (8,8); 1,175 (7,3); 1,163 (16,0); 1,157 (4,7); 1,144 (6,8); 1,114 (0,6); 0,731 (1,9); 0,719 (5,2); 0,714 (5,7); 0,702 (5,8); 0,696 (4,2); 0,684 (1,6); 0,593 (0,3); 0,563 (2,7); 0,553 (6,7); 0,547 (6,1); 0,538 (4,5); 0,525 (1,3); 0,006 (15,8); 0,000 (61,8); -0,008 (2,7)
Ví dụ I-T3-181: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,108 (0,4); 9,087 (10,3); 8,892 (5,1); 8,888 (5,2); 8,613 (0,4); 8,591 (10,7); 8,579 (3,8); 8,568 (3,7); 8,407 (5,3); 8,403 (5,3); 7,787 (2,0); 7,781 (4,5); 7,775 (6,6); 7,769 (7,7); 7,765 (6,0); 7,759 (2,3); 7,575 (6,0); 7,564 (1,5); 7,552 (5,0); 4,056 (1,1); 4,038 (3,4); 4,020 (3,4); 4,002 (1,2); 3,330 (39,4); 3,101 (0,5); 3,083 (1,8); 3,065 (2,2); 3,049 (2,3); 3,031 (2,1); 3,012 (0,6); 2,879 (0,4); 2,869 (1,0); 2,860 (1,4); 2,851 (2,1); 2,841 (2,1); 2,833 (1,4); 2,823 (1,0); 2,813 (0,4); 2,676 (0,5); 2,672 (0,6); 2,667 (0,5); 2,601 (0,7); 2,583 (2,1); 2,564 (2,5); 2,549 (2,3); 2,530 (2,5); 2,525 (2,1); 2,507 (69,4); 2,503 (90,4); 2,498 (68,1); 2,334 (0,4); 2,329 (0,6); 2,325 (0,4); 1,989 (14,7); 1,193 (3,9); 1,175 (7,7); 1,158 (3,8); 1,081 (0,4); 1,067 (7,5); 1,048 (16,0); 1,030 (7,2); 0,738 (1,3); 0,725 (4,0); 0,720 (5,5); 0,708 (5,1); 0,702 (4,4); 0,691 (1,8); 0,566 (1,8); 0,555 (5,4); 0,549 (5,2); 0,539 (4,6); 0,527 (1,3); 0,008 (0,6); 0,000 (16,1)
Ví dụ I-T3-182: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,454 (7,2); 8,884 (10,2); 8,500 (10,2); 8,482 (4,9); 8,478 (5,0); 8,317 (0,4); 8,098 (5,0); 8,093 (5,0); 7,829 (1,5); 7,823 (5,9); 7,821 (7,8); 7,815 (6,3); 7,807 (4,8); 7,801 (2,4); 7,588 (5,9); 7,579 (1,0); 7,574 (1,0); 7,566 (5,1); 4,056 (1,2); 4,038 (3,6); 4,020 (3,6); 4,002 (1,2); 3,329 (62,1); 3,069 (0,5); 3,051 (1,8); 3,032 (2,1); 3,017 (2,3); 2,998 (2,1); 2,980 (0,6); 2,676 (0,6); 2,672 (0,8); 2,667 (0,6); 2,594 (0,6); 2,575 (2,1); 2,557 (2,5); 2,541 (2,4); 2,523 (3,8); 2,520 (3,9); 2,511 (46,1); 2,507 (93,1); 2,503 (122,1); 2,498 (89,1); 2,494 (44,0); 2,334 (0,6); 2,329 (0,8); 2,325 (0,6); 1,989 (15,8); 1,622 (2,4); 1,607 (5,9); 1,601 (6,4); 1,588 (2,7); 1,290 (2,8); 1,276 (5,9); 1,270 (6,4); 1,255 (2,4); 1,235 (0,5); 1,193 (4,2); 1,175 (8,3); 1,157 (4,1); 1,134 (0,3); 1,051 (7,3); 1,033 (16,0); 1,014 (7,1); 0,008 (0,8); 0,000 (23,6); -0,008 (0,9)
Ví dụ I-T3-183: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,464 (4,6); 8,733 (3,3); 8,729 (3,6); 8,723 (6,9); 8,477 (6,6); 8,270 (3,3); 8,266 (3,3); 7,820 (1,3); 7,814 (3,0); 7,808 (4,3); 7,803 (4,8); 7,798 (3,7); 7,792 (1,4); 7,573 (4,0); 7,562 (0,9); 7,551 (3,4); 4,055 (1,2); 4,038 (3,6); 4,020 (3,7); 4,002 (1,2); 3,465 (0,9); 3,447 (2,9); 3,429 (3,0); 3,410 (1,0); 3,329 (48,5); 2,676 (0,4); 2,671 (0,6); 2,667 (0,5); 2,525 (1,6); 2,511 (35,4); 2,507 (71,4); 2,502 (93,1); 2,498 (68,1); 2,494 (33,4); 2,333 (0,4); 2,329 (0,6); 2,325 (0,4); 1,989 (16,0); 1,614 (1,6); 1,600 (3,9); 1,593 (4,1); 1,580 (1,7); 1,290 (1,9); 1,277 (4,0); 1,270 (4,3); 1,256 (1,6); 1,235 (0,5); 1,193 (4,4); 1,175 (8,8); 1,157 (4,9); 1,152 (5,1); 1,134 (10,7); 1,115 (4,8); 0,008 (0,6); 0,000 (19,6); -0,009 (0,7)
Ví dụ I-T3-184: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):

δ= 8,222 (1,1); 8,212 (14,6); 8,193 (0,9); 8,163 (0,7); 8,151 (14,2); 8,150 (13,6); 7,984 (5,6); 7,968 (5,6); 7,937 (0,6); 7,860 (0,5); 7,837 (0,5); 7,699 (8,7); 7,694 (11,4); 7,666 (5,9); 7,660 (4,9); 7,645 (6,7); 7,639 (6,1); 7,588 (0,8); 7,523 (0,3); 7,480 (10,7); 7,459 (8,5); 6,928 (2,6); 5,448 (5,4); 2,881 (0,7); 2,871 (1,9); 2,862 (2,7); 2,853 (4,3); 2,844 (4,3); 2,835 (2,8); 2,825 (2,1); 2,816 (0,7); 2,474 (0,9); 2,469 (1,8); 2,464 (2,4); 2,460 (1,9); 2,455 (1,0); 2,293 (0,4); 2,270 (0,7); 2,266 (0,7); 2,246 (1,0); 2,227 (1,0); 2,160 (875,2); 2,121 (3,1); 2,114 (4,2); 2,108 (5,3); 2,102 (3,8); 2,096 (2,1); 2,036 (0,6); 2,018 (0,8); 1,998 (0,9); 1,965 (19,7); 1,959 (49,7); 1,953 (311,9); 1,947 (575,9); 1,941 (786,4); 1,935 (548,9); 1,929 (287,9); 1,883 (0,6); 1,782 (1,8); 1,775 (3,4); 1,769 (4,7); 1,763 (3,2); 1,757 (1,8); 1,525 (0,4); 1,385 (0,3); 1,372 (0,5); 1,359 (0,4); 1,340 (1,4); 1,335 (0,8); 1,285 (2,9); 1,270 (16,0); 1,204 (0,3); 0,918 (0,4); 0,899 (0,9); 0,882 (2,1); 0,864 (1,1); 0,832 (0,4); 0,795 (2,4); 0,783 (7,1); 0,777 (9,7); 0,765 (9,8); 0,760 (7,5); 0,747 (3,3); 0,726 (0,5); 0,708 (0,5); 0,652 (0,5); 0,643 (0,5); 0,627 (0,4); 0,613 (3,3); 0,601 (8,2); 0,595 (8,8); 0,591 (7,8); 0,586 (7,8); 0,573 (2,3); 0,536 (0,3); 0,520 (0,4); 0,478 (0,3); 0,392 (0,4); 0,387 (0,4); 0,008 (0,7); 0,000 (20,9); -0,009 (1,0)
Ví dụ I-T3-185: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 17,517 (0,4); 15,219 (0,3); 14,973 (0,3); 13,920 (0,3); 8,404 (0,4); 8,394 (0,4); 8,224 (16,0); 8,208 (0,8); 8,165 (12,9); 7,986 (5,2); 7,970 (5,1); 7,938 (1,2); 7,864 (0,5); 7,840 (0,4); 7,747 (7,8); 7,741 (10,5); 7,715 (5,2); 7,710 (4,3); 7,694 (6,0); 7,689 (5,7); 7,654 (3,5); 7,624 (1,2); 7,601 (2,1); 7,594 (1,3); 7,590 (2,0); 7,564 (1,9); 7,541 (1,1); 7,513 (9,5); 7,492 (7,5); 7,292 (0,7); 7,282 (0,4); 7,270 (0,7); 7,201 (0,4); 7,176 (1,6); 7,168 (0,4); 7,151 (0,4); 7,064 (0,5); 7,045 (0,4); 6,914 (0,4); 6,892 (0,4); 6,881 (0,8); 6,859 (0,6); 6,178 (0,3); 6,160 (0,4); 6,111 (0,4); 6,099 (0,4); 6,067 (0,4); 6,042 (0,4); 6,038 (0,4); 6,017 (0,4); 5,640 (0,4); 5,594 (0,3); 5,540 (0,3); 5,516 (0,4); 5,485 (0,4); 5,427 (0,3); 5,373 (0,3); 4,507 (0,6); 4,491 (0,6); 4,068 (1,3); 4,050 (1,1); 4,032 (0,5); 3,789 (0,5); 3,776 (1,0); 3,758 (2,9); 3,656 (0,4); 3,149 (0,4); 3,128 (0,4); 2,720 (13,7); 2,656 (0,5); 2,492 (0,9); 2,475 (2,8); 2,470 (6,1); 2,465 (9,0); 2,461 (6,7); 2,456 (3,4); 2,285 (0,4); 2,264 (0,7); 2,247 (1,5); 2,237 (1,1); 2,171 (2483,4); 2,121 (7,1); 2,114 (9,5); 2,108 (11,9); 2,102 (8,8); 2,096 (5,2); 2,075 (1,8); 2,032 (0,9); 2,020 (0,7); 2,011 (0,6); 1,972 (8,4); 1,965 (39,5); 1,959 (102,1); 1,953 (642,3); 1,947 (1199,8); 1,941 (1645,9); 1,935 (1167,9); 1,929 (619,1); 1,818 (1,3); 1,782 (4,2); 1,775 (7,5); 1,769 (10,3); 1,763 (7,4); 1,757 (4,5); 1,722 (0,9); 1,708 (0,9); 1,696 (0,9); 1,688 (0,9); 1,674 (0,7); 1,638 (0,8); 1,597 (4,8); 1,583 (11,6); 1,576 (12,0); 1,562 (6,3); 1,543 (0,8); 1,522 (1,2); 1,501 (0,6); 1,472 (0,6); 1,437 (9,0); 1,402 (1,2); 1,361 (6,2); 1,348 (11,9); 1,341 (12,8); 1,327 (7,6); 1,311 (3,5); 1,269 (8,7); 1,222 (1,9); 1,204 (3,2); 1,186 (1,7); 1,164 (0,6); 1,154 (0,6); 1,145 (0,5); 1,131 (0,6); 1,109 (0,6); 1,095 (0,6); 1,091 (0,6); 1,047 (0,5); 1,040 (0,4); 1,031 (0,4); 1,009 (0,4); 0,987 (0,4); 0,976 (0,4); 0,952 (0,4); 0,945 (0,5); 0,897 (0,8);

0,881 (1,6); 0,855 (1,3); 0,838 (0,9); 0,824 (0,5); 0,806 (0,5); 0,797 (0,4); 0,776 (0,4); 0,766 (0,5); 0,739 (0,4); 0,636 (0,3); 0,526 (0,3); 0,147 (0,4); 0,008 (2,5); 0,000 (80,2); -0,020 (0,5); -0,121 (0,3); -0,149 (0,4); -0,213 (0,4); -2,478 (0,3); -3,017 (0,3)
Ví dụ I-T3-186: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,202 (8,0); 8,190 (8,4); 7,927 (0,7); 7,858 (4,8); 7,731 (2,7); 7,708 (2,9); 7,690 (4,8); 7,685 (6,1); 7,657 (2,8); 7,652 (2,5); 7,637 (3,4); 7,632 (3,2); 7,590 (0,8); 7,477 (5,0); 7,456 (4,0); 6,984 (0,3); 6,951 (1,9); 6,041 (0,3); 5,521 (0,4); 5,491 (0,4); 5,466 (0,3); 3,874 (0,9); 3,056 (0,3); 2,890 (4,6); 2,872 (1,0); 2,863 (1,5); 2,853 (2,1); 2,844 (2,2); 2,835 (1,7); 2,825 (1,1); 2,799 (0,4); 2,772 (4,2); 2,711 (0,4); 2,684 (0,4); 2,671 (0,4); 2,662 (0,4); 2,619 (0,4); 2,601 (1,1); 2,583 (0,4); 2,543 (0,5); 2,522 (0,5); 2,505 (0,6); 2,466 (6,3); 2,351 (0,9); 2,310 (1,3); 2,298 (1,3); 2,179 (2377,2); 2,121 (5,6); 2,115 (6,3); 2,108 (7,1); 2,102 (5,6); 2,043 (0,8); 2,018 (1,0); 1,953 (344,9); 1,947 (623,4); 1,941 (840,7); 1,935 (641,3); 1,929 (374,2); 1,827 (0,6); 1,781 (2,1); 1,776 (3,6); 1,770 (4,8); 1,763 (3,6); 1,758 (2,2); 1,437 (16,0); 1,311 (0,4); 1,283 (0,5); 1,268 (0,9); 0,794 (1,2); 0,777 (5,1); 0,764 (5,1); 0,747 (1,8); 0,738 (0,4); 0,612 (1,5); 0,600 (4,9); 0,594 (5,3); 0,586 (4,9); 0,573 (1,5); 0,000 (28,5)
Ví dụ I-T3-187: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 19,987 (0,6); 8,214 (12,6); 8,200 (13,9); 7,859 (6,8); 7,738 (9,0); 7,733 (14,7); 7,707 (9,2); 7,701 (5,6); 7,686 (6,6); 7,680 (5,9); 7,610 (3,2); 7,587 (1,7); 7,510 (9,9); 7,489 (8,2); 7,448 (0,5); 2,469 (1,8); 2,464 (2,6); 2,459 (2,0); 2,157 (1156,2); 2,120 (5,2); 2,114 (6,3); 2,108 (7,5); 2,102 (5,6); 2,096 (3,3); 1,965 (26,5); 1,959 (71,5); 1,953 (401,8); 1,947 (750,3); 1,941 (1019,6); 1,935 (723,9); 1,928 (383,2); 1,781 (2,7); 1,775 (4,6); 1,769 (6,2); 1,763 (4,5); 1,757 (2,6); 1,634 (0,6); 1,597 (4,4); 1,583 (11,2); 1,576 (11,2); 1,563 (6,0); 1,523 (1,0); 1,437 (16,0); 1,401 (1,1); 1,361 (6,0); 1,347 (11,3); 1,341 (12,0); 1,326 (4,9); 1,270 (8,5); 0,882 (2,0); 0,857 (2,2); 0,000 (34,6)
Ví dụ I-T3-188: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,340 (9,9); 8,272 (16,0); 8,192 (0,3); 7,761 (9,7); 7,755 (12,3); 7,742 (0,4); 7,737 (0,3); 7,727 (6,7); 7,721 (5,0); 7,706 (7,8); 7,700 (6,5); 7,569 (4,5); 7,524 (11,5); 7,503 (9,3); 5,447 (0,8); 2,576 (0,8); 2,572 (0,8); 2,250 (0,4); 2,139 (89,4); 2,120 (0,7); 2,114 (0,7); 2,108 (0,9); 2,102 (0,6); 2,095 (0,3); 1,965 (3,2); 1,959 (8,4); 1,953 (52,4); 1,947 (96,8); 1,940 (132,2); 1,934 (91,5); 1,928 (47,5); 1,781 (0,3); 1,775 (0,6); 1,769 (0,8); 1,763 (0,6); 1,604 (5,0); 1,590 (12,7); 1,583 (12,8); 1,569 (6,7); 1,529 (0,9); 1,406 (0,8); 1,366 (6,8); 1,352 (12,5); 1,346 (13,2); 1,331 (5,3); 1,309 (0,5); 1,293 (0,9); 1,285 (1,5); 1,269 (7,2); 0,898 (0,3); 0,881 (0,9); 0,864 (0,4); 0,000 (3,9)
Ví dụ I-T3-189: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,726 (0,3); 8,720 (0,4); 8,701 (10,1); 8,694 (10,3); 8,265 (0,8); 8,253 (16,0); 8,246 (15,9);

8,062 (0,6); 8,051 (11,3); 8,045 (11,1); 7,978 (7,4); 7,766 (6,5); 7,051 (2,2); 5,449 (0,6); 4,068 (0,4); 4,050 (0,4); 3,024 (0,4); 2,888 (0,6); 2,878 (1,7); 2,869 (2,5); 2,860 (3,8); 2,851 (3,8); 2,842 (2,5); 2,833 (1,8); 2,823 (0,6); 2,729 (0,6); 2,473 (0,5); 2,468 (0,9); 2,464 (1,2); 2,459 (0,9); 2,454 (0,5); 2,166 (234,9); 2,121 (0,8); 2,114 (1,2); 2,108 (1,5); 2,102 (1,1); 2,096 (0,6); 2,087 (0,5); 2,035 (0,4); 2,017 (0,7); 1,998 (0,6); 1,972 (2,6); 1,965 (5,7); 1,959 (13,8); 1,953 (85,4); 1,947 (157,6); 1,941 (215,5); 1,935 (150,1); 1,928 (78,1); 1,782 (0,5); 1,775 (0,9); 1,769 (1,3); 1,763 (0,9); 1,757 (0,5); 1,437 (3,4); 1,308 (0,3); 1,268 (8,7); 1,222 (0,6); 1,204 (1,0); 1,186 (0,5); 0,898 (0,4); 0,881 (1,1); 0,864 (0,5); 0,810 (2,1); 0,797 (6,2); 0,792 (8,4); 0,779 (8,6); 0,774 (6,4); 0,762 (2,8); 0,740 (0,4); 0,722 (0,4); 0,662 (0,3); 0,652 (0,4); 0,622 (2,8); 0,610 (7,3); 0,604 (7,7); 0,600 (6,9); 0,595 (6,8); 0,582 (2,1); 0,543 (0,4); 0,391 (0,3); 0,386 (0,3); 0,008 (1,2); 0,000 (38,3); -0,009 (1,6)
Ví dụ I-T3-190: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,487 (7,1); 9,105 (5,1); 9,102 (5,1); 8,887 (9,5); 8,557 (11,6); 8,317 (0,4); 7,826 (4,4); 7,820 (6,3); 7,815 (6,9); 7,810 (5,3); 7,602 (5,1); 7,591 (1,5); 7,580 (4,2); 4,055 (1,3); 4,038 (3,8); 4,020 (3,8); 4,002 (1,3); 3,560 (1,9); 3,542 (6,2); 3,523 (6,3); 3,505 (2,1); 3,328 (157,1); 2,671 (1,6); 2,506 (190,5); 2,502 (243,8); 2,329 (1,7); 1,989 (16,0); 1,617 (2,3); 1,602 (6,1); 1,596 (6,6); 1,583 (2,7); 1,296 (2,7); 1,282 (6,2); 1,276 (6,6); 1,261 (2,3); 1,193 (4,5); 1,181 (7,3); 1,175 (10,1); 1,163 (14,9); 1,158 (7,2); 1,145 (6,8); 0,000 (25,1)
Ví dụ I-T3-191: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,426 (3,3); 8,594 (4,6); 8,359 (4,8); 8,317 (0,5); 7,785 (4,0); 7,779 (2,8); 7,770 (2,1); 7,765 (1,1); 7,545 (2,7); 7,537 (0,6); 7,530 (0,5); 7,522 (2,3); 7,351 (6,5); 3,331 (366,6); 3,015 (2,0); 2,997 (6,6); 2,979 (6,7); 2,960 (2,1); 2,676 (1,1); 2,671 (1,6); 2,667 (1,2); 2,524 (4,4); 2,511 (86,9); 2,507 (177,3); 2,502 (236,3); 2,498 (176,3); 2,493 (90,0); 2,333 (1,1); 2,329 (1,5); 2,324 (1,2); 1,611 (1,1); 1,597 (2,7); 1,590 (2,9); 1,577 (1,2); 1,398 (15,1); 1,285 (1,3); 1,271 (2,7); 1,264 (2,9); 1,250 (1,1); 1,195 (7,5); 1,177 (16,0); 1,158 (7,3); 0,146 (1,7); 0,008 (13,5); 0,000 (371,8); -0,008 (16,5); -0,150 (1,7)
Ví dụ I-T3-192: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,435 (6,5); 8,687 (9,2); 8,408 (9,3); 8,317 (1,5); 7,796 (4,7); 7,787 (4,3); 7,780 (6,0); 7,775 (6,7); 7,770 (5,2); 7,764 (2,0); 7,559 (5,8); 7,548 (5,4); 7,537 (5,3); 3,330 (735,7); 3,123 (0,7); 3,082 (1,9); 3,063 (6,4); 3,045 (6,6); 3,027 (2,0); 2,838 (0,6); 2,676 (2,8); 2,671 (4,1); 2,667 (3,1); 2,525 (10,0); 2,520 (15,7); 2,511 (220,9); 2,507 (459,4); 2,502 (612,6); 2,498 (450,6); 2,493 (223,7); 2,333 (2,9); 2,329 (4,0); 2,324 (3,0); 1,614 (2,1); 1,600 (5,3); 1,593 (5,7); 1,580 (2,4); 1,284 (2,5); 1,271 (5,3); 1,264 (5,7); 1,250 (2,1); 1,205 (7,5); 1,187 (16,0); 1,168 (7,5); 0,146 (1,8); 0,008 (13,1); 0,000 (404,0); -0,009 (15,5); -0,150 (1,8)
Ví dụ I-T3-193: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO):

δ= 9,458 (0,3); 8,777 (8,3); 8,542 (3,2); 8,531 (3,0); 8,504 (0,3); 8,462 (8,6); 8,337 (3,7); 8,317 (1,8); 7,962 (3,6); 7,750 (2,0); 7,745 (3,2); 7,738 (1,0); 7,726 (12,9); 7,717 (1,1); 7,710 (1,7); 7,692 (1,1); 7,659 (1,1); 7,653 (0,9); 7,569 (1,2); 7,548 (1,0); 7,529 (3,7); 7,526 (2,4); 7,510 (2,0); 7,507 (3,2); 7,484 (1,3); 7,465 (0,8); 7,420 (0,5); 7,402 (0,6); 7,058 (1,6); 6,924 (3,7); 6,789 (1,9); 4,055 (1,2); 4,037 (3,6); 4,020 (3,6); 4,002 (1,2); 3,328 (98,6); 3,305 (0,8); 2,858 (0,9); 2,849 (1,2); 2,840 (1,9); 2,830 (1,9); 2,821 (1,3); 2,812 (0,9); 2,801 (0,4); 2,676 (1,1); 2,671 (1,6); 2,667 (1,2); 2,662 (0,6); 2,524 (3,6); 2,511 (83,9); 2,507 (175,0); 2,502 (233,7); 2,498 (171,2); 2,493 (84,1); 2,338 (0,5); 2,333 (1,1); 2,329 (1,5); 2,324 (1,1); 1,989 (16,0); 1,234 (0,8); 1,193 (4,2); 1,175 (8,4); 1,157 (4,2); 0,729 (1,2); 0,716 (3,5); 0,711 (4,9); 0,699 (4,5); 0,693 (4,0); 0,682 (1,6); 0,568 (0,4); 0,559 (1,8); 0,549 (5,1); 0,543 (4,5); 0,534 (3,7); 0,522 (1,2); 0,146 (0,4); 0,008 (2,5); 0,000 (83,8); -0,009 (3,2); -0,150 (0,4)
Ví dụ I-T3-194: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,349 (9,1); 8,304 (0,4); 8,286 (14,8); 8,241 (0,3); 7,801 (9,7); 7,795 (11,3); 7,718 (6,0); 7,712 (5,6); 7,697 (7,3); 7,692 (6,9); 7,665 (0,5); 7,647 (0,7); 7,643 (0,7); 7,635 (0,5); 7,617 (0,6); 7,614 (0,7); 7,584 (1,1); 7,541 (0,6); 7,522 (11,4); 7,501 (9,2); 7,484 (0,5); 7,453 (4,1); 7,422 (0,4); 7,236 (0,4); 7,215 (0,3); 6,837 (0,5); 6,673 (0,4); 6,617 (1,3); 6,575 (0,4); 5,973 (0,3); 5,954 (0,3); 5,896 (1,4); 5,447 (5,8); 3,817 (0,8); 3,769 (0,4); 3,550 (1,0); 3,545 (0,9); 2,579 (0,4); 2,575 (0,5); 2,269 (0,4); 2,253 (0,5); 2,140 (512,8); 2,120 (7,2); 2,114 (6,9); 2,108 (7,9); 2,102 (5,5); 2,095 (3,1); 1,965 (25,3); 1,959 (63,5); 1,953 (411,4); 1,947 (768,8); 1,940 (1065,1); 1,934 (761,0); 1,928 (406,5); 1,849 (1,2); 1,799 (0,7); 1,781 (2,8); 1,775 (4,8); 1,769 (6,7); 1,763 (4,7); 1,756 (2,7); 1,728 (0,5); 1,714 (0,5); 1,699 (0,5); 1,677 (0,4); 1,666 (0,5); 1,649 (0,4); 1,628 (0,4); 1,580 (0,4); 1,570 (0,4); 1,556 (0,4); 1,515 (0,6); 1,477 (5,4); 1,466 (14,4); 1,457 (16,0); 1,447 (6,5); 1,407 (0,7); 1,398 (0,5); 1,386 (0,8); 1,366 (0,5); 1,340 (6,0); 1,305 (1,0); 1,285 (8,1); 1,270 (5,0); 1,247 (0,7); 1,230 (0,5); 1,217 (0,6); 1,199 (0,5); 1,190 (0,6); 1,185 (0,7); 1,145 (6,1); 1,135 (15,7); 1,126 (14,8); 1,115 (5,4); 1,076 (0,6); 1,063 (0,4); 0,994 (0,4); 0,976 (0,8); 0,958 (0,5); 0,951 (0,4); 0,930 (0,4); 0,923 (0,4); 0,882 (1,1); 0,856 (0,9); 0,842 (0,7); 0,783 (0,4); 0,771 (0,4); 0,764 (0,5); 0,735 (0,4); 0,597 (0,3); 0,564 (0,4); 0,008 (1,0); 0,000 (32,8)
Ví dụ I-T3-195: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,457 (8,1); 8,920 (11,3); 8,511 (11,3); 8,325 (5,6); 8,319 (6,1); 8,030 (5,3); 7,802 (8,5); 7,797 (7,4); 7,789 (5,4); 7,784 (3,0); 7,591 (6,0); 7,582 (1,3); 7,569 (5,0); 4,037 (0,6); 4,019 (0,6); 3,329 (278,3); 3,090 (0,5); 3,071 (1,9); 3,053 (2,4); 3,037 (2,5); 3,019 (2,1); 3,000 (0,7); 2,675 (3,1); 2,671 (4,3); 2,667 (3,5); 2,597 (0,4); 2,506 (494,1); 2,502 (653,4); 2,498 (511,0); 2,470 (6,8); 2,452 (3,7); 2,434 (2,4); 2,416 (1,0); 2,333 (3,0); 2,329 (4,1); 2,325 (3,3); 1,989 (2,4); 1,621 (2,6); 1,607 (6,7); 1,600 (7,6); 1,587 (3,1); 1,397 (1,3); 1,335 (0,4);

1,327 (0,3); 1,297 (0,8); 1,286 (3,2); 1,273 (7,0); 1,266 (7,6); 1,252 (3,2); 1,235 (5,1); 1,193 (0,7); 1,175 (1,3); 1,157 (0,7); 1,107 (0,4); 0,982 (7,4); 0,964 (16,0); 0,945 (7,3); 0,854 (0,5); 0,835 (0,3); 0,000 (20,8)
Ví dụ I-T3-196: ^{1}H-NMR (601,6 MHz, CD3CN): δ= 8,223 (0,5); 8,218 (0,5); 8,045 (0,3); 8,041 (0,3); 2,621 (0,7); 2,150 (4,8); 1,948 (1,3); 1,944 (2,2); 1,940 (3,2); 1,936 (2,2); 1,932 (1,1); 1,135 (16,0); 0,000 (0,9)
Ví dụ I-T3-197: ^{1}H-NMR (601,6 MHz, CD3CN): δ= 8,765 (7,5); 8,761 (7,5); 8,2493 (9,5); 8,2486 (9,9); 8,230 (8,0); 8,115 (8,0); 8,111 (8,0); 8,038 (4,4); 7,992 (4,5); 7,394 (1,5); 3,844 (16,0); 3,552 (11,2); 3,542 (11,1); 3,312 (0,7); 3,303 (0,7); 2,172 (78,0); 2,155 (28,3); 2,088 (0,6); 2,084 (0,8); 2,080 (0,6); 1,998 (2,0); 1,989 (5,4); 1,985 (7,5); 1,982 (52,9); 1,977 (98,7); 1,973 (145,4); 1,969 (98,4); 1,965 (48,4); 1,956 (0,7); 1,863 (0,5); 1,859 (0,8); 1,854 (0,6); 1,312 (2,7); 1,303 (8,1); 1,299 (8,0); 1,291 (3,5); 1,266 (0,4); 1,192 (0,4); 1,166 (3,5); 1,158 (7,9); 1,154 (7,9); 1,146 (2,6)
Ví dụ I-T3-198: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,484 (3,8); 9,467 (0,6); 8,776 (0,9); 8,753 (5,3); 8,574 (0,6); 8,561 (8,6); 8,509 (5,3); 8,491 (0,8); 8,317 (1,8); 8,178 (0,4); 7,782 (7,1); 7,778 (3,2); 7,765 (2,2); 7,759 (1,3); 7,579 (2,8); 7,557 (2,4); 4,049 (0,4); 3,497 (0,3); 3,479 (0,7); 3,461 (0,7); 3,413 (1,0); 3,395 (1,5); 3,377 (1,6); 3,329 (582,9); 3,287 (1,0); 2,676 (4,0); 2,671 (5,5); 2,667 (4,1); 2,524 (14,3); 2,507 (629,0); 2,502 (826,7); 2,498 (606,0); 2,333 (3,8); 2,329 (5,2); 2,324 (3,9); 1,614 (1,3); 1,600 (3,4); 1,593 (3,7); 1,580 (1,5); 1,289 (1,5); 1,276 (3,3); 1,269 (3,6); 1,255 (1,3); 1,237 (0,4); 1,150 (0,4); 1,126 (0,7); 1,108 (8,3); 1,089 (16,0); 1,071 (7,0); 0,008 (0,5); 0,000 (18,9); -0,008 (0,7)
Ví dụ I-T3-199: ^{1}H-NMR (400,1 MHz, d_6-DMSO): d= 8,86 (0,0328); 8,85 (0,0664); 8,56 (0,0471);8,51 (0,0250);8,18 (0,0290);8,17 (0,0298);8,09 (0,0245);3,47 (0,0401);3,45 (0,0407);3,31 (0,7767);2,54 (0,3233);2,50 (0,3250);2,50 (0,4400);2,50 (0,3578);1,25 (0,0306);1,25 (0,0369);1,15 (0,0210);1,14 (0,0347);1,13 (0,0321);0,00 (1,0000)
Ví dụ I-T3-200: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,745 (8,9); 8,739 (8,9); 8,566 (1,6); 8,560 (1,6); 8,264 (13,9); 8,256 (14,3); 8,244 (0,7); 8,115 (9,6); 8,109 (9,4); 8,056 (1,8); 8,050 (1,7); 7,998 (0,4); 7,983 (7,2); 7,980 (7,2); 7,767 (6,3); 7,690 (2,3); 7,666 (0,6); 7,587 (0,3); 5,448 (3,1); 3,724 (0,8); 3,071 (0,5); 2,882 (0,5); 2,626 (0,7); 2,603 (0,5); 2,468 (0,4); 2,463 (0,5); 2,458 (0,4); 2,152 (189,2); 2,120 (1,4); 2,114 (1,8); 2,108 (2,1); 2,102 (1,5); 2,096 (0,8); 1,965 (8,9); 1,959 (23,8); 1,953 (126,4); 1,947 (227,5); 1,941 (305,0); 1,935 (212,6); 1,928 (110,8); 1,868 (0,3); 1,781 (0,8); 1,775 (1,4); 1,769 (1,9); 1,763 (1,3); 1,757 (0,7); 1,615 (3,9); 1,600 (10,0); 1,593 (10,8); 1,580

(6,7); 1,571 (2,5); 1,557 (1,3); 1,540 (0,7); 1,410 (0,6); 1,386 (0,4); 1,370 (5,3); 1,356 (10,0); 1,350 (10,4); 1,335 (5,3); 1,325 (2,3); 1,310 (1,1); 1,297 (0,5); 1,285 (0,7); 1,270 (2,4); 1,202 (0,6); 1,134 (16,0); 0,882 (0,4); 0,008 (0,5); 0,000 (15,0); -0,008 (0,8)
Ví dụ I-T3-201: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,467 (2,2); 8,775 (3,1); 8,578 (1,5); 8,573 (1,5); 8,490 (3,1); 8,177 (1,4); 7,800 (0,6); 7,795 (1,2); 7,787 (1,8); 7,782 (2,4); 7,778 (1,9); 7,578 (1,7); 7,555 (1,5); 3,498 (0,6); 3,479 (1,9); 3,461 (1,9); 3,443 (0,6); 3,330 (198,5); 2,676 (0,7); 2,671 (1,0); 2,667 (0,7); 2,524 (2,5); 2,507 (107,2); 2,502 (141,8); 2,498 (106,1); 2,333 (0,7); 2,329 (0,9); 2,325 (0,7); 1,989 (0,4); 1,614 (0,7); 1,600 (1,8); 1,593 (1,9); 1,580 (0,8); 1,398 (16,0); 1,287 (0,8); 1,274 (1,8); 1,267 (2,0); 1,253 (0,7); 1,235 (0,3); 1,126 (2,1); 1,108 (4,7); 1,089 (2,1); 0,146 (0,9); 0,008 (7,4); 0,000 (188,9); -0,008 (8,7); -0,150 (0,9)
Ví dụ I-T3-202: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,428 (4,8); 8,626 (0,4); 8,603 (6,6); 8,357 (6,9); 8,316 (0,6); 7,790 (1,3); 7,785 (2,8); 7,777 (4,1); 7,772 (5,1); 7,768 (4,0); 7,562 (3,3); 7,548 (3,9); 7,537 (0,8); 7,525 (3,2); 7,428 (3,2); 3,343 (390,5); 2,991 (1,5); 2,973 (4,8); 2,955 (5,1); 2,937 (1,8); 2,676 (1,0); 2,672 (1,3); 2,668 (1,0); 2,507 (163,2); 2,503 (208,0); 2,499 (152,2); 2,334 (1,0); 2,330 (1,3); 2,325 (0,9); 2,188 (1,0); 2,100 (16,0); 2,075 (0,5); 1,613 (1,6); 1,598 (4,1); 1,592 (4,5); 1,579 (2,0); 1,284 (2,0); 1,270 (4,3); 1,263 (4,5); 1,249 (1,6); 1,232 (0,4); 1,214 (0,7); 1,192 (5,5); 1,173 (11,4); 1,155 (5,2); 0,146 (0,5); 0,008 (4,9); 0,000 (117,1); -0,008 (4,9); -0,150 (0,5)
Ví dụ I-T3-203: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,601 (0,6); 8,581 (6,8); 8,520 (2,4); 8,509 (2,4); 8,343 (7,1); 8,137 (0,8); 7,732 (1,5); 7,726 (2,4); 7,707 (9,8); 7,561 (3,2); 7,499 (2,9); 7,477 (2,5); 7,427 (3,2); 3,329 (31,4); 2,989 (1,5); 2,971 (5,0); 2,952 (5,1); 2,940 (0,7); 2,934 (1,6); 2,922 (0,4); 2,854 (0,6); 2,844 (0,9); 2,836 (1,4); 2,826 (1,4); 2,818 (1,0); 2,808 (0,7); 2,676 (0,5); 2,671 (0,7); 2,667 (0,5); 2,524 (1,7); 2,511 (39,4); 2,507 (80,4); 2,502 (106,1); 2,498 (78,2); 2,333 (0,5); 2,329 (0,7); 2,324 (0,5); 2,187 (1,2); 2,116 (0,8); 2,101 (16,0); 2,075 (1,0); 1,909 (0,5); 1,230 (0,4); 1,212 (0,9); 1,190 (5,7); 1,172 (11,9); 1,154 (5,4); 0,726 (0,9); 0,713 (2,6); 0,708 (3,6); 0,696 (3,5); 0,690 (3,0); 0,679 (1,3); 0,560 (1,2); 0,550 (3,7); 0,544 (3,5); 0,534 (3,0); 0,522 (0,9); 0,008 (2,2); 0,000 (67,6); -0,008 (2,8)
Ví dụ I-T3-204: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,968 (6,3); 8,871 (0,8); 8,864 (4,0); 8,858 (3,7); 8,617 (5,8); 8,558 (2,8); 8,554 (2,9); 8,469 (3,0); 8,464 (2,8); 8,379 (3,8); 8,373 (3,6); 8,318 (1,3); 8,261 (0,5); 8,255 (0,6); 4,155 (1,4); 3,332 (210,2); 3,309 (0,8); 3,036 (16,0); 3,014 (1,0); 2,886 (0,9); 2,809 (0,3); 2,798 (0,7); 2,791 (0,8); 2,782 (1,3); 2,772 (1,0); 2,762 (3,0); 2,727 (0,4); 2,676 (0,8); 2,672 (1,1); 2,667 (0,9); 2,541 (0,4); 2,525 (2,7); 2,511 (61,5); 2,507 (127,7); 2,503 (170,1); 2,498

(126,6); 2,494 (64,4); 2,334 (0,8); 2,329 (1,1); 2,325 (0,9); 2,075 (2,2); 1,169 (0,5); 0,836 (0,3); 0,817 (0,4); 0,775 (0,4); 0,608 (0,4); 0,587 (2,1); 0,579 (2,6); 0,570 (1,1); 0,562 (0,6); 0,544 (1,0); 0,532 (2,1); 0,515 (2,1); 0,496 (0,5); 0,146 (0,4); 0,008 (2,9); 0,000 (95,4); -0,008 (4,6); -0,150 (0,4)
Ví dụ I-T3-205: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,991 (0,5); 8,972 (14,8); 8,876 (0,4); 8,861 (9,9); 8,855 (10,1); 8,716 (4,8); 8,706 (5,3); 8,672 (0,4); 8,661 (0,4); 8,642 (0,8); 8,631 (14,8); 8,562 (7,0); 8,557 (7,2); 8,471 (7,3); 8,467 (6,8); 8,318 (8,7); 8,264 (0,7); 8,258 (0,8); 8,247 (9,6); 8,240 (9,4); 7,948 (0,4); 7,942 (0,4); 7,795 (0,4); 4,156 (4,3); 3,329 (163,2); 3,306 (4,7); 2,887 (0,6); 2,877 (1,4); 2,867 (2,0); 2,859 (3,0); 2,849 (3,2); 2,840 (2,2); 2,830 (1,7); 2,821 (0,8); 2,676 (1,6); 2,671 (2,1); 2,667 (1,6); 2,525 (5,4); 2,507 (239,7); 2,502 (316,6); 2,498 (235,7); 2,333 (1,4); 2,329 (2,0); 2,325 (1,5); 2,076 (16,0); 0,760 (1,9); 0,747 (5,6); 0,743 (7,6); 0,730 (7,4); 0,725 (6,3); 0,713 (2,8); 0,570 (2,3); 0,559 (7,1); 0,553 (7,0); 0,550 (6,7); 0,544 (6,4); 0,532 (2,3); 0,495 (0,4); 0,146 (0,8); 0,008 (5,8); 0,000 (177,1); -0,008 (8,0); -0,150 (0,8)
Ví dụ I-T3-206: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,449 (4,9); 8,859 (6,6); 8,459 (6,7); 8,318 (4,2); 8,038 (3,0); 7,936 (3,0); 7,803 (3,4); 7,799 (4,7); 7,793 (4,8); 7,787 (3,7); 7,781 (1,6); 7,581 (4,2); 7,570 (0,9); 7,558 (3,6); 3,733 (0,3); 3,690 (0,4); 3,329 (896,7); 3,282 (0,7); 2,981 (1,3); 2,963 (1,5); 2,947 (1,5); 2,929 (1,4); 2,910 (0,5); 2,676 (7,6); 2,671 (10,3); 2,667 (7,7); 2,525 (28,4); 2,511 (589,6); 2,507 (1188,5); 2,502 (1555,2); 2,498 (1146,1); 2,493 (578,6); 2,389 (1,6); 2,370 (1,8); 2,354 (1,8); 2,333 (8,0); 2,329 (10,4); 2,324 (7,7); 2,296 (16,0); 1,909 (0,6); 1,621 (1,6); 1,607 (4,0); 1,600 (4,3); 1,587 (2,0); 1,282 (2,1); 1,269 (3,9); 1,262 (4,2); 1,248 (1,6); 1,147 (0,8); 0,945 (4,8); 0,927 (10,5); 0,908 (4,6); 0,146 (3,6); 0,008 (30,4); 0,000 (880,4); -0,008 (42,5); -0,150 (3,7)
Ví dụ I-T3-207: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,624 (6,5); 9,586 (0,7); 8,984 (9,3); 8,916 (5,7); 8,910 (5,5); 8,728 (0,7); 8,636 (9,3); 8,571 (1,5); 8,560 (4,6); 8,473 (4,6); 8,469 (4,3); 8,330 (6,1); 8,324 (6,0); 7,943 (0,4); 7,798 (0,4); 7,793 (0,4); 4,156 (3,5); 3,332 (174,7); 3,051 (0,6); 2,875 (0,6); 2,672 (1,1); 2,667 (0,9); 2,507 (117,6); 2,503 (153,3); 2,499 (115,3); 2,330 (1,0); 2,325 (0,7); 2,076 (16,0); 1,648 (2,1); 1,634 (5,4); 1,627 (6,2); 1,614 (2,5); 1,304 (2,4); 1,291 (5,2); 1,284 (5,7); 1,269 (2,1); 1,262 (0,8); 1,254 (0,7); 1,240 (0,3); 0,146 (0,4); 0,008 (2,8); 0,000 (78,1); -0,150 (0,4)
Ví dụ I-T3-208: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,696 (3,0); 8,690 (3,1); 8,249 (4,2); 8,240 (4,6); 8,003 (3,2); 7,997 (3,1); 7,982 (2,3); 7,978 (2,3); 7,946 (0,5); 7,940 (0,5); 7,766 (2,1); 3,068 (16,0); 2,800 (2,7); 2,783 (0,6); 2,776 (0,6); 2,767 (1,1); 2,756 (0,7); 2,748 (0,6); 2,465 (0,4); 2,170 (94,3); 2,115 (0,5); 2,109 (0,6);

2,102 (0,4); 1,965 (2,7); 1,959 (7,1); 1,954 (39,1); 1,947 (71,0); 1,941 (94,9); 1,935 (64,8); 1,929 (33,1); 1,776 (0,4); 1,770 (0,5); 1,763 (0,4); 0,855 (0,3); 0,789 (0,4); 0,579 (1,4); 0,535 (1,7); 0,525 (1,1); 0,518 (1,6); 0,000 (0,5)
Ví dụ I-T3-209: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,461 (4,8); 8,713 (6,6); 8,448 (6,8); 8,317 (1,4); 8,281 (3,0); 8,094 (3,1); 7,800 (1,3); 7,794 (2,8); 7,787 (4,1); 7,782 (5,1); 7,778 (4,1); 7,569 (3,8); 7,557 (0,8); 7,546 (3,2); 3,393 (0,4); 3,331 (347,0); 2,676 (2,0); 2,672 (2,7); 2,667 (2,1); 2,524 (7,4); 2,507 (323,5); 2,503 (427,2); 2,498 (324,8); 2,426 (0,4); 2,334 (1,9); 2,329 (2,7); 2,325 (2,1); 2,197 (0,8); 2,160 (16,0); 1,614 (1,5); 1,600 (4,0); 1,593 (4,4); 1,580 (1,8); 1,284 (1,8); 1,270 (4,0); 1,264 (4,4); 1,249 (1,5); 1,147 (0,6); 1,079 (4,6); 1,061 (10,1); 1,042 (4,5); 0,146 (0,9); 0,008 (6,6); 0,000 (197,0); -0,150 (1,0)
Ví dụ I-T3-210: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,835 (0,4); 8,692 (6,8); 8,552 (2,5); 8,540 (2,5); 8,513 (0,5); 8,435 (7,0); 8,318 (0,5); 8,278 (3,0); 8,094 (3,0); 7,873 (0,4); 7,742 (1,5); 7,736 (2,5); 7,718 (10,2); 7,520 (3,0); 7,502 (1,5); 7,498 (2,5); 3,357 (1,0); 3,329 (76,1); 3,304 (1,0); 2,857 (0,6); 2,847 (0,9); 2,839 (1,4); 2,829 (1,4); 2,820 (0,9); 2,811 (0,7); 2,676 (0,8); 2,671 (1,1); 2,667 (0,9); 2,524 (3,0); 2,511 (66,6); 2,507 (135,2); 2,502 (178,3); 2,498 (130,4); 2,493 (64,6); 2,333 (0,9); 2,329 (1,2); 2,324 (0,9); 2,193 (1,1); 2,159 (16,0); 2,075 (0,6); 1,153 (0,3); 1,135 (0,7); 1,078 (4,8); 1,060 (10,5); 1,041 (4,6); 0,727 (0,9); 0,714 (2,6); 0,709 (3,6); 0,697 (3,5); 0,691 (3,0); 0,680 (1,3); 0,559 (1,2); 0,548 (3,6); 0,542 (3,3); 0,539 (3,1); 0,533 (3,0); 0,521 (0,9); 0,146 (0,4); 0,008 (3,0); 0,000 (92,3); -0,008 (3,7); -0,150 (0,4)
Ví dụ I-T3-211: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,641 (0,5); 8,541 (0,8); 8,530 (3,2); 8,524 (3,1); 8,504 (5,0); 8,495 (0,7); 8,385 (0,5); 8,318 (1,5); 8,288 (5,2); 8,280 (0,8); 7,971 (3,1); 7,965 (3,0); 7,943 (0,5); 7,803 (0,8); 7,532 (2,9); 7,375 (2,7); 7,322 (0,3); 7,209 (0,3); 4,421 (0,8); 4,404 (2,1); 4,386 (2,3); 4,369 (1,0); 4,240 (1,1); 4,224 (3,6); 4,206 (3,6); 4,189 (1,2); 4,179 (0,5); 4,162 (0,4); 3,741 (0,4); 3,727 (0,4); 3,328 (176,8); 3,027 (0,8); 2,985 (16,0); 2,886 (0,8); 2,775 (0,5); 2,762 (1,0); 2,748 (1,4); 2,734 (1,2); 2,717 (2,0); 2,676 (2,7); 2,671 (3,8); 2,667 (2,8); 2,524 (10,0); 2,510 (212,4); 2,507 (426,0); 2,502 (559,5); 2,498 (412,6); 2,456 (0,7); 2,333 (2,6); 2,329 (3,5); 2,324 (2,7); 2,075 (1,5); 1,361 (0,8); 1,344 (1,7); 1,329 (5,1); 1,312 (10,0); 1,294 (5,0); 1,282 (0,6); 1,229 (0,6); 1,213 (4,5); 1,196 (8,4); 1,178 (4,2); 1,160 (0,4); 1,147 (0,4); 0,788 (0,3); 0,779 (0,4); 0,704 (0,4); 0,469 (4,1); 0,454 (2,9); 0,146 (1,0); 0,008 (7,5); 0,000 (219,5); -0,008 (9,3); -0,150 (1,0)
Ví dụ I-T3-212: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,450 (2,0); 8,714 (2,7); 8,433 (2,7); 8,220 (1,3); 8,083 (1,3); 7,802 (0,5); 7,796 (1,2);

7,790 (1,7); 7,785 (1,8); 7,780 (1,4); 7,774 (0,6); 7,567 (1,5); 7,556 (0,4); 7,545 (1,3); 3,329 (62,0); 2,675 (0,5); 2,671 (0,7); 2,667 (0,5); 2,506 (78,1); 2,502 (103,1); 2,498 (77,2); 2,329 (0,7); 1,615 (0,6); 1,601 (1,6); 1,594 (1,7); 1,581 (0,7); 1,398 (16,0); 1,287 (0,7); 1,274 (1,6); 1,267 (1,7); 1,253 (0,6); 0,008 (1,3); 0,000 (41,2); -0,008 (1,8)
Ví dụ I-T3-213: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,692 (2,3); 8,542 (0,8); 8,531 (0,8); 8,417 (2,3); 8,220 (1,0); 8,216 (1,1); 8,079 (1,1); 8,075 (1,0); 7,742 (0,5); 7,737 (0,8); 7,717 (3,3); 7,517 (1,0); 7,496 (0,9); 3,348 (0,4); 3,330 (73,9); 2,839 (0,5); 2,829 (0,5); 2,676 (0,3); 2,671 (0,5); 2,667 (0,4); 2,525 (1,2); 2,520 (1,9); 2,511 (26,1); 2,507 (54,6); 2,502 (72,8); 2,498 (52,8); 2,493 (25,6); 2,333 (0,3); 2,329 (0,5); 2,324 (0,3); 1,398 (16,0); 0,716 (0,8); 0,710 (1,2); 0,698 (1,1); 0,692 (0,9); 0,681 (0,4); 0,562 (0,4); 0,552 (1,2); 0,545 (1,1); 0,536 (0,9); 0,008 (1,1); 0,000 (33,4); -0,009 (1,1)
Ví dụ I-T3-214: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 20,020 (0,4); 8,203 (15,1); 8,187 (0,8); 8,173 (15,3); 7,865 (8,4); 7,716 (8,3); 7,711 (10,7); 7,683 (5,4); 7,677 (4,2); 7,662 (6,4); 7,656 (5,5); 7,608 (8,3); 7,528 (0,3); 7,504 (10,0); 7,484 (7,9); 7,016 (4,8); 6,931 (3,0); 6,835 (9,8); 6,653 (5,0); 2,910 (0,6); 2,901 (1,7); 2,891 (2,6); 2,883 (3,9); 2,873 (4,0); 2,865 (2,6); 2,855 (1,8); 2,846 (0,6); 2,174 (590,6); 2,150 (3,3); 2,144 (3,9); 2,138 (4,9); 2,132 (3,3); 2,125 (2,0); 1,995 (20,3); 1,988 (51,7); 1,983 (284,0); 1,977 (520,7); 1,970 (703,8); 1,964 (488,9); 1,958 (254,0); 1,811 (1,6); 1,805 (2,8); 1,799 (4,0); 1,793 (2,8); 1,786 (1,4); 1,467 (16,0); 1,299 (0,7); 0,824 (2,1); 0,811 (6,5); 0,807 (8,8); 0,794 (8,9); 0,789 (6,8); 0,777 (2,9); 0,755 (0,4); 0,737 (0,4); 0,670 (0,4); 0,641 (2,8); 0,629 (8,1); 0,623 (8,3); 0,614 (7,3); 0,602 (2,1); 0,030 (2,9)
Ví dụ I-T3-215: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,215 (15,4); 8,189 (16,0); 7,866 (9,4); 7,763 (8,8); 7,758 (11,3); 7,732 (5,7); 7,726 (4,7); 7,711 (6,6); 7,705 (5,9); 7,672 (4,3); 7,609 (9,4); 7,536 (9,6); 7,515 (7,8); 7,022 (4,7); 6,840 (9,6); 6,659 (4,7); 4,096 (0,8); 4,079 (0,8); 2,495 (1,5); 2,491 (1,3); 2,206 (651,9); 2,150 (2,6); 2,144 (2,8); 2,138 (3,0); 2,131 (2,4); 2,001 (6,5); 1,994 (14,1); 1,983 (141,8); 1,976 (255,1); 1,970 (340,8); 1,964 (252,4); 1,958 (142,1); 1,811 (1,0); 1,805 (1,6); 1,799 (2,1); 1,793 (1,6); 1,787 (1,0); 1,664 (0,3); 1,626 (4,3); 1,611 (12,2); 1,605 (12,9); 1,591 (6,2); 1,551 (0,7); 1,466 (4,4); 1,431 (0,8); 1,390 (5,7); 1,376 (12,2); 1,370 (13,2); 1,355 (4,7); 1,318 (0,5); 1,297 (1,2); 1,251 (1,0); 1,233 (1,9); 1,215 (1,0); 0,029 (1,1)
Ví dụ I-T3-216: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,197 (4,6); 8,169 (4,8); 7,865 (3,0); 7,669 (1,3); 7,664 (1,9); 7,644 (6,9); 7,609 (3,0); 7,584 (0,6); 7,579 (0,6); 7,516 (2,2); 7,495 (1,7); 7,023 (1,3); 7,016 (0,4); 6,841 (2,7); 6,835 (0,7); 6,660 (1,3); 3,086 (16,0); 2,794 (3,5); 2,778 (0,8); 2,769 (1,2); 2,759 (0,9); 2,751 (0,7); 2,741 (0,3); 2,184 (18,2); 2,175 (42,1); 2,144 (0,3); 2,138 (0,4); 2,002 (1,1); 1,994 (1,5);

1,988 (3,9); 1,983 (19,8); 1,976 (36,2); 1,970 (48,7); 1,964 (34,4); 1,958 (18,2); 1,466 (8,2); 1,233 (0,5); 0,869 (0,5); 0,852 (0,5); 0,806 (0,6); 0,795 (0,5); 0,598 (1,8); 0,512 (1,7); 0,504 (1,6); 0,495 (1,8)
Ví dụ I-T3-217: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,724 (2,9); 8,717 (3,2); 8,247 (7,4); 8,240 (1,1); 8,028 (3,1); 8,022 (3,1); 7,971 (0,5); 7,965 (0,5); 7,869 (2,3); 7,615 (2,4); 7,034 (1,5); 6,852 (2,9); 6,846 (0,6); 6,671 (1,5); 3,097 (16,0); 2,828 (2,6); 2,812 (0,6); 2,805 (0,6); 2,797 (1,1); 2,786 (0,7); 2,778 (0,6); 2,179 (56,3); 2,150 (0,4); 2,144 (0,5); 2,138 (0,6); 2,131 (0,4); 1,994 (4,3); 1,988 (6,2); 1,982 (37,6); 1,976 (69,1); 1,970 (93,5); 1,964 (64,7); 1,958 (33,4); 1,805 (0,4); 1,799 (0,6); 1,792 (0,4); 0,817 (0,4); 0,608 (1,4); 0,573 (1,0); 0,565 (1,7); 0,556 (1,1); 0,548 (1,5)
Ví dụ I-T3-218: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 20,011 (0,4); 8,773 (8,6); 8,766 (9,0); 8,741 (1,2); 8,735 (1,2); 8,265 (14,9); 8,261 (16,0); 8,253 (3,2); 8,250 (2,9); 8,143 (9,4); 8,137 (9,5); 8,009 (1,3); 8,002 (1,3); 7,870 (7,3); 7,689 (3,7); 7,614 (8,2); 7,029 (4,5); 6,847 (9,1); 6,666 (4,5); 5,477 (0,5); 3,753 (3,4); 3,653 (0,4); 3,636 (0,6); 3,628 (0,6); 3,611 (0,4); 3,327 (0,4); 3,315 (0,8); 3,304 (0,7); 3,098 (0,7); 3,087 (0,6); 2,911 (0,4); 2,168 (284,6); 2,150 (2,8); 2,144 (3,6); 2,138 (4,5); 2,131 (3,1); 2,125 (1,7); 1,994 (21,0); 1,988 (48,8); 1,982 (280,0); 1,976 (513,9); 1,970 (694,8); 1,964 (480,4); 1,958 (247,2); 1,811 (1,5); 1,805 (2,9); 1,799 (4,1); 1,792 (2,9); 1,786 (1,4); 1,644 (3,6); 1,629 (9,1); 1,623 (9,3); 1,609 (4,8); 1,568 (0,6); 1,440 (0,5); 1,399 (4,9); 1,386 (9,0); 1,379 (9,4); 1,364 (3,7); 1,327 (0,4); 1,299 (0,5); 1,164 (0,7); 0,029 (2,4)
Ví dụ I-T3-219: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,186 (4,3); 8,170 (4,3); 7,971 (2,5); 7,758 (2,2); 7,641 (1,2); 7,636 (1,8); 7,616 (6,7); 7,558 (0,6); 7,552 (0,5); 7,490 (2,0); 7,488 (1,7); 7,483 (0,7); 7,470 (1,3); 7,468 (1,5); 7,462 (0,6); 3,057 (16,0); 2,765 (3,5); 2,755 (0,7); 2,747 (0,7); 2,738 (1,1); 2,728 (0,7); 2,720 (0,6); 2,139 (32,4); 2,114 (0,4); 2,108 (0,5); 2,102 (0,4); 1,965 (2,1); 1,959 (5,3); 1,953 (31,9); 1,947 (58,9); 1,941 (79,9); 1,934 (55,2); 1,928 (28,6); 1,775 (0,3); 1,769 (0,5); 1,437 (6,1); 0,840 (0,4); 0,822 (0,4); 0,777 (0,5); 0,766 (0,4); 0,568 (1,4); 0,482 (1,4); 0,474 (1,3); 0,464 (1,5)
Ví dụ I-T3-220: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,695 (3,0); 8,689 (3,2); 8,219 (7,0); 8,000 (3,0); 7,994 (3,0); 7,937 (8,6); 7,897 (0,6); 5,449 (12,1); 3,067 (16,0); 2,891 (0,7); 2,869 (0,3); 2,798 (2,8); 2,785 (0,6); 2,778 (0,7); 2,769 (1,2); 2,758 (0,8); 2,750 (0,7); 2,741 (0,4); 2,474 (0,3); 2,469 (0,5); 2,464 (0,4); 2,189 (56,5); 2,121 (0,4); 2,115 (0,4); 2,109 (0,5); 2,103 (0,4); 2,087 (3,4); 1,965 (1,9); 1,959 (4,3); 1,954 (23,2); 1,947 (42,6); 1,941 (57,3); 1,935 (40,0); 1,929 (20,9); 1,770 (0,3); 1,316 (1,1); 1,300 (0,9); 1,285 (0,3); 1,269 (1,0); 0,853 (0,4); 0,834 (0,4); 0,787 (0,4); 0,776 (0,4); 0,578

(1,6); 0,535 (1,9); 0,525 (1,3); 0,518 (1,7); 0,146 (0,6); 0,008 (4,9); 0,000 (131,9); -0,008 (6,9); -0,150 (0,6)
Ví dụ I-T3-221: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,693 (6,2); 8,687 (6,2); 8,234 (0,7); 8,225 (9,9); 8,212 (10,1); 8,053 (0,4); 8,042 (6,8); 8,036 (6,6); 7,932 (16,0); 7,011 (1,9); 5,447 (15,9); 2,886 (0,5); 2,876 (1,3); 2,867 (1,8); 2,858 (2,8); 2,848 (2,8); 2,840 (1,8); 2,830 (1,3); 2,821 (0,4); 2,149 (16,6); 2,121 (1,4); 2,114 (1,2); 2,108 (1,2); 2,102 (0,9); 2,096 (0,6); 1,965 (6,2); 1,959 (9,3); 1,953 (46,1); 1,947 (83,1); 1,941 (110,8); 1,934 (76,5); 1,928 (39,4); 1,775 (0,5); 1,769 (0,7); 1,763 (0,4); 1,269 (1,0); 1,259 (0,5); 0,809 (1,5); 0,796 (4,5); 0,791 (5,9); 0,778 (6,1); 0,773 (4,5); 0,761 (2,0); 0,620 (2,0); 0,608 (5,1); 0,603 (5,5); 0,599 (4,9); 0,593 (4,7); 0,581 (1,4); 0,146 (1,3); 0,008 (11,5); 0,000 (286,0); -0,009 (12,3); -0,150 (1,3)
Ví dụ I-T3-222: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,742 (7,6); 8,736 (7,9); 8,237 (11,7); 8,230 (10,9); 8,112 (8,3); 8,106 (8,3); 7,935 (16,0); 7,717 (1,6); 6,777 (0,5); 5,448 (3,1); 2,170 (68,6); 2,121 (0,4); 2,115 (0,6); 2,108 (0,7); 2,102 (0,5); 1,965 (4,0); 1,959 (7,7); 1,953 (42,0); 1,947 (76,9); 1,941 (104,1); 1,935 (72,7); 1,929 (37,9); 1,776 (0,5); 1,769 (0,6); 1,763 (0,5); 1,697 (0,5); 1,612 (3,1); 1,598 (7,6); 1,591 (7,8); 1,577 (4,2); 1,537 (0,5); 1,523 (1,3); 1,505 (1,2); 1,408 (0,5); 1,368 (4,3); 1,355 (7,7); 1,348 (8,0); 1,333 (3,2); 1,277 (0,4); 1,269 (0,9); 1,259 (1,1); 1,193 (0,9); 1,187 (0,6); 1,183 (0,4); 1,177 (1,0); 1,171 (0,6); 1,166 (0,4); 0,146 (1,1); 0,008 (9,5); 0,000 (259,4); -0,009 (11,5); -0,150 (1,1)
Ví dụ I-T3-223: ^{1}H-NMR (600,1 MHz, CD3CN): δ= 8,772 (0,8); 8,732 (3,1); 8,728 (3,0); 8,222 (7,7); 8,215 (5,8); 8,200 (0,8); 8,021 (3,2); 8,017 (3,1); 7,943 (13,2); 6,642 (0,5); 4,077 (1,3); 4,065 (3,9); 4,053 (3,9); 4,042 (1,3); 3,752 (0,8); 3,165 (3,1); 3,069 (0,4); 2,934 (16,0); 2,880 (0,4); 2,245 (0,5); 2,240 (0,6); 2,222 (0,8); 2,146 (25,4); 2,078 (1,0); 2,059 (0,8); 2,055 (1,1); 2,050 (1,3); 2,046 (1,0); 2,042 (0,7); 1,972 (17,2); 1,964 (2,0); 1,956 (5,4); 1,952 (7,4); 1,948 (55,6); 1,944 (100,9); 1,940 (146,1); 1,936 (99,1); 1,931 (49,9); 1,833 (0,4); 1,829 (0,7); 1,825 (0,9); 1,821 (0,7); 1,816 (0,4); 1,664 (3,8); 1,661 (4,0); 1,505 (0,4); 1,473 (3,0); 1,443 (0,6); 1,425 (0,6); 1,422 (0,6); 1,409 (0,8); 1,406 (0,8); 1,390 (2,1); 1,388 (1,6); 1,372 (1,4); 1,363 (0,5); 1,358 (0,7); 1,341 (1,7); 1,316 (0,9); 1,303 (0,9); 1,285 (3,5); 1,277 (3,9); 1,271 (6,9); 1,221 (1,2); 1,216 (6,4); 1,214 (5,7); 1,204 (9,5); 1,201 (2,5); 1,192 (4,8); 1,180 (0,6); 1,175 (0,3); 0,948 (0,4); 0,893 (0,9); 0,882 (1,8); 0,870 (1,5); 0,863 (0,9); 0,860 (0,9); 0,856 (0,9); 0,846 (0,9); 0,000 (7,9)
Ví dụ I-T3-224: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,271 (7,9); 8,267 (7,8); 8,184 (15,8); 8,183 (15,9); 8,152 (0,7); 8,141 (16,0); 7,791 (6,9); 7,693 (9,4); 7,688 (12,0); 7,678 (0,8); 7,662 (6,6); 7,656 (4,7); 7,641 (7,7); 7,635 (6,2); 7,591

(0,7); 7,479 (11,5); 7,458 (9,1); 6,959 (2,7); 4,086 (0,9); 4,068 (2,7); 4,050 (2,8); 4,032 (0,9); 2,986 (0,4); 2,883 (0,8); 2,873 (2,2); 2,864 (3,0); 2,855 (4,6); 2,846 (4,6); 2,837 (2,9); 2,828 (2,2); 2,818 (0,9); 2,567 (0,7); 2,536 (0,3); 2,503 (0,4); 2,477 (1,2); 2,472 (1,9); 2,467 (2,6); 2,462 (1,9); 2,458 (1,1); 2,411 (0,5); 2,398 (0,5); 2,373 (0,6); 2,310 (0,9); 2,281 (1,2); 2,187 (1104,6); 2,121 (0,9); 2,115 (2,0); 2,109 (2,7); 2,103 (1,9); 2,096 (0,9); 1,993 (0,6); 1,973 (14,2); 1,966 (15,1); 1,960 (36,7); 1,954 (209,3); 1,948 (380,7); 1,941 (511,0); 1,935 (347,0); 1,929 (175,8); 1,916 (1,4); 1,782 (1,0); 1,776 (1,9); 1,770 (2,8); 1,764 (1,8); 1,757 (0,8); 1,437 (14,7); 1,340 (0,4); 1,285 (0,8); 1,270 (2,8); 1,222 (3,4); 1,204 (6,6); 1,186 (3,2); 0,882 (0,5); 0,857 (0,5); 0,841 (0,4); 0,796 (2,4); 0,784 (7,0); 0,779 (9,4); 0,766 (9,7); 0,761 (6,9); 0,749 (3,1); 0,727 (0,5); 0,709 (0,4); 0,654 (0,4); 0,644 (0,4); 0,614 (3,2); 0,602 (7,9); 0,597 (8,2); 0,593 (7,3); 0,587 (7,3); 0,575 (2,2); 0,526 (0,3); 0,146 (7,1); 0,138 (0,4); 0,079 (0,4); 0,069 (0,4); 0,066 (0,3); 0,058 (0,5); 0,054 (0,5); 0,049 (0,5); 0,045 (0,6); 0,037 (0,8); 0,023 (2,0); 0,008 (59,7); 0,000 (1582,5); -0,009 (57,5); -0,033 (0,5); -0,036 (0,5); -0,150 (7,0)
Ví dụ I-T3-225: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,269 (2,4); 8,266 (2,4); 8,170 (4,4); 8,126 (4,2); 7,787 (2,2); 7,644 (1,2); 7,639 (1,7); 7,624 (1,0); 7,618 (5,4); 7,613 (1,7); 7,561 (0,6); 7,556 (0,5); 7,490 (2,1); 7,489 (2,0); 7,482 (0,7); 7,470 (1,6); 7,468 (1,6); 7,462 (0,6); 3,058 (14,9); 3,006 (0,4); 2,778 (0,6); 2,771 (3,2); 2,761 (0,6); 2,753 (0,7); 2,744 (1,1); 2,734 (0,7); 2,726 (0,8); 2,127 (33,1); 2,113 (0,8); 2,106 (0,7); 2,100 (0,5); 1,971 (0,8); 1,963 (2,6); 1,957 (6,7); 1,951 (37,7); 1,945 (68,8); 1,939 (92,9); 1,933 (64,3); 1,927 (33,3); 1,774 (0,4); 1,767 (0,5); 1,761 (0,4); 1,437 (16,0); 1,270 (0,8); 1,204 (0,4); 0,841 (0,5); 0,823 (0,4); 0,780 (0,5); 0,769 (0,4); 0,581 (1,4); 0,575 (1,4); 0,487 (1,5); 0,479 (1,3); 0,470 (1,5); 0,146 (1,1); 0,008 (9,5); 0,000 (262,4); -0,009 (11,4); -0,150 (1,2)
Ví dụ I-T3-226: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,269 (7,2); 8,266 (7,5); 8,191 (16,0); 8,147 (15,3); 8,056 (0,9); 7,789 (6,5); 7,741 (8,2); 7,735 (10,5); 7,708 (5,2); 7,703 (4,0); 7,687 (6,0); 7,682 (5,1); 7,582 (0,8); 7,554 (4,5); 7,509 (10,0); 7,488 (8,2); 4,084 (0,6); 4,067 (1,9); 4,049 (1,9); 4,032 (0,6); 3,063 (0,7); 3,040 (5,6); 2,902 (4,9); 2,854 (0,6); 2,568 (0,4); 2,126 (170,0); 2,112 (2,8); 2,106 (2,7); 2,100 (1,9); 2,093 (1,0); 2,035 (0,4); 1,970 (10,0); 1,962 (11,5); 1,956 (26,7); 1,951 (152,2); 1,944 (278,1); 1,938 (376,5); 1,932 (259,9); 1,926 (134,2); 1,913 (1,4); 1,779 (0,8); 1,773 (1,5); 1,767 (2,1); 1,761 (1,4); 1,754 (0,7); 1,597 (4,0); 1,583 (10,7); 1,576 (10,4); 1,563 (5,3); 1,523 (0,7); 1,436 (8,2); 1,404 (0,7); 1,364 (5,4); 1,350 (10,4); 1,344 (11,2); 1,329 (4,1); 1,318 (0,3); 1,292 (0,5); 1,269 (2,7); 1,221 (2,2); 1,203 (4,2); 1,185 (2,1); 0,881 (0,4); 0,858 (0,3); 0,145 (5,2); 0,031 (0,9); 0,0071 (35,1); 0,0066 (35,1); -0,001 (985,7); -0,009 (44,0); -0,026 (0,9); -0,040 (0,4); -0,151 (5,1)

Ví dụ I-T3-227: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,511 (7,8); 8,508 (7,8); 8,174 (16,0); 8,118 (13,4); 8,099 (7,8); 7,694 (9,8); 7,688 (12,4); 7,662 (6,6); 7,656 (5,0); 7,641 (7,7); 7,635 (6,4); 7,499 (0,3); 7,476 (11,6); 7,455 (9,2); 6,938 (2,9); 3,062 (0,6); 2,880 (0,7); 2,870 (2,1); 2,861 (3,0); 2,852 (4,7); 2,843 (4,7); 2,834 (3,0); 2,825 (2,2); 2,815 (0,7); 2,543 (0,4); 2,468 (0,4); 2,463 (0,6); 2,459 (0,4); 2,163 (162,8); 2,120 (1,0); 2,114 (1,0); 2,108 (1,1); 2,102 (0,9); 2,087 (20,5); 1,972 (1,6); 1,965 (5,0); 1,959 (13,4); 1,953 (69,2); 1,947 (125,1); 1,941 (166,4); 1,935 (115,7); 1,928 (59,8); 1,781 (0,4); 1,775 (0,7); 1,769 (1,0); 1,763 (0,6); 1,757 (0,3); 1,285 (0,4); 1,269 (1,7); 1,204 (0,6); 1,186 (0,3); 1,179 (0,8); 0,794 (2,5); 0,781 (7,3); 0,776 (9,8); 0,763 (10,2); 0,758 (7,4); 0,746 (3,4); 0,724 (0,4); 0,707 (0,4); 0,652 (0,4); 0,642 (0,4); 0,612 (3,3); 0,601 (8,5); 0,595 (8,9); 0,591 (8,1); 0,586 (7,9); 0,573 (2,5); 0,536 (0,4); 0,528 (0,3); 0,146 (2,7); 0,029 (0,4); 0,008 (25,1); 0,000 (580,3); -0,009 (29,4); -0,028 (0,7); -0,150 (2,7)
Ví dụ I-T3-228: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,508 (2,3); 8,184 (4,7); 8,130 (3,9); 8,099 (2,3); 7,741 (2,6); 7,735 (3,4); 7,711 (1,8); 7,705 (1,3); 7,690 (2,1); 7,684 (1,7); 7,644 (1,3); 7,509 (3,2); 7,488 (2,6); 2,545 (0,6); 2,468 (0,5); 2,463 (0,7); 2,459 (0,5); 2,159 (239,3); 2,119 (0,6); 2,113 (0,8); 2,107 (0,9); 2,101 (0,7); 2,095 (0,4); 1,971 (1,0); 1,964 (3,7); 1,958 (9,3); 1,952 (53,0); 1,946 (96,2); 1,940 (130,0); 1,933 (90,1); 1,927 (46,8); 1,780 (0,3); 1,774 (0,6); 1,768 (0,8); 1,762 (0,6); 1,595 (1,3); 1,581 (3,4); 1,574 (3,5); 1,560 (1,8); 1,437 (16,0); 1,363 (1,8); 1,349 (3,4); 1,343 (3,5); 1,328 (1,4); 1,270 (0,7); 1,204 (0,4); 0,146 (1,3); 0,008 (10,5); 0,000 (282,8); -0,009 (11,9); -0,150 (1,3)
Ví dụ I-T3-229: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,507 (1,6); 8,161 (3,4); 8,104 (3,1); 7,644 (0,8); 7,639 (1,1); 7,619 (3,9); 7,562 (0,4); 7,557 (0,4); 7,488 (1,4); 7,481 (0,5); 7,466 (1,1); 7,460 (0,4); 3,056 (10,5); 2,855 (0,4); 2,771 (2,3); 2,763 (0,5); 2,755 (0,5); 2,745 (0,8); 2,736 (0,5); 2,728 (0,4); 2,544 (0,4); 2,131 (16,7); 1,971 (0,5); 1,963 (1,1); 1,957 (2,7); 1,951 (15,4); 1,945 (28,4); 1,939 (38,5); 1,933 (26,5); 1,927 (13,7); 1,437 (16,0); 0,779 (0,4); 0,576 (1,0); 0,488 (1,0); 0,480 (0,9); 0,471 (1,0); 0,146 (0,4); 0,008 (3,0); 0,000 (85,2); -0,009 (3,4); -0,150 (0,4)
Ví dụ I-T4-1: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,170 (4,8); 7,860 (5,7); 7,840 (2,0); 7,833 (1,3); 7,687 (4,2); 7,561 (1,9); 7,539 (1,6); 7,436 (5,5); 6,972 (0,9); 2,871 (0,5); 2,862 (0,8); 2,853 (1,1); 2,843 (1,1); 2,835 (0,8); 2,825 (0,5); 2,251 (24,5); 2,140 (6,0); 1,971 (0,5); 1,964 (0,6); 1,958 (1,4); 1,952 (6,2); 1,946 (11,2); 1,940 (15,0); 1,934 (10,9); 1,928 (5,9); 1,436 (16,0); 0,796 (0,6); 0,784 (1,9); 0,779 (2,5); 0,766 (2,6); 0,761 (2,0); 0,749 (0,9); 0,619 (0,8); 0,608 (2,3); 0,601 (2,5); 0,592 (2,1); 0,580 (0,6); 0,000 (15,7)

Ví dụ I-T4-2: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,184 (6,7); 8,183 (6,5); 7,920 (2,5); 7,915 (8,6); 7,894 (3,0); 7,887 (1,9); 7,699 (6,2); 7,680 (1,6); 7,602 (3,0); 7,600 (2,8); 7,582 (2,4); 7,580 (2,6); 7,438 (7,8); 2,463 (0,3); 2,253 (39,2); 2,151 (134,8); 2,120 (0,5); 2,114 (0,7); 2,108 (0,9); 2,102 (0,6); 2,095 (0,4); 1,972 (1,2); 1,965 (4,2); 1,959 (10,5); 1,953 (54,2); 1,947 (98,7); 1,940 (132,9); 1,934 (93,2); 1,928 (48,4); 1,775 (0,6); 1,769 (0,8); 1,763 (0,6); 1,599 (1,8); 1,585 (4,6); 1,578 (4,7); 1,564 (2,4); 1,437 (16,0); 1,415 (0,4); 1,375 (2,4); 1,361 (4,7); 1,354 (4,9); 1,340 (1,8); 1,269 (1,5); 1,204 (0,4); 0,146 (0,7); 0,008 (5,3); 0,000 (150,3); -0,008 (7,3); -0,149 (0,7)
Ví dụ I-T4-3: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,929 (2,4); 8,922 (2,4); 8,231 (2,7); 8,224 (2,6); 8,205 (4,3); 7,754 (3,8); 7,444 (5,0); 7,072 (0,7); 2,881 (0,4); 2,872 (0,7); 2,863 (1,0); 2,853 (1,0); 2,845 (0,7); 2,835 (0,4); 2,252 (22,9); 2,140 (16,7); 1,964 (1,1); 1,952 (13,4); 1,946 (23,9); 1,940 (31,3); 1,934 (21,8); 1,928 (11,3); 1,436 (16,0); 0,814 (0,5); 0,800 (1,8); 0,796 (2,2); 0,783 (2,3); 0,778 (1,7); 0,766 (0,7); 0,633 (0,7); 0,622 (2,1); 0,616 (2,2); 0,612 (2,0); 0,607 (1,8); 0,594 (0,5); 0,146 (0,6); 0,000 (113,1); -0,150 (0,6)
Ví dụ I-T4-4: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,974 (3,9); 8,967 (3,9); 8,300 (4,1); 8,294 (4,0); 8,216 (6,7); 7,764 (6,3); 7,753 (0,6); 7,735 (1,8); 7,446 (7,8); 4,067 (0,9); 4,050 (0,9); 3,076 (1,0); 2,898 (1,0); 2,254 (38,8); 2,144 (39,1); 2,114 (0,6); 2,107 (0,6); 2,101 (0,4); 2,095 (0,4); 2,086 (0,4); 2,063 (0,4); 1,972 (4,1); 1,964 (2,3); 1,958 (6,0); 1,952 (30,2); 1,946 (53,9); 1,940 (71,6); 1,934 (48,9); 1,928 (25,1); 1,768 (0,4); 1,617 (1,7); 1,602 (4,5); 1,595 (4,4); 1,581 (2,2); 1,437 (16,0); 1,388 (2,3); 1,375 (4,5); 1,368 (4,5); 1,353 (1,7); 1,269 (0,9); 1,221 (1,0); 1,204 (2,0); 1,186 (1,0); 0,146 (1,1); 0,008 (8,7); 0,000 (211,3); -0,009 (8,7); -0,150 (1,1)
Ví dụ I-T22-1: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 7,934 (2,4); 7,928 (3,4); 7,908 (1,9); 7,902 (1,3); 7,887 (2,0); 7,882 (1,6); 7,615 (3,0); 7,594 (2,6); 7,486 (5,3); 7,037 (0,7); 6,864 (0,4); 6,858 (6,5); 2,877 (0,5); 2,867 (0,8); 2,858 (1,2); 2,849 (1,2); 2,840 (0,8); 2,831 (0,6); 2,258 (25,0); 2,168 (12,6); 1,965 (0,4); 1,959 (1,0); 1,953 (5,8); 1,947 (10,6); 1,941 (14,3); 1,935 (10,0); 1,928 (5,3); 1,436 (16,0); 0,800 (0,6); 0,788 (1,8); 0,783 (2,5); 0,770 (2,6); 0,765 (1,9); 0,753 (0,9); 0,624 (0,9); 0,613 (2,2); 0,606 (2,3); 0,602 (2,0); 0,597 (2,0); 0,585 (0,7); 0,008 (0,7); 0,000 (20,3); -0,009 (0,9)
Ví dụ I-T22-2: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 7,992 (6,1); 7,986 (8,0); 7,960 (4,3); 7,954 (3,3); 7,939 (4,6); 7,933 (4,0); 7,709 (2,2); 7,654 (7,3); 7,633 (6,4); 7,487 (13,6); 6,877 (16,0); 5,448 (2,4); 2,418 (0,4); 2,260 (66,3); 2,153 (49,7); 2,120 (0,4); 2,114 (0,4); 2,108 (0,5); 2,098 (0,5); 2,086 (1,9); 1,972 (0,6); 1,964 (1,9); 1,958 (4,9); 1,953 (28,0); 1,946 (51,5); 1,940 (70,2); 1,934 (49,9); 1,928 (27,0); 1,775

(0,3); 1,769 (0,4); 1,603 (3,1); 1,588 (8,0); 1,581 (8,3); 1,568 (4,3); 1,528 (0,5); 1,436 (0,9); 1,419 (0,5); 1,379 (4,2); 1,365 (8,0); 1,359 (8,7); 1,344 (3,3); 1,268 (0,4); 0,146 (0,5); 0,008 (3,8); 0,000 (117,9); -0,008 (7,0); -0,150 (0,6)
Ví dụ I-T22-3: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 7,982 (3,5); 7,977 (5,3); 7,966 (3,0); 7,960 (1,9); 7,945 (2,9); 7,939 (2,5); 7,669 (4,3); 7,648 (3,7); 7,487 (9,9); 6,883 (8,4); 4,152 (1,0); 4,136 (1,1); 4,129 (3,0); 4,112 (3,1); 4,105 (3,3); 4,089 (3,1); 4,082 (1,4); 4,065 (1,1); 2,262 (40,4); 2,156 (20,4); 2,101 (0,4); 1,972 (0,5); 1,964 (1,0); 1,958 (2,4); 1,953 (12,4); 1,946 (23,1); 1,940 (31,5); 1,934 (23,1); 1,928 (12,8); 1,436 (16,0); 0,008 (2,0); 0,000 (53,5)
Ví dụ I-T22-4: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,983 (1,2); 8,977 (1,3); 8,360 (1,3); 8,355 (1,3); 7,953 (1,3); 7,944 (1,4); 7,036 (2,1); 2,306 (6,0); 2,160 (8,1); 1,953 (4,2); 1,947 (7,8); 1,941 (10,6); 1,935 (7,9); 1,929 (4,3); 1,619 (0,6); 1,604 (1,6); 1,597 (1,6); 1,584 (0,8); 1,437 (16,0); 1,390 (0,8); 1,376 (1,6); 1,369 (1,7); 1,354 (0,6)
Ví dụ I-T22-5: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 7,942 (4,2); 7,936 (5,2); 7,918 (1,6); 7,912 (1,1); 7,897 (1,6); 7,892 (1,3); 7,619 (2,4); 7,598 (2,1); 7,045 (0,8); 6,922 (4,2); 2,874 (0,4); 2,865 (0,7); 2,856 (1,0); 2,847 (1,0); 2,838 (0,7); 2,828 (0,4); 2,305 (10,8); 2,183 (27,7); 1,960 (0,8); 1,954 (3,8); 1,948 (6,9); 1,942 (9,3); 1,936 (6,5); 1,930 (3,4); 1,436 (16,0); 0,799 (0,5); 0,786 (1,7); 0,781 (2,2); 0,769 (2,2); 0,764 (1,7); 0,751 (0,7); 0,624 (0,7); 0,613 (2,1); 0,607 (2,1); 0,603 (2,0); 0,597 (1,8); 0,585 (0,5); 0,000 (23,8)
Ví dụ I-T22-6: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,939 (1,4); 8,933 (1,4); 8,292 (1,5); 8,286 (1,4); 7,952 (1,1); 7,942 (1,1); 7,150 (0,3); 7,022 (2,3); 2,874 (0,4); 2,865 (0,5); 2,855 (0,5); 2,847 (0,4); 2,305 (5,7); 2,187 (7,7); 1,973 (0,7); 1,960 (0,4); 1,954 (2,8); 1,948 (5,1); 1,942 (7,0); 1,936 (4,8); 1,930 (2,5); 1,436 (16,0); 1,204 (0,3); 0,803 (0,9); 0,798 (1,1); 0,785 (1,2); 0,780 (0,9); 0,767 (0,4); 0,636 (0,4); 0,624 (1,0); 0,619 (1,1); 0,615 (0,9); 0,609 (0,9); 0,000 (5,3)
Ví dụ I-T22-7: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 7,999 (1,6); 7,994 (2,1); 7,970 (1,1); 7,965 (0,8); 7,949 (2,6); 7,944 (2,6); 7,937 (1,8); 7,659 (2,2); 7,638 (1,6); 6,939 (3,3); 2,306 (8,4); 2,155 (9,0); 1,972 (0,6); 1,965 (0,3); 1,953 (5,6); 1,947 (10,3); 1,941 (14,0); 1,935 (9,7); 1,929 (5,0); 1,602 (0,8); 1,587 (2,1); 1,581 (2,1); 1,567 (1,1); 1,436 (16,0); 1,380 (1,1); 1,366 (2,1); 1,360 (2,2); 1,345 (0,8)
Ví dụ I-T23-1: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 7,961 (5,3); 7,958 (2,0); 7,942 (1,7); 7,937 (1,0); 7,864 (5,1); 7,609 (1,6); 7,606 (1,0); 7,590 (1,0); 7,587 (1,4); 7,148 (5,1); 6,968 (0,5); 2,876 (0,4); 2,867 (0,6); 2,858 (0,9); 2,849

(0,9); 2,840 (0,6); 2,831 (0,4); 2,134 (6,5); 1,964 (1,6); 1,958 (2,5); 1,952 (11,3); 1,946 (20,0); 1,940 (26,1); 1,934 (17,8); 1,928 (9,0); 1,437 (16,0); 0,800 (0,5); 0,787 (1,5); 0,782 (1,9); 0,770 (2,0); 0,764 (1,4); 0,752 (0,7); 0,624 (0,7); 0,614 (1,6); 0,606 (1,7); 0,602 (1,5); 0,597 (1,5); 0,584 (0,5); 0,000 (0,7)
Ví dụ I-T23-2: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,014 (3,3); 8,010 (1,3); 7,997 (1,1); 7,991 (0,6); 7,866 (3,6); 7,648 (1,5); 7,642 (0,8); 7,630 (0,6); 7,625 (1,2); 7,162 (3,0); 5,447 (16,0); 2,140 (12,0); 1,972 (0,4); 1,964 (2,4); 1,958 (4,0); 1,952 (17,2); 1,946 (30,2); 1,940 (39,3); 1,934 (26,8); 1,928 (13,7); 1,600 (0,6); 1,586 (1,7); 1,579 (1,7); 1,565 (0,9); 1,437 (0,9); 1,380 (0,9); 1,367 (1,6); 1,360 (1,7); 1,345 (0,7); 0,000 (0,9)
Ví dụ I-T46-1: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 7,669 (6,3); 7,664 (9,6); 7,654 (5,5); 7,648 (2,9); 7,633 (5,5); 7,627 (4,3); 7,582 (3,1); 7,509 (16,0); 7,426 (8,2); 7,405 (6,8); 7,166 (4,7); 7,161 (8,3); 7,156 (5,0); 6,767 (3,7); 6,760 (7,3); 6,754 (5,5); 6,735 (5,6); 6,730 (6,3); 6,723 (3,8); 2,468 (0,7); 2,463 (1,0); 2,459 (0,7); 2,298 (0,5); 2,161 (388,0); 2,139 (78,8); 2,121 (1,2); 2,114 (1,5); 2,108 (1,7); 2,102 (1,2); 2,096 (0,7); 1,993 (0,7); 1,977 (0,9); 1,965 (8,8); 1,959 (16,3); 1,953 (98,1); 1,947 (179,6); 1,941 (243,9); 1,935 (167,4); 1,928 (86,0); 1,856 (0,9); 1,842 (0,6); 1,782 (0,6); 1,775 (1,1); 1,769 (1,5); 1,763 (1,0); 1,757 (0,5); 1,585 (3,5); 1,570 (9,4); 1,563 (9,3); 1,550 (4,6); 1,510 (0,5); 1,394 (0,5); 1,354 (4,7); 1,340 (9,4); 1,333 (9,8); 1,319 (3,5); 0,146 (0,4); 0,008 (2,9); 0,000 (87,8); -0,008 (3,4); -0,150 (0,4)
Ví dụ I-T46-2: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 7,682 (3,3); 7,677 (6,3); 7,676 (6,2); 7,673 (6,2); 7,668 (4,7); 7,665 (5,9); 7,653 (5,1); 7,647 (7,8); 7,628 (1,3); 7,623 (1,7); 7,606 (1,1); 7,600 (0,7); 7,585 (1,1); 7,579 (1,0); 7,518 (4,3); 7,517 (4,5); 7,507 (3,5); 7,496 (6,1); 7,478 (6,1); 7,475 (3,5); 7,459 (3,7); 7,422 (2,5); 7,419 (1,8); 7,409 (1,0); 7,403 (2,8); 7,394 (1,8); 7,385 (1,0); 7,373 (1,2); 7,153 (0,9); 7,148 (1,6); 7,143 (1,1); 6,961 (0,8); 6,900 (0,5); 6,760 (0,8); 6,753 (1,5); 6,747 (1,1); 6,724 (1,1); 6,720 (1,3); 6,717 (1,2); 6,713 (0,9); 3,855 (0,7); 3,051 (1,3); 2,881 (0,4); 2,871 (1,1); 2,862 (1,6); 2,853 (2,4); 2,843 (3,0); 2,834 (1,8); 2,826 (1,3); 2,816 (0,6); 2,476 (0,8); 2,472 (1,3); 2,467 (1,8); 2,462 (1,4); 2,427 (0,5); 2,391 (0,4); 2,383 (0,3); 2,359 (0,4); 2,327 (0,5); 2,182 (852,2); 2,138 (15,6); 2,121 (1,5); 2,115 (2,2); 2,109 (2,8); 2,102 (2,4); 2,096 (1,2); 1,992 (0,9); 1,966 (9,9); 1,959 (26,3); 1,954 (166,7); 1,947 (309,9); 1,941 (423,2); 1,935 (291,5); 1,929 (148,5); 1,782 (0,9); 1,776 (1,7); 1,770 (2,4); 1,764 (1,7); 1,757 (0,9); 1,437 (16,0); 1,270 (1,6); 0,790 (1,1); 0,778 (3,3); 0,773 (4,8); 0,766 (2,0); 0,760 (4,8); 0,755 (4,0); 0,743 (1,7); 0,736 (0,5); 0,614 (1,5); 0,602 (4,2); 0,593 (4,9); 0,587 (4,7); 0,575 (1,8); 0,000 (1,7)
Ví dụ I-T46-3: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):

δ= 8,649 (2,9); 8,643 (3,2); 7,935 (2,9); 7,929 (2,9); 7,873 (7,9); 7,322 (1,5); 7,318 (2,7); 7,313 (1,9); 6,923 (1,5); 6,917 (2,0); 6,916 (2,3); 6,910 (1,9); 6,802 (1,7); 6,798 (2,2); 6,795 (2,0); 6,790 (1,9); 3,058 (16,0); 2,790 (2,7); 2,783 (0,4); 2,772 (0,6); 2,765 (0,6); 2,757 (1,2); 2,745 (0,7); 2,738 (0,6); 2,170 (18,1); 1,966 (1,0); 1,960 (2,0); 1,954 (11,8); 1,948 (21,8); 1,941 (29,7); 1,935 (20,7); 1,929 (10,7); 1,269 (0,6); 0,844 (0,3); 0,826 (0,4); 0,783 (0,4); 0,573 (1,4); 0,528 (1,7); 0,518 (1,1); 0,511 (1,6); 0,000 (7,0); -0,008 (0,3)
Ví dụ I-T46-4: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,649 (6,8); 8,643 (7,0); 7,990 (0,3); 7,976 (7,4); 7,970 (7,3); 7,871 (16,0); 7,320 (4,1); 7,315 (6,6); 7,310 (4,1); 6,976 (1,8); 6,920 (3,8); 6,914 (4,9); 6,912 (5,2); 6,907 (4,0); 6,805 (4,5); 6,801 (4,8); 6,798 (4,5); 6,794 (3,8); 5,448 (0,6); 2,876 (0,4); 2,867 (1,2); 2,857 (1,7); 2,849 (2,7); 2,839 (2,8); 2,831 (1,8); 2,821 (1,3); 2,811 (0,4); 2,143 (54,7); 2,114 (0,4); 2,108 (0,4); 1,965 (2,0); 1,959 (5,3); 1,953 (26,5); 1,947 (48,2); 1,941 (64,2); 1,934 (44,7); 1,928 (23,1); 1,769 (0,4); 1,269 (0,9); 1,200 (0,4); 0,799 (1,4); 0,786 (4,5); 0,781 (5,9); 0,769 (6,1); 0,763 (4,5); 0,751 (1,9); 0,614 (1,9); 0,602 (5,1); 0,597 (5,6); 0,593 (5,0); 0,587 (4,8); 0,575 (1,4); 0,008 (0,5); 0,000 (15,3)
Ví dụ I-T46-5: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,693 (7,0); 8,687 (7,3); 8,034 (7,5); 8,028 (7,5); 7,873 (16,0); 7,693 (1,3); 7,335 (3,9); 7,330 (6,8); 7,325 (4,4); 6,927 (3,7); 6,922 (4,7); 6,920 (5,0); 6,914 (4,3); 6,816 (4,3); 6,812 (4,8); 6,808 (4,4); 6,804 (3,9); 5,449 (14,1); 2,173 (58,5); 2,115 (0,4); 2,109 (0,5); 2,103 (0,4); 1,966 (2,9); 1,960 (5,1); 1,954 (29,3); 1,948 (53,8); 1,941 (72,9); 1,935 (50,8); 1,929 (26,4); 1,776 (0,3); 1,770 (0,4); 1,764 (0,3); 1,602 (2,9); 1,588 (7,3); 1,581 (7,4); 1,567 (3,9); 1,551 (0,4); 1,523 (0,7); 1,505 (0,6); 1,405 (0,5); 1,365 (4,1); 1,351 (7,2); 1,345 (7,6); 1,330 (3,0); 1,269 (0,9); 1,259 (0,5); 1,200 (0,6); 1,193 (0,4); 1,187 (0,4); 1,177 (0,5); 1,171 (0,4); 0,008 (0,4); 0,000 (13,0)
Ví dụ I-T46-6: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,729 (1,0); 8,692 (3,0); 8,687 (3,0); 8,145 (1,0); 7,954 (3,0); 7,949 (3,0); 7,871 (14,1); 7,325 (3,5); 7,071 (0,6); 6,926 (2,7); 6,920 (3,2); 6,914 (2,1); 6,808 (2,6); 6,803 (2,8); 6,643 (1,1); 6,496 (1,1); 3,751 (1,8); 3,659 (0,8); 3,649 (0,9); 3,643 (2,1); 3,624 (1,8); 3,159 (4,2); 3,076 (1,9); 3,062 (0,3); 2,927 (16,0); 2,905 (0,3); 2,887 (0,3); 2,874 (0,3); 2,240 (1,1); 2,176 (137,5); 2,121 (0,6); 2,115 (0,7); 2,109 (0,7); 2,103 (0,6); 2,097 (0,4); 1,966 (2,5); 1,960 (6,5); 1,954 (35,6); 1,948 (65,4); 1,942 (88,3); 1,935 (62,6); 1,929 (33,5); 1,819 (1,0); 1,811 (1,1); 1,803 (2,6); 1,794 (1,2); 1,786 (1,1); 1,776 (0,6); 1,770 (0,8); 1,764 (0,6); 1,758 (0,4); 1,698 (0,4); 1,653 (4,1); 1,599 (0,4); 1,586 (0,3); 1,548 (0,4); 1,541 (0,4); 1,523 (0,9); 1,505 (1,0); 1,468 (3,4); 1,453 (1,6); 1,415 (1,4); 1,405 (1,4); 1,389 (9,5); 1,358 (1,0); 1,340 (1,1); 1,315 (1,4); 1,303 (3,2); 1,285 (4,6); 1,270 (11,8); 1,221 (12,0); 1,214 (12,0); 1,200 (3,3);

1,193 (1,3); 1,190 (1,5); 1,177 (1,0); 1,172 (1,1); 1,161 (0,7); 1,121 (0,6); 1,107 (0,6); 1,093 (0,9); 1,057 (0,7); 0,974 (0,4); 0,957 (0,5); 0,947 (0,6); 0,934 (0,5); 0,923 (0,7); 0,898 (1,3); 0,882 (3,1); 0,876 (2,5); 0,858 (2,8); 0,840 (1,7); 0,815 (0,6); 0,000 (3,4)

[1)] Khối lượng được đưa ra là đỉnh của mẫu đồng vị của ion $[M+H]^+$ có cường độ cao nhất; nếu ion $[M-H]^-$ được phát hiện, khối lượng được đưa ra được nhận biết bằng [2].

[2] Khối lượng được đưa ra là đỉnh của mẫu đồng vị của ion $[M-H]^-$ có cường độ cao nhất.

[a)] Lưu ý về cách xác định các giá trị logP và phát hiện khối lượng: các giá trị logP được xác định theo EEC Directive 79/831 Phụ lục V.A8 bằng phương pháp HPLC (high-performance liquid chromatography – sắc ký lỏng hiệu năng cao) trên cột đảo pha (C_18) Agilent 1100 LC system; 50*4,6 Zorbax Eclipse Plus C_18 1,8 micron; chất giải hấp A: axetonitril (axit formic 0,1%); chất giải hấp B: nước (axit formic 0,09%); gradien tuyến tính từ 10% axetonitril đến 95% axetonitril trong 4,25 phút, sau đó 95% axetonitril trong 1,25 phút nữa; nhiệt độ lò 55°C; tốc độ dòng: 2,0 ml/phút. Phát hiện khối lượng bằng hệ thống Agilent MSD.

Các ví dụ sinh học

Rhipicephalus sanguineus – thử nghiệm tiếp xúc in vitro với ve chó nâu trưởng thành

Để phủ lên các ống nghiệm, 9 mg thành phần hoạt tính đầu tiên được hòa tan trong 1 ml axeton có chất lượng hóa chất phân tích và sau đó pha loãng đến nồng độ mong muốn bằng axeton có chất lượng hóa chất phân tích 250 µl dung dịch này được phân bố đồng đều trên các thành trong và đáy của ống nghiệm 25 ml bằng cách xoay và rung trên máy lắc quỹ đạo (xoáy rung ở 30 vòng/phút trong 2 giờ). Với dung dịch thành phần hoạt tính 900 ppm và bề mặt trong 44,7 cm^2, dựa trên sự phân bố đồng đều, đạt được liều tính trên diện tích là 5 $\mu g/cm^2$.

Sau khi dung môi đã được làm bay hơi, các ống được đưa vào 5-10 ve chó trưởng thành (*Rhipicephalus sanguineus*), bịt bằng nắp nhựa có đục lỗ và ủ ở bị trí nằm ngang trong bóng tối ở nhiệt độ trong phòng và độ ẩm môi trường. Sau 48 giờ, hiệu lực được xác định. Nhằm mục đích này, các ve được dỗ xuống đáy ống và ủ trên đĩa gia nhiệt ở 45-50°C trong không quá 5 phút. Các con ve mà không động đậy trên đáy hoặc di chuyển theo cách không thống nhất đến mức chúng không thể cố ý tránh sức nóng bằng cách trèo lên cao được xem là đã chết hoặc gần chết.

Chất thể hiện hiệu lực tốt chống lại *Rhipicephalus sanguineus* nếu đạt được ít nhất hiệu lực 80% trong thử nghiệm này ở tỷ lệ áp dụng 5 $\mu g/cm^2$. Hiệu lực 100% nghĩa là tất cả ve chế hoặc gần chết. Hiệu lực 0% nghĩa là không có ve nào bị tổn hại.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 100% pử tỷ lệ áp dụng 5 $\mu g/cm^2$: I-T3-1, I-T3-3, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-23, I-T3-24, I-T3-42, I-T3-44, I-T3-46, I-T3-47, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-61, I-T3-63, I-T3-71, I-T3-72, I-T3-81, I-T3-90, I-T3-91, I-T3-96, I-T3-97, I-T3-98, I-T3-104, I-T3-106, I-T3-109, I-T3-110, I-T3-112, I-T3-117, I-T3-119, I-T3-148, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-161, I-T3-162, I-T3-163, I-T3-165, I-T3-175, I-T3-176, I-T3-189, I-T3-196, I-T4-1, I-T4-2, I-T4-3, I-T4-4, I-T22-2, I-T22-1, I-T22-4, I-T22-5, I-T22-6, I-T22-7

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 80% ở tỷ lệ áp dụng 5 $\mu g/cm^2$: I-T3-38, I-T3-43, I-T3-80, I-T3-88, I-T3-92, I-T3-143

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 100% ở tỷ lệ áp dụng 1 µg/cm²: I-T3-108, I-T3-114, I-T3-141

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 80% ở tỷ lệ áp dụng 1 µg/cm²: I-T3-94, I-T3-123

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 100% ở tỷ lệ áp dụng 0,2 µg/cm²: I-T3-105

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 80% ở tỷ lệ áp dụng 0,2 µg/cm²: I-T3-64

Ctenocephalides felis – thử nghiệm tiếp xúc in vitro với bọ chét mèo trưởng thành

Để phù lên các ống nghiệm, 9 mg thành phần hoạt tính đầu tiên được hòa tan trong 1 ml axeton có chất lượng hóa chất phân tích và sau đó pha loãng đến nồng độ mong muốn bằng axeton có chất lượng hóa chất phân tích. 250 µl dung dịch này được phân bố đồng đều trên thành trong và đáy của ống nghiệm 25 ml bằng cách xoay và rung trên máy lắc quỹ đạo (xoáy rung ở 30 vòng/phút trong 2 giờ). Với dung dịch thành phần hoạt tính 900 ppm và bề mặt trong 44,7 cm², dựa trên sự phân bố đồng đều, đạt được liều tính trên diện tích là 5 µg/cm².

Sau khi dung môi đã được làm bay hơi, các ống được đưa vào 5-10 bọ chét mèo trưởng thành (*Ctenocephalides felis*), bịt bằng nắp nhựa có đục lỗ và ủ ở vị trí nằm ngang ở nhiệt độ trong phòng và độ ẩm môi trường. Sau 48 giờ, hiệu lực được xác định. Nhằm mục đích này, các ống nghiệm được cho đứng thẳng và bọ chét được dỗ xuống đáy ống. Các bọ chét không động đậy trên đáy hoặc di chuyển theo cách không thống nhất được xem là đã chết hoặc gần chết.

Chất thể hiện hiệu lực tốt chống lại *Ctenocephalides felis* nếu đạt được hiệu lực ít nhất 80% trong thử nghiệm này ở tỷ lệ áp dụng 5 µg/cm². Hiệu lực 100% nghĩa là tất cả các bọ chét đều chết hoặc gần chết. Hiệu lực 0% nghaiasc là không bọ chét nào bị tổn hại.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 100% ở tỷ lệ áp dụng 5 µg/cm² (= 500 g/ha): I-T3-1, I-T3-3, I-T3-7, I-T3-9, I-T3-17, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-23, I-T3-24, I-T3-25, I-T3-27, I-T3-28, I-T3-29, I-T3-30, I-T3-31, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-44, I-T3-46, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-61, I-

T3-63, I-T3-64, I-T3-71, I-T3-72, I-T3-80, I-T3-81, I-T3-84, I-T3-85, I-T3-86, I-T3-87, I-T3-88, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-93, I-T3-94, I-T3-95, I-T3-96, I-T3-97, I-T3-98, I-T3-99, I-T3-100, I-T3-101, I-T3-102, I-T3-103, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-109, I-T3-110, I-T3-111, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-114, I-T3-115, I-T3-116, I-T3-117, I-T3-118, I-T3-119, I-T3-120, I-T3-123, I-T3-124, I-T3-125, I-T3-127, I-T3-128, I-T3-129, I-T3-130, I-T3-131, I-T3-132, I-T3-133, I-T3-136, I-T3-137, I-T3-138, I-T3-143, I-T3-145, I-T3-147, I-T3-148, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-162, I-T3-163, I-T3-165, I-T3-175, I-T3-176, I-T3-189, I-T3-196, I-T3-199, I-T4-2, I-T4-3, I-T4-4, I-T22-1, I-T22-2, I-T22-3, I-T22-5, I-T22-7, I-T23-1, I-T23-2, I-T46-2

Thủ nghiệm Amblyomma hebaraeum

Dung môi: dimetyl sulphoxit

Để sản xuất chế phẩm chứa thành phần hoạt tính thích hợp, 10 mg thành phần hoạt tính được trộn với 0,5 ml dimetyl sulphoxit, và thể đặc này được pha loãng bằng nước đến nồng độ mong muốn.

Nhộng ve (*Amblyomma hebraeum*) được đưa vào cốc nhựa có đục lỗ và ngâm trong nồng độ mong muốn trong 1 phút. Các ve được chuyển lên giấy lọc vào đĩa Petri và giữ trong tủ có điều chỉnh khí hậu.

Sau 42 ngày, tỷ lệ tiêu diệt theo % được xác định. 100% nghĩa là tất cả các ve đã bị tiêu diệt; 0% nghĩa là không ve nào bị tiêu diệt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 100% ở tỷ lệ áp dụng 100 ppm: I-T3-1, I-T3-3, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-24, I-T3-28, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-44, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-71, I-T3-72, I-T3-81, I-T3-86, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-95, I-T3-96, I-T3-97, I-T3-98, I-T3-100, I-T3-104, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-109, I-T3-110, I-T3-112, I-T3-114, I-T3-116, I-T3-117, I-T3-119, I-T3-124, I-T3-125, I-T3-131, I-T3-148, I-T3-155, I-T3-162, I-T3-163, I-T22-1, I-T22-2, I-T23-1, I-T4-3, I-T4-4

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 95% ở tỷ lệ áp dụng 100 ppm: I-T3-101

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 90% ở tỷ lệ áp dụng 100 ppm: I-T3-102, I-T3-103

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 85% ở tỷ lệ áp dụng 100 ppm: I-T3-105

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 80% ở tỷ lệ áp dụng 100 ppm: I-T3-53, I-T3-61, I-T3-111, I-T3-123

Boophilus microplus – thử nghiệm tiêm

Dung môi: dimetyl sulphoxit

Để tạo ra chế phẩm chứa thành phần hoạt tính thích hợp, 10 mg thành phần hoạt tính được trộn với 0,5 ml dung môi và thể đặc này được pha loãng bằng dung môi đến nồng độ mong muốn.

1 µl dung dịch thành phần hoạt tính được tiêm vào bụng của 5 ve gia súc cái trưởng thành căng máu *(Boophilus microplus)*. Các ve này được chuyển vào đĩa và giữ trong buồng có điều chỉnh khí hậu.

Hiệu lực được đánh giá sau 7 bằng khả năng đẻ trứng có thể nở thành con. Các trứng rõ ràng không thể nở thành con được bảo quản trong tủ có điều chỉnh khí hậu đến ấu trùng nở ra sau khoảng 42 ngày. Hiệu lực 100% nghĩa là không có ve nào đẻ được trứng có thể nở thành con; 0% nghĩa là tất cả các trứng đều nở được thành con.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 100% ở tỷ lệ áp dụng 20 µg/động vật: I-T2-1, I-T2-2, I-T3-1, I-T3-2, I-T3-3, I-T3-4, I-T3-5, I-T3-6, I-T3-7, I-T3-8, I-T3-9, I-T3-10, I-T3-11, I-T3-12, I-T3-13, I-T3-15, I-T3-17, I-T3-18, I-T3-19, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-23, I-T3-24, I-T3-25, I-T3-26, I-T3-27, I-T3-28, I-T3-29, I-T3-30, I-T3-31, I-T3-32, I-T3-33, I-T3-34, I-T3-35, I-T3-36, I-T3-37, I-T3-38, I-T3-39, I-T3-40, I-T3-41, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-44, I-T3-45, I-T3-46, I-T3-47, I-T3-48, I-T3-49, I-T3-50, I-T3-51, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-58, I-T3-59, I-T3-60, I-T3-61, I-T3-62, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-65, I-T3-66, I-T3-67, I-T3-68, I-T3-69, I-T3-70, I-T3-71, I-T3-72, I-T3-73, I-T3-74, I-T3-76, I-T3-77, I-T3-78, I-T3-79, I-T3-80, I-T3-81, I-T3-82, I-T3-83, I-T3-84, I-T3-85, I-T3-86, I-T3-87, I-T3-88, I-T3-89, I-T3-90, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-93, I-T3-94, I-T3-95, I-T3-96, I-T3-97, I-T3-98, I-T3-99, I-T3-100, I-T3-101, I-T3-102, I-T3-103, I-T3-104, I-T3-105, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-109, I-T3-110, I-T3-111, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-114, I-T3-115, I-T3-116, I-T3-117, I-T3-118, I-T3-119, I-T3-120, I-T3-123, I-T3-124, I-T3-125, I-T3-126, I-T3-127, I-T3-128, I-T3-129, I-T3-130, I-T3-131, I-T3-132,

I-T3-133, I-T3-136, I-T3-137, I-T3-145, I-T3-139, I-T3-140, I-T3-141, I-T3-142, I-T3-143, I-T3-144, I-T3-146, I-T3-148, I-T3-149, I-T3-150, I-T3-151, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-161, I-T3-162, I-T3-163, I-23-165, I-T3-168, I-T3-175, I-T3-176, I-T3-89, I-T4-1, I-T4-2, I-T4-3, I-T4-4, I-T22-1, I-T22-2, I-T22-3, I-T22-4, I-T22-5, I-T22-6, I-T22-7, I-T23-1, I-T23-2, I-T46-2

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 90% ở tỷ lệ áp dụng 20 µg/động vật: I-T3-75

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 80% ở tỷ lệ áp dụng 20 µg/động vật: I-T3-121

Boophilus microplus – thử nghiệm nhúng

Động vật thử nghiệm: ve gia súc (*Boophilus microplus)* chủng Parkhurst, kháng SP

Dung môi: dimetyl sulphoxit

10 mg thành phần hoạt tính được hòa tan trong 0,5 ml dimetyl sulphoxit. Để tạo ra chế phẩm thích hợp, dung dịch thành phần hoạt tính được pha loãng bằng nước đến nồng độ mong muốn trong từng trường hợp.

Chế phẩm chứa thành phần hoạt tính này được đưa bằng pipet vào các ống. 8-10 ve gia súc cái trưởng thành căng máu (*Boophilus microplus*) được chuyển vào ống tiếp theo có lỗ. Ống này được ngâm trong chế phẩm thành phần hoạt tính, và tất cả các ve đều hoàn toàn ướt. Sau khi chất lỏng đã chảy đi, các ve được chuyển trên đĩa lọc vào các đĩa nhựa và giữ trong buồng có điều chỉnh khí hậu.

Hiệu lực được đánh giá sau 7 ngày bằng khả năng đẻ trứng có thể nở thành con. Các trứng mà rõ ràng không thể nở thành con được bảo quản trong tủ có điều chỉnh khí hậu đến khi ấu trùng nở ra sau khoảng 42 ngày. Hiệu lực 100% nghĩa là khong có ve nào đẻ trứng nở được thành con; 0% nghĩa là tất cả các trứng đều nở được thành con.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 100% ở tỷ lệ áp dụng 100 ppm: I-T3-1, I-T3-3, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-24, I-T3-28, I-T3-39, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-44, I-T3-48, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-61, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-71, I-T3-72, I-T3-81, I-T3-86, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-95, I-T3-96, I-T3-97, I-T3-98, I-T3-100, I-T3-101, I-T3-102, I-T3-103, I-T3-104, I-

T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-109, I-T3-110, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-114, I-T3-115, I-T3-116, I-T3-117, I-T3-118, I-T3-119, I-T3-120, I-T3-123, I-T3-124, I-T3-125, I-T3-130, I-T3-131, I-T3-133, I-T3-148, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-162, I-T3-163, I-T3-165, I-T3-175, I-T3-176, I-T4-3, I-T4-4, I-T22-1, I-T22-2, I-T22-4, I-T22-5, I-T22-6, I-T22-7, I-T23-1

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 98% ở tỷ lệ áp dụng 100 ppm: I-T3-111

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 90% ở tỷ lệ áp dụng 100 ppm: I-T3-99

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 80% ở tỷ lệ áp dụng 100 ppm: I-T3-27, I-T3-80

Ctenocephalides felis – thử nghiệm đường uống

Dung môi: dimetyl sulphoxit

Để tạo ra chế phẩm chứa thành phần hoạt tính thích hợp, 10 mg thành phần hoạt tính được trộn với 0,5 ml dimetyl sulphoxit. Việc pha loãng bằng máu gia súc được xitrat hóa tạo ra nồng độ mong muốn.

Khoảng 20 bọ chét mèo trưởng thành không được cho ăn (*Ctenocephalides felis*) được đặt vào khoang được bịt ở đỉnh và đáy bằng gạc. Một ống kim loại hình trụ đáy bịt bằng parafilm được đặt lên khoang này. Ống hình trụ này chứa máu/chế phẩm thành phần hoạt tính, mà có thể được bọ chét hút qua màng parafilm.

Sau 2 ngày, tỷ lệ tiêu diệt tính theo % được xác định. 100% nghĩa là tất cả bọ chét bị tiêu diệt; 0% nghĩa là không bọ chét nào bị tiêu diệt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 100% ở tỷ lệ áp dụng 100 ppm: I-T3-1, I-T3-2, I-T3-3, I-T3-4, I-T3-5, I-T3-7, I-T3-8, I-T3-9, I-T3-10, I-T3-12, I-T3-18, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-23, I-T3-24, I-T3-25, I-T3-26, I-T3-27, I-T3-28, I-T3-29, I-T3-30, I-T3-31, I-T3-32, I-T3-33, I-T3-34, I-T3-35, I-T3-38, I-T3-39, I-T3-40, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-44, I-T3-46, I-T3-47, I-T3-48, I-T3-49, I-T3-50, I-T3-51, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-58, I-T3-59, I-T3-61, I-T3-62, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-65, I-T3-66, I-T3-67, I-T3-68, I-T3-69, I-T3-71, I-T3-72, I-T3-73, I-T3-76, I-T3-77, I-T3-78, I-T3-80, I-T3-81, I-T3-84, I-T3-85, I-

T3-86, I-T3-87, I-T3-88, I-T3-89, I-T3-90, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-93, I-T3-94, I-T3-95, I-T3-96, I-T3-97, I-T3-98, I-T3-99, I-T3-100, I-T3-101, I-T3-102, I-T3-103, I-T3-104, I-T3-105, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-109, I-T3-110, I-T3-111, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-114, I-T3-115, I-T3-116, I-T3-117, I-T3-118, I-T3-119, I-T3-120, I-T3-123, I-T3-124, I-T3-125, I-T3-127, I-T3-128, I-T3-129, I-T3-130, I-T3-131, I-T3-132, I-T3-133, I-T3-135, I-T3-136, I-T3-137, I-T3-139, I-T3-140, I-T3-141, I-T3-143, I-T3-145, I-T3-146, I-T3-148, I-T3-149, I-T3-150, I-T3-151, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-161, I-T3-162, I-T3-163, I-T3-165, I-T3-168, I-T3-175, I-T3-176, I-T3-189, I-T4-1, I-T4-2, I-T4-3, I-T4-4, I-T22-1, I-T22-2, I-T22-3, I-T22-4, I-T22-5, I-T22-7, I-T23-1, I-T23-2, I-T46-2

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 95% ở tỷ lệ áp dụng 100 ppm: I-T3-11, I-T3-17, I-T3-19, I-T3-41, I-T3-45, I-T3-70, I-T3-79, I-T3-82, I-T3-83, I-T22-6

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 90% ở tỷ lệ áp dụng 100 ppm: I-T3-15, I-T3-37, I-T3-60, I-T3-126, I-T3-144

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 80% ở tỷ lệ áp dụng 100 ppm: I-T3-13, I-T3-16, I-T3-36

Thủ nghiệm Lucilia cuprina

Dung môi: dimetyl sulphoxit

Để tạo ra chế phẩm chứa thành phần hoạt tính thích hợp, 10 mg thành phần hoạt tính được trộn với 0,5 ml dimetyl sulphoxit, và thể đặc này được pha loãng bằng nước đến nồng độ mong muốn.

Khoảng 20 ấu trùng L1 của nhặng cừu Úc (*Lucilia cuprina*) được chuyển vào bình thử nghiệm chứa thịt ngựa nghiền và chế phẩm chứa thành phần hoạt tính ở nồng độ mong muốn.

Sau 2 ngày, tỷ lệ tiêu diệt tính theo % được xác định. 100% nghĩa là tất cả ấu trùng đã bị tiêu diệt; 0% nghĩa là không ấu trùng nào bị tiêu diệt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 100% ở tỷ lệ áp dụng 100 ppm: I-T3-1, I-T3-2, I-T3-3, I-T3-4, I-T3-5, I-T3-6, I-T3-7, I-T3-8, I-T3-9, I-T3-10, I-T3-15, I-T3-17, I-T3-18, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-23, I-T3-

24, I-T3-25, I-T3-26, I-T3-27, I-T3-28, I-T3-29, I-T3-30, I-T3-31, I-T3-32, I-T3-33, I-T3-34, I-T3-35, I-T3-36, I-T3-37, I-T3-38, I-T3-39, I-T3-40, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-44, I-T3-45, I-T3-46, I-T3-47, I-T3-48, I-T3-49, I-T3-50, I-T3-51, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-58, I-T3-59, I-T3-61, I-T3-62, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-65, I-T3-66, I-T3-67, I-T3-68, I-T3-70, I-T3-71, I-T3-72, I-T3-73, I-T3-77, I-T3-78, I-T3-80, I-T3-81, I-T3-82, I-T3-83, I-T3-84, I-T3-85, I-T3-86, I-T3-87, I-T3-88, I-T3-89, I-T3-90, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-93, I-T3-94, I-T3-96, I-T3-97, I-T3-98, I-T3-99, I-T3-100, I-T3-101, I-T3-102, I-T3-103, I-T3-104, I-T3-105, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-109, I-T3-110, I-T3-111, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-114, I-T3-115, I-T3-116, I-T3-117, I-T3-118, I-T3-119, I-T3-120, I-T3-123, I-T3-124, I-T3-125, I-T3-130, I-T3-131, I-T3-133, I-T3-136, I-T3-139, I-T3-140, I-T3-141, I-T3-143, I-T3-144, I-T3-145, I-T3-148, I-T3-149, I-T3-150, I-T3-151, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-161, I-T3-162, I-T3-163, I-T3-165, I-T3-168, I-T3-175, I-T3-176, I-T3-189, I-T4-1, I-T4-2, I-T4-3, I-T4-4, I-T22-1, I-T22-2, I-T22-3, I-T22-5, I-T22-6, I-T22-7, I-T23-1, I-T23-2, I-T46-2

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 95% ở tỷ lệ áp dụng 100 ppm: I-T3-69

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 90% ở tỷ lệ áp dụng 100 ppm: I-T3-41, I-T3-60, I-T3-74, I-T3-76, I-T3-127, I-T3-146

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 80% ở tỷ lệ áp dụng 100 ppm: I-T3-12, I-T3-75, I-T3-79, I-T3-121, I-T3-137

Thử nghiệm Musca domestica

Dung môi: dimetyl sulphoxit

Để tạo ra chế phẩm chứa thành phần hoạt tính thích hợp, 10 mg thành phần hoạt tính được trộn với 0,5 ml dimetyl sulphoxit, và thể đặc này được pha loãng bằng nước đến nồng độ mong muốn.

Các bình chứa bọt biển được xử lý bằng dung dịch đường và chế phẩm chứa thành phần hoạt tính ở nồng độ mong muốn được đưa vào 10 ruồi nhà trưởng thành *(Musca domestica)*.

Sau 2 ngày, tỷ lệ tiêu diệt tính theo % được xác định. 100% nghĩa là tất cả ruồi đã bị tiêu diệt; 0% nghĩa là không ruồi nào bị tiêu diệt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 100% ở tỷ lệ áp dụng 100 ppm: I-T3-1, I-T3-2, I-T3-3, I-T3-4, I-T3-5, I-T3-8, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-23, I-T3-24, I-T3-25, I-T3-26, I-T3-27, I-T3-29, I-T3-31, I-T3-34, I-T3-38, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-46, I-T3-48, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-58, I-T3-61, I-T3-62, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-65, I-T3-71, I-T3-72, I-T3-73, I-T3-77, I-T3-80, I-T3-84, I-T3-85, I-T3-86, I-T3-87, I-T3-89, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-93, I-T3-94, I-T3-96, I-T3-97, I-T3-100, I-T3-101, I-T3-102, I-T3-103, I-T3-104, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-109, I-T3-110, I-T3-111, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-114, I-T3-115, I-T3-116, I-T3-117, I-T3-118, I-T3-119, I-T3-120, I-T3-123, I-T3-124, I-T3-125, I-T3-130, I-T3-131, I-T3-133, I-T3-136, I-T3-137, I-T3-141, I-T3-143, I-T3-144, I-T3-148, I-T3-149, I-T3-150, I-T3-151, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-161, I-T3-162, I-T3-163, I-T3-165, I-T3-175, I-T3-176, I-T3-189, I-T4-2, I-T22-1, I-T22-2, I-T22-3, I-T22-5, I-T22-7, I-T23-1, I-T23-2

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 95% ở tỷ lệ áp dụng 100 ppm: I-T3-51

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 90% ở tỷ lệ áp dụng 100 ppm: I-T3-30, I-T3-67, I-T3-76, I-T3-81, I-T3-90, I-T3-98, I-T3-99, I-T3-139, I-T3-145, I-T22-6

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 80% ở tỷ lệ áp dụng 100 ppm: I-T3-7, I-T3-66, I-T3-68, I-T3-79, I-T3-88, I-T3-105, I-T3-121, I-T3-129

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 80% ở tỷ lệ áp dụng 20 ppm: I-T3-28

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 80% ở tỷ lệ áp dụng 4 ppm: I-T3-35

Thử nghiệm Meloidogyne incognita

Dung môi: 125,0 phần trọng lượng axeton

Để tạo ra chế phẩm chứa thành phần hoạt tính thích hợp, 1 phần trọng lượng thành phần hoạt tính được trộn với lượng dung môi đã đưa ra và thể đặc này được pha loãng bằng nước đến nồng độ mong muốn.

Các bình được đổ đầy cát, dung dịch chứa thành phần hoạt tính, huyền phù trứng/ấu trùng giun tròn sần rễ Miền Nam (*Meloidogyne incognita*) và hạt rau diếp. Các hạt ra diếp nảy mầm và cây phát triển. Nốt sần phát triển trên rễ.

Sau 14 ngày, hiệu lực diệt giun tròn tính theo % được xác định bằng khả năng tạo nốt sần. 100% nghĩa là không phát hiện nốt sần; 0% nghĩa là số nốt sần trên cây được xử lý tương ứng với đối chứng không xử lý.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 90% ở tỷ lệ áp dụng 20 ppm: I-T3-27, I-T3-28, I-T3-184, I-T3-185.

Myzus persicae – thử nghiệm phun

Dung môi: 78 phần trọng lượng axeton và 1,5 phần trọng lượng dimetylformamit

Chất nhũ hóa: alkylaryl polyglycol ete

Để tạo ra chế phẩm chứa thành phần hoạt tính thích hợp, 1 phần trọng lượng thành phần hoạt tính được hòa tan bằng số phần trọng lượng đã định của dung môi và bù bằng nước chứa chất nhũ hóa với nồng độ 1000 ppm đến khi đạt nồng độ mong muốn. Để tạo ra các nồng độ thử nghiệm khác, chế phẩm này được pha loãng bằng nước chứa chất nhũ hóa.

Các tấm tròn lá bắp cải Trung Quốc (*Brassica pekinensis*) bị nhiễm rệp đào xanh ở tất cả các giai đoạn (*Myzus persicae*) được phun chế phẩm chứa thành phần hoạt tính ở nồng độ mong muốn.

Sau 6 ngày, hiệu lực tính theo % được xác định. 100% nghĩa là tất cả rệp đã bị tiêu diệt; 0% nghĩa là không có rệp nào bị tiêu diệt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 100% ở tỷ lệ áp dụng 500 g/ha: I-T3-7, I-T3-20, I-T3-43, I-T3-44, I-T3-46, I-T3-92, I-T3-100, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-110, I-T3-122, I-T3-185, I-T3-187

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 90% ở tỷ lệ áp dụng 500 g/ha: I-T3-8, I-T3-21, I-T3-29, I-T3-30, I-T3-42, I-T3-91,

I-T3-97, I-T3-103, I-T3-105, I-T3-109, I-T3-114, I-T3-117, I-T3-119, I-T3-120, I-T3-186

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 100% ở tỷ lệ áp dụng 100 g/ha: I-T3-1, I-T3-3, I-T3-27, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-77, I-T3-88, I-T3-99, I-T3-101, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-115, I-T3-116, I-T3-118, I-T3-120, I-T3-123, I-T3-124, I-T3-125, I-T3-127, I-T3-128, I-T3-129, I-T3-130, I-T3-162, I-T3-165, I-T3-170, I-T3-174, I-T3-175, I-T3-176, I-T3-179, I-T3-184, I-T3-189, I-T22-1, I-T22-2, I-T22-5, I-T22-7

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 90% ở tỷ lệ áp dụng 100 g/ha: I-T3-28, I-T3-38, I-T3-39, I-T3-53, I-T3-64, I-T3-72, I-T3-76, I-T3-80, I-T3-81, I-T3-85, I-T3-87, I-T3-95, I-T3-96, I-T3-98, I-T3-131, I-T3-132, I-T3-145, I-T3-160, I-T3-164, I-T3-163, I-T4-3

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 90% ở tỷ lệ áp dụng 20 g/ha: I-T3-182, I-T4-2

Phaedon cochleariae – Thử nghiệm phun

Dung môi: 78,.0 phần trọng lượng axeton và 1,5 phần trọng lượng dimetylformamit

Chất nhũ hóa: alkylaryl polyglycol ete

Để tạo ra chế phẩm chứa thành phần hoạt tính thích hợp, 1 phần trọng lượng thành phần hoạt tính được hòa tan trong số phần trọng lượng đã định của dung môi và bù bằng nước chứa chất nhũ hóa với nồng độ 1000 ppm đến khi đạt nồng độ mong muốn. Để tạo ra các nồng độ thử nghiệm khác, chế phẩm này được pha loãng bằng nước chứa chất nhũ hóa.

Các tấm tròn lá bắp cải Trung Quốc (*Brassica pekinensis*) được phun chế phẩm chứa thành phần hoạt tính ở nồng độ mong muốn và, sau khi làm khô, được đưa vào ấu trùng bọ cải (*Phaedon cochleariae*).

Sau 7 ngày, hiệu lực tính theo % được xác định. 100% nghĩa là tất cả ấu trùng bọ đã bị tiêu diệt; 0% nghĩa là không ấu trùng bọ nào bị tiêu diệt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 100% ở tỷ lệ áp dụng 500 g/ha: I-T3-7, I-T3-8, I-T3-9, I-T3-10, I-T3-12, I-T3-15, I-

T3-17, I-T3-18, I-T3-19, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-22, I-T3-23, I-T3-24, I-T3-25, I-T3-26, I-T3-29, I-T3-30, I-T3-31, I-T3-34, I-T3-35, I-T3-36, I-T3-37, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-44, I-T3-45, I-T3-46, I-T3-47, I-T3-65, I-T3-66, I-T3-67, I-T3-68, I-T3-69, I-T3-70, I-T3-73, I-T3-74, I-T3-75, I-T3-76, I-T3-77, I-T3-78, I-T3-79, I-T3-89, I-T3-90, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-96, I-T3-97, I-T3-98, I-T3-100, I-T3-101, I-T3-102, I-T3-103, I-T3-104, I-T3-105, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-109, I-T3-110, I-T3-111, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-114, I-T3-115, I-T3-116, I-T3-117, I-T3-118, I-T3-119, I-T3-120, I-T3-126, I-T3-184, I-T3-185, I-T3-186, I-T3-187, I-T3-188, I-T23-1, I-T23-2

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 100% ở tỷ lệ áp dụng 100 g/ha: I-T2-1, I-T2-2, I-T3-1, I-T3-2, I-T3-3, I-T3-4, I-T3-5, I-T3-6, I-T3-27, I-T3-28, I-T3-38, I-T3-39, I-T3-40, I-T3-41, I-T3-48, I-T3-49, I-T3-50, I-T3-51, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-58, I-T3-59, I-T3-61, I-T3-62, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-71, I-T3-72, I-T3-80, I-T3-81, I-T3-82, I-T3-83, I-T3-84, I-T3-85, I-T3-86, I-T3-87, I-T3-88, I-T3-93, I-T3-94, I-T3-95, I-T3-99, I-T3-123, I-T3-124, I-T3-125, I-T3-127, I-T3-128, I-T3-129, I-T3-130, I-T3-131, I-T3-132, I-T3-133, I-T3-136, I-T3-137, I-T3-139, I-T3-140, I-T3-141, I-T3-143, I-T3-144, I-T3-145, I-T3-148, I-T3-149, I-T3-151, I-T3-152, I-T3-153, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-161, I-T3-162, I-T3-163, I-T3-164, I-T3-165, I-T3-168, I-T3-169, I-T3-170, I-T3-171, I-T3-172, I-T3-174, I-T3-175, I-T3-176, I-T3-177, I-T3-178, I-T3-179, I-T3-180, I-T3-181, I-T3-182, I-T3-183, I-T3-189, I-T3-190, I-T3-191, I-T3-192, I-T3-195, I-T3-197, I-T3-198, I-T3-220, I-T3-221, I-T3-222, I-T3-223, I-T4-1, I-T4-2, I-T4-3, I-T4-4, I-T22-1, I-T22-2, I-T22-3, I-T22-4, I-T22-5, I-T22-6, I-T22-7, I-T46-2, I-T46-3, I-T46-4, I-T46-5, I-T46-6

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 83% ở tỷ lệ áp dụng 100 g/ha: I-T3-138

Spodoptera frugiperda – thử nghiệm phun

Dung môi: 78,0 phần trọng lượng axeton và 1,5 phần trọng lượng dimetylformamit

Chất nhũ hóa: alkylaryl polyglycol ete

Để tạo ra chế phẩm chứa thành phần hoạt tính thích hợp, 1 phần trọng lượng thành phần hoạt tính được hòa tan trong số phần trọng lượng đã định của dung môi và

bù bằng nước chứa chất nhũ hóa với nồng độ 1000 ppm đến khi đạt nồng độ mong muốn. Để tạo ra các nồng độ thử nghiệm khác, chế phẩm này được pha loãng bằng nước chứa chất nhũ hóa.

Các tấm tròn lá ngô (*Zea mays*) được phun chế phẩm chứa thành phần hoạt tính ở nồng độ mong muốn và, sau khi làm khô, được đưa vào các sâu xanh (*Spodoptera frugiperda*).

Sau 7 ngày, hiệu lực tính theo % được xác định. 100% nghĩa là tất cả các sâu đã bị tiêu diệt; 0% nghĩa là không sâu nào bị tiêu diệt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 100% ở tỷ lệ áp dụng 500 g/ha: I-T3-7, I-T3-8, I-T3-9, I-T3-10, I-T3-12, I-T3-17, I-T3-18, I-T3-19, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-22, I-T3-23, I-T3-24, I-T3-25, I-T3-26, I-T3-29, I-T3-30, I-T3-31, I-T3-34, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-44, I-T3-45, I-T3-46, I-T3-47, I-T3-65, I-T3-66, I-T3-67, I-T3-68, I-T3-69, I-T3-70, I-T3-73, I-T3-74, I-T3-75, I-T3-76, I-T3-77, I-T3-78, I-T3-79, I-T3-89, I-T3-90, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-96, I-T3-97, I-T3-98, I-T3-100, I-T3-102, I-T3-103, I-T3-104, I-T3-105, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-109, I-T3-110, I-T3-111, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-114, I-T3-115, I-T3-116, I-T3-117, I-T3-118, I-T3-119, I-T3-120, I-T3-126, I-T3-184, I-T3-185, I-T3-186, I-T3-187, I-T23-1, I-T23-2

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 83% ở tỷ lệ áp dụng 500 g/ha: I-T3-101

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 100% ở tỷ lệ áp dụng 100 g/ha: I-T2-2, I-T3-1, I-T3-2, I-T3-3, I-T3-4, I-T3-27, I-T3-28, I-T3-38, I-T3-39, I-T3-40, I-T3-41, I-T3-48, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-58, I-T3-61, I-T3-62, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-71, I-T3-72, I-T3-80, I-T3-81, I-T3-82, I-T3-83, I-T3-84, I-T3-85, I-T3-86, I-T3-87, I-T3-88, I-T3-93, I-T3-94, I-T3-95, I-T3-99, I-T3-123, I-T3-124, I-T3-125, I-T3-130, I-T3-131, I-T3-133, I-T3-136, I-T3-137, I-T3-138, I-T3-139, I-T3-140, I-T3-141, I-T3-143, I-T3-145, I-T3-148, I-T3-151, I-T3-152, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-161, I-T3-162, I-T3-163, I-T3-164, I-T3-165, I-T3-170, I-T3-174, I-T3-175, I-T3-176, I-T3-189, I-T3-191, I-T3-192, I-T3-197, I-T3-198, I-T4-1, I-T4-2, I-T4-3, I-T4-4, I-T22-1, I-T22-2, I-T22-3, I-T22-5, I-T22-7, I-T46-2, I-T46-3, I-T46-4, I-T46-5, I-T46-6

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 83% ở tỷ lệ áp dụng 100 g/ha: I-T3-35, I-T3-50, I-T3-169, I-T3-177

Tetranychus urticae – thử nghiệm phun, kháng OP

Dung môi: 78,0 phần trọng lượng axeton và 1,5 phần trọng lượng dimetylformamit

Chất nhũ hóa: alkylaryl polyglycol ete

Để tạo ra chế phẩm chứa thành phần hoạt tính thích hợp, 1 phần trọng lượng thành phần hoạt tính được hòa tan trong số phần trọng lượng dung môi đã định và bù bằng nước chứa chất nhũ hóa với nồng độ 1000 ppm đến khi đạt nồng độ mong muốn. Để tạo ra các nồng độ thử nghiệm khác, chế phẩm này được pha loãng bằng nước chứa chất nhũ hóa.

Các tấm tròn lá đậu (*Phaseolus vulgaris*) nhiễm nhện đỏ nhà kính ở tất cả các giai đoạn (*Tetranychus urticae*) được phun chế phẩm chứa thành phần hoạt tính ở nồng độ mong muốn.

Sau 6 ngày, hiệu lực tính theo % được xác định. 100% nghĩa là tất cả nhện đã bị tiêu diệt; 0% nghĩa là không nhện nào bị tiêu diệt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 100% ở tỷ lệ áp dụng 500 g/ha: I-T3-7, I-T3-8, I-T3-9, I-T3-10, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-22, I-T3-23, I-T3-24, I-T3-26, I-T3-29, I-T3-30, I-T3-31, I-T3-34, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-44, I-T3-45, I-T3-46, I-T3-47, I-T3-69, I-T3-75, I-T3-76, I-T3-77, I-T3-78, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-96, I-T3-97, I-T3-98, I-T3-100, I-T3-101, I-T3-103, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-109, I-T3-110, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-114, I-T3-115, I-T3-119, I-T3-120, I-T3-184, I-T3-185, I-T3-186, I-T3-187, I-T23-1, I-T23-2

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 90% ở tỷ lệ áp dụng 500 g/ha: I-T3-25, I-T3-65, I-T3-70, I-T3-89, I-T3-90, I-T3-102, I-T3-104, I-T3-105, I-T3-116, I-T3-117, I-T3-118

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 100% ở tỷ lệ áp dụng 100 g/ha: I-T3-1, I-T3-2, I-T3-3, I-T3-4, I-T3-27, I-T3-28, I-T3-38, I-T3-39, I-T3-41, I-T3-51, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-58, I-T3-61, I-T3-62, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-72, I-T3-73, I-T3-80, I-T3-81, I-T3-82, I-T3-

83, I-T3-84, I-T3-85, I-T3-86, I-T3-87, I-T3-88, I-T3-93, I-T3-94, I-T3-95, I-T3-99, I-T3-124, I-T3-125, I-T3-127, I-T3-129, I-T3-130, I-T3-131, I-T3-132, I-T3-133, I-T3-139, I-T3-145, I-T3-146, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-161, I-T3-162, I-T3-163, I-T3-164, I-T3-165, I-T3-168, I-T3-169, I-T3-170, I-T3-174, I-T3-175, I-T3-176, I-T3-177, I-T3-178, I-T3-179, I-T3-180, I-T3-181, I-T3-182, I-T3-183, I-T3-189, I-T3-190, I-T3-192, I-T3-197, I-T3-221, I-T3-222, I-T3-223, I-T4-1, I-T4-2, I-T4-3, I-T4-4, I-T22-4, I-T22-5, I-T22-7, I-T46-4, I-T46-5, I-T46-6

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 90% ở tỷ lệ áp dụng 100 g/ha: I-T3-50, I-T3-52, I-T3-71, I-T3-74, I-T3-111, I-T3-123, I-T3-137, I-T3-138, I-T3-147, I-T3-148, I-T3-151, I-T3-172, I-T3-195, I-T22-1, I-T22-2, I-T22-3

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 100% ở tỷ lệ áp dụng 20 g/ha: I-T3-49

Thử nghiệm Anopheles (xử lý bề mặt ANPHGB)

Dung môi: axeton + 2000 ppm este metyl dầu hạt cải (rapeseed oil metyl ester - RME)

Để tạo ra chế phẩm chứa thành phần hoạt tính thích hợp, thành phần hoạt tính được hòa tan trong dung môi (2 mg/ml). Chế phẩm chứa thành phần hoạt tính được đưa bằng pipet lên gạch men và, sau khi chế phẩm này đã khô, muỗi trưởng thành thuộc loài Anopheles gambiae chủng RSPH (homozygot kdr) được đưa lên gạch đã xử lý. Thời gian phơi nhiễm là 30 phút.

24 giờ sau khi cho tiếp xúc với bề mặt đã xử lý, tỷ lệ chết tính theo % được xác định. 100% nghĩa là tất cả muỗi đã bị tiêu diệt; 0% nghĩa là không muỗi nào bị tiêu diệt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 90-100% ở tỷ lệ áp dụng 100 mg/m^2: I-T3-20, I-T3-24, I-T3-27, I-T3-28, I-T3-43, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-61, I-T3-100, I-T3-102, I-T3-112, I-T3-123, I-T3-130, I-T3-133, I-T3-134, I-T3-136, I-T3-145, I-T3-148, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-162, I-T3-173, I-T3-189, I-T22-1

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 90-100% ở tỷ lệ áp dụng 20 mg/m^2: I-T3-23, I-T3-24, I-T3-26, I-T3-27, I-T3-28, I-

T3-43, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-57, I-T3-58, I-T3-61, I-T3-87, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-100, I-T3-102, I-T3-106, I-T3-112, I-T3-116, I-T3-130; I-T3-133, I-T3-134, I-T3-136, I-T3-137, I-T3-145, I-T3-148, I-T3-155, I-T3-159, I-T3-160, I-T3-162, I-T3-189, I-T22-2

Thủ nghiệm Anopheles (xử lý bề mặt ANPHFU)

Dung môi: axeton + 2000 ppm este metyl dầu hạt cải (RME)

Để tạo ra chế phẩm chứa thành phần hoạt tính thích hợp, thành phần hoạt tính được hòa tan trong dung môi (2 mg/ml). Chế phẩm chứa thành phần hoạt tính được đưa bằng pipet lên gạch men và, sau khi chế phẩm này đã khô, muỗi trưởng thành thuộc loài Anopheles funestus chủng FUMOZ-R (Hunt et al., Med Vet Entomol. 2005 Sep; 19(3):271-5) được đặt lên gạch đã xử lý. Thời gian phơi nhiễm là 30 phút.

24 giờ sau khi tiếp xúc với bề mặt được xử lý, tỷ lệ chết theo % được xác định. 100% nghĩa là tất cả muỗi bị tiêu diệt; 0% nghĩa là không muỗi nào bị tiêu diệt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 90-100% ở tỷ lệ áp dụng 100 mg/m^2: I-T3-24, I-T3-25, I-T3-38, I-T3-43, I-T3-46, I-T3-54, I-T3-56, I-T3-58, I-T3-63, I-T3-86, I-T3-92, I-T3-99, I-T3-100, I-T3-102, I-T3-107, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-115, I-T3-123, I-T3-133, I-T3-134, I-T3-136, I-T3-145, I-T3-148, I-T3-155, I-T3-159, I-T3-160, I-T3-162, I-T3-189, I-T22-1, I-T22-2

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 90-100% ở tỷ lệ áp dụng 20 mg/m^2: I-T3-3, I-T3-24, I-T3-25, I-3-26, I-T3-38, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-46, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-57, I-T3-61, I-T3-63, I-T3-92, I-T3-93, I-T3-99, I-T3-100, I-T3-102, I-T3-107, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-116, I-T3-123, I-T3-134, I-T3-136, I-T3-145, I-T3-148, I-T3-155, I-T3-159, I-T3-160, I-T3-162, I-T3-189, I-T22-1, I-T22-2, I-T23-1, I-T23-2

Thử nghiệm Aedes (xử lý bề mặt AEDSAE)

Dung môi: axeton + 2000 ppm este metyl dầu hạt cải (RME)

Để tạo ra chế phẩm chứa thành phần hoạt tính thích hợp, thành phần hoạt tính được hòa tan trong dung môi (2 mg/ml). Chế phẩm chứa thành phần hoạt tính được đưa bằng pipet lên gạch men và, sau khi chế phẩm này đã khô, muỗi trưởng thành thuộc loài

Aedes aegypti chủng MONHEIM được đưa lên gạch đã xử lý. Thời gian phơi nhiễm là 30 phút.

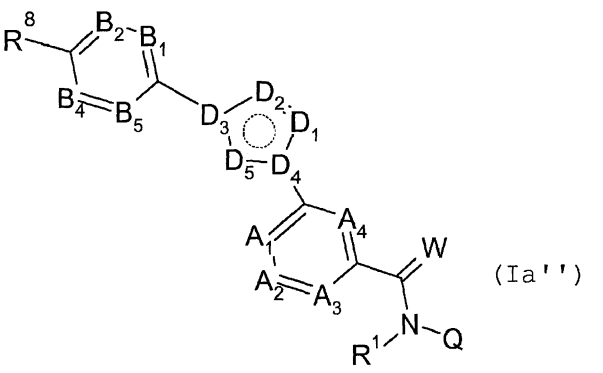
24 giờ sau khi tiếp xúc với gạch đã được xử lý, tỷ lệ chết theo % được xác định. 100% nghĩa là tất cả muỗi đã bị tiêu diệt; 0% nghĩa là không muỗi nào bị tiêu diệt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 90-100% ở tỷ lệ áp dụng 100 mg/m^2: I-T3-1, I-T3-3, I-T3-8, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-23, I-T3-24, I-T3-25, I-T3-27, I-T3-28, I-T3-38, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-46, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-58, I-T3-61, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-86, I-T3-87, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-93, I-T3-96, I-T3-98, I-T3-99, I-T3-100, I-T3-101, I-T3-102, I-T3-103, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-115, I-T3-117, I-T3-118, I-T3-120, I-T3-123, I-T3-130, I-T3-133, I-T3-134, I-T3-136, I-T3-145, I-T3-148, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-162, I-T3-163, I-T3-173, I-T3-189, I-T22-1, I-T22-2, I-T23-1, I-T23-2

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu lực 90-100% ở tỷ lệ áp dụng 20 mg/m^2: I-T3-1, I-T3-3, I-T3-8, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-23, I-T3-24, I-T3-25, I-T3-27, I-T3-28, I-T3-38, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-46, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-58, I-T3-61, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-86, I-T3-87, I-T3-91, I-T3-92, I-T-93, I-T3-95, I-T3-96, I-T3-98, I-T3-99, I-T3-100, I-T3-101, I-T3-102, I-T3-103, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-115, I-T3-116, I-T3-117, I-T3-118, I-T3-123, I-T3-130, I-T3-133, I-T3-134, I-T3-136, I-T3-145, I-T3-148, I-T3-155, I-T3-159, I-T3-160, I-T3-162, I-T3-163, I-T3-173, I-T3-189, I-T22-1, I-T22-2, I-T23-1, I-T23-2

YÊU CẦU BẢO HỘ

1. Hợp chất có công thức (Ia")



(Ia'')

trong đó

D_1 là C-R^{11} hoặc nguyên tử khác loại được chọn từ N và O;

D_2 là C-R^{11} hoặc nguyên tử khác loại được chọn từ N và O;

D_3 là C hoặc N;

D_4 là C hoặc N;

D_5 là C-R^{11} hoặc N;

trong đó không quá một (1) hoặc hai gốc được chọn từ D_1, D_2, D_3, D_4 và D_5 là nguyên tử khác loại;

◌ là hệ thơm; và

R^1 là C_1-C_6-alkyl tùy ý được thế;

các gốc sau đây là như sau:

A_1 là C-H,

A_2 là CR^3 hoặc N,

A_3 là CR^4,

A_4 là C-H,

B_1 là CR^6 hoặc N,

B_2 là C-H,

B_4 là C-H và

B_5 là CR^{10} hoặc N;

R^3, R^4, R^6 và R^{10} mỗi nhóm độc lập là H, halogen, xyano, nitro, C_1-C_6-alkyl, C_3-C_6-xycloalkyl, C_1-C_6-alkoxy, N-C_1-C_6-alkoxyimino-C_1-C_3-alkyl, C_1-C_6-

alkylsulphanyl, C_1-C_6-alkylsulphinyl, C_1-C_6-alkylsulphonyl, *N*-C_1-C_6-alkylamino, *N,N*-di-C_1-C_6-alkylamino hoặc *N*-C_1-C_3-alkoxy-C_1-C_4-alkylamino trong từng trường hợp tùy ý được thế hoặc 1-pyrrolidinyl;

nếu không có gốc nào trong số các gốc A_2 và A_3 là N, R^3 và R^4 cùng với nguyên tử cacbon mà chúng liên kết có thể tạo thành vòng 5 hoặc 6 cạnh chứa 0, 1 hoặc 2 nguyên tử nitơ và/hoặc 0 hoặc 1 nguyên tử oxy và/hoặc 0 hoặc 1 nguyên tử lưu huỳnh, hoặc

nếu không có gốc nào trong số các gốc A_1 và A_2 là N, R^2 và R^3 cùng với nguyên tử cacbon mà chúng liên kết có thể tạo thành vòng 6 cạnh chứa 0, 1 hoặc 2 nguyên tử nitơ;

R^8 là C_1-C_4-alkoxy được thế flo hoặc C_1-C_4-alkyl được thế flo;

R^{11} độc lập là H, halogen, xyano, nitro, amino hoặc C_1-C_6-alkyl, C_1-C_6-alkyloxy, C_1-C_6-alkylcacbonyl, C_1-C_6-alkylsulphanyl, C_1-C_6-alkylsulphinyl, C_1-C_6-alkylsulphonyl tùy ý được thế, tốt hơn là H;

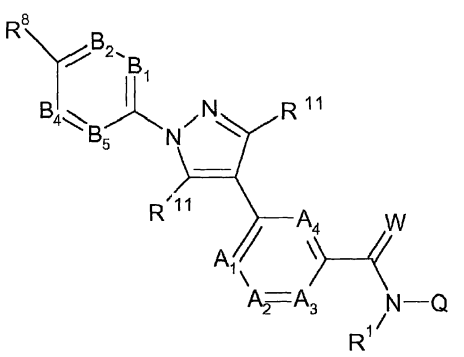
W là O hoặc S;

Q là H, formyl, hydroxyl, amino hoặc C_1-C_6-alkyl, C_2-C_6-alkenyl, C_2-C_6-alkynyl, C_3-C_6-xycloalkyl, C_1-C_5-heteroxycloalkyl, C_1-C_4-alkoxy, C_1-C_6-alkyl-C_3-C_6-xycloalkyl, C_3-C_6-xycloalkyl-C_1-C_6-alkyl, C_6-, C_{10}-C_{14}-aryl, C_1-C_5-heteroaryl, C_6-, C_{10}-, C_{14}-aryl- (C_1-C_3) -alkyl, C_1-C_5-heteroaryl- (C_1-C_3)-alkyl, *N*-C_1-C_4-alkylamino, *N*-C_1-C_4-alkylcacbonylamino, hoặc *N,N*-di-C_1-C_4-alkylamino trong từng trường hợp tùy ý được thế; hoặc là vòng cacbon 6 cạnh không no tùy ý được thế poly-V; hoặc là dị vòng 4, 5 hoặc 6 cạnh không no tùy ý được thế poly-V, trong đó V độc lập là halogen, xyano, nitro, C_1-C_6-alkyl, C_1-C_4-alkenyl, C_1-C_4-alkynyl, C_3-C_6-xycloalkyl, C_1-C_6-alkoxy, *N*-C_1-C_6-alkoxyimino-C_1-C_3-alkyl, C_1-C_6-alkylsulphanyl, C_1-C_6-alkylsulphinyl, C_1-C_6-alkylsulphonyl, hoặc *N,N*-di-(C_1-C_6-alkyl) amino trong từng trường hợp tùy ý được thế;

trong đó, nếu các nhóm R^3, R^4, R^6, R^{10}, R^{11}, Q và V mỗi nhóm được thế độc lập với nhau, các phần tử thế là một (1) phần tử thế hoặc nhiều phần tử thế được chọn từ nhóm gồm amino, hydroxyl, halogen, nitro, xyano, isoxyano, mercapto, isothioxyanato, C_1-C_4-carboxyl, cacbonamit, SF_5, aminosulphonyl, C_1-C_4-alkyl, C_3-C_4-xycloalkyl, C_2-C_4-alkenyl, C_3-C_4-xycloalkenyl, C_2-C_4-alkynyl, *N*-mono-C_1-C_4-alkylamino, *N,N*-di-C_1-C_4-alkylamino, *N*-C_1-C_4-alkanoylamino, C_1-C_4-alkoxy, C_2-C_4-alkenyloxy, C_2-C_4-

alkynyloxy, C_3-C_4-xycloalkoxy, C_3-C_4-xycloalkenyloxy, C_1-C_4-alkoxycacbonyl, C_2-C_4-alkenyloxycacbonyl, C_2-C_4-alkynyloxycacbonyl, C_6-, C_{10}-, C_{14}-aryloxycacbonyl, C_1-C_4-alkanoyl, C_2-C_4-alkenylcacbonyl, C_2-C_4-alkynylcacbonyl, C_6-, C_{10}-, C_{14}-arylcacbonyl,C_1-C_4-alkylsulphanyl, C_3-C_4-xycloalkylsulphanyl, C_1-C_4-alkylthio, C_2-C_4-alkenylthio, C_3-C_4-xycloalkenylthio, C_2-C_4-alkynylthio, C_1-C_4-alkylsulphenyl và C_1-C_4-alkylsulphinyl, bao gồm cả hai chất đồng phân đối ảnh của nhóm C_1-C_4-alkylsulphinyl, C_1-C_4-alkylsulphonyl, N-mono-C_1-C_4-alkylaminosulphonyl, *N,N*-di-C_1-C_4-alkylaminosulphonyl, C_1-C_4-alkylphosphinyl, C_1-C_4-alkylphosphonyl, bao gồm cả hai chất đồng phân đối ảnh của C_1-C_4-alkylphosphinyl và C_1-C_4-alkylphosphonyl, *N*-C_1-C_4-alkylaminocacbonyl, *N,N*-di-C_1-C_4-alkylaminocacbonyl, *N*-C_1-C_4-alkanoylaminocacbonyl, *N*-C_1-C_4-alkanoyl-N-C_1-C_4-alkylaminocacbonyl, C_6, C_{10}, C_{14}-aryl, C_6-, C_{10}-, C_{14}-aryloxy, benzyl, benzyloxy, benzylthio, C_6-, C_{10}-, C_{14}-arylthio, C_6-, C_{10}-, C_{14}-arylamino, benzylamino, heteroxyclyl và trialkylsilyl, các phần tử thế được liên kết thông qua liên kết đôi, như C_1-C_4-alkyliden (ví dụ, metyliden hoặc etyliden), nhóm oxo, nhóm thioxo, nhóm imino và nhóm imino được thế, và các muối, N-oxit và các dạng tautome của hợp chất có công thức (Ia").

2. Hợp chất theo điểm 1, trong đó hợp chất có công thức (Ia") là hợp chất có công thức (I-T3):

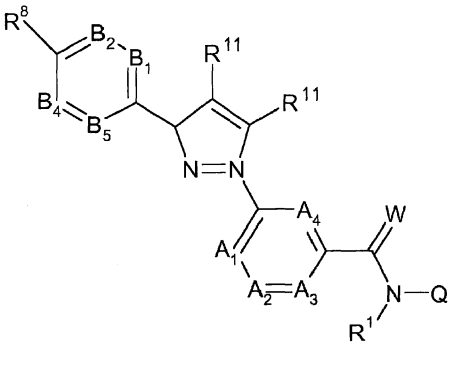


(I-T3)

trong đó

R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, Q và W mỗi nhóm là như được xác định trong điểm 1.

3. Hợp chất theo điểm 1, trong đó hợp chất có công thức (Ia") là hợp chất có công thức (I-T2):

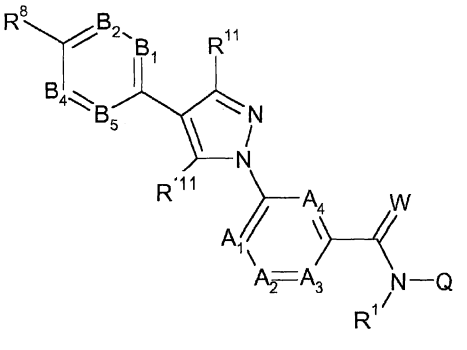


(I-T2)

trong đó

R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, Q và W mỗi nhóm là như được xác định trong điểm 1.

4. Hợp chất theo điểm 1, trong đó hợp chất có công thức (Ia") là hợp chất có công thức (I-T4):

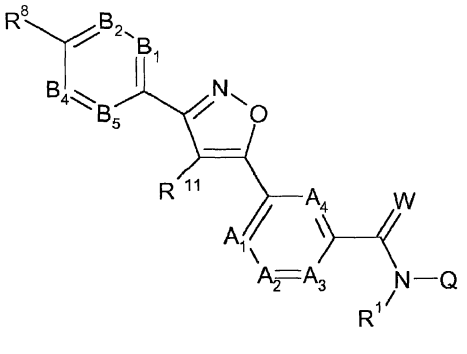


(I-T4)

trong đó

R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, Q và W mỗi nhóm là như được xác định trong điểm 1.

5. Hợp chất theo điểm 1, trong đó hợp chất có công thức (Ia") là hợp chất có công thức (I-T22):

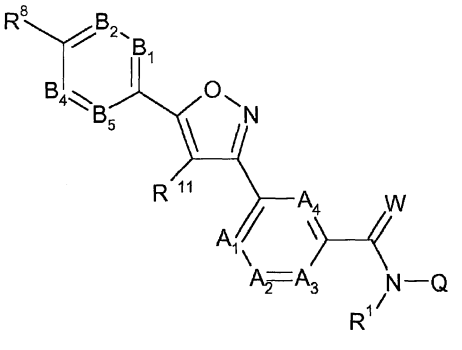


(T-22)

trong đó

R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, Q và W mỗi nhóm là như được xác định trong điểm 1.

6. Hợp chất theo điểm 1, trong đó hợp chất có công thức (Ia") là hợp chất có công thức (I-T23):

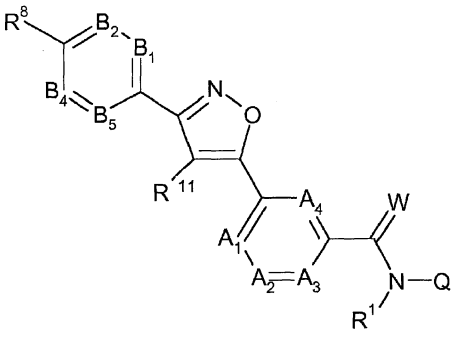


(I-T23)

trong đó

R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, Q và W mỗi nhóm là như được xác định trong điểm 1.

7. Hợp chất theo điểm 1, trong đó hợp chất có công thức (Ia") là hợp chất có công thức (I-T46):



(I-T46)

trong đó

R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, Q và W là như được xác định trong điểm 1.

8. Hợp chất theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 7, trong đó R^{11} độc lập là H và W là O.

9. Hợp chất theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 8, trong đó R^1 là metyl.

10. Hợp chất theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 9, trong đó Q là C_1-C_3-alkyl, xyclopropyl, 1-(xyano)xyclopropyl, 1-(C_1-C_3-alkyl được perflo hóa)xyclopropyl, 1-(C_1-C_4-alkyl)xyclopropyl, 1-(thiocarbamoyl)xyclopropyl, C_1-C_3-alkyl được thế halogen, thietan-3-yl, N-metylpyrazol-3-yl hoặc 2-oxo-2(2,2,2-trifloetylamino)etyl.

11. Chế phẩm diệt côn trùng, khác biệt ở chỗ, chế phẩm này chứa ít nhất một hợp chất có công thức (Ia") theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 10 và chất độn và/hoặc chất hoạt động bề mặt.