



(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)



1-0030959

(51)⁸ C07D 403/12; A01P 1/00; A01P 3/00; (13) B
C07D 495/04; A01P 7/02; A01P 7/04;
A01N 43/54; A01P 5/00

(21) 1-2018-01449

(22) 17/05/2016

(86) PCT/CN2016/082291 17/05/2016

(87) WO 2016/184378 24/11/2016

(30) 201510252832.7 18/05/2015 CN

(45) 25/02/2022 407

(43) 25/07/2018 364A

(73) SHENYANG SINOCHEM AGROCHEMICALS R&D CO., LTD. (CN)

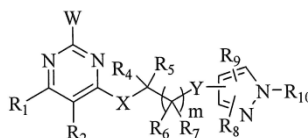
No.8-1 Shenliao Dong Road, Tiexi District Shenyang, Liaoning 110021, China

(72) LIU, Changling (CN); GUAN, Aiyong (CN); WANG, Junfeng (CN); SUN, Xufeng (CN); LI, Zhinian (CN); ZHANG, Jinbo (CN); BAN, Lanfeng (CN); MA, Sen (CN); LAN, Jie (CN); XIA, Xiaoli (CN); YANG, Jinlong (CN).

(74) Công ty Luật TNHH WINCO (WINCO LAW FIRM)

(54) HỢP CHẤT PYRAZOL ĐƯỢC THỂ CHỨA PYRIMIDINYL VÀ PHƯƠNG PHÁP ĐIỀU CHẾ HỢP CHẤT PYRAZOL NÀY

(57) Sáng chế đề cập đến hợp chất pyrazol được thể chứa pyrimidinyl có cấu trúc như được thể hiện trong công thức I:



I

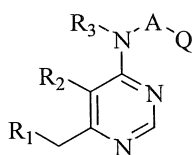
Các định nghĩa của mỗi nhóm thể được thể hiện trong phần mô tả. Hợp chất theo sáng chế có hoạt tính của thuốc diệt nấm, thuốc trừ sâu và thuốc diệt ve bét phổ rộng, và có hiệu quả phòng trừ tốt đối với bệnh mốc sương ở cây dưa chuột, bệnh phấn trắng ở cây lúa mì, bệnh gỉ sắt ở cây ngô, bệnh đạo ôn, bệnh nấm than ở cây dưa chuột và bệnh tương tự. Các hợp chất theo sáng chế cũng có hoạt tính trừ sâu tốt. Ngoài ra, sáng chế còn đề cập đến phương pháp điều chế hợp chất pyrazol này cũng như các chế phẩm chứa hợp chất pyrazol này như chế phẩm diệt nấm, chế phẩm trừ sâu và chế phẩm diệt ve bét.

Lĩnh vực kỹ thuật được đề cập

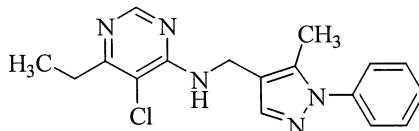
Sáng chế đề cập đến thuốc diệt nấm, thuốc trừ sâu và thuốc diệt ve bét. Cụ thể, sáng chế đề cập đến phương pháp điều chế hợp chất pyrazol được thể chứa pyrimidinyl và chế phẩm chứa hợp chất này.

Tình trạng kỹ thuật của sáng chế

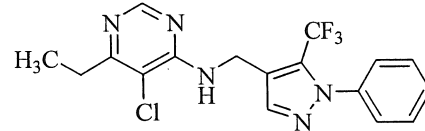
Công bố đơn quốc tế số WO9507278 bộc lộ hợp chất pyrazol được thể chứa pyrimidinyl có công thức chung và các hợp chất cụ thể có công thức CK1 và CK2 được sử dụng làm thuốc diệt nấm, thuốc trừ sâu và thuốc diệt ve bét trong nông nghiệp.



công thức chung

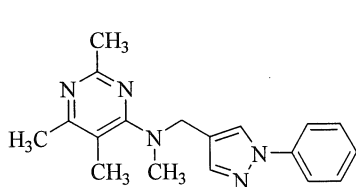


CK1

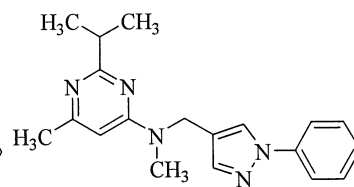


CK2

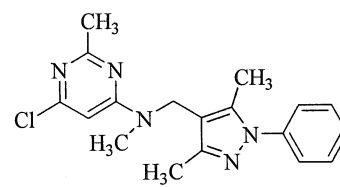
Các hợp chất có công thức CK3, CK4 và CK5 sau đây được tìm thấy trong cơ sở dữ liệu Scifinder mà không được bộc lộ trong tài liệu cụ thể.



CK3



CK4

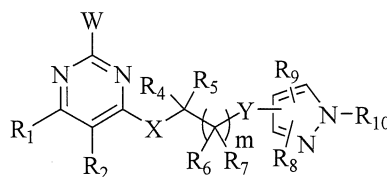


CK5

Tuy nhiên, hợp chất pyrazol được thể chứa pyrimidinyl có công thức chung I theo sáng chế vẫn chưa được thông báo trong các tài liệu đã biết.

Bản chất kỹ thuật của sáng chế

Mục đích của sáng chế là đề xuất hợp chất pyrazol được thể chứa pyrimidinyl có cấu trúc như được thể hiện bằng công thức chung I:



I

trong đó:

R_1 được chọn từ H, halogen, xyano, nitro, amino, carboxyl, C_1 - C_{12} alkyl, halo C_1 - C_{12} alkyl, C_3 - C_{12} xycloalkyl, C_1 - C_{12} alkoxy, halo C_1 - C_{12} alkoxy, C_1 - C_{12} alkylthio, halo C_1 - C_{12} alkylthio, C_1 - C_{12} alkylsulfinyl, C_1 - C_{12} alkylsulfonyl, C_2 - C_{12} alkenyl, halo C_2 - C_{12} alkenyl, C_2 - C_{12} alkynyl, halo C_2 - C_{12} alkynyl, C_3 - C_{12} alkenoxy, halo C_3 - C_{12} alkenoxy, C_3 - C_{12} alkynoxy, halo C_3 - C_{12} alkynoxy, C_1 - C_{12} alkylamino, di(C_1 - C_{12} alkyl)amino, C_1 - C_{12} alkylaminocarbonyl, halo C_1 - C_{12} alkylaminocarbonyl, C_1 - C_{12} alkoxycarbonyl, halo C_1 - C_{12} alkoxycarbonyl, C_1 - C_{12} alkoxy C_1 - C_{12} alkyl hoặc C_1 - C_{12} alkylthio C_1 - C_{12} alkyl;

R_2 được chọn từ H, halogen, xyano, nitro, amino, carboxyl, CHO, C_1 - C_{12} alkyl, halo C_1 - C_{12} alkyl, C_1 - C_{12} alkoxy hoặc halo C_1 - C_{12} alkoxy;

R_1 , R_2 và vòng pyrimidin liên kết của chúng cũng có thể tạo thành vòng có 5 cạnh, vòng có 6 cạnh, vòng có 7 cạnh hoặc vòng có 8 cạnh chứa nguyên tử cacbon, nguyên tử nitơ, nguyên tử oxy hoặc nguyên tử lưu huỳnh;

X được chọn từ NR_3 , O hoặc S;

Y được chọn từ NR_3 , O hoặc S;

R_3 được chọn từ H, OH, CHO, C_1 - C_{12} alkyl, halo C_1 - C_{12} alkyl, C_1 - C_{12} alkoxy, halo C_1 - C_{12} alkoxy, C_3 - C_{12} xycloalkyl, C_1 - C_{12} alkylthio, C_2 - C_{12} alkenylthio, C_2 - C_{12} alkenyl, C_2 - C_{12} alkynyl, halo C_2 - C_{12} alkenyl, halo C_2 - C_{12} alkynyl, C_1 - C_{12} alkoxy C_1 - C_{12} alkyl, halo C_1 - C_{12} alkoxy C_1 - C_{12} alkyl, C_1 - C_{12} alkylthio C_1 - C_{12} alkyl, halo C_1 - C_{12} alkylthio C_1 - C_{12} alkyl, C_1 - C_{12} alkylsulfinyl, halo C_1 - C_{12} alkylsulfinyl, C_1 - C_{12} alkylsulfonyl, halo C_1 - C_{12} alkylsulfonyl, C_1 - C_{12} alkylaminosulfonyl, di(C_1 - C_{12} alkyl)aminosulfonyl, C_1 - C_{12} alkylsulfonylaminocarbonyl, C_1 - C_{12} alkylcarbonylaminosulfonyl, C_3 - C_{12} xycloalkyloxycarbonyl, C_1 - C_{12} alkylcarbonyl, halo C_1 - C_{12} alkylcarbonyl, C_1 - C_{12} alkoxycarbonyl, halo C_1 - C_{12} alkoxycarbonyl, C_1 - C_{12} alkylcarbonyl C_1 - C_{12} alkyl,

C_1 - C_{12} alkoxycarbonyl C_1 - C_{12} alkyl, C_1 - C_{12} alkylaminocarbonyl, di(C_1 - C_{12} alkyl)aminocarbonyl, C_2 - C_{12} alkenoxycarbonyl, C_2 - C_{12} alkynoxycarbonyl, C_1 - C_{12} alkoxy C_1 - C_{12} alkoxycarbonyl, C_1 - C_{12} alkylaminothio, di(C_1 - C_{12} alkyl)aminothio, các nhóm (hetero)arylcabonyl C_1 - C_6 alkyl, (hetero)arylcabonyl, (hetero)aryloxycabonyl, (hetero)aryl C_1 - C_6 alkyloxycabonyl hoặc (hetero)aryl C_1 - C_6 alkyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm sau: halo, nitro, xyano, C_1 - C_6 alkyl, halo C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 alkoxy hoặc halo C_1 - C_6 alkoxy;

R_4 , R_5 có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, halogen, C_1 - C_{12} alkyl, halo C_1 - C_{12} alkyl, C_1 - C_{12} alkoxy hoặc halo C_1 - C_{12} alkoxy; hoặc R_4 , R_5 và nguyên tử cacbon liên kết của chúng cũng có thể tạo thành vòng có từ 3 đến 8 nguyên tử cacbon;

R_6 , R_7 có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, halogen, C_1 - C_{12} alkyl, halo C_1 - C_{12} alkyl, C_1 - C_{12} alkoxy hoặc halo C_1 - C_{12} alkoxy; hoặc R_6 , R_7 và nguyên tử cacbon liên kết của chúng cũng có thể tạo thành vòng có từ 3 đến 8 nguyên tử cacbon;

m là số nguyên được chọn từ 0 đến 5;

R_8 được chọn từ H, xyano, halogen, C_1 - C_{12} alkyl, halo C_1 - C_{12} alkyl, C_1 - C_{12} alkoxycabonyl, halo C_1 - C_{12} alkoxycabonyl, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmetyl, (hetero)arylcabonyl, (hetero)arylmetylcabonyl hoặc (hetero)aryloxycabonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

R_9 được chọn từ H, xyano, halogen, C_1 - C_{12} alkyl, halo C_1 - C_{12} alkyl, C_1 - C_{12} alkoxycabonyl, halo C_1 - C_{12} alkoxycabonyl, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmetyl, (hetero)arylcabonyl, (hetero)arylmetylcabonyl hoặc (hetero)aryloxycabonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

R_{10} được chọn từ C_1 - C_{12} alkyl, C_3 - C_8 xycloalkyl, halo C_1 - C_{12} alkyl, C_1 - C_{12} alkylcabonyl, halo C_1 - C_{12} alkylcabonyl, C_1 - C_{12} alkylsulfonyl, halo C_1 - C_{12} alkylsulfonyl, C_1 - C_{12} alkoxycabonyl, C_1 - C_{12} alkoxy C_1 - C_{12} alkyl, C_1 - C_{12} alkoxycabonyl C_1 - C_{12} alkyl, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmetyl, (hetero)arylcabonyl, (hetero)arylmetylcabonyl hoặc (hetero)aryloxycabonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

R_{11} được chọn từ halogen, OH, amino, xyano, nitro, C_1 - C_{12} alkyl, halo C_1 - C_{12} alkyl,

C₁-C₁₂alkoxy, haloC₁-C₁₂alkoxy, C₃-C₁₂cycloalkyl, C₁-C₁₂alkylamino, haloC₁-C₁₂alkylamino, di(C₁-C₁₂alkyl)amino, halodi(C₁-C₁₂alkyl)amino, C(=O)NR₁₂R₁₃, C₁-C₁₂alkylthio, haloC₁-C₁₂alkylthio, C₂-C₁₂alkenyl, C₂-C₁₂alkynyl, C₂-C₁₂alkenoxy, haloC₂-C₁₂alkenoxy, C₂-C₁₂alkynoxy, haloC₂-C₁₂alkynoxy, C₁-C₁₂alkylsulfonyl, haloC₁-C₁₂alkylsulfonyl, C₁-C₁₂alkylcarbonyl, haloC₁-C₁₂alkylcarbonyl, C₁-C₁₂alkoxycarbonyl, haloC₁-C₁₂alkoxycarbonyl, C₁-C₁₂alkoxyC₁-C₁₂alkyl, haloC₁-C₁₂alkoxyC₁-C₁₂alkyl, C₁-C₁₂alkylthioC₁-C₁₂alkyl, haloC₁-C₁₂alkylthioC₁-C₁₂alkyl, C₁-C₁₂alkoxycarbonylC₁-C₁₂alkyl, haloC₁-C₁₂alkoxycarbonylC₁-C₁₂alkyl, C₁-C₁₂alkylthiocarbonylC₁-C₁₂alkyl, haloC₁-C₁₂alkylthiocarbonylC₁-C₁₂alkyl, C₁-C₁₂alkylcarbonyloxy, haloC₁-C₁₂alkylcarbonyloxy, C₁-C₁₂alkoxycarbonyloxy, haloC₁-C₁₂alkoxycarbonyloxy, C₁-C₁₂alkylsulfonyloxy, haloC₁-C₁₂alkylsulfonyloxy, C₁-C₁₂alkoxyC₁-C₁₂alkoxy hoặc haloC₁-C₁₂alkoxyC₁-C₁₂alkoxy;

R₁₂, R₁₃ có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, C₁-C₁₂alkyl hoặc haloC₁-C₁₂alkyl;

W được chọn từ H, halogen, C₁-C₁₂alkyl, haloC₁-C₁₂alkyl, C₃-C₈cycloalkyl, C₁-C₁₂alkoxy, C₁-C₁₂alkylthio hoặc C₁-C₁₂alkylsulfonyl;

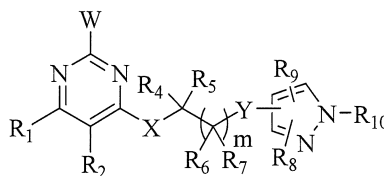
Vị trí của nhóm Y được liên kết với vòng pyrazol là vị trí 3, vị trí 4 hoặc vị trí 5. Khi nhóm Y được liên kết với vị trí 3 của pyrazol, R₈ ở vị trí 4, R₉ ở vị trí 5; Khi nhóm Y được liên kết với vị trí 4 của pyrazol, R₈ ở vị trí 3, R₉ ở vị trí 5; Khi nhóm Y được liên kết với vị trí 5 của pyrazol, R₈ ở vị trí 3, R₉ ở vị trí 4;

Hoặc các muối được tạo ra từ các hợp chất có công thức chung I.

Sáng chế còn đề xuất phương pháp điều chế và chế phẩm chứa hợp chất này. Hợp chất theo sáng chế có thể được sử dụng để điều chế thuốc diệt nấm, thuốc trừ sâu, và thuốc diệt ve bét phòng trừ các loài nấm, vi khuẩn, côn trùng và ve bét gây hại trong lĩnh vực nông nghiệp hoặc lĩnh vực khác.

Mô tả chi tiết sáng chế

Sáng chế đề xuất hợp chất pyrazol được thể chứa pyrimidinyl có cấu trúc như được thể hiện bằng công thức chung I:

**I**

trong đó:

R₁ được chọn từ H, halogen, xyano, nitro, amino, carboxyl, C₁-C₁₂alkyl, haloC₁-C₁₂alkyl, C₃-C₁₂xycloalkyl, C₁-C₁₂alkoxy, haloC₁-C₁₂alkoxy, C₁-C₁₂alkylthio, haloC₁-C₁₂alkylthio, C₁-C₁₂alkylsulfinyl, C₁-C₁₂alkylsulfonyl, C₂-C₁₂alkenyl, haloC₂-C₁₂alkenyl, C₂-C₁₂alkynyl, haloC₂-C₁₂alkynyl, C₃-C₁₂alkenoxy, haloC₃-C₁₂alkenoxy, C₃-C₁₂alkynoxy, haloC₃-C₁₂alkynoxy, C₁-C₁₂alkylamino, di(C₁-C₁₂alkyl)amino, C₁-C₁₂alkylaminocarbonyl, haloC₁-C₁₂alkylaminocarbonyl, C₁-C₁₂alkoxycarbonyl, haloC₁-C₁₂alkoxycarbonyl, C₁-C₁₂alkoxyC₁-C₁₂alkyl hoặc C₁-C₁₂alkylthioC₁-C₁₂alkyl;

R₂ được chọn từ H, halogen, xyano, nitro, amino, carboxyl, CHO, C₁-C₁₂alkyl, haloC₁-C₁₂alkyl, C₁-C₁₂alkoxy hoặc haloC₁-C₁₂alkoxy;

R₁, R₂ và vòng pyrimidin liên kết của chúng cũng có thể tạo thành vòng có 5 cạnh, vòng có 6 cạnh, vòng có 7 cạnh hoặc vòng có 8 cạnh chứa nguyên tử cacbon, nguyên tử nitơ, nguyên tử oxy hoặc nguyên tử lưu huỳnh;

X được chọn từ NR₃, O hoặc S;

Y được chọn từ NR₃, O hoặc S;

R₃ được chọn từ H, OH, CHO, C₁-C₁₂alkyl, haloC₁-C₁₂alkyl, C₁-C₁₂alkoxy, haloC₁-C₁₂alkoxy, C₃-C₁₂xycloalkyl, C₁-C₁₂alkylthio, C₂-C₁₂alkenylthio, C₂-C₁₂alkenyl, C₂-C₁₂alkynyl, haloC₂-C₁₂alkenyl, haloC₂-C₁₂alkynyl, C₁-C₁₂alkoxyC₁-C₁₂alkyl, haloC₁-C₁₂alkoxyC₁-C₁₂alkyl, C₁-C₁₂alkylthioC₁-C₁₂alkyl, haloC₁-C₁₂alkylthioC₁-C₁₂alkyl, C₁-C₁₂alkylsulfinyl, haloC₁-C₁₂alkylsulfinyl, C₁-C₁₂alkylsulfonyl, haloC₁-C₁₂alkylsulfonyl, C₁-C₁₂alkylaminosulfonyl, di(C₁-C₁₂alkyl)aminosulfonyl, C₁-C₁₂alkylsulfonylaminocarbonyl, C₁-C₁₂alkylcarbonylaminosulfonyl, C₃-C₁₂xycloalkyloxycarbonyl, C₁-C₁₂alkylcarbonyl, haloC₁-C₁₂alkylcarbonyl, C₁-C₁₂alkoxycarbonyl, haloC₁-C₁₂alkoxycarbonyl, C₁-C₁₂alkylcarbonylC₁-C₁₂alkyl,

C_1 - C_{12} alkoxycarbonyl C_1 - C_{12} alkyl, C_1 - C_{12} alkylaminocarbonyl, di(C_1 - C_{12} alkyl)aminocarbonyl, C_2 - C_{12} alkenoxycarbonyl, C_2 - C_{12} alkynoxycarbonyl, C_1 - C_{12} alkoxy C_1 - C_{12} alkoxycarbonyl, C_1 - C_{12} alkylaminothio, di(C_1 - C_{12} alkyl)aminothio, các nhóm (hetero)arylcabonyl C_1 - C_6 alkyl, (hetero)arylcabonyl, (hetero)aryloxycabonyl, (hetero)aryl C_1 - C_6 alkyloxycabonyl hoặc (hetero)aryl C_1 - C_6 alkyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm sau: halo, nitro, xyano, C_1 - C_6 alkyl, halo C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 alkoxy hoặc halo C_1 - C_6 alkoxy;

R_4 , R_5 có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, halogen, C_1 - C_{12} alkyl, halo C_1 - C_{12} alkyl, C_1 - C_{12} alkoxy hoặc halo C_1 - C_{12} alkoxy; hoặc R_4 , R_5 và nguyên tử cacbon liên kết của chúng cũng có thể tạo thành vòng có từ 3 đến 8 nguyên tử cacbon;

R_6 , R_7 có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, halogen, C_1 - C_{12} alkyl, halo C_1 - C_{12} alkyl, C_1 - C_{12} alkoxy hoặc halo C_1 - C_{12} alkoxy; hoặc R_6 , R_7 và nguyên tử cacbon liên kết của chúng cũng có thể tạo thành vòng có từ 3 đến 8 nguyên tử cacbon;

m là số nguyên được chọn từ 0 đến 5;

R_8 được chọn từ H, xyano, halogen, C_1 - C_{12} alkyl, halo C_1 - C_{12} alkyl, C_1 - C_{12} alkoxycabonyl, halo C_1 - C_{12} alkoxycabonyl, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmetyl, (hetero)arylcabonyl, (hetero)arylmetylcabonyl hoặc (hetero)aryloxycabonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

R_9 được chọn từ H, xyano, halogen, C_1 - C_{12} alkyl, halo C_1 - C_{12} alkyl, C_1 - C_{12} alkoxycabonyl, halo C_1 - C_{12} alkoxycabonyl, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmetyl, (hetero)arylcabonyl, (hetero)arylmetylcabonyl hoặc (hetero)aryloxycabonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

R_{10} được chọn từ C_1 - C_{12} alkyl, C_3 - C_8 xycloalkyl, halo C_1 - C_{12} alkyl, C_1 - C_{12} alkylcabonyl, halo C_1 - C_{12} alkylcabonyl, C_1 - C_{12} alkylsulfonyl, halo C_1 - C_{12} alkylsulfonyl, C_1 - C_{12} alkoxycabonyl, C_1 - C_{12} alkoxy C_1 - C_{12} alkyl, C_1 - C_{12} alkoxycabonyl C_1 - C_{12} alkyl, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmetyl, (hetero)arylcabonyl, (hetero)arylmetylcabonyl hoặc (hetero)aryloxycabonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

R_{11} được chọn từ halogen, OH, amino, xyano, nitro, C_1 - C_{12} alkyl, halo C_1 - C_{12} alkyl,

C₁-C₁₂alkoxy, haloC₁-C₁₂alkoxy, C₃-C₁₂cycloalkyl, C₁-C₁₂alkylamino, haloC₁-C₁₂alkylamino, di(C₁-C₁₂alkyl)amino, halodi(C₁-C₁₂alkyl)amino, C(=O)NR₁₂R₁₃, C₁-C₁₂alkylthio, haloC₁-C₁₂alkylthio, C₂-C₁₂alkenyl, C₂-C₁₂alkynyl, C₂-C₁₂alkenoxy, haloC₂-C₁₂alkenoxy, C₂-C₁₂alkynoxy, haloC₂-C₁₂alkynoxy, C₁-C₁₂alkylsulfonyl, haloC₁-C₁₂alkylsulfonyl, C₁-C₁₂alkylcarbonyl, haloC₁-C₁₂alkylcarbonyl, C₁-C₁₂alkoxycarbonyl, haloC₁-C₁₂alkoxycarbonyl, C₁-C₁₂alkoxyC₁-C₁₂alkyl, haloC₁-C₁₂alkoxyC₁-C₁₂alkyl, C₁-C₁₂alkylthioC₁-C₁₂alkyl, haloC₁-C₁₂alkylthioC₁-C₁₂alkyl, C₁-C₁₂alkoxycarbonylC₁-C₁₂alkyl, haloC₁-C₁₂alkoxycarbonylC₁-C₁₂alkyl, C₁-C₁₂alkylthiocarbonylC₁-C₁₂alkyl, haloC₁-C₁₂alkylthiocarbonylC₁-C₁₂alkyl, C₁-C₁₂alkylcarbonyloxy, haloC₁-C₁₂alkylcarbonyloxy, C₁-C₁₂alkoxycarbonyloxy, haloC₁-C₁₂alkoxycarbonyloxy, C₁-C₁₂alkylsulfonyloxy, haloC₁-C₁₂alkylsulfonyloxy, C₁-C₁₂alkoxyC₁-C₁₂alkoxy hoặc haloC₁-C₁₂alkoxyC₁-C₁₂alkoxy;

R₁₂, R₁₃ có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, C₁-C₁₂alkyl hoặc haloC₁-C₁₂alkyl;

W được chọn từ H, halogen, C₁-C₁₂alkyl, haloC₁-C₁₂alkyl, C₃-C₈cycloalkyl, C₁-C₁₂alkoxy, C₁-C₁₂alkylthio hoặc C₁-C₁₂alkylsulfonyl;

Vị trí của nhóm Y được liên kết với vòng pyrazol là vị trí 3, vị trí 4 hoặc vị trí 5. Khi nhóm Y được liên kết với vị trí 3 của pyrazol, R₈ ở vị trí 4, R₉ ở vị trí 5; Khi nhóm Y được liên kết với vị trí 4 của pyrazol, R₈ ở vị trí 3, R₉ ở vị trí 5; Khi nhóm Y được liên kết với vị trí 5 của pyrazol, R₈ ở vị trí 3, R₉ ở vị trí 4;

Hoặc các muối được tạo ra từ các hợp chất có công thức chung I.

Trong số các hợp chất pyrazol được thể chứa pyrimidinyl của sáng chế, các hợp chất được ưu tiên bao gồm hợp chất có công thức chung I trong đó:

R₁ được chọn từ H, halogen, xyano, nitro, amino, carboxyl, C₁-C₆alkyl, haloC₁-C₆alkyl, C₃-C₆cycloalkyl, C₁-C₆alkoxy, haloC₁-C₆alkoxy, C₁-C₆alkylthio, C₁-C₆alkylsulfinyl, C₁-C₆alkylsulfonyl, haloC₁-C₆alkylthio, C₂-C₆alkenyl, haloC₂-C₆alkenyl, C₂-C₆alkynyl, haloC₂-C₆alkynyl, C₃-C₆alkenoxy, haloC₃-C₆alkenoxy, C₃-C₆alkynoxy, haloC₃-C₆alkynoxy, C₁-C₆alkylamino, di(C₁-C₆alkyl)amino, C₁-C₆alkylaminocarbonyl, haloC₁-C₆alkylaminocarbonyl, C₁-C₆alkoxycarbonyl,

haloC₁-C₆alkoxycarbonyl, C₁-C₆alkoxyC₁-C₆alkyl hoặc C₁-C₆alkylthioC₁-C₆alkyl;

R₂ được chọn từ H, halogen, xyano, nitro, amino, carboxyl, CHO, C₁-C₆alkyl, haloC₁-C₆alkyl, C₁-C₆alkoxy hoặc haloC₁-C₆alkoxy;

R₁, R₂ và vòng pyrimidin liên kết của chúng cũng có thể tạo thành vòng có 5 cạnh hoặc vòng có 6 cạnh chứa nguyên tử cacbon, nguyên tử nitơ, nguyên tử oxy hoặc nguyên tử lưu huỳnh;

X được chọn từ NR₃, O hoặc S;

Y được chọn từ NR₃, O hoặc S;

R₃ được chọn từ H, OH, CHO, C₁-C₆alkyl, haloC₁-C₆alkyl, C₁-C₆alkoxy, haloC₁-C₆alkoxy, C₃-C₆xycloalkyl, C₁-C₆alkylthio, C₂-C₆alkenylthio, C₂-C₆alkenyl, C₂-C₆alkynyl, haloC₂-C₆alkenyl, haloC₂-C₆alkynyl, C₁-C₆alkoxyC₁-C₆alkyl, haloC₁-C₆alkoxyC₁-C₆alkyl, C₁-C₆alkylthioC₁-C₆alkyl, haloC₁-C₆alkylthioC₁-C₆alkyl, C₁-C₆alkylsulfinyl, haloC₁-C₆alkylsulfinyl, C₁-C₆alkylsulfonyl, haloC₁-C₆alkylsulfonyl, C₁-C₆alkylaminosulfonyl, di(C₁-C₆alkyl)aminosulfonyl, C₁-C₆alkylsulfonylaminocarbonyl, C₁-C₆alkylcarbonylaminosulfonyl, C₃-C₆xycloalkyloxycarbonyl, C₁-C₆alkylcarbonyl, haloC₁-C₆alkylcarbonyl, C₁-C₆alkoxycarbonyl, haloC₁-C₆alkoxycarbonyl, C₁-C₆alkylcarbonylC₁-C₆alkyl, C₁-C₆alkoxycarbonylC₁-C₆alkyl, C₁-C₆alkylaminocarbonyl, di(C₁-C₆alkyl)aminocarbonyl, C₂-C₆alkenoxycarbonyl, C₂-C₆alkynoxycarbonyl, C₁-C₆alkoxyC₁-C₆alkoxycarbonyl, C₁-C₆alkylaminothio, di(C₁-C₆alkyl)aminothio, các nhóm (hetero)arylcarbonylC₁-C₆alkyl, (hetero)arylcarbonyl, (hetero)aryloxycarbonyl, (hetero)arylC₁-C₆alkyloxycarbonyl hoặc (hetero)arylC₁-C₆alkyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm sau: halogen, nitro, xyano, C₁-C₆alkyl, haloC₁-C₆alkyl, C₁-C₆alkoxy hoặc haloC₁-C₆alkoxy;

R₄, R₅ có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, halogen, C₁-C₆alkyl, haloC₁-C₆alkyl, C₁-C₆alkoxy hoặc haloC₁-C₆alkoxy; hoặc R₄, R₅ và nguyên tử cacbon liên kết của chúng cũng có thể tạo thành vòng có từ 3 đến 6 nguyên tử cacbon;

R₆, R₇ có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, halogen, C₁-C₆alkyl, haloC₁-C₆alkyl, C₁-C₆alkoxy hoặc haloC₁-C₆alkoxy; hoặc R₆, R₇ và nguyên tử cacbon liên kết của chúng cũng có thể tạo thành vòng có từ 3 đến 6 nguyên tử cacbon;

m là số nguyên được chọn từ 0 đến 4;

R_8 được chọn từ H, xyano, halogen, C_1 - C_6 alkyl, halo C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 alkoxycarbonyl, halo C_1 - C_6 alkoxycarbonyl, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmetyl, (hetero)arylcarbonyl, (hetero)arylmetylcarbonyl hoặc (hetero)aryloxy carbonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

R_9 được chọn từ H, xyano, halogen, C_1 - C_6 alkyl, halo C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 alkoxycarbonyl, halo C_1 - C_6 alkoxycarbonyl, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmetyl, (hetero)arylcarbonyl, (hetero)arylmetylcarbonyl hoặc (hetero)aryloxy carbonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

R_{10} được chọn từ C_1 - C_6 alkyl, C_3 - C_6 cycloalkyl, halo C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 alkylcarbonyl, halo C_1 - C_6 alkylcarbonyl, C_1 - C_6 alkylsulfonyl, halo C_1 - C_6 alkylsulfonyl, C_1 - C_6 alkoxycarbonyl, C_1 - C_6 alkoxy C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 alkoxycarbonyl C_1 - C_6 alkyl, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmetyl, (hetero)arylcarbonyl, (hetero)arylmetylcarbonyl hoặc (hetero)aryloxy carbonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

R_{11} được chọn từ halogen, OH, amino, xyano, nitro, C_1 - C_6 alkyl, halo C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 alkoxy, halo C_1 - C_6 alkoxy, C_3 - C_6 cycloalkyl, C_1 - C_6 alkylamino, halo C_1 - C_6 alkylamino, di(C_1 - C_6 alkyl)amino, halodi(C_1 - C_6 alkyl)amino, $C(=O)NR_{12}R_{13}$, C_1 - C_6 alkylthio, halo C_1 - C_6 alkylthio, C_2 - C_6 alkenyl, C_2 - C_6 alkynyl, C_2 - C_6 alkenoxy, halo C_2 - C_6 alkenoxy, C_2 - C_6 alkynoxy, halo C_2 - C_6 alkynoxy, C_1 - C_6 alkylsulfonyl, halo C_1 - C_6 alkylsulfonyl, C_1 - C_6 alkylcarbonyl, halo C_1 - C_6 alkylcarbonyl, C_1 - C_6 alkoxycarbonyl, halo C_1 - C_6 alkoxycarbonyl, C_1 - C_6 alkoxy C_1 - C_6 alkyl, halo C_1 - C_6 alkoxy C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 alkylthio C_1 - C_6 alkyl, halo C_1 - C_6 alkylthio C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 alkoxycarbonyl C_1 - C_6 alkyl, halo C_1 - C_6 alkoxycarbonyl C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 alkylthiocarbonyl C_1 - C_6 alkyl, halo C_1 - C_6 alkylthiocarbonyl C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 alkylcarbonyloxy, halo C_1 - C_6 alkylcarbonyloxy, C_1 - C_6 alkoxycarbonyloxy, halo C_1 - C_6 alkoxycarbonyloxy, C_1 - C_6 alkylsulfonyloxy, halo C_1 - C_6 alkylsulfonyloxy, C_1 - C_6 alkoxy C_1 - C_6 alkoxy hoặc halo C_1 - C_6 alkoxy C_1 - C_6 alkoxy;

R_{12} , R_{13} có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, C_1 - C_6 alkyl hoặc halo C_1 - C_6 alkyl;

W được chọn từ H, halogen, C_1 - C_6 alkyl, halo C_1 - C_6 alkyl, C_3 - C_6 cycloalkyl, C_1 - C_6 alkoxy, C_1 - C_6 alkylthio hoặc C_1 - C_6 alkylsulfonyl;

Vị trí của nhóm Y được liên kết với vòng pyrazol là vị trí 3, vị trí 4 hoặc vị trí 5. Khi nhóm Y được liên kết với vị trí 3 của pyrazol, R₈ ở vị trí 4, R₉ ở vị trí 5; Khi nhóm Y được liên kết với vị trí 4 của pyrazol, R₈ ở vị trí 3, R₉ ở vị trí 5; Khi nhóm Y được liên kết với vị trí 5 của pyrazol, R₈ ở vị trí 3, R₉ ở vị trí 4;

Hoặc các muối được tạo ra từ các hợp chất có công thức chung I được ưu tiên trên đây.

Trong số các hợp chất pyrazol được thể chứa pyrimidinyl của sáng chế, các hợp chất được ưu tiên hơn bao gồm các hợp chất có công thức chung I trong đó:

R₁ được chọn từ H, halogen, xyano, nitro, amino, carboxyl, C₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkyl, C₃-C₄xycloalkyl, C₁-C₄alkoxy, haloC₁-C₄alkoxy, C₁-C₄alkylthio, C₁-C₄alkylsulfinyl, C₁-C₄alkylsulfonyl, haloC₁-C₄alkylthio, C₂-C₄alkenyl, haloC₂-C₄alkenyl, C₂-C₄alkynyl, haloC₂-C₄alkynyl, C₃-C₄alkenoxy, haloC₃-C₄alkenoxy, C₃-C₄alkynoxy, haloC₃-C₄alkynoxy, C₁-C₄alkylamino, di(C₁-C₄alkyl)amino, C₁-C₄alkylaminocarbonyl, haloC₁-C₄alkylaminocarbonyl, C₁-C₄alkoxycarbonyl, haloC₁-C₄alkoxycarbonyl, C₁-C₄alkoxyC₁-C₄alkyl hoặc C₁-C₄alkylthioC₁-C₄alkyl;

R₂ được chọn từ H, halogen, xyano, nitro, amino, carboxyl, CHO, C₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkoxy hoặc haloC₁-C₄alkoxy;

R₁, R₂ và vòng pyrimidin liên kết của chúng cũng có thể tạo thành vòng có 5 cạnh hoặc vòng có 6 cạnh chứa nguyên tử cacbon, nguyên tử nitơ, nguyên tử oxy hoặc nguyên tử lưu huỳnh;

X được chọn từ NR₃, O hoặc S;

R₃ được chọn từ H, OH, CHO, C₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkoxy, haloC₁-C₄alkoxy, C₃-C₄xycloalkyl, C₁-C₄alkylthio, C₂-C₄alkenylthio, C₂-C₄alkenyl, C₂-C₄alkynyl, haloC₂-C₄alkenyl, haloC₂-C₄alkynyl, C₁-C₄alkoxyC₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkoxyC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkylthioC₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkylthioC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkylsulfinyl, haloC₁-C₄alkylsulfinyl, C₁-C₄alkylsulfonyl, haloC₁-C₄alkylsulfonyl, C₁-C₄alkylaminosulfonyl, di(C₁-C₄alkyl)aminosulfonyl, C₁-C₄alkylsulfonylaminocarbonyl, C₁-C₄alkylcarbonylaminosulfonyl, C₃-C₄xycloalkyloxycarbonyl, C₁-C₄alkylcarbonyl, haloC₁-C₄alkylcarbonyl, C₁-C₄alkoxycarbonyl, haloC₁-C₄alkoxycarbonyl, C₁-C₄alkylcarbonylC₁-C₄alkyl,

C₁-C₄alkoxycarbonylC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkylaminocarbonyl, di(C₁-C₄alkyl)aminocarbonyl, C₂-C₄alkenoxycarbonyl, C₂-C₄alkynoxycarbonyl, C₁-C₄alkoxyC₁-C₄alkoxycarbonyl, C₁-C₄alkylaminothio, di(C₁-C₄alkyl)aminothio, các nhóm (hetero)arylcarbonylC₁-C₄alkyl, (hetero)arylcarbonyl, (hetero)aryloxycarbonyl, (hetero)arylC₁-C₄alkyloxycarbonyl hoặc (hetero)arylC₁-C₄alkyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm sau: halogen, nitro, xyano, C₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkoxy hoặc haloC₁-C₄alkoxy;

R₄, R₅ có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, halogen, C₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkoxy hoặc haloC₁-C₄alkoxy; hoặc R₄, R₅ và nguyên tử cacbon liên kết của chúng cũng có thể tạo thành vòng có 3 hoặc 4 nguyên tử cacbon;

R₆, R₇ có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, halogen, C₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkoxy hoặc haloC₁-C₄alkoxy; hoặc R₆, R₇ và nguyên tử cacbon liên kết của chúng cũng có thể tạo thành vòng có 3 hoặc 4 nguyên tử cacbon;

m là số nguyên được chọn từ 0 đến 3;

R₈ được chọn từ H, xyano, halogen, C₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkoxycarbonyl, haloC₁-C₄alkoxycarbonyl, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmetyl, (hetero)arylcarbonyl, (hetero)arylmetylcarbonyl hoặc (hetero)aryloxycarbonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R₁₁;

R₉ được chọn từ H, xyano, halogen, C₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkoxycarbonyl, haloC₁-C₄alkoxycarbonyl, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmetyl, (hetero)arylcarbonyl, (hetero)arylmetylcarbonyl hoặc (hetero)aryloxycarbonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R₁₁;

R₁₀ được chọn từ C₁-C₄alkyl, C₃-C₄cycloalkyl, haloC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkylcarbonyl, haloC₁-C₄alkylcarbonyl, C₁-C₄alkylsulfonyl, haloC₁-C₄alkylsulfonyl, C₁-C₄alkoxycarbonyl, C₁-C₄alkoxyC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkoxycarbonylC₁-C₄alkyl, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmetyl, (hetero)arylcarbonyl, (hetero)arylmetylcarbonyl hoặc (hetero)aryloxycarbonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R₁₁;

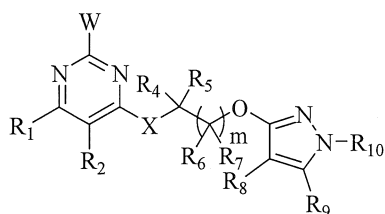
R₁₁ được chọn từ halogen, OH, amino, xyano, nitro, C₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkoxy, haloC₁-C₄alkoxy, C₃-C₄cycloalkyl, C₁-C₄alkylamino, haloC₁-C₄alkylamino, di(C₁-C₄alkyl)amino, halodi(C₁-C₄alkyl)amino, C(=O)NR₁₂R₁₃,

C₁-C₄alkylthio, haloC₁-C₄alkylthio, C₂-C₄alkenyl, C₂-C₄alkynyl, C₂-C₄alkenoxy, haloC₂-C₄alkenoxy, C₂-C₄alkynoxy, haloC₂-C₄alkynoxy, C₁-C₄alkylsulfonyl, haloC₁-C₄alkylsulfonyl, C₁-C₄alkylcacybonyl, haloC₁-C₄alkylcacybonyl, C₁-C₄alkoxycacybonyl, haloC₁-C₄alkoxycacybonyl, C₁-C₄alkoxyC₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkoxyC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkylthioC₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkylthioC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkoxycacybonylC₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkoxycacybonylC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkylthiocacybonylC₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkylthiocacybonylC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkylcacybonyloxy, haloC₁-C₄alkylcacybonyloxy, C₁-C₄alkoxycacybonyloxy, haloC₁-C₄alkoxycacybonyloxy, C₁-C₄alkylsulfonyloxy, haloC₁-C₄alkylsulfonyloxy, C₁-C₄alkoxyC₁-C₄alkoxy hoặc haloC₁-C₄alkoxyC₁-C₄alkoxy;

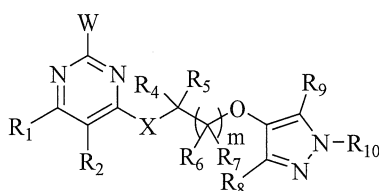
R₁₂, R₁₃ có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, C₁-C₄alkyl hoặc haloC₁-C₄alkyl;

W được chọn từ H, halogen, C₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkyl, C₃-C₄cycloalkyl, C₁-C₄alkoxy, C₁-C₄alkylthio hoặc C₁-C₄alkylsulfonyl;

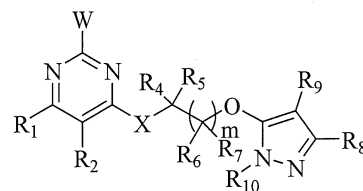
Y là O, vị trí của nhóm Y được liên kết với vòng pyrazol là vị trí 3, vị trí 4 hoặc vị trí 5. Khi O được liên kết với vị trí 3 của pyrazol, R₈ ở vị trí 4, R₉ ở vị trí 5, hợp chất có công thức chung I được thể hiện bằng công thức chung I-1; Khi nhóm Y được liên kết với vị trí 4 của pyrazol, R₈ ở vị trí 3, R₉ ở vị trí 5, hợp chất có công thức chung I được thể hiện bằng công thức chung I-2; Khi nhóm Y được liên kết với vị trí 5 của pyrazol, R₈ ở vị trí 3, R₉ ở vị trí 4, hợp chất có công thức chung I được thể hiện bằng công thức chung I-3:



I-1



I-2



I-3

Hoặc các muối được tạo ra từ các hợp chất có công thức chung I được ưu tiên nữa nêu trên.

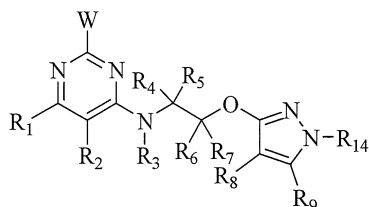
Trong số các hợp chất pyrazol được thể chứa pyrimidinyl của sáng chế, các hợp chất được ưu tiên hơn bao gồm các hợp chất có công thức chung I trong đó:

cấu trúc của hợp chất có công thức chung I-1 được thể hiện bằng công thức chung I-1A, I-1B, I-1C, I-1D, I-1E, I-1F, I-1G, I-1H, I-1I, I-1J, I-1K, I-1L, I-1M, I-1N, I-4C,

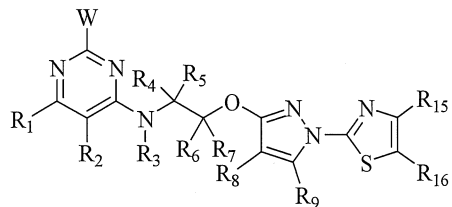
I-4F hoặc I-4G;

cấu trúc của hợp chất có công thức chung I-2 được thể hiện bằng công thức chung I-2A, I-2B, I-2C, I-2D, I-2E, I-2F hoặc I-2G;

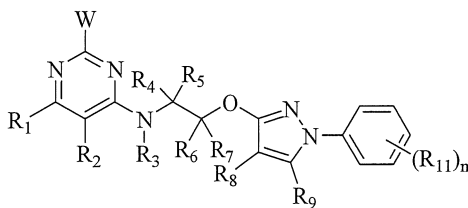
cấu trúc của hợp chất có công thức chung I-3 được thể hiện bằng công thức chung I-3A, I-3B, I-3C, I-3D, I-3E, I-3F hoặc I-3G:



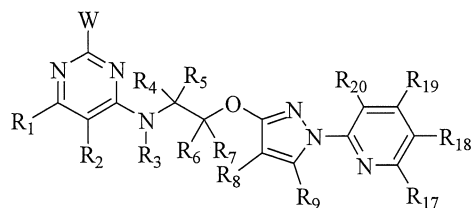
I-1A



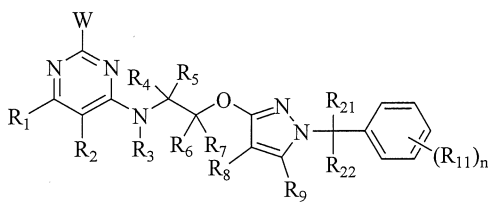
I-1B



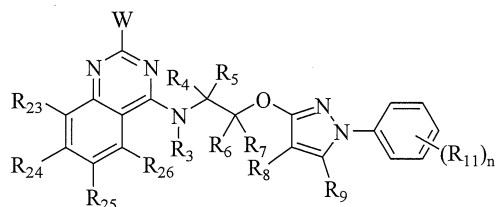
I-1C



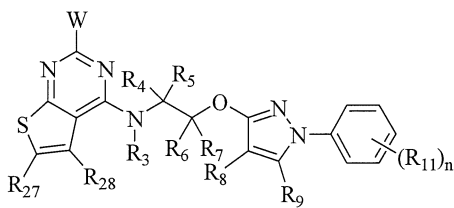
I-1D



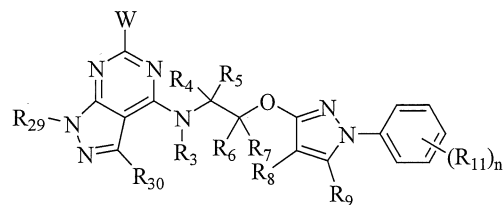
I-1E



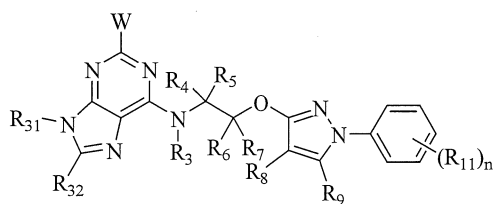
I-1F



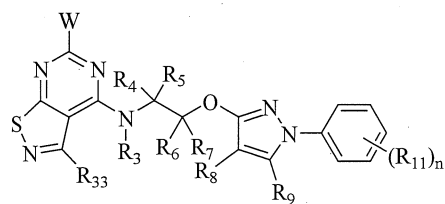
I-1G



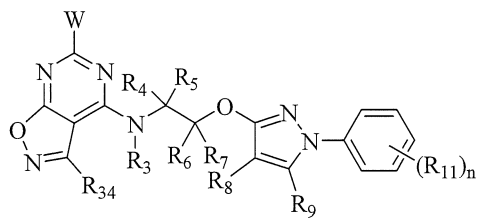
I-1H



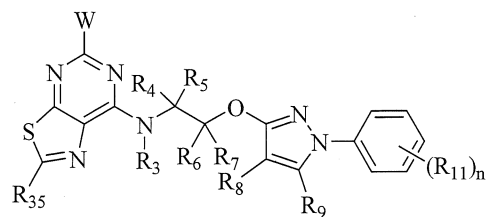
I-1I



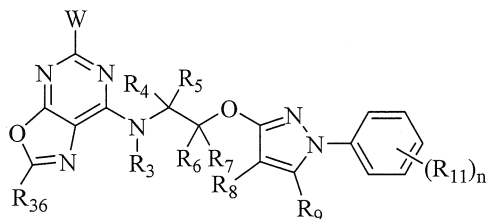
I-1J



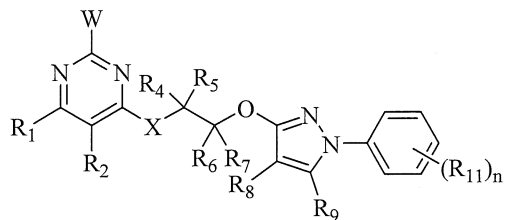
I-1K



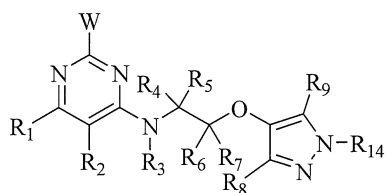
I-1L



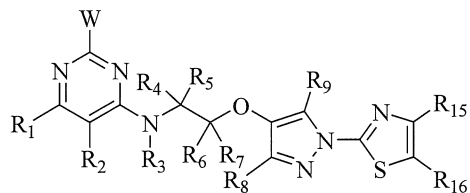
I-1M



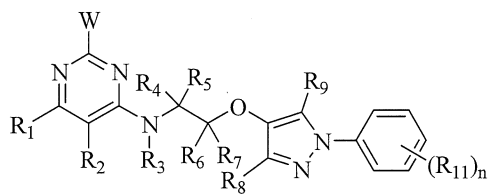
I-1N (X=O or S)



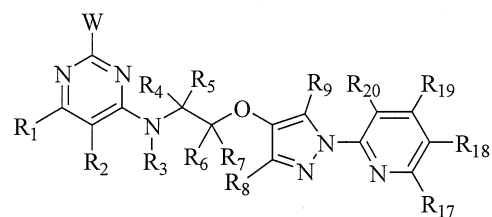
I-2A



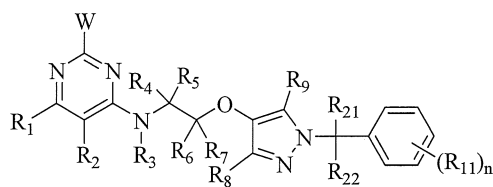
I-1N (X = O hoặc S)



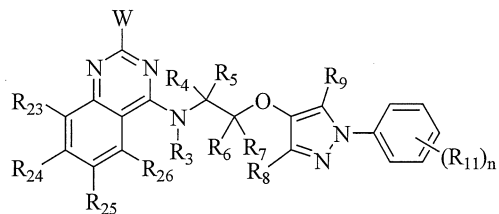
I-2C



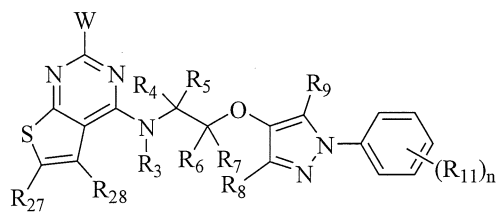
I-2D



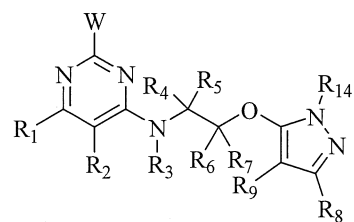
I-2E



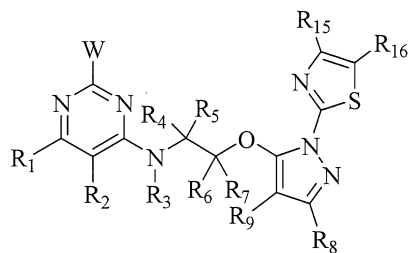
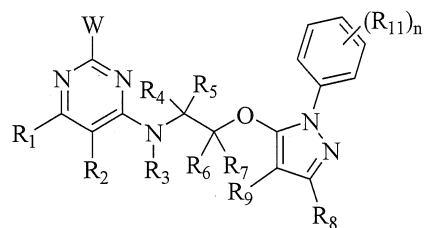
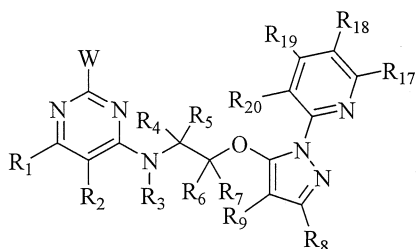
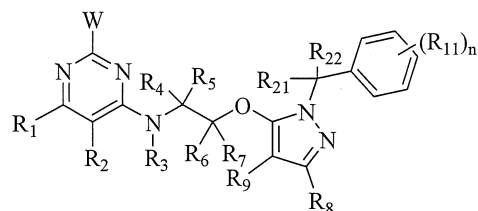
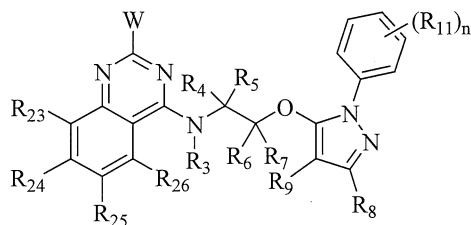
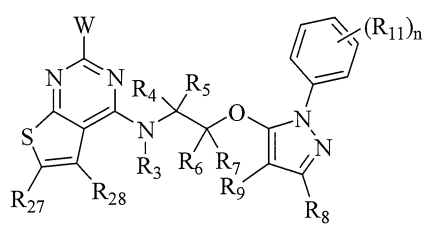
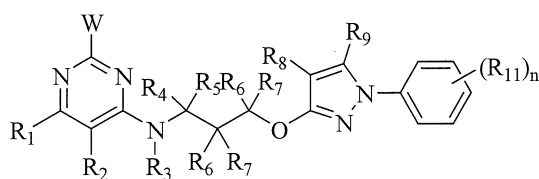
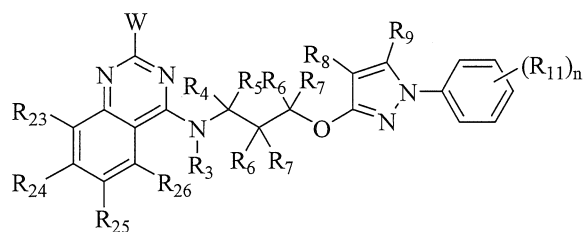
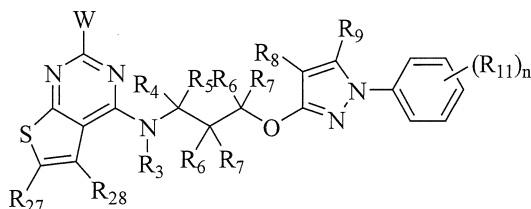
I-2F



I-2G



I-3A

**I-3B****I-3C****I-3D****I-3E****I-3F****I-3G****I-4C****I-4F****I-4G**

Trong các hợp chất có công thức chung I-1A, I-1B, I-1C, I-1D, I-1E, I-1F, I-1G, I-1H, I-1I, I-1J, I-1K, I-1L, I-1M, I-1N, I-4C, I-4F, I-4G, I-2A, I-2B, I-2C, I-2D, I-2E, I-2F, I-2G, I-3A, I-3B, I-3C, I-3D, I-3E, I-3F và I-3G:

R₁ được chọn từ H, halogen, xyano, nitro, amino, carboxyl, C₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkyl, C₃-C₄xycloalkyl, C₁-C₄alkoxy, haloC₁-C₄alkoxy, C₁-C₄alkylthio,

haloC₁-C₄alkylthio, C₁-C₄alkylsulfinyl, C₁-C₄alkylsulfonyl, C₂-C₄alkenyl, haloC₂-C₄alkenyl, C₂-C₄alkynyl, haloC₂-C₄alkynyl, C₃-C₄alkenoxy, haloC₃-C₄alkenoxy, C₃-C₄alkynoxy, haloC₃-C₄alkynoxy, C₁-C₄alkylamino, di(C₁-C₄alkyl)amino, C₁-C₄alkylaminocarbonyl, haloC₁-C₄alkylaminocarbonyl, C₁-C₄alkoxycarbonyl, haloC₁-C₄alkoxycarbonyl, C₁-C₄alkoxyC₁-C₄alkyl hoặc C₁-C₄alkylthioC₁-C₄alkyl;

R₂ được chọn từ H, halogen, xyano, nitro, amino, carboxyl, CHO, C₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkoxy hoặc haloC₁-C₄alkoxy;

R₃ được chọn từ H, OH, CHO, C₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkoxy, haloC₁-C₄alkoxy, C₃-C₄xycloalkyl, C₁-C₄alkylthio, C₂-C₄alkenylthio, C₂-C₄alkenyl, C₂-C₄alkynyl, haloC₂-C₄alkenyl, haloC₂-C₄alkynyl, C₁-C₄alkoxyC₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkoxyC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkylthioC₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkylthioC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkylsulfinyl, haloC₁-C₄alkylsulfinyl, C₁-C₄alkylsulfonyl, haloC₁-C₄alkylsulfonyl, C₁-C₄alkylaminosulfonyl, di(C₁-C₄alkyl)aminosulfonyl, C₁-C₄alkylsulfonylaminocarbonyl, C₁-C₄alkylcarbonylaminosulfonyl, C₃-C₄xycloalkyloxycarbonyl, C₁-C₄alkylcarbonyl, haloC₁-C₄alkylcarbonyl, C₁-C₄alkoxycarbonyl, haloC₁-C₄alkoxycarbonyl, C₁-C₄alkylcarbonylC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkoxycarbonylC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkylaminocarbonyl, di(C₁-C₄alkyl)aminocarbonyl, C₂-C₄alkenoxycarbonyl, C₂-C₄alkynoxycarbonyl, C₁-C₄alkoxyC₁-C₄alkoxycarbonyl, C₁-C₄alkylaminothio, di(C₁-C₄alkyl)aminothio, các nhóm (hetero)arylcarbonylC₁-C₄alkyl, (hetero)arylcarbonyl, (hetero)aryloxycarbonyl, (hetero)arylC₁-C₄alkyloxycarbonyl hoặc (hetero)arylC₁-C₄alkyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm sau: halogen, nitro, xyano, C₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkoxy hoặc haloC₁-C₄alkoxy;

R₄, R₅ có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, halogen, C₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkoxy hoặc haloC₁-C₄alkoxy; hoặc R₄, R₅ và nguyên tử cacbon liên kết của chúng cũng có thể tạo thành vòng có 3 hoặc 4 nguyên tử cacbon;

R₆, R₇ có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, halogen, C₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkoxy hoặc haloC₁-C₄alkoxy; hoặc R₆, R₇ và nguyên tử cacbon liên kết của chúng cũng có thể tạo thành vòng có 3 hoặc 4 nguyên tử cacbon;

R₈ được chọn từ H, xyano, halogen, C₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkoxycarbonyl, haloC₁-C₄alkoxycarbonyl, các nhóm (hetero)aryl,

(hetero)arylmetyl, (hetero)arylcacbonyl, (hetero)arylmetylcacbonyl hoặc (hetero)aryloxyacarbonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

R_9 được chọn từ H, xyano, halogen, C_1 - C_4 alkyl, halo C_1 - C_4 alkyl, C_1 - C_4 alkoxyacarbonyl, halo C_1 - C_4 alkoxyacarbonyl, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmetyl, (hetero)arylcacbonyl, (hetero)arylmetylcacbonyl hoặc (hetero)aryloxyacarbonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

R_{11} được chọn từ halogen, OH, amino, xyano, nitro, C_1 - C_4 alkyl, halo C_1 - C_4 alkyl, C_1 - C_4 alkoxy, halo C_1 - C_4 alkoxy, C_3 - C_4 xycloalkyl, C_1 - C_4 alkylamino, halo C_1 - C_4 alkylamino, di(C_1 - C_4 alkyl)amino, halodi(C_1 - C_4 alkyl)amino, $C(=O)NR_{12}R_{13}$, C_1 - C_4 alkylthio, halo C_1 - C_4 alkylthio, C_2 - C_4 alkenyl, C_2 - C_4 alkynyl, C_2 - C_4 alkenoxy, halo C_2 - C_4 alkenoxy, C_2 - C_4 alkynoxy, halo C_2 - C_4 alkynoxy, C_1 - C_4 alkylsulfonyl, halo C_1 - C_4 alkylsulfonyl, C_1 - C_4 alkylcabonyl, halo C_1 - C_4 alkylcabonyl, C_1 - C_4 alkoxyacarbonyl, halo C_1 - C_4 alkoxyacarbonyl, C_1 - C_4 alkoxy C_1 - C_4 alkyl, halo C_1 - C_4 alkoxy C_1 - C_4 alkyl, C_1 - C_4 alkylthio C_1 - C_4 alkyl, halo C_1 - C_4 alkylthio C_1 - C_4 alkyl, C_1 - C_4 alkoxyacarbonyl C_1 - C_4 alkyl, halo C_1 - C_4 alkoxyacarbonyl C_1 - C_4 alkyl, C_1 - C_4 alkylthiocarbonyl C_1 - C_4 alkyl, halo C_1 - C_4 alkylthiocarbonyl C_1 - C_4 alkyl, C_1 - C_4 alkylcabonyloxy, halo C_1 - C_4 alkylcabonyloxy, C_1 - C_4 alkoxyacarbonyloxy, halo C_1 - C_4 alkoxyacarbonyloxy, C_1 - C_4 alkylsulfonyloxy, halo C_1 - C_4 alkylsulfonyloxy, C_1 - C_4 alkoxy C_1 - C_4 alkoxy hoặc halo C_1 - C_4 alkoxy C_1 - C_4 alkoxy;

n là số nguyên được chọn từ 0 đến 5, khi n bằng 0, vòng benzen là phenyl không được thế; khi n lớn hơn 1, R_{11} có thể giống nhau hoặc khác nhau;

R_{12} , R_{13} có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, C_1 - C_4 alkyl hoặc halo C_1 - C_4 alkyl;

R_{14} được chọn từ C_1 - C_4 alkyl, C_3 - C_4 xycloalkyl, halo C_1 - C_4 alkyl, C_1 - C_4 alkylcabonyl, halo C_1 - C_4 alkylcabonyl, C_1 - C_4 alkylsulfonyl, halo C_1 - C_4 alkylsulfonyl, C_1 - C_4 alkoxyacarbonyl, C_1 - C_4 alkoxy C_1 - C_4 alkyl hoặc C_1 - C_4 alkoxyacarbonyl C_1 - C_4 alkyl;

R_{15} , R_{16} có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, halogen, amino, xyano, nitro, C_1 - C_4 alkyl, halo C_1 - C_4 alkyl, C_1 - C_4 alkoxy, halo C_1 - C_4 alkoxy, C_1 - C_4 alkylthio, halo C_1 - C_4 alkylthio, C_3 - C_4 xycloalkyl, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmetyl, (hetero)arylcacbonyl, (hetero)arylmetylcacbonyl hoặc

(hetero)aryloxyacetyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

R_{17} , R_{18} , R_{19} , R_{20} có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, halogen, xyano, nitro, C_1 - C_4 alkyl, halo C_1 - C_4 alkyl, C_1 - C_4 alkoxy hoặc halo C_1 - C_4 alkoxy;

R_{21} , R_{22} có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, halogen, OH, xyano, nitro, C_1 - C_4 alkyl, halo C_1 - C_4 alkyl, C_1 - C_4 alkoxy, halo C_1 - C_4 alkoxy, C_1 - C_4 alkylthio, halo C_1 - C_4 alkylthio, C_3 - C_4 cycloalkyl, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmethyl, (hetero)arylacetyl, (hetero)arylmethylacetyl hoặc (hetero)aryloxyacetyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

R_{23} , R_{24} , R_{25} , R_{26} có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, halogen, OH, amino, xyano, nitro, C_1 - C_4 alkyl, halo C_1 - C_4 alkyl, C_1 - C_4 alkoxy, halo C_1 - C_4 alkoxy hoặc C_3 - C_4 cycloalkyl;

R_{27} , R_{28} có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, halogen, C_1 - C_4 alkyl, halo C_1 - C_4 alkyl, C_1 - C_4 alkoxy, halo C_1 - C_4 alkoxy, C_1 - C_4 alkylthio, halo C_1 - C_4 alkylthio, C_3 - C_4 cycloalkyl, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmethyl, (hetero)arylacetyl, (hetero)arylmethylacetyl hoặc (hetero)aryloxyacetyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

R_{29} được chọn từ C_1 - C_4 alkyl, halo C_1 - C_4 alkyl, C_3 - C_4 cycloalkyl, C_1 - C_4 alkylsulfonyl, halo C_1 - C_4 alkylsulfonyl, C_1 - C_4 alkylacetyl, halo C_1 - C_4 alkylacetyl, C_1 - C_4 alkoxyacetyl, halo C_1 - C_4 alkoxyacetyl, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmethyl, (hetero)arylacetyl, (hetero)arylmethylacetyl hoặc (hetero)aryloxyacetyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

R_{30} được chọn từ H, xyano, halogen, C_1 - C_4 alkyl, halo C_1 - C_4 alkyl, C_1 - C_4 alkoxyacetyl, halo C_1 - C_4 alkoxyacetyl, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmethyl, (hetero)arylacetyl, (hetero)arylmethylacetyl hoặc (hetero)aryloxyacetyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

R_{31} được chọn từ C_1 - C_4 alkyl, halo C_1 - C_4 alkyl, C_3 - C_4 cycloalkyl, C_1 - C_4 alkylsulfonyl, halo C_1 - C_4 alkylsulfonyl, C_1 - C_4 alkylacetyl, halo C_1 - C_4 alkylacetyl, C_1 - C_4 alkoxyacetyl, halo C_1 - C_4 alkoxyacetyl, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmethyl, (hetero)arylacetyl, (hetero)arylmethylacetyl hoặc (hetero)aryloxyacetyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

R_{32} được chọn từ H, xyano, halogen, C_1 - C_4 alkyl, halo C_1 - C_4 alkyl, các nhóm

(hetero)aryl, (hetero)arylmethyl, (hetero)arylcacbonyl, (hetero)arylmethylcacbonyl hoặc (hetero)aryloxyacacbonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

R_{33} , R_{34} có thể được chọn tương ứng từ C_1 - C_4 alkyl, halo C_1 - C_4 alkyl, C_3 - C_4 xycloalkyl, C_1 - C_4 alkylcacbonyl, halo C_1 - C_4 alkylcacbonyl, C_1 - C_4 alkoxyacacbonyl, halo C_1 - C_4 alkoxyacacbonyl, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmethyl, (hetero)arylcacbonyl, (hetero)arylmethylcacbonyl hoặc (hetero)aryloxyacacbonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

R_{35} , R_{36} có thể được chọn tương ứng từ H, xyano, halogen, C_1 - C_4 alkyl, halo C_1 - C_4 alkyl, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmethyl, (hetero)arylcacbonyl, (hetero)arylmethylcacbonyl hoặc (hetero)aryloxyacacbonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

W được chọn từ H, halogen, C_1 - C_4 alkyl, halo C_1 - C_4 alkyl, C_3 - C_4 xycloalkyl, C_1 - C_4 alkoxy, halo C_1 - C_4 alkoxy hoặc C_1 - C_4 alkylsulfonyl;

Hoặc các muối được tạo ra từ các hợp chất có công thức chung được ưu tiên hơn nêu trên, với axit clohydric, axit sulfuric, axit phosphoric, axit formic, axit axetic, axit trifloaxetic, axit oxalic, axit metylsulfonic, axit *p*-toluensulfonic, axit benzoic, axit alizaric, axit maleic, axit fumaric, axit sorbic, axit malic hoặc axit xitric.

Trong số các hợp chất pyrazol được thế chứa pyrimidinyl của sáng chế, các hợp chất được ưu tiên hơn bao gồm: các hợp chất có công thức chung I-1A, I-1B, I-1C, I-1D, I-1E, I-1F, I-1G, I-1H, I-1I, I-1J, I-1K, I-1L, I-1M, I-1N, I-2A, I-2B, I-2C, I-2D, I-2E, I-2F, I-2G, I-3A, I-3B, I-3C, I-3D, I-3E, I-3F, I-3G, I-4C, I-4F hoặc I-4G:

trong đó:

R_1 được chọn từ H, F, Cl, Br, I, CN, NO_2 , NH_2 , carboxyl, CH_3 , C_2H_5 , *n*- C_3H_7 , *i*- C_3H_7 , *n*- C_4H_9 , *s*- C_4H_9 , *i*- C_4H_9 , *t*- C_4H_9 , CH_2F , CH_2Cl , CHF_2 , CF_3 , CH_2CF_3 , CH_2OCH_3 , $CH_2OCH_2CH_3$ hoặc $CH_2OCH_2CF_3$;

R_2 được chọn từ H, F, Cl, Br, I, CN, NO_2 , NH_2 , carboxyl, CHO, CH_3 , C_2H_5 , OCH_3 , OC_2H_5 hoặc OCH_2CF_3 ;

R_3 được chọn từ H, OH, CHO, $COCH_3$, COC_2H_5 , COC_3H_7 , $COCF_3$, $COPh$, CH_3 , C_2H_5 , *n*- C_3H_7 , *i*- C_3H_7 , *n*- C_4H_9 , *s*- C_4H_9 , *i*- C_4H_9 , *t*- C_4H_9 , CF_3 , CH_2CF_3 , OCH_3 , OC_2H_5 , OCH_2CF_3 , $\text{O}-\triangle$, SCH_3 , SC_2H_5 , $CH_2CH=CH_2$, $CH_2C\equiv CH$, SO_2CH_3 , $SO_2CH_2CH_3$,

$\text{SO}_2\text{CH}_2\text{CF}_3$, SO_2NHCH_3 , $\text{SO}_2\text{NHC}_2\text{H}_5$, $\text{SO}_2\text{N}(\text{CH}_3)_2$, $\text{SO}_2\text{N}(\text{C}_2\text{H}_5)_2$, $\text{CONHSO}_2\text{CH}_3$, COOCH_3 , COOC_2H_5 , $\text{COOC}_3\text{H}_7\text{-n}$, $\text{COOC}_3\text{H}_7\text{-i}$, CONHCH_3 , $\text{CON}(\text{CH}_3)_2$, $\text{COOCH}=\text{CH}_2$, $\text{COOC}\equiv\text{CH}$, SNHCH_3 , SNHC_2H_5 hoặc $\text{SN}(\text{CH}_3)_2$;

R_4 , R_5 có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, F, Cl, Br, I, CH_3 , C_2H_5 , $\text{n-C}_3\text{H}_7$, $\text{i-C}_3\text{H}_7$, $\text{n-C}_4\text{H}_9$, $\text{s-C}_4\text{H}_9$, $\text{i-C}_4\text{H}_9$, $\text{t-C}_4\text{H}_9$, OCH_3 , OC_2H_5 , $\text{n-C}_3\text{H}_7\text{O}$, $\text{i-C}_3\text{H}_7\text{O}$, $\text{n-C}_4\text{H}_9\text{O}$, $\text{s-C}_4\text{H}_9\text{O}$, $\text{i-C}_4\text{H}_9\text{O}$ hoặc $\text{t-C}_4\text{H}_9\text{O}$;

R_6 , R_7 có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, F, Cl, Br, I, CH_3 , C_2H_5 , $\text{n-C}_3\text{H}_7$, $\text{i-C}_3\text{H}_7$, $\text{n-C}_4\text{H}_9$, $\text{s-C}_4\text{H}_9$, $\text{i-C}_4\text{H}_9$, $\text{t-C}_4\text{H}_9$, OCH_3 , OC_2H_5 , $\text{n-C}_3\text{H}_7\text{O}$, $\text{i-C}_3\text{H}_7\text{O}$, $\text{n-C}_4\text{H}_9\text{O}$, $\text{s-C}_4\text{H}_9\text{O}$, $\text{i-C}_4\text{H}_9\text{O}$ hoặc $\text{t-C}_4\text{H}_9\text{O}$;

R_8 được chọn từ H, CN, F, Cl, Br, I, CH_3 , C_2H_5 hoặc CF_3 ;

R_9 được chọn từ H, CN, F, Cl, Br, I, CH_3 , C_2H_5 hoặc CF_3 ;

R_{11} được chọn từ F, Cl, Br, I, CN, NH_2 , NO_2 , CH_3 , C_2H_5 , $\text{n-C}_3\text{H}_7$, $\text{i-C}_3\text{H}_7$, $\text{n-C}_4\text{H}_9$, $\text{s-C}_4\text{H}_9$, $\text{i-C}_4\text{H}_9$, $\text{t-C}_4\text{H}_9$, CF_3 , CCl_3 , CF_2Cl , CFCl_2 , OCH_3 , OCH_2CH_3 , $\text{n-C}_3\text{H}_7\text{O}$, $\text{i-C}_3\text{H}_7\text{O}$, $\text{n-C}_4\text{H}_9\text{O}$, $\text{s-C}_4\text{H}_9\text{O}$, $\text{i-C}_4\text{H}_9\text{O}$, $\text{t-C}_4\text{H}_9\text{O}$, OCF_3 , OCH_2CF_3 , COOCH_3 , COOC_2H_5 , CONH_2 , CONHCH_3 , CONHC_2H_5 hoặc $\text{CON}(\text{CH}_3)_2$;

n là số nguyên được chọn từ 0 đến 5, khi n bằng 0, vòng benzen là phenyl không được thế; khi n lớn hơn 1, R_{11} có thể giống nhau hoặc khác nhau;

R_{14} được chọn từ CH_3 , C_2H_5 , $\text{n-C}_3\text{H}_7$, $\text{i-C}_3\text{H}_7$, $\text{n-C}_4\text{H}_9$, $\text{s-C}_4\text{H}_9$, $\text{i-C}_4\text{H}_9$, $\text{t-C}_4\text{H}_9$, xyclopropyl, xyclobutyl, CH_2F , CH_2Cl , CHF_2 , CF_3 hoặc CH_2CF_3 ;

R_{15} , R_{16} có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, F, Cl, Br, I, NH_2 , CN, NO_2 , CH_3 , C_2H_5 , $\text{n-C}_3\text{H}_7$, $\text{i-C}_3\text{H}_7$, $\text{n-C}_4\text{H}_9$, $\text{s-C}_4\text{H}_9$, $\text{i-C}_4\text{H}_9$, $\text{t-C}_4\text{H}_9$, CF_3 , CCl_3 , CF_2Cl , CFCl_2 , CH_2CF_3 , OCH_3 , OCH_2CH_3 , $\text{n-C}_3\text{H}_7\text{O}$, $\text{i-C}_3\text{H}_7\text{O}$, $\text{n-C}_4\text{H}_9\text{O}$, $\text{s-C}_4\text{H}_9\text{O}$, $\text{i-C}_4\text{H}_9\text{O}$, $\text{t-C}_4\text{H}_9\text{O}$, OCF_3 , OCH_2CF_3 , các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmetyl, (hetero)arylcacbonyl, (hetero)arylmetylcacbonyl hoặc (hetero)aryloxyacacbonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

R_{17} , R_{18} , R_{19} , R_{20} có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, F, Cl, Br, I, CN, NO_2 , CH_3 , CF_3 , OCH_3 hoặc OCF_3 ;

R_{21} , R_{22} có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, F, Cl, Br, I, OH, CN, NO_2 , CH_3 , C_2H_5 , $\text{n-C}_3\text{H}_7$, $\text{i-C}_3\text{H}_7$, $\text{n-C}_4\text{H}_9$, $\text{s-C}_4\text{H}_9$, $\text{i-C}_4\text{H}_9$, $\text{t-C}_4\text{H}_9$, CF_3 , CCl_3 , CF_2Cl , CFCl_2 , CH_2CF_3 , OCH_3 , OCH_2CH_3 , $\text{n-C}_3\text{H}_7\text{O}$, $\text{i-C}_3\text{H}_7\text{O}$, $\text{n-C}_4\text{H}_9\text{O}$, $\text{s-C}_4\text{H}_9\text{O}$, $\text{i-C}_4\text{H}_9\text{O}$, $\text{t-C}_4\text{H}_9\text{O}$, OCF_3 , OCH_2CF_3 , các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmetyl,

(hetero)arylcacbonyl, (hetero)arylmetylcacbonyl hoặc (hetero)aryloxyacarbonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

R_{23} , R_{24} , R_{25} , R_{26} có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, F, Cl, Br, I, NH_2 , CN, NO_2 , CH_3 , C_2H_5 , $n-C_3H_7$, $i-C_3H_7$, $n-C_4H_9$, $s-C_4H_9$, $i-C_4H_9$, $t-C_4H_9$, CF_3 , CCl_3 , CF_2Cl , $CFCl_2$, OCH_3 , OCH_2CH_3 , $n-C_3H_7O$, $i-C_3H_7O$, $n-C_4H_9O$, $s-C_4H_9O$, $i-C_4H_9O$, $t-C_4H_9O$, OCF_3 hoặc OCH_2CF_3 ;

R_{27} , R_{28} có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, F, Cl, Br, I, CH_3 , C_2H_5 , $n-C_3H_7$, $i-C_3H_7$, $n-C_4H_9$, $s-C_4H_9$, $i-C_4H_9$, $t-C_4H_9$, CF_3 , CCl_3 , CF_2Cl , $CFCl_2$, CH_2CF_3 , OCH_3 , OCH_2CH_3 , $n-C_3H_7O$, $i-C_3H_7O$, $n-C_4H_9O$, $s-C_4H_9O$, $i-C_4H_9O$, $t-C_4H_9O$, OCF_3 , OCH_2CF_3 , các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmetyl, (hetero)arylcacbonyl, (hetero)arylmetylcacbonyl hoặc (hetero)aryloxyacarbonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

R_{29} được chọn từ CH_3 , C_2H_5 , $n-C_3H_7$, $i-C_3H_7$, $n-C_4H_9$, $s-C_4H_9$, $i-C_4H_9$, $t-C_4H_9$, CF_3 , CCl_3 , CF_2Cl , $CFCl_2$, xyclopropyl, SO_2CH_3 , $SO_2CH_2CH_3$, $COCH_3$, COC_2H_5 , các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmetyl, (hetero)arylcacbonyl, (hetero)arylmetylcacbonyl hoặc (hetero)aryloxyacarbonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

R_{30} được chọn từ H, CN, F, Cl, Br, I, CH_3 , C_2H_5 , $n-C_3H_7$, $i-C_3H_7$, $n-C_4H_9$, $s-C_4H_9$, $i-C_4H_9$, $t-C_4H_9$, CF_3 , CCl_3 , CF_2Cl , $CFCl_2$, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmetyl, (hetero)arylcacbonyl, (hetero)arylmetylcacbonyl hoặc (hetero)aryloxyacarbonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

R_{31} được chọn từ CH_3 , C_2H_5 , $n-C_3H_7$, $i-C_3H_7$, $n-C_4H_9$, $s-C_4H_9$, $i-C_4H_9$, $t-C_4H_9$, CF_3 , CCl_3 , CF_2Cl , $CFCl_2$, xyclopropyl, SO_2CH_3 , $SO_2CH_2CH_3$, $COCH_3$, COC_2H_5 , các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmetyl, (hetero)arylcacbonyl, (hetero)arylmetylcacbonyl hoặc (hetero)aryloxyacarbonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

R_{32} được chọn từ H, CN, F, Cl, Br, I, CH_3 , C_2H_5 , $n-C_3H_7$, $i-C_3H_7$, $n-C_4H_9$, $s-C_4H_9$, $i-C_4H_9$, $t-C_4H_9$, CF_3 , CCl_3 , CF_2Cl , $CFCl_2$, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmetyl, (hetero)arylcacbonyl, (hetero)arylmetylcacbonyl hoặc (hetero)aryloxyacarbonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

R_{33} , R_{34} có thể được chọn tương ứng từ CH_3 , C_2H_5 , $n-C_3H_7$, $i-C_3H_7$, $n-C_4H_9$,

$s\text{-C}_4\text{H}_9$, $i\text{-C}_4\text{H}_9$, $t\text{-C}_4\text{H}_9$, CF_3 , CCl_3 , CF_2Cl , CFCl_2 , xyclopropyl, COCH_3 , COC_2H_5 , COOCH_3 , COOC_2H_5 , $\text{COOCH}_2\text{CF}_3$, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmetyl, (hetero)arylcacbonyl, (hetero)arylmetylcacbonyl hoặc (hetero)aryloxycacbonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

R_{35} , R_{36} có thể được chọn tương ứng từ H, CN, F, Cl, Br, I, CH_3 , C_2H_5 , $n\text{-C}_3\text{H}_7$, $i\text{-C}_3\text{H}_7$, $n\text{-C}_4\text{H}_9$, $s\text{-C}_4\text{H}_9$, $i\text{-C}_4\text{H}_9$, $t\text{-C}_4\text{H}_9$, CF_3 , CCl_3 , CF_2Cl , CFCl_2 , các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmetyl, (hetero)arylcacbonyl, (hetero)arylmetylcacbonyl hoặc (hetero)aryloxycacbonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

W được chọn từ H, F, Cl, Br, I, CH_3 , C_2H_5 , $n\text{-C}_3\text{H}_7$, $i\text{-C}_3\text{H}_7$, $n\text{-C}_4\text{H}_9$, $s\text{-C}_4\text{H}_9$, $i\text{-C}_4\text{H}_9$, $t\text{-C}_4\text{H}_9$, CH_2F , CH_2Cl , CHF_2 , CF_3 , CH_2CF_3 , OCH_3 , OC_2H_5 , SCH_3 , SC_2H_5 , SO_2CH_3 hoặc $\text{SO}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$;

Hoặc các muối được tạo ra từ các hợp chất có công thức chung được ưu tiên hơn nêu trên, với axit clohydric, axit sulfuric, axit phosphoric, axit formic, axit axetic, axit trifloaxetic, axit oxalic, axit metylsulfonic, axit *p*-toluensulfonic, axit benzoic, axit alizaric, axit maleic, axit fumaric, axit sorbic, axit malic hoặc axit xitric.

Trong số các hợp chất pyrazol được thế chứa pyrimidinyl của sáng chế, các hợp chất được ưu tiên hơn bao gồm các hợp chất có công thức chung I-1C, I-1F, I-1G, I-2C, I-2F, I-2G, I-4C, I-4F hoặc I-4G:

trong đó:

R_1 được chọn từ H, F, Cl, Br, I, CH_3 , C_2H_5 hoặc CHF_2 ;

R_2 được chọn từ H, F, Cl, Br, I, NO_2 , NH_2 , CHO, CH_3 , C_2H_5 , OCH_3 hoặc OC_2H_5 ;

R_3 được chọn từ H, CH_3 , COCH_3 , COCF_3 , OCH_3 , SCH_3 , $\text{CH}_2\text{CH}=\text{CH}_2$, SO_2CH_3 , SO_2NHCH_3 , $\text{SO}_2\text{N}(\text{CH}_3)_2$, COOCH_3 , CONHCH_3 , $\text{CON}(\text{CH}_3)_2$, SNHCH_3 hoặc $\text{SN}(\text{CH}_3)_2$;

R_4 , R_5 có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, F, Cl, Br hoặc CH_3 ;

R_6 , R_7 là H;

R_8 là H;

R_9 là H;

R_{11} được chọn từ F, Cl, Br, I, CN, NO_2 , CH_3 , CF_3 , OCH_3 hoặc OCF_3 ;

n là số nguyên được chọn từ 0 đến 5, khi n bằng 0, vòng benzen là phenyl không được thế; khi n lớn hơn 1, R_{11} có thể giống nhau hoặc khác nhau;

$R_{23}, R_{24}, R_{25}, R_{26}$ có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, F, Cl, Br, I hoặc CH_3 ;

R_{27}, R_{28} có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, F, Cl, Br hoặc I;

W được chọn từ H, F, Cl, Br, I hoặc CH_3 ;

hoặc các muối được tạo ra từ các hợp chất có công thức chung được ưu tiên hơn nêu trên, với axit clohydric, axit sulfuric, axit phosphoric, axit formic, axit axetic, axit trifloaxetic, axit oxalic, axit metylsulfonic, axit *p*-toluensulfonic, axit benzoic, axit alizaric, axit maleic, axit fumaric, axit sorbic, axit malic hoặc axit xitric.

Trong số các hợp chất pyrazol được thế chứa pyrimidinyl của sáng chế, các hợp chất được ưu tiên nhất bao gồm các hợp chất có công thức chung I-1C, I-1F, I-1G, I-2C, I-2G, I-4C, I-4F hoặc I-4G:

trong đó

R_1 được chọn từ F, Cl, Br, I, CH_3 , C_2H_5 hoặc CHF_2 ;

R_2 được chọn từ F, Cl, Br, I, NO_2 , NH_2 , CHO, CH_3 hoặc OCH_3 ;

R_3 được chọn từ H, CH_3 , $COCH_3$, OCH_3 , $CH_2CH=CH_2$, SO_2CH_3 , $COOCH_3$, $CONHCH_3$, $CON(CH_3)_2$ hoặc $SN(CH_3)_2$;

R_4, R_5 có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H hoặc CH_3 ;

R_6, R_7 là H;

R_8 là H;

R_9 là H;

R_{11} được chọn từ F, Cl, Br, I, CN, NO_2 , CH_3 , CF_3 , OCH_3 hoặc OCF_3 ;

n là số nguyên được chọn từ 1 đến 5, khi n lớn hơn 1, R_{11} có thể giống nhau hoặc khác nhau;

$R_{23}, R_{24}, R_{25}, R_{26}$ là H;

R_{27} là H;

R_{28} là H;

W được chọn từ H, F, Cl, Br hoặc I;

Hoặc các muối được tạo ra từ các hợp chất có công thức chung được ưu tiên nhất trên đây, với axit clohydric, axit sulfuric, axit phosphoric, axit formic, axit axetic, axit trifloaxetic, axit oxalic, axit metylsulfonic, axit *p*-toluensulfonic, axit benzoic, axit alizaric, axit maleic, axit fumaric, axit sorbic, axit malic hoặc axit xitric.

Các thuật ngữ được sử dụng trên đây để xác định các hợp chất có công thức chung I được định nghĩa như sau:

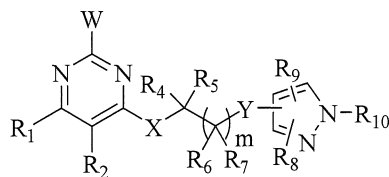
Thuật ngữ “halogen” hoặc “halo” là flo, clo, brom hoặc iot. Thuật ngữ “alkyl” để chỉ nhóm alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh, như metyl, etyl, propyl, isopropyl hoặc *tert*-butyl. Thuật ngữ “xycloalkyl” để chỉ alkyl vòng được thế hoặc không được thế, như xyclopropyl, xyclopentyl hoặc xyclohexyl. (Các) nhóm thế là metyl, halogen, v.v.. Thuật ngữ “haloalkyl” để chỉ nhóm alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh, trong đó các nguyên tử hydro có thể được thế hoàn toàn hoặc một phần bằng halogen, như clometyl, diclometyl, triclometyl, flometyl, diflometyl, triflometyl, v.v.. Thuật ngữ “alkylsulfinyl” để chỉ nhóm alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh được liên kết với cấu trúc bằng nhóm (-SO-), như metylsulfinyl. Thuật ngữ “haloalkylsulfinyl” để chỉ nhóm alkylsulfinyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh, trong đó các nguyên tử hydro có thể được thế hoàn toàn hoặc một phần bằng halogen. Thuật ngữ “haloalkylsulfonyl” để chỉ nhóm alkylsulfonyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh, trong đó các nguyên tử hydro có thể được thế hoàn toàn hoặc một phần bằng halogen. Thuật ngữ “alkylaminothio” để chỉ nhóm -SNHCH₃, -SNHC₂H₅. Thuật ngữ “dialkylaminothio” để chỉ nhóm -SN(CH₃)₂, -SN(C₂H₅)₂. Thuật ngữ “alkylaminosulfonyl” để chỉ nhóm alkyl-NH-SO₂-. Thuật ngữ “dialkylaminosulfonyl” để chỉ nhóm (alkyl)₂-N-SO₂-. Thuật ngữ “alkylsulfonylaminocacbonyl” để chỉ nhóm alkyl-SO₂-NH-CO-. Thuật ngữ “alkylcacbonylaminosulfonyl” để chỉ nhóm alkyl-CO-NH-SO₂-. Thuật ngữ “alkylcacbonylalkyl” để chỉ nhóm alkyl-CO-alkyl-. Thuật ngữ “alkylsulfonyloxy” như nhóm alkyl-S(O)₂-O-. Thuật ngữ “haloalkylsulfonyloxy” để chỉ nhóm trong đó các nguyên tử hydro có thể được thế hoàn toàn hoặc một phần bằng halogen, như CF₃-SO₂-O-. Thuật ngữ “xycloalkyloxycacbonyl” để chỉ nhóm xyclopropyloxycacbonyl, xyclohexyloxycacbonyl, v.v.. Thuật ngữ “alkoxy” để chỉ nhóm alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh, được liên kết với cấu trúc bằng nguyên tử oxy.

Thuật ngữ “haloalkoxy” để chỉ nhóm alkoxy mạch thẳng hoặc mạch nhánh, trong đó các nguyên tử hydro có thể được thế hoàn toàn hoặc một phần bằng halogen, như clometoxy, diclometoxy, triclometoxy, flometoxy, diflometoxy, triflometoxy, cloflometoxy, trifloetoxi, v.v.. Thuật ngữ “haloalkoxycarbonyl” để chỉ nhóm alkoxycarbonyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh, trong đó các nguyên tử hydro có thể được thế hoàn toàn hoặc một phần bằng halogen, như $\text{ClCH}_2\text{CH}_2\text{OCO}$, $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{OCO}$ -, v.v.. Thuật ngữ “alkoxyalkyl” để chỉ nhóm alkyl-O-alkyl-, như $-\text{CH}_2\text{OCH}_3$. Thuật ngữ “haloalkoxyalkyl” để chỉ nhóm alkoxyalkyl, trong đó các nguyên tử hydro có thể được thế hoàn toàn hoặc một phần bằng halogen, như $-\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{Cl}$, $-\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CF}_3$, v.v.. Thuật ngữ “alkoxycarbonylalkyl” để chỉ nhóm alkoxycarbonyl-alkyl-, như $-\text{CH}_2\text{COOCH}_3$. Thuật ngữ “haloalkoxycarbonylalkyl” để chỉ nhóm alkoxycarbonylalkyl, trong đó các nguyên tử hydro của nhóm alkoxycarbonyl có thể được thế hoàn toàn hoặc một phần bằng halogen, như $-\text{CH}_2\text{COOCH}_2\text{CF}_3$. Thuật ngữ “alkylcarbonyloxy” như nhóm $-\text{OCOCH}_3$, v.v.. Thuật ngữ “haloalkylcarbonyloxy” để chỉ nhóm alkylcarbonyloxy, trong đó các nguyên tử hydro có thể được thế hoàn toàn hoặc một phần bằng halogen, như $-\text{OCOCF}_3$, v.v.. Thuật ngữ “alkoxycarbonyloxy” để chỉ nhóm alkoxycarbonyl-oxy, như $-\text{OCOOCH}_3$. Thuật ngữ “haloalkoxycarbonyloxy” để chỉ nhóm alkoxycarbonyloxy, trong đó các nguyên tử hydro có thể được thế hoàn toàn hoặc một phần bằng halogen, như $-\text{OCOOCF}_3$. Thuật ngữ “alkylthiocarbonylalkyl” để chỉ nhóm alkylthiocarbonyl-alkyl-, như $-\text{CH}_2\text{COSCH}_3$. Thuật ngữ “haloalkylthiocarbonylalkyl” để chỉ nhóm alkylthiocarbonylalkyl, trong đó các nguyên tử hydro có thể được thế hoàn toàn hoặc một phần bằng halogen, như $-\text{CH}_2\text{COSCH}_2\text{CF}_3$. Thuật ngữ “alkoxyalkoxy” để chỉ nhóm $-\text{OCH}_2\text{OCH}_3$, v.v.. Thuật ngữ “haloalkoxyalkoxy” để chỉ nhóm alkoxyalkoxy, trong đó các nguyên tử hydro có thể được thế hoàn toàn hoặc một phần bằng halogen, như nhóm $-\text{OCH}_2\text{OCF}_3$. Thuật ngữ “alkoxyalkoxycarbonyl” như nhóm $-\text{COOCH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_3$, v.v.. Thuật ngữ “alkylthio” để chỉ nhóm alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh, nhóm này được liên kết với cấu trúc bằng nguyên tử lưu huỳnh. Thuật ngữ “haloalkylthio” để chỉ nhóm alkylthio mạch thẳng hoặc mạch nhánh, trong đó các nguyên tử hydro có thể được thế hoàn toàn hoặc một phần bằng halogen, như clometylthio, diclometylthio, triclometylthio, flometylthio, diflometylthio, triflometylthio, cloflometylthio, v.v.. Thuật ngữ “alkylthioalkyl” để chỉ

nhóm alkyl-S-alkyl-, như $-\text{CH}_2\text{SCH}_3$. Thuật ngữ “haloalkylthioalkyl” để chỉ nhóm alkylthioalkyl, trong đó các nguyên tử hydro có thể được thế hoàn toàn hoặc một phần bằng halogen, như $-\text{CH}_2\text{SCH}_2\text{CH}_2\text{Cl}$, $-\text{CH}_2\text{SCH}_2\text{CF}_3$. Thuật ngữ “alkylamino” để chỉ nhóm alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh, nhóm này được liên kết với cấu trúc bằng nguyên tử nitơ. Thuật ngữ “haloalkylamino” để chỉ nhóm alkylamino mạch thẳng hoặc mạch nhánh, trong đó các nguyên tử hydro có thể được thế hoàn toàn hoặc một phần bằng halogen. Thuật ngữ “dialkylamino” như nhóm $-\text{N}(\text{CH}_3)_2$, $-\text{N}(\text{CH}_3\text{CH}_2)_2$. Thuật ngữ “dihaloalkylamino” để chỉ nhóm dialkylamino, trong đó các nguyên tử hydro có thể được thế hoàn toàn hoặc một phần bằng halogen, như nhóm $-\text{N}(\text{CF}_3)_2$, $-\text{N}(\text{CH}_2\text{CF}_3)_2$. Thuật ngữ “alkenyl” để chỉ nhóm alkenyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh, như etenyl, 1-propenyl, 2-propenyl và chất đồng phân khác của butenyl, pentenyl và hexenyl. Nhóm alkenyl còn bao gồm polyen, như propa-1,2-dienyl và hexa-2,4-dienyl. Thuật ngữ “haloalkenyl” để chỉ nhóm alkenyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh, trong đó các nguyên tử hydro có thể được thế hoàn toàn hoặc một phần bằng halogen. Thuật ngữ “alkenoxyl” để chỉ nhóm alkenyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh được liên kết với cấu trúc bằng nguyên tử oxy. Thuật ngữ “haloalkenoxyl” để chỉ nhóm alkenoxyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh, trong đó các nguyên tử hydro có thể được thế hoàn toàn hoặc một phần bằng halogen. Thuật ngữ “alkenylthio” để chỉ nhóm alkenyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh, nhóm này được liên kết với cấu trúc bằng nguyên tử lưu huỳnh như nhóm $-\text{SCH}_2\text{CH}=\text{CH}_2$. Thuật ngữ “alkenoxylcacbonyl” để chỉ nhóm $\text{CH}_2=\text{CHCH}_2\text{OCO}-$, v.v.. Thuật ngữ “alkynyl” để chỉ nhóm alkynyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh, như etynyl, 1-propynyl, 2-propynyl và chất đồng phân khác của butynyl, pentynyl và hexynyl. Thuật ngữ alkynyl cũng bao gồm các nhóm có nhiều hơn một liên kết ba, như hexa-2,5-diynyl. Thuật ngữ “haloalkynyl” để chỉ nhóm alkynyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh, trong đó các nguyên tử hydro có thể được thế hoàn toàn hoặc một phần bằng halogen. Thuật ngữ “alkynoxyl” để chỉ các nhóm alkyn mạch thẳng hoặc mạch nhánh được liên kết với cấu trúc bằng nguyên tử oxy. Thuật ngữ “haloalkynoxyl” để chỉ nhóm alkynoxyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh, trong đó các nguyên tử hydro có thể được thế hoàn toàn hoặc một phần bằng halogen. Thuật ngữ “alkynoxylcacbonyl” để chỉ nhóm $-\text{COOCH}_2\text{C}\equiv\text{CH}$, v.v.. Thuật ngữ “alkylsulfonyl” để chỉ nhóm alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh, nhóm này được liên kết với cấu trúc bằng nhóm $(-\text{SO}_2-)$, như metylsulfonyl.

Thuật ngữ “haloalkylsulfonyl” để chỉ nhóm alkylsulfonyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh, trong đó các nguyên tử hydro có thể được thế hoàn toàn hoặc một phần bằng halogen. Thuật ngữ “alkylcacbonyl” để chỉ nhóm alkyl được liên kết với cấu trúc bằng nhóm cacbonyl, như nhóm $-\text{COCH}_3$, $-\text{COCH}_2\text{CH}_3$. Thuật ngữ “haloalkylcacbonyl” để chỉ nhóm alkylcacbonyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh, trong đó các nguyên tử hydro có thể được thế hoàn toàn hoặc một phần bằng halogen, như nhóm $-\text{COCF}_3$. Thuật ngữ “alkoxycarbonyl” để chỉ nhóm alkoxy được liên kết với cấu trúc bằng nhóm cacbonyl, như nhóm $-\text{COOCH}_3$, $-\text{COOCH}_2\text{CH}_3$. Thuật ngữ “aminocarbonyl” như nhóm $\text{NH}_2\text{CO}-$. Thuật ngữ “alkylaminocarbonyl” để chỉ nhóm alkyl-NH-CO-, như nhóm $-\text{CONHCH}_3$, $-\text{CONHCH}_2\text{CH}_3$. Thuật ngữ “dialkylaminocarbonyl” như nhóm $-\text{CON}(\text{CH}_3)_2$, $-\text{CON}(\text{CH}_2\text{CH}_3)_2$. Thuật ngữ “aryl” trong nhóm (hetero)aryl, (hetero)aryllalkyl, (hetero)arylcacbonyl, (hetero) arylmetylcacbonyl, (hetero)arylcacbonylalkyl, (hetero)aryloxycacbonyl, (hetero)arylalkyloxycacbonyl bao gồm phenyl hoặc naphtyl v.v.. Thuật ngữ “heteroaryl” để chỉ vòng có 5 cạnh hoặc vòng có 6 cạnh chứa một hoặc nhiều nguyên tử khác loại N, O, S như furyl, pyrazolyl, thiazolyl, pyridinyl, pyrimidinyl, pyrazinyl, pyridazinyl, triazinyl, quinolinyl, v.v.. Thuật ngữ “(hetero)aryl” để chỉ nhóm phenyl, v.v.. Thuật ngữ “(hetero)aryllalkyl” để chỉ nhóm benzyl, phenyletyl, 4-clobenzyl, 2-clo-pyridin-5-ylmetyl, 2-clo-thiazol-5-ylmetyl, v.v.. Thuật ngữ “(hetero)arylcacbonyl” để chỉ nhóm benzoyl, 4-Cl-benzoyl, v.v.. Thuật ngữ “(hetero)arylmetylcacbonyl” để chỉ nhóm $\text{PhCH}_2\text{CO}-$. Thuật ngữ “(hetero)arylcacbonylalkyl” để chỉ nhóm PhCOCH_2- . Thuật ngữ “(hetero)aryloxycacbonyl” như nhóm phenoxycacbonyl, *p*-clophenoxycacbonyl, *p*-nitrophenoxycacbonyl, naphtyloxycacbonyl, v.v.. Thuật ngữ arylalkyloxycacbonyl để chỉ nhóm benzyloxycacbonyl, *p*-clobenzyloxycacbonyl, *p*-triflometylbenzyloxycacbonyl, v.v.. Thuật ngữ “(hetero)arylalkyloxycacbonyl” để chỉ nhóm $-\text{COOCH}_2\text{Ph}$, $-\text{COOCH}_2-4\text{-Cl-Ph}$, v.v..

Trong công thức chung I, một số nhóm thế được ưu tiên của R_1 , R_2 , $\text{R}_3(\text{X}=\text{NR}_3)$, $\text{R}_4(\text{R}_5)$, $\text{R}_6(\text{R}_7)$, R_8 , R_9 , R_{10} và w được liệt kê riêng rẽ trong bảng 1, bảng 2, bảng 3, bảng 4, bảng 5, bảng 6, bảng 7, bảng 8 và bảng 9, nhưng không bị giới hạn bởi các nhóm trong bảng này.



I

Bảng 1: các nhóm thế R_1

R_1	R_1	R_1	R_1
H	F	Cl	Br
I	CH ₃	C ₂ H ₅	<i>n</i> -C ₃ H ₇
<i>i</i> -C ₃ H ₇	<i>n</i> -C ₄ H ₉	<i>s</i> -C ₄ H ₉	<i>i</i> -C ₄ H ₉
<i>t</i> -C ₄ H ₉	CF ₃	CCl ₃	CHF ₂
CH ₂ Cl	CHBr ₂	CF ₃ CH ₂	CH(CH ₃)F
CH(CH ₃)Cl	CH(CH ₃)Br	C(CH ₃) ₂ F	CH=CH ₂
C≡CH	SCH ₃	SOCH ₃	SO ₂ CH ₃
CN	NO ₂	NH ₂	COOH
COOCH ₃	COOC ₂ H ₅	CH ₃ NH	C ₂ H ₅ NH
OCH ₃	OC ₂ H ₅	OCF ₃	OCH ₂ CH=CH ₂
OCH ₂ CH=CHCl	OCH ₂ C≡CH	OCH ₂ C≡C-I	OCH ₂ C≡CCH ₃
CONH ₂	CONHCH ₃	CON(CH ₃) ₂	NHCH ₃
NHC ₂ H ₅	N(CH ₃) ₂	N(C ₂ H ₅) ₂	CH ₂ OCH ₃
CH ₂ OCH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₂ OCH ₃	CH ₂ CH ₂ OCH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₂ CH ₂ OCH ₃
CH ₂ CH ₂ CH ₂ OCH ₂ CH ₃			

Bảng 2: các nhóm thế R_2

R_2	R_2	R_2	R_2
H	F	Cl	Br
I	CN	NO ₂	NH ₂
CHO	CH ₃	C ₂ H ₅	<i>n</i> -C ₃ H ₇
<i>i</i> -C ₃ H ₇	<i>n</i> -C ₄ H ₉	<i>s</i> -C ₄ H ₉	<i>i</i> -C ₄ H ₉
<i>t</i> -C ₄ H ₉	OCH ₃	OC ₂ H ₅	OC ₃ H ₇ - <i>n</i>
OC ₃ H ₇ - <i>i</i>	OC ₄ H ₉ - <i>n</i>	OC ₄ H ₉ - <i>i</i>	OC ₄ H ₉ - <i>t</i>

OCH ₂ F	OCHF ₂	OCF ₃	OCH ₂ CF ₃
--------------------	-------------------	------------------	----------------------------------

Bảng 3: các nhóm thế R₃

R ₃	R ₃	R ₃	R ₃
H	OH	-C(=O)H	CBr ₃
CH ₃	C ₂ H ₅	<i>n</i> -C ₃ H ₇	<i>i</i> -C ₃ H ₇
<i>n</i> -C ₄ H ₉	<i>i</i> -C ₄ H ₉	<i>t</i> -C ₄ H ₉	CCl ₃
CH ₂ Br	CHF ₂	CHBr ₂	CF ₃
CH ₂ Cl	CHCl ₂	CCl ₃	CH ₂ F
OCH ₃	OC ₂ H ₅	OCH(CH ₃) ₂	OC(CH ₃) ₃
OCF ₃	OCH ₂ CF ₃	OCH ₂ F	OCHF ₂
SCH ₃	SC ₂ H ₅	SCH ₂ CH=CH ₂	CH=CH ₂
CH ₂ CH=CH ₂	CH ₂ CH=CCl ₂	C≡CH	CH ₂ C≡CH
CH ₂ C≡C-I	CH ₂ OCH ₃	CH ₂ OCH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₂ OCH ₃
CH ₂ CH ₂ OCH ₂ CH ₃	CH ₂ OCH ₂ Cl	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ Cl	CH ₂ CH ₂ OCH ₂ Cl
CH ₂ SCH ₃	CH ₂ SCH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₂ SCH ₃	CH ₂ CH ₂ SCH ₂ CH ₃
CH ₂ SCH ₂ Cl	CH ₂ SCH ₂ CH ₂ Cl	CH ₂ CH ₂ SCH ₂ Cl	SOCH ₃
SOC ₂ H ₅	SOCF ₃	SOCH ₂ CF ₃	SO ₂ CH ₃
SO ₂ C ₂ H ₅	SO ₂ CF ₃	SO ₂ CH ₂ CF ₃	SO ₂ NHCOCH ₃
SO ₂ NHCH ₃	SO ₂ N(CH ₃) ₃	CONHSO ₂ CH ₃	COCH ₃
COC ₂ H ₅	CO- <i>n</i> -C ₃ H ₇	CO- <i>i</i> -C ₃ H ₇	CO- <i>n</i> -C ₄ H ₉
CO- <i>i</i> -C ₄ H ₉	CO- <i>t</i> -C ₄ H ₉	COCF ₃	COCH ₂ Cl
COOCH ₃	COOC ₂ H ₅	COO- <i>n</i> -C ₃ H ₇	COO- <i>t</i> -C ₄ H ₉
COOCF ₃	COOCH ₂ CH ₂ Cl	COOCH ₂ CF ₃	CH ₂ COOCH ₃
CH ₂ COOC ₂ H ₅	CH ₂ COCH ₃	CH ₂ COC ₂ H ₅	CONHCH ₃
CONHC ₂ H ₅	CONH- <i>t</i> -C ₄ H ₉	CON(CH ₃) ₂	CON(C ₂ H ₅) ₂
COOCH ₂ CH=CH ₂	COOCH ₂ C≡CH	COOCH ₂ OCH ₃	COOCH ₂ CH ₂ OCH ₃
SNHCH ₃	SNHC ₂ H ₅	SN(CH ₃) ₂	SN(C ₂ H ₅) ₂
			
CO-O- 	CO-O- 	CO-O- 	CO-O- 

Bảng 4: các nhóm thế $R_4(R_5)$

$R_4(R_5)$	$R_4(R_5)$	$R_4(R_5)$	$R_4(R_5)$
H	F	Cl	Br
I	CH ₃	C ₂ H ₅	<i>n</i> -C ₃ H ₇
<i>i</i> -C ₃ H ₇	<i>n</i> -C ₄ H ₉	<i>s</i> -C ₄ H ₉	<i>i</i> -C ₄ H ₉
<i>t</i> -C ₄ H ₉	CF ₃	CCl ₃	CHF ₂
CH ₂ Cl	CHBr ₂	CF ₃ CH ₂	CH(CH ₃)F
CH(CH ₃)Cl	CH(CH ₃)Br	C(CH ₃) ₂ F	OCH ₃
OC ₂ H ₅	<i>n</i> -C ₃ H ₇ O	<i>i</i> -C ₃ H ₇ O	<i>n</i> -C ₄ H ₉ O
<i>s</i> -C ₄ H ₉ O	<i>i</i> -C ₄ H ₉ O	<i>t</i> -C ₄ H ₉ O	OCF ₃
OCH ₂ CF ₃			
CR₄R₅			

Bảng 5: các nhóm thế $R_6(R_7)$

$R_6(R_7)$	$R_6(R_7)$	$R_6(R_7)$	$R_6(R_7)$
H	F	Cl	Br
I	CH ₃	C ₂ H ₅	<i>n</i> -C ₃ H ₇
<i>i</i> -C ₃ H ₇	<i>n</i> -C ₄ H ₉	<i>s</i> -C ₄ H ₉	<i>i</i> -C ₄ H ₉
<i>t</i> -C ₄ H ₉	CF ₃	CCl ₃	CHF ₂
CH ₂ Cl	CHBr ₂	CF ₃ CH ₂	CH(CH ₃)F
CH(CH ₃)Cl	CH(CH ₃)Br	C(CH ₃) ₂ F	OCH ₃
OC ₂ H ₅	<i>n</i> -C ₃ H ₇ O	<i>i</i> -C ₃ H ₇ O	<i>n</i> -C ₄ H ₉ O
<i>s</i> -C ₄ H ₉ O	<i>i</i> -C ₄ H ₉ O	<i>t</i> -C ₄ H ₉ O	OCF ₃
OCH ₂ CF ₃			
CR₆R₇			
			

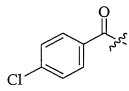
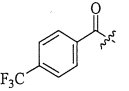
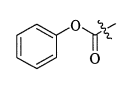
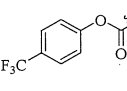
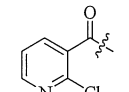
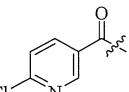
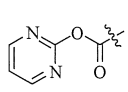
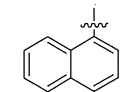
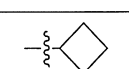
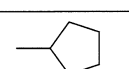
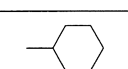
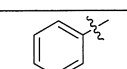
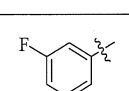
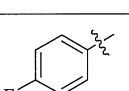
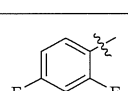
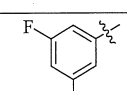
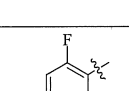
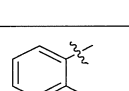
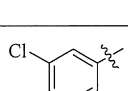
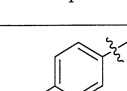
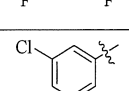
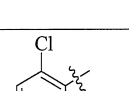
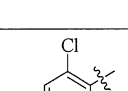
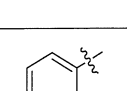
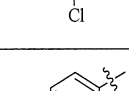
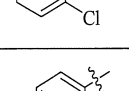
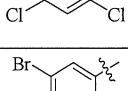
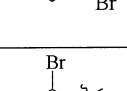
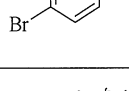
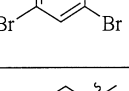
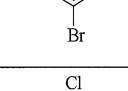
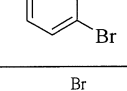
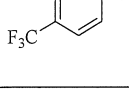
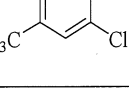
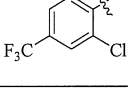
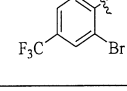
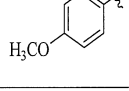
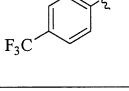
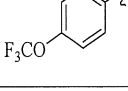
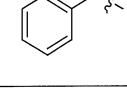
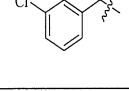
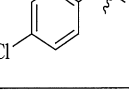
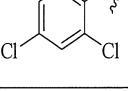
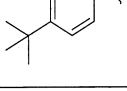
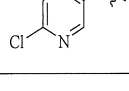
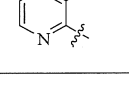
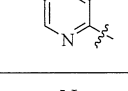
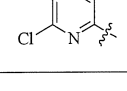
Bảng 6: các nhóm thế R_8

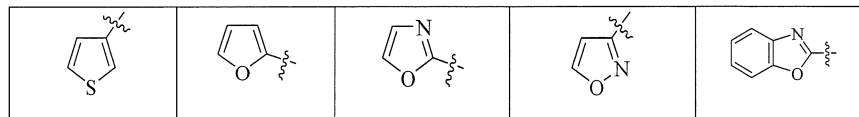
R_8	R_8	R_8	R_8
H	CN	CH ₃	C ₂ H ₅
<i>n</i> -C ₃ H ₇	<i>i</i> -C ₃ H ₇	<i>n</i> -C ₄ H ₉	<i>s</i> -C ₄ H ₉
<i>i</i> -C ₄ H ₉	<i>t</i> -C ₄ H ₉	CF ₃	CCl ₃
CHF ₂	CH ₂ F	CH ₂ Cl	CH ₂ CF ₃
CF ₂ CF ₃	COOCH ₃	Ph	Ph-4-Cl

Bảng 7: các nhóm thế R_9

R_9	R_9	R_9	R_9
H	CN	CH ₃	C ₂ H ₅
<i>n</i> -C ₃ H ₇	<i>i</i> -C ₃ H ₇	<i>n</i> -C ₄ H ₉	<i>s</i> -C ₄ H ₉
<i>i</i> -C ₄ H ₉	<i>t</i> -C ₄ H ₉	CF ₃	CCl ₃
CHF ₂	CH ₂ F	CH ₂ Cl	CH ₂ CF ₃
CF ₂ CF ₃	COOCH ₃	Ph	Ph-4-Cl

Bảng 8: các nhóm thế R₁₀

R ₁₀	R ₁₀	R ₁₀	R ₁₀	R ₁₀
CH ₃	Et	n-Pr	i-Pr	n-Bu
i-Bu	s-Bu	t-Bu	CH ₂ F	CHF ₂
CF ₃	CH ₂ CF ₃	COCH ₃	COEt	CO-n-Pr
CO- n-Bu	CO-t-Bu	COCF ₃	CO ₂ CH ₃	CO ₂ Et
CO ₂ -n-Pr	CO ₂ - i-Pr	CO ₂ -t-Bu	CO ₂ CH ₂ CF ₃	CH ₂ OCH ₃
				
				
				
				
				
				
				
				
				
				
				
				

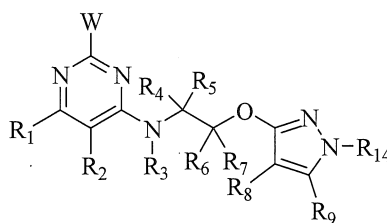


Bảng 9: các nhóm thế W

W	W	W	W	W
H	<i>i</i> -C ₃ H ₇	CHF ₂	OCH ₃	SCH ₃
F	<i>n</i> -C ₄ H ₉	CHBr ₂	OC ₂ H ₅	SC ₂ H ₅
Cl	<i>i</i> -C ₄ H ₉	CF ₃	OC ₃ H _{7-n}	SC ₃ H _{7-n}
Br	CH ₃	CH(CH ₃)F	OC ₃ H _{7-i}	SC ₃ H _{7-i}
I	C ₂ H ₅	CH(CH ₃)Cl	OC ₄ H _{9-n}	SC ₄ H _{9-n}
	CHCl ₂	CH(CH ₃)Br	OC ₄ H _{9-i}	SC ₄ H _{9-i}
	CCl ₃	CH(<i>n</i> -C ₄ H ₉)F	OC ₄ H _{9-t}	SC ₄ H _{9-t}
		C(CH ₃) ₂ F	OCF ₃	SO ₂ CH ₃
		<i>n</i> -C ₃ H ₇	OCH ₂ CF ₃	<i>t</i> -C ₄ H ₉

Trong công thức chung I, một số hợp chất theo sáng chế hợp chất cũng được giải thích bằng các hợp chất được liệt kê trong các bảng từ 10 đến 128 sau đây mà không bị giới hạn bởi các hợp chất trong bảng này. Trong công thức chung I-1A, I-1B, I-1C, I-1D, I-1E, I-1F, I-1G, I-1H, I-1I, I-1J, I-1K, I-1L, I-1M, I-1N, I-2A, I-2B, I-2C, I-2D, I-2E, I-2F, I-2G, I-3A, I-3B, I-3C, I-3D, I-3E, I-3F hoặc I-3G, W=R₆=R₇=R₈=R₉=R₂₃=R₂₄=R₂₅=R₂₆=R₂₇=H.

Trong công thức chung I-1A,

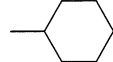


I-1A

R₁=Cl, R₂=Cl, R₃=R₄=R₅=H, các nhóm thế R₁₄ được thể hiện trong bảng 10, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 10-1 đến 10-15.

Bảng 10

Hợp chất số	R ₁₄	Hợp chất số	R ₁₄	Hợp chất số	R ₁₄
-------------	-----------------	-------------	-----------------	-------------	-----------------

10-1	CH ₃	10-2	C ₂ H ₅	10-3	<i>n</i> -C ₃ H ₇
10-4	<i>i</i> -C ₃ H ₇	10-5	<i>n</i> -C ₄ H ₉	10-6	<i>s</i> -C ₄ H ₉
10-7	<i>i</i> -C ₄ H ₉	10-8	<i>t</i> -C ₄ H ₉	10-9	CF ₃
10-10	CH ₂ CF ₃	10-11	CF ₂ CF ₃	10-12	
10-13		10-14		10-15	

Bảng 11: trong công thức chung I-IA, R₁=CH₃, R₂=Cl, R₃=R₄=R₅=H, các nhóm thế R₁₄ là giống như các nhóm thế trong bảng 10 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 10-1 đến 10-15 trong bảng 10, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 11-1 đến 11-15.

Bảng 12: trong công thức chung I-IA, R₁=C₂H₅, R₂=Cl, R₃=R₄=R₅=H, các nhóm thế R₁₄ là giống như các nhóm thế trong bảng 10 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 10-1 đến 10-15 trong bảng 10, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 12-1 đến 12-15.

Bảng 13: trong công thức chung I-IA, R₁=CHF₂, R₂=Cl, R₃=R₄=R₅=H, các nhóm thế R₁₄ là giống như các nhóm thế trong bảng 10 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 10-1 đến 10-15 trong bảng 10, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 13-1 đến 13-15.

Bảng 14: trong công thức chung I-IA, R₁=CF₃, R₂=Cl, R₃=R₄=R₅=H, các nhóm thế R₁₄ là giống như các nhóm thế trong bảng 10 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 10-1 đến 10-15 trong bảng 10, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 14-1 đến 14-15.

Bảng 15: trong công thức chung I-IA, R₁=Cl, R₂=Cl, R₃=R₄=H, R₅=CH₃, các nhóm thế R₁₄ là giống như các nhóm thế trong bảng 10 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 10-1 đến 10-15 trong bảng 10, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 15-1 đến 15-15.

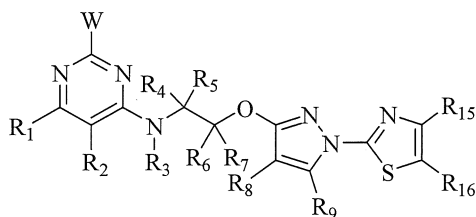
Bảng 16: trong công thức chung I-IA, R₁=CH₃, R₂=Cl, R₃=R₄=H, R₅=CH₃, các nhóm thế R₁₄ là giống như các nhóm thế trong bảng 10 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 10-1 đến 10-15 trong bảng 10, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 16-1 đến 16-15.

Bảng 17: trong công thức chung I-IA, R₁=C₂H₅, R₂=Cl, R₃=R₄=H, R₅=CH₃, các nhóm thế R₁₄ là giống như các nhóm thế trong bảng 10 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 10-1 đến 10-15 trong bảng 10, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 17-1 đến 17-15.

Bảng 18: trong công thức chung I-IA, $R_1=CHF_2$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=H$, $R_5=CH_3$, các nhóm thế R_{14} là giống như các nhóm thế trong bảng 10 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 10-1 đến 10-15 trong bảng 10, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 18-1 đến 18-15.

Bảng 19: trong công thức chung I-IA, $R_1=CF_3$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=H$, $R_5=CH_3$, các nhóm thế R_{14} là giống như các nhóm thế trong bảng 10 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 10-1 đến 10-15 trong bảng 10, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 19-1 đến 19-15.

Trong công thức chung I-IB,



I-IB

$R_1=Cl$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm thế R_{15} và R_{16} được thể hiện trong Bảng 20, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 20-1 đến 20-10.

Bảng 20

Hợp chất số	R_{15}	R_{16}
20-1	H	H
20-2	H	Br
20-3	H	CH_3
20-4	H	NO_2
20-5	H	CN
20-6	H	CF_3
20-7	Cl	H
20-8	CH_3	H
20-9	CF_3	H
20-10	CF_3	CO_2CH_3

Bảng 21: trong công thức chung I-IB, $R_1=CH_3$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm

thế R_{15} và R_{16} là giống như các nhóm thế trong bảng 20 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 20-1 đến 20-10 trong bảng 20, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 21-1 đến 21-10.

Bảng 22: trong công thức chung I-IB, $R_1=C_2H_5$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm thế R_{15} và R_{16} là giống như các nhóm thế trong bảng 20 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 20-1 đến 20-10 trong bảng 20, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 22-1 đến 22-10.

Bảng 23: trong công thức chung I-IB, $R_1=CHF_2$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm thế R_{15} và R_{16} là giống như các nhóm thế trong bảng 20 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 20-1 đến 20-10 trong bảng 20, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 23-1 đến 23-10.

Bảng 24: trong công thức chung I-IB, $R_1=CF_3$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm thế R_{15} và R_{16} là giống như các nhóm thế trong bảng 20 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 20-1 đến 20-10 trong bảng 20, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 24-1 đến 24-10.

Bảng 25: trong công thức chung I-IB, $R_1=Cl$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=H$, $R_5=CH_3$, các nhóm thế R_{15} và R_{16} là giống như các nhóm thế trong bảng 20 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 20-1 đến 20-10 trong bảng 20, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 25-1 đến 25-10.

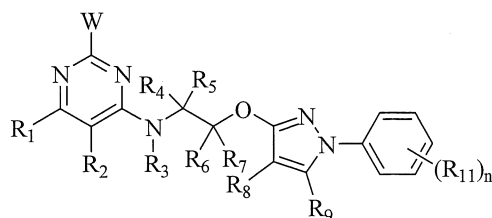
Bảng 26: trong công thức chung I-IB, $R_1=CH_3$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=H$, $R_5=CH_3$, các nhóm thế R_{15} và R_{16} là giống như các nhóm thế trong bảng 20 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 20-1 đến 20-10 trong bảng 20, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 26-1 đến 26-10.

Bảng 27: trong công thức chung I-IB, $R_1=C_2H_5$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=H$, $R_5=CH_3$, các nhóm thế R_{15} và R_{16} là giống như các nhóm thế trong bảng 20 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 20-1 đến 20-10 trong bảng 20, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 27-1 đến 27-10.

Bảng 28: trong công thức chung I-IB, $R_1=CHF_2$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=H$, $R_5=CH_3$, các nhóm thế R_{15} và R_{16} là giống như các nhóm thế trong bảng 20 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 20-1 đến 20-10 trong bảng 20, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 28-1 đến 28-10.

Bảng 29: trong công thức chung I-IB, $R_1=CF_3$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=H$, $R_5=CH_3$, các nhóm thế R_{15} và R_{16} là giống như các nhóm thế trong bảng 20 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 20-1 đến 20-10 trong bảng 20, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 29-1 đến 29-10.

Trong công thức chung I-IC,



I-IC

$R_1=Cl$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ được thể hiện trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 30-1 đến 30-279.

Bảng 30

Hợp chất số	$(R_{11})_n$	Hợp chất số	$(R_{11})_n$	Hợp chất số	$(R_{11})_n$
30-1	H	30-2	2-F	30-3	3-F
30-4	4-F	30-5	2,3-2F	30-6	2,4-2F
30-7	2,5-2F	30-8	2,6-2F	30-9	3,4-2F
30-10	3,5-2F	30-11	2,3,4-3F	30-12	2,3,5-3F
30-13	2,4,5-3F	30-14	2,3,6-3F	30-15	2,4,6-3F
30-16	3,4,5-3F	30-17	2-Cl	30-18	3-Cl
30-19	4-Cl	30-20	2,3-2Cl	30-21	2,4-2Cl
30-22	2,5-2Cl	30-23	2,6-2Cl	30-24	3,4-2Cl
30-25	3,5-2Cl	30-26	2,3,4-3Cl	30-27	2,3,5-3Cl
30-28	2,4,5-3Cl	30-29	2,3,6-3Cl	30-30	2,4,6-3Cl
30-31	3,4,5-3Cl	30-32	2-Br	30-33	3-Br
30-34	4-Br	30-35	2,3-Br	30-36	2,4-2Br
30-37	2,5-2Br	30-38	2,6-2Br	30-39	3,4-2Br
30-40	3,5-2Br	30-41	2,3,4-3Br	30-42	2,3,5-3Br
30-43	2,4,5-3Br	30-44	2,3,6-3Br	30-45	2,4,6-3Br
30-46	3,4,5-3Br	30-47	2-CN	30-48	3-CN
30-49	4-CN	30-50	2-NO ₂	30-51	3-NO ₂
30-52	4-NO ₂	30-53	2,4-2NO ₂	30-54	2,4,6-3NO ₂

30-55	2-CH ₃	30-56	3-CH ₃	30-57	4-CH ₃
30-58	2,3-2CH ₃	30-59	2,4-2CH ₃	30-60	2,5-2CH ₃
30-61	2,6-2CH ₃	30-62	3,4-2CH ₃	30-63	3,5-2CH ₃
30-64	2-C ₂ H ₅	30-65	3-C ₂ H ₅	30-66	4-C ₂ H ₅
30-67	2-CF ₃	30-68	3-CF ₃	30-69	4-CF ₃
30-70	2-OCH ₃	30-71	3-OCH ₃	30-72	4-OCH ₃
30-73	2-SCH ₃	30-74	3-SCH ₃	30-75	4-SCH ₃
30-76	2-OCF ₃	30-77	3-OCF ₃	30-78	4-OCF ₃
30-79	2-SCF ₃	30-80	3-SCF ₃	30-81	4-SCF ₃
30-82	2-OC ₂ H ₅	30-83	3-OC ₂ H ₅	30-84	4-OC ₂ H ₅
30-85	2-NHCH ₃	30-86	3-NHCH ₃	30-87	4-NHCH ₃
30-88	2-N(CH ₃) ₂	30-89	3-N(CH ₃) ₂	30-90	4-N(CH ₃) ₂
30-91	2-COCH ₃	30-92	3-COCH ₃	30-93	4-COCH ₃
30-94	2-COC ₂ H ₅	30-95	3-COC ₂ H ₅	30-96	4-COC ₂ H ₅
30-97	2-SO ₂ CH ₃	30-98	3-SO ₂ CH ₃	30-99	4-SO ₂ CH ₃
30-100	2-OCHF ₂	30-101	3-OCHF ₂	30-102	4-OCHF ₂
30-103	2-SO ₂ C ₂ H ₅	30-104	3-SO ₂ C ₂ H ₅	30-105	4-SO ₂ C ₂ H ₅
30-106	2-CO ₂ CH ₃	30-107	3-CO ₂ CH ₃	30-108	4-CO ₂ CH ₃
30-109	2-CO ₂ C ₂ H ₅	30-110	3-CO ₂ C ₂ H ₅	30-111	4-CO ₂ C ₂ H ₅
30-112	2-CH ₂ OCH ₃	30-113	3-CH ₂ OCH ₃	30-114	4-CH ₂ OCH ₃
30-115	2-OCOCH ₃	30-116	3-OCOCH ₃	30-117	4-OCOCH ₃
30-118	2-OCOCH ₂ CH ₃	30-119	3-OCOCH ₂ CH ₃	30-120	4-OCOCH ₂ CH ₃
30-121	2-OCO ₂ CH ₃	30-122	3-OCO ₂ CH ₃	30-123	4-OCO ₂ CH ₃
30-124	2-OCH ₂ OCH ₃	30-125	3-OCH ₂ OCH ₃	30-126	4-OCH ₂ OCH ₃
30-127	2-OCF ₂ OCF ₃	30-128	3-OCF ₂ OCF ₃	30-129	4-OCF ₂ OCF ₃
30-130	2-COPh	30-131	3-COPh	30-132	4-COPh
30-133	2-COCH ₂ Ph	30-134	3-COCH ₂ Ph	30-135	4-COCH ₂ Ph
30-136	2-NHPh	30-137	3-NHPh	30-138	4-NHPh
30-139	2-OPh	30-140	3-OPh	30-141	4-OPh
30-142	2-CONHPh	30-143	3-CONHPh	30-144	4-CONHPh
30-145	2-CO ₂ Ph	30-146	3-CO ₂ Ph	30-147	4-CO ₂ Ph
30-148	2-CONH ₂	30-149	3-CONH ₂	30-150	4-CONH ₂
30-151	2-Cl-4-F	30-152	2-Cl-4-Br	30-153	2-Cl-4-CH ₃
30-154	2-Cl-4-CF ₃	30-155	2-Cl-4-NO ₂	30-156	2-Cl-4-CN
30-157	2-Cl-4-OCF ₃	30-158	2-F-4-Cl	30-159	2-Br-4-Cl
30-160	2-CH ₃ -4-Cl	30-161	2-CF ₃ -4-Cl	30-162	2-NO ₂ -4-Cl
30-163	2-CN-4-Cl	30-164	2-OCF ₃ -4-Cl	30-165	2,6-2Cl-4-NO ₂

30-166	2,6-2Cl-4-CF ₃	30-167	2,6-2Cl-4-CN	30-168	2,6-2Cl-4-COCH ₃
30-169	2,6-2Cl-4-CONH ₂	30-170	2,4-2Cl-6-NO ₂	30-171	2,4-2Cl-6-CN
30-172	2,4-2Cl-6-CF ₃	30-173	2,4-2F-6-NO ₂	30-174	2,6-2F-4-NO ₂
30-175	2-NO ₂ -4-F	30-176	2-NO ₂ -4-Br	30-177	2-NO ₂ -4-CF ₃
30-178	2-NO ₂ -4-CN	30-179	2-NO ₂ -4-COCH ₃	30-180	2-NO ₂ -4-CONH ₂
30-181	2-NO ₂ -4-CH ₃	30-182	2-NO ₂ -4-OCH ₃	30-183	2-NO ₂ -4-SCH ₃
30-184	2-NO ₂ -4-NCH ₃	30-185	2-F-4-NO ₂	30-186	2-Br-4-NO ₂
30-187	2-CF ₃ -4-NO ₂	30-188	2-CN-4-NO ₂	30-189	2-COCH ₃ -4-NO ₂
30-190	2-CONH ₂ -4-NO ₂	30-191	2-CH ₃ -4-NO ₂	30-192	2-Cl-4-F-6-NO ₂
30-193	2-Cl-4-Br-6-NO ₂	30-194	2-Cl-4-CH ₃ -6-NO ₂	30-195	2-Cl-4-CF ₃ -6-NO ₂
30-196	2-Cl-4,6-2NO ₂	30-197	2-Cl-4-CN-6-NO ₂	30-198	2-Cl-4-OCF ₃ -6-NO ₂
30-199	2-F-4-Cl-6-NO ₂	30-200	2-Br-4-Cl-6-NO ₂	30-201	2-CH ₃ -4-Cl-6-NO ₂
30-202	2-CF ₃ -4-Cl-6-NO ₂	30-203	4-Cl-2,6-2NO ₂	30-204	2-CF ₃ -4-CN
30-205	2-CN-4-CF ₃	30-206	4-CF ₃ -2,6-2NO ₂	30-207	4-CN-2,6-2NO ₂
30-208	4-CH ₃ -2,6-2NO ₂	30-209	4-OCF ₃ -2,6-2NO ₂	30-210	4-OCH ₃ -2,6-2NO ₂
30-211	4-SCH ₃ -2,6-2NO ₂	30-212	4-NHCH ₃ -2,6-2NO ₂	30-213	4-F-2,6-2NO ₂
30-214	2-CF ₃ -4,6-2NO ₂	30-215	2-CN-4,6-2NO ₂	30-216	2-CH ₃ -4,6-2NO ₂
30-217	2-F-4,6-2NO ₂	30-218	2-OCF ₃ -4,6-2NO ₂	30-219	2-CF ₃ -4-Br
30-220	3-CF ₃ -4-NO ₂	30-221	2-CN-4-Cl-6-NO ₂	30-222	2-OCF ₃ -4-Cl-6-NO ₂
30-223	3-CF ₃ -4-CN	30-224	3-CN-4-CF ₃	30-225	2-CF ₃ -4-Br-6-NO ₂
30-226	3-NO ₂ -4-CF ₃	30-227	2-NO ₂ -4-CN-5-CF ₃	30-228	2-NO ₂ -4-CF ₃ -5-CN
30-229	4-OCF ₃ -2,6-2Br	30-230	2-CH ₃ -4-Cl-5-CH ₂ CO ₂ C ₂ H ₅	30-231	2,4-2Cl-3-CH ₃
30-232	2,4-2Cl-3-CH ₃ -6-NO ₂	30-233	2-Cl-3-CH ₃	30-234	2-CH ₃ -3-Cl
30-235	2-CH ₃ -3-Cl-4,6-2NO ₂	30-236	2-CH ₃ -3-Cl-4-NO ₂	30-237	2-CH ₃ -3-Cl-6-NO ₂
30-238	2-Cl-3-CH ₃ -4,6-2NO ₂	30-239	2-Cl-3-CH ₃ -4-NO ₂	30-240	2-Cl-3-CH ₃ -6-NO ₂
30-241	2-Br-4-NO ₂ -6-CN	30-242	3-Cl-4-CF ₃ -2,6-2NO ₂	30-243	2NO ₂ -4,5-2Cl
30-244	2-NO ₂ -3,5-2Cl	30-245	2,5-2Cl-4-NO ₂	30-246	2,5-2Cl-6-NO ₂
30-247	2,3-2Cl-4-NO ₂	30-248	2,3-2Cl-6-NO ₂	30-249	3,4-2Cl-2,6-2NO ₂
30-250	2,5-2Cl-4,6-2NO ₂	30-251	2,4,5-3Cl-6-NO ₂	30-252	2,3,4-3Cl-5-NO ₂
30-253	2,3,4-3Cl-6-NO ₂	30-254	2,3,5-3Cl-4,6-2CN	30-255	2,5-2Cl-4-OCF ₂ OCF ₃
30-256	2,6-2Br-4-NO ₂	30-257	2-F-4-NO ₂ -6-Cl	30-258	2-Cl-4-NO ₂ -6-SCN
30-259	2-Br-4-NO ₂ -6-Cl	30-260	2-Cl-4-NO ₂ -6-OCH ₃	30-261	2-Cl-4-NO ₂ -6-SCH ₃
30-262	2-Cl-4-NO ₂ -6-NHCH ₃	30-263	2-Cl-4-NO ₂ -6-SO ₂ CH ₃	30-264	2-Cl-4-SO ₂ CH ₃
30-265	2,6-2Cl-4-SO ₂ CH ₃	30-266	2,6-2Cl-4-CH ₃	30-267	2,6-2Cl-4-CO ₂ CH ₃
30-268	2,6-2Cl-4-CONHCH ₃	30-269	2,6-2Cl-4-CON(CH ₃) ₂	30-270	2,6-2Cl-4-CF(CF ₃) ₂
30-271	2-Cl-4-CF(CF ₃) ₂ -6-Br	30-272	2-F-4-CF(CF ₃) ₂ -6-Br	30-273	2-F-4-CF(CF ₃) ₂ -6-Cl
30-274	2,6-2F-4-CF(CF ₃) ₂ -6-Cl	30-275	2,4,5-3Cl-3,6-2CN	30-276	2,3,5-3F-4,6-2CN

30-277	2-SO ₂ NH ₂	30-278	3-SO ₂ NH ₂	30-279	4-SO ₂ NH ₂
--------	-----------------------------------	--------	-----------------------------------	--------	-----------------------------------

Bảng 30-1: trong công thức chung I-IC, $R_1=Cl$, $R_2=CH_3$, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm thế (R_{11})_n là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 30-1-1 đến 30-1-279.

Bảng 30-2: trong công thức chung I-IC, $R_1=Cl$, $R_2=OCH_3$, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm thế (R_{11})_n là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 30-2-1 đến 30-2-279:

Bảng 30-3: trong công thức chung I-IC, $R_1=Cl$, $R_2=CHO$, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm thế (R_{11})_n là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 30-3-1 đến 30-3-279.

Bảng 30-4: trong công thức chung I-IC, $R_1=Cl$, $R_2=Br$, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm thế (R_{11})_n là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 30-4-1 đến 30-4-279.

Bảng 31: trong công thức chung I-IC, $R_1=CH_3$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm thế (R_{11})_n là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 31-1 đến 31-279.

Bảng 32: trong công thức chung I-IC, $R_1=C_2H_5$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm thế (R_{11})_n là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 32-1 đến 32-279.

Bảng 33: trong công thức chung I-IC, $R_1=CHF_2$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm thế (R_{11})_n là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 33-1 đến 33-279.

Bảng 34: trong công thức chung I-IC, $R_1=CF_3$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 34-1 đến 34-279.

Bảng 35: trong công thức chung I-IC, $R_1=Cl$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=H$, $R_5=CH_3$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 35-1 đến 35-279.

Bảng 36: trong công thức chung I-IC, $R_1=CH_3$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=H$, $R_5=CH_3$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 36-1 đến 36-279.

Bảng 37: trong công thức chung I-IC, $R_1=C_2H_5$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=H$, $R_5=CH_3$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 37-1 đến 37-279.

Bảng 38: trong công thức chung I-IC, $R_1=CHF_2$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=H$, $R_5=CH_3$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 38-1 đến 38-279.

Bảng 39: trong công thức chung I-IC, $R_1=CF_3$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=H$, $R_5=CH_3$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 39-1 đến 39-279.

Bảng 40: trong công thức chung I-IF, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 40-1 đến 40-279.

Bảng 41: trong công thức chung I-IF, $R_3=R_4=H$, $R_5=CH_3$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 41-1 đến 41-279.

Bảng 42: trong công thức chung I-IG, $R_3=R_4=R_5=H$, $R_{28}=Cl$, các nhóm thế $(R_{11})_n$

là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 42-1 đến 42-279.

Bảng 43: trong công thức chung I-IG, $R_3=R_4=R_5=H$, $R_{28}=CH_3$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 43-1 đến 43-279.

Bảng 44: trong công thức chung I-IG, $R_3=R_4=H$, $R_5=CH_3$, $R_{28}=Cl$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 44-1 đến 44-279.

Bảng 45: trong công thức chung I-IG, $R_3=R_4=H$, $R_5=CH_3$, $R_{28}=CH_3$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 45-1 đến 45-279.

Bảng 46: trong công thức chung I-2A, $R_1=Cl$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm thế R_{14} là giống như các nhóm thế trong bảng 10 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 10-1 đến 10-15 trong bảng 10, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 46-1 đến 46-15.

Bảng 47: trong công thức chung I-2A, $R_1=CH_3$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm thế R_{14} là giống như các nhóm thế trong bảng 10 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 10-1 đến 10-15 trong bảng 10, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 47-1 đến 47-15.

Bảng 48: trong công thức chung I-2A, $R_1=C_2H_5$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm thế R_{14} là giống như các nhóm thế trong bảng 10 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 10-1 đến 10-15 trong bảng 10, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 48-1 đến 48-15.

Bảng 49: trong công thức chung I-2A, $R_1=CHF_2$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm thế R_{14} là giống như các nhóm thế trong bảng 10 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 10-1 đến 10-15 trong bảng 10, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 49-1 đến 49-15.

Bảng 50: trong công thức chung I-2A, $R_1=CF_3$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm thế R_{14} là giống như các nhóm thế trong bảng 10 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 10-1 đến 10-15 trong bảng 10, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 50-1 đến 50-15.

Bảng 51: trong công thức chung I-2A, $R_1=Cl$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=H$, $R_5=CH_3$, các nhóm thế R_{14} là giống như các nhóm thế trong bảng 10 và lần lượt tương ứng với các

hợp chất từ 10-1 đến 10-15 trong bảng 10, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 51-1 đến 51-15.

Bảng 52: trong công thức chung I-2A, $R_1=CH_3$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=H$, $R_5=CH_3$, các nhóm thế R_{14} là giống như các nhóm thế trong bảng 10 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 10-1 đến 10-15 trong bảng 10, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 52-1 đến 52-15.

Bảng 53: trong công thức chung I-2A, $R_1=C_2H_5$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=H$, $R_5=CH_3$, các nhóm thế R_{14} là giống như các nhóm thế trong bảng 10 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 10-1 đến 10-15 trong bảng 10, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 53-1 đến 53-15.

Bảng 54: trong công thức chung I-2A, $R_1=CHF_2$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=H$, $R_5=CH_3$, các nhóm thế R_{14} là giống như các nhóm thế trong bảng 10 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 10-1 đến 10-15 trong bảng 10, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 54-1 đến 54-15.

Bảng 55: trong công thức chung I-2A, $R_1=CF_3$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=H$, $R_5=CH_3$, các nhóm thế R_{14} là giống như các nhóm thế trong bảng 10 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 10-1 đến 10-15 trong bảng 10, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 55-1 đến 55-15.

Bảng 56: trong công thức chung I-2C, $R_1=Cl$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 56-1 đến 56-279.

Bảng 57: trong công thức chung I-2C, $R_1=CH_3$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 57-1 đến 57-279.

Bảng 58: trong công thức chung I-2C, $R_1=C_2H_5$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 58-1 đến 58-279.

Bảng 59: trong công thức chung I-2C, $R_1=CHF_2$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm

thể $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 59-1 đến 59-279.

Bảng 60: trong công thức chung I-2C, $R_1=CF_3$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 60-1 đến 60-279.

Bảng 61: trong công thức chung I-2C, $R_1=Cl$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=H$, $R_5=CH_3$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 61-1 đến 61-279.

Bảng 62: trong công thức chung I-2C, $R_1=CH_3$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=H$, $R_5=CH_3$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 62-1 đến 62-279.

Bảng 63: trong công thức chung I-2C, $R_1=C_2H_5$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=H$, $R_5=CH_3$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 63-1 đến 63-279.

Bảng 64: trong công thức chung I-2C, $R_1=CHF_2$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=H$, $R_5=CH_3$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 64-1 đến 64-279.

Bảng 65: trong công thức chung I-2C, $R_1=CF_3$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=H$, $R_5=CH_3$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 65-1 đến 65-279.

Bảng 66: trong công thức chung I-2F, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 66-1 đến 66-279.

Bảng 67: trong công thức chung I-2F, $R_3=R_4=H$, $R_5=CH_3$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là

giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 67-1 đến 67-279.

Bảng 68: trong công thức chung I-2G, $R_3=R_4=R_5=H$, $R_{28}=Cl$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 68-1 đến 68-279.

Bảng 69: trong công thức chung I-2G, $R_3=R_4=R_5=H$, $R_{28}=CH_3$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 69-1 đến 69-279.

Bảng 70: trong công thức chung I-2G, $R_3=R_4=H$, $R_5=CH_3$, $R_{28}=Cl$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 70-1 đến 70-279.

Bảng 71: trong công thức chung I-2G, $R_3=R_4=H$, $R_5=CH_3$, $R_{28}=CH_3$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 71-1 đến 71-279.

Bảng 72: trong công thức chung I-3A, $R_1=Cl$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm thế R_{14} là giống như các nhóm thế trong bảng 10 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 10-1 đến 10-15 trong bảng 10, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 72-1 đến 72-15.

Bảng 73: trong công thức chung I-3A, $R_1=CH_3$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm thế R_{14} là giống như các nhóm thế trong bảng 10 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 10-1 đến 10-15 trong bảng 10, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 73-1 đến 73-15.

Bảng 74: trong công thức chung I-3A, $R_1=C_2H_5$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm thế R_{14} là giống như các nhóm thế trong bảng 10 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 10-1 đến 10-15 trong bảng 10, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 74-1 đến 74-15.

Bảng 75: trong công thức chung I-3A, $R_1=CHF_2$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm thế R_{14} là giống như các nhóm thế trong bảng 10 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 10-1 đến 10-15 trong bảng 10, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 75-1 đến 75-15.

Bảng 76: trong công thức chung I-3A, $R_1=CF_3$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm thế R_{14} là giống như các nhóm thế trong bảng 10 và lần lượt tương ứng với các hợp chất

từ 10-1 đến 10-15 trong bảng 10, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 76-1 đến 76-15.

Bảng 77: trong công thức chung I-3A, $R_1=Cl$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=H$, $R_5=CH_3$, các nhóm thế R_{14} là giống như các nhóm thế trong bảng 10 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 10-1 đến 10-15 trong bảng 10, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 77-1 đến 77-15.

Bảng 78: trong công thức chung I-3A, $R_1=CH_3$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=H$, $R_5=CH_3$, các nhóm thế R_{14} là giống như các nhóm thế trong bảng 10 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 10-1 đến 10-15 trong bảng 10, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 78-1 đến 78-15.

Bảng 79: trong công thức chung I-3A, $R_1=C_2H_5$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=H$, $R_5=CH_3$, các nhóm thế R_{14} là giống như các nhóm thế trong bảng 10 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 10-1 đến 10-15 trong bảng 10, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 79-1 đến 79-15.

Bảng 80: trong công thức chung I-3A, $R_1=CHF_2$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=H$, $R_5=CH_3$, các nhóm thế R_{14} là giống như các nhóm thế trong bảng 10 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 10-1 đến 10-15 trong bảng 10, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 80-1 đến 80-15.

Bảng 81: trong công thức chung I-3A, $R_1=CF_3$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=H$, $R_5=CH_3$, các nhóm thế R_{14} là giống như các nhóm thế trong bảng 10 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 10-1 đến 10-15 trong bảng 10, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 81-1 đến 81-15.

Bảng 82: trong công thức chung I-3C, $R_1=Cl$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 82-1 đến 82-279.

Bảng 83: trong công thức chung I-3C, $R_1=CH_3$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 83-1 đến 83-279.

Bảng 84: trong công thức chung I-3C, $R_1=C_2H_5$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp

chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 84-1 đến 84-279.

Bảng 85: trong công thức chung I-3C, $R_1=CHF_2$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 85-1 đến 85-279.

Bảng 86: trong công thức chung I-3C, $R_1=CF_3$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 86-1 đến 86-279.

Bảng 87: trong công thức chung I-3C, $R_1=Cl$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=H$, $R_5=CH_3$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 87-1 đến 87-279.

Bảng 88: trong công thức chung I-3C, $R_1=CH_3$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=H$, $R_5=CH_3$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 88-1 đến 88-279.

Bảng 89: trong công thức chung I-3C, $R_1=C_2H_5$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=H$, $R_5=CH_3$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 89-1 đến 89-279.

Bảng 90: trong công thức chung I-3C, $R_1=CHF_2$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=H$, $R_5=CH_3$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 90-1 đến 90-279.

Bảng 91: trong công thức chung I-3C, $R_1=CF_3$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=H$, $R_5=CH_3$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 91-1 đến 91-279.

Bảng 92: trong công thức chung I-3F, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống

như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 92-1 đến 92-279.

Bảng 93: trong công thức chung I-3F, $R_3=R_4=H$, $R_5=CH_3$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 93-1 đến 93-279.

Bảng 94: trong công thức chung I-3G, $R_3=R_4=R_5=H$, $R_{28}=Cl$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 94-1 đến 94-279.

Bảng 95: trong công thức chung I-3G, $R_3=R_4=R_5=H$, $R_{28}=CH_3$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 95-1 đến 95-279.

Bảng 96: trong công thức chung I-3G, $R_3=R_4=H$, $R_5=CH_3$, $R_{28}=Cl$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 96-1 đến 96-279.

Bảng 97: trong công thức chung I-3G, $R_3=R_4=H$, $R_5=CH_3$, $R_{28}=CH_3$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 97-1 đến 97-279.

Bảng 98: trong công thức chung I-1C, $R_1=CH_3$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=H$, $R_5=F$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 98-1 đến 98-279.

Bảng 99: trong công thức chung I-1C, $R_1=C_2H_5$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=H$, $R_5=F$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 99-1 đến 99-279.

Bảng 100: trong công thức chung I-1C, $R_1=CHF_2$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=H$, $R_5=F$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 100-1

đến 100-279.

Bảng 101: trong công thức chung I-1C, $R_1=CH_3$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=R_5=F$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 101-1 đến 101-279.

Bảng 102: trong công thức chung I-1C, $R_1=C_2H_5$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=R_5=F$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 102-1 đến 102-279.

Bảng 103: trong công thức chung I-1C, $R_1=CHF_2$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=R_5=F$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 103-1 đến 103-279.

Bảng 104: trong công thức chung I-1H, $R_3=R_4=R_5=H$, $R_{29}=CH_3$, $R_{30}=H$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 104-1 đến 104-279.

Bảng 105: trong công thức chung I-1I, $R_3=R_4=R_5=H$, $R_{31}=CH_3$, $R_{32}=H$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 105-1 đến 105-279.

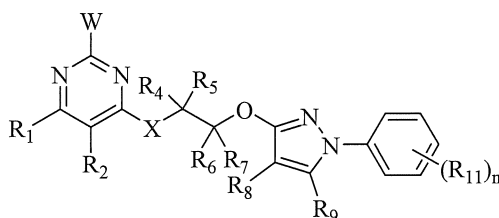
Bảng 106: trong công thức chung I-1J, $R_3=R_4=R_5=H$, $R_{33}=H$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 106-1 đến 106-279.

Bảng 107: trong công thức chung I-1K, $R_3=R_4=R_5=H$, $R_{34}=H$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 107-1 đến 107-279.

Bảng 108: trong công thức chung I-1L, $R_3=R_4=R_5=H$, $R_{35}=H$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất

từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 108-1 đến 108-279.

Bảng 109: trong công thức chung I-1M, $R_3=R_4=R_5=H$, $R_{36}=H$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 109-1 đến 109-279.



I-1N (X = O hoặc S)

Bảng 110: trong công thức chung I-1N, $R_1=CH_3$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=R_5=H$, $X=O$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 110-1 đến 110-279.

Bảng 111: trong công thức chung I-1N, $R_1=C_2H_5$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=R_5=H$, $X=O$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 111-1 đến 111-279.

Bảng 112: trong công thức chung I-1N, $R_1=CHF_2$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=R_5=H$, $X=O$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 112-1 đến 112-279.

Bảng 113: trong công thức chung I-1N, $R_1=CH_3$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=R_5=H$, $X=S$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 113-1 đến 113-279.

Bảng 114: trong công thức chung I-1N, $R_1=C_2H_5$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=R_5=H$, $X=S$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với

các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 114-1 đến 114-279.

Bảng 115: trong công thức chung I-1N, $R_1=CHF_2$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=R_5=H$, $X=S$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 115-1 đến 115-279.

Trong công thức chung I-1C, $R_1=CH_3$, $R_2=Cl$, $R_4=R_5=H$, $(R_{11})_n=4-CH_3$, các nhóm thế R_3 (ngoại trừ H) được thể hiện trong Bảng 116, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 116-1 đến 116-140.

Bảng 116

Hợp chất số	R_3	Hợp chất số	R_3	Hợp chất số	R_3	Hợp chất số	R_3
116-1	S-i-C ₃ H ₇	116-2	OH	116-3	-C(=O)H	116-4	CB ₃
116-5	CH ₃	116-6	C ₂ H ₅	116-7	n-C ₃ H ₇	116-8	i-C ₃ H ₇
116-9	n-C ₄ H ₉	116-10	i-C ₄ H ₉	116-11	t-C ₄ H ₉	116-12	Cl ₃
116-13	CH ₂ Br	116-14	CHF ₂	116-15	CHBr ₂	116-16	CF ₃
116-17	CH ₂ Cl	116-18	CHCl ₂	116-19	CCl ₃	116-20	CH ₂ F
116-21	OCH ₃	116-22	OC ₂ H ₅	116-23	OCH(CH ₃) ₂	116-24	OC(CH ₃) ₃
116-25	OCF ₃	116-26	OCH ₂ CF ₃	116-27	OCH ₂ F	116-28	OCHF ₂
116-29	SCH ₃	116-30	SC ₂ H ₅	116-31	SCH ₂ CH=CH ₂	116-32	CH=CH ₂
116-33	CH ₂ CH=CH ₂	116-34	CH ₂ CH=CCl ₂	116-35	C≡CH	116-36	CH ₂ C≡CH
116-37	CH ₂ C≡C-I	116-38	CH ₂ OCH ₃	116-39	CH ₂ OCH ₂ CH ₃	116-40	CH ₂ CH ₂ OCH ₃
116-41	CH ₂ CH ₂ OCH ₂ CH ₃	116-42	CH ₂ OCH ₂ Cl	116-43	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ Cl	116-44	CH ₂ CH ₂ OCH ₂ Cl
116-45	CH ₂ SCH ₃	116-46	CH ₂ SCH ₂ CH ₃	116-47	CH ₂ CH ₂ SCH ₃	116-48	CH ₂ CH ₂ SCH ₂ CH ₃
116-49	CH ₂ SCH ₂ Cl	116-50	CH ₂ SCH ₂ CH ₂ Cl	116-51	CH ₂ CH ₂ SCH ₂ Cl	116-52	SOCH ₃
116-53	SOC ₂ H ₅	116-54	SOCF ₃	116-55	SOCH ₂ CF ₃	116-56	SO ₂ CH ₃
116-57	SO ₂ C ₂ H ₅	116-58	SO ₂ CF ₃	116-59	SO ₂ CH ₂ CF ₃	116-60	SO ₂ NHCOCH ₃
116-61	SO ₂ NHCH ₃	116-62	SO ₂ N(CH ₃) ₃	116-63	CONHSO ₂ CH ₃	116-64	COCH ₃
116-65	COC ₂ H ₅	116-66	CO-n-C ₃ H ₇	116-67	CO-i-C ₃ H ₇	116-68	CO-n-C ₄ H ₉
116-69	CO-i-C ₄ H ₉	116-70	CO-t-C ₄ H ₉	116-71	COCF ₃	116-72	COCH ₂ Cl
116-73	COOCH ₃	116-74	COOC ₂ H ₅	116-75	COO-n-C ₃ H ₇	116-76	COO-t-C ₄ H ₉
116-77	COOCF ₃	116-78	COOCH ₂ CH ₂ Cl	116-79	COOCH ₂ CF ₃	116-80	CH ₂ COOCH ₃
116-81	CH ₂ COOC ₂ H ₅	116-82	CH ₂ COCH ₃	116-83	CH ₂ COC ₂ H ₅	116-84	CONHCH ₃
116-85	CONHC ₂ H ₅	116-86	CONH-t-C ₄ H ₉	116-87	CON(CH ₃) ₂	116-88	CON(C ₂ H ₅) ₂

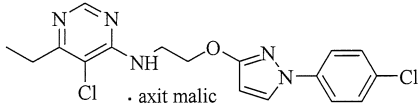
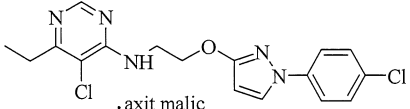
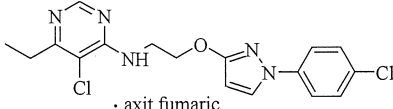
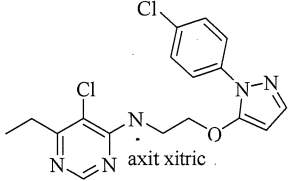
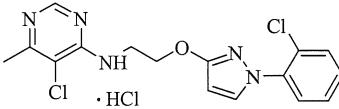
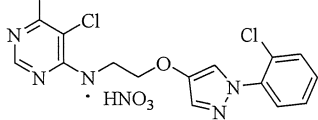
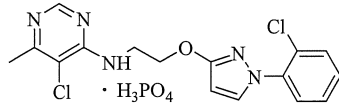
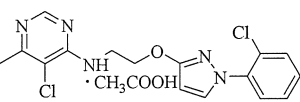
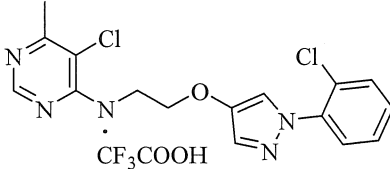
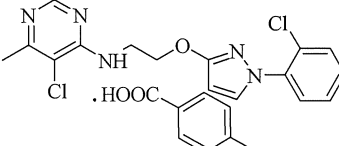
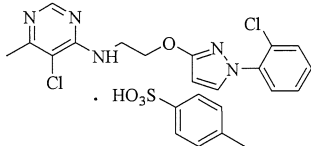
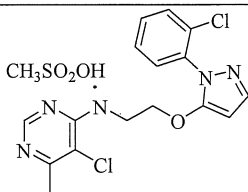
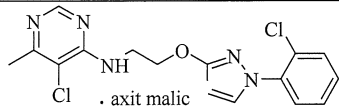
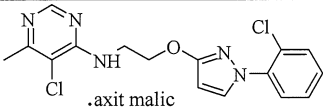
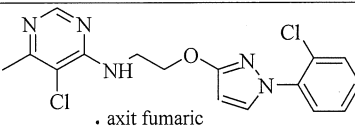
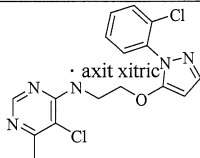
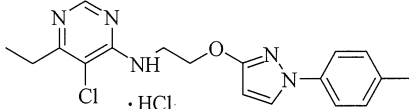
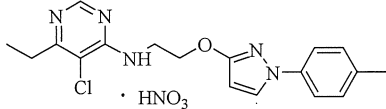
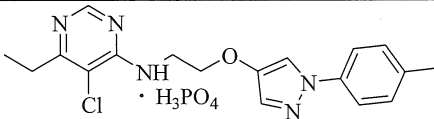
116-89	$\text{COOCH}_2\text{CH}=\text{CH}_2$	116-90	$\text{COOCH}_2\text{C}\equiv\text{CH}$	116-91	$\text{COOCH}_2\text{OCH}_3$	116-92	$\text{COOCH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_3$
116-93	SNHCH_3	116-94	SNHC_2H_5	116-95	$\text{SN}(\text{CH}_3)_2$	116-96	$\text{SN}(\text{C}_2\text{H}_5)_2$
116-97		116-98		116-99		116-100	
116-101	CO-O-	116-102	CO-O-	116-103	CO-O-	116-104	CO-O-
116-105		116-106		116-107		116-108	
116-109		116-110		116-111		116-112	
116-113		116-114		116-115		116-116	
116-117		116-118		116-119	CO-	116-120	CO-
116-121	CO-	116-122	CO-	116-123	CO-	116-124	CO-O-
116-125	CO-O-	116-126	CO-O-	116-127	CO-O-	116-128	CO-O-
116-129	CO-O-	116-130	CO-O-	116-131	CO-O-	116-132	CO-O-
116-133	CO-O-	116-134	CO-O-	116-135		116-136	
116-137		116-138		116-139		116-140	

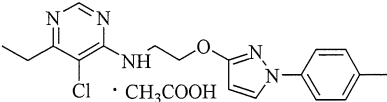
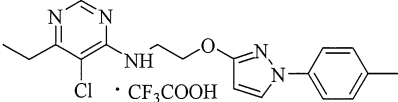
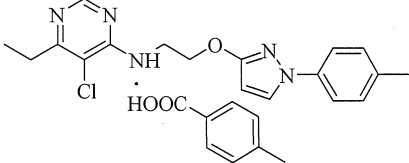
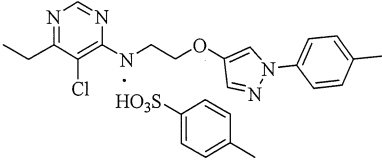
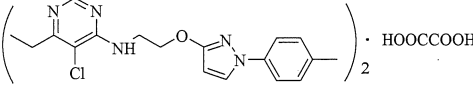
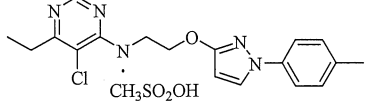
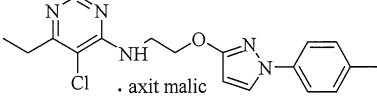
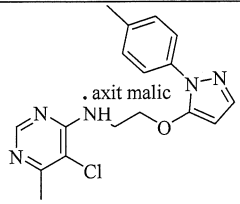
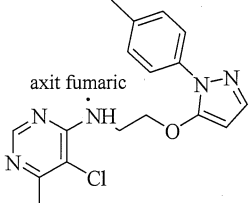
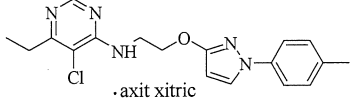
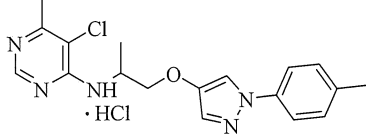
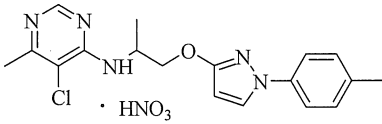
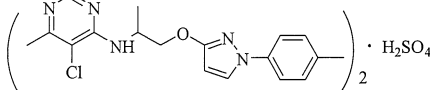
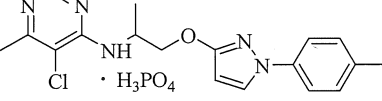
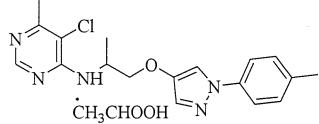
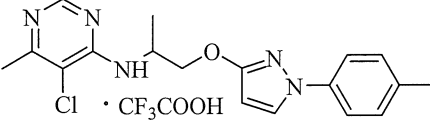
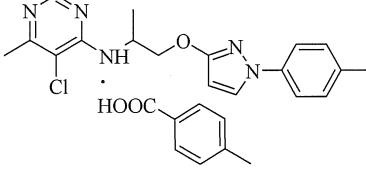
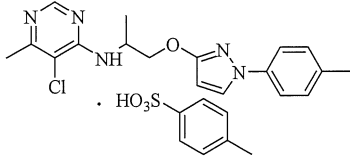
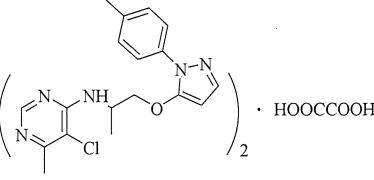
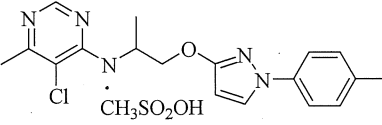
Các muối của một số hợp chất có cấu trúc như được thể hiện bằng công thức I theo sáng chế được liệt kê trong bảng 117 nhưng không bị giới hạn bởi các hợp chất trong bảng này.

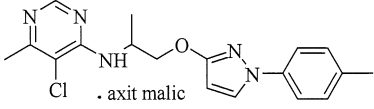
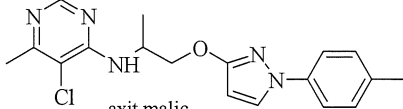
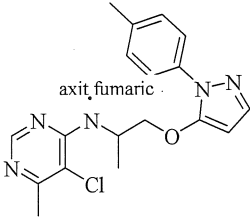
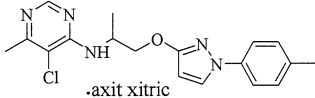
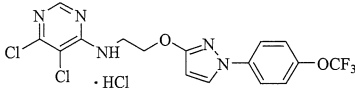
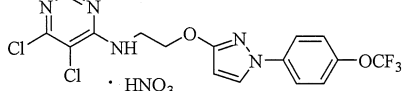
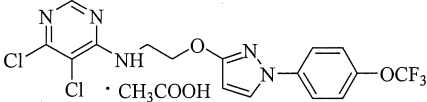
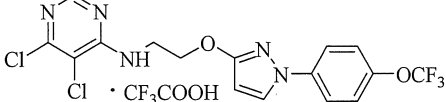
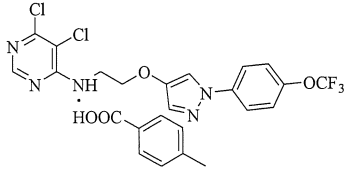
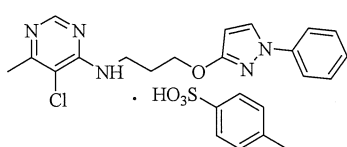
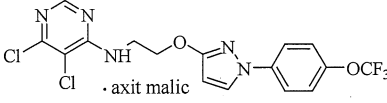
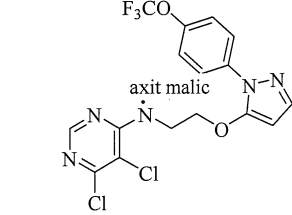
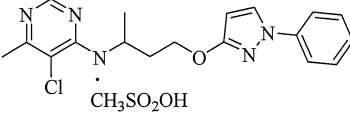
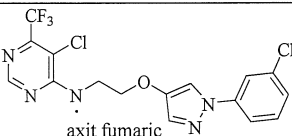
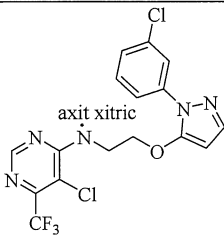
Bảng 117: các muối của một số hợp chất

Hợp chất số	Cấu trúc	Hợp chất số	Cấu trúc
117-1		117-2	

117-3		117-4	
117-5		117-6	
117-7		117-8	
117-9		117-10	
117-11		117-12	
117-13		117-14	
117-15		117-16	
117-17		117-18	
117-19		117-20	
117-21		117-22	
117-23		117-24	

117-25	 ·axit malic	117-26	 ·axit malic
117-27	 ·axit fumaric	117-28	 ·axit xitric
117-29	 ·HCl	117-30	 ·HNO ₃
117-31	$\left(\text{pyrimidine ring with methyl at 6, chlorine at 5, NH at 2, connected via methylene to oxygen to 1,2,4-triazole ring, which is connected at position 1 to a 2-chlorophenyl group} \right)_2 \cdot \text{H}_2\text{SO}_4$	117-32	 ·H ₃ PO ₄
117-33	 ·CH ₃ COOH	117-34	 ·CF ₃ COOH
117-35	 ·HOOC	117-36	 ·HO ₃ S
117-37	$\left(\text{pyrimidine ring with methyl at 6, chlorine at 5, NH at 2, connected via methylene to oxygen to 1,2,4-triazole ring, which is connected at position 1 to a 2-chlorophenyl group} \right)_2 \cdot \text{HOCCOOH}$	117-38	 ·CH ₃ SO ₂ OH
117-39	 ·axit malic	117-40	 ·axit malic
117-41	 ·axit fumaric	117-42	 ·axit xitric
117-43	 ·HCl	117-44	 ·HNO ₃
117-45	$\left(\text{pyrimidine ring with ethyl at 6, chlorine at 5, NH at 2, connected via methylene to oxygen to 1,2,4-triazole ring, which is connected at position 1 to a 4-chlorophenyl group} \right)_2 \cdot \text{H}_2\text{SO}_4$	117-46	 ·H ₃ PO ₄

117-47		117-48	
117-49		117-50	
117-51		117-52	
117-53		117-54	
117-55		117-56	
117-57		117-58	
117-59		117-60	
117-61		117-62	
117-63		117-64	
117-65		117-66	

117-67		117-68	
117-69		117-70	
117-71		117-72	
117-73	$\left(\text{pyrimidine ring with Cl at 6, Me at 5, NH-CH}_2\text{-O-pyrazole-2-yl, and 4-(OCF}_3\text{)phenyl} \right)_2 \cdot \text{H}_2\text{SO}_4$	117-74	$\left(\text{pyrimidine ring with Cl at 6, Me at 5, NH-CH}_2\text{-O-pyrazole-2-yl, and 4-(OCF}_3\text{)phenyl} \right)_2 \cdot \text{H}_3\text{PO}_4$
117-75		117-76	
117-77		117-78	
117-79		117-80	
117-81	$\left(\text{pyrimidine ring with Cl at 6, Me at 5, NH-CH}_2\text{-O-pyrazole-2-yl, and 4-(OCF}_3\text{)phenyl} \right)_2 \cdot \text{HOOC-COOH}$	117-82	
117-83		117-84	

Bảng 118: trong công thức chung I-4C, $R_1=\text{Cl}$, $R_2=\text{Br}$, $R_3=R_4=R_5=\text{H}$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp

chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 118-1 đến 118-279.

Bảng 119: trong công thức chung I-4C, $R_1=Cl$, $R_2=NH_2$, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 119-1 đến 119-279.

Bảng 120: trong công thức chung I-4C, $R_1=Cl$, $R_2=NO_2$, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 120-1 đến 120-279.

Bảng 121: trong công thức chung I-4C, $R_1=Cl$, $R_2=CHO$, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 121-1 đến 121-279.

Bảng 122: trong công thức chung I-4C, $R_1=Cl$, $R_2=CH_3$, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 122-1 đến 122-279.

Bảng 123: trong công thức chung I-4C, $R_1=Cl$, $R_2=OCH_3$, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 123-1 đến 123-279.

Bảng 124: trong công thức chung I-4C, $R_1=CH_3$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 124-1 đến 124-279.

Bảng 125: trong công thức chung I-4C, $R_1=C_2H_5$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 125-1 đến 125-279.

Bảng 126: trong công thức chung I-4C, $R_1=CHF_2$, $R_2=Cl$, $R_3=R_4=R_5=H$, các

nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 126-1 đến 126-279.

Bảng 127: trong công thức chung I-4F, $R_3=R_4=R_5=H$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 127-1 đến 127-279.

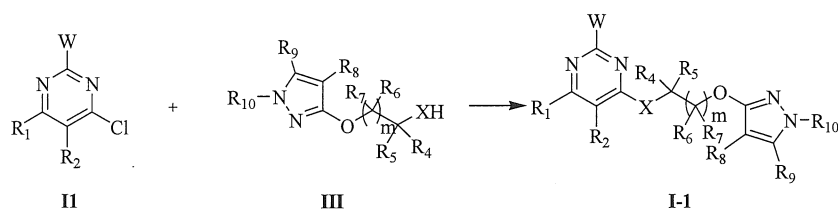
Bảng 128: trong công thức chung I-4G, $R_3=R_4=R_5=H$, $R_{28}=Cl$, các nhóm thế $(R_{11})_n$ là giống như các nhóm thế trong bảng 30 và lần lượt tương ứng với các hợp chất từ 30-1 đến 30-279 trong bảng 30, các hợp chất đại diện được ký hiệu từ 128-1 đến 128-279.

Các hợp chất theo sáng chế có thể được điều chế theo các phương pháp sau. Phân định nghĩa của mỗi nhóm thế là như được xác định trên đây, trừ khi được chỉ rõ theo cách khác:

Các hợp chất có công thức chung I có thể được điều chế theo hai phương pháp khác nhau theo định nghĩa khác nhau của nhóm Y:

(1) Khi Y là O, theo vị trí liên kết của nguyên tử oxy và vòng pyrazol, các phương pháp điều chế các hợp chất có công thức chung I-1, I-2 và I-3 là như sau:

Phương pháp điều chế các hợp chất có công thức chung I-1 là như sau:



Các hợp chất có công thức chung I-1 có thể được điều chế bằng cách cho các hợp chất trung gian có công thức II và III phản ứng với sự có mặt của bazơ và dung môi thích hợp.

Bazơ thích hợp nêu trên có thể được chọn từ kali hydroxit, natri hydroxit, natri cacbonat, kali cacbonat, natri bicarbonat, trietylamin, pyridin, natri metoxit, natri etoxit, natri hydrua, kali tert-butoxit hoặc natri tert butoxit, v.v..

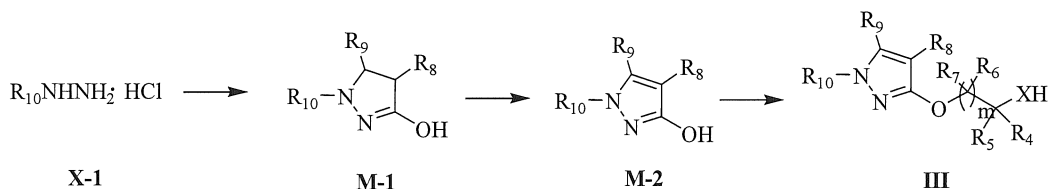
Phản ứng được tiến hành dung môi thích hợp và dung môi thích hợp này có thể được chọn từ tetrahydrofuran, 1,4-dioxan, axetonitril, toluen, xylen, benzen, DMF, *N*-metyl pyrrolidon, DMSO, axeton hoặc butanon, v.v..

Nhiệt độ thích hợp nêu trên nằm trong khoảng từ nhiệt độ trong phòng đến điểm sôi của dung môi, nhiệt độ thường nằm trong khoảng từ 20 đến 100°C.

Thời gian phản ứng nằm trong khoảng từ 30 phút đến 20 giờ, thường nằm trong khoảng từ 1 đến 10 giờ.

Các hợp chất trung gian có công thức II có bán trên thị trường, hoặc được điều chế theo các phương pháp được mô tả trong các tài liệu JP2000007662, US4977264, US6090815, US20040092402, JP09124613, US5468751, US4985426, US4845097, Journal of the American Chemical Society (1957), 79, 1455 hoặc Journal of Chemical Society (1955), p.3478-3481.

Hợp chất trung gian có công thức chung III là hợp chất trung gian quan trọng được dùng để điều chế các hợp chất có công thức chung I-1. Phương pháp điều chế là như sau:



Các hợp chất trung gian có công thức chung M-1 có thể được điều chế bằng cách cho các hợp chất trung gian có công thức chung X-1 phản ứng với etyl acrylat (không) được thể ở nhiệt độ thích hợp trong dung môi thích hợp. Thời gian phản ứng nằm trong khoảng từ 30 phút đến 20 giờ, thường là từ 1 đến 10 giờ, quy trình thực hiện chi tiết theo phương pháp được mô tả trong các tài liệu: CN103588708, WO9703969 và Organic & Biomolecular Chemistry (2011), 9(5), 1443-1453; hợp chất có công thức M-2 có thể được điều chế từ các hợp chất trung gian có công thức chung M-1 bằng phản ứng oxy hoá, quy trình thực hiện chi tiết theo phương pháp được mô tả trong các tài liệu: DE19652516, WO9703969 và Bulletin of the Korean Chemical Society (2010), 31(11), 3341-3347; Các hợp chất trung gian có công thức chung III có thể được điều chế bằng cách cho các hợp chất trung gian có công thức chung M-2 phản ứng với halogenua tương ứng, quy trình thực hiện chi tiết theo phương pháp được mô tả trong các tài liệu: US20100158860, WO2011133444 và Bioorganic & Medicinal Chemistry (2012), 20(20), 6109-6122.

Nguồn của các hợp chất trung gian là như sau: hợp chất trung gian có công thức

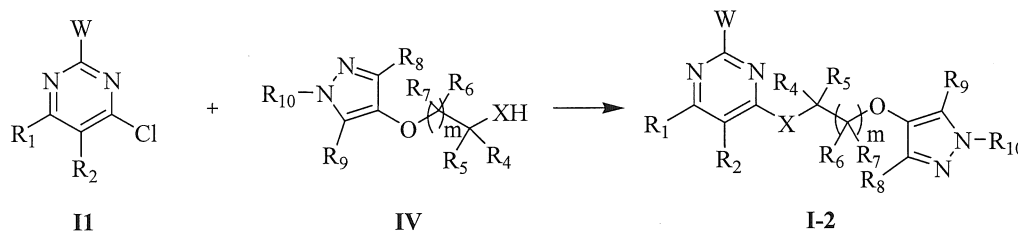
chung X-1 có bán trên thị trường, hoặc có thể được điều chế theo phương pháp thông thường.

Nhiệt độ phản ứng thích hợp nằm trong khoảng từ 0 đến 50°C; Thời gian phản ứng nằm trong khoảng từ 30 phút đến 20 giờ, thường là từ 0,5 đến 10 giờ.

Dung môi thích hợp nêu trên có thể được chọn từ metyl axetat, etyl axetat, benzen, toluen, xylen, clorofom, diclometan, nước, tetrahydrofuran, axetonitril, 1,4-dioxan, DMF, *N*-metyl pyrrolidon hoặc DMSO, v.v..

Axit thích hợp nêu trên có thể được chọn từ axit clohydric, axit trifloaxetic, axit sulfuric, axit axetic, axit propionic, axit butyric, axit oxalic, axit adipic, axit 1,10-decandicarboxylic, axit lauric, axit stearic, axit fumaric, axit maleic, axit benzoic hoặc axit alizaric.

Phương pháp điều chế các hợp chất có công thức chung I-2 là như sau:



Các hợp chất có công thức chung I-2 có thể được điều chế bằng phản ứng của các hợp chất trung gian có công thức II và IV với sự có mặt của bazơ và dung môi thích hợp.

Bazơ thích hợp nêu trên có thể được chọn từ kali hydroxit, natri hydroxit, natri cacbonat, kali cacbonat, natri bicacbonat, trietylamin, pyridin, natri metoxit, natri etoxit, natri hydrua, kali tert-butoxit hoặc natri tert-butoxit, v.v..

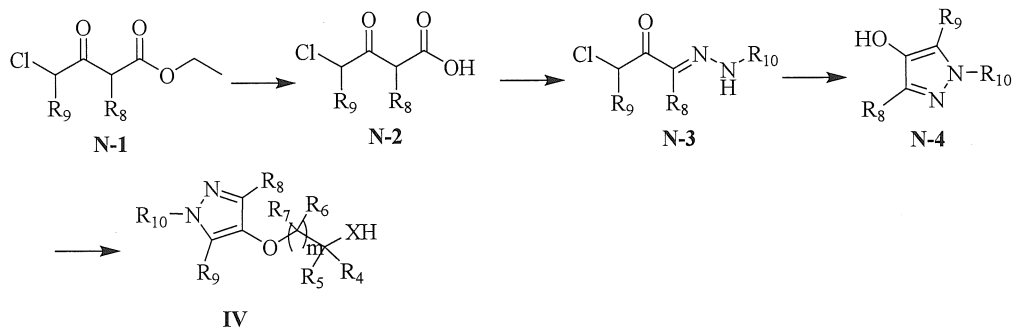
Phản ứng được tiến hành trong dung môi thích hợp và dung môi thích hợp này có thể được chọn từ tetrahydrofuran, 1,4-dioxan, axetonitril, toluen, xylen, benzen, DMF, *N*-metyl pyrrolidon, DMSO, axeton hoặc butanon, v.v..

Nhiệt độ thích hợp nêu trên nằm trong khoảng từ nhiệt độ trong phòng đến điểm sôi của dung môi, nhiệt độ thường nằm trong khoảng từ 20 đến 100°C.

Thời gian phản ứng nằm trong khoảng từ 30 phút đến 20 giờ, thường là từ 1 đến 10 giờ.

Hợp chất trung gian có công thức chung IV là hợp chất trung gian quan trọng

được dùng để điều chế các hợp chất có công thức chung I-2. Phương pháp điều chế là như sau:



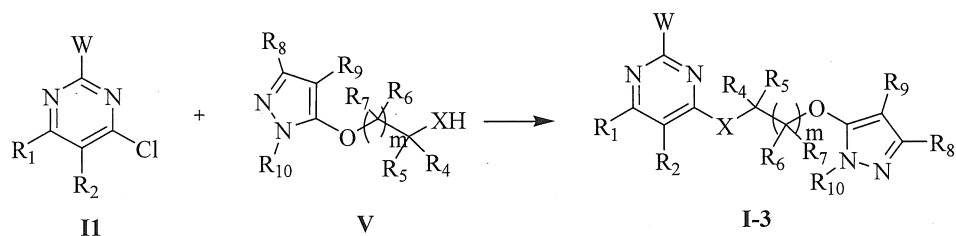
Hợp chất trung gian có công thức N-4 có thể được điều chế từ hợp chất ban đầu có công thức N-1 theo phương pháp được mô tả trong các tài liệu: DE3012193, WO2010076553, Organic Preparations and Procedures International (2002), 34(1), 98-102 và Science of Synthesis (2002), 12, 15-225; Journal of Medicinal Chemistry (2016), 59(4), 1370-1387; Phương pháp điều chế các hợp chất có công thức IV từ hợp chất có công thức N-4 là giống như phương pháp điều chế các hợp chất có công thức III từ hợp chất có công thức M-2.

Dung môi thích hợp nêu trên có thể được chọn từ metanol, etanol, tetrahydrofuran, 1,4-dioxan, axetonitril, toluen, xylen, benzen, DMF, DMSO, axeton hoặc butanon.

Dung môi thích hợp có thể được chọn từ axit clohydric, axit sulfuric hoặc axit nitric.

Bazơ thích hợp nêu trên có thể được chọn từ natri hydroxit, kali hydroxit, natri metoxit, natri etoxit, natri tert-butoxit hoặc kali tert-butoxit, v.v..

Phương pháp điều chế các hợp chất có công thức chung I-3 là như sau:



Các hợp chất có công thức chung I-3 có thể được điều chế bằng phản ứng của các hợp chất trung gian có công thức II và V với sự có mặt của bazơ và dung môi thích hợp.

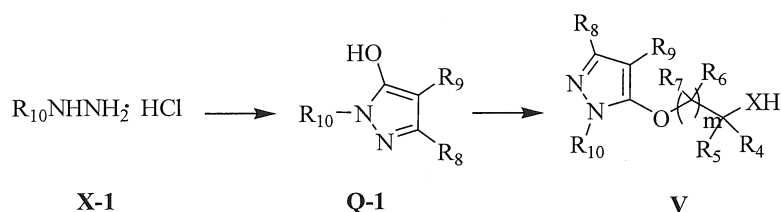
Bazơ thích hợp nêu trên có thể được chọn từ kali hydroxit, natri hydroxit, natri cacbonat, kali cacbonat, natri bicacbonat, trietylamin, pyridin, natri metoxit, natri etoxit, natri hydrua, kali tert-butoxit hoặc natri tert-butoxit, v.v..

Phản ứng được tiến hành trong dung môi thích hợp và dung môi thích hợp này có thể được chọn từ tetrahydrofuran, 1,4-dioxan, axetonitril, toluen, xylen, benzen, DMF, *N*-metyl pyrrolidon, DMSO, axeton hoặc butanon, v.v..

Nhiệt độ thích hợp nêu trên nằm trong khoảng từ nhiệt độ trong phòng đến điểm sôi của dung môi, nhiệt độ thường nằm trong khoảng từ 20 đến 100°C.

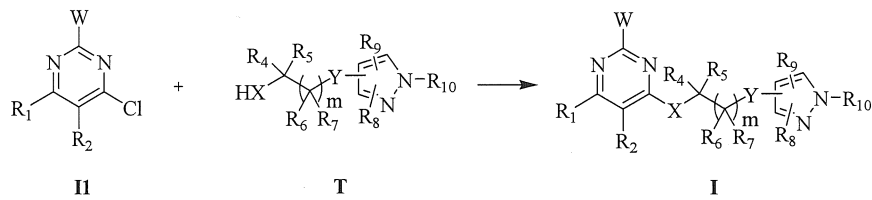
Thời gian phản ứng nằm trong khoảng từ 30 phút 20 giờ, thường là từ 1 đến 10 giờ.

Hợp chất trung gian có công thức chung V là hợp chất trung gian quan trọng được sử dụng để điều chế các hợp chất có công thức chung I-3, phương pháp điều chế là như sau:



Các hợp chất trung gian có công thức Q-1 có thể được điều chế từ hợp chất ban đầu có công thức X-1 theo phương pháp được mô tả trong các tài liệu: WO2009069044, WO2000031042, WO2008059370, Bioorganic & Medicinal Chemistry (2006), 14(14), 5061-5071, v.v.; Phương pháp điều chế các hợp chất có công thức V từ hợp chất có công thức Q-1 là giống như phương pháp điều chế các hợp chất có công thức III từ hợp chất có công thức M -2.

(2) Phương pháp điều chế các hợp chất có công thức chung I là như sau: khi Y là NR₃ hoặc S, quy trình chi tiết để điều chế hợp chất trung gian có công thức T được thực hiện theo phương pháp được mô tả trong các tài liệu: WO2003049739, WO2000031072, v.v..



Mặc dù cả hợp chất có công thức chung I và một số hợp chất đã được thông báo trong các tài liệu đã biết đều thuộc về hợp chất pyrazol được thế chứa pyrimidinyl, vẫn có một số khác biệt rõ ràng về cấu trúc giữa chúng. Các khác biệt về cấu trúc này làm cho hợp chất theo sáng chế có hoạt tính của thuốc diệt nấm và/hoặc thuốc trừ sâu/thuốc diệt ve bét cao hơn.

Các hợp chất có công thức chung I có hoạt tính rất tốt đối với nhiều tác nhân gây bệnh/bệnh ở cây trồng trong cả lĩnh vực nông nghiệp và lĩnh vực khác và côn trùng/ve bét. Do đó, sáng chế cũng mô tả việc sử dụng các hợp chất có công thức chung I để tạo ra thuốc diệt nấm, thuốc trừ sâu/thuốc diệt ve bét trong lĩnh vực nông nghiệp hoặc lĩnh vực khác.

Sáng chế được giải thích qua các ví dụ về bệnh ở thực vật sau đây mà không bị giới hạn bởi các ví dụ này.

Các hợp chất có công thức chung I có thể được sử dụng để phòng trừ các bệnh sau đây ở cây trồng: bệnh nhiễm nấm *Oomycete*, như bệnh mốc sương (bệnh mốc sương ở cây dưa chuột, bệnh mốc sương ở cây cải dầu, bệnh mốc sương ở cây đậu tương, bệnh mốc sương ở cây củ cải, bệnh mốc sương ở cây mía, bệnh mốc sương ở cây thuốc lá, bệnh mốc sương ở cây đậu, bệnh mốc sương ở cây mướp ta, bệnh mốc sương ở cây bí đao, bệnh mốc sương ở cây dưa hương, bệnh mốc sương ở cây cải thìa, bệnh mốc sương ở rau bina, bệnh mốc sương ở cây cải củ, bệnh mốc sương ở cây nho, bệnh mốc sương ở cây hành), bệnh gỉ trắng (bệnh gỉ trắng ở cây cải dầu, bệnh gỉ trắng ở cây cải thìa), bệnh chết cây con (bệnh chết cây con ở cây cải dầu, bệnh chết cây con ở cây thuốc lá, bệnh chết cây con ở cây cà chua, bệnh chết cây con ở cây hồ tiêu, bệnh chết cây con ở cây cà tím, bệnh chết cây con ở cây dưa chuột, bệnh chết cây con ở cây bông), bệnh thối gốc (bệnh thân mềm ở cây hồ tiêu, bệnh thối gốc ở cây mướp ta, bệnh thối gốc ở cây bí đao), bệnh lụi (bệnh lụi do nấm *Phytophthora* ở cây đậu răng ngựa, bệnh lụi do nấm *Phytophthora* ở cây dưa chuột, bệnh thối gốc do nấm *Phytophthora* ở cây bí ngô, bệnh

lụi do nấm *Phytophthora* ở cây bí đao, bệnh lụi do nấm *Phytophthora* ở cây dưa hấu, bệnh lụi do nấm *Phytophthora* ở cây dưa hương, bệnh lụi do nấm *Phytophthora* ở cây hồ tiêu, bệnh lụi do nấm *Phytophthora* ở cây họ, bệnh lụi do nấm *Phytophthora* ở cây tỏi, bệnh lụi do nấm *Phytophthora* ở cây bông), bệnh héo muôn (bệnh héo muôn ở cây khoai tây, bệnh héo muôn ở cây cà chua), v.v.; các bệnh do nấm *Deuteromycotina* gây ra, như bệnh héo (bệnh héo do nấm *Fusarium* ở cây khoai lang, bệnh héo do nấm *Fusarium* ở cây bông, bệnh héo ở cây vừng, bệnh héo do nấm *Fusarium* ở cây thầu dầu, bệnh héo do nấm *Fusarium* ở cây cà chua, bệnh héo do nấm *Fusarium* ở cây đậu cô ve lùn, bệnh héo do nấm *Fusarium* ở cây dưa chuột, bệnh héo do nấm *Fusarium* ở cây mướp ta, bệnh héo do nấm *Fusarium* ở cây bí ngô, bệnh héo do nấm *Fusarium* ở cây bí đao, bệnh héo do nấm *Fusarium* ở cây dưa hấu, bệnh héo do nấm *Fusarium* ở cây dưa hương, bệnh héo do nấm *Fusarium* ở cây hồ tiêu, bệnh héo do nấm *Fusarium* ở cây đậu răng ngựa, bệnh héo do nấm *Fusarium* ở cây cải dầu, bệnh héo do nấm *Fusarium* ở cây đậu tương), bệnh thối rữa (bệnh thối rữa ở cây hồ tiêu, bệnh thối rữa ở cây cà tím, bệnh thối rữa do nấm *Fusarium* ở cây đậu cô ve lùn, bệnh thối rữa do nấm *Fusarium* ở cây dưa chuột, bệnh thối rữa do nấm *Fusarium* ở cây mướp đắng, bệnh thối rữa đen ở cây bông, bệnh thối rữa do nấm *Thielaviopsis* ở cây đậu răng ngựa), bệnh héo rũ (bệnh lở cổ rễ ở cây bông, bệnh lở cổ rễ ở cây vừng, bệnh thối do nấm *Rhizoctonia* ở cây hồ tiêu, bệnh thối do nấm *Rhizoctonia* ở cây dưa chuột, bệnh thối do nấm *Rhizoctonia* ở cây cải thìa), bệnh nấm than (bệnh nấm than ở cây lúa miến, bệnh nấm than ở cây bông, bệnh nấm than ở cây dâm bụt, bệnh nấm than ở cây đay, bệnh nấm than ở cây lanh, bệnh nấm than ở cây thuốc lá, bệnh nấm than ở cây dâu tằm, bệnh nấm than ở cây hồ tiêu, bệnh nấm than ở cây cà tím, bệnh nấm than ở cây đậu cô ve lùn, bệnh nấm than ở cây dưa chuột, bệnh nấm than ở cây mướp đắng, bệnh nấm than ở cây bí ngòi, bệnh nấm than ở cây bí đao, bệnh nấm than ở cây dưa hấu, bệnh nấm than ở cây dưa hương, bệnh nấm than ở cây vải), bệnh héo do nấm *Verticillium* (bệnh héo do nấm *Verticillium* ở cây bông, bệnh héo do nấm *Verticillium* ở cây hướng dương, bệnh héo do nấm *Verticillium* ở cây cà chua, bệnh héo do nấm *Verticillium* ở cây hồ tiêu, bệnh héo do nấm *Verticillium* ở cây cà tím), bệnh nấm vảy (bệnh nấm vảy ở cây bí ngòi, bệnh nấm vảy ở cây bí đao, bệnh nấm vảy ở cây dưa hương), bệnh mốc xám (bệnh mốc xám vỏ quả ở cây bông, bệnh mốc xám ở cây dâm bụt, bệnh mốc xám ở cây cà chua, bệnh mốc xám ở cây hồ tiêu, bệnh mốc xám ở cây đậu cô

ve lùn, bệnh mốc xám ở cây rau cần tây, bệnh mốc xám ở cây rau bina, bệnh thối mốc xám ở quả kiwi), bệnh đốm nâu (bệnh đốm nâu ở cây bông, bệnh đốm nâu ở cây đậu, bệnh đốm lá do nấm *Sercospora* ở cây củ cải, bệnh đốm nâu ở cây lạc, bệnh đốm lá nâu ở cây hồ tiêu, bệnh đốm lá do nấm *Corynespora* ở cây bí đao, bệnh đốm nâu ở cây đậu tương, bệnh đốm nâu ở cây hướng dương, bệnh lụi do nấm *Ascochyta* ở cây đậu, bệnh đốm nâu ở cây đậu răng ngựa), bệnh đốm đen (bệnh đốm đen ở cây lanh, bệnh đốm lá do nấm *Alternaria* ở cây cải dầu, bệnh đốm đen ở cây vừng, bệnh đốm lá do nấm *Alternaria* ở cây hướng dương, bệnh đốm lá do nấm *Alternaria* ở cây thầu dầu, bệnh đốm dạng đầu móng ở cây cà chua, bệnh đốm đen ở quả cây hồ tiêu, bệnh đốm đen ở cây cà tím, bệnh đốm lá ở cây đậu cô ve lùn, bệnh lụi do nấm *Alternaria* ở cây dưa chuột, bệnh đốm đen ở lá do nấm *Alternaria* ở cây rau cần tây, bệnh thối đen do nấm *Alternaria* ở cây cà rốt, bệnh lụi lá ở cây cà rốt, bệnh thối do nấm *Alternaria* ở cây táo, bệnh đốm nâu ở cây lạc), bệnh lụi đốm (bệnh đốm lá do nấm *Septoria* ở cây cà chua, bệnh đốm lá do nấm *Septoria* ở cây hồ tiêu, bệnh héo muện ở cây rau cần tây), bệnh lụi sớm (bệnh lụi sớm ở cây cà chua, bệnh lụi sớm ở cây hồ tiêu, bệnh lụi sớm ở cây cà tím, bệnh lụi sớm ở cây khoai tây, bệnh lụi sớm ở cây rau cần tây), bệnh đốm tròn (bệnh đốm vùng ở cây đậu tương, bệnh đốm tròn ở cây vừng, bệnh đốm vùng ở cây đậu cô ve lùn), bệnh lụi lá (bệnh lụi lá ở cây vừng, bệnh lụi lá ở cây hướng dương, bệnh lụi do nấm *Alternaria* ở cây dưa hấu, bệnh đốm do nấm *Alternaria* ở cây dưa hương), bệnh thối thân gốc (bệnh thối thân gốc ở cây cà chua, bệnh thối do nấm *Rhizoctonia* ở cây đậu cô ve lùn), và các bệnh khác (bệnh đốm lá lớn ở cây ngô, bệnh chết cây con ở cây dâm bụt, bệnh đạo ôn, bệnh vỏ đen ở cây kê, bệnh đốm mắt ở cây mía, bệnh thối vỏ quả do nấm *Aspergillus* ở cây bông, bệnh thối chồi ngọn ở cây lạc, bệnh lụi thân ở cây đậu tương, bệnh đốm đen ở cây đậu tương, bệnh lụi lá do nấm *Alternaria* ở cây dưa hương, bệnh đốm màng ở cây lạc, bệnh đốm lá đỏ ở cây chè, bệnh lụi do nấm *Phyllosticta* ở cây hồ tiêu, bệnh đốm lá do nấm *Phyllosticta* ở cây bí đao, bệnh thối đen ở cây rau cần tây, bệnh thối lõi cây rau bina, bệnh mốc lá ở cây dâm bụt, bệnh đốm lá nâu ở cây dâm bụt, bệnh lụi thân ở cây đậu, bệnh đốm do nấm *Cercospora* ở cây đậu tương, bệnh đốm lá ở cây vừng, bệnh đốm lá xám ở cây thầu dầu, bệnh đốm lá nâu ở cây chè, bệnh đốm lá do nấm *Cercospora* ở cây cà tím, bệnh đốm lá do nấm *Cercospora* ở cây đậu cô ve lùn, bệnh đốm lá do nấm *Cercospora* ở cây mướp đắng, bệnh đốm lá do nấm *Cercospora* ở cây dưa hấu, bệnh thối

khô ở cây đậu, bệnh thối rễ và thân ở cây hướng dương, bệnh thối thân ở cây đậu cô ve, bệnh thối địch ở cây đậu tương, bệnh đốm lá do nấm *Corynespora* ở cây cà tím, bệnh đốm lá địch do nấm *Corynespora* ở cây dưa chuột, bệnh mốc lá ở cây cà chua, bệnh mốc lá màu vàng-hung ở cây cà tím, bệnh đốm cacao ở cây đậu răng ngựa), v.v.; các bệnh do nấm *Basidiomycete* gây ra, như bệnh gỉ sắt (bệnh gỉ sắt dạng sọc ở cây lúa mì, bệnh gỉ sắt ở thân cây lúa mì, bệnh gỉ sắt ở lá cây lúa mì, bệnh gỉ sắt ở cây lạc, bệnh gỉ sắt ở cây hướng dương, bệnh gỉ sắt ở cây mía, bệnh gỉ sắt ở cây họ, bệnh gỉ sắt ở cây hành, bệnh gỉ sắt ở cây kê, bệnh gỉ sắt ở cây đậu tương), bệnh nấm than (bệnh nấm than ở ngọn cây ngô, bệnh nấm than ở cây ngô, bệnh nấm than ở phần thân cây lúa miến, bệnh nấm than ở hạt cây lúa miến, bệnh nấm than cứng ở cây lúa miến, bệnh nấm than ở cây lúa miến, bệnh nấm than ở hạt kê, bệnh nấm than ở cây mía, bệnh gỉ sắt ở cây đậu cô ve), và các bệnh khác (ví dụ, bệnh thối vỏ ở cây lúa mì và bệnh thối vỏ ở cây lúa gạo), v.v.; các bệnh do nấm *Ascomycete* gây ra, như bệnh phấn trắng (bệnh phấn trắng ở cây lúa mì, bệnh phấn trắng ở cây cải dầu, bệnh phấn trắng ở cây vừng, bệnh phấn trắng ở cây hướng dương, bệnh phấn trắng ở cây củ cải, bệnh phấn trắng ở cây cà tím, bệnh phấn trắng ở cây đậu, bệnh phấn trắng ở cây mướp ta, bệnh phấn trắng ở cây bí ngô, bệnh phấn trắng ở cây bí ngòi, bệnh phấn trắng ở cây bí đao, bệnh phấn trắng ở cây dưa hương, bệnh phấn trắng ở cây nho, bệnh phấn trắng ở cây đậu răng ngựa), bệnh thối do nấm *Sclerotinia* (bệnh thối do nấm *Sclerotinia* ở cây lanh, bệnh thối do nấm *Sclerotinia* ở cây cải dầu, bệnh thối do nấm *Sclerotinia* ở cây đậu tương, bệnh thối do nấm *Sclerotinia* ở cây lạc, bệnh thối do nấm *Sclerotinia* ở cây thuốc lá, bệnh thối do nấm *Sclerotinia* ở cây hồ tiêu, bệnh thối do nấm *Sclerotinia* ở cây cà tím, bệnh thối do nấm *Sclerotinia* ở cây đậu cô ve, bệnh thối do nấm *Sclerotinia* ở cây đậu, bệnh thối do nấm *Sclerotinia* ở cây dưa chuột, bệnh thối do nấm *Sclerotinia* ở cây mướp đắng, bệnh thối do nấm *Sclerotinia* ở cây bí đao, bệnh thối do nấm *Sclerotinia* ở cây dưa hấu, bệnh thối thân ở cây rau cần tây), bệnh nấm vảy (bệnh nấm vảy ở cây táo, bệnh nấm vảy ở cây lê), v.v..

Các hợp chất có công thức chung I có thể được sử dụng để phòng trừ các côn trùng: bộ Cánh cứng *Coleoptera*, như *Acanthoscelides spp.*, *Acanthoscelides obtectus*, *Agilus planipennis*, *Agriotes spp.*, *Anoplophora glabripennis*, *Anthonomus spp.*, *Anthonomus grandis*, *Aphidius spp.*, *Apion spp.*, *Apogonia spp.*, *Atacnius sprctulus*,

Atomaria linearis, pygmy mangold beetle, *Aulacophore* spp., *Bothynoderes punctiventris*, *Bruchus* spp., *Bruchus pisorum*, *Cacoesia*, *Cacoesia* spp., *Callosobruchus maculatus*, *Carpophilus hemipteras*, *Cassida vittata*, *Ccrotorna* spp., *Ccrotoma*, *Ccrotoma* spp., *Cerotoma trifurcata*, *Ceutorhynchus* spp., *Ceutorhynchus assimilis*, bọ vòi voi ở lá cây cải bắp, *Ceutorhynchus napi*, bọ vòi voi *Curculio* ở cây cải bắp, *Chaetocnema* spp., *Colaspis* spp., *Conoderus scalaris*, *Conoderus stigmosus*, *Conotrachelus nenuphar*, *Cotinus nitidis*, Green June beetle, *Crioceris asparagi*, *Cryptolestes ferrugineus*, rusty grainbeetle, *Cryptolestes pusillus*, *Cryptolestes turcicus* Turkish grain beetle, *Ctenicera* spp., *Curculio* spp., *Cyclocephala* spp., *Cylindrocpturus adspersus*, bọ vòi voi ở thân cây hướng dương, *Deporaus marginatus*, bọ vòi voi ăn lá cây xoài, *Dermestes lardarius*, *Dermestes maculatus*, *Diabrotica* spp., *Epilachna varivestis*, *raustinus cubae*, *Hylobius pales*, pales weevil, *Hypera* spp., *Hypera postica*, *Hyperdoes* spp., *Hyperodes* weevil, *Hypothenemus hampei*, *Ips* spp., engravers, *Lasioderma serricorne*, *Leptinotarsa decemlineata*, *Liogenys fuscus*, *Liogenys suturalis*, *Lissorhoptrus oryzophilus*, *Lyctus* spp., powder post beetles, *Maecolaspis joliveti*, *Megascelis* spp., *Melanotus communis*, *Meligethes* spp., *Meligethes aeneus*, blossom beetle, *Melolontha melolontha*, *Oberea brevis*, *Oberea linearis*, *Oryctes rhinoceros*, date palm beetle, *Oryzaephilus mercator*, merchant grain beetle, *Oryzaephilus surinamensis*, sawtoothed grain beetle, *Otiorhynchus* spp., *Oulema melanopus*, bọ ăn lá cây ngũ cốc, *Oulema oryzae*, *Pantomorus* spp., *Phyllophaga* spp., *Phyllophaga cuyabana*, *Phyllotreta* spp., *Phynchites* spp., *Popillia japonica*, *Prostephanus truncatus*, một đực hạt lớn, *Rhizopertha dominica*, một đực hạt nhỏ, *Rhizotrogus* spp., European chafer, *Rhynchophorus* spp., *Scolytus* spp., *Shenophorus* spp., *Sitona lineatus*, pea leaf weevil, *Sitophilus* spp., *Sitophilus granaries*, granary weevil, *Sitophilus oryzae*, bọ vòi voi ở cây lúa gạo, *Stegobium paniceum*, drugstore beetle, *Tribolium* spp., *Tribolium castaneum*, một bột đỏ, *Tribolium confusum*, một bột hỗn hợp, *Trogoderma variabile*, warehouse beetle and *Zabrus tenebrioides*.

Bộ côn trùng Cánh màng *Dermaptera*.

Bộ Cánh lưới *Dictyoptera*, như *Blattella germanica*, German cockroach, *Blatta orientalis*, *Parcoblatta pennsylvanica*, *Periplaneta americana*, American cockroach, *Periplaneta australasiae*, Australian cockroach, *Periplaneta brunnea*, brown

cockroach, *Periplaneta fuliginosa*, *smokybrown cockroach*, *Pyncoselus suninamensis*, *Surinam cockroach* và *Supella longipalpa*, *brownbanded cockroach*.

Bộ côn trùng hai cánh *Diptera*, như *Aedes spp.*, *Agromyza frontella*, *alfalfa blotch leafminer*, *Agromyza spp.*, *Anastrepha spp.*, *Anastrepha suspensa*, *Caribbean fruit fly*, *Anopheles spp.*, *Batrocera spp.*, *Bactrocera cucurbitae*, *Bactrocera dorsalis*, *Ceratitis spp.*, *Ceratitis capitata*, *Chrysops spp.*, *Cochliomyia spp.*, *Contarinia spp.*, *Culex spp.*, *Dasineura spp.*, *Dasineura brassicae*, *Delia spp.*, *Delia platura*, *seedcorn maggot*, *Drosophila spp.*, *Fannia spp.*, *Fannia canicularis*, ruồi nhà nhỏ, *Fannia scalaris*, *Gasterophilus intestinalis*, *Gracillia perseae*, *Haematobia irritans*, *Hylemyia spp.*, *root maggot*, *Hypoderma lineatum*, *common cattle grub*, *Liriomyza spp.*, *Liriomyza brassica*, *serpentine leafminer*, *Melophagus ovinus*, *Musca spp.*, *muscid fly*, *Musca autumnalis*, *face fly*, *Vusca domestica*, ruồi nhà, *Oestrus ovis*, *sheep bot fly*, *Oscinella frit*, *Pegomyia betae*, sâu đục lá cây củ cải, *Phorbia spp.*, *Psila rosae*, *carrotrust fly*, *Rhagoletis cerasi*, *cherry fruit fly*, *Rhagoletis pomonella*, *apple maggot*, *Sitodiplosis mosellana*, *orange wheat blossom midge*, *stomoxys calcitrans*, *stable fly*, *Tahanus spp.* và *Tipula spp.*.

Bộ cánh nửa *Hemiptera*, như *Acrosternum hilare*, *green stink bug*, *Blissus leucopterus*, *chinch bug*, *Calocoris norvegicus*, bọ xít ở cây khoai tây, *Cimex hemipterus*, *tropical bed bug*, *Cimex lectularius*, *bed bug*, *Daghertus fasciatus*, *Dichelops furcatus*, *Dysdercus suturellus*, bọ xít ở cây bông, *Edessa meditabunda*, *Eurygaster maura*, rệp ngũ cốc, *Euschistus heros*, *Euschistus servus*, *brown stink bug*, *Helopeltis antonii*, *Helopeltis theivora*, *tea blight plantbug*, *Lagynotomus spp.*, *Leptocorisa oratorius*, *Leptocorisa varicorni*, *Lygus spp.*, *plant bug*, *Lygus hesperus*, *western tarnished plant bug*, *Maconellicoccus hirsutus*, *Neurocolpus longirostris*, *Nezara viridula*, *southern green stink bug*, *PhyLocoris spp.*, *Phytocoris californicus*, *Phytocoris relativus*, *Piezodorus guildingi*, *Poecilocapsus lineatus*, *foullined plant bug*, *Psallus vaccinicola*, *Pseudacysta perseae*, *Scaptocoris castanea* và *Triatoma spp.*, *bloodsuckingconenose bug*, *kissing bug*.

Bộ côn trùng cánh giống *Homoptera*, như *Acrythosiphonpisum*, rệp cây đậu, *Adelges spp.*, *adelgids*, *Aleurodes proletella*, *Aleurodicus disperses*, *Aleurothrixus flccosus*, ruồi trắng có lông, *Aluacaspis spp.*, *Amrasca bigutella bigutella*, *Aphrophora*

spp., rầy xanh đuôi đen, *Aonidiella aurantii*, California red scale, *Aphis spp.*, *Aphis gossypii*, rệp cây bông, *Aphis pomi*, rệp cây táo, *Aulacorthum solan*, rệp cây địa hoàng, *Bemisia spp.*, *Bemisia argentifolii*, *Bemisia tabaci*, ruồi trắng ở cây khoai tây lang, *Brachycolus noxius*, Russian aphid, *Brachycorynclia asparagi*, rệp cây măng tây, *Brevinnia rehi*, *Brevicoryne brassicae*, *Ceroplastes spp.*, *Ceroplastes rubens*, red wax scale, *Chionaspis spp.*, *Chrysomphalus spp.*, *Coccus spp.*, *Dysaphis plantaginea*, rệp cây gioi, *Empoasca spp.*, *Eriosoma lanigerum*, rệp táo có lông, *Icerya purchasi*, cottony cushion scale, *Idioscopus nitidulus*, rầy xanh đuôi đen ở cây xoài, *Laodelphax striatellus*, smaller brown planthopper, *Lepidosaphes spp.*, *Macrosiphum spp.*, *Macrosiphum euphorbiae*, rệp cây khoai tây, *Macrosiphum granarium*, English grain aphid, *Macrosiphum rosae*, rệp cây hoa hồng, *Macrosteles quadrilineatus*, rầy xanh đuôi đen ở cây cúc sao, *Mahanarva frimbiolata*, *Metopolophium dirhodum*, rose grain aphid, *Midis longicornis*, *Myzus persicae*, rệp đào, *Nephotettix spp.*, *Nephotettix cinctipes*, rầy xanh đuôi đen ở cây chè, *Nilaparvata lugens*, rầy nâu, *Parlatoria pergandii*, chaff scale, *Parlatoria ziziphi*, ebony scale, *Peregrinus maidis*, corn delphacid, *Philaenus spp.*, *Phylloxera vitifoliae*, grape phylloxera, *Physokermes piceae*, spruce bud scale, *Planococcus spp.*, *Pseudococcus spp.*, *Pseudococcus brcvipcs*, pine apple mealybug, *Quadraspidiotus perniciosus*, San Jose scale, *Rhaphalosiphum spp.*, *Rhaphalosiphum maidi*, rệp lá ngô, *Rhaphalosiphum padi*, oatbird-cherry aphid, *Saissetia spp.*, *Saissetia oleae*, *Schizaphis graminum*, rệp xanh lục, *Sitobion avenae*, *Sogatella furcifera*, white-backed planthopper, *Therioaphis spp.*, *Toumeyella spp.*, *Toxoptera spp.*, *Trialeurodes spp.*, *Trialeurodes vaporariorum*, ruồi trắng nhà kính, *Trialeurodes abutiloneus*, bandedwing whitefly, *Unaspis spp.*, *Unaspis yanonensis*, arrowhead scale và *Zulia entreriana*.

Bộ côn trùng cánh màng *Hymenoptera*, như *Acromyrmex spp.*, *Athalia rosae*, *Atta spp.*, kiến ăn lá, *Camponotus spp.*, kiến đục lỗ, *Diprion spp.*, sawfly, *Formica spp.*, *Iridomyrmex humilis*, Argentine ant, *Monomorium spp.*, *Monomorium minimum*, kiến đen nhỏ, *Monomorium pharaonis*, haraoh ant, *Neodiprion spp.*, *Pogonomyrmex spp.*, *Polistes spp.*, paper wasp, *Solenopsis spp.*, *Tapinoma sessile*, kiến hôi, *Tetranomium spp.*, pavement ant, *Vespula spp.*, yellow jacket và *Xylocopa spp.*, ong đục lỗ.

Côn trùng cánh đều *Isoptera*, như *Coptotermes spp.*, *Coptotermes curvignathus*,

Coptotermes frenchii, *Coptotermes formosanus*, *Formosan subterranean termite*, *Cornitermes spp.*, *nasute termite*, *Cryptotermes spp.*, *Heterotermes spp.*, *desert subterranean termite*, *Heterotermes aureus*, *Kalotermes spp.*, *Incistitermes spp.*, *Macrotermes spp.*, *fungus growing termite*, *Marginitermes spp.*, *Microcerotermes spp.*, *harvester termite*, *Microtermes obesi*, *Procornitermes spp.*, *Reticulitermes spp.*, *Reticulitermes banyulensis*, *Reticulitermes grassei*, *Reticulitermes flavipes*, *Reticulitermes hageni*, *Reticulitermes hesperus*, *Reticulitermes santonensis*, *Reticulitermes speratus*, *Reticulitermes tibialis*, *Reticulitermes virginicus*, *Schedorhinotermes spp.* và *Zootermopsis spp.*.

Côn trùng cánh vảy *Lepidoptera*, như *Achoea janata*, *Adoxophyes spp.*, *Adoxophyes orana*, *Agrotis spp.*, *Agrotis ipsilon*, *Alabama argillacea*, sâu ăn lá cây bông *Amorbia cuneana*, *Amyelosis transitella*, navel orangeworm, *Anacamptodes defectaria*, *Anarsia lineatella*, sâu đục cành ở cây đào, *Anomis sabulijera*, sâu đo ở cây đay, *Anticarsia gemmatilis*, velvetbean caterpillar, *Archips argyrospila*) (sâu cuốn lá ở cây ăn quả, *Archips rosana*, sâu cuốn lá ở cây hoa hồng, *Argyrotaenia spp.*, *tortricid moths*, *Argyrotaenia citrana*, sâu cuốn lá ở cây cam, *Autographa gamma*, *Bonagota cranaodes*, *Borbo cinnara*, sâu cuốn lá ở cây lúa gạo, *Bucculatrix thurberiella*, sâu khoan lá ở cây bông, *Caloptilia spp.*, *Capua reticulana*, *Carposina niponensis*, sâu bướm ở quả đào, *Chilo spp.*, *Chlumetia transversa*, sâu đục chồi cây xoài, *Choristoneura rosaceana*, *oblique banded leaf roller*, *Chrysodeixis spp.*, *Cnaphalocerus medinalis*, sâu cuốn lá cỏ, *Colias spp.*, *Conpomorpha cramerella*, *Cossus cossus*, *Crambus spp.*, *Sod webworms*, *Cydia funebrana*, sâu bướm ở cây mận, *Cydia molesta*, *oriental fruit moth*, *Cydia nignicana*, sâu bướm ở cây đậu, *Cydia pomonella*, *codling moth*, *Darna diducta*, *Diaphania spp.*, sâu đục củ, *Diatraea spp.*, sâu đục thân, *Diatraea saccharalis*, sâu đục thân cây mía, *Diatraea graniosella*, sâu đục thân cây ngô Tây Nam, *Earias spp.*, *Earias insulata*, *Egyptian bollworm*, *Earias vit.ella*, *rough northern bollworm*, *Ecdytopopha aurantianum*, *Elasmopalpus lignosellus*, sâu đục thân cây ngô nhỏ, *Epiphysias postruttana*, *light brown*, sâu bướm ở cây táo, *Ephestia spp.*, *Ephestia cautella*, sâu bướm ở cây hạnh nhân, *Ephestia elutella*, sâu bướm ở cây thuốc lá, *Ephestia kuehniella*, *Mediterranean flour moth*, *Epimeces spp.*, *Epinotia aporema*, *Erionota thrax*, bướm nhảy nâu ở cây chuối, *Eupoecilia ambiguella*, sâu bướm ở cây

nho, *Euxoa auxiliaris*, sâu cắn rễ rế, *Feltia* spp., *Gortyna* spp., *Grapholita molesta*, oriental fruit moth, *Hedylepta indicata*, sâu cuốn lá cây đậu cô ve lùn, *Helicoverpa* spp., *Helicoverpa armigera*, sâu xanh ở cây bông, *Helicoverpa zea*, *Heliothis* spp., *Heliothis virescens*, sâu đục chồi ở cây thuốc lá, *Hellula undalis*, sâu kéo màng ở cây cải bắp, *Indarbela* spp. *Keiferia lycopersicella*, sâu kim ở cây cà chua, *Leucinodes orbonalis*, sâu đục quả cà tím, *Leucoptera malifoliella*, *Lithocolletis* spp., *Lobesia botrana*, sâu bướm ở quả nho, *Loxagrotis* spp., *Loxagrotis albicosta*, sâu cắn rễ ở cây đậu tây, *Lymantria dispar*, gypsy moth, *Lyonetiacleckella*, sâu đục lá ở cây táo, *Mahasena corbetti*, sâu áo toi ở cây cọ dầu, *Malacosoma* spp., tent caterpillars, *Mamestra brassicae*, sâu cắn ngọn cây cải bắp, *Maruca testulalis*, *Metisa plana*, *Mythimna unipuncta*, sâu cắn gié điển hình, *Neoleucinodes elegantalis*, sâu đục quả cà chua nhỏ, *Nymphula depunctalis*, sâu phao ở cây lúa gạo, *Operophtera brumata*, sâu bướm mùa đông, *Ostrinia nubilalis*, sâu đục thân cây ngô châu Âu, *Oxydia vesulia*, *Pandemis cerasana*, common currant tortrix, *Pandemis heparana*, sâu cuốn lá táo nâu, *Papilio demodocus*, *Pectinophora gossypiella*, sâu hồng hại bông, *Peridroma* spp., *Peridroma saucia*, sâu cắn rễ dạng đốm nhiều màu, *Perileucoptera coffeella*, sâu đục lá màu trắng hại cây cà phê, *Phthorimaea operculella*, sâu ở củ khoai tây, *Phyllocnistis citrella*, *Phyllonorycter* spp., *Pieris rapae*, imported cabbageworm, *Plathypena scabra*, *Plodia interpunctella*, Indian meal moth, *Plutella xylostella*, sâu tơ, *Polychrosis viteana*, sâu bướm hại nho, *Prays endocarps*, *Prays oleae*, sâu bướm ở cây oliu, *Pseudaletia* spp., *Pseudaletia unipunctata*, *Pseudoplusia includens*, sâu đo ở cây đậu tương, *Rachiplusia nu*, *Scirpophaga incertulas*, *Sesamia* spp., *Sesamia inferens*, sâu đục thân hồng hại cây lúa gạo, *Sesamia nonagrioides*, *Setora nitens*, *Sitotroga cerealella*, Angoumois grain moth, *Sparganothis pilleriana*, *Spodoptera* spp., *Spodoptera exigua*, sâu cắn gié hại cây cải củ, *Spodoptera fugiperda*, sâu cắn gié mùa thu, *Spodoptera oridania*, sâu cắn gié Southern, *Synanthedon* spp., *Thecla basilides*, *Thermisia gemmatalis*, *Tineola bisselliella*, webbing clothes moth, *Trichoplusia ni*, sâu đo ở cây cải bắp, *Tuta absoluta*, *Yponomeuta* spp., *Zeuzeracoffeae*, red branch borer và *Zeuzera pyrina*, leopard moth.

Bộ ăn lông Mallophaga, loài rận lông, như *Bovicola ovis*, rận cừu, *Menacanthus stramineus*, rận ở gà con và *Menopon gallinea*, rận ở gà mái thông thường.

Côn trùng cánh thẳng Orthoptera, như *Anabrus simplex*, Mormon cricket,

Gryllotalpidae, mole cricket, *Locusta migratoria*, *Melanoplus spp.*, *Microcentrum retinerve*, angular winged katydid, *Pterophylla spp.*, *histocerca gregaria*, *Scudderia furcata*, fork tailed bush katydid và *Valanga nigricorni.*, rận hút máu như *Haematopinus spp.*, *Linognathus ovillus*, rận cừu, *Pediculus humanus capitis*, *Pediculus humanus humanus* và *Pthirus pubis*, rận mu.

Bộ bọ chét *Siphonaptera*, như *Ctenocephalides canis*, bọ chét ở chó, *Ctenocephalides felis*, bọ chét ở mèo và bọ chét ở người *Pulex irritans*.

Bộ cánh tơ *Thysanoptera*, như *Frankliniella fusca*, bọ trĩ hại cây thuốc lá, *Frankliniella occidentalis*, western flower thrips, *Frankliniella shultzei*, *Frankliniella williamsi*, bọ trĩ hại cây ngô, *Heliothrips haemorrhoidalis*, bọ trĩ nhà kính, *Rhipiphorothrips cruentatus*, *Scirtothrips spp.*, *Scirtothrips cirri*, bọ trĩ hại cây chanh, *Scirtothrips dorsalis*, bọ trĩ hại cây chè vằng, *Taeniothrips rhopalantennalis* và *Thrips spp.*.

Bộ đuôi tơ *Thysanura*, họ Dài đuôi, như *Lepisma spp.*, silverfish và *Thermobia spp.*.

Bộ ve bét *Acarina*, ve và bét, như *Acaropsis woodi*, ve bét ký sinh đường thở của ong mật, *Acarus spp.*, *Acarus siro*, mọt hạt, *Aceria mangiferae*, ve bét ăn chồi của cây xoài, *Aculops spp.*, *Aculops lycopersici*, mọt russet ở cây cà chua, *Aculops pelekasi*, *Aculus pelekassi*, *Aculus schlechtendali*, ve bét gây bệnh gỉ sắt ở cây táo, *Amblyomma americanum*, lone star tick, *Boophilus spp.*, *Brevipalpus obovatus*, ve bét hại cây râm, *Brevipalpus phoenicis*, mọt nhà màu đỏ và đen, *Demodex spp.*, mọt mange, *Dermacentor spp.*, *Dermacentor variabilis*, ve chó Mỹ, *Dermatophagoides pteronyssinus*, mọt nhà, *Eotetranychus spp.*, *Eotetranychus carpini*, nhện vàng, *Epitimerus spp.*, *Eriophyes spp.*, *Odes spp.*, *Metatetranychus spp.*, *Notoedres cati*, *Oligonychus spp.*, *Oligonychus coffee*, *Oligonychus ilicus*, southern red mite, *anonychus spp.*, *Panonychus cirri*, ve bét đỏ hại cây chanh, *Panonychus ulmi*, European red mite, *Phyllocoptruta oleivora*, ve bét gây bệnh gỉ sắt ở cây chanh, *Polyphagotarsonemus latus*, broad mite, *Rhipicephalus sanguineus*, ve bét chó màu nâu, *Rhizoglyphus spp.*, ve bét hại cây hành, *Sarcoptes scabiei*, ve bét gây bệnh ghẻ, *Tegolophus perseae florum*, *Tetranychus spp.*, *Tetranychus urticae*, nhện hai chấm và *Varroa destructor*.

Lớp giun tròn như *Aphelenchoides spp.*, giun tròn ở chồi, lá và gỗ thông,

Belonolaimus spp., sting nematodes, *Criconebella spp.*, ring nematodes, *Dirofilaria immitis*, giun tim ở chó, *Ditylenchus spp.*, *Heterodera spp.*, giun tròn ở kén, *Heterodera zaeae*, giun tròn ở bắp ngô, *Hirschmanniella spp.*, giun tròn ở rễ, *Hoplolaimus spp.*, lance nematodes, *Meloidogyne spp.*, *Meloidogyne incognita*, *Onchocerca volvulus*, giun móc, *PraLylenchus spp.*, lesion nematode, *Radopholus spp.*, giun tròn dạng đào rúc và *Rotylenchus reniformis*, giun tròn dạng thận.

Ngành nhiều chân *Symphyla* như *Scutigera immaculata*.

Nhờ các đặc tính tích cực của các hợp chất đã được đề cập trên đây, các hợp chất này có thể được sử dụng theo cách có lợi trong việc bảo vệ cây trồng ở trang trại và cây trồng trong vườn, động vật nuôi và động vật nhân giống, cũng như các môi trường có tác nhân gây bệnh, côn trùng và ve bét gây hại mà con người thường xuyên tiếp xúc với.

Để thu được hiệu quả mong muốn, liều dùng của các hợp chất cần được sử dụng có thể thay đổi theo nhiều yếu tố khác nhau, ví dụ, hợp chất được sử dụng, cây trồng được bảo vệ, loại sinh vật gây hại, mức độ nhiễm bệnh, các điều kiện khí hậu, phương pháp sử dụng và loại sản phẩm được chọn.

Liều dùng của các hợp chất nằm trong khoảng từ 10g đến 5kg/hecta có thể tạo ra đủ hiệu quả phòng trừ.

Mục đích khác của sáng chế còn bao gồm các chế phẩm diệt nấm, trừ sâu/điệt ve bét chứa hợp chất có công thức chung I làm hoạt chất, và tỷ lệ % trọng lượng của hoạt chất trong chế phẩm này nằm trong khoảng từ 0,5 đến 99%. Chế phẩm diệt nấm, trừ sâu/điệt ve bét còn chứa chất mang chấp nhận được trong nông nghiệp, lâm nghiệp và y tế.

Các chế phẩm theo sáng chế có thể được sử dụng ở nhiều dạng khác nhau. Thông thường, các hợp chất có công thức chung I làm hoạt chất có thể được hòa tan hoặc phân tán trong chất mang hoặc tạo thành dạng chế phẩm sao cho các hợp chất này có thể được phân tán dễ dàng làm thuốc diệt nấm hoặc thuốc trừ sâu. Ví dụ, các dạng chế phẩm hóa học có thể được tạo thành bột thấm ướt được, dầu có thể trộn lẫn và chảy được, dung dịch huyền phù, dung dịch nhũ tương, dung dịch nước hoặc dịch cô có thể nhũ hóa, v.v.. Do đó, trong các chế phẩm này, ít nhất một chất mang dạng lỏng hoặc dạng rắn được thêm vào, và thông thường (các) chất hoạt động bề mặt thích hợp có thể được thêm vào, nếu cần.

Sáng chế còn đề xuất phương pháp phòng trừ nấm gây bệnh ở cây, côn trùng, ve bét gây hại, bao gồm bước phun chế phẩm theo sáng chế vào nấm gây bệnh ở cây hoặc khu vực sinh trưởng của chúng. Liều dùng hữu hiệu thích hợp của các hợp chất theo sáng chế thường nằm trong khoảng từ 10 g/ha đến 1000 g/ha, tốt hơn là từ 20 g/ha đến 500 g/ha.

Trong một số ứng dụng, một hoặc nhiều thuốc diệt nấm, thuốc trừ sâu/thuốc diệt ve bét khác, thuốc diệt cỏ, chất điều hòa sự sinh trưởng của cây trồng hoặc phân bón có thể được bổ sung vào chế phẩm diệt nấm, trừ sâu/điệt ve bét theo sáng chế để tạo ra hiệu quả và tác dụng bổ sung.

Cần lưu ý rằng có thể tiến hành các cải biến và thay đổi trong phạm vi yêu cầu bảo hộ của sáng chế.

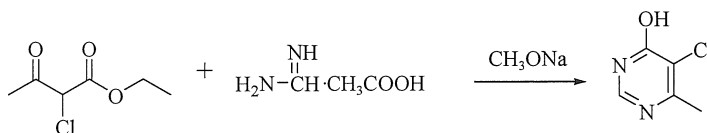
Ví dụ thực hiện sáng chế

Sáng chế được minh họa qua các ví dụ sau mà không bị giới hạn bởi các ví dụ này. (Tất cả các chất ban đầu đều có sẵn trên thị trường, trừ khi được chỉ rõ theo cách khác).

Các ví dụ điều chế

Ví dụ 1: điều chế hợp chất trung gian 4,5-diclo-6-methylpyrimidin

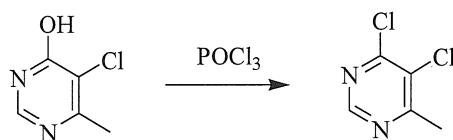
1) Điều chế hợp chất 4-hydroxyl-5-clo-6-methylpyrimidin



Cho thêm từ từ dung dịch chứa 8,80g (0,16mol) CH_3ONa trong metanol vào dung dịch chứa 11,30g (0,11mol) formimidamitaxetat trong 50ml metanol ở nhiệt độ trong phòng kèm theo khuấy, hỗn hợp này được khuấy trong 2 giờ nữa sau khi cho thêm ở nhiệt độ trong phòng. Tiếp đó, cho thêm 11,17g (0,068mol) ethyl 2-clo-3-oxobutanoat vào, hỗn hợp này được tiếp tục khuấy trong thời gian từ 5 đến 7 giờ nữa ở nhiệt độ trong phòng. Hỗn hợp sau khi phản ứng kết thúc được theo dõi bằng phương pháp sắc ký lớp mỏng, hỗn hợp phản ứng được cô dưới áp suất giảm và độ pH được điều chỉnh đến mức 5-6 bằng HCl , và sau đó được lọc để thu được chất rắn màu vàng cam, pha nước được chiết bằng ethyl axetat ($3 \times 50\text{ml}$), làm khô bằng magie sulfat khan, lọc và sau đó được cô

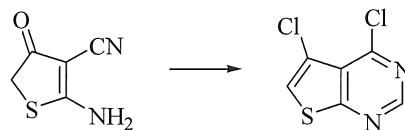
dưới áp suất giảm. Phần cặn được hòa tan với 50ml etyl axetat, để yên qua đêm để thu được 6,48g chất rắn màu vàng cam với hiệu suất 66%. Nhiệt độ nóng chảy (m.p.) nằm trong khoảng từ 181 đến 184°C.

2) Điều chế hợp chất trung gian 4,5-diclo-6-metylpyrimidin



Cho thêm nhỏ giọt 50ml POCl₃ vào dung dịch chứa 14,5g (0,1mol) 4-hydroxyl-5-clo-6-metylpyrimidin trong 50ml toluen, hỗn hợp này được đun hồi lưu trong thời gian từ 5 đến 7 giờ sau khi cho thêm. Hỗn hợp sau khi phản ứng kết thúc được theo dõi bằng phương pháp sắc ký lớp mỏng, hỗn hợp phản ứng được cô dưới áp suất giảm để loại bỏ toluen và lượng POCl₃ dư, và sau đó được rót vào nước đá. Pha nước được chiết bằng etyl axetat (3×50ml), các pha hữu cơ được kết hợp, làm khô bằng magie sulfat khan, lọc và sau đó được cô dưới áp suất giảm. Phần cặn được tinh chế qua cột silic oxit (etyl axetat/ete dầu mỏ theo tỷ lệ 1:5 làm dung môi rửa giải) để thu được 14,43g chất lỏng màu vàng với hiệu suất 88,5%.

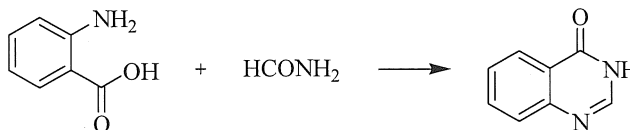
Ví dụ 2: điều chế hợp chất trung gian 4,5-diclothieno[2,3-d]pyrimidin



Cho thêm 38ml DMF vào dung dịch chứa 2-amino-4-oxo-4,5-dihydrothiophen-3-carbonitril (70g, 0,5mol) được hòa tan trong 250ml phosphoryl trichlorua trong bể nước đá trong khoảng 30 phút, và hỗn hợp này được cho phản ứng trong 1 giờ ở nhiệt độ trong phòng, sau đó được gia nhiệt đến 75°C trong 3 giờ. Hỗn hợp sau khi phản ứng kết thúc được theo dõi bằng phương pháp sắc ký lớp mỏng, hỗn hợp này được làm nguội đến nhiệt độ trong phòng và được rót vào nước đá, pha nước được chiết bằng etyl axetat (3×80ml), các pha hữu cơ được kết hợp, lọc để thu được 89,1g 4,5-diclothieno[2,3-d]pyrimidin dưới dạng chất rắn màu xám sẫm với hiệu suất 86,9%, nhiệt độ nóng chảy nằm trong khoảng từ 160 đến 161°C.

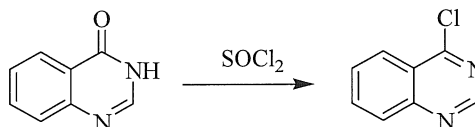
Ví dụ 3: điều chế hợp chất trung gian 4-cloquinazolin

1) Điều chế hợp chất trung gian quinazolin-4(3H)-on



Cho axit 2-aminobenzoic (13,7g, 0,1mol) và 20ml formamit vào bình ba cổ có dung tích 250ml, sau đó hỗn hợp này được gia nhiệt đến 140°C và được cho phản ứng trong thời gian từ 4 đến 10 giờ, và được theo dõi bằng phương pháp TLC (sắc ký lớp mỏng) cho đến khi phản ứng kết thúc. 80ml nước được bổ sung vào kèm theo khuấy khi dung dịch được làm nguội đến 100°C, sau đó được làm nguội đến nhiệt độ trong phòng, lọc và rửa chất rắn bằng ete dietyl khan để thu được 10,96g quinazolin-4(3H)-on dưới dạng chất rắn màu nâu với hiệu suất 75,1%.

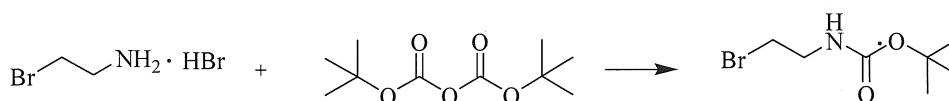
2) Điều chế hợp chất trung gian 4-cloquinazolin



Hòa tan quinazolin-4(3H)-on (14,6g, 0,1mol) trong 50ml sulfuryl diclorua, và sau đó gia nhiệt hồi lưu hỗn hợp này trong thời gian từ 4 đến 6 giờ. Hỗn hợp sau khi phản ứng kết thúc được theo dõi bằng phương pháp sắc ký lớp mỏng, hỗn hợp này được rót vào nước đá và khuấy trong khoảng 30 phút, lọc và rửa chất rắn bằng ete dietyl khan để thu được 10,96g 4-cloquinazolin dưới dạng chất rắn màu nâu với hiệu suất 92,7%.

Ví dụ 4: điều chế hợp chất trung gian 2-(1-(4-clophenyl)-1H-pyrazol-3-yloxy)etanamin hydroclorua

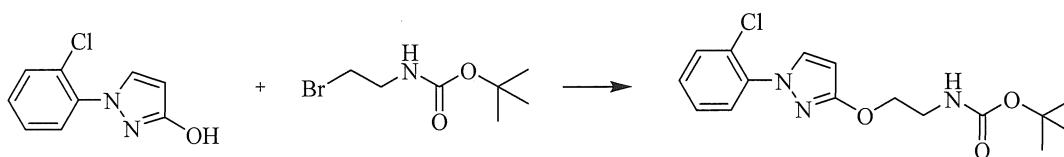
1) Điều chế hợp chất N-Boc-2- brometylamin



Cho thêm nhỏ giọt di-tert-butyl dicacbonat 21,80g (0,1mol) vào dung dịch chứa 2-brometylamin hydrobromua 20,5g (0,1mol) và natri bicacbonat 10,08g (0,12mol) trong 80ml tetrahydrofuran và 50ml nước ở nhiệt độ trong phòng, sau đó hỗn hợp phản

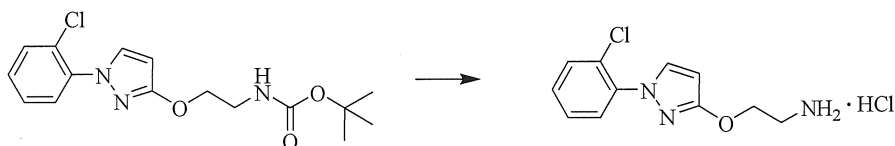
ứng được tiếp tục khuấy trong thời gian từ 4 đến 10 giờ, và được theo dõi bằng phương pháp TLC (sắc ký lớp mỏng) cho đến khi phản ứng kết thúc, lượng dung môi dư được làm bay hơi dưới áp suất giảm. Sau đó, hỗn hợp này được rót vào etyl axetat (3×50ml) để tách lớp hữu cơ, pha hữu cơ được rửa bằng 50ml nước muối, làm khô và làm bay hơi dưới áp suất giảm để thu được 21,84g hợp chất trung gian đích dưới dạng dầu không màu với hiệu suất 97,5%.

2) Điều chế hợp chất tert-butyl 2-(1-(2-clophenyl)-1H-pyrazol-3-yloxy)ethylcarbamate



Cho thêm 2,76g (0,02mol) kali cacbonat vào dung dịch chứa 2,24g (0,01mol) tert-butyl 2-bromethylcarbamate và 1,94g (0,01mol) 1-(2-clophenyl)-1H-pyrazol-3-ol (theo tài liệu: Organic Preparations and Procedures International, 34(1), 98-102; 2002) trong 50ml butanon. Hỗn hợp phản ứng được tiếp tục khuấy và gia nhiệt để đun hồi lưu trong thời gian từ 4 đến 10 giờ, và được theo dõi bằng phương pháp TLC (sắc ký lớp mỏng) cho đến khi phản ứng kết thúc, lượng dung môi dư được làm bay hơi dưới áp suất giảm. Sau đó, hỗn hợp được rót vào etyl axetat (3×50ml) để tách lớp hữu cơ, pha hữu cơ được rửa bằng 50ml nước muối, làm khô và làm bay hơi dưới áp suất giảm, phần cặn được tinh chế qua cột silic oxit (etyl axetat/ete dầu mỏ theo tỷ lệ 1: 6 làm dung môi rửa giải) để thu được 2,73g tert-butyl 2-(1-(4-clophenyl)-1H-pyrazol-3-yloxy)ethylcarbamate dưới dạng chất rắn màu vàng với hiệu suất 81,1%.

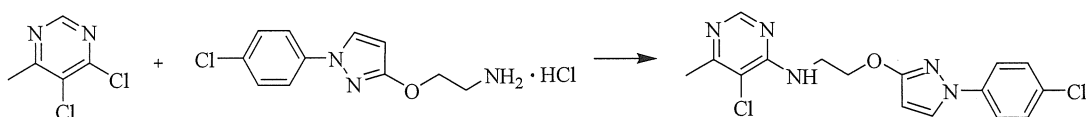
3) Điều chế hợp chất 2-(1-(2-clophenyl)-1H-pyrazol-3-yloxy)etanamin hydroclorua



Cho thêm nhỏ giọt 6ml axit clohydric đậm đặc vào dung dịch chứa 3,37g (0,01mol) tert-butyl 2-(1-(2-clophenyl)-1H-pyrazol-3-yloxy)ethylcarbamate trong 50ml etyl axetat. Chất rắn được hòa tan, hỗn hợp phản ứng được khuấy trong thời gian từ 4 đến 5 giờ, và được theo dõi bằng phương pháp TLC (sắc ký lớp mỏng) cho đến khi phản

ứng kết thúc, lượng dung môi dư được làm bay hơi dưới áp suất giảm. Sau đó, hỗn hợp này được rót vào 10ml diclometan để khuấy trong nửa giờ và được lọc để thu được 2,16g hợp chất trung gian đích ở dạng chất rắn màu trắng.

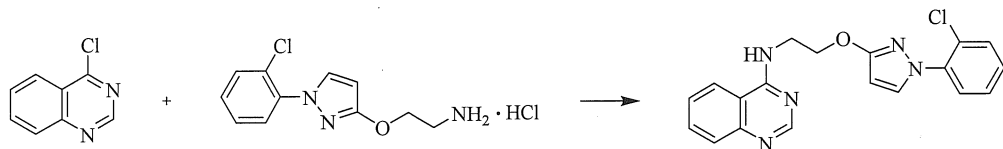
Ví dụ 5: điều chế hợp chất 31-19



Cho thêm 4,45g (0,022mol) trietylamin vào dung dịch chứa 1,62g (0,01mol) 4,5-diclo-6-metylpyrimidin và 2,74g (0,01mol) 2-(1-(4-clophenyl)-1H-pyrazol-3-yloxy)etanaminhydroclorua trong 50ml toluen. Hỗn hợp phản ứng được tiếp tục khuấy và gia nhiệt để đun hồi lưu trong thời gian từ 4 đến 10 giờ, và được theo dõi bằng phương pháp TLC (sắc ký lớp mỏng) cho đến khi phản ứng kết thúc, lượng dung môi dư được làm bay hơi dưới áp suất giảm. Sau đó, hỗn hợp được rót vào etyl axetat (3×50ml) để tách lớp hữu cơ, pha hữu cơ được rửa bằng 50ml nước muối, làm khô và làm bay hơi dưới áp suất giảm, phần cặn được tinh chế qua cột silic oxit (etyl axetat/ete dầu mỏ theo tỷ lệ 1: 4, làm dung môi rửa giải, khoảng nhiệt độ sôi từ 60 đến 90°C) để thu được 2,90g hợp chất 31-19 dưới dạng chất rắn màu trắng với hiệu suất 79,9%.

$^1\text{H-NMR}$ (300MHz, chất chuẩn nội: TMS, dung môi: CDCl_3) δ (ppm): 2,44 (3H, s), 3,90-3,98 (2H, q), 4,48 (2H, t), 5,93 (1H, d), 5,94 (1H, t), 7,37 (2H, dd), 7,52 (2H, dd), 7,71 (1H, d), 8,39 (1H, s).

Ví dụ 6: điều chế hợp chất 40-17

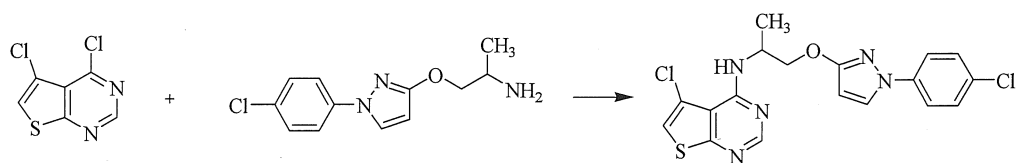


Cho thêm 4,45g (0,022mol) trietylamin vào dung dịch chứa 1,64g (0,01mol) 4-cloquinazolin và 2,74g (0,01mol) 2-(1-(2-clophenyl)-1H-pyrazol-3-yloxy)etanaminhydroclorua trong 50ml toluen. Hỗn hợp phản ứng được tiếp tục khuấy và gia nhiệt để đun hồi lưu trong thời gian từ 4 đến 10 giờ, và được theo dõi bằng phương pháp TLC (sắc ký lớp mỏng) cho đến khi phản ứng kết thúc, lượng dung môi dư

được làm bay hơi dưới áp suất giảm. Sau đó, hỗn hợp được rót vào etyl axetat (3×50ml) để tách lớp hữu cơ, pha hữu cơ được rửa bằng 50ml nước muối, làm khô và làm bay hơi dưới áp suất giảm, phần cặn được tinh chế qua cột silic oxit cột (etyl axetat/ete dầu mỏ theo tỷ lệ 1: 4 làm dung môi rửa giải, khoảng nhiệt độ sôi từ 60 đến 90°C) để thu được 2,61g hợp chất 40-17 dưới dạng chất rắn màu trắng với hiệu suất 70,1%. Nhiệt độ nóng chảy bằng 186,6°C.

¹H-NMR (300MHz, chất chuẩn nội: TMS, dung môi: CDCl₃) δ (ppm): 8,65 (s, 1H, Quinazolin-3-H), 7,73 (d, *J*=2,4Hz, 1H, Pyrazol-5-H), 7,40-7,72 (m, 5H, Ph-3,4,5,6-5H), 7,40-7,72 (m, 4H, Quinazolin-5,6,7,8-4H), 5,97 (d, *J*=2,4Hz, 1H, Pyrazol-4-H), 5,90 (s, 1H, NH), 4,63 (t, 2H, O-CH₂), 4,06 (m, 2H, N-CH₂).

Ví dụ 7: điều chế hợp chất 44-19



Cho thêm 0,45g (0,011mol) trietylamin vào dung dịch chứa 0,41g (0,002mol) 4,5-dichloro-2,3-dihydroquinazolin và 0,51g (0,002mol) 1-(1-(4-chlorophenyl)-1H-pyrazol-3-yloxy)propan-2-amin trong 50ml toluen. Hỗn hợp phản ứng được tiếp tục khuấy và gia nhiệt để đun hồi lưu trong thời gian từ 4 đến 10 giờ, và được theo dõi bằng phương pháp TLC (sắc ký lớp mỏng) cho đến khi phản ứng kết thúc, lượng dung môi dư được làm bay hơi dưới áp suất giảm. Sau đó, hỗn hợp được rót vào etyl axetat (3×50ml) để tách lớp hữu cơ, pha hữu cơ được rửa bằng 50ml nước muối, làm khô và làm bay hơi dưới áp suất giảm, phần cặn được tinh chế qua cột silic oxit (etyl axetat/ete dầu mỏ theo tỷ lệ 1:4 làm dung môi rửa giải, khoảng nhiệt độ sôi từ 60 đến 90°C) để thu được 0,53g hợp chất 44-19 dưới dạng chất rắn màu trắng với hiệu suất 63,7%.

¹H-NMR (300MHz, chất chuẩn nội: TMS, dung môi: CDCl₃) δ(ppm): 1,48 (3H, d), 4,40-4,46 (2H, m), 4,85 (1H, q), 5,95 (1H, d), 7,03 (1H, d), 7,26 (1H, s), 7,48 (2H, d), 7,51 (2H, d), 7,90 (1H, d), 8,47 (1H, s).

Các hợp chất khác của sáng chế được điều chế theo các ví dụ trên đây.

Các tính chất lý học và phổ ¹HNMR (1HNMR, 300MHz, chất chuẩn nội: TMS,

ppm) của một số hợp chất theo sáng chế là như sau:

Hợp chất 30-1-4: nhiệt độ nóng chảy 152,9°C. δ (CDCl₃) 8,29 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,68 (d, $J=2,4$ Hz, 1H, Pyrazol-5-H), 7,51-7,56 (m, 2H, Ph-2,6-2H), 7,08-7,15 (m, 2H, Ph-3,5-2H), 5,91 (d, $J=2,4$ Hz, 1H, Pyrazol-4-H), 5,56 (s, 1H, NH), 4,49 (t, 2H, O-CH₂), 3,91-3,96 (m, 2H, N-CH₂), 2,05 (s, 3H, CH₃).

Hợp chất 30-1-19: nhiệt độ nóng chảy 156,1°C. δ (CDCl₃) 8,30 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,72 (d, $J=2,4$ Hz, 1H, Pyrazol-5-H), 7,52 (d, $J=9$ Hz, 2H, Ph-2,6-2H), 7,39 (d, $J=9$ Hz, 2H, Ph-3,5-2H), 5,93 (d, $J=2,4$ Hz, 1H, Pyrazol-4-H), 5,50 (s, 1H, NH), 4,49 (t, 2H, O-CH₂), 3,94 (m, 2H, N-CH₂), 2,06 (s, 3H, CH₃).

Hợp chất 30-1-21: nhiệt độ nóng chảy 126,8°C. δ (CDCl₃) 8,28 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,73 (d, $J=2,7$ Hz, 1H, Pyrazol-5-H), 7,49-7,51 (m, 2H, Ph-3,6-H), 7,34 (d, 1H, Ph-5-H), 5,94 (d, $J=2,7$ Hz, 1H, Pyrazol-4-H), 5,64 (s, 1H, NH), 4,47 (t, 2H, O-CH₂), 3,93 (m, 2H, N-CH₂), 2,04 (s, 3H, CH₃).

Hợp chất 30-1-25: nhiệt độ nóng chảy 172,7°C. δ (CDCl₃) 8,31 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,73 (d, $J=2,7$ Hz, 1H, Pyrazol-5-H), 7,50 (d, 2H, Ph-2,6-2H), 7,20 (s, 1H, Ph-4-H), 5,96 (d, $J=2,7$ Hz, 1H, Pyrazol-4-H), 5,40 (s, 1H, NH), 4,50 (t, 2H, O-CH₂), 3,94-3,98 (m, 2H, N-CH₂), 2,11 (s, 3H, CH₃).

Hợp chất 30-1-30: nhiệt độ nóng chảy 175,9°C. δ (CDCl₃) 8,27 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,47 (s, 2H, Ph-3,5-2H), 7,34 (d, $J=2,7$ Hz, 1H, Pyrazol-5-H), 5,96 (d, $J=2,7$ Hz, 1H, Pyrazol-4-H), 5,70 (s, 1H, NH), 4,45 (t, 2H, O-CH₂), 3,88-3,92 (m, 2H, N-CH₂), 2,06 (s, 3H, CH₃).

Hợp chất 30-1-49: nhiệt độ nóng chảy 170,8°C. δ (CDCl₃) 8,31 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,82 (d, $J=2,7$ Hz, 1H, Pyrazol-5-H), 7,65-7,73 (d, 4H, PhH), 6,00 (d, $J=2,7$ Hz, 1H, Pyrazol-4-H), 5,34 (s, 1H, NH), 4,51 (t, 2H, O-CH₂), 3,93-3,99 (m, 2H, N-CH₂), 2,09 (s, 3H, CH₃).

Hợp chất 30-1-57: nhiệt độ nóng chảy 137,8°C. δ (CDCl₃) 8,29 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,70 (d, $J=2,4$ Hz, 1H, Pyrazol-5-H), 7,45 (d, $J=8,4$ Hz, 2H, Ph-2,6-2H), 7,22 (d, $J=8,4$ Hz, 2H, Ph-3,5-2H), 5,89 (d, $J=2,4$ Hz, 1H, Pyrazol-4-H), 5,70 (s, 1H, NH), 4,51 (t, 2H, O-CH₂), 3,90-3,95 (m, 2H, N-CH₂), 2,37 (s, 3H, PhCH₃), 2,03 (s, 3H, CH₃).

Hợp chất 30-1-78: dầu. δ (CDCl₃) 8,30 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,68 (d, $J=2,4$ Hz, 1H, Pyrazol-5-H), 7,51-7,60 (m, 2H, Ph-2,6-2H), 7,26-7,33 (m, 2H, Ph-3,5-2H), 5,93 (d,

$J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-4-H), 5,46 (s, 1H, NH), 4,49 (t, 2H, O-CH₂), 3,92-3,97 (m, 2H, N-CH₂), 2,07 (s, 3H, CH₃).

Hợp chất 30-2-19: nhiệt độ nóng chảy 111,9°C. δ (CDCl₃) 8,17 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,72 (d, $J=2,7\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-5-H), 7,53 (d, $J=6,9\text{Hz}$, 2H, Ph-2,6-2H), 7,38 (d, $J=7,9\text{Hz}$, 2H, Ph-3,5-2H), 6,07 (s, 1H, NH), 5,92 (d, $J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-4-H), 4,48 (t, 2H, O-CH₂), 3,92 (m, 2H, N-CH₂), 3,74 (s, 3H, CH₃).

Hợp chất 30-3-19: dầu. δ (CDCl₃) 10,35 (s, 1H, CHO), 8,45 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,70 (d, $J=2,7\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-5-H), 7,51 (d, $J=9,3\text{Hz}$, 2H, Ph-2,6-2H), 7,37 (d, $J=9,3\text{Hz}$, 2H, Ph-3,5-2H), 6,00 (s, 1H, NH), 5,93 (d, $J=2,7\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-4-H), 4,48 (t, 2H, O-CH₂), 4,05 (m, 2H, N-CH₂).

Hợp chất 30-4-19: nhiệt độ nóng chảy 143,7°C. δ (CDCl₃) 8,30 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,72 (d, $J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-5-H), 7,52 (d, $J=8,7\text{Hz}$, 2H, Ph-2,6-2H), 7,38 (d, $J=8,7\text{Hz}$, 2H, Ph-3,5-2H), 6,29 (s, 1H, NH), 5,93 (d, $J=2,7\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-4-H), 4,50 (t, 2H, O-CH₂), 3,94 (m, 2H, N-CH₂).

Hợp chất 31-4: nhiệt độ nóng chảy 139,2°C. δ (CDCl₃) 8,38 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,67 (d, $J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-5-H), 7,51-7,56 (m, 2H, Ph-2,6-2H), 7,07-7,13 (m, 2H, Ph-3,5-2H), 6,01 (s, 1H, NH), 5,91 (d, $J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-4-H), 4,48 (t, 2H, O-CH₂), 3,93-3,95 (m, 2H, N-CH₂), 2,43 (s, 3H, CH₃).

Hợp chất 31-18: nhiệt độ nóng chảy 146,7°C. δ (CDCl₃) 8,39 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,73 (d, $J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-5-H), 7,63 (s, 1H, Ph-2-H), 7,43 (d, 1H, Ph-6-H), 7,33 (t, 1H, Ph-5-H), 7,19 (d, 1H, Ph-4-H), 5,96 (s, 1H, NH), 5,94 (d, $J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-4-H), 4,50 (t, 2H, O-CH₂), 3,95 (m, 2H, N-CH₂), 2,44 (s, 3H, CH₃).

Hợp chất 31-21: nhiệt độ nóng chảy 155,6°C. δ (CDCl₃) 8,37 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,73 (d, $J=2,7\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-5-H), 7,53 (s, 1H, Ph-3-H), 7,50 (d, $J=1,8\text{Hz}$, 1H, Ph-6-H), 7,34 (d, $J=1,8\text{Hz}$, 1H, Ph-5-H), 6,09 (s, 1H, NH), 5,94 (d, $J=2,7\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-4-H), 4,46 (t, 2H, O-CH₂), 3,93 (m, 2H, N-CH₂), 2,44 (s, 3H, CH₃).

Hợp chất 31-23: dầu. δ (CDCl₃) 8,37 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,31-7,46 (m, 4H, Pyrazol-5-H, PhH), 6,12 (s, 1H, NH), 5,96 (d, 1H, Pyrazol-4-H), 4,45 (t, 2H, O-CH₂), 3,89-3,95 (m, 2H, N-CH₂), 2,45 (s, 3H, CH₃).

Hợp chất 31-25: nhiệt độ nóng chảy 144,1°C. δ (CDCl₃) 8,40 (s, 1H,

Pyrimidin-H), 7,71 (d, $J=2,7\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-5-H), 7,49-7,51 (m, 2H, Ph-2,6-2H), 7,18 (s, 1H, Ph-4-H), 5,96 (d, $J=2,7\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-4-H), 5,92 (s, 1H, NH), 4,49 (t, 2H, O-CH₂), 3,94-3,96 (m, 2H, N-CH₂), 2,45 (s, 3H, CH₃).

Hợp chất 31-30: dầu. δ (CDCl₃) 8,37 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,46 (s, 2H, Ph-3,5-2H), 7,33 (d, $J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-5-H), 6,06 (s, 1H, NH), 5,96 (d, $J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-4-H), 4,43 (t, 2H, O-CH₂), 3,89-3,95 (m, 2H, N-CH₂), 2,46 (s, 3H, CH₃).

Hợp chất 31-49: nhiệt độ nóng chảy 187,0°C. δ (CDCl₃) 8,39 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,80 (d, $J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-5-H), 7,69 (s, 4H, PhH), 6,00 (d, $J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-4-H), 5,91 (s, 1H, NH), 4,50 (t, 2H, O-CH₂), 3,92-3,98 (m, 2H, N-CH₂), 2,44 (s, 3H, CH₃).

Hợp chất 31-57: nhiệt độ nóng chảy 127,3°C. δ (CDCl₃) 8,38 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,69 (d, $J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-5-H), 7,46 (d, $J=8,7\text{Hz}$, 2H, Ph-2,6-2H), 7,19 (d, $J=8,7\text{Hz}$, 2H, Ph-3,5-2H), 6,04 (s, 1H, NH), 5,89 (d, $J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-4-H), 4,48 (t, 2H, O-CH₂), 3,91-3,96 (m, 2H, N-CH₂), 2,43 (s, 3H, CH₃), 2,36 (s, 3H, PhCH₃).

Hợp chất 31-69: nhiệt độ nóng chảy 171,0°C. δ (CDCl₃) 8,39 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,81 (d, $J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-5-H), 7,62-7,70 (m, 4H, Ph-2,3,5,6-4H), 5,98 (d, $J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-4-H), 5,95 (s, 1H, NH), 4,50 (t, 2H, O-CH₂), 3,96 (m, 2H, N-CH₂), 2,43 (s, 3H, CH₃).

Hợp chất 31-78: nhiệt độ nóng chảy 134,7°C. δ (CDCl₃) 8,39 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,72 (d, $J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-5-H), 7,58-7,62 (m, 2H, Ph-2,6-2H), 7,26-7,29 (m, 2H, Ph-3,5-2H), 5,96 (s, 1H, NH), 5,94 (d, $J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-4-H), 4,49 (t, 2H, O-CH₂), 3,92-3,98 (m, 2H, N-CH₂), 2,44 (s, 3H, CH₃).

Hợp chất 32-1: nhiệt độ nóng chảy 92,2°C. δ (CDCl₃) 8,43 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,75 (d, $J=2,7\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-5-H), 7,59 (d, $J=8,4\text{Hz}$, 2H, Ph-2,6-2H), 7,41 (m, 2H, Ph-3,5-2H), 7,22 (m, 1H, Ph-4-H), 6,05 (s, 1H, NH), 5,92 (d, $J=2,7\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-4-H), 4,50 (t, 2H, O-CH₂), 3,95 (m, 2H, N-CH₂), 2,76 (m, 2H, CH₂), 1,24 (t, 3H, CH₃).

Hợp chất 32-4: nhiệt độ nóng chảy 123,9°C. δ (CDCl₃) 8,43 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,67 (d, $J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-5-H), 7,51-7,56 (m, 2H, Ph-2,6-2H), 7,07-7,13 (m, 2H, Ph-3,5-2H), 6,01 (s, 1H, NH), 5,91 (d, $J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-4-H), 4,78 (t, 2H, O-CH₂), 3,91-3,96 (m, 2H, N-CH₂), 2,73-2,80 (m, 2H, CH₂), 1,24 (t, 3H, CH₃).

Hợp chất 32-17: nhiệt độ nóng chảy 75,4°C. δ (CDCl₃) 8,42 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,74 (d, $J=2,4$ Hz, 1H, Pyrazol-5-H), 7,57 (d, 1H, Ph-6-H), 7,48 (d, $J=1,5$ Hz, 1H, Ph-3-H), 7,26-7,36 (m, 2H, Ph-4,5-2H), 6,09 (s, 1H, NH), 5,94 (d, $J=2,4$ Hz, 1H, Pyrazol-4-H), 4,47 (t, 2H, O-CH₂), 3,93 (m, 2H, N-CH₂), 2,77 (m, 2H, CH₂), 1,25 (t, 3H, CH₃).

Hợp chất 32-18: nhiệt độ nóng chảy 100,9°C. δ (CDCl₃) 8,44 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,73 (d, $J=2,4$ Hz, 1H, Pyrazol-5-H), 7,64 (s, 1H, Ph-2-H), 7,45 (d, 1H, Ph-6-H), 7,33 (t, 1H, Ph-5-H), 7,18 (d, 1H, Ph-4-H), 5,99 (s, 1H, NH), 5,94 (d, $J=2,4$ Hz, 1H, Pyrazol-4-H), 4,49 (t, 2H, O-CH₂), 3,95 (m, 2H, N-CH₂), 2,77 (m, 2H, CH₂), 1,27 (t, 3H, CH₃).

Hợp chất 32-19: nhiệt độ nóng chảy 138,6°C. δ (CDCl₃) 1,24 (3H, t), 2,71-2,82 (2H, q), 3,90-3,98 (2H, q), 4,49 (2H, t), 5,93 (1H, d), 6,01 (1H, t), 7,37 (2H, d), 7,53 (2H, d), 7,72 (1H, d), 8,44 (1H, s).

Hợp chất 32-21: nhiệt độ nóng chảy 97,6°C. δ (CDCl₃) 8,41 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,73 (d, $J=2,4$ Hz, 1H, Pyrazol-5-H), 7,51 (s, 1H, Ph-3-H), 7,49 (d, 1H, Ph-6-H), 7,28 (d, 1H, Ph-5-H), 6,09 (s, 1H, NH), 5,95 (d, $J=2,4$ Hz, 1H, Pyrazol-4-H), 4,46 (t, 2H, O-CH₂), 3,94 (m, 2H, N-CH₂), 2,76 (m, 2H, CH₂), 1,25 (t, 3H, CH₃).

Hợp chất 32-23: dầu. δ (CDCl₃) 8,41 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,27-7,46 (m, 4H, Pyrazol-5-H, PhH), 6,12 (s, 1H, NH), 5,96 (d, 1H, Pyrazol-4-H), 4,45 (t, 2H, O-CH₂), 3,90-3,95 (m, 2H, N-CH₂), 2,73-2,82 (m, 2H, CH₂), 1,22-1,28 (m, 3H, CH₃).

Hợp chất 32-25: nhiệt độ nóng chảy 104,9°C. δ (CDCl₃) 8,46 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,71 (d, $J=2,7$ Hz, 1H, Pyrazol-5-H), 7,49 (s, 2H, Ph-2,6-2H), 7,17 (s, 1H, Ph-4-H), 5,98 (s, 1H, NH), 5,96 (d, $J=2,7$ Hz, 1H, Pyrazol-4-H), 4,49 (t, 2H, O-CH₂), 3,93-3,96 (m, 2H, N-CH₂), 2,77-2,80 (m, 2H, CH₂), 1,25 (t, 3H, CH₃).

Hợp chất 32-30: dầu. δ (CDCl₃) 8,42 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,46 (s, 2H, Ph-3,5-2H), 7,33 (d, $J=2,4$ Hz, 1H, Pyrazol-5-H), 6,05 (s, 1H, NH), 5,96 (d, $J=2,4$ Hz, 1H, Pyrazol-4-H), 4,43 (t, 2H, O-CH₂), 3,89-3,95 (m, 2H, N-CH₂), 2,74-2,82 (m, 2H, CH₂), 1,26 (t, 3H, CH₃).

Hợp chất 32-49: nhiệt độ nóng chảy 145,1°C. δ (CDCl₃) 8,44 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,80 (d, $J=2,4$ Hz, 1H, Pyrazol-5-H), 7,69 (s, 4H, PhH), 6,00 (d, $J=2,4$ Hz, 1H, Pyrazol-4-H), 5,91 (s, 1H, NH), 4,51 (t, 2H, O-CH₂), 3,93-3,98 (m, 2H, N-CH₂),

2,72-2,78 (m, 2H, CH₂), 1,21-1,28 (m, 3H, CH₃).

Hợp chất 32-57: nhiệt độ nóng chảy 112,5°C. δ (CDCl₃) 8,43 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,69 (d, $J=2,4$ Hz, 1H, Pyrazol-5-H), 7,46 (d, $J=8,7$ Hz, 2H, Ph-2,6-2H), 7,19 (d, $J=8,7$ Hz, 2H, Ph-3,5-2H), 6,04 (s, 1H, NH), 5,89 (d, $J=2,4$ Hz, 1H, Pyrazol-4-H), 4,48 (t, 2H, O-CH₂), 3,91-3,97 (m, 2H, N-CH₂), 2,72-2,80 (m, 2H, CH₂), 2,36 (s, 3H, CH₃), 1,24 (t, 3H, CH₃).

Hợp chất 32-69: nhiệt độ nóng chảy 119,9°C. δ (CDCl₃) 8,44 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,81 (d, $J=2,4$ Hz, 1H, Pyrazol-5-H), 7,64-7,68 (m, 4H, Ph-2,3,5,6-4H), 5,98 (d, $J=2,4$ Hz, 1H, Pyrazol-4-H), 5,95 (s, 1H, NH), 4,51 (t, 2H, O-CH₂), 3,96 (m, 2H, N-CH₂), 2,77 (m, 2H, CH₂), 1,24 (t, 3H, CH₃).

Hợp chất 32-78: nhiệt độ nóng chảy 102,1°C. δ (CDCl₃) 8,45 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,66 (d, $J=2,4$ Hz, 1H, Pyrazol-5-H), 7,52-7,62 (m, 2H, Ph-2,6-2H), 7,28-7,33 (m, 2H, Ph-3,5-2H), 5,98 (s, 1H, NH), 5,94 (d, $J=2,4$ Hz, 1H, Pyrazol-4-H), 4,49 (t, 2H, O-CH₂), 3,94-3,96 (m, 2H, N-CH₂), 2,75-2,78 (m, 2H, CH₂), 1,24 (t, 3H, CH₃).

Hợp chất 33-1: nhiệt độ nóng chảy 73,6°C. δ (CDCl₃) 8,23 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,75 (d, $J=2,4$ Hz, 1H, Pyrazol-5-H), 7,59 (d, $J=8,4$ Hz, 2H, Ph-2,6-2H), 7,42 (m, 2H, Ph-3,5-2H), 7,23 (m, 1H, Ph-4-H), 6,70 (t, 1H, CHF₂), 6,22 (s, 1H, NH), 5,90 (d, $J=2,4$ Hz, 1H, Pyrazol-4-H), 4,36 (t, 2H, O-CH₂), 3,75 (m, 2H, N-CH₂).

Hợp chất 33-4: nhiệt độ nóng chảy 115,2°C. δ (CDCl₃) 8,56 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,67 (d, $J=2,4$ Hz, 1H, Pyrazol-5-H), 7,51-7,56 (m, 2H, Ph-2,6-2H), 7,07-7,14 (m, Ph-3,5-2H), 6,69 (t, $J=5$ 3,4Hz, 1H, CF₂H), 6,43 (s, 1H, NH), 5,91 (d, $J=2,4$ Hz, 1H, Pyrazol-4-H), 4,52 (t, 2H, O-CH₂), 3,95-4,01 (m, 2H, N-CH₂).

Hợp chất 33-18: nhiệt độ nóng chảy 99,3°C. δ (CDCl₃) 8,56 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,74 (d, $J=2,7$ Hz, 1H, Pyrazol-5-H), 7,64 (s, 1H, Ph-2-H), 7,44 (d, 1H, Ph-6-H), 7,33 (t, 1H, Ph-5-H), 7,18 (d, 1H, Ph-4-H), 6,70 (t, 1H, CHF₂), 6,37 (s, 1H, NH), 5,94 (d, $J=2,7$ Hz, 1H, Pyrazol-4-H), 4,53 (t, 2H, O-CH₂), 3,99 (m, 2H, N-CH₂).

Hợp chất 33-19: nhiệt độ nóng chảy 142,8°C. δ (CDCl₃) 4,00-4,05 (2H, q), 4,56 (2H, t), 5,96 (1H, s), 6,50 (1H, s), 6,75 (1H, t), 7,40 (2H, d), 7,51 (2H, d), 7,75 (1H, s), 8,60 (1H, s).

Hợp chất 33-21: nhiệt độ nóng chảy 136,5°C. δ (CDCl₃) 8,55 (s, 1H,

Pyrimidin-H), 7,72 (d, $J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-5-H), 7,51 (s, 1H, Ph-3-H), 7,49 (d, 1H, Ph-6-H), 7,35 (d, 1H, Ph-5-H), 6,70 (t, 1H, CHF_2), 6,39 (s, 1H, NH), 5,94 (d, $J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-4-H), 4,49 (t, 2H, O- CH_2), 3,97 (m, 2H, N- CH_2).

Hợp chất 33-25: nhiệt độ nóng chảy $126,5^\circ\text{C}$. δ (CDCl_3) 8,58 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,72 (d, $J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-5-H), 7,49-7,51 (m, 2H, Ph-2,6-2H), 7,19 (d, 1H, Ph-4-H), 6,72 (t, $J=53,40\text{Hz}$, 1H, CF_2H), 6,30 (s, 1H, NH), 5,96 (d, $J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-4-H), 4,53 (t, 2H, O- CH_2), 3,97-4,03 (m, 2H, N- CH_2).

Hợp chất 33-30: nhiệt độ nóng chảy $132,9^\circ\text{C}$. δ (CDCl_3) 8,54 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,47 (s, 2H, Ph-3,5-2H), 7,34 (d, $J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-5-H), 6,73 (t, $J=53,7\text{Hz}$, 1H, CF_2H), 6,52 (s, 1H, NH), 5,96 (d, $J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-4-H), 4,46 (t, 2H, O- CH_2), 3,94-3,99 (m, 2H, N- CH_2).

Hợp chất 33-49: nhiệt độ nóng chảy $151,7^\circ\text{C}$. δ (CDCl_3) 8,57 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,82 (d, $J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-5-H), 7,70 (s, 4H, PhH), 6,70 (t, $J=53,70\text{Hz}$, 1H, CF_2H), 6,52 (s, 1H, NH), 6,01 (d, $J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-4-H), 4,54 (t, 2H, O- CH_2), 3,98-4,03 (m, 2H, N- CH_2).

Hợp chất 33-57: nhiệt độ nóng chảy $106,6^\circ\text{C}$. δ (CDCl_3) 8,56 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,71 (d, $J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-5-H), 7,46 (d, $J=8,4\text{Hz}$, 2H, Ph-2,6-2H), 7,21 (d, $J=8,4\text{Hz}$, 2H, Ph-3,5-2H), 6,69 (t, $J=54,00\text{Hz}$, 1H, CF_2H), 6,52 (s, 1H, NH), 5,89 (d, $J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-4-H), 4,53 (t, 2H, O- CH_2), 3,95-4,00 (m, 2H, N- CH_2), 2,37 (s, 3H, CH_3).

Hợp chất 33-69: nhiệt độ nóng chảy $122,3^\circ\text{C}$. δ (CDCl_3) 8,57 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,81 (d, $J=2,7\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-5-H), 7,01-7,64 (m, 4H, Ph-2,3,5,6-4H), 6,70 (t, 1H, CHF_2), 6,31 (s, 1H, NH), 5,98 (d, $J=2,7\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-4-H), 4,54 (t, 2H, O- CH_2), 4,00 (m, 2H, N- CH_2).

Hợp chất 35-19: δ (CDCl_3) 1,42 (3H, d), 4,38 (2H, d), 4,65 (1H, s), 5,93 (1H, d), 6,06-6,08 (1H, m), 7,38 (2H, d), 7,51 (2H, d), 7,71 (1H, d), 8,28 (1H, s).

Hợp chất 36-19: nhiệt độ nóng chảy $80-82^\circ\text{C}$. δ (CDCl_3) 1,42 (3H, d), 2,42 (3H, s), 4,37 (2H, d), 4,65-4,67 (1H, m), 5,91 (1H, s), 5,93 (1H, d), 7,36 (2H, d), 7,53 (2H, d), 7,70 (1H, d), 8,40 (1H, s).

Hợp chất 37-19: δ (CDCl_3) 1,24 (3H, t), 1,42 (3H, d), 2,73-2,77 (2H, q), 4,37 (2H,

d), 4,39 (1H, s), 5,78-5,82 (1H, m), 5,93 (1H, d), 7,38 (2H, d), 7,52 (2H, d), 7,70 (1H, d), 8,43 (1H, s).

Hợp chất 40-1: dầu. δ (CDCl_3) 8,66 (s, 1H, Quinazolin-3-H), 7,76 (d, $J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-5-H), 7,72-7,75 (m, 5H, Ph-2,3,4,5,6-5H), 7,72-7,75 (m, 4H, Quinazolin-5,6,7,8-4H), 6,22 (s, 1H, NH), 5,90 (d, $J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-4-H), 4,36 (t, 2H, O- CH_2), 3,75 (m, 2H, N- CH_2).

Hợp chất 40-4: nhiệt độ nóng chảy $155,7^\circ\text{C}$. δ (CDCl_3) 8,67 (s, 1H, Quinazolin-3-H), 7,82 (d, 1H, Quinazolin-6-H), 7,67 (d, $J=2,7\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-5-H), 7,53-7,65 (m, 4H, Ph-2,6-2H, Quinazolin-7,8-H), 7,10-7,19 (m, 3H, Ph-3,5-2H, Quinazolin-9-H), 6,95 (s, 1H, NH), 5,94 (d, $J=2,7\text{Hz}$, 1H, =CH), 4,62 (t, 2H, CH_2), 4,05-4,10 (m, 2H, CH_2).

Hợp chất 40-18: nhiệt độ nóng chảy $146,1^\circ\text{C}$. δ (CDCl_3) 8,68 (s, 1H, Quinazolin-3-H), 7,74 (d, $J=2,7\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-5-H), 7,63-7,71 (m, 4H, Ph-2, 4,5,6-4H), 7,31-7,54 (m, 4H, Quinazolin-5,6,7,8-4H), 6,78 (s, 1H, NH), 5,96 (d, $J=2,7\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-4-H), 4,63 (t, 2H, O- CH_2), 4,10 (m, 2H, N- CH_2).

Hợp chất 40-19: nhiệt độ nóng chảy $176,4^\circ\text{C}$. δ (CDCl_3) 4,10-4,15 (2H, q), 4,67 (2H, t), 5,99 (1H, s), 7,11 (1H, s), 7,44 (2H, d), 7,58 (2H, d), 7,66 (1H, d), 7,71-7,76 (2H, d), 7,90 (1H, d), 8,70 (1H, s).

Hợp chất 40-21: nhiệt độ nóng chảy $141,7^\circ\text{C}$. δ (CDCl_3) 8,66 (s, 1H, Quinazolin-3-H), 7,72 (d, $J=2,7\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-5-H), 7,80-7,83 (m, 3H, Ph-3,5,6-3H), 7,51-7,58 (m, 4H, Quinazolin-5,6,7,8-4H), 6,90 (s, 1H, NH), 5,97 (d, $J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-4-H), 4,59 (t, 2H, O- CH_2), 4,08 (m, 2H, N- CH_2).

Hợp chất 40-25: nhiệt độ nóng chảy $199,9^\circ\text{C}$. δ (CDCl_3) 8,69 (s, 1H, Quinazolin-3-H), 7,83 (d, 1H, Quinazolin-6-H), 7,73 (d, $J=3,0\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-5-H), 7,65-7,66 (m, 2H, Quinazolin-7,8-H), 7,51-7,52 (m, 2H, Ph-2,6-2H), 7,30-7,36 (m, 1H, Quinazolin-7,8-H), 7,21-7,22 (m, 1H, Ph-4-H), 6,56 (s, 1H, NH), 5,99 (d, $J=3,0\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-4-H), 4,62 (t, 2H, O- CH_2), 4,09-4,14 (m, 2H, N- CH_2).

Hợp chất 40-30: nhiệt độ nóng chảy $170,5^\circ\text{C}$. δ (CDCl_3) 8,66 (s, 1H, Quinazolin-3-H), 7,52-7,84 (m, 3H, Quinazolin-6,7,9-3H), 7,46 (s, 2H, Ph-3,5-2H), 7,35 (d, $J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-5-H), 7,24 (t, 1H, Quinazolin-8-1H), 5,99 (d, $J=2,4\text{Hz}$,

1H, Pyrazol-4-H), 4,57 (t, 2H, O-CH₂), 4,04-4,09 (m, 2H, N-CH₂).

Hợp chất 40-49: dầu. δ (CDCl₃) 8,68 (s, 1H, Quinazolin-3-H), 7,83 (d, 1H, Quinazolin-6-H), 7,81 (d, $J=3,0$ Hz, 1H, Pyrazol-5-H), 7,64-7,76 (m, 5H, Quinazolin-7,8,9-H, Ph-2,6-2H), 7,31 (d, 2H, Ph-3,5-2H), 6,47 (s, 1H, NH), 6,02 (d, $J=3,0$ Hz, 1H, Pyrazol-4-H), 4,62 (t, 2H, O-CH₂), 4,09-4,15 (m, 2H, N-CH₂).

Hợp chất 40-57: nhiệt độ nóng chảy 178,7°C. δ (CDCl₃) 8,66 (s, 1H, Quinazolin-3-H), 7,78 (d, 1H, Quinazolin-6-H), 7,70 (d, $J=2,4$ Hz, 1H, Pyrazol-5-H), 7,58-7,67 (m, 3H, Quinazolin-7,8,9-H), 7,50 (d, $J=8,4$ Hz, 2H, Ph-2,6-2H), 7,10 (d, $J=8,4$ Hz, 2H, Ph-3,5-2H), 5,92 (d, $J=2,4$ Hz, 1H, Pyrazol-4-H), 4,64 (t, 2H, O-CH₂), 4,05-4,10 (m, 2H, N-CH₂), 2,40 (s, 3H, CH₃).

Hợp chất 40-69: nhiệt độ nóng chảy 170,1°C. δ (CDCl₃) 8,68 (s, 1H, Quinazolin-3-H), 7,81 (d, $J=2,4$ Hz, 1H, Pyrazol-5-H), 7,62-7,71 (m, 4H, Ph-2,3,5,6-4H), 7,62-7,71 (m, 4H, Quinazolin-5,6,7,8-4H), 6,62 (s, 1H, NH), 6,00 (d, $J=2,7$ Hz, 1H, Pyrazol-4-H), 4,64 (t, 2H, O-CH₂), 4,11 (m, 2H, N-CH₂).

Hợp chất 42-1: nhiệt độ nóng chảy 129,7°C. δ (CDCl₃) 8,48 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,74 (d, $J=2,7$ Hz, 1H, Pyrazol-5-H), 7,57 (d, $J=8,4$ Hz, 2H, Ph-2,6-2H), 7,40 (m, 2H, Ph-3,5-2H), 7,19 (m, 1H, Ph-4-H), 7,03 (s, 1H, Thieno-H), 6,98 (s, 1H, NH), 5,92 (d, $J=2,4$ Hz, 1H, Pyrazol-4-H), 4,55 (t, 2H, O-CH₂), 4,08 (m, 2H, N-CH₂).

Hợp chất 42-4: nhiệt độ nóng chảy 132,2°C. δ (CDCl₃) 8,48 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,67 (d, $J=2,4$ Hz, 1H, Pyrazol-5-H), 7,49-7,55 (m, 2H, Ph-2,6-2H), 7,04-7,13 (m, 2H, Ph-3,5-2H), 6,97 (s, 1H, Thiophen-H), 6,92 (s, 1H, NH), 5,92 (d, $J=2,4$ Hz, 1H, Pyrazol-4-H), 4,53 (t, 2H, O-CH₂), 4,04-4,10 (m, 2H, N-CH₂).

Hợp chất 42-17: nhiệt độ nóng chảy 122,4°C. δ (CDCl₃) 8,47 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,74 (d, $J=2,4$ Hz, 1H, Pyrazol-5-H), 7,54 (d, $J=7,5$ Hz, 1H, Ph-6-H), 7,48 (d, $J=7,5$ Hz, 1H, Ph-3-H), 7,31-7,36 (m, 2H, Ph-4,5-2H), 7,05 (s, 1H, Thieno-H), 7,01 (s, 1H, NH), 5,94 (d, $J=2,1$ Hz, 1H, Pyrazol-4-H), 4,53 (t, 2H, O-CH₂), 4,07 (m, 2H, N-CH₂).

Hợp chất 42-18: nhiệt độ nóng chảy 100,1°C. δ (CDCl₃) 8,48 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,72 (d, $J=2,7$ Hz, 1H, Pyrazol-5-H), 7,61 (s, 1H, Ph-2-H), 7,43 (d, 1H, Ph-6-H), 7,31 (t, 1H, Ph-5-H), 7,17 (d, 1H, Ph-4-H), 7,04 (s, 1H, Thieno-H), 6,95 (s, 1H, NH), 5,94 (d, $J=2,7$ Hz, 1H, Pyrazol-4-H), 4,55 (t, 2H, O-CH₂), 4,08 (m, 2H, N-CH₂).

Hợp chất 42-21: nhiệt độ nóng chảy 123,1°C. δ (CDCl_3) 8,47 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,73 (d, $J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-5-H), 7,48-7,51 (m, 2H, Ph-3,6-2H), 7,32 (d, 1H, Ph-5-H), 7,05 (s, 1H, Thieno-H), 6,97 (s, 1H, NH), 5,94 (d, $J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-4-H), 4,51 (t, 2H, O-CH₂), 4,06 (m, 2H, N-CH₂).

Hợp chất 42-25: dầu. δ (CDCl_3) 8,49 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,71 (d, $J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-5-H), 7,43-7,49 (m, 2H, Ph-2,6-2H), 7,14-7,19 (m, 1H, Ph-4-H), 7,06 (s, 1H, Thiophen-H), 6,94 (s, 1H, NH), 5,96 (d, $J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-4-H), 4,55 (t, 2H, O-CH₂), 4,05-4,11 (m, 2H, N-CH₂).

Hợp chất 42-30: dầu. δ (CDCl_3) 8,46 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,45 (s, 2H, Ph-3,5-2H), 7,32 (d, $J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-5-H), 7,06 (s, 1H, Thiophen-H), 6,98 (s, 1H, NH), 5,96 (d, $J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-4-H), 4,47 (t, 2H, O-CH₂), 4,04-4,07 (m, 2H, N-CH₂).

Hợp chất 42-49: nhiệt độ nóng chảy 164,9°C. δ (CDCl_3) 8,49 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,80 (d, $J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-5-H), 7,63-7,67 (m, 4H, PhH), 7,04 (s, 1H, Thiophen-H), 6,90 (s, 1H, NH), 6,01 (d, $J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-4-H), 4,57 (t, 2H, O-CH₂), 4,07-4,10 (m, 2H, N-CH₂).

Hợp chất 42-57: nhiệt độ nóng chảy 113,4°C. δ (CDCl_3) 8,48 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,68 (d, $J=2,7\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-5-H), 7,44 (d, $J=8,4\text{Hz}$, 2H, Ph-2,6-2H), 7,19 (d, $J=8,4\text{Hz}$, 2H, Ph-3,5-2H), 7,03 (s, 1H, Thiophen-H), 6,03 (s, 1H, NH), 5,89 (d, $J=2,7\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-4-H), 4,54 (t, 2H, O-CH₂), 4,04-4,10 (m, 2H, N-CH₂), 2,36 (s, 3H, CH₃).

Hợp chất 42-69: nhiệt độ nóng chảy 149,7°C. δ (CDCl_3) 8,48 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,79 (d, $J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-5-H), 7,65 (m, 4H, Ph-2,3,5,6-4H), 7,03 (s, 1H, Thieno-H), 6,92 (s, 1H, NH), 5,98 (d, $J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-4-H), 4,57 (t, 2H, O-CH₂), 4,09 (m, 2H, N-CH₂).

Hợp chất 42-78: dầu. δ (CDCl_3) 8,49 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,96 (d, $J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-5-H), 7,71-7,74 (m, 2H, Ph-2,6-2H), 7,29-7,33 (m, 2H, Ph-3,5-2H), 7,16 (s, 1H, Thiophen-H), 6,96 (s, 1H, NH), 5,94 (d, $J=2,4\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-4-H), 4,55 (t, 2H, O-CH₂), 4,07-4,09 (m, 2H, N-CH₂).

Hợp chất 57-4: δ (CDCl_3) 2,47 (3H, s), 3,92 (2H, d), 4,14 (2H, t), 5,78 (1H, s), 7,13 (2H, t), 7,55 (1H, s), 7,56-7,59 (3H, m), 8,39 (1H, s).

Hợp chất 57-19: nhiệt độ nóng chảy 130,0°C. δ (CDCl_3): 8,41 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,58 (s, 1H, Pyrazol-5-H), 7,56 (d, $J=9,0\text{Hz}$, 2H, Ph-2,6-2H), 7,50 (s, 1H, Pyrazol-3-H), 7,40 (d, $J=9,0\text{Hz}$, 2H, Ph-3,5-2H), 5,85 (s, 1H, NH), 4,14 (t, 2H, O-CH₂), 3,95-3,90 (m, 2H, N-CH₂), 2,46 (t, 3H, CH₃).

Hợp chất 58-19: nhiệt độ nóng chảy 134,7°C. δ (CDCl_3): 8,45 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,60 (s, 1H, Pyrazol-5-H), 7,56 (d, $J=9,0\text{Hz}$, 2H, Ph-2,6-2H), 7,50 (s, 1H, Pyrazol-3-H), 7,40 (d, $J=9,0\text{Hz}$, 2H, Ph-3,5-2H), 5,82 (s, 1H, NH), 4,15 (t, 2H, O-CH₂), 3,95-3,90 (m, 2H, N-CH₂), 2,84-2,77 (m, 2H, CH₂), 1,27 (t, 3H, CH₃).

Hợp chất 59-19: nhiệt độ nóng chảy 125,7°C. δ (CDCl_3): 8,58 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,58 (s, 1H, Pyrazol-5-H), 7,56 (d, $J=9,0\text{Hz}$, 2H, Ph-2,6-2H), 7,50 (s, 1H, Pyrazol-3-H), 7,40 (d, $J=9,0\text{Hz}$, 2H, Ph-3,5-2H), 6,74 (t, $J=54\text{Hz}$, 1H, CF₂H), 6,08 (s, 1H, NH), 4,16 (t, 2H, O-CH₂), 4,01-3,96 (m, 2H, N-CH₂).

Hợp chất 68-19: nhiệt độ nóng chảy 119,2°C. δ (CDCl_3): 8,49 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,60 (s, 1H, Pyrazol-5-H), 7,55 (d, $J=8,7\text{Hz}$, 2H, Ph-2,6-2H), 7,51 (s, 1H, Pyrazol-3-H), 7,39 (d, $J=8,7\text{Hz}$, 2H, Ph-3,5-2H), 7,01 (s, 1H, Thiophen-H), 6,97 (s, 1H, NH), 4,22 (t, 2H, O-CH₂), 4,07-4,02 (m, 2H, N-CH₂).

Hợp chất 59-21: dầu. δ (CDCl_3) 8,54 (s, 1H, Pyrimidin-H), 8,01 (s, 1H, Ph-3-H), 7,57 (s, 1H, Pyrazol-5-H), 7,49-7,52 (m, 2H, Ph-6-H, Pyrazol-3-H), 7,35 (dd, 1H, Ph-5-H), 6,73 (t, $J=53,7\text{Hz}$, 1H, CF₂H), 6,25 (s, 1H, NH), 4,11 (t, 2H, O-CH₂), 3,75-3,81 (m, 2H, N-CH₂), 2,13-2,18 (m, 2H, CH₂).

Hợp chất 68-4: δ (CDCl_3) 4,03-4,04 (2H, q), 4,20 (2H, t), 7,10 (1H, s), 7,12-7,15 (2H, m), 7,25 (1H, d), 7,52-7,58 (4H, m), 8,48 (1H, s).

Hợp chất 116-5: δ (CDCl_3) 8,43 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,68 (d, $J=2,7\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-5-H), 7,49-7,54 (m, 2H, Ph-2,6-2H), 7,34-7,39 (m, 2H, Ph-3,5-2H), 5,86 (d, $J=2,7\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-4-H), 4,56 (t, 2H, O-CH₂), 4,03 (t, 2H, N-CH₂), 3,22 (s, 3H, NCH₃), 2,79-2,87 (m, 2H, CH₂), 1,26 (t, 3H, CH₃).

Hợp chất 118-69: nhiệt độ nóng chảy 83,5°C. δ (CDCl_3) 8,28 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,81 (d, $J=2,7\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-5-H), 7,65-7,72 (m, 4H, Ph-2,3,5,6-4H), 6,15 (s, 1H, NH), 5,97 (d, $J=2,7\text{Hz}$, 1H, Pyrazol-4-H), 4,44 (t, 2H, O-CH₂), 3,75 (m, 2H,

N-CH₂), 2,16 (m, 2H, CH₂).

Hợp chất 119-69: dầu. δ (CDCl₃) 8,07 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,81 (d, $J=2,4$ Hz, 1H, Pyrazol-5-H), 7,65-7,72 (m, 4H, Ph-2,3,5,6-4H), 5,98 (d, $J=3$ Hz, 1H, Pyrazol-4-H), 5,43 (s, 1H, NH), 4,43 (t, 2H, O-CH₂), 3,72 (m, 2H, N-CH₂), 3,44 (s, 2H, NH₂), 2,17 (m, 2H, CH₂).

Hợp chất 120-69: dầu. δ (CDCl₃) 8,10 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,80 (d, $J=3$ Hz, 1H, Pyrazol-5-H), 7,64-7,72 (m, 4H, Ph-2,3,5,6-4H), 6,03 (d, $J=3$ Hz, 1H, Pyrazol-4-H), 5,99 (s, 1H, NH), 4,43 (t, 2H, O-CH₂), 3,84 (m, 2H, N-CH₂), 2,17 (m, 2H, CH₂).

Hợp chất 121-69: nhiệt độ nóng chảy 96,0°C. δ (CDCl₃) 10,38 (s, 1H, CHO), 9,47 (s, 1H, NH), 8,42 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,81 (d, 1H, Pyrazol-5-H), 7,65-7,73 (m, 4H, Ph-2,3,5,6-4H), 6,03 (d, 1H, Pyrazol-4-H), 4,41 (t, 2H, O-CH₂), 3,84 (m, 2H, N-CH₂), 2,18 (m, 2H, CH₂).

Hợp chất 122-69: nhiệt độ nóng chảy 94,1°C. δ (CDCl₃) 8,28 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,82 (d, $J=2,4$ Hz, 1H, Pyrazol-5-H), 7,65-7,72 (m, 4H, Ph-2,3,5,6-4H), 5,95 (d, $J=2,7$ Hz, 1H, Pyrazol-4-H), 5,35 (s, 1H, NH), 4,44 (t, 2H, O-CH₂), 3,74 (m, 2H, N-CH₂), 2,18 (m, 2H, CH₂), 2,14 (s, 3H, CH₃).

Hợp chất 123-69: dầu. δ (CDCl₃) 8,15 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,81 (d, $J=2,7$ Hz, 1H, Pyrazol-5-H), 7,68-7,73 (m, 4H, Ph-2,3,5,6-4H), 5,96 (d, $J=2,7$ Hz, 1H, Pyrazol-4-H), 5,89 (s, 1H, NH), 4,41 (t, 2H, O-CH₂), 3,85 (s, 3H, CH₃), 3,71 (m, 2H, N-CH₂), 2,16 (m, 2H, CH₂).

Hợp chất 124-19: nhiệt độ nóng chảy 140,1°C. δ (CDCl₃) 8,36 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,70 (d, $J=2,7$ Hz, 1H, Pyrazol-5-H), 7,53 (d, $J=9,0$ Hz, 2H, Ph-2,6-2H), 7,37 (d, $J=9,3$ Hz, 2H, Ph-3,5-2H), 5,91 (d, $J=2,7$ Hz, 1H, Pyrazol-4-H), 5,87 (s, 1H, NH), 4,41 (t, 2H, O-CH₂), 3,70-3,75 (m, 2H, N-CH₂), 2,45 (s, 3H), 2,12-2,17 (m, 2H, CH₂).

Hợp chất 125-19: δ (CDCl₃) 8,42 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,70 (d, $J=2,7$ Hz, 1H, Pyrazol-5-H), 7,51-7,55 (m, 2H, Ph-2,6-2H), 7,35-7,39 (m, 2H, Ph-3,5-2H), 5,91 (d, $J=2,7$ Hz, 1H, Pyrazol-4-H), 5,88 (s, 1H, NH), 4,41 (t, 2H, O-CH₂), 3,69-3,75 (m, 2H, N-CH₂), 2,75-2,80 (m, 2H, CH₃-CH₂), 2,12-2,18 (m, 2H, CH₂), 1,26 (t, 3H, CH₃).

Hợp chất 125-69: nhiệt độ nóng chảy 94,3°C. δ (CDCl₃) 8,42 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,81 (d, $J=2,4$ Hz, 1H, Pyrazol-5-H), 7,65-7,73 (m, 4H, Ph-2,3,5,6-4H), 5,97 (d, $J=2,7$ Hz, 1H, Pyrazol-4-H), 5,89 (s, 1H, NH), 4,43 (t, 2H, O-CH₂), 3,73 (m, 2H,

N-CH₂), 2,78 (m, 2H, CH₂ CH₃), 2,17 (m, 2H, CH₂), 1,26 (t, 3H, CH₃).

Hợp chất 126-19: nhiệt độ nóng chảy 132,9°C. δ (CDCl₃) 8,54 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,70 (d, $J=2,7$ Hz, 1H, Pyrazol-5-H), 7,51-7,55 (m, 2H, Ph-2,6-2H), 7,35-7,40 (m, 2H, Ph-3,5-2H), 6,71 (t, 1H, CHF₂), 6,23 (s, 1H, NH), 5,91 (d, $J=2,7$ Hz, 1H, Pyrazol-4-H), 4,43 (t, 2H, O-CH₂), 3,73-3,79 (m, 2H, N-CH₂), 2,13-2,19 (m, 2H, CH₂).

Hợp chất 126-69: dầu. δ (CDCl₃) 8,54 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,82 (d, $J=2,7$ Hz, 1H, Pyrazol-5-H), 7,65-7,73 (m, 4H, Ph-2,3,5,6-4H), 6,74 (t, 1H, CHF₂), 6,29 (s, 1H, NH), 5,97 (d, $J=2,7$ Hz, 1H, Pyrazol-4-H), 4,45 (t, 2H, O-CH₂), 3,79 (m, 2H, N-CH₂), 2,18 (m, 2H, CH₂).

Hợp chất 127-19: nhiệt độ nóng chảy 165,7°C. δ (CDCl₃) 8,66 (s, 1H, Quinazolin-3-H), 7,81 (d, $J=2,7$ Hz, 1H, Pyrazol-5-H), 7,70-7,78 (m, 4H, Quinazolin-5,6,7,8-4H), 7,52 (dd, 2H, Ph-2H), 7,37 (dd, 2H, Ph-2H), 6,07 (s, 1H, NH), 5,92 (d, $J=2,7$ Hz, 1H, Pyrazol-4-H), 4,31 (t, 2H, O-CH₂), 3,43-3,53 (m, 2H, N-CH₂), 2,02-2,08 (m, 2H, CH₂).

Hợp chất 127-69: nhiệt độ nóng chảy 149,7°C. δ (CDCl₃) 8,67 (s, 1H, Quinazolin-3-H), 7,82 (d, $J=2,4$ Hz, 1H, Pyrazol-5-H), 7,65-7,81 (m, 4H, Ph-2,3,5,6-4H), 7,65-7,81 (m, 4H, Quinazolin-5,6,7,8-4H), 6,50 (s, 1H, NH), 5,98 (d, $J=2,7$ Hz, 1H, Pyrazol-4-H), 4,50 (t, 2H, O-CH₂), 3,89 (m, 2H, N-CH₂), 2,26 (m, 2H, CH₂).

Hợp chất 128-19: δ (CDCl₃) 8,46 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,70 (d, $J=2,7$ Hz, 1H, Pyrazol-5-H), 7,50-7,54 (m, 2H, Ph-2,6-2H), 7,34-7,40 (m, 2H, Ph-3,5-2H), 7,05 (s, 1H, Thiazol-H), 6,92 (s, 1H, NH), 5,91 (d, $J=2,7$ Hz, 1H, Pyrazol-4-H), 4,43 (t, 2H, O-CH₂), 3,82-3,90 (m, 2H, N-CH₂), 2,17-2,27 (m, 2H, CH₂).

Hợp chất 128-69: nhiệt độ nóng chảy 123,5°C. δ (CDCl₃) 8,46 (s, 1H, Pyrimidin-H), 7,81 (d, $J=2,4$ Hz, 1H, Pyrazol-5-H), 7,64-7,71 (m, 4H, Ph-2,3,5,6-4H), 7,06 (s, 1H, Thieno-H), 6,92 (s, 1H, NH), 5,96 (d, $J=2,7$ Hz, 1H, Pyrazol-4-H), 4,46 (t, 2H, O-CH₂), 3,86 (m, 2H, N-CH₂), 2,23 (m, 2H, CH₂).

Thử nghiệm hoạt tính sinh học

Các hợp chất theo sáng chế có hoạt tính phòng trừ tốt đối với nhiều tác nhân gây bệnh, côn trùng và ve bét gây hại trong lĩnh vực nông nghiệp.

Ví dụ 8: thử nghiệm hoạt tính diệt nấm

Các mẫu hợp chất của sáng chế được thử nghiệm về hoạt tính diệt nấm *in vitro* hoặc hoạt tính bảo vệ *in vivo*. Các kết quả của thử nghiệm diệt nấm là như sau.

(1) Xác định hoạt tính diệt nấm *in vitro*

Phương pháp là như sau: phương pháp sàng lọc thông lượng cao được sử dụng trong thử nghiệm này. Hợp chất được hoà tan trong dung môi thích hợp để trở thành dung dịch thử nghiệm có nồng độ định trước. Dung môi được chọn từ axeton, metanol, DMF, v.v. theo khả năng hòa tan của chúng với mẫu. Trong điều kiện không có vi khuẩn, cho dung dịch thử nghiệm và huyền phù chứa tác nhân gây bệnh vào các lỗ của đĩa nuôi cấy có 96 lỗ, sau đó đĩa này được cho vào hộp ở nhiệt độ không đổi. Sau 24 giờ, sự nảy mầm hoặc phát triển của tác nhân gây bệnh có thể được đánh giá bằng mắt thường, và hoạt tính *in vitro* của hợp chất được đánh giá dựa trên sự nảy mầm hoặc phát triển của nhóm xử lý bằng hợp chất đối chứng.

Hoạt tính *in vitro* (tỷ lệ ức chế) của một số hợp chất là như sau:

Tỷ lệ ức chế đối với bệnh đạo ôn:

Với liều dùng bằng 25 phần triệu (part per million: ppm), tỷ lệ ức chế của các hợp chất 30-1-4, 31-4, 31-78, 32-1, 32-4, 32-21, 32-57, 32-78, 33-4, 33-18, 35-19, 36-19, 37-19, 40-4, 40-18, 40-57, 40-69, 42-1, 42-4, 42-18, 42-21, 42-57, 42-69, 42-78, 44-19, 57-4, 59-21, 68-4, v.v. đối với bệnh đạo ôn là trên 80%. Tỷ lệ ức chế của các hợp chất đối chứng CK1, CK2, CK3, CK4 và CK5 bằng 0; với liều dùng bằng 8,3ppm, tỷ lệ ức chế của hợp chất 31-4, 36-19, 40-4, 40-18, 40-57, 42-1, 42-18, 42-21, 42-57, 42-69, 44-19, 57-4, 59-21, 68-4, 128-69, v.v. đối với bệnh đạo ôn là trên 80%; với liều dùng bằng 2,8ppm, tỷ lệ ức chế của hợp chất 36-19, 42-1, 42-18, 42-21, 42-69, 44-19, 57-4, 59-21, 68-4, v.v. đối với bệnh đạo ôn là trên 80%.

Tỷ lệ ức chế đối với bệnh mốc xám ở cây dưa chuột:

Với liều dùng bằng 25ppm, tỷ lệ ức chế của hợp chất 36-19, 40-19, 44-19, 57-4, 59-21, 68-4, v.v. đối với bệnh mốc xám ở cây dưa chuột là trên 80%. Tỷ lệ ức chế của các hợp chất đối chứng CK1, CK2, CK3, CK4 và CK5 bằng 0.

(2) Xác định hoạt tính bảo vệ *in vivo*

Phương pháp là như sau: toàn bộ cây trồng được sử dụng trong thử nghiệm này. Hợp chất được hoà tan trong dung môi thích hợp để thu được nước cái. Dung môi thích hợp được chọn từ axeton, metanol, DMF, v.v. theo khả năng hòa tan của chúng với mẫu. Tỷ lệ thể tích của dung môi và dung dịch thử nghiệm (theo thể tích) là bằng hoặc nhỏ hơn 5%. Nước cái được pha loãng bằng nước chứa Tween-80 0,1% để thu được dung dịch thử nghiệm có nồng độ định trước. Dung dịch thử nghiệm được phun vào cây chủ bằng bình phun đặc biệt. Cây trồng này được cấy nấm sau 24 giờ. Theo đặc tính gây nhiễm của nấm, cây trồng được bảo quản trong buồng ẩm và sau đó được chuyển vào nhà kính sau khi việc gây nhiễm kết thúc. Và các cây trồng còn lại được cho ngay vào nhà kính. Hoạt tính của hợp chất được đánh giá bằng mắt thường sau 7 ngày.

Hoạt tính bảo vệ *in vivo* của một số hợp chất là như sau:

Hoạt tính bảo vệ đối với bệnh mốc sương ở cây dưa chuột *in vivo*:

Với liều dùng bằng 400ppm, các hợp chất 30-1-4, 30-1-49, 30-1-57, 31-4, 31-19, 31-18, 31-21, 31-49, 31-57, 31-69, 32-4, 32-18, 32-19, 32-21, 32-49, 33-18, 33-19, 33-21, 35-19, 36-19, 40-4, 40-18, 40-19, 40-21, 40-57, 42-1, 42-18, 42-21, 42-49, 42-57, 42-69, 42-78, 44-19, 57-4, 57-19, 58-19, 59-19, 66-19, 68-19, 68-4, v.v. có hiệu quả phòng trừ bệnh mốc sương ở cây dưa chuột là trên 80%; với liều dùng bằng 100ppm, các hợp chất 30-1-19, 30-1-21, 30-1-30, 30-2-19, 31-4, 31-18, 31-19, 31-21, 31-23, 31-30, 31-69, 32-4, 32-17, 32-18, 32-19, 32-21, 32-30, 33-18, 33-19, 33-21, 33-30, 33-49, 33-57, 35-19, 36-19, 40-1, 40-4, 40-17, 40-18, 40-19, 40-21, 40-30, 42-1, 42-17, 42-18, 42-21, 42-69, 44-19, 123-69, 125-69, 126-69, 127-69, 128-69, v.v.. có hiệu quả phòng trừ bệnh mốc sương ở cây dưa chuột là trên 80%; với liều dùng bằng 25ppm, các hợp chất 30-1-19, 30-1-21, 30-1-30, 30-2-19, 31-18, 31-19, 31-21, 31-23, 31-30, 31-69, 32-4, 32-19, 32-30, 33-18, 33-19, 33-21, 33-30, 33-49, 33-57, 35-19, 36-19, 40-4, 40-17, 40-18, 40-19, 40-21, 40-30, 42-1, 42-17, 42-18, 42-21, 42-69, 44-19, v.v. có hiệu quả phòng trừ bệnh mốc sương ở cây dưa chuột là trên 80%; với liều dùng bằng 12,5ppm, các hợp chất 30-2-19, 31-23, 32-19, 32-30, 33-21, 33-30, 33-49, 33-57, 35-19, 36-19, 40-4, 40-18, 40-19, 42-21, v.v. có hiệu quả phòng trừ bệnh mốc sương ở cây dưa chuột là trên 80%; với liều dùng bằng 6,25ppm, các hợp chất 30-2-19, 31-23, 32-19, 32-30, 33-21, 33-30, 33-49, 33-57, 36-19, 40-4, 40-18, 40-19, 42-21, v.v. có hiệu quả phòng trừ

bệnh mốc sương ở cây dưa chuột là trên 80%.

Hoạt tính bảo vệ đối với bệnh phấn trắng ở cây lúa mì *in vivo*:

Với liều dùng bằng 400ppm, các hợp chất 30-1-57, 30-1-21, 30-2-19, 31-18, 31-21, 31-30, 31-49, 31-57, 31-69, 31-78, 32-1, 32-17, 32-18, 32-19, 32-21, 32-30, 32-49, 32-69, 32-78, 33-4, 33-19, 33-21, 33-30, 33-49, 33-57, 33-69, 35-19, 36-19, 37-19, 40-19, 40-21, 40-69, 42-4, 42-17, 42-18, 42-21, 42-49, 42-57, 42-69, 42-78, 44-19, 57-19, 58-19, 59-19, 66-19, 68-19, 59-21, 118-69, 119-69, 122-69, 123-69, 125-69, 126-69, 127-69, 128-69, v.v. có hiệu quả phòng trừ bệnh phấn trắng ở cây lúa mì là trên 80%; với liều dùng bằng 100ppm, các hợp chất 30-1-21, 30-2-19, 31-30, 31-69, 32-17, 32-19, 32-21, 32-30, 32-49, 32-69, 33-4, 33-19, 33-30, 33-49, 33-57, 33-69, 36-19, 37-19, 42-17, 42-57, 42-69, 44-19, 59-21, 118-69, 119-69, 122-69, 123-69, 125-69, 126-69, 127-69, 128-69, v.v. có hiệu quả phòng trừ bệnh phấn trắng ở cây lúa mì là trên 80%; với liều dùng bằng 25ppm, các hợp chất 30-2-19, 31-30, 31-69, 32-21, 32-30, 32-69, 33-4, 33-19, 33-30, 33-49, 33-57, 33-69, 36-19, 37-19, 42-69, 44-19, 118-69, 119-69, 122-69, 123-69, 125-69, 126-69, 127-69, 128-69, v.v. có hiệu quả phòng trừ bệnh phấn trắng ở cây lúa mì là trên 80%; với liều dùng bằng 6,25ppm, các hợp chất 30-2-19, 31-69, 32-69, 33-4, 33-19, 33-49, 33-57, 33-69, 36-19, 37-19, 42-69, 44-19, 118-69, 123-69, 126-69, 128-69, v.v. có hiệu quả phòng trừ bệnh phấn trắng ở cây lúa mì là trên 80%.

Hoạt tính bảo vệ đối với bệnh gỉ sắt ở cây ngô *in vivo*:

Với liều dùng bằng 400ppm, các hợp chất 31-49, 31-57, 31-69, 32-4, 32-18, 32-19, 32-49, 32-57, 32-69, 32-78, 33-4, 33-19, 33-69, 36-19, 37-19, 40-18, 40-21, 42-18, 42-21, 42-4, 42-69, 42-78, 44-19, 57-4, 59-21, 68-4, v.v. có hiệu quả phòng trừ bệnh gỉ sắt ở cây ngô là trên 80%; với liều dùng bằng 100ppm, các hợp chất 31-69, 31-57, 32-49, 32-57, 32-69, 33-4, 33-69, 37-19, 42-18, 42-69, 44-19, 57-4, v.v. có hiệu quả phòng trừ bệnh gỉ sắt ở cây ngô là trên 80%; với liều dùng bằng 25ppm, các hợp chất 32-49, 32-57, 32-69, 37-19, 42-69, v.v. có hiệu quả phòng trừ bệnh gỉ sắt ở cây ngô là trên 80%; với liều dùng bằng 6,25ppm, các hợp chất 32-49, 37-19, 42-69, v.v. có hiệu quả phòng trừ bệnh gỉ sắt ở cây ngô là trên 80%.

Hoạt tính bảo vệ đối với bệnh nấm than ở cây dưa chuột *in vivo*:

Với liều dùng bằng 400ppm, các hợp chất 31-4, 31-19, 31-49, 31-57, 32-4, 32-18, 32-19, 32-49, 33-4, 33-19, 40-4, 40-19, 40-57, 42-1, 42-49, 42-69, v.v. có hiệu quả phòng trừ bệnh nấm than ở cây dưa chuột là trên 80%; với liều dùng bằng 100ppm, các hợp chất 31-19, 31-49, 31-57, 32-4, 32-18, 32-19, 32-49, 33-4, 33-19, 40-4, 40-19, 40-57, 42-1, 42-49, 118-69, 122-69, 123-69, 126-69, 127-69, v.v. có hiệu quả phòng trừ bệnh nấm than ở cây dưa chuột là trên 80%; với liều dùng bằng 25ppm, các hợp chất 31-19, 31-49, 31-57, 32-4, 32-49, 33-4, 32-19, 40-19, 40-57, 42-1, 42-49, 42-69, 122-69, 123-69, 126-69, 127-69, v.v. có hiệu quả phòng trừ bệnh nấm than ở cây dưa chuột là trên 80%; với liều dùng bằng 6,25ppm, hợp chất 31-57, 32-19, 32-49, 40-57 và 42-1 có hiệu quả phòng trừ bệnh nấm than ở cây dưa chuột là trên 90%.

(3) Các kết quả thử nghiệm so sánh của một số hợp chất theo sáng chế và hợp chất đối chứng

Các thử nghiệm so sánh được tiến hành giữa một số hợp chất theo sáng chế và hợp chất đối chứng. Các kết quả thử nghiệm được liệt kê trong các bảng từ 129 đến 132 (ký hiệu “///” trong bảng dưới đây có nghĩa là không thử nghiệm).

Bảng 129: thử nghiệm so sánh hoạt tính bảo vệ đối với bệnh mốc sương ở cây dưa chuột với nồng độ 25mg/l

Hợp chất số	Hoạt tính bảo vệ (%)	Hợp chất số	Hoạt tính bảo vệ (%)	Hợp chất số	Hoạt tính bảo vệ (%)	Hợp chất số	Hoạt tính bảo vệ (%)
30-1-19	95	32-17	70	35-19	100	42-18	100
30-1-21	100	32-18	60	36-19	100	42-21	100
30-1-30	98	32-19	100	40-1	70	42-69	80
30-2-19	98	32-21	70	40-4	100	44-19	100
31-18	95	32-30	100	40-17	70	126-69	70
31-19	100	33-18	85	40-18	100	127-69	70
31-21	90	33-19	95	40-19	96	CK1	20
31-23	100	33-21	100	40-21	100	CK2	20
31-30	100	33-30	100	40-30	100	CK3	0
31-69	100	33-49	100	42-1	100	CK4	0

32-4	95	33-57	100	42-17	100	CK5	0
------	----	-------	-----	-------	-----	-----	---

Bảng 130: thử nghiệm so sánh về hoạt tính bảo vệ đối với bệnh phấn trắng ở cây lúa mì với nồng độ 100 mg/l

Hợp chất số	Hoạt tính bảo vệ (%)	Hợp chất số	Hoạt tính bảo vệ (%)	Hợp chất số	Hoạt tính bảo vệ (%)
30-2-19	100	33-49	100	122-69	100
31-30	98	33-57	100	123-69	100
31-69	100	33-69	100	125-69	100
32-19	100	35-19	70	126-69	100
32-21	100	36-19	100	127-69	100
32-30	100	37-19	95	128-69	100
32-69	100	42-69	100	CK2	50
33-4	100	44-19	100	CK3	0
33-19	100	118-69	100	CK4	0
33-30	100	119-69	100	CK5	0

Bảng 131: thử nghiệm so sánh hoạt tính bảo vệ đối với bệnh gỉ sắt ở cây ngô

Hợp chất số	Hiệu quả phòng trừ bệnh gỉ sắt ở cây ngô (%)	
	100mg/l	25mg/l
32-57	98	85
32-69	90	85
37-19	100	90
42-69	90	85
CK3	20	0
CK4	0	0
CK5	70	60

Bảng 132: thử nghiệm so sánh hoạt tính bảo vệ đối với bệnh nấm than ở cây dưa chuột với nồng độ 100 mg/l

Hợp chất số	Hoạt tính bảo vệ (%)	Hợp chất số	Hoạt tính bảo vệ (%)	Hợp chất số	Hoạt tính bảo vệ (%)
-------------	----------------------	-------------	----------------------	-------------	----------------------

	vệ (%)		vệ (%)		vệ (%)
31-19	90	33-4	85	122-69	85
31-49	85	33-19	100	123-69	90
31-57	98	40-19	100	126-69	95
32-4	90	40-57	98	127-69	92
32-18	85	42-1	95	CK3	0
32-19	100	42-69	95	CK4	0
32-49	100	118-69	80	CK5	0

Ví dụ 9: thử nghiệm hoạt tính sinh học đối với côn trùng và ve bét

Việc xác định hoạt tính trừ sâu của các hợp chất theo sáng chế đối với một vài côn trùng được tiến hành theo các quy trình sau:

Các hợp chất được hoà tan trong dung môi hỗn hợp (axeton: metanol theo tỷ lệ 1:1), và được pha loãng với nước chứa Tween 80 0,1% đến nồng độ cần thiết.

Sâu tơ cải bắp, sâu cắn gié, rệp đào và nhện màu đỏ son được dùng làm đích và sử dụng phương pháp phun bằng bình phun sơn trong các thử nghiệm sinh học của thuốc trừ sâu.

(1) Thử nghiệm hoạt tính sinh học đối với sâu tơ cải bắp

Phương pháp phun bằng bình phun sơn: lá cải bắp được tạo thành các đĩa lá có đường kính 2cm bằng cách sử dụng dụng cụ dập lỗ. Dung dịch thử nghiệm (0,5ml) được phun bằng bình phun sơn với áp lực 0,7 kg/cm² lên cả hai mặt của mỗi đĩa lá. 10 ấu trùng giai đoạn hai được đưa vào các đĩa Petri sau khi đĩa lá được làm khô trong không khí và mỗi lần xử lý được lặp lại 3 lần. Sau đó, các côn trùng được duy trì trong phòng quan sát (ở nhiệt độ 25°C, độ ẩm tương đối (R.H.) 60~70%). Tiến hành đếm và tính tỷ lệ chết sau 72 giờ.

Một số kết quả thử nghiệm đối với sâu tơ cải bắp:

Với liều dùng bằng 600ppm, các hợp chất 33-19, 37-19, v.v. có hiệu quả phòng trừ 100% đối với sâu tơ cải bắp.

(2) Thử nghiệm hoạt tính sinh học đối với rệp đào

Phương pháp: cho giấy lọc vào các đĩa nuôi cấy (đường kính=6cm), và nước

được nhỏ giọt lên giấy lọc để duy trì độ ẩm. Rệp đào (*Myzus Persicae* Sulzer) được duy trì trên cây bắp cải. Lá cây (đường kính=3cm) có khoảng 15-30 con rệp được đưa vào các đĩa nuôi cấy. Các thử nghiệm về hoạt tính sinh học sử dụng phương pháp phun lên lá bằng dụng cụ phun sơn, áp lực=10psi (0,7kg/cm²), thể tích phun =0,5ml. Các nghiên cứu được tiến hành ở 3 nhiệt độ không đổi bằng 25± 1°C trong ngăn tủ áp với độ ẩm tương đối RH bằng 60 ± 5%. Đánh giá số lượng rệp còn sống sau 48 giờ và tính tỷ lệ chết.

Với liều dùng bằng 600ppm, các hợp chất 31-49, 32-17, 32-21, 32-30, 32-33, 32-57, 33-21, 33-57, 37-19, 42-1, 42-57, 59-21, v.v. có hiệu quả phòng trừ đối với rệp đào là trên 80%; với liều dùng bằng 100ppm, các hợp chất 32-21, 33-21, 37-19, v.v. có hiệu quả phòng trừ đối với rệp đào là trên 80%; với liều dùng bằng 5ppm, hợp chất 33-21 có hiệu quả phòng trừ đối với rệp đào bằng 100%.

(3) Các kết quả thử nghiệm hoạt tính sinh học đối với nhện màu đỏ son

Phương pháp: sử dụng các chồi của cây đậu răng ngựa có hai lá mầm trong chậu để thử nghiệm, các con nhện màu đỏ son trưởng thành khỏe mạnh được cấy vào các lá. Số lượng các con nhện này được đếm và sau đó phun bằng bình phun sơn với áp lực 0,7 kg/cm² và với liều 0,5ml. Thực hiện lặp lại 3 lần đối với mỗi lần xử lý. Và sau đó chúng được duy trì trong phòng quan sát chuẩn. Tiến hành đếm và tính tỷ lệ chết sau 72 giờ.

Thử nghiệm về hoạt tính sinh học đối với nhện màu đỏ son:

Với liều dùng bằng 600ppm, các hợp chất 30-1-57, 30-2-19, 31-23, 32-17, 32-21, 32-23, 32-30, 32-57, 32-78, 33-4, 33-57, 36-19, 37-19, 40-4, 42-17, 42-57, 42-78, 44-19, 59-21, v.v. có hiệu quả phòng trừ đối với nhện màu đỏ son là trên 80%; với liều dùng bằng 100ppm, các hợp chất 32-21, 32-57, 36-19, 37-19, 42-57, 44-19, v.v. có hiệu quả phòng trừ đối với nhện màu đỏ son là trên 80%; với liều dùng bằng 10ppm, cả hợp chất 32-57 và 37-19 đều có hiệu quả phòng trừ đối với nhện màu đỏ son là trên 80%.

(4) Kết quả của thử nghiệm so sánh của một số hợp chất theo sáng chế và hợp chất đối chứng

Các thử nghiệm so sánh được tiến hành giữa một số hợp chất theo sáng chế và hợp chất đối chứng. Các kết quả thử nghiệm được liệt kê trong các bảng 133 từ 135 (ký hiệu “///” trong các bảng dưới đây có nghĩa là không thử nghiệm).

Bảng 133: kết quả của các thử nghiệm so sánh của đối với sâu tơ cải bắp

Hợp chất số	Hoạt tính trừ sâu đối với sâu tơ cải bắp (%)
	600mg/l
33-19	100
37-19	100
CK1	43
CK2	20
CK3	0
CK4	0
CK5	0

Bảng 134: kết quả của thử nghiệm so sánh đối với rệp đào

Hợp chất số	Hoạt tính trừ sâu đối với rệp đào (%)
	100mg/l
33-21	100
37-19	84
CK1	0
CK3	30
CK4	0
CK5	22

Bảng 135: kết quả của thử nghiệm so sánh đối với nhện màu đỏ son

Hợp chất số	Hoạt tính trừ sâu đối với nhện màu đỏ son (%)	
	600 mg/l	100 mg/l
32-57	100	100
36-19	100	98
37-19	100	100
44-19	100	100
CK3	56	///
CK4	59	///

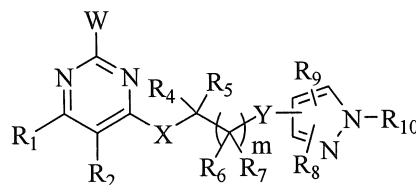
CK5	58	///
-----	----	-----

Trong toàn bộ bản mô tả này, trừ khi có yêu cầu theo cách khác do ngữ cảnh, từ “chứa” hoặc các phương án như “có chứa” hoặc “bao gồm” sẽ được hiểu là gồm cả thành phần hoặc số nguyên hoặc bước của phương pháp hoặc nhóm các thành phần hoặc các số nguyên hoặc các bước của phương pháp đã nêu mà không loại trừ thành phần hoặc số nguyên hoặc bước của phương pháp hoặc nhóm các thành phần hoặc các số nguyên hoặc các bước của phương pháp bất kỳ.

Trong bản mô tả này, sự viện dẫn đến tài liệu công bố bất kỳ (hoặc thông tin từ tài liệu này), hoặc chất bất kỳ là chất đã biết hoặc chưa biết không được hiểu là sự công nhận hoặc thừa nhận hoặc dạng gợi ý bất kỳ rằng tài liệu công bố đã biết (hoặc thông tin từ tài liệu này) hoặc chất đã biết này tạo thành một phần kiến thức chung trong lĩnh vực mà bản mô tả này đề cập đến.

YÊU CẦU BẢO HỘ

1. Hợp chất pyrazol được thể chứa pyrimidinyl có công thức chung I:



I

trong đó:

R_1 được chọn từ H, halogen, xyano, nitro, amino, carboxyl, C_1 - C_{12} alkyl, halo C_1 - C_{12} alkyl, C_3 - C_{12} xycloalkyl, C_1 - C_{12} alkoxy, halo C_1 - C_{12} alkoxy, C_1 - C_{12} alkylthio, halo C_1 - C_{12} alkylthio, C_1 - C_{12} alkylsulfinyl, C_1 - C_{12} alkylsulfonyl, C_2 - C_{12} alkenyl, halo C_2 - C_{12} alkenyl, C_2 - C_{12} alkynyl, halo C_2 - C_{12} alkynyl, C_3 - C_{12} alkenoxy, halo C_3 - C_{12} alkenoxy, C_3 - C_{12} alkynoxy, halo C_3 - C_{12} alkynoxy, C_1 - C_{12} alkylamino, di(C_1 - C_{12} alkyl)amino, C_1 - C_{12} alkylaminocarbonyl, halo C_1 - C_{12} alkylaminocarbonyl, C_1 - C_{12} alkoxycarbonyl, halo C_1 - C_{12} alkoxycarbonyl, C_1 - C_{12} alkoxy C_1 - C_{12} alkyl hoặc C_1 - C_{12} alkylthio C_1 - C_{12} alkyl;

R_2 được chọn từ H, halogen, xyano, nitro, amino, carboxyl, CHO, C_1 - C_{12} alkyl, halo C_1 - C_{12} alkyl, C_1 - C_{12} alkoxy hoặc halo C_1 - C_{12} alkoxy;

R_1 , R_2 và vòng pyrimidin liên kết của chúng cũng có thể tạo thành vòng có 5 cạnh, vòng có 6 cạnh, vòng có 7 cạnh hoặc vòng có 8 cạnh chứa nguyên tử cacbon, nguyên tử nitơ, nguyên tử oxy hoặc nguyên tử lưu huỳnh;

X được chọn từ NR_3 , O hoặc S;

Y được chọn từ NR_3 , O hoặc S;

R_3 được chọn từ H, OH, CHO, C_1 - C_{12} alkyl, halo C_1 - C_{12} alkyl, C_1 - C_{12} alkoxy, halo C_1 - C_{12} alkoxy, C_3 - C_{12} xycloalkyl, C_1 - C_{12} alkylthio, C_2 - C_{12} alkenylthio, C_2 - C_{12} alkenyl, C_2 - C_{12} alkynyl, halo C_2 - C_{12} alkenyl, halo C_2 - C_{12} alkynyl, C_1 - C_{12} alkoxy C_1 - C_{12} alkyl, halo C_1 - C_{12} alkoxy C_1 - C_{12} alkyl, C_1 - C_{12} alkylthio C_1 - C_{12} alkyl, halo C_1 - C_{12} alkylthio C_1 - C_{12} alkyl, C_1 - C_{12} alkylsulfinyl, halo C_1 - C_{12} alkylsulfinyl, C_1 - C_{12} alkylsulfonyl, halo C_1 - C_{12} alkylsulfonyl, C_1 - C_{12} alkylaminosulfonyl, di(C_1 - C_{12} alkyl)aminosulfonyl, C_1 - C_{12} alkylsulfonylaminocarbonyl,

C_1 - C_{12} alkylcabcbonylaminosulfonyl, C_3 - C_{12} xycloalkyloxycabcbonyl,
 C_1 - C_{12} alkylcabcbonyl, halo C_1 - C_{12} alkylcabcbonyl, C_1 - C_{12} alkoxycabcbonyl,
halo C_1 - C_{12} alkoxycabcbonyl, C_1 - C_{12} alkylcabcbonyl C_1 - C_{12} alkyl,
 C_1 - C_{12} alkoxycabcbonyl C_1 - C_{12} alkyl, C_1 - C_{12} alkylaminocabcbonyl,
di(C_1 - C_{12} alkyl)aminocabcbonyl, C_2 - C_{12} alkenoxycabcbonyl, C_2 - C_{12} alkynoxycabcbonyl,
 C_1 - C_{12} alkoxy C_1 - C_{12} alkoxycabcbonyl, C_1 - C_{12} alkylaminothio, di(C_1 - C_{12} alkyl)aminothio,
các nhóm (hetero)arylcabcbonyl C_1 - C_6 alkyl, (hetero)arylcabcbonyl,
(hetero)aryloxycabcbonyl, (hetero)aryl C_1 - C_6 alkyloxycabcbonyl hoặc
(hetero)aryl C_1 - C_6 alkyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm sau:
halo, nitro, xyano, C_1 - C_6 alkyl, halo C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 alkoxy hoặc halo C_1 - C_6 alkoxy;

R_4 , R_5 có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, halogen,
 C_1 - C_{12} alkyl, halo C_1 - C_{12} alkyl, C_1 - C_{12} alkoxy hoặc halo C_1 - C_{12} alkoxy; hoặc R_4 , R_5 và
nguyên tử cacbon liên kết của chúng cũng có thể tạo thành vòng có từ 3 đến 8 nguyên tử
cacbon;

R_6 , R_7 có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, halogen,
 C_1 - C_{12} alkyl, halo C_1 - C_{12} alkyl, C_1 - C_{12} alkoxy hoặc halo C_1 - C_{12} alkoxy; hoặc R_6 , R_7 và
nguyên tử cacbon liên kết của chúng cũng có thể tạo thành vòng có từ 3 đến 8 nguyên tử
cacbon;

m là số nguyên được chọn từ 0 đến 5;

R_8 được chọn từ H, xyano, halogen, C_1 - C_{12} alkyl, halo C_1 - C_{12} alkyl,
 C_1 - C_{12} alkoxycabcbonyl, halo C_1 - C_{12} alkoxycabcbonyl, các nhóm (hetero)aryl,
(hetero)arylmetyl, (hetero)arylcabcbonyl, (hetero)arylmetylcabcbonyl hoặc
(hetero)aryloxycabcbonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

R_9 được chọn từ H, xyano, halogen, C_1 - C_{12} alkyl, halo C_1 - C_{12} alkyl,
 C_1 - C_{12} alkoxycabcbonyl, halo C_1 - C_{12} alkoxycabcbonyl, các nhóm (hetero)aryl,
(hetero)arylmetyl, (hetero)arylcabcbonyl, (hetero)arylmetylcabcbonyl hoặc
(hetero)aryloxycabcbonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

R_{10} được chọn từ C_1 - C_{12} alkyl, C_3 - C_8 xycloalkyl, halo C_1 - C_{12} alkyl,
 C_1 - C_{12} alkylcabcbonyl, halo C_1 - C_{12} alkylcabcbonyl, C_1 - C_{12} alkylsulfonyl,
halo C_1 - C_{12} alkylsulfonyl, C_1 - C_{12} alkoxycabcbonyl, C_1 - C_{12} alkoxy C_1 - C_{12} alkyl,
 C_1 - C_{12} alkoxycabcbonyl C_1 - C_{12} alkyl, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmetyl,

(hetero)arylcacbonyl, (hetero)arylmetylcacbonyl hoặc (hetero)aryloxyacacbonyl không được thể hoặc được thể tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

R_{11} được chọn từ halogen, OH, amino, xyano, nitro, C_1 - C_{12} alkyl, halo C_1 - C_{12} alkyl, C_1 - C_{12} alkoxy, halo C_1 - C_{12} alkoxy, C_3 - C_{12} xycloalkyl, C_1 - C_{12} alkylamino, halo C_1 - C_{12} alkylamino, di(C_1 - C_{12} alkyl)amino, halodi(C_1 - C_{12} alkyl)amino, $C(=O)NR_{12}R_{13}$, C_1 - C_{12} alkylthio, halo C_1 - C_{12} alkylthio, C_2 - C_{12} alkenyl, C_2 - C_{12} alkynyl, C_2 - C_{12} alkenoxy, halo C_2 - C_{12} alkenoxy, C_2 - C_{12} alkynoxy, halo C_2 - C_{12} alkynoxy, C_1 - C_{12} alkylsulfonyl, halo C_1 - C_{12} alkylsulfonyl, C_1 - C_{12} alkylcacbonyl, halo C_1 - C_{12} alkylcacbonyl, C_1 - C_{12} alkoxyacacbonyl, halo C_1 - C_{12} alkoxyacacbonyl, C_1 - C_{12} alkoxy C_1 - C_{12} alkyl, halo C_1 - C_{12} alkoxy C_1 - C_{12} alkyl, C_1 - C_{12} alkylthio C_1 - C_{12} alkyl, halo C_1 - C_{12} alkylthio C_1 - C_{12} alkyl, C_1 - C_{12} alkoxyacacbonyl C_1 - C_{12} alkyl, halo C_1 - C_{12} alkoxyacacbonyl C_1 - C_{12} alkyl, C_1 - C_{12} alkylthiocacbonyl C_1 - C_{12} alkyl, halo C_1 - C_{12} alkylthiocacbonyl C_1 - C_{12} alkyl, C_1 - C_{12} alkylcacbonyloxy, halo C_1 - C_{12} alkylcacbonyloxy, C_1 - C_{12} alkoxyacacbonyloxy, halo C_1 - C_{12} alkoxyacacbonyloxy, C_1 - C_{12} alkylsulfonyloxy, halo C_1 - C_{12} alkylsulfonyloxy, C_1 - C_{12} alkoxy C_1 - C_{12} alkoxy hoặc halo C_1 - C_{12} alkoxy C_1 - C_{12} alkoxy;

R_{12} , R_{13} có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, C_1 - C_{12} alkyl hoặc halo C_1 - C_{12} alkyl;

W được chọn từ H, halogen, C_1 - C_{12} alkyl, halo C_1 - C_{12} alkyl, C_3 - C_8 xycloalkyl, C_1 - C_{12} alkoxy, C_1 - C_{12} alkylthio hoặc C_1 - C_{12} alkylsulfonyl;

vị trí của nhóm Y được liên kết với vòng pyrazol là vị trí 3, vị trí 4 hoặc vị trí 5; khi nhóm Y được liên kết với vị trí 3 của pyrazol, R_8 ở vị trí 4, R_9 ở vị trí 5; khi nhóm Y được liên kết với vị trí 4 của pyrazol, R_8 ở vị trí 3, R_9 ở vị trí 5; khi nhóm Y được liên kết với vị trí 5 của pyrazol, R_8 ở vị trí 3, R_9 ở vị trí 4;

hoặc các muối được tạo ra từ các hợp chất có công thức chung I.

2. Hợp chất pyrazol được thể chứa pyrimidinyl theo điểm 1, khác biệt ở chỗ, trong công thức chung I:

R_1 được chọn từ H, halogen, xyano, nitro, amino, carboxyl, C_1 - C_6 alkyl, halo C_1 - C_6 alkyl, C_3 - C_6 xycloalkyl, C_1 - C_6 alkoxy, halo C_1 - C_6 alkoxy, C_1 - C_6 alkylthio, C_1 - C_6 alkylsulfinyl, C_1 - C_6 alkylsulfonyl, halo C_1 - C_6 alkylthio, C_2 - C_6 alkenyl,

haloC₂-C₆alkenyl, C₂-C₆alkynyl, haloC₂-C₆alkynyl, C₃-C₆alkenoxy, haloC₃-C₆alkenoxy, C₃-C₆alkynoxy, haloC₃-C₆alkynoxy, C₁-C₆alkylamino, di(C₁-C₆alkyl)amino, C₁-C₆alkylaminocarbonyl, haloC₁-C₆alkylaminocarbonyl, C₁-C₆alkoxycarbonyl, haloC₁-C₆alkoxycarbonyl, C₁-C₆alkoxyC₁-C₆alkyl hoặc C₁-C₆alkylthioC₁-C₆alkyl;

R₂ được chọn từ H, halogen, xyano, nitro, amino, carboxyl, CHO, C₁-C₆alkyl, haloC₁-C₆alkyl, C₁-C₆alkoxy hoặc haloC₁-C₆alkoxy;

R₁, R₂ và vòng pyrimidin liên kết của chúng cũng có thể tạo thành vòng có 5 cạnh hoặc vòng có 6 cạnh chứa nguyên tử cacbon, nguyên tử nitơ, nguyên tử oxy hoặc nguyên tử lưu huỳnh;

X được chọn từ NR₃, O hoặc S;

Y được chọn từ NR₃, O hoặc S;

R₃ được chọn từ H, OH, CHO, C₁-C₆alkyl, haloC₁-C₆alkyl, C₁-C₆alkoxy, haloC₁-C₆alkoxy, C₃-C₆cycloalkyl, C₁-C₆alkylthio, C₂-C₆alkenylthio, C₂-C₆alkenyl, C₂-C₆alkynyl, haloC₂-C₆alkenyl, haloC₂-C₆alkynyl, C₁-C₆alkoxyC₁-C₆alkyl, haloC₁-C₆alkoxyC₁-C₆alkyl, C₁-C₆alkylthioC₁-C₆alkyl, haloC₁-C₆alkylthioC₁-C₆alkyl, C₁-C₆alkylsulfinyl, haloC₁-C₆alkylsulfinyl, C₁-C₆alkylsulfonyl, haloC₁-C₆alkylsulfonyl, C₁-C₆alkylaminosulfonyl, di(C₁-C₆alkyl)aminosulfonyl, C₁-C₆alkylsulfonylaminocarbonyl, C₁-C₆alkylcarbonylaminosulfonyl, C₃-C₆cycloalkyloxycarbonyl, C₁-C₆alkylcarbonyl, haloC₁-C₆alkylcarbonyl, C₁-C₆alkoxycarbonyl, haloC₁-C₆alkoxycarbonyl, C₁-C₆alkylcarbonylC₁-C₆alkyl, C₁-C₆alkoxycarbonylC₁-C₆alkyl, C₁-C₆alkylaminocarbonyl, di(C₁-C₆alkyl)aminocarbonyl, C₂-C₆alkenoxycarbonyl, C₂-C₆alkynoxycarbonyl, C₁-C₆alkoxyC₁-C₆alkoxycarbonyl, C₁-C₆alkylaminothio, di(C₁-C₆alkyl)aminothio, các nhóm (hetero)arylcarbonylC₁-C₆alkyl, (hetero)arylcarbonyl, (hetero)aryloxycarbonyl, (hetero)arylC₁-C₆alkyloxycarbonyl hoặc (hetero)arylC₁-C₆alkyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm sau: halogen, nitro, xyano, C₁-C₆alkyl, haloC₁-C₆alkyl, C₁-C₆alkoxy hoặc haloC₁-C₆alkoxy;

R₄, R₅ có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, halogen, C₁-C₆alkyl, haloC₁-C₆alkyl, C₁-C₆alkoxy hoặc haloC₁-C₆alkoxy; hoặc R₄, R₅ và nguyên tử cacbon liên kết của chúng cũng có thể tạo thành vòng có từ 3 đến 6 nguyên tử cacbon;

R₆, R₇ có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, halogen,

C_1 - C_6 alkyl, halo C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 alkoxy hoặc halo C_1 - C_6 alkoxy; hoặc R_6 , R_7 và nguyên tử cacbon liên kết của chúng cũng có thể tạo thành vòng có từ 3 đến 6 nguyên tử cacbon;

m là số nguyên được chọn từ 0 đến 4;

R_8 được chọn từ H, xyano, halogen, C_1 - C_6 alkyl, halo C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 alkoxycarbonyl, halo C_1 - C_6 alkoxycarbonyl, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmethyl, (hetero)arylcarbonyl, (hetero)arylmethylcarbonyl hoặc (hetero)aryloxy carbonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

R_9 được chọn từ H, xyano, halogen, C_1 - C_6 alkyl, halo C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 alkoxycarbonyl, halo C_1 - C_6 alkoxycarbonyl, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmethyl, (hetero)arylcarbonyl, (hetero)arylmethylcarbonyl hoặc (hetero)aryloxy carbonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

R_{10} được chọn từ C_1 - C_6 alkyl, C_3 - C_6 cycloalkyl, halo C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 alkylcarbonyl, halo C_1 - C_6 alkylcarbonyl, C_1 - C_6 alkylsulfonyl, halo C_1 - C_6 alkylsulfonyl, C_1 - C_6 alkoxycarbonyl, C_1 - C_6 alkoxy C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 alkoxycarbonyl C_1 - C_6 alkyl, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmethyl, (hetero)arylcarbonyl, (hetero)arylmethylcarbonyl hoặc (hetero)aryloxy carbonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

R_{11} được chọn từ halogen, OH, amino, xyano, nitro, C_1 - C_6 alkyl, halo C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 alkoxy, halo C_1 - C_6 alkoxy, C_3 - C_6 cycloalkyl, C_1 - C_6 alkylamino, halo C_1 - C_6 alkylamino, di(C_1 - C_6 alkyl)amino, halo di(C_1 - C_6 alkyl)amino, $C(=O)NR_{12}R_{13}$, C_1 - C_6 alkylthio, halo C_1 - C_6 alkylthio, C_2 - C_6 alkenyl, C_2 - C_6 alkynyl, C_2 - C_6 alkenoxy, halo C_2 - C_6 alkenoxy, C_2 - C_6 alkynoxy, halo C_2 - C_6 alkynoxy, C_1 - C_6 alkylsulfonyl, halo C_1 - C_6 alkylsulfonyl, C_1 - C_6 alkylcarbonyl, halo C_1 - C_6 alkylcarbonyl, C_1 - C_6 alkoxycarbonyl, halo C_1 - C_6 alkoxycarbonyl, C_1 - C_6 alkoxy C_1 - C_6 alkyl, halo C_1 - C_6 alkoxy C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 alkylthio C_1 - C_6 alkyl, halo C_1 - C_6 alkylthio C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 alkoxycarbonyl C_1 - C_6 alkyl, halo C_1 - C_6 alkoxycarbonyl C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 alkylthiocarbonyl C_1 - C_6 alkyl, halo C_1 - C_6 alkylthiocarbonyl C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 alkylcarbonyloxy, halo C_1 - C_6 alkylcarbonyloxy, C_1 - C_6 alkoxycarbonyloxy, halo C_1 - C_6 alkoxycarbonyloxy, C_1 - C_6 alkylsulfonyloxy, halo C_1 - C_6 alkylsulfonyloxy, C_1 - C_6 alkoxy C_1 - C_6 alkoxy hoặc halo C_1 - C_6 alkoxy C_1 - C_6 alkoxy;

R_{12} , R_{13} có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H,

C₁-C₆alkyl hoặc haloC₁-C₆alkyl;

W được chọn từ H, halogen, C₁-C₆alkyl, haloC₁-C₆alkyl, C₃-C₆cycloalkyl, C₁-C₆alkoxy, C₁-C₆alkylthio hoặc C₁-C₆alkylsulfonyl;

vị trí của nhóm Y được liên kết với vòng pyrazol là vị trí 3, vị trí 4 hoặc vị trí 5; khi nhóm Y được liên kết với vị trí 3 của pyrazol, R₈ ở vị trí 4, R₉ ở vị trí 5; khi nhóm Y được liên kết với vị trí 4 của pyrazol, R₈ ở vị trí 3, R₉ ở vị trí 5; khi nhóm Y được liên kết với vị trí 5 của pyrazol, R₈ ở vị trí 3, R₉ ở vị trí 4.

3. Hợp chất pyrazol được thể chứa pyrimidinyl theo điểm 2, khác biệt ở chỗ, trong công thức chung I:

R₁ được chọn từ H, halogen, xyano, nitro, amino, carboxyl, C₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkyl, C₃-C₄cycloalkyl, C₁-C₄alkoxy, haloC₁-C₄alkoxy, C₁-C₄alkylthio, C₁-C₄alkylsulfinyl, C₁-C₄alkylsulfonyl, haloC₁-C₄alkylthio, C₂-C₄alkenyl, haloC₂-C₄alkenyl, C₂-C₄alkynyl, haloC₂-C₄alkynyl, C₃-C₄alkenoxy, haloC₃-C₄alkenoxy, C₃-C₄alkynoxy, haloC₃-C₄alkynoxy, C₁-C₄alkylamino, di(C₁-C₄alkyl)amino, C₁-C₄alkylaminocarbonyl, haloC₁-C₄alkylaminocarbonyl, C₁-C₄alkoxycarbonyl, haloC₁-C₄alkoxycarbonyl, C₁-C₄alkoxyC₁-C₄alkyl hoặc C₁-C₄alkylthioC₁-C₄alkyl;

R₂ được chọn từ H, halogen, xyano, nitro, amino, carboxyl, CHO, C₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkoxy hoặc haloC₁-C₄alkoxy;

R₁, R₂ và vòng pyrimidin liên kết của chúng cũng có thể tạo thành vòng có 5 cạnh hoặc vòng có 6 cạnh chứa nguyên tử cacbon, nguyên tử nitơ, nguyên tử oxy hoặc nguyên tử lưu huỳnh;

X được chọn từ NR₃, O hoặc S;

R₃ được chọn từ H, OH, CHO, C₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkoxy, haloC₁-C₄alkoxy, C₃-C₄cycloalkyl, C₁-C₄alkylthio, C₂-C₄alkenylthio, C₂-C₄alkenyl, C₂-C₄alkynyl, haloC₂-C₄alkenyl, haloC₂-C₄alkynyl, C₁-C₄alkoxyC₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkoxyC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkylthioC₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkylthioC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkylsulfinyl, haloC₁-C₄alkylsulfinyl, C₁-C₄alkylsulfonyl, haloC₁-C₄alkylsulfonyl, C₁-C₄alkylaminosulfonyl, di(C₁-C₄alkyl)aminosulfonyl, C₁-C₄alkylsulfonylaminocarbonyl, C₁-C₄alkylcarbonylaminosulfonyl, C₃-C₄cycloalkyloxycarbonyl, C₁-C₄alkylcarbonyl, haloC₁-C₄alkylcarbonyl,

C₁-C₄alkoxycarbonyl, haloC₁-C₄alkoxycarbonyl, C₁-C₄alkylcarbonylC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkoxycarbonylC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkylaminocarbonyl, di(C₁-C₄alkyl)aminocarbonyl, C₂-C₄alkenoxycarbonyl, C₂-C₄alkynoxycarbonyl, C₁-C₄alkoxyC₁-C₄alkoxycarbonyl, C₁-C₄alkylaminothio, di(C₁-C₄alkyl)aminothio, các nhóm (hetero)arylcarbonylC₁-C₄alkyl, (hetero)arylcarbonyl, (hetero)aryloxycarbonyl, (hetero)arylC₁-C₄alkyloxycarbonyl hoặc (hetero)arylC₁-C₄alkyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm sau: halogen, nitro, xyano, C₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkoxy hoặc haloC₁-C₄alkoxy;

R₄, R₅ có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, halogen, C₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkoxy hoặc haloC₁-C₄alkoxy; hoặc R₄, R₅ và nguyên tử cacbon liên kết của chúng cũng có thể tạo thành vòng có 3 hoặc 4 nguyên tử cacbon;

R₆, R₇ có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, halogen, C₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkoxy hoặc haloC₁-C₄alkoxy; hoặc R₆, R₇ và nguyên tử cacbon liên kết của chúng cũng có thể tạo thành vòng có 3 hoặc 4 nguyên tử cacbon;

m là số nguyên được chọn từ 0 đến 3;

R₈ được chọn từ H, xyano, halogen, C₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkoxycarbonyl, haloC₁-C₄alkoxycarbonyl, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmethyl, (hetero)arylcarbonyl, (hetero)arylmethylcarbonyl hoặc (hetero)aryloxycarbonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R₁₁;

R₉ được chọn từ H, xyano, halogen, C₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkoxycarbonyl, haloC₁-C₄alkoxycarbonyl, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmethyl, (hetero)arylcarbonyl, (hetero)arylmethylcarbonyl hoặc (hetero)aryloxycarbonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R₁₁;

R₁₀ được chọn từ C₁-C₄alkyl, C₃-C₄cycloalkyl, haloC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkylcarbonyl, haloC₁-C₄alkylcarbonyl, C₁-C₄alkylsulfonyl, haloC₁-C₄alkylsulfonyl, C₁-C₄alkoxycarbonyl, C₁-C₄alkoxyC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkoxycarbonylC₁-C₄alkyl, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmethyl, (hetero)arylcarbonyl, (hetero)arylmethylcarbonyl hoặc (hetero)aryloxycarbonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R₁₁;

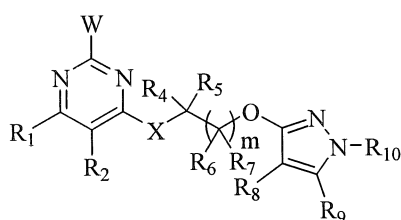
R₁₁ được chọn từ halogen, OH, amino, xyano, nitro, C₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkoxy, haloC₁-C₄alkoxy, C₃-C₄cycloalkyl, C₁-C₄alkylamino,

haloC₁-C₄alkylamino, di(C₁-C₄alkyl)amino, halodi(C₁-C₄alkyl)amino, C(=O)NR₁₂R₁₃, C₁-C₄alkylthio, haloC₁-C₄alkylthio, C₂-C₄alkenyl, C₂-C₄alkynyl, C₂-C₄alkenoxy, haloC₂-C₄alkenoxy, C₂-C₄alkynoxy, haloC₂-C₄alkynoxy, C₁-C₄alkylsulfonyl, haloC₁-C₄alkylsulfonyl, C₁-C₄alkylcacybonyl, haloC₁-C₄alkylcacybonyl, C₁-C₄alkoxycacybonyl, haloC₁-C₄alkoxycacybonyl, C₁-C₄alkoxyC₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkoxyC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkylthioC₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkylthioC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkoxycacybonylC₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkoxycacybonylC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkylthiocacybonylC₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkylthiocacybonylC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkylcacybonyloxy, haloC₁-C₄alkylcacybonyloxy, C₁-C₄alkoxycacybonyloxy, haloC₁-C₄alkoxycacybonyloxy, C₁-C₄alkylsulfonyloxy, haloC₁-C₄alkylsulfonyloxy, C₁-C₄alkoxyC₁-C₄alkoxy hoặc haloC₁-C₄alkoxyC₁-C₄alkoxy;

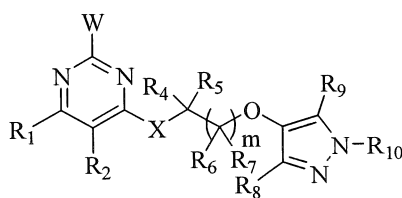
R₁₂, R₁₃ có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, C₁-C₄alkyl hoặc haloC₁-C₄alkyl;

W được chọn từ H, halogen, C₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkyl, C₃-C₄cycloalkyl, C₁-C₄alkoxy, C₁-C₄alkylthio hoặc C₁-C₄alkylsulfonyl;

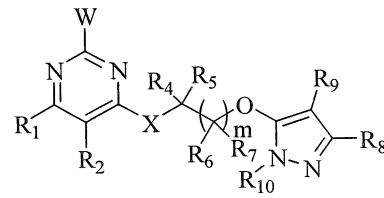
Y là O, vị trí của nhóm Y được liên kết với vòng pyrazol là vị trí 3, vị trí 4 hoặc vị trí 5, khi nhóm Y được liên kết với vị trí 3 của pyrazol, R₈ ở vị trí 4, R₉ ở vị trí 5, công thức chung I là công thức chung I-1; khi nhóm Y được liên kết với vị trí 4 của pyrazol, R₈ ở vị trí 3, R₉ ở vị trí 5, công thức chung I là công thức chung I-2; khi nhóm Y được liên kết với vị trí 5 của pyrazol, R₈ ở vị trí 3, R₉ ở vị trí 4, công thức chung I là công thức chung I-3;



I-1



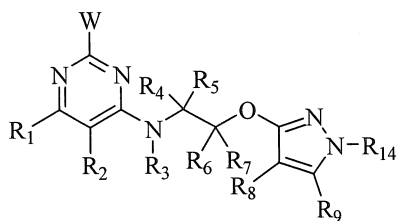
I-2



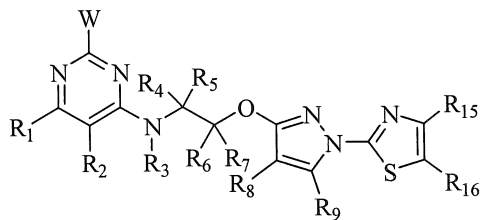
I-3

4. Hợp chất pyrazol được thể chứa pyrimidinyl theo điểm 3, khác biệt ở chỗ, cấu trúc của hợp chất có công thức chung I-1 được thể hiện bằng công thức chung I-1A, I-1B, I-1C, I-1D, I-1E, I-1F, I-1G, I-1H, I-1I, I-1J, I-1K, I-1L, I-1M, I-1N, I-4C, I-4F hoặc I-4G; cấu trúc của hợp chất có công thức chung I-2 được thể hiện bằng công thức chung I-2A, I-2B,

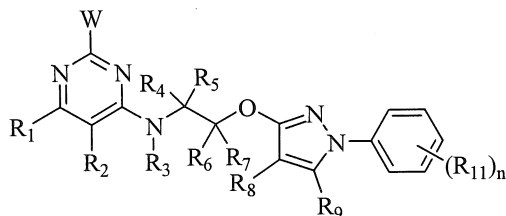
I-2C, I-2D, I-2E, I-2F, I-2G; cấu trúc của hợp chất có công thức chung I-3 được thể hiện bằng công thức chung I-3A, I-3B, I-3C, I-3D, I-3E, I-3F hoặc I-3G:



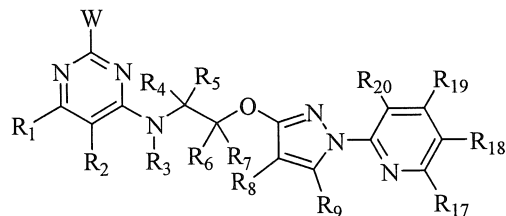
I-1A



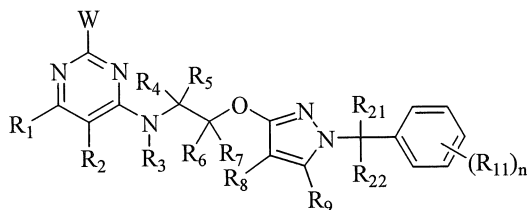
I-1B



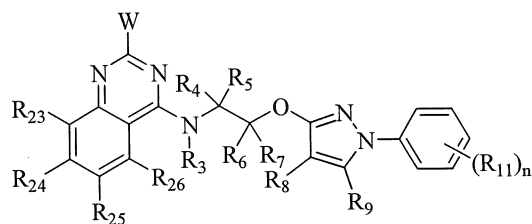
I-1C



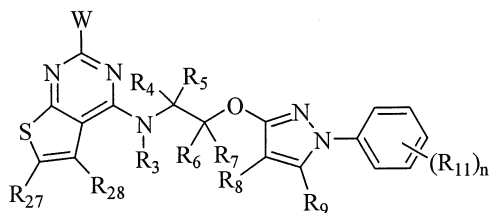
I-1D



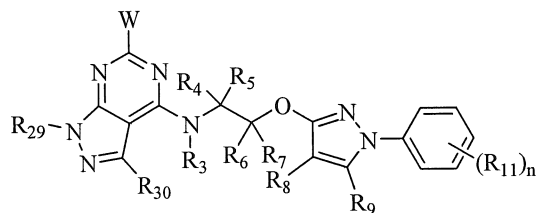
I-1E



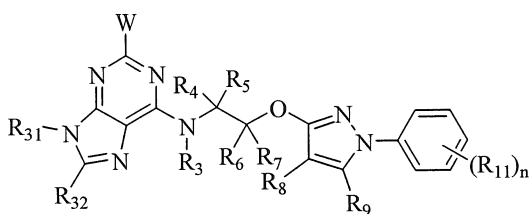
I-1F



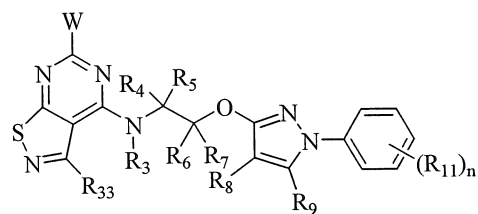
I-1G



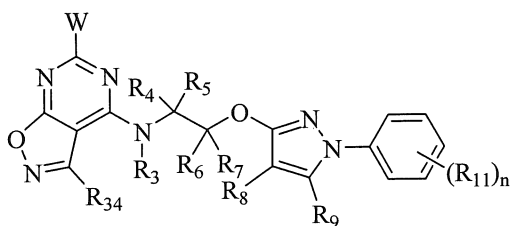
I-1H



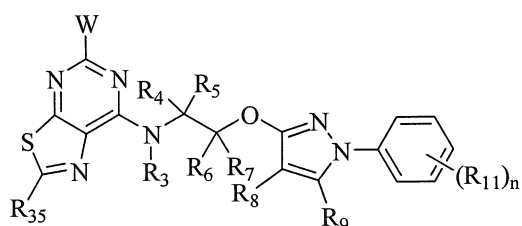
I-1I



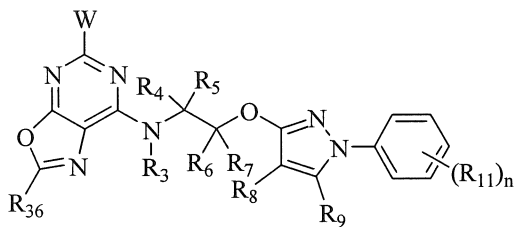
I-1J



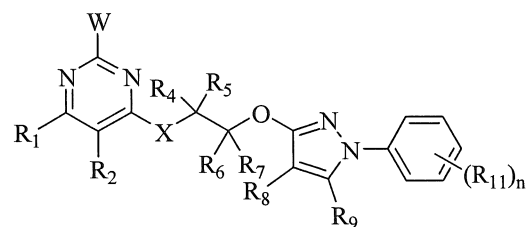
I-1K



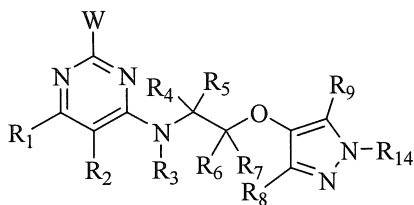
I-1L



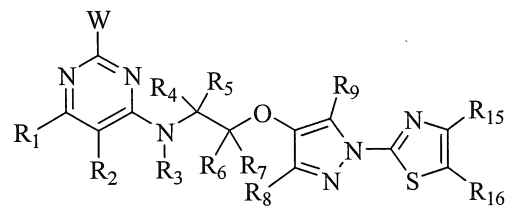
I-1M



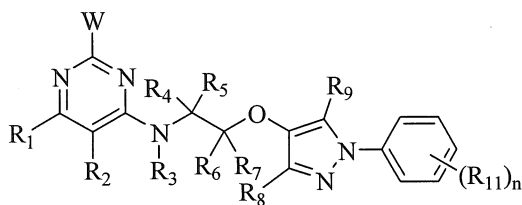
I-1N (X=O or S)



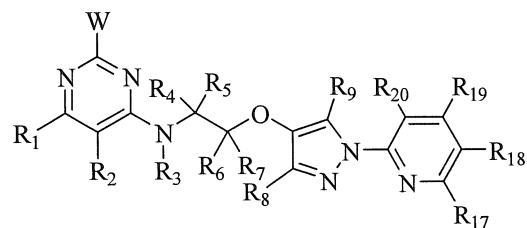
I-2A



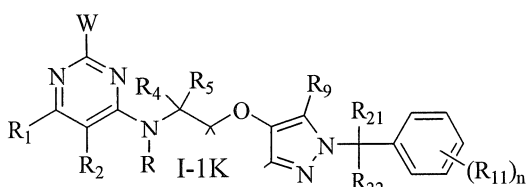
I-1N (X = O hoặc S)



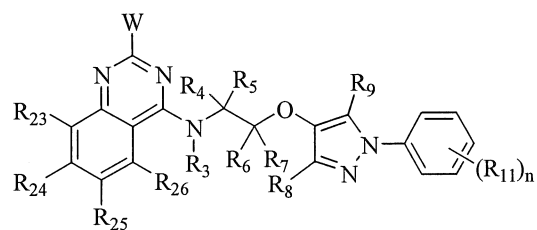
I-2C



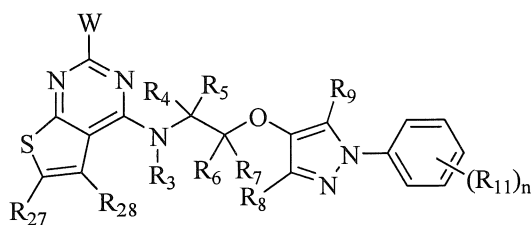
I-2D



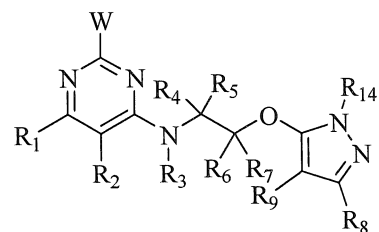
I-2E



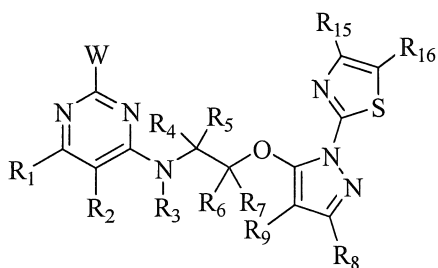
I-2F



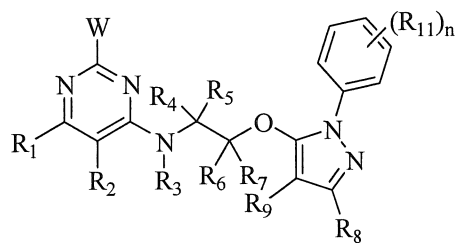
I-2G



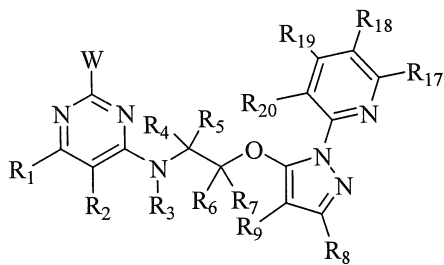
I-3A



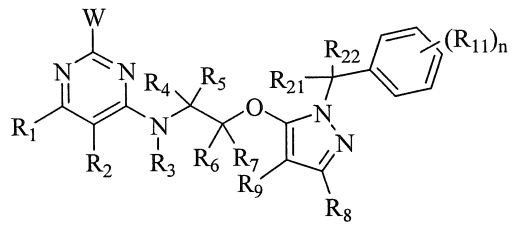
I-3B



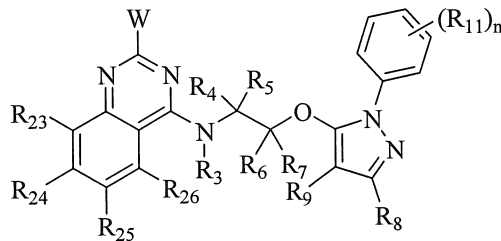
I-3C



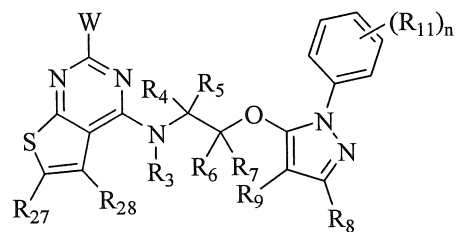
I-3D



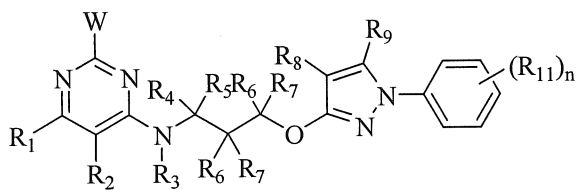
I-3E



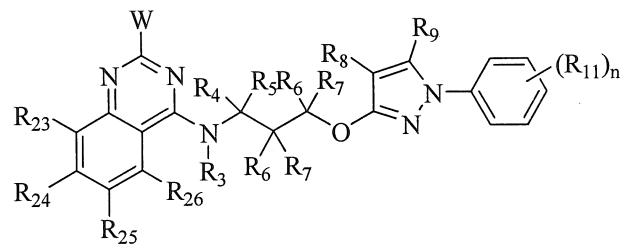
I-3F



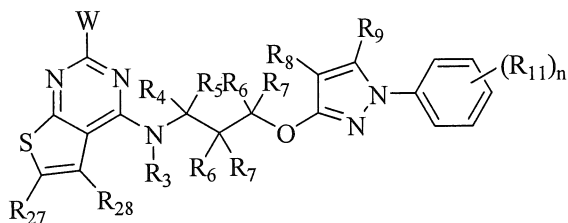
I-3G



I-4C



I-4F



I-4G

trong đó:

R₁ được chọn từ H, halogen, xyano, nitro, amino, carboxyl, C₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkyl, C₃-C₄xycloalkyl, C₁-C₄alkoxy, haloC₁-C₄alkoxy, C₁-C₄alkylthio, haloC₁-C₄alkylthio, C₁-C₄alkylsulfinyl, C₁-C₄alkylsulfonyl, C₂-C₄alkenyl, haloC₂-C₄alkenyl, C₂-C₄alkynyl, haloC₂-C₄alkynyl, C₃-C₄alkenoxy, haloC₃-C₄alkenoxy, C₃-C₄alkynoxy, haloC₃-C₄alkynoxy, C₁-C₄alkylamino, di(C₁-C₄alkyl)amino, C₁-C₄alkylaminocarbonyl, haloC₁-C₄alkylaminocarbonyl, C₁-C₄alkoxycarbonyl, haloC₁-C₄alkoxycarbonyl, C₁-C₄alkoxyC₁-C₄alkyl hoặc C₁-C₄alkylthioC₁-C₄alkyl;

R₂ được chọn từ H, halogen, xyano, nitro, amino, carboxyl, CHO, C₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkoxy hoặc haloC₁-C₄alkoxy;

R_3 được chọn từ H, OH, CHO, C_1 - C_4 alkyl, halo C_1 - C_4 alkyl, C_1 - C_4 alkoxy, halo C_1 - C_4 alkoxy, C_3 - C_4 xycloalkyl, C_1 - C_4 alkylthio, C_2 - C_4 alkenylthio, C_2 - C_4 alkenyl, C_2 - C_4 alkynyl, halo C_2 - C_4 alkenyl, halo C_2 - C_4 alkynyl, C_1 - C_4 alkoxy C_1 - C_4 alkyl, halo C_1 - C_4 alkoxy C_1 - C_4 alkyl, C_1 - C_4 alkylthio C_1 - C_4 alkyl, halo C_1 - C_4 alkylthio C_1 - C_4 alkyl, C_1 - C_4 alkylsulfinyl, halo C_1 - C_4 alkylsulfinyl, C_1 - C_4 alkylsulfonyl, halo C_1 - C_4 alkylsulfonyl, C_1 - C_4 alkylaminosulfonyl, di(C_1 - C_4 alkyl)aminosulfonyl, C_1 - C_4 alkylsulfonylaminocarbonyl, C_1 - C_4 alkylcarbonylaminosulfonyl, C_3 - C_4 xycloalkyloxycarbonyl, C_1 - C_4 alkylcarbonyl, halo C_1 - C_4 alkylcarbonyl, C_1 - C_4 alkoxycarbonyl, halo C_1 - C_4 alkoxycarbonyl, C_1 - C_4 alkylcarbonyl C_1 - C_4 alkyl, C_1 - C_4 alkoxycarbonyl C_1 - C_4 alkyl, C_1 - C_4 alkylaminocarbonyl, di(C_1 - C_4 alkyl)aminocarbonyl, C_2 - C_4 alkenoxycarbonyl, C_2 - C_4 alkynoxycarbonyl, C_1 - C_4 alkoxy C_1 - C_4 alkoxycarbonyl, C_1 - C_4 alkylaminothio, di(C_1 - C_4 alkyl)aminothio, các nhóm (hetero)arylcarbonyl C_1 - C_4 alkyl, (hetero)arylcarbonyl, (hetero)aryloxycarbonyl, (hetero)aryl C_1 - C_4 alkyloxycarbonyl hoặc (hetero)aryl C_1 - C_4 alkyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm sau: halogen, nitro, xyano, C_1 - C_4 alkyl, halo C_1 - C_4 alkyl, C_1 - C_4 alkoxy hoặc halo C_1 - C_4 alkoxy;

R_4 , R_5 có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, halogen, C_1 - C_4 alkyl, halo C_1 - C_4 alkyl, C_1 - C_4 alkoxy hoặc halo C_1 - C_4 alkoxy; hoặc R_4 , R_5 và nguyên tử cacbon liên kết của chúng cũng có thể tạo thành vòng có 3 hoặc 4 nguyên tử cacbon;

R_6 , R_7 có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, halogen, C_1 - C_4 alkyl, halo C_1 - C_4 alkyl, C_1 - C_4 alkoxy hoặc halo C_1 - C_4 alkoxy; hoặc R_6 , R_7 và nguyên tử cacbon liên kết của chúng cũng có thể tạo thành vòng có 3 hoặc 4 nguyên tử cacbon;

R_8 được chọn từ H, xyano, halogen, C_1 - C_4 alkyl, halo C_1 - C_4 alkyl, C_1 - C_4 alkoxycarbonyl, halo C_1 - C_4 alkoxycarbonyl, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmetyl, (hetero)arylcarbonyl, (hetero)arylmethylcarbonyl hoặc (hetero)aryloxycarbonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

R_9 được chọn từ H, xyano, halogen, C_1 - C_4 alkyl, halo C_1 - C_4 alkyl, C_1 - C_4 alkoxycarbonyl, halo C_1 - C_4 alkoxycarbonyl, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmetyl, (hetero)arylcarbonyl, (hetero)arylmethylcarbonyl hoặc (hetero)aryloxycarbonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

R_{11} được chọn từ halogen, OH, amino, xyano, nitro, C_1 - C_4 alkyl, halo C_1 - C_4 alkyl,

C₁-C₄alkoxy, haloC₁-C₄alkoxy, C₃-C₄cycloalkyl, C₁-C₄alkylamino, haloC₁-C₄alkylamino, di(C₁-C₄alkyl)amino, halo(C₁-C₄alkyl)amino, C(=O)NR₁₂R₁₃, C₁-C₄alkylthio, haloC₁-C₄alkylthio, C₂-C₄alkenyl, C₂-C₄alkynyl, C₂-C₄alkenoxy, haloC₂-C₄alkenoxy, C₂-C₄alkynoxy, haloC₂-C₄alkynoxy, C₁-C₄alkylsulfonyl, haloC₁-C₄alkylsulfonyl, C₁-C₄alkylcacybonyl, haloC₁-C₄alkylcacybonyl, C₁-C₄alkoxycacybonyl, haloC₁-C₄alkoxycacybonyl, C₁-C₄alkoxyC₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkoxyC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkylthioC₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkylthioC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkoxycacybonylC₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkoxycacybonylC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkylthiocacybonylC₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkylthiocacybonylC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkylcacybonyloxy, haloC₁-C₄alkylcacybonyloxy, C₁-C₄alkoxycacybonyloxy, haloC₁-C₄alkoxycacybonyloxy, C₁-C₄alkylsulfonyloxy, haloC₁-C₄alkylsulfonyloxy, C₁-C₄alkoxyC₁-C₄alkoxy hoặc haloC₁-C₄alkoxyC₁-C₄alkoxy;

n là số nguyên được chọn từ 0 đến 5, khi n bằng 0, vòng benzen là phenyl không được thế; khi n lớn hơn 1, R₁₁ có thể giống nhau hoặc khác nhau;

R₁₂, R₁₃ có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, C₁-C₄alkyl hoặc haloC₁-C₄alkyl;

R₁₄ được chọn từ C₁-C₄alkyl, C₃-C₄cycloalkyl, haloC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkylcacybonyl, haloC₁-C₄alkylcacybonyl, C₁-C₄alkylsulfonyl, haloC₁-C₄alkylsulfonyl, C₁-C₄alkoxycacybonyl, C₁-C₄alkoxyC₁-C₄alkyl hoặc C₁-C₄alkoxycacybonylC₁-C₄alkyl;

R₁₅, R₁₆ có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, halogen, amino, xyano, nitro, C₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkoxy, haloC₁-C₄alkoxy, C₁-C₄alkylthio, haloC₁-C₄alkylthio, C₃-C₄cycloalkyl, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmetyl, (hetero)arylcacybonyl, (hetero)arylmetylcacybonyl hoặc (hetero)aryloxycacybonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R₁₁;

R₁₇, R₁₈, R₁₉, R₂₀ có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, halogen, xyano, nitro, C₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkoxy hoặc haloC₁-C₄alkoxy;

R₂₁, R₂₂ có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, halogen, OH, xyano, nitro, C₁-C₄alkyl, haloC₁-C₄alkyl, C₁-C₄alkoxy, haloC₁-C₄alkoxy, C₁-C₄alkylthio, haloC₁-C₄alkylthio, C₃-C₄cycloalkyl, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmetyl, (hetero)arylcacybonyl, (hetero)arylmetylcacybonyl hoặc

(hetero)aryloxyacetyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

R_{23} , R_{24} , R_{25} , R_{26} có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, halogen, OH, amino, xiano, nitro, C_1 - C_4 alkyl, halo C_1 - C_4 alkyl, C_1 - C_4 alkoxy, halo C_1 - C_4 alkoxy hoặc C_3 - C_4 cycloalkyl;

R_{27} , R_{28} có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, halogen, C_1 - C_4 alkyl, halo C_1 - C_4 alkyl, C_1 - C_4 alkoxy, halo C_1 - C_4 alkoxy, C_1 - C_4 alkylthio, halo C_1 - C_4 alkylthio, C_3 - C_4 cycloalkyl, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmethyl, (hetero)arylacetyl, (hetero)arylmethylacetyl hoặc (hetero)aryloxyacetyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

R_{29} được chọn từ C_1 - C_4 alkyl, halo C_1 - C_4 alkyl, C_3 - C_4 cycloalkyl, C_1 - C_4 alkylsulfonyl, halo C_1 - C_4 alkylsulfonyl, C_1 - C_4 alkylacetyl, halo C_1 - C_4 alkylacetyl, C_1 - C_4 alkoxyacetyl, halo C_1 - C_4 alkoxyacetyl, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmethyl, (hetero)arylacetyl, (hetero)arylmethylacetyl hoặc (hetero)aryloxyacetyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

R_{30} được chọn từ H, xiano, halogen, C_1 - C_4 alkyl, halo C_1 - C_4 alkyl, C_1 - C_4 alkoxyacetyl, halo C_1 - C_4 alkoxyacetyl, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmethyl, (hetero)arylacetyl, (hetero)arylmethylacetyl hoặc (hetero)aryloxyacetyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

R_{31} được chọn từ C_1 - C_4 alkyl, halo C_1 - C_4 alkyl, C_3 - C_4 cycloalkyl, C_1 - C_4 alkylsulfonyl, halo C_1 - C_4 alkylsulfonyl, C_1 - C_4 alkylacetyl, halo C_1 - C_4 alkylacetyl, C_1 - C_4 alkoxyacetyl, halo C_1 - C_4 alkoxyacetyl, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmethyl, (hetero)arylacetyl, (hetero)arylmethylacetyl hoặc (hetero)aryloxyacetyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

R_{32} được chọn từ H, xiano, halogen, C_1 - C_4 alkyl, halo C_1 - C_4 alkyl, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmethyl, (hetero)arylacetyl, (hetero)arylmethylacetyl hoặc (hetero)aryloxyacetyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

R_{33} , R_{34} có thể được chọn tương ứng từ C_1 - C_4 alkyl, halo C_1 - C_4 alkyl, C_3 - C_4 cycloalkyl, C_1 - C_4 alkylacetyl, halo C_1 - C_4 alkylacetyl, C_1 - C_4 alkoxyacetyl, halo C_1 - C_4 alkoxyacetyl, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmethyl, (hetero)arylacetyl, (hetero)arylmethylacetyl hoặc (hetero)aryloxyacetyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

R_{35} , R_{36} có thể được chọn tương ứng từ H, xyano, halogen, C_1 - C_4 alkyl, halo C_1 - C_4 alkyl, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmetyl, (hetero)arylcacbonyl, (hetero)arylmetylcacbonyl hoặc (hetero)aryloxycacbonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

W được chọn từ H, halogen, C_1 - C_4 alkyl, halo C_1 - C_4 alkyl, C_3 - C_4 xycloalkyl, C_1 - C_4 alkoxy, halo C_1 - C_4 alkoxy hoặc C_1 - C_4 alkylsulfonyl;

các muối có công thức chung I là các muối được tạo ra từ các hợp chất có công thức chung I-1A, I-1B, I-1C, I-1D, I-1E, I-1F, I-1G, I-1H, I-1I, I-1J, I-1K, I-1L, I-1M, I-1N, I-2A, I-2B, I-2C, I-2D, I-2E, I-2F, I-2G, I-3A, I-3B, I-3C, I-3D, I-3E, I-3F, I-3G, I-4C, I-4F hoặc I-4G với axit clohydric, axit sulfuric, axit phosphoric, axit formic, axit axetic, axit trifloaxetic, axit oxalic, axit metylsulfonic, axit *p*-toluensulfonic, axit benzoic, axit alizaric, axit maleic, axit fumaric, axit sorbic, axit malic hoặc axit xitric.

5. Hợp chất pyrazol được thế chứa pyrimidinyl theo điểm 4, khác biệt ở chỗ, trong công thức chung I-1A, I-1B, I-1C, I-1D, I-1E, I-1F, I-1G, I-1H, I-1I, I-1J, I-1K, I-1L, I-1M, I-1N, I-2A, I-2B, I-2C, I-2D, I-2E, I-2F, I-2G, I-3A, I-3B, I-3C, I-3D, I-3E, I-3F, I-3G, I-4C, I-4F hoặc I-4G:

trong đó:

R_1 được chọn từ H, F, Cl, Br, I, CN, NO_2 , NH_2 , carboxyl, CH_3 , C_2H_5 , *n*- C_3H_7 , *i*- C_3H_7 , *n*- C_4H_9 , *s*- C_4H_9 , *i*- C_4H_9 , *t*- C_4H_9 , CH_2F , CH_2Cl , CHF_2 , CF_3 , CH_2CF_3 , CH_2OCH_3 , $CH_2OCH_2CH_3$ hoặc $CH_2OCH_2CF_3$;

R_2 được chọn từ H, F, Cl, Br, I, CN, NO_2 , NH_2 , carboxyl, CHO, CH_3 , C_2H_5 , OCH_3 , OC_2H_5 hoặc OCH_2CF_3 ;

R_3 được chọn từ H, OH, CHO, $COCH_3$, COC_2H_5 , COC_3H_7 , $COCF_3$, $COPh$, CH_3 , C_2H_5 , *n*- C_3H_7 , *i*- C_3H_7 , *n*- C_4H_9 , *s*- C_4H_9 , *i*- C_4H_9 , *t*- C_4H_9 , CF_3 , CH_2CF_3 , OCH_3 , OC_2H_5 , OCH_2CF_3 , , SCH_3 , SC_2H_5 , $CH_2CH=CH_2$, $CH_2C\equiv CH$, SO_2CH_3 , $SO_2CH_2CH_3$, $SO_2CH_2CF_3$, SO_2NHCH_3 , $SO_2NHC_2H_5$, $SO_2N(CH_3)_2$, $SO_2N(C_2H_5)_2$, $CONHSO_2CH_3$, $COOCH_3$, $COOC_2H_5$, $COOC_3H_7$ -*n*, $COOC_3H_7$ -*i*, $CONHCH_3$, $CON(CH_3)_2$, $COOCH=CH_2$, $COOC\equiv CH$, $SNHCH_3$, $SNHC_2H_5$ hoặc $SN(CH_3)_2$;

R_4 , R_5 có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, F, Cl, Br, I,

CH₃, C₂H₅, n-C₃H₇, i-C₃H₇, n-C₄H₉, s-C₄H₉, i-C₄H₉, t-C₄H₉, OCH₃, OC₂H₅, n-C₃H₇O, i-C₃H₇O, n-C₄H₉O, s-C₄H₉O, i-C₄H₉O hoặc t-C₄H₉O;

R₆, R₇ có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, F, Cl, Br, I, CH₃, C₂H₅, n-C₃H₇, i-C₃H₇, n-C₄H₉, s-C₄H₉, i-C₄H₉, t-C₄H₉, OCH₃, OC₂H₅, n-C₃H₇O, i-C₃H₇O, n-C₄H₉O, s-C₄H₉O, i-C₄H₉O hoặc t-C₄H₉O;

R₈ được chọn từ H, CN, F, Cl, Br, I, CH₃, C₂H₅ hoặc CF₃;

R₉ được chọn từ H, CN, F, Cl, Br, I, CH₃, C₂H₅ hoặc CF₃;

R₁₁ được chọn từ F, Cl, Br, I, CN, NH₂, NO₂, CH₃, C₂H₅, n-C₃H₇, i-C₃H₇, n-C₄H₉, s-C₄H₉, i-C₄H₉, t-C₄H₉, CF₃, CCl₃, CF₂Cl, CFCl₂, OCH₃, OCH₂CH₃, n-C₃H₇O, i-C₃H₇O, n-C₄H₉O, s-C₄H₉O, i-C₄H₉O, t-C₄H₉O, OCF₃, OCH₂CF₃, COOCH₃, COOC₂H₅, CONH₂, CONHCH₃, CONHC₂H₅ hoặc CON(CH₃)₂;

n là số nguyên được chọn từ 0 đến 5, khi n bằng 0, vòng benzen là phenyl không được thế; khi n lớn hơn 1, R₁₁ có thể giống nhau hoặc khác nhau;

R₁₄ được chọn từ CH₃, C₂H₅, n-C₃H₇, i-C₃H₇, n-C₄H₉, s-C₄H₉, i-C₄H₉, t-C₄H₉, xyclopropyl, xyclobutyl, CH₂F, CH₂Cl, CHF₂, CF₃ hoặc CH₂CF₃;

R₁₅, R₁₆ có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, F, Cl, Br, I, NH₂, CN, NO₂, CH₃, C₂H₅, n-C₃H₇, i-C₃H₇, n-C₄H₉, s-C₄H₉, i-C₄H₉, t-C₄H₉, CF₃, CCl₃, CF₂Cl, CFCl₂, CH₂CF₃, OCH₃, OCH₂CH₃, n-C₃H₇O, i-C₃H₇O, n-C₄H₉O, s-C₄H₉O, i-C₄H₉O, t-C₄H₉O, OCF₃, OCH₂CF₃, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmetyl, (hetero)arylcacbonyl, (hetero)arylmetylcacbonyl hoặc (hetero)aryloxycacbonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R₁₁;

R₁₇, R₁₈, R₁₉, R₂₀ có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, F, Cl, Br, I, CN, NO₂, CH₃, CF₃, OCH₃ hoặc OCF₃;

R₂₁, R₂₂ có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, F, Cl, Br, I, OH, CN, NO₂, CH₃, C₂H₅, n-C₃H₇, i-C₃H₇, n-C₄H₉, s-C₄H₉, i-C₄H₉, t-C₄H₉, CF₃, CCl₃, CF₂Cl, CFCl₂, CH₂CF₃, OCH₃, OCH₂CH₃, n-C₃H₇O, i-C₃H₇O, n-C₄H₉O, s-C₄H₉O, i-C₄H₉O, t-C₄H₉O, OCF₃, OCH₂CF₃, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmetyl, (hetero)arylcacbonyl, (hetero)arylmetylcacbonyl hoặc (hetero)aryloxycacbonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R₁₁;

R₂₃, R₂₄, R₂₅, R₂₆ có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, F, Cl, Br, I, NH₂, CN, NO₂, CH₃, C₂H₅, n-C₃H₇, i-C₃H₇, n-C₄H₉, s-C₄H₉, i-C₄H₉, t-C₄H₉,

CF₃, CCl₃, CF₂Cl, CFCl₂, OCH₃, OCH₂CH₃, n-C₃H₇O, i-C₃H₇O, n-C₄H₉O, s-C₄H₉O, i-C₄H₉O, t-C₄H₉O, OCF₃ hoặc OCH₂CF₃;

R₂₇, R₂₈ có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, F, Cl, Br, I, CH₃, C₂H₅, n-C₃H₇, i-C₃H₇, n-C₄H₉, s-C₄H₉, i-C₄H₉, t-C₄H₉, CF₃, CCl₃, CF₂Cl, CFCl₂, CH₂CF₃, OCH₃, OCH₂CH₃, n-C₃H₇O, i-C₃H₇O, n-C₄H₉O, s-C₄H₉O, i-C₄H₉O, t-C₄H₉O, OCF₃, OCH₂CF₃, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmetyl, (hetero)arylcacbonyl, (hetero)arylmetylcacbonyl hoặc (hetero)aryloxyacarbonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R₁₁;

R₂₉ được chọn từ CH₃, C₂H₅, n-C₃H₇, i-C₃H₇, n-C₄H₉, s-C₄H₉, i-C₄H₉, t-C₄H₉, CF₃, CCl₃, CF₂Cl, CFCl₂, xyclopropyl, SO₂CH₃, SO₂CH₂CH₃, COCH₃, COC₂H₅, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmetyl, (hetero)arylcacbonyl, (hetero)arylmetylcacbonyl hoặc (hetero)aryloxyacarbonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R₁₁;

R₃₀ được chọn từ H, CN, F, Cl, Br, I, CH₃, C₂H₅, n-C₃H₇, i-C₃H₇, n-C₄H₉, s-C₄H₉, i-C₄H₉, t-C₄H₉, CF₃, CCl₃, CF₂Cl, CFCl₂, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmetyl, (hetero)arylcacbonyl, (hetero)arylmetylcacbonyl hoặc (hetero)aryloxyacarbonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R₁₁;

R₃₁ được chọn từ CH₃, C₂H₅, n-C₃H₇, i-C₃H₇, n-C₄H₉, s-C₄H₉, i-C₄H₉, t-C₄H₉, CF₃, CCl₃, CF₂Cl, CFCl₂, xyclopropyl, SO₂CH₃, SO₂CH₂CH₃, COCH₃, COC₂H₅, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmetyl, (hetero)arylcacbonyl, (hetero)arylmetylcacbonyl hoặc (hetero)aryloxyacarbonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R₁₁;

R₃₂ được chọn từ H, CN, F, Cl, Br, I, CH₃, C₂H₅, n-C₃H₇, i-C₃H₇, n-C₄H₉, s-C₄H₉, i-C₄H₉, t-C₄H₉, CF₃, CCl₃, CF₂Cl, CFCl₂, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmetyl, (hetero)arylcacbonyl, (hetero)arylmetylcacbonyl hoặc (hetero)aryloxyacarbonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R₁₁;

R₃₃, R₃₄ có thể được chọn tương ứng từ CH₃, C₂H₅, n-C₃H₇, i-C₃H₇, n-C₄H₉, s-C₄H₉, i-C₄H₉, t-C₄H₉, CF₃, CCl₃, CF₂Cl, CFCl₂, xyclopropyl, COCH₃, COC₂H₅, COOCH₃, COOC₂H₅, COOCH₂CF₃, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmetyl, (hetero)arylcacbonyl, (hetero)arylmetylcacbonyl hoặc (hetero)aryloxyacarbonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R₁₁;

R_{35} , R_{36} có thể được chọn tương ứng từ H, CN, F, Cl, Br, I, CH_3 , C_2H_5 , $n-C_3H_7$, $i-C_3H_7$, $n-C_4H_9$, $s-C_4H_9$, $i-C_4H_9$, $t-C_4H_9$, CF_3 , CCl_3 , CF_2Cl , $CFCl_2$, các nhóm (hetero)aryl, (hetero)arylmetyl, (hetero)arylcacbonyl, (hetero)arylmetylcacbonyl hoặc (hetero)aryloxyacarbonyl không được thế hoặc được thế tiếp bằng từ 1 đến 5 nhóm R_{11} ;

W được chọn từ H, F, Cl, Br, I, CH_3 , C_2H_5 , $n-C_3H_7$, $i-C_3H_7$, $n-C_4H_9$, $s-C_4H_9$, $i-C_4H_9$, $t-C_4H_9$, CH_2F , CH_2Cl , CHF_2 , CF_3 , CH_2CF_3 , OCH_3 , OC_2H_5 , SCH_3 , SC_2H_5 , SO_2CH_3 hoặc $SO_2CH_2CH_3$;

các muối có công thức chung I là các muối được tạo ra từ các hợp chất có công thức chung I-1A, I-1B, I-1C, I-1D, I-1E, I-1F, I-1G, I-1H, I-1I, I-1J, I-1K, I-1L, I-1M, I-1N, I-2A, I-2B, I-2C, I-2D, I-2E, I-2F, I-2G, I-3A, I-3B, I-3C, I-3D, I-3E, I-3F, I-3G, I-4C, I-4F hoặc I-4G với axit clohydric, axit sulfuric, axit phosphoric, axit formic, axit axetic, axit trifloaxetic, axit oxalic, axit metylsulfonic, axit *p*-toluensulfonic, axit benzoic, axit alizaric, axit maleic, axit fumaric, axit sorbic, axit malic hoặc axit xitric.

6. Hợp chất pyrazol được thế chứa pyrimidinyl theo điểm 5, khác biệt ở chỗ, trong công thức chung I-1C, I-1F, I-1G, I-2C, I-2F, I-2G, I-4C, I-4F hoặc I-4G:

R_1 được chọn từ H, F, Cl, Br, I, CH_3 , C_2H_5 hoặc CHF_2 ;

R_2 được chọn từ H, F, Cl, Br, I, NO_2 , NH_2 , CHO, CH_3 , C_2H_5 , OCH_3 hoặc OC_2H_5 ;

R_3 được chọn từ H, CH_3 , $COCH_3$, $COCF_3$, OCH_3 , SCH_3 , $CH_2CH=CH_2$, SO_2CH_3 , SO_2NHCH_3 , $SO_2N(CH_3)_2$, $COOCH_3$, $CONHCH_3$, $CON(CH_3)_2$, $SNHCH_3$ hoặc $SN(CH_3)_2$;

R_4 , R_5 có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, F, Cl, Br hoặc CH_3 ;

R_6 , R_7 là H;

R_8 là H;

R_9 là H;

R_{11} được chọn từ F, Cl, Br, I, CN, NO_2 , CH_3 , CF_3 , OCH_3 hoặc OCF_3 ;

n là số nguyên được chọn từ 0 đến 5, khi n bằng 0, vòng benzen là phenyl không được thế; khi n lớn hơn 1, R_{11} có thể giống nhau hoặc khác nhau;

R_{23} , R_{24} , R_{25} , R_{26} có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, F, Cl, Br, I hoặc CH_3 ;

R_{27} , R_{28} có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H, F, Cl, Br hoặc I;

W được chọn từ H, F, Cl, Br, I hoặc CH_3 ;

các muối có công thức chung I là các muối được tạo ra từ các hợp chất có công thức chung I-1C, I-1F, I-1G, I-2C, I-2F, I-2G, I-4C, I-4F hoặc I-4G với axit clohydric, axit sulfuric, axit phosphoric, axit formic, axit axetic, axit trifloaxetic, axit oxalic, axit metylsulfonic, axit *p*-toluensulfonic, axit benzoic, axit alizaric, axit maleic, axit fumaric, axit sorbic, axit malic hoặc axit xitric.

7. Hợp chất pyrazol được thể chứa pyrimidinyl theo điểm 5, khác biệt ở chỗ, trong công thức chung I-1C, I-1F, I-1G, I-2C, I-2G, I-4C, I-4F hoặc I-4G:

R_1 được chọn từ F, Cl, Br, I, CH_3 , C_2H_5 hoặc CHF_2 ;

R_2 được chọn từ F, Cl, Br, I, NO_2 , NH_2 , CHO, CH_3 hoặc OCH_3 ;

R_3 được chọn từ H, CH_3 , $COCH_3$, OCH_3 , $CH_2CH=CH_2$, SO_2CH_3 , $COOCH_3$, $CONHCH_3$, $CON(CH_3)_2$ hoặc $SN(CH_3)_2$;

R_4 , R_5 có thể giống nhau hoặc khác nhau, được chọn tương ứng từ H hoặc CH_3 ;

R_6 , R_7 là H;

R_8 là H;

R_9 là H;

R_{11} được chọn từ F, Cl, Br, I, CN, NO_2 , CH_3 , CF_3 , OCH_3 hoặc OCF_3 ;

n là số nguyên được chọn từ 1 đến 5, khi n lớn hơn 1, R_{11} có thể giống nhau hoặc khác nhau;

R_{23} , R_{24} , R_{25} , R_{26} là H;

R_{27} là H;

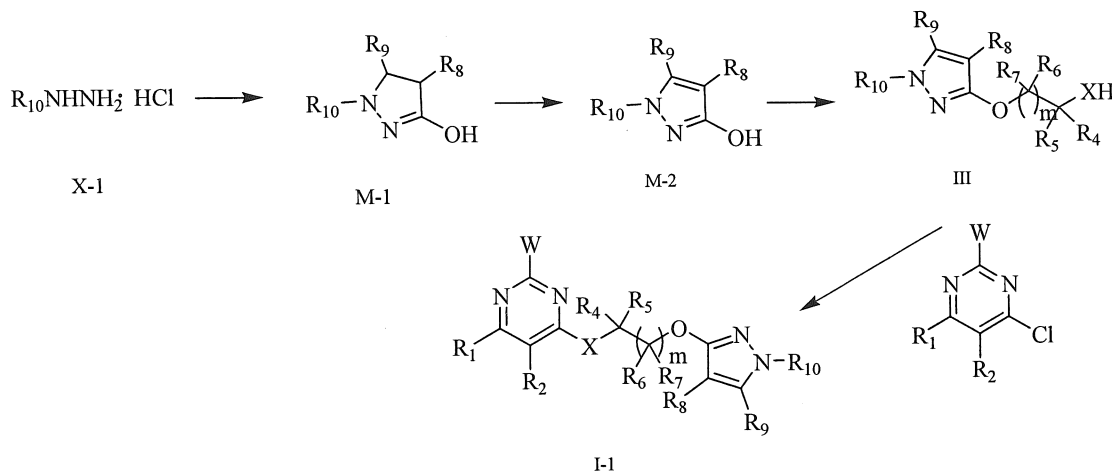
R_{28} là Cl;

W được chọn từ H, F, Cl, Br hoặc I;

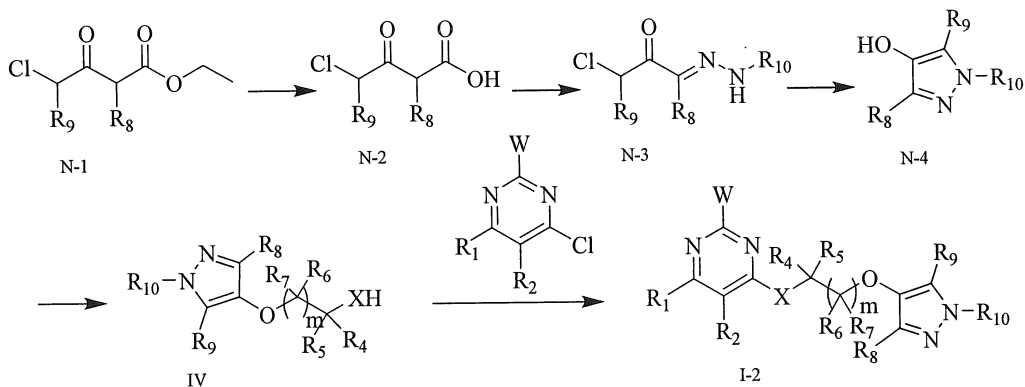
các muối có công thức chung I là các muối được tạo ra từ các hợp chất có công thức chung I-1C, I-1F, I-1G, I-2C, I-2G, I-4C, I-4F hoặc I-4G với axit clohydric, axit sulfuric, axit phosphoric, axit formic, axit axetic, axit trifloaxetic, axit oxalic, axit metylsulfonic, axit *p*-toluensulfonic, axit benzoic, axit alizaric, axit maleic, axit fumaric, axit sorbic, axit malic hoặc axit xitric.

8. Phương pháp điều chế hợp chất pyrazol được thế chứa pyrimidinyl theo điểm 3, khác biệt ở chỗ:

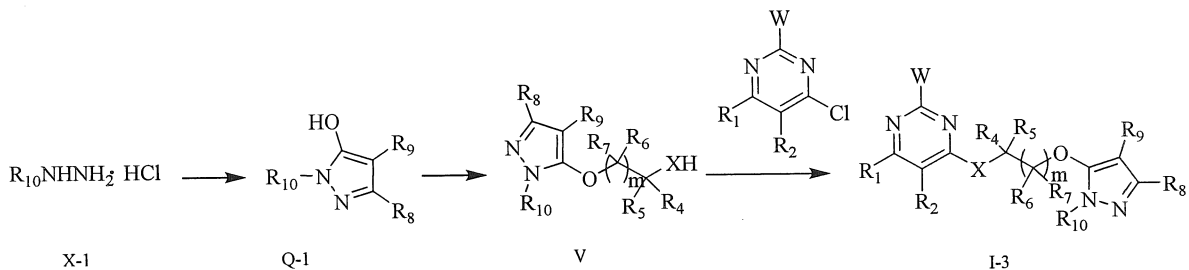
phương pháp điều chế hợp chất có công thức chung I-1 là như sau:



phương pháp điều chế hợp chất có công thức chung I-2 là như sau:



phương pháp điều chế hợp chất có công thức chung I-3 là như sau:



9. Chế phẩm diệt nấm, khác biệt ở chỗ, chế phẩm này chứa hợp chất pyrazol được thế chứa pyrimidinyl có công thức chung I theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 7 làm hoạt chất và chất mang chấp nhận được, và trong đó tỷ lệ % trọng lượng của hoạt chất trong chế phẩm này nằm trong khoảng từ 0,1 đến 99%.

10. Chế phẩm trừ sâu, khác biệt ở chỗ, chế phẩm này chứa hợp chất pyrazol được thế chứa pyrimidinyl có công thức chung I theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 7 làm hoạt chất và chất mang chấp nhận được, và trong đó tỷ lệ % trọng lượng của hoạt chất trong chế phẩm này nằm trong khoảng từ 0,1 đến 99%.

11. Chế phẩm diệt ve bét, khác biệt ở chỗ, chế phẩm này chứa hợp chất pyrazol được thế chứa pyrimidinyl có công thức chung I theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 7 làm hoạt chất và chất mang chấp nhận được, và trong đó tỷ lệ % trọng lượng của hoạt chất trong chế phẩm này nằm trong khoảng từ 0,1 đến 99%.