



(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)



1-0032835

(51)⁸ C07D 215/20; C07D 215/38; C07D 241/42; C07D 241/44; C07F 7/08; C07D 471/04; C07D 487/04; C07D 495/04; C07F 7/07; A01N 55/10; C07D 401/12 (13) B

(21) 1-2018-02171

(22) 28/10/2016

(86) PCT/EP2016/076048 28/10/2016

(87) WO2017/072283 04/05/2017

(30) 15290278.9 29/10/2015 EP

(45) 25/08/2022 413

(43) 27/08/2018 365A

(73) BAYER CROPSCIENCE AKTIENGESELLSCHAFT (DE)

Alfred-Nobel-Strasse 50, 40789 Monheim am Rhein, Germany

(72) DUFOUR, Jérémy (FR); DESBORDES, Philippe (FR); DUBOST, Christophe (FR); GOURGUES, Mathieu (FR); MEISSNER, Ruth (DE); PETTINGER, Andrew (GB); RINOLFI, Philippe (FR); TOQUIN, Valérie (FR); WACHENDORFF-NEUMANN, Ulrike (DE).

(74) Công ty Luật TNHH T&G (TGVN)

(54) HỢP CHẤT DỊ VÒNG SILYLPHENOXY ĐƯỢC THỂ BA LẦN VÀ QUY TRÌNH ĐIỀU CHẾ HỢP CHẤT NÀY

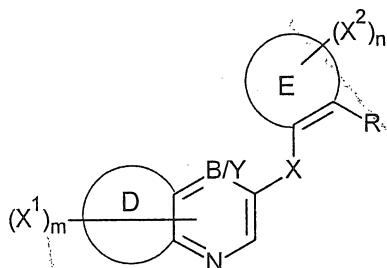
(57) Sáng chế đề cập đến các hợp chất dị vòng silylphenoxy được thể ba lần, quy trình và hợp chất trung gian để điều chế các hợp chất này. Sáng chế cũng đề cập đến chế phẩm phòng trừ vi sinh vật không mong muốn chứa các hợp chất theo sáng chế, đặc biệt là ở dạng chế phẩm diệt nấm. Sáng chế còn đề cập đến phương pháp phòng trừ vi sinh vật không mong muốn gây bệnh ở thực vật bằng cách sử dụng các hợp chất này và chế phẩm chứa chúng.

Lĩnh vực kỹ thuật được đề cập

Sáng chế đề cập đến các hoạt chất diệt nấm, cụ thể hơn là đến các hợp chất dị vòng silylphenoxy được thế ba lần và các chất tương tự của hợp chất này, quy trình và các hợp chất trung gian để điều chế chúng và việc sử dụng chúng làm hoạt chất diệt nấm, cụ thể là ở dạng chế phẩm diệt nấm. Sáng chế cũng đề cập đến phương pháp phòng trừ nấm gây bệnh thực vật bằng cách sử dụng các hợp chất này và chế phẩm chứa chúng.

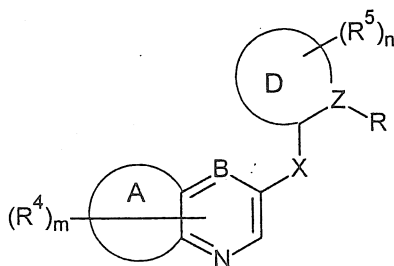
Tình trạng kỹ thuật của sáng chế

Trong đơn sáng chế Nhật số JP-2014/124411 và trong đơn sáng chế Quốc tế international số WO 2013/002205, các phenoxyquinolin nhất định được đề cập một cách tổng quát trong phần mô tả rộng về nhiều hợp chất có công thức sau:



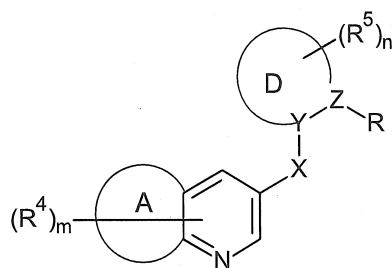
trong đó D và E là vòng 5 đến 7 cạnh, X là O, NH hoặc N-C₁-C₃-alkyl, B (hoặc Y) là C hoặc N, và R, trong số các nhóm khác, là nhóm alkoxy tùy ý được thế, nhóm amino tùy ý được thế, nhóm alkylsulfanyl tùy ý được thế và tùy ý được oxy hóa, hoặc nhóm nitro. Tuy nhiên, JP-2014/124411 và WO2013/002205 không bộc lộ cũng như đề xuất các hợp chất trong đó R là nhóm được silyl hóa được thế.

Trong đơn sáng chế Nhật số JP-2014/166991, các phenoxyquinolin nhất định được đề cập một cách tổng quát trong phần mô tả rộng về nhiều hợp chất có công thức sau:



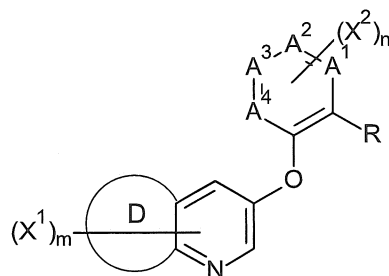
trong đó A là vòng 5 đến 7 cạnh, D là vòng hydrocacbon hoặc dị vòng 5 đến 7 cạnh, X là O, S, NH hoặc N-C₁-C₈-alkyl, Z và B độc lập là C hoặc N, và R, trong số các nhóm khác, là nhóm alkyl tùy ý được thế như nhóm silylalkyl được thế ba lần, nhóm keton tùy ý được thế, nhóm C₆-C₁₀-aryl tùy ý được thế, nhóm C₂-C₈-alkynyl tùy ý được thế, hoặc nhóm xyano. Tuy nhiên, JP-2014/166991 không bộc lộ cũng như đề xuất các hợp chất trong đó R là nhóm được silyl hóa được thế.

Trong đơn sáng chế Quốc tế số WO 2011/081174, các phenoxyquinolin nhất định được đề cập một cách tổng quát trong phần mô tả rộng về nhiều hợp chất có công thức sau:



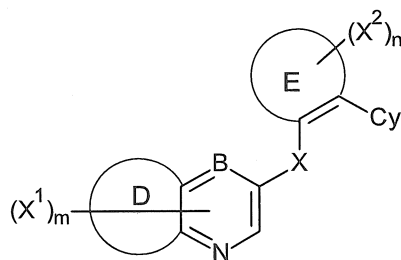
trong đó A và D là vòng hydrocacbon hoặc dị vòng 5 đến 7 cạnh, X là O, S, S(O), S(O)₂, C tùy ý được thế, hoặc N tùy ý được thế, Y và Z độc lập là C hoặc N, và R là nhóm alkyl tùy ý được thế, nhóm C₆-C₁₀-aryl tùy ý được thế, hoặc nhóm xyano. Tuy nhiên, WO 2011/081174 không bộc lộ cũng như đề xuất các hợp chất trong đó R là nhóm được silyl hóa được thế.

Trong đơn sáng chế Quốc tế số WO 2012/161071, các phenoxyquinolin nhất định được đề cập một cách tổng quát trong phần mô tả rộng về nhiều hợp chất có công thức sau:



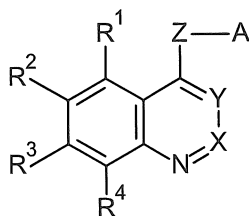
trong đó D là vòng 5 đến 7 cạnh, A¹, A², A³ và A⁴ độc lập là C hoặc N với điều kiện là ít nhất một trong số Aⁿ là N, và R là nhóm alkyl tùy ý được thế hoặc nhóm xyano. Tuy nhiên, WO 2012/161071 không bộc lộ cũng như đề xuất các hợp chất trong đó R là nhóm được silyl hóa được thế.

Trong đơn sáng chế Quốc tế số WO 2013/058256, các phenoxyquinolin nhất định được đề cập một cách tổng quát trong phần mô tả rộng về nhiều hợp chất có công thức sau:



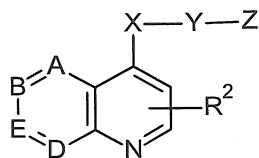
trong đó D và E là vòng hydrocacbon hoặc dị vòng 5 đến 7 cạnh, X là O, S, C(O) hoặc CH(OH), B là C hoặc N, và Cy là oxiranyl tùy ý được thế, hoặc nhóm heterocyclyl 5 hoặc 6 cạnh tùy ý được thế. Tuy nhiên, WO 2013/058256 không bộc lộ cũng như đề xuất các hợp chất trong đó Cy là vòng được silyl được thế.

Trong đơn sáng chế châu Âu số EP 0326330, các phenoxyquinolin nhất định được đề cập một cách tổng quát trong phần mô tả rộng về nhiều hợp chất có công thức sau:



trong đó X và Y có thể là CR⁵ và R⁵ là H, Cl hoặc Br, Z có thể là O, NR⁶ và R⁶ có thể là các phần tử thế khác nhau trong số đó là hydro hoặc nhóm alkyl, và A có thể là các nhóm khác nhau trong số đó là nhóm nhóm silylphenyl được thế ba lần ở vị trí ortho. Tuy nhiên, EP 0326330 không bộc lộ cũng như đề xuất các hợp chất trong đó nhóm silylphenoxy được thế ba lần ở vị trí ortho -Z-A được gắn ở vị trí số 3 trong gốc quinolin.

Trong đơn sáng chế châu Âu số EP 0410762, các phenoxyquinolin nhất định được đề cập một cách tổng quát trong phần mô tả rộng về nhiều hợp chất có công thức sau:



trong đó một trong số A, B, E hoặc D là N và các nhóm khác là CR¹, R¹ và R² độc lập là nguyên tử hydro hoặc halogen, X có thể là O, NR³ hoặc CR⁴R⁵, Y có thể là liên kết trực tiếp, và Z có thể là các nhóm khác nhau trong số đó là nhóm silylphenyl được thế ba lần ở vị trí ortho. Tuy nhiên, EP 0410762 không bộc lộ cũng như đề xuất các hợp

chất trong đó nhóm silylphenoxy được thế ba lần ở vị trí ortho -X-Y-Z được gắn ở vị trí số 3 trong gốc naphthyridin.

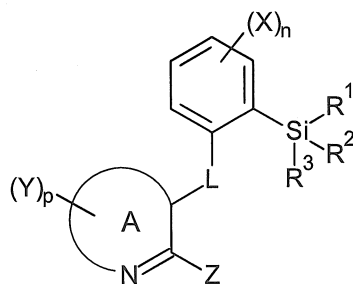
Ngày nay, các đòi hỏi về môi trường và kinh tế ngày càng gia tăng chẳng hạn về mặt phổ tác dụng, độc tính, độ chọn lọc, tỷ lệ áp dụng, sự tạo thành các chất cặn bã, và quy trình phối chế chất diệt nấm. Một số mầm bệnh cũng đã được phát hiện là phát triển khả năng kháng với chất diệt nấm được sử dụng. Do đó, trong nông nghiệp, có nhu cầu liên tục về cung cấp các hợp chất diệt nấm mới mà có thể đáp ứng được những đòi hỏi về môi trường và kinh tế này và/hoặc làm giảm bớt những vấn đề có liên quan đến tính kháng của mầm bệnh.

Bản chất kỹ thuật của sáng chế

Theo đó, sáng chế đề xuất các silylphenoxyquinolin được thế ba lần và các chất tương tự của chúng như được mô tả trong phần mô tả sau đây mà có thể được sử dụng làm chất diệt vi sinh vật, tốt hơn là hoạt chất diệt nấm.

Hoạt chất

Sáng chế đề xuất hợp chất có công thức (I):



(I)

trong đó

- A là vòng heterocycl 9, 10 hoặc 11 cạnh hai vòng ngưng tụ no hoặc không no từng phần chứa ít nhất 1 nguyên tử nitơ và từ 0 đến 4 nguyên tử khác loại nữa độc lập được chọn từ danh mục gồm N, O và S;
- Z được chọn từ nhóm gồm nguyên tử hydro, nguyên tử halogen, C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C₂-C₈-alkenyl không được thế hoặc được thế, C₂-C₈-halogenoalkenyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C₂-C₈-alkynyl không được thế hoặc được thế, C₂-C₈-

halogenoalkynyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C₃-C₇-xycloalkyl không được thế hoặc được thế, C₄-C₇-xycloalkenyl không được thế hoặc được thế, hydroxyl, C₁-C₈-alkoxy không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-halogenoalkoxy chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, aryl không được thế hoặc được thế, heteroxyclyl không được thế hoặc được thế, formyl, C₁-C₈-alkylcarbonyl không được thế hoặc được thế, (hydroxyimino)C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, (C₁-C₈-alkoxyimino)C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, carboxyl, C₁-C₈-alkoxycarbonyl không được thế hoặc được thế, carbamoyl, C₁-C₈-alkylcarbamoyl không được thế hoặc được thế, di-C₁-C₈-alkylcarbamoyl không được thế hoặc được thế, amino, C₁-C₈-alkylamino không được thế hoặc được thế, di-C₁-C₈-alkylamino không được thế hoặc được thế, sulfanyl, C₁-C₈-alkylsulfanyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-alkylsulfinyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-alkylsulfonyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₆-trialkylsilyl không được thế hoặc được thế, xyano và nitro, tốt hơn nếu Z được chọn từ nhóm gồm nguyên tử hydro, nguyên tử halogen, C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C₂-C₈-alkenyl không được thế hoặc được thế, hydroxyl, C₁-C₈-alkoxy không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-halogenoalkoxy chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, aryl không được thế hoặc được thế, heteroxyclyl không được thế hoặc được thế và xyano;

- n là 0, 1, 2, 3 hoặc 4;
- p là 0, 1, 2, 3, 4 hoặc 5;
- L là O, S, SO, SO₂, CR⁴R⁵ hoặc NR⁶ trong đó
 - R⁴ và R⁵ độc lập được chọn từ nhóm gồm nguyên tử hydro, nguyên tử halogen, hydroxyl, C₁-C₈-alkoxy không được thế hoặc được thế và C₁-C₈ alkyl không được thế hoặc được thế, hoặc chúng có thể cùng với nguyên tử cacbon mà chúng gắn vào tạo thành nhóm cacbonyl;
 - R⁶ được chọn từ nhóm gồm nguyên tử hydro, C₁-C₈-alkyl được thế hoặc không được thế, C₁-C₈-halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C₂-C₈-alkenyl không được thế hoặc được

thế, C₂-C₈-halogenoalkenyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C₃-C₈-alkynyl không được thế hoặc được thế, C₃-C₈-halogenoalkynyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C₃-C₇-xycloalkyl không được thế hoặc được thế, C₃-C₇-halogenoxycloalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C₃-C₇-xycloalkyl-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, formyl, C₁-C₈-alkylcacbonyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-halogenoalkylcacbonyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C₁-C₈-alkoxycacbonyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-halogenoalkoxycacbonyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C₁-C₈-alkylsulfonyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-halogenoalkylsulfonyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, aryl-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế và phenylsulfonyl không được thế hoặc được thế;

- X độc lập được chọn từ nhóm gồm nguyên tử halogen, C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C₂-C₈-alkenyl không được thế hoặc được thế, C₂-C₈-halogenoalkenyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C₂-C₈-alkynyl không được thế hoặc được thế, C₂-C₈-halogenoalkynyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C₃-C₇-xycloalkyl không được thế hoặc được thế, C₄-C₇-xycloalkenyl không được thế hoặc được thế, hydroxyl, C₁-C₈-alkoxy không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-halogenoalkoxy chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, aryl không được thế hoặc được thế, heteroxyclyl không được thế hoặc được thế, formyl, C₁-C₈-alkylcacbonyl không được thế hoặc được thế, (hydroxyimino)C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, (C₁-C₈-alkoxyimino)C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, carboxyl, C₁-C₈-alkoxycacbonyl không được thế hoặc được thế, carbamoyl, C₁-C₈-alkylcarbamoyl không được thế hoặc được thế, di-C₁-C₈-alkylcarbamoyl không được thế hoặc được thế, amino, C₁-C₈-alkylamino không được thế hoặc được thế, di-C₁-C₈-alkylamino không được thế hoặc được thế, sulfanyl, C₁-C₈-alkylsulfanyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-alkylsulfinyl không được thế

hoặc được thế, C₁-C₈-alkylsulfonyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₆-trialkylsilyl không được thế hoặc được thế, xyano, nitro, hydroxymetyl và (tetrahydro-2H-pyran-2-yloxy)metyl, tốt hơn nếu X độc lập được chọn từ nhóm gồm nguyên tử halogen, C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C₁-C₈-alkoxy không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-halogenoalkoxy chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, amino, xyano và nitro;

- Y độc lập được chọn từ nhóm gồm nguyên tử halogen, C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C₂-C₈-alkenyl không được thế hoặc được thế, C₂-C₈-halogenoalkenyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C₂-C₈-alkynyl không được thế hoặc được thế, C₂-C₈-halogenoalkynyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C₃-C₇-xycloalkyl không được thế hoặc được thế, C₄-C₇-xycloalkenyl không được thế hoặc được thế, hydroxyl, C₁-C₈-alkoxy không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-halogenoalkoxy chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, aryl không được thế hoặc được thế, heteroxyclyl không được thế hoặc được thế, formyl, C₁-C₈-alkylcarbonyl không được thế hoặc được thế, (hydroxyimino)C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, (C₁-C₈-alkoxyimino)C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, carboxyl, C₁-C₈-alkoxycarbonyl không được thế hoặc được thế, carbamoyl, C₁-C₈-alkylcarbamoyl không được thế hoặc được thế, di-C₁-C₈-alkylcarbamoyl không được thế hoặc được thế, amino, C₁-C₈-alkylamino không được thế hoặc được thế, di-C₁-C₈-alkylamino không được thế hoặc được thế, sulfanyl, C₁-C₈-alkylsulfanyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-alkylsulfinyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-alkylsulfonyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₆-trialkylsilyl không được thế hoặc được thế, xyano và nitro, tốt hơn nếu Y độc lập được chọn từ nhóm gồm nguyên tử halogen, C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C₁-C₈-alkoxy không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-

halogenoalkoxy chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, hydroxyl và xyano;

- R^1 được chọn từ nhóm gồm C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, C_2 - C_8 -alkenyl không được thế hoặc được thế, C_2 - C_8 -alkynyl không được thế hoặc được thế, C_3 - C_7 -xycloalkyl không được thế hoặc được thế, C_4 - C_7 -xycloalkenyl không được thế hoặc được thế, aryl không được thế hoặc được thế và heteroxyclyl không được thế hoặc được thế, tốt hơn nếu R^1 được chọn từ nhóm gồm C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế;
- R^2 được chọn từ nhóm gồm hydroxyl, C_1 - C_8 -alkoxy không được thế hoặc được thế, C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, C_2 - C_8 -alkenyl không được thế hoặc được thế, C_2 - C_8 -alkynyl không được thế hoặc được thế, C_3 - C_7 -xycloalkyl không được thế hoặc được thế, C_4 - C_7 -xycloalkenyl không được thế hoặc được thế, aryl không được thế hoặc được thế và heteroxyclyl không được thế hoặc được thế, tốt hơn nếu R^2 được chọn từ nhóm gồm C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế và aryl không được thế hoặc được thế;
- Khi R^1 và R^2 là C_1 - C_8 alkyl không được thế hoặc được thế hoặc C_2 - C_8 alkenyl không được thế hoặc được thế, chúng có thể cùng với nguyên tử silic mà chúng gắn vào tạo thành vòng C_3 - C_8 -silaxycloalkyl không được thế hoặc được thế hoặc vòng C_4 - C_8 -silaxycloalkenyl không được thế hoặc được thế;
- R^3 được chọn từ nhóm gồm nguyên tử hydro, nguyên tử halogen, C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, C_1 - C_8 -halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C_2 - C_8 -alkenyl không được thế hoặc được thế, C_2 - C_8 -alkynyl không được thế hoặc được thế, C_3 - C_7 -xycloalkyl không được thế hoặc được thế, C_4 - C_7 -xycloalkenyl không được thế hoặc được thế, hydroxyl, C_1 - C_8 -alkoxy không được thế hoặc được thế, aryl không được thế hoặc được thế, aryl- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, heteroxyclyl không được thế hoặc được thế, heteroxyclyl- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, hydroxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, C_1 - C_8 -alkoxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, C_1 - C_8 -alkylcarbonyloxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, aryloxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, heteroxyclyloxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, amino- C_1 - C_8 -alkyl

không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-alkylamino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, di-C₁-C₈-alkylamino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, arylamino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, di-arylamino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, heteroxycyclamino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-alkylcarbonylamino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-alkoxycarbonylamino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-alkylsulfanyl-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-alkylsulfinyl-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế và xyano-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, tốt hơn nếu R³ được chọn từ nhóm gồm nguyên tử hydro, nguyên tử halogen, C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C₃-C₇-xycloalkyl không được thế hoặc được thế, C₂-C₈-alkenyl không được thế hoặc được thế, aryl không được thế hoặc được thế, aryl-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, hydroxyl, heteroxycyl không được thế hoặc được thế và heteroxycyl-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế;

- R³ và X, khi X này nằm gần SiR¹R²R³, có thể cùng với nguyên tử silic và nguyên tử cacbon mà chúng lần lượt gắn vào, tạo thành dị vòng 5, 6 hoặc 7 cạnh, no từng phần không được thế hoặc được thế;
- Khi R² là C₁-C₈-alkoxy không được thế hoặc được thế và R³ là C₁-C₈-alkoxy không được thế hoặc được thế hoặc C₁-C₈ alkyl không được thế hoặc được thế, chúng có thể, cùng với nguyên tử silic mà chúng gắn vào tạo thành dị vòng 5, 6 hoặc 7 cạnh không được thế hoặc được thế;

cũng như muối, N-oxit, phức kim loại, phức á kim và các chất đồng phân hoạt động về mặt quang học hoặc các chất đồng phân hình học của chúng.

Mô tả chi tiết sáng chế

Như được sử dụng trong bản mô tả, khi một nhóm đề cập là “được thế”, một hoặc nhiều phần tử thế của nhóm được thế này có thể độc lập được chọn từ nhóm gồm nguyên tử halogen, nitro, hydroxyl, xyano, amino, sulfanyl, pentafluor-λ⁶-sulfanyl, formyl, carbamoyl, carbamat, C₁-C₈-alkyl, tri(C₁-C₈-alkyl)silyl, C₃-C₇-xycloalkyl, C₁-C₈-

halogenoalkyl có 1 đến 5 nguyên tử halogen, C₃-C₈-halogenoxycloalkyl có 1 đến 5 nguyên tử halogen, C₂-C₈-alkenyl, C₂-C₈-alkynyl, C₁-C₈-alkylamino, di-C₁-C₈-alkylamino, C₁-C₈-alkoxy, C₁-C₈-halogenoalkoxy có 1 đến 5 nguyên tử halogen, C₁-C₈-alkylsulfanyl, C₁-C₈-halogenoalkylsulfanyl có 1 đến 5 nguyên tử halogen, C₁-C₈-alkylcacbonyl, C₁-C₈-halogenoalkylcacbonyl có 1 đến 5 nguyên tử halogen, C₁-C₈-alkylcarbamoyl, di-C₁-C₈-alkylcarbamoyl, C₁-C₈-alkoxycacbonyl, C₁-C₈-halogenoalkoxycacbonyl có 1 đến 5 nguyên tử halogen, C₁-C₈-alkylcacbonyloxy, C₁-C₈-halogenoalkylcacbonyloxy có 1 đến 5 nguyên tử halogen, C₁-C₈-alkylcacbonylamino, C₁-C₈-halogenoalkylcacbonylamino có 1 đến 5 nguyên tử halogen, C₁-C₈-alkylsulfanyl, C₁-C₈-halogenoalkylsulfanyl có 1 đến 5 nguyên tử halogen, C₁-C₈-alkylsulfinyl, C₁-C₈-halogenoalkylsulfinyl có 1 đến 5 nguyên tử halogen, C₁-C₈-alkylsulfonyl và C₁-C₈-halogenoalkylsulfonyl có 1 đến 5 nguyên tử halogen.

Như được sử dụng trong bản mô tả, halogen nghĩa là flo, clo, brom hoặc iot; formyl nghĩa là -CH(=O); carboxyl nghĩa là -C(=O)OH; cacbonyl nghĩa là -C(=O)-; carbamoyl nghĩa là -C(=O)NH₂; N-hydroxycarbamoyl nghĩa là -C(=O)NHOH; triflyl nghĩa là -SO₂-CF₃; SO là nhóm sulfoxit; SO₂ là nhóm sulfon; nguyên tử khác loại nghĩa là lưu huỳnh, nitơ hoặc oxy; metylen nghĩa là gốc đôi -CH₂-; aryl thường nghĩa là phenyl hoặc naphtyl; trừ khi được chỉ định khác, heteroxyclyl nghĩa là vòng 5 đến 7 cạnh, tốt hơn là vòng 5 đến 6 cạnh, mà có thể no, no từng phần hoặc không no, chứa từ 1 đến 4 nguyên tử khác loại độc lập được chọn từ danh mục gồm N, O, S.

Thuật ngữ “cạnh” như được sử dụng trong bản mô tả khi thể hiện “vòng heteroxyclyl 9, 10 hoặc 11 cạnh” hoặc “vòng 5 đến 6 cạnh” chỉ số nguyên tử khung cấu tạo nên vòng.

Như được sử dụng trong bản mô tả, việc thể hiện “vòng heteroxyclyl 9, 10 hoặc 11 cạnh hai vòng ngưng tụ no từng phần hoặc không no” chỉ hệ hai vòng ngưng tụ chứa vòng no ngưng tụ với vòng không no hoặc hai vòng không no ngưng tụ, hệ hai vòng này gồm từ 9 đến 11 nguyên tử khung.

Như được sử dụng trong bản mô tả, nhóm alkyl, nhóm alkenyl và nhóm alkynyl cũng như các gốc chứa các thuật ngữ này, có thể thẳng hoặc phân nhánh.

Khi nhóm amino hoặc gốc amino của nhóm chứa amino bất kỳ khác được thể bằng hai phần tử thế mà có thể giống hoặc khác nhau, hai phần tử thế này cùng với nguyên tử nitơ mà chúng liên kết can tạo thành nhóm heteroxyclyl, tốt hơn là nhóm heteroxyclyl

5 đến 7 cạnh, mà có thể được thể hoặc có thể gồm các nguyên tử khác loại khác, ví dụ nhóm morpholino hoặc nhóm piperidinyl.

Hợp chất bất kỳ theo sáng chế có thể tồn tại dưới một hoặc nhiều dạng đồng phân quang hoặc hoặc đồng phân bất đối tùy thuộc vào số lượng tâm bất đối trong hợp chất. Do đó, theo cách tương tự, sáng chế đề cập đến tất cả các chất đồng phân quang học và hỗn hợp triệt quang hoặc không triệt quang của chúng (thuật ngữ "không triệt quang" để chỉ hỗn hợp các chất đồng phân đối ảnh theo tỷ lệ khác nhau) và hỗn hợp của tất cả các chất đồng phân lập thể có thể, theo mọi tỷ lệ. Chất đồng phân không đối quang và/hoặc chất đồng phân quang học có thể được tách theo các phương pháp mà bản thân chúng đã được người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực này biết rõ.

Hợp chất bất kỳ theo sáng chế cũng có thể tồn tại ở một hoặc nhiều dạng đồng phân hình học tùy thuộc vào số lượng liên kết đôi trong hợp chất. Do đó, theo cách tương tự, sáng chế đề cập đến tất cả các chất đồng phân hình học và tất cả các hỗn hợp có thể, theo mọi tỷ lệ. Chất đồng phân hình học có thể được tách theo các phương pháp chung, các phương pháp này đã được người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực biết rõ.

Hợp chất bất kỳ theo sáng chế cũng có thể tồn tại ở một hoặc nhiều dạng đồng phân hình học tùy thuộc vào vị trí tương đối (syn/anti hoặc cis/trans) của các phân tử thể trong mạch hoặc vòng. Do đó, theo cách tương tự, sáng chế đề cập đến tất cả các chất đồng phân syn/anti (hoặc cis/trans) và tất cả các hỗn hợp syn/anti (hoặc cis/trans) có thể, theo mọi tỷ lệ. Các chất đồng phân syn/anti (hoặc cis/trans) có thể được tách theo các phương pháp chung đã được người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực này biết rõ.

Khi hợp chất theo sáng chế có thể ở dạng tautome, sáng chế cũng bao gồm các dạng tautome bất kỳ của hợp chất như vậy, ngay cả khi điều này không được đề cập một cách rõ ràng.

Các hợp chất có công thức (I) ở đây được gọi là "(các) hoạt chất".

Trong công thức (I) trên đây, Z tốt hơn được chọn từ nhóm gồm nguyên tử hydro, nguyên tử halogen, hydroxyl, C₁-C₆-alkyl không được thể hoặc được thể, C₁-C₆-halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C₁-C₆-alkoxy không được thể hoặc được thể, C₁-C₆-halogenoalkoxy chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau và xyano, tốt hơn nữa nếu Z là

nguyên tử hydro hoặc C₁-C₆-alkyl không được thế hoặc được thế, còn tốt hơn nữa nếu Z là nguyên tử hydro hoặc nhóm methyl.

Trong công thức (I) trên đây, n tốt hơn là 0 hoặc 1.

Trong công thức (I) trên đây, p tốt hơn là 0, 1, 2 hoặc 3.

Trong công thức (I) trên đây, L tốt hơn là O hoặc CH₂.

Trong công thức (I) trên đây, X độc lập tốt hơn là nguyên tử halogen hoặc nhóm C₁-C₆-alkyl không được thế hoặc được thế, tốt hơn nữa nếu X độc lập là nguyên tử clo, nguyên tử flo hoặc nhóm methyl.

Trong công thức (I) trên đây, Y tốt hơn là độc lập được chọn từ nhóm gồm nguyên tử halogen, C₁-C₆-alkyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₆-halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C₁-C₆-alkoxy không được thế hoặc được thế, C₁-C₆-halogenoalkoxy chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau và xyano, tốt hơn nữa nếu Y độc lập được chọn từ nhóm gồm nguyên tử halogen và C₁-C₆-alkyl không được thế hoặc được thế, còn tốt hơn nữa nếu Y độc lập là nguyên tử flo, nguyên tử clo hoặc nhóm methyl.

Trong công thức (I) trên đây, R¹ tốt hơn là C₁-C₆-alkyl không được thế hoặc được thế, tốt hơn nữa là nhóm methyl.

Trong công thức (I) trên đây, R² tốt hơn là C₁-C₆-alkyl không được thế hoặc được thế, tốt hơn nữa là nhóm methyl.

Trong công thức (I) trên đây, R³ tốt hơn là được chọn từ nhóm gồm nguyên tử hydro, C₁-C₆-alkyl không được thế hoặc được thế, C₃-C₇-xycloalkyl không được thế hoặc được thế, aryl không được thế hoặc được thế, aryl-C₁-C₆-alkyl không được thế hoặc được thế, heteroxyclyl không được thế hoặc được thế, heteroxyclyl-C₁-C₆-alkyl không được thế hoặc được thế và hydroxyl, tốt hơn nữa nếu R³ được chọn từ nhóm gồm nguyên tử hydro, C₁-C₆-alkyl không được thế hoặc được thế, aryl không được thế hoặc được thế, aryl-C₁-C₆-alkyl không được thế hoặc được thế và hydroxyl, còn tốt hơn nữa nếu R³ là nguyên tử hydro, hydroxyl, nhóm methyl, nhóm phenyl hoặc nhóm benzyl.

Theo một số phương án, các hợp chất theo sáng chế là các hợp chất có công thức (I) trong đó:

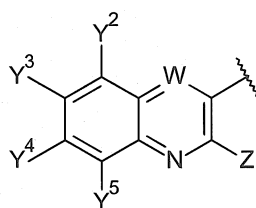
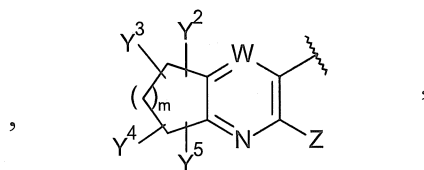
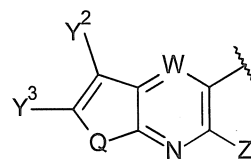
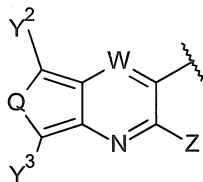
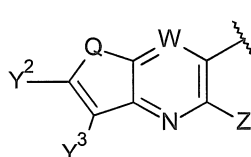
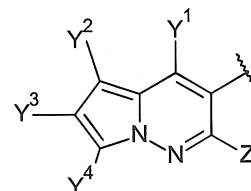
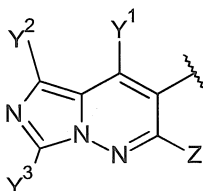
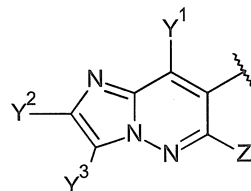
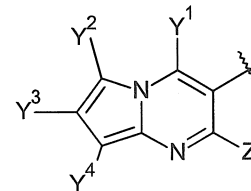
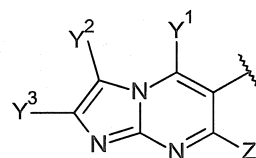
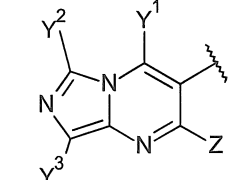
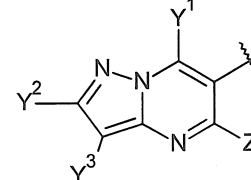
Y độc lập được chọn từ nhóm gồm nguyên tử halogen, C₁-C₆-alkyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₆-halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C₁-C₆-alkoxy không được thế hoặc được thế, C₁-C₆-

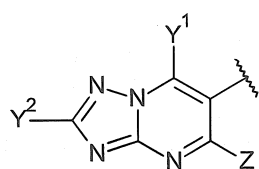
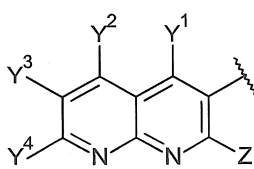
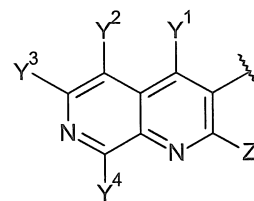
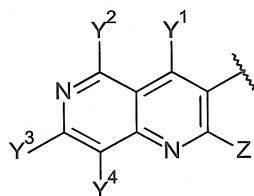
halogenoalkoxy chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau và xyano;

Z được chọn từ nhóm gồm nguyên tử hydro, nguyên tử halogen, hydroxyl, C₁-C₆-alkyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₆-halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C₁-C₆-alkoxy không được thế hoặc được thế, C₁-C₆-halogenoalkoxy chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau và xyano; và

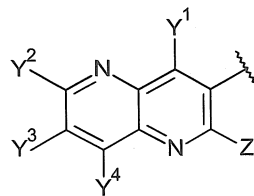
A, R¹, R², R³, X, n, p và L như được xác định trong bản mô tả.

Một số hợp chất được ưu tiên theo sáng chế là các hợp chất có công thức (I) trong đó A được chọn từ danh mục gồm:

(A¹)(A²)(A³)(A⁴)(A⁵)(A⁶)(A⁷)(A⁸)(A⁹)(A¹⁰)(A¹¹)(A¹²)

(A¹³)(A¹⁴)(A¹⁵)(A¹⁶)

và

(A¹⁷)

trong đó:

W là CY¹ hoặc N;

Q là O, S hoặc NY⁶ với Y⁶ là nguyên tử hydro hoặc C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế;

Y¹, Y², Y³, Y⁴ và Y⁵ độc lập là nguyên tử hydro hoặc Y như được mô tả trên đây, tốt hơn nếu Y¹, Y², Y³, Y⁴ và Y⁵ độc lập được chọn từ nhóm gồm nguyên tử hydro, nguyên tử halogen, C₁-C₆-alkyl được thế hoặc không được thế, C₁-C₆-halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C₁-C₆-alkoxy không được thế hoặc được thế, C₁-C₆-halogenoalkoxy chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau và xyano, tốt hơn nữa nếu Y¹, Y², Y³, Y⁴ và Y⁵ độc lập được chọn từ nhóm gồm nguyên tử hydro, nguyên tử halogen và C₁-C₆-alkyl không được thế hoặc được thế, còn tốt hơn nữa nếu Y¹, Y², Y³, Y⁴ và Y⁵ độc lập là nguyên tử hydro, nguyên tử flo, nguyên tử clo hoặc nhóm methyl;

Z như được mô tả trên đây, tốt hơn nếu Z được chọn từ nhóm gồm nguyên tử hydro, nguyên tử halogen, hydroxyl, C₁-C₆-alkyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₆-halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C₁-C₆-alkoxy không được thế hoặc được thế, C₁-C₆-halogenoalkoxy chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau và xyano, tốt hơn nữa nếu Z là nguyên tử hydro hoặc C₁-C₆-alkyl không được thế hoặc được thế, còn tốt hơn nữa nếu Z là nguyên tử hydro hoặc nhóm methyl;

m là 1, 2 hoặc 3; và

n, X, L, R¹, R² và R³ như được xác định trong bản mô tả này

Tốt hơn là trong các phương án này, A được chọn từ danh mục gồm A¹ đến A¹⁷,

L là O hoặc CH₂, tốt hơn nữa là O; và/hoặc

R¹ là C₁-C₆-alkyl không được thế hoặc được thế, tốt hơn nữa là nhóm methyl; và/hoặc

R² là C₁-C₆-alkyl không được thế hoặc được thế, tốt hơn nữa là nhóm methyl; và/hoặc

R³ được chọn từ nhóm gồm nguyên tử hydro, C₁-C₆-alkyl không được thế hoặc được thế, C₃-C₇-xycloalkyl không được thế hoặc được thế, aryl không được thế hoặc được thế, aryl-C₁-C₆-alkyl không được thế hoặc được thế, heteroxyclyl không được thế hoặc được thế, heteroxyclyl-C₁-C₆-alkyl không được thế hoặc được thế và hydroxyl, tốt hơn nữa nếu là R³ được chọn từ nhóm gồm nguyên tử hydro, C₁-C₆-alkyl không được thế hoặc được thế, aryl không được thế hoặc được thế, aryl-C₁-C₆-alkyl không được thế hoặc được thế và hydroxyl, còn tốt hơn nữa nếu R³ là nguyên tử hydro, hydroxyl, nhóm methyl, nhóm phenyl hoặc nhóm benzyl; và/hoặc

n là 0 hoặc 1; và/hoặc

X là nguyên tử halogen hoặc nhóm C₁-C₆-alkyl không được thế hoặc được thế, tốt hơn nếu X nguyên tử clo, nguyên tử flo hoặc nhóm methyl.

Một số hợp chất được ưu tiên theo sáng chế là các hợp chất có công thức (I) trong đó A được chọn từ danh mục gồm A¹, A², A³, A⁵, A¹⁰, A¹² và A¹⁷ như được mô tả trên đây, trong đó W, Q, Y¹, Y², Y³, Y⁴, Y⁵, m, n, X, L, R¹, R² và R³ như được xác định trong bản mô tả.

Một số hợp chất được ưu tiên theo sáng chế là các hợp chất có công thức (I) trong đó A là dị vòng có công thức A¹ như được mô tả trên đây trong đó W, Y¹, Y², Y³, Y⁴, Y⁵, n, X, L, R¹, R² và R³ như được xác định trong bản mô tả.

Một số hợp chất được ưu tiên hơn theo sáng chế là các hợp chất có công thức (I) trong đó:

A là dị vòng có công thức (A¹) trong đó:

W là CY¹ hoặc N;

Y^1 đến Y^5 độc lập là nguyên tử hydro, nguyên tử flo hoặc nhóm methyl, tốt hơn là nguyên tử hydro hoặc nguyên tử flo, tốt hơn nữa nếu Y^1 , Y^2 và Y^3 là nguyên tử hydro và Y^4 và Y^5 độc lập là nguyên tử hydro hoặc nguyên tử flo;

Z là nguyên tử hydro hoặc nhóm methyl;

R^1 , R^2 , R^3 , X, n và L như được xác định trên đây, tốt hơn nếu R^1 và R^2 là C₁-C₆-alkyl không được thế hoặc được thế, R^3 được chọn từ nhóm gồm C₁-C₆-alkyl không được thế hoặc được thế, C₃-C₇-xycloalkyl không được thế hoặc được thế, aryl không được thế hoặc được thế, heteroxyclyl không được thế hoặc được thế và hydroxyl, tốt hơn nếu R^3 là C₁-C₆-alkyl không được thế hoặc được thế hoặc hydroxyl, và X là nguyên tử clo, nguyên tử flo hoặc nhóm methyl. Tốt hơn là, theo một số phương án về các hợp chất được ưu tiên hơn này, n là 0 hoặc 1 với X nằm gần SiR¹R²R³ khi n là 1.

Các ưu tiên trên đây về phân tử thế của các hợp chất theo sáng chế có thể được kết hợp theo nhiều cách khác nhau. Các tổ hợp dấu hiệu được ưu tiên này do đó tạo ra các nhóm phụ của các hợp chất theo sáng chế. Ví dụ về các nhóm phụ như vậy của các hợp chất được ưu tiên theo sáng chế là:

- các dấu hiệu được ưu tiên của A với một hoặc nhiều dấu hiệu được ưu tiên của L, R^1 , R^2 , R^3 , n, p, X, Y và Z;
- các dấu hiệu được ưu tiên của L với một hoặc nhiều dấu hiệu được ưu tiên của A, R^1 , R^2 , R^3 , n, p, X, Y và Z;
- các dấu hiệu được ưu tiên của R^1 với một hoặc nhiều dấu hiệu được ưu tiên của A, L, R^2 , R^3 , n, p, X, Y và Z;
- các dấu hiệu được ưu tiên của R^2 với một hoặc nhiều dấu hiệu được ưu tiên của A, L, R^1 , R^3 , n, p, X, Y và Z;
- các dấu hiệu được ưu tiên của R^3 với một hoặc nhiều dấu hiệu được ưu tiên của A, L, R^1 , R^2 , n, p, X, Y và Z;
- các dấu hiệu được ưu tiên của n với một hoặc nhiều dấu hiệu được ưu tiên của A, L, R^1 , R^2 , R^3 , p, X, Y và Z;
- các dấu hiệu được ưu tiên của p với một hoặc nhiều dấu hiệu được ưu tiên của A, L, R^1 , R^2 , R^3 , n, X, Y và Z;
- các dấu hiệu được ưu tiên của X với một hoặc nhiều dấu hiệu được ưu tiên của A, L, R^1 , R^2 , R^3 , n, p, Y và Z;

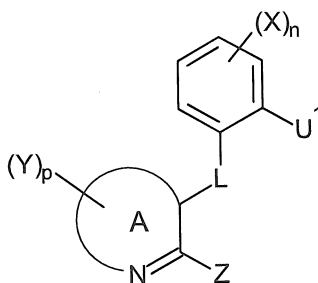
- các dấu hiệu được ưu tiên của Y với một hoặc nhiều dấu hiệu được ưu tiên của A, L, R^1 , R^2 , R^3 , n, p, X và Z;
- các dấu hiệu được ưu tiên của Z với một hoặc nhiều dấu hiệu được ưu tiên của A, L, R^1 , R^2 , R^3 , n, p, X và Y;

Trong những tổ hợp dấu hiệu được ưu tiên này của các phần tử thể của các hợp chất theo sáng chế, các dấu hiệu được ưu tiên đã nêu cũng có thể được chọn trong số các dấu hiệu được ưu tiên hơn của từng A, L, R^1 , R^2 , R^3 , n, p, X, Y và Z sao cho tạo ra nhóm phụ các hợp chất theo sáng chế được ưu tiên nhất.

Quy trình điều chế các hoạt chất

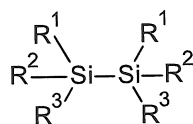
Sáng chế cũng đề cập đến quy trình điều chế các hợp chất có công thức (I).

Các hợp chất có công thức (I) như được xác định ở đây có thể được điều chế bằng quy trình P1 mà bao gồm bước cho halogenoaryl có công thức (II) hoặc một trong số các muối của nó:



(II)

trong đó A, L, n, p, X, Y và Z như được xác định ở đây và U¹ là nguyên tử clo, nguyên tử brom, nguyên tử iot, nhóm mesyl, nhóm tosyl hoặc nhóm triflyl, phản ứng với dẫn xuất disilyl có công thức (IIIa):



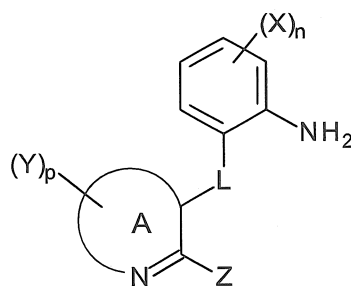
(IIIa)

trong đó R¹, R² và R³ như được xác định ở đây.

Quy trình P1 có thể được thực hiện với sự có mặt của chất xúc tác kim loại chuyển tiếp như paladi và nếu thích hợp với sự có mặt của phối tử phosphin hoặc phối tử carben N-dị vòng, nếu thích hợp với sự có mặt của bazơ và nếu thích hợp với sự có mặt của

dung môi theo các quy trình đã biết (Organic Letters (2003), 5, 3483, Organic Letters (2007), 9, 3785 và các tài liệu tham khảo được viện dẫn trong đó).

Các dẫn xuất có công thức (II) trong đó trong đó A, L, n, p, X, Y và Z như được xác định ở đây và U¹ là nguyên tử clo, nguyên tử brom hoặc nguyên tử iot, có thể được điều chế bằng cách diazo hóa anilin có công thức (IV) hoặc một trong số các muối của nó:



(IV)

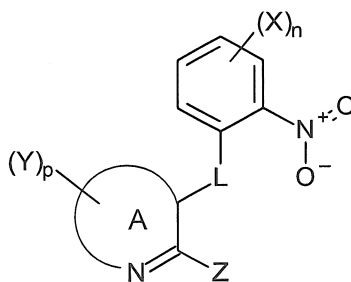
trong đó A, L, n, p, X, Y và Z như được xác định ở đây, theo các quy trình đã biết (Patai's Chemistry of Functional Groups - Amino, Nitroso, Nitro and Related Groups - 1996).

Các dẫn xuất có công thức (II) cũng có thể được điều chế bằng cách thế ái nhân thơm theo các quy trình đã biết (Journal of Heterocyclic Chemistry (2008), 45, 1199 và Synthetic Communications (1999), 29, 1393).

Các dẫn xuất có công thức (II) cũng có thể được điều chế từ các hợp chất có công thức (VIII) bằng cách ngưng tụ các [thio]phenol hoặc anilin được thế ortho tương ứng theo các quy trình đã biết (US-2012/289702).

Các dẫn xuất có công thức (II) cũng có thể được điều chế bằng quy trình P6 được mô tả sau đây.

Các anilin có công thức (IV) trong đó trong đó A, L, n, p, X, Y và Z như được xác định ở đây có thể được điều chế bằng cách khử nhóm nitro có công thức (V) hoặc một trong số các muối của nó:



(V)

trong đó A, L, n, p, X, Y và Z như được xác định ở đây theo các quy trình đã biết (Patai's Chemistry of Functional Groups - Amino, Nitroso, Nitro and Related Groups - 1996).

Các dẫn xuất disilyl có công thức (IIIa) là đã biết hoặc có thể được điều chế bằng các quy trình đã biết.

Các hợp chất có công thức (I) trong đó R^3 là hydroxyl có thể được điều chế từ các hợp chất có công thức (I) trong đó R^3 là C_1 - C_6 -alkoxy không được thế hoặc được thế (bản thân chúng được điều chế bằng quy trình P1) bằng cách thủy phân trong môi trường axit theo các quy trình đã biết (Organic Letters (2003), 5, 3483)

Các hợp chất có công thức (I) trong đó R^3 là nguyên tử flo có thể được điều chế từ các hợp chất có công thức (I) trong đó R^3 là C_1 - C_6 -alkoxy không được thế hoặc được thế (bản thân chúng được điều chế bằng quy trình P1) bằng các quy trình đã biết (Synlett (2012), 23, 1064 và các tài liệu tham khảo được viện dẫn trong đó) hoặc có thể được điều chế từ các hợp chất có công thức (I) trong đó R^3 là hydroxyl bằng các quy trình đã biết (EP1908472)

Quy trình P1 có thể được thực hiện với sự có mặt của chất xúc tác, như muối hoặc phức kim loại. Các dẫn xuất kim loại thích hợp cho mục đích này là các chất xúc tác kim loại chuyển tiếp như paladi. Các muối hoặc phức kim loại thích hợp cho mục đích này là, ví dụ, paladi clorua, paladi axetat, tetrakis(triphenylphosphin)paladi(0), bis(dibenzylidenaxeton)paladi(0), tris(dibenzylidenaxeton)dipaladi(0), bis(triphenylphosphin)paladi(II) diclorua, [1,1'-bis(diphenylphosphino)feroxen]diclopaladi(II), bis(xinnamyl)diclodipaladi(II), bis(allyl)-diclodipaladi(II) hoặc [1,1'-Bis(di-*tert*-butylphosphino)feroxen]diclopaladi(II).

Cũng có thể tạo phức paladi trong hỗn hợp phản ứng bằng cách bổ sung riêng rẽ muối paladi và phối tử hoặc muối, như triethylphosphin, tri-*tert*-butylphosphin, tri-*tert*-butylphosphoni tetrafloroborat, trixyclohexylphosphin, 2-(dixyclohexylphosphino)biphenyl, 2-(di-*tert*-butylphosphino)biphenyl, 2-(dixyclohexylphosphino)-2'-(N,N-dimetylamino)biphenyl, 2-(*tert*-butylphosphino)-2'-(N,N-dimetylamino)biphenyl, 2-di-*tert*-butylphosphino-2',4',6'-triisopropylbiphenyl, 2-dixyclohexylphosphino-2',4',6'-triisopropylbiphenyl, 2-dixyclohexylphosphino-2,6'-dimetoxybiphenyl, 2-dixyclohexylphosphino-2',6'-diisopropoxybiphenyl, triphenyl-phosphin, tris-(o-tolyl)phosphin, natri 3-(diphenylphosphino)benzensulfonat,

tris-2-(metoxy-phenyl)phosphin, 2,2'-bis(diphenylphosphino)-1,1'-binaphtyl, 1,4-bis(diphenylphosphino)butan, 1,2-bis(diphenylphosphino) etan, 1,4-bis(dixyclohexylphosphino)butan, 1,2-bis(dixyclohexylphosphino)-etan, 2-(dixyclohexylphosphino)-2'-(N,N-dimetylamino)-biphenyl, 1,1'-bis(diphenylphosphino)-feroxen, (R)-(-)-1-[(S)-2-diphenyl-phosphino]feroxenyl] etyldixyclohexylphosphin, tris-(2,4-*tert*-butyl-phenyl)phosphit, di(1-adamantyl)-2-morpholinophenylphosphin hoặc 1,3-bis(2,4,6-trimetylphenyl)imidazoli clorua vào phản ứng.

Cũng có lợi nếu chọn chất xúc tác và/hoặc phối tử thích hợp từ các danh mục thương mại như “Metal Catalysts for Organic Synthesis” của hãng Strem Chemicals hoặc “Phosphorous Ligands and Compounds” của hãng Strem Chemicals.

Các bazơ thích hợp để thực hiện quy trình P1 có thể là bazơ vô cơ và bazơ hữu cơ thông thường cho các phản ứng như vậy. Ưu tiên sử dụng hydroxit của kim loại kiềm hoặc kim loại kiềm thổ, như natri hydroxit, canxi hydroxit, kali hydroxit hoặc các dẫn xuất amoni hydroxit khác; các florua kim loại kiềm thổ, kim loại kiềm hoặc amoni như kali florua, xesi florua hoặc tetrabutylamoni florua; cacbonat của kim loại kiềm thổ hoặc kim loại kiềm, như natri cacbonat, kali cacbonat, kali bicarbonat, natri bicarbonat hoặc xesi cacbonat; axetat của kim loại kiềm hoặc kim loại kiềm thổ, như natri axetat, lithi axetat, kali axetat hoặc canxi axetat; phosphat của kim loại kiềm hoặc kim loại kiềm thổ, như trikali phosphat kiềm; alcoholat kim loại kiềm, như kali *tert*-butoxit hoặc natri *tert*-butoxit; các amin bậc bốn, như trimetylamin, trietylamin, tributylamin, N,N-dimetylanilin, N,N-dixyclohexylmetylamin, N,N-diisopropyletylamin, N-metylpiperidin, N,N-dimetylaminopyridin, diazabixyclooctan (DABCO), diazabixyclononen (DBN) hoặc diazabixycloundecen (DBU); và cả các bazơ thơm, như pyridin, picolin, lutidin hoặc collidin.

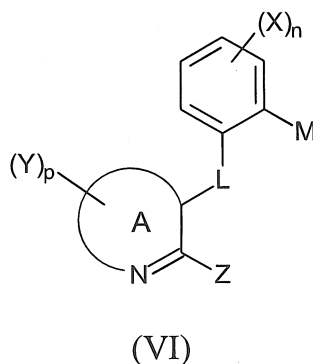
Các dung môi thích hợp để thực hiện quy trình P1 có thể là các dung môi hữu cơ trơ thông thường. Ưu tiên sử dụng các hydrocacbon béo, vòng béo hoặc thơm tùy ý được halogen hóa, như ete dầu mỏ, pentan, hexan, heptan, xyclohexan, metylxyclohexan, benzen, toluen, xylen hoặc decalin; clobenzen, diclobenzen, diclometan, cloroform, cacbon tetraclorea, dicloetan hoặc tricloetan; các ete, như dietyl ete, diisopropyl ete, metyl *tert*-butyl ete, metyl *tert*-amyl ete, dioxan, tetrahydrofuran, 2-metyltetrahydrofuran, 1,2-dimetoxyetan, 1,2-dietoxyetan hoặc anisol; các nitril, như

axetonitril, propionitril, *n*- hoặc *iso*-butyronitril hoặc benzonitril; các amit, như N,N-dimetylformamit, N,N-dimetylaxetamit, N-metylformanilit, N-metylpyrrolidon hoặc hexametylphosphoric triamit; các ure, như 1,3-dimetyl-3,4,5,6-tetrahydro-2(1H)-pyrimidinon; các este, như metyl axetat hoặc etyl axetat, các sulfoxit, như dimetyl sulfoxit, hoặc các sulfon, như sulfolan; và hỗn hợp của các dung môi này.

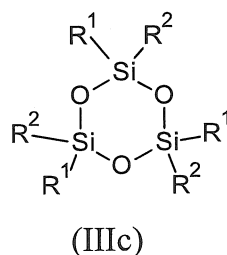
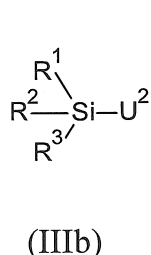
Cũng có thể thuận lợi nếu tiến hành quy trình P1 với đồng dung môi như nước hoặc rượu như metanol, etanol, propanol, isopropanol hoặc *tert*-butanol.

Quy trình P1 có thể được thực hiện trong khí quyển trơ như khí quyển argon hoặc nitơ. Khi tiến hành quy trình P1, 1 mol hoặc lượng dư hợp chất có công thức (III) và từ 1 đến 5 mol bazơ và từ 0,01 đến 20 phần trăm mol phức paladi có thể được sử dụng trên mỗi mol hợp chất có công thức (II). Cũng có thể sử dụng các thành phần phản ứng theo tỷ lệ khác. Việc làm sạch được thực hiện bằng các phương pháp đã biết.

Các hợp chất có công thức (I) như được xác định ở đây có thể được điều chế bằng quy trình P2 mà bao gồm bước cho hợp chất có công thức (VI) hoặc một trong số các muối của nó:



trong đó A, L, n, p, X, Y và Z như được xác định ở đây và M là kim loại kiềm như lithi mà có thể được tạo phức bằng 1 đến 2 phối tử hoặc halogenomagic mà có thể được tạo phức bằng 1 đến 2 phối tử, phản ứng với dẫn xuất silyl có công thức (IIIb) hoặc dẫn xuất silyl có công thức (IIIc):



trong đó R¹, R² và R³ như được xác định ở đây và U² là nguyên tử clo, nguyên tử brom, nguyên tử iot hoặc C₁-C₆-alkoxy không được thế hoặc được thế.

Hợp chất có công thức (VI) có thể thu được từ dẫn xuất halogenoaryl có công thức (II) bằng phản ứng với kim loại magie hoặc kim loại lithi; hoặc bằng cách trao đổi halogen/kim loại sử dụng chất phản ứng alkyllithi hoặc chất phản ứng Grignard hoặc phức đã tạo ra từ chất phản ứng alkyllithi hoặc chất phản ứng Grignard tốt hơn là trong điều kiện khan. Tùy ý, lithi clorua có thể được sử dụng trong hỗn hợp tiền chế với các chất phản ứng này.

Ví dụ về các chất phản ứng alkyllithi được sử dụng trong quy trình lithi hóa bao gồm metyllithi, phenyllithi, *n*-butyllithi, *sec*-butyllithi, *iso*-butyllithi, *tert*-butyllithi, và các chất tương tự.

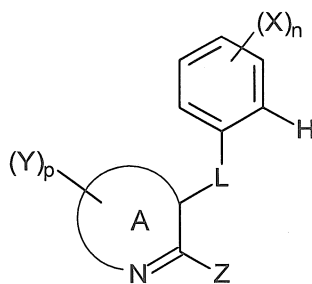
Ví dụ về các chất phản ứng Grignard được sử dụng trong quy trình tạo phức magie bao gồm metylmagie clorua, etylmagie clorua, *n*-butylmagie clorua, *iso*-propylmagie clorua, clo-(2,2,6,6-tetrametyl-1-piperidyl)magie và các chất tương tự. Phức được điều chế từ *n*-butylmagie clorua và *n*-butyllithi cũng có thể được sử dụng.

Ví dụ về các phối tử được sử dụng trong quy trình lithi hóa hoặc quy trình tạo phức magie bao gồm tetrametyletylendiamin, hexametylphosphotriamit, (+) hoặc (-)-sparteine hoặc 1,3-dimetyl-3,4,5,6-tetrahydro-2(1H)-pyrimidinon.

Dung môi được sử dụng trong việc lithi hóa hoặc tạo phức magie không bị giới hạn cụ thể với điều kiện là dung môi này tạo ra hệ phản ứng khan mà không hòa tan hợp chất để phản ứng với nó hoặc thể hiện tương tác cụ thể bất kỳ với nó. Ưu tiên sử dụng các hydrocacbon béo, vòng béo hoặc thơm không halogen hóa, như ete dầu hỏa, pentan, hexan, heptan, xyclohexan, metylxyclohexan, benzen, toluen, xylen, decalin, ISOPAR (nhãn hiệu đã đăng ký) E hoặc ISOPAR (nhãn hiệu đã đăng ký) G; các ete, như dietyl ete, diisopropyl ete, metyl *tert*-butyl ete, metyl *tert*-amyl ete, dioxan, tetrahydrofuran, 2-metyltetrahydrofuran, 1,2-dimetoxyetan hoặc 1,2-dietoxyetan; và hỗn hợp của chúng.

Việc lithi hóa hoặc tạo phức magie có thể được thực hiện trong khí quyển trơ và điều chế ở nhiệt độ từ 0°C đến -78°C.

Theo cách khác, hợp chất có công thức (VI) có thể được điều chế từ hợp chất có công thức (VII) hoặc một trong số các muối của nó:



(VII)

trong đó A, L, n, p, X, Y và Z như được xác định ở đây bằng phản ứng với bazơ như *n*-butyllithi, lithi di-*isopropyl*amin, lithi tetrametylpiperidide, lithi bis(trimetylsilyl)amin, metyllithi hoặc clo-(2,2,6,6-tetrametyl-1-piperidyl)magie và các chất tương tự, tốt hơn là trong điều kiện khan. Tùy ý, lithi clorua có thể được sử dụng trong hỗn hợp tiền chế với các chất phản ứng này.

Dung môi được sử dụng trong phản ứng của hợp chất (VII) với bazơ không bị giới hạn cụ thể với điều kiện là dung môi này tạo ra hệ phản ứng khan mà không hòa tan hợp chất để phản ứng với nó hoặc thể hiện tương tác cụ thể bất kỳ với nó. Ưu tiên sử dụng các hydrocacbon béo, vòng béo hoặc thơm không halogen hóa, như ete dầu hỏa, pentan, hexan, heptan, xyclohexan, metylxyclohexan, benzen, toluen, xylen, decalin, ISOPAR (nhãn hiệu đã đăng ký) E hoặc ISOPAR (nhãn hiệu đã đăng ký) G; các ete, như dietyl ete, diisopropyl ete, metyl *tert*-butyl ete, metyl *tert*-amyl ete, dioxan, tetrahydrofuran, 2-metyltetrahydrofuran, 1,2-dimetoxyetan hoặc 1,2-dietoxyetan; và hỗn hợp của chúng.

Phản ứng có thể được thực hiện trong khí quyển trơ và điều chế ở nhiệt độ từ 0°C đến -78°C.

Các hợp chất có công thức (VII) là đã biết và có thể được điều chế bằng các quy trình đã biết (Organic Letters (2012), 14, 173, Bioorganic & Medicinal Chemistry, 19, 939 và các tài liệu tham khảo được viện dẫn trong đó).

Các dẫn xuất silyl có công thức (IIIb) và (IIIc) là đã biết hoặc có thể được điều chế bằng các quy trình đã biết.

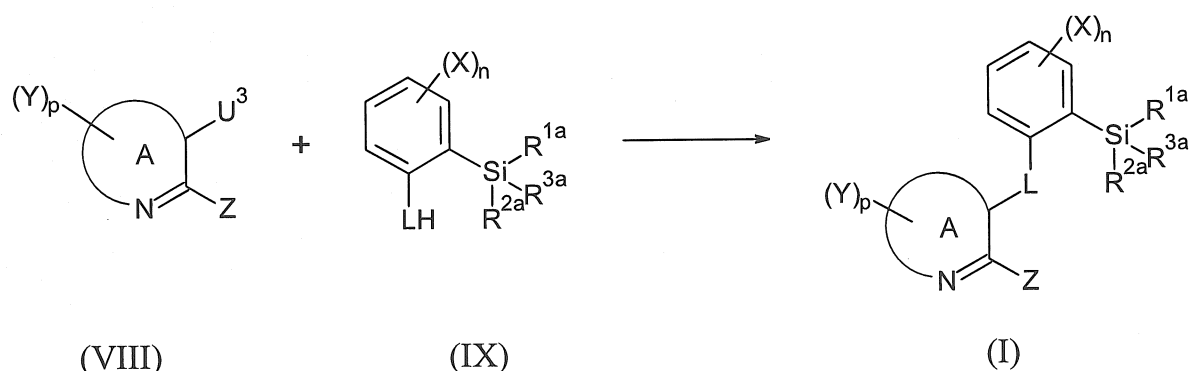
Các hợp chất có công thức (I) trong đó R³ là hydroxyl cũng có thể được điều chế từ các hợp chất có công thức (I) trong đó R³ là nguyên tử hydro (bản thân chúng được điều chế bằng quy trình P2) bằng các quy trình đã biết (Chemistry – A European Journal (2012), 18, 9789, WO-2013/058825 và EP1908472).

Dung môi được sử dụng để thực hiện quy trình P2 không bị giới hạn cụ thể với điều kiện là dung môi này tạo ra hệ phản ứng khan mà không hòa tan hợp chất để phản

ứng với nó hoặc thể hiện tương tác cụ thể bất kỳ với nó. Ưu tiên sử dụng các hydrocacbon béo, vòng béo hoặc thơm không halogen hóa, như ete dầu hỏa, pentan, hexan, heptan, xyclohexan, metylxyclohexan, benzen, toluen, xylen, decalin, ISOPAR (nhãn hiệu đã đăng ký) E hoặc ISOPAR (nhãn hiệu đã đăng ký) G; các ete, như dietyl ete, diisopropyl ete, metyl *tert*-butyl ete, metyl *tert*-amyl ete, dioxan, tetrahydrofuran, 2-metyltetrahydrofuran, 1,2-dimetoxyetan hoặc 1,2-dietoxyetan; hoặc hỗn hợp của chúng.

Quy trình P2 có thể được thực hiện trong khí quyển trơ. Khi tiến hành quy trình P2, 1 mol hoặc lượng dư hợp chất có công thức (IIIb) hoặc hợp chất có công thức (IIIc) có thể được sử dụng trên mỗi mol hợp chất có công thức (VII). Cũng có thể sử dụng các thành phần phản ứng theo tỷ lệ khác. Việc làm sạch được thực hiện bằng các phương pháp đã biết.

Các hợp chất có công thức (I) như được xác định ở đây có thể được điều chế bằng quy trình P3 mà bao gồm bước cho hợp chất có công thức (VIII) hoặc một trong số các muối của nó phản ứng với hợp chất có công thức (IX) như được minh họa trên sơ đồ phản ứng sau:



Quy trình P3

trong đó L là O, S hoặc NR⁶;

U³ là nguyên tử clo, nguyên tử brom, nguyên tử iot, nhóm mesyl, nhóm tosyl hoặc nhóm triflyl;

R^{1a} và R^{2a} độc lập là C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, C₂-C₈-alkenyl không được thế hoặc được thế, C₃-C₇-xycloalkyl không được thế hoặc được thế, aryl không được thế hoặc được thế hoặc heteroxyclyl không được thế hoặc được thế; và

R^{3a} là nguyên tử hydro, C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; C₁-C₈-halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau; C₂-C₈-alkenyl không được thế hoặc được thế; C₂-C₈-alkynyl không được thế hoặc được

thế; C₃-C₇-xycloalkyl không được thế hoặc được thế; C₄-C₇-xycloalkenyl không được thế hoặc được thế; aryl không được thế hoặc được thế; aryl-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; heteroxyclyl không được thế hoặc được thế; heteroxyclyl-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; hydroxy-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; C₁-C₈-alkoxy-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; C₁-C₈-alkylcacbonyloxy-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; aryloxy-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; heteroxyclyloxy-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; amino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; C₁-C₈-alkylamino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; di-C₁-C₈-alkylamino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; arylamino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; di-aryl-amino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; heteroxyclylamino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; C₁-C₈-alkylcacbonylamino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; C₁-C₈-alkoxycacbonylamino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; C₁-C₈-alkylsulfonyl-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; C₁-C₈-alkylsulfinyl-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; C₁-C₈-alkylsulfonyl-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; hoặc xyano-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; và

A, n, p, X, Y, R⁶ và Z như được xác định ở đây.

Các hợp chất có công thức (IX) có bán trên thị trường hoặc có thể được điều chế bằng các quy trình đã biết rõ.

Quy trình P3 có thể được thực hiện với sự có mặt của chất xúc tác kim loại chuyển tiếp như paladi và nếu thích hợp với sự có mặt của phối tử phosphin hoặc phối tử carben N-dị vòng; hoặc đồng và nếu thích hợp với sự có mặt của phối tử; và nếu thích hợp với sự có mặt của bazơ và nếu thích hợp với sự có mặt của dung môi theo các quy trình đã biết (Organic Letters (2012), 14, 170, Organic Letters (2002), 4, 1623 và các tài liệu tham khảo được viện dẫn trong đó).

Chất xúc tác trên cơ sở paladi thích hợp có thể được mô tả liên quan đến quy trình P1.

Các muối hoặc phức đồng thích hợp và các hydrat của chúng cho mục đích này là, ví dụ, đồng metal, đồng(I) iodua, đồng(I) clorua, đồng(I) bromua, đồng(II) clorua, đồng(II) bromua, đồng(II) oxit, đồng(I) oxit, đồng(II) axetat, đồng(I) axetat, đồng(I) thiophen-2-carboxylat, đồng(I) xyanua, đồng(II) sulfat, đồng bis(2,2,6,6-tetrametyl-3,5-heptandionat), đồng(II) triflometansulfonate tetrakis(axetonitril)đồng(I) hexaflophosphat, tetrakis(axetonitril)-đồng(I) tetrafloroborat.

Cũng có thể tạo phức đồng trong hỗn hợp phản ứng bằng cách bổ sung riêng rẽ muối đồng và phối tử hoặc muối, như etylendiamin, N,N-dimetyletylendiamin, N,N'-dimetyletylendiamin, *rac-trans*-1,2-diaminoxyclohexan, *rac-trans*-N,N'-dimetylxcyclohexan-1,2-diamin, 1,1'-binaphtyl-2,2'-diamin, N,N,N',N'-tetrametyletylendiamin, prolin, N,N-dimetyl glyxin, quinolin-8-ol, pyridin, 2-aminopyridin, 4-(dimethylamino)pyridin, 2,2'-bipyridyl, 2,6-di(2-pyridyl)pyridin, axit 2-picolinic, 2-(dimethylaminometyl)-3-hydroxypyridin, 1,10-phenanthrolin, 3,4,7,8-tetrametyl-1,10-phenanthrolin, 2,9-dimetyl-1,10-phenanthrolin, 4,7-dimetoxy-1,10-phenanthrolin, N,N'-bis[(E)-pyridin-2-ylmetyliden]xyclohexan-1,2-diamin, N-[(E)-phenylmetyliden], N-[(E)-phenylmetyliden]-xyclohexanamin, 1,1,1-tris(hydroxymetyl)etan, etylen glycol, 2,2,6,6-tetrametylheptan-3,5-dion, 2-(2,2-dimetylpropanoyl)xyclohexanon, axetylaxeton, dibenzoylmetan, 2-(2-metylpropanoyl)xyclohexanon, biphenyl-2-yl(di-*tert*-butyl)phosphan, etylenbis-(diphenylphosphin), N,N-diethylsalixylamit, 2-hydroxybenzaldehyt oxim, axit oxo[(2,4,6-trimetylphenyl)amino]axetic hoặc axit 1H-pyrol-2-carboxylic vào phản ứng.

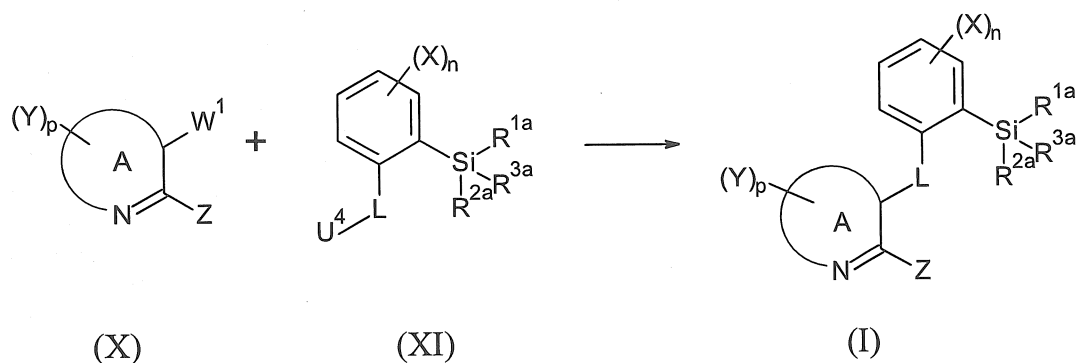
Cũng có lợi nếu chọn chất xúc tác và/hoặc phối tử thích hợp từ các danh mục thương mại như “Metal Catalysts for Organic Synthesis” của hãng Strem Chemicals hoặc từ các tạp chí chuyên ngành (Chemical Society Reviews (2014), 43, 3525, Coordination Chemistry Reviews (2004), 248, 2337 và các tài liệu tham khảo trong đó).

Các bazơ thích hợp để thực hiện quy trình P3 có thể được mô tả liên quan đến quy trình P1.

Các dung môi thích hợp để thực hiện quy trình P3 có thể được mô tả liên quan đến quy trình P1.

Quy trình P3 có thể được thực hiện trong khí quyển trơ. Khi tiến hành quy trình P3, 1 mol hoặc lượng dư hợp chất có công thức (IX) và từ 1 đến 5 mol bazơ và từ 0,01 đến 20 phần trăm mol phức kim loại chuyển tiếp có thể được sử dụng trên mỗi mol hợp chất có công thức (VIII). Cũng có thể sử dụng các thành phần phản ứng theo tỷ lệ khác. Việc làm sạch được thực hiện bằng các phương pháp đã biết.

Các hợp chất có công thức (I) như được xác định ở đây có thể được điều chế bằng quy trình P4 mà bao gồm bước cho hợp chất có công thức (X) hoặc một trong số các muối của nó phản ứng với hợp chất có công thức (XI) như được minh họa trên sơ đồ phản ứng sau:



Quy trình P4

trong đó L là CR^4R^5 ;

R^4 và R^5 độc lập là nguyên tử hydro hoặc C_1 - C_8 alkyl không được thế hoặc được thế;

U^4 là nguyên tử brom, nguyên tử clo, nguyên tử iot, nhóm mesyl, nhóm tosyl hoặc nhóm triflyl;

W^1 là dẫn xuất bo như axit boronic, este boronic hoặc dẫn xuất kali trifloborat;

R^{1a} và R^{2a} độc lập là C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, C_2 - C_8 -alkenyl không được thế hoặc được thế, C_3 - C_7 -xycloalkyl không được thế hoặc được thế, aryl không được thế hoặc được thế, hoặc heteroxyclyl không được thế hoặc được thế;

R^{3a} là nguyên tử hydro, C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau; C_2 - C_8 -alkenyl không được thế hoặc được thế; C_2 - C_8 -alkynyl không được thế hoặc được thế; C_3 - C_7 -xycloalkyl không được thế hoặc được thế; C_4 - C_7 -xycloalkenyl không được thế hoặc được thế; aryl không được thế hoặc được thế; aryl- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; heteroxyclyl không được thế hoặc được thế; heteroxyclyl- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; hydroxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkoxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkylcarbonyloxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; aryloxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; heteroxyclyloxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; amino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; di- C_1 - C_8 -alkylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; arylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; di-arylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; heteroxyclylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkylcarbonylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkoxycarbonylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkylsulfanyl- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkylsulfinyl- C_1 - C_8 -alkyl không được

thể hoặc được thể; C₁-C₈-alkylsulfonyl-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể hoặc xyano-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể; và

A, n, p, X, Y và Z như được xác định ở đây.

Các hợp chất có công thức (XI) có thể được điều chế bằng các quy trình đã biết (Journal of the American Chemical Society (1957), 79, 6540; Journal of Organic Chemistry (2000), (65), 4913; Tetrahedron Letters (2002), 43, 8569).

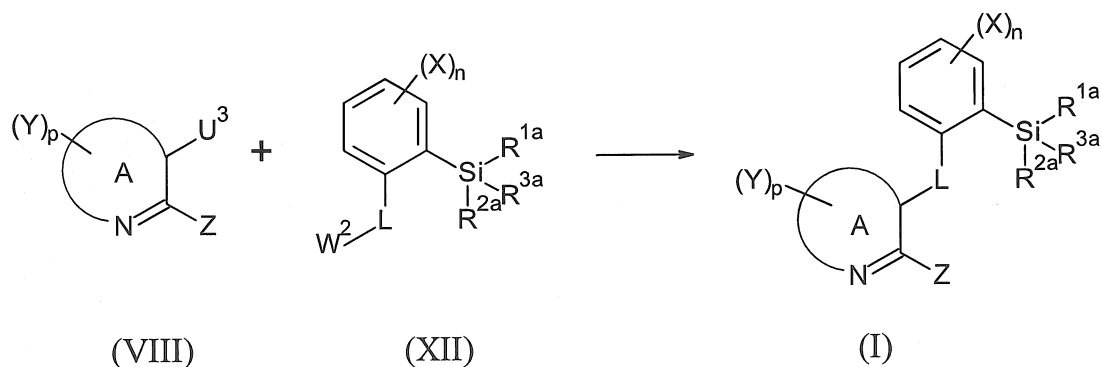
Quy trình P4 có thể được thực hiện với sự có mặt của chất xúc tác kim loại chuyển tiếp như paladi và nếu thích hợp với sự có mặt của phối tử phosphin hoặc phối tử carben N-dị vòng và nếu thích hợp với sự có mặt của bazơ và nếu thích hợp với sự có mặt của dung môi. Các muối hoặc phức paladi thích hợp cho mục đích này có thể được mô tả liên quan đến quy trình P1.

Các bazơ thích hợp để thực hiện quy trình P4 có thể được mô tả liên quan đến quy trình P1. Các dung môi thích hợp để thực hiện quy trình P4 có thể được mô tả liên quan đến quy trình P1.

Cũng có thể thuận lợi nếu tiến hành quy trình P4 theo sáng chế, với đồng dung môi như nước hoặc rượu như metanol, etanol, propanol, isopropanol hoặc *tert*-butanol.

Quy trình P4 có thể được thực hiện trong khí quyển trơ. Khi tiến hành quy trình P4, 1 mol hoặc lượng dư hợp chất có công thức (XI) và từ 1 đến 5 mol bazơ và từ 0,01 đến 20 phần trăm mol phức kim loại chuyển tiếp có thể được sử dụng trên mỗi mol hợp chất có công thức (X). Cũng có thể sử dụng các thành phần phản ứng theo tỷ lệ khác. Việc làm sạch được thực hiện bằng các phương pháp đã biết.

Các hợp chất có công thức (I) như được xác định ở đây có thể được điều chế bằng quy trình P5 mà bao gồm bước cho hợp chất có công thức (VIII) hoặc một trong số các muối của nó phản ứng với hợp chất có công thức (XII) như được minh họa trên sơ đồ phản ứng sau:



Quy trình P5

trong đó L là CR^4R^5 ;

R^4 và R^5 độc lập là nguyên tử hydro, C_1 - C_8 -alkoxy không được thế hoặc được thế hoặc C_1 - C_8 alkyl không được thế hoặc được thế;

U^3 là nguyên tử brom, nguyên tử clo, nguyên tử iot, nhóm mesyl, nhóm tosyl hoặc nhóm triflyl;

W^2 là dẫn xuất bo như axit boronic, este boronic hoặc dẫn xuất kali trifloborat;

R^{1a} và R^{2a} độc lập là C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, C_2 - C_8 -alkenyl không được thế hoặc được thế, C_3 - C_7 -xycloalkyl không được thế hoặc được thế, aryl không được thế hoặc được thế, hoặc heteroxyclyl không được thế hoặc được thế;

R^{3a} là nguyên tử hydro; hoặc C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau; C_2 - C_8 -alkenyl không được thế hoặc được thế; C_2 - C_8 -alkynyl không được thế hoặc được thế; C_3 - C_7 -xycloalkyl không được thế hoặc được thế; C_4 - C_7 -xycloalkenyl không được thế hoặc được thế; aryl không được thế hoặc được thế; aryl- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; heteroxyclyl không được thế hoặc được thế; heteroxyclyl- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; hydroxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkoxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkylcarbonyloxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; aryloxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; heteroxyclyloxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; amino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; di- C_1 - C_8 -alkylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; arylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; di-arylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; heteroxyclylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkylcarbonylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkoxycarbonylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkylsulfonyl- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkylsulfinyl- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkylsulfonyl- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế hoặc xyno- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; và

A, n, p, X, Y và Z như được xác định ở đây.

Các hợp chất có công thức (XII) có thể được điều chế từ các hợp chất có công thức (XI) bằng các quy trình đã biết (Tetrahedron Letters (2003), 44, 233 và Chemistry Letters (2002), 780).

Quy trình P5 có thể được thực hiện với sự có mặt của chất xúc tác kim loại chuyển tiếp như paladi và nếu thích hợp với sự có mặt của phối tử phosphin hoặc phối tử carben N-dị vòng và nếu thích hợp với sự có mặt của bazơ và nếu thích hợp với sự có mặt của dung môi. Các muối hoặc phức paladi thích hợp cho mục đích này có thể được mô tả liên quan đến quy trình P1.

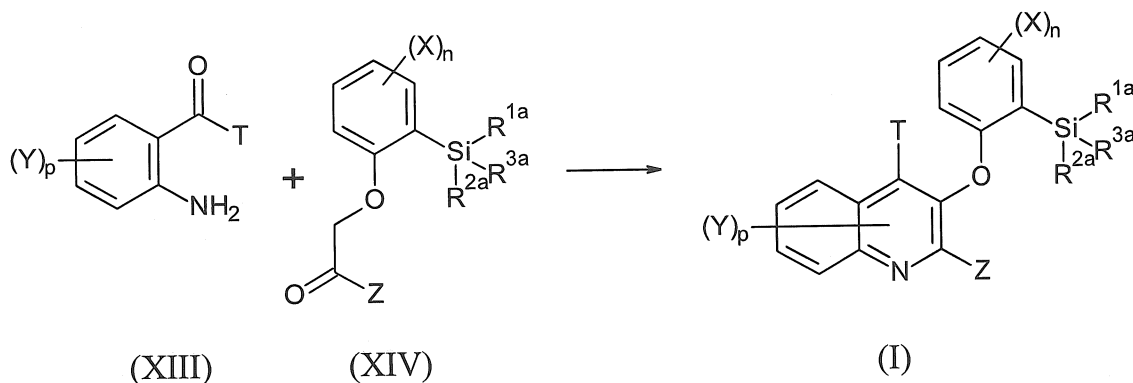
Các bazơ thích hợp để thực hiện quy trình P5 có thể được mô tả liên quan đến quy trình P1.

Các dung môi thích hợp để thực hiện quy trình P5 có thể được mô tả liên quan đến quy trình P1.

Cũng có thể thuận lợi nếu tiến hành quy trình P5 theo sáng chế, với đồng dung môi như nước hoặc rượu như metanol, etanol, propanol, isopropanol hoặc tert-butanol.

Quy trình P5 có thể được thực hiện trong khí quyển trơ. Khi tiến hành quy trình P5, 1 mol hoặc lượng dư hợp chất có công thức (XII) và từ 1 đến 5 mol bazơ và từ 0,01 đến 20 phần trăm mol phức kim loại chuyển tiếp có thể được sử dụng trên mỗi mol hợp chất có công thức (VIII). Cũng có thể sử dụng các thành phần phản ứng theo tỷ lệ khác. Việc làm sạch được thực hiện bằng các phương pháp đã biết.

Các hợp chất có công thức (I) như được xác định ở đây có thể được điều chế bằng quy trình P6 mà bao gồm bước cho hợp chất có công thức (XIII) hoặc một trong số các muối của nó phản ứng với hợp chất có công thức (XIV) như được minh họa trên sơ đồ phản ứng sau:



Quy trình P6

trong đó T là nguyên tử hydro, C₁-C₈ alkyl không được thế hoặc được thế, C₃-C₇-xycloalkyl không được thế hoặc được thế, aryl không được thế hoặc được thế, hoặc heteroxyclyl không được thế hoặc được thế;

p là 0, 1, 2, 3 hoặc 4;

Z là C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, C₃-C₇-xycloalkyl không được thế hoặc được thế, aryl không được thế hoặc được thế hoặc heteroxyclyl không được thế hoặc được thế;

R^{1a} và R^{2a} độc lập là C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, C₂-C₈-alkenyl không được thế hoặc được thế, C₃-C₇-xycloalkyl không được thế hoặc được thế, aryl không được thế hoặc được thế, hoặc heteroxyclyl không được thế hoặc được thế;

R^{3a} là nguyên tử hydro; hoặc C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; C₁-C₈-halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau; C₂-C₈-alkenyl không được thế hoặc được thế; C₂-C₈-alkynyl không được thế hoặc được thế; C₃-C₇-xycloalkyl không được thế hoặc được thế; C₄-C₇-xycloalkenyl không được thế hoặc được thế; aryl không được thế hoặc được thế; aryl-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; heteroxyclyl không được thế hoặc được thế; heteroxyclyl-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; hydroxy-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; C₁-C₈-alkoxy-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; C₁-C₈-alkylcarbonyloxy-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; aryloxy-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; heteroxyclyloxy-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; amino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; C₁-C₈-alkylamino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; di-C₁-C₈-alkylamino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; arylamino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; di-arylamino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; heteroxyclylamino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; C₁-C₈-alkylcarbonylamino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; C₁-C₈-alkoxycarbonylamino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; C₁-C₈-alkylsulfonyl-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; C₁-C₈-alkylsulfonyl-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế hoặc xyano-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; và

n, X và Y như được xác định ở đây.

Quy trình P6 có thể được thực hiện, nếu thích hợp, với sự có mặt của bazơ thích hợp hoặc, nếu thích hợp, với sự có mặt của axit Brønsted hoặc axit Lewis thích hợp, và nếu thích hợp với sự có mặt của dung môi.

Các hợp chất có công thức (XIII) có bán trên thị trường hoặc có thể được điều chế bằng các quy trình đã biết rõ.

Các hợp chất có công thức (XIV) có thể được điều chế bằng các quy trình đã biết từ các phenol (IX) tương ứng và các *alpha*-halo keton tương ứng (Organic and Biomolecular Chemistry (2006), 4, 4193).

Quy trình P6 cũng có thể được sử dụng để điều chế các 3-phenoxynaphtyridin.

Các bazơ thích hợp để thực hiện quy trình P6 có thể được mô tả liên quan đến quy trình P1.

Các axit Lewis thích hợp để thực hiện quy trình P6 có thể là axit Lewis vô cơ và hữu cơ thông thường cho các phản ứng như vậy. Ưu tiên sử dụng các halogenua kim loại, như nhôm(III) clorua, sắt(III) clorua, kẽm(II) clorua, titan tetraclorea, bo triflorua; các triflat, như scandi(III) triflat, bismut(III) triflat hoặc ytterbi(III) triflat và cả iot.

Các axit Brønsted thích hợp để thực hiện quy trình P6 có thể là axit Lewis vô cơ và hữu cơ thông thường cho các phản ứng như vậy. Ưu tiên sử dụng hydro halogenua, như hydro clorua hoặc hydro bromua; các axit sulfonic như axit *p*-toluensulfonic, axit camphorsulfonic, axit metansulfonic hoặc axit triflometansulfonic và cả axit polyphosphoric, axit phosphoric, axit sulfuric, kali bisulfit, axit trifloaxetic hoặc axit axetic.

Các dung môi thích hợp để thực hiện quy trình P6 có thể là các dung môi hữu cơ trơ thông thường. Ưu tiên sử dụng nước, rượu như metanol, etanol, propanol, isopropanol, *tert*-butanol hoặc *rượu tert*-amylic, các hydrocacbon béo, vòng béo hoặc thơm tùy ý được halogen hóa, như ete dầu mỏ, pentan, hexan, heptan, xyclohexan, metylxyclohexan, benzen, toluen, xylen hoặc decalin; clobenzen, diclobenzen, diclometan, cloroform, cacbon tetraclorea, dicloetan hoặc tricloetan; các ete, như dietyl ete, diisopropyl ete, metyl *tert*-butyl ete, metyl *tert*-amyl ete, dioxan, tetrahydrofuran, 2-metyltetrahydrofuran, 1,2-dimetoxyetan, 1,2-dietoxyetan hoặc anisol; các nitril, như axetonitril, propionitril, *n*- hoặc *iso*-butyronitril hoặc benzonitril; các amit, như N,N-dimetylformamit, N,N-dimetylaxetamit, N-metylformanilit, N-metylpyrolidon hoặc hexametylphosphoric triamit; các ure, như 1,3-dimetyl-3,4,5,6-tetrahydro-2(1H)-pyrimidinon; các este, như metyl axetat hoặc etyl axetat, các sulfoxit, như dimetyl sulfoxit, hoặc các sulfon, như sulfolan; và hỗn hợp của các dung môi này.

Quy trình P6 có thể được thực hiện trong khí quyển trơ. Khi tiến hành quy trình P6, 1 mol hoặc lượng dư hợp chất có công thức (XIV) và từ 0,01 đến 5 mol bazơ hoặc từ 0,01 đến 5 phần trăm mol

axit thích hợp có thể được sử dụng be trên mỗi mol hợp chất có công thức (XIII). Cũng có thể sử dụng các thành phần phản ứng theo tỷ lệ khác. Việc làm sạch được thực hiện bằng các phương pháp đã biết.

Các quy trình P1, P2, P3, P4, P5 và P6 thường được thực hiện ở áp suất khí quyển. Cũng có thể tiến hành trong điều kiện áp suất tăng cao hoặc giảm thấp.

Khi tiến hành các quy trình P1, P2, P3, P4, P5 và P6, nhiệt độ phản ứng có thể được thay đổi trong khoảng tương đối rộng. Nói chung, các quy trình này được tiến hành ở nhiệt độ từ -78°C đến 200°C , tốt hơn là từ -78°C đến 150°C . Một phương pháp để kiểm soát nhiệt độ cho các quy trình này là sử dụng công nghệ vi sóng.

Nói chung, hỗn hợp phản ứng được cô đặc trong điều kiện áp suất giảm thấp. Phần cặn còn lại có thể được giải phóng bằng các phương pháp đã biết, như sắc ký hoặc kết tinh, khỏi tạp chất bất kỳ mà vẫn còn có mặt.

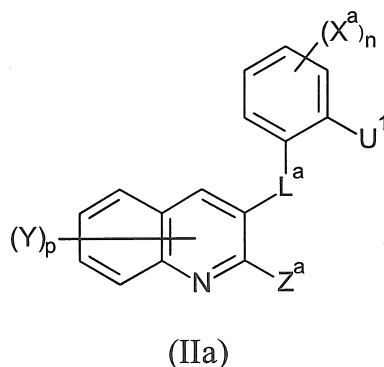
Việc làm sạch được thực hiện bằng các phương pháp thông thường. Nói chung, hỗn hợp phản ứng được xử lý bằng nước và pha hữu cơ được tách ra và, sau khi làm khô, cô đặc trong điều kiện áp suất giảm thấp. Nếu thích hợp, phần cặn còn lại có thể được giải phóng bằng các phương pháp thông thường, như sắc ký, kết tinh hoặc chưng cất, khỏi tạp chất bất kỳ mà vẫn còn có mặt.

Các hợp chất có công thức (I) có thể được điều chế theo các quy trình điều chế chung được mô tả trên đây. Tuy nhiên, có thể hiểu rằng, trên cơ sở kiến thức chung của mình và các công bố có sẵn, người có kỹ năng sẽ có khả năng điều chỉnh các phương pháp này thích hợp theo các đặc trưng của mỗi hợp chất mong muốn tổng hợp.

Các hợp chất trung gian để điều chế các hoạt chất

Sáng chế cũng đề cập đến các hợp chất trung gian để điều chế các hợp chất có công thức (I).

Do đó, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (IIa) cũng như muối chấp nhận được của chúng:



trong đó:

L^a là O, S, CH_2 hoặc NR^6 ;

U^1 là nguyên tử clo, nguyên tử brom, nguyên tử iot, nhóm mesyl, nhóm tosyl hoặc nhóm triflyl;

X^a là nguyên tử halogen, nhóm C_1 - C_8 -alkyl, nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkyl chứa 2 đến 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, nhóm C_1 - C_8 -alkoxy, nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkoxy chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, nhóm C_1 - C_8 -alkylsulfanyl, nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkylsulfanyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, hoặc xyno;

Z^a là nguyên tử hydro, nguyên tử halogen, nhóm C_1 - C_8 -alkyl, nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, nhóm C_1 - C_8 -alkoxy, nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkoxy chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, nhóm C_1 - C_8 -alkylsulfanyl, hoặc nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkylsulfanyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau; và

n, p, Y và R^6 như được xác định ở đây,

với điều kiện là hợp chất có công thức (IIa) không phải là:

- 3-(2-clobenzyl)-2-metoxi-6-(pyridin-3-yl)quinolin [1574532-60-7],
- 3-clo-4-(quinolin-3-ylamino)benzonitril [1407301-89-6],
- 8-flo-3-(3-flo-2-iodophenoxy)quinolin [1314012-45-7],
- 3-[(2-bromophenyl)sulfanyl]quinolin [1299398-51-8],
- N-(2-clophenyl)quinolin-3-amin [1021328-11-9],
- 6-bromo-3-(2-clobenzyl)-2-metoxiquinolin [930406-96-5],
- 2-clo-3-(2-clobenzyl)-6-floquinolin [924658-62-8],
- 2-clo-3-(2-clobenzyl)quinolin [924658-58-2],
- N-[2-bromo-5-(triflometyl)phenyl]quinolin-3-amin [891779-92-3],
- N-(2-bromo-4-clophenyl)quinolin-3-amin [891779-90-1],
- N-(2-bromo-4-metylphenyl)quinolin-3-amin [891779-88-7],
- 3-(2-bromo-4,5-dimetoxibenzyl)quinolin-4-ol [856100-31-7],
- 3-(2-bromo-4,5-dimetoxibenzyl)-4-cloquinolin [856089-71-9],
- 3-(2-clobenzyl)-4-phenyl-8-(triflometyl)quinolin [854770-03-9],
- N-(2-bromophenyl)quinolin-3-amin [848086-11-3], và

- 3-[(2-clophenyl)sulfanyl]-8-nitroquinolin [607743-29-3].

Các hợp chất có công thức (Iia) sau đây cũng được đề cập trong các cơ sở dữ liệu hóa học và/hoặc các cơ sở dữ liệu của nhà cung cấp nhưng không được ưu tiên bất kỳ hoặc không có thông tin để không điều chế và tách chúng:

- 3-clo-4-(quinolin-3-yloxy)benzonitril [1965167-19-4],
- 3-bromo-4-(quinolin-3-yloxy)benzonitril [1925480-59-6],
- 3-bromo-4-(quinolin-3-ylamino)benzonitril [1551935-00-2],
- 6-bromo-2-clo-3-(2-clobenzyl)quinolin [1429750-26-4],
- 6-bromo-3-(2,4-diclobenzyl)-2-metoxiquinolin [930445-54-8], và
- 6-bromo-3-(2,3-diclobenzyl)-2-metoxiquinolin [930406-99-8].

Các hợp chất có công thức (IIa) được ưu tiên theo sáng chế là:

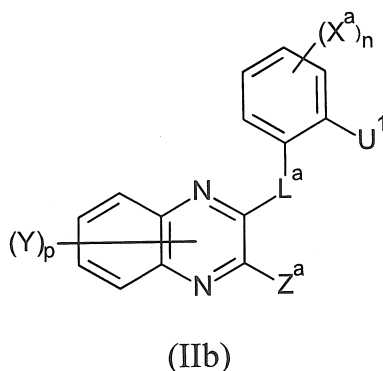
- 3-(3-flo-2-iodophenoxy)quinolin,
- 3-(2-iodophenoxy)quinolin,
- 3-(2-bromophenoxy)quinolin,
- 3-(2-bromophenoxy)-8-floquinolin,
- 3-(2-bromophenoxy)-8-flo-2-metylquinolin,
- 3-(2-bromophenoxy)-7,8-difloquinolin,
- 3-(2-bromophenoxy)-7,8-diflo-2-metylquinolin,
- 3-(2-bromophenoxy)-2-metylquinolin,
- 3-(2-bromo-6-flophenoxy)-7,8-diflo-2-metylquinolin,
- 3-(2-bromo-5-flophenoxy)-7,8-diflo-2-metylquinolin,
- 3-(2-bromo-4-flophenoxy)-8-cloquinolin,
- 3-(2-bromo-4-flophenoxy)-7,8-diflo-2-metylquinolin,
- 3-(2-bromo-4-flophenoxy)-2-metylquinolin,
- 3-(2-bromo-3-metoxypheoxy)-7,8-diflo-2-metylquinolin,
- 3-(2-bromo-3-flophenoxy)-7,8-difloquinolin,
- 3-(2-bromo-3-flophenoxy)-7,8-diflo-2-metylquinolin,
- 3-(2-bromo-3-flophenoxy)-4-metylquinolin,
- 3-(2-bromo-3-flophenoxy)-2-metylquinolin,
- 3-(2-bromo-3-flophenoxy)-2-(diflometyl)quinolin,
- 3-(2-bromo-3-clophenoxy)-7,8-diflo-2-metylquinolin,
- 3-(2-bromo-3-clophenoxy)-2-metylquinolin,

- N-(2-bromo-3-flophenyl)-2-(diflometyl)quinolin-3-amin,
- 8-clo-3-(2-clo-4-flophenoxy)quinolin,
- 3-[2-bromo-3-(triflometoxy)phenoxy]-7,8-diflo-2-metylquinolin,
- 3-[2-bromo-3-(triflometoxy)phenoxy]-2-metylquinolin, và
- 3-(2-bromo-4-clophenoxy)-2-metylquinolin.

Các hợp chất có công thức (II) được ưu tiên khác theo sáng chế là:

- 2-iodo-3-(quinolin-3-yloxy)benzaldehyt,
- [2-iodo-3-(quinolin-3-yloxy)phenyl]metanol,
- 2-{2-bromo-3-[(2-metylquinolin-3-yl)oxy]phenyl}etanol,
- N-{2-bromo-3-[(tetrahydro-2H-pyran-2-yloxy)metyl]phenyl}quinolin-3-amin,
- 3-{2-iodo-3-[(tetrahydro-2H-pyran-2-yloxy)metyl]phenoxy}quinolin,
- 3-(2-bromo-5-nitrophenoxy)-7,8-diflo-2-metylquinolin,
- (2-bromophenyl)(quinolin-3-yl)metanon, và
- 3-[2-bromo-3-(2-cloetyl)phenoxy]-2-metylquinolin.

Sáng chế cũng đề cập đến các hợp chất có công thức (IIb) cũng như muối chấp nhận được của chúng:



trong đó:

L^a là O, S, CH_2 hoặc NR^6 ; U^1 là nguyên tử clo, nguyên tử brom, nguyên tử iot, nhóm mesyl, nhóm tosyl hoặc nhóm triflyl;

X^a là nguyên tử halogen, nhóm C_1 - C_8 -alkyl, nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkyl chứa 2 đến 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, nhóm C_1 - C_8 -alkoxy, nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkoxy chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, nhóm C_1 - C_8 -alkylsulfanyl, nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkylsulfanyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, hoặc xyano;

Z^a là nguyên tử hydro, nguyên tử halogen, nhóm C_1 - C_8 -alkyl, nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau,

nhóm C₁-C₈-alkoxy, nhóm C₁-C₈-halogenoalkoxy chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, nhóm C₁-C₈-alkylsulfanyl, hoặc nhóm C₁-C₈-halogenoalkylsulfanyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau; và

n, p, Y và R⁶ như được xác định ở đây,

với điều kiện là hợp chất có công thức (IIb) không phải là:

- 2-(2-clophenoxy)-3-metylquinoxalin [1792986-07-2],
- 2-bromo-3-[(2-bromo-4-clophenyl)sulfanyl]quinoxalin [1674381-01-1],
- 2-bromo-3-(2-bromo-4-clophenoxy)quinoxalin [1674380-91-6],
- 2-(2-iodophenoxy)quinoxalin [1055190-73-2],
- N-[2,6-diclo-4-(triflometyl)phenyl]-3-(triflometyl)quinoxalin-2-amin [803726-02-5],
- N-(2-clophenyl)-3-metylquinoxalin-2-amin [438481-21-1],
- 2-[(2-clophenyl)sulfanyl]-3-(triflometyl)quinoxalin [338773-65-2],
- 2-[(2-clophenyl)sulfanyl]quinoxalin [338394-57-3],
- 2-(2-bromophenoxy)quinoxalin [223592-42-5],
- 2-(2-clophenoxy)quinoxalin [223592-28-7],
- N-(2,4-diclophenyl)quinoxalin-2-amin [128499-91-2], và
- 2-(2-clobenzyl)quinoxalin [108852-34-2].

Các hợp chất có công thức (IIb) sau đây cũng được đề cập trong các cơ sở dữ liệu hóa học và/hoặc các cơ sở dữ liệu của nhà cung cấp nhưng không được ưu tiên bất kỳ hoặc không có thông tin để không điều chế và tách chúng:

- 2-(2-bromo-4-metoxypheoxy)-3-metylquinoxalin [1921330-33-7],
- 2-(2-bromo-4-metoxypheoxy)quinoxalin [1918929-81-3],
- 2-(2-bromophenoxy)-3-cloquinoxalin [1546723-03-8],
- 2-(2-bromo-5-flophenoxy)-3-metylquinoxalin [1540198-72-8],
- 2-(2-bromo-5-flophenoxy)quinoxalin [1503431-97-7],
- 2-(5-bromo-2-clophenoxy)quinoxalin [1468741-12-9],
- 2-(2-bromo-4-flophenoxy)quinoxalin [1460342-41-9],
- 2-(2-bromo-4-flophenoxy)-3-metylquinoxalin [1458220-97-7],
- 2-(2-iodophenoxy)-3-metylquinoxalin [1457170-20-5],
- 2-(2-bromo-4-metylphenoxy)-3-metylquinoxalin [1455256-50-4],

- 2-(5-bromo-2-clophenoxy)-3-metylquinoxalin [1406847-74-2],
- 2-(2-bromo-4-clophenoxy)quinoxalin [1356750-37-2],
- 2-(2-bromophenoxy)-3-metylquinoxalin [1285665-15-7],
- 2-(2-bromo-4-metylphenoxy)quinoxalin [1275144-84-7],
- 2-(2-clo-4-flophenoxy)-3-metylquinoxalin [1181513-80-3],
- N-(2-clo-4-flophenyl)quinoxalin-2-amin [1029754-17-3],
- N-(2-clo-4-metylphenyl)quinoxalin-2-amin [933029-23-3],
- 2-clo-3-(2-clophenoxy)quinoxalin [930037-00-6],
- 6,7-diclo-2-(2,4,6-triclophenoxy)-3-(triflometyl)quinoxalin [478040-16-3],
- 6,7-diclo-2-(2,6-diclophenoxy)-3-(triflometyl)quinoxalin [478040-14-1],
- N-(2,4-diclophenyl)-3-metylquinoxalin-2-amin [438481-37-9], và
- 3-clo-N-(2-clophenyl)quinoxalin-2-amin [372172-51-5].

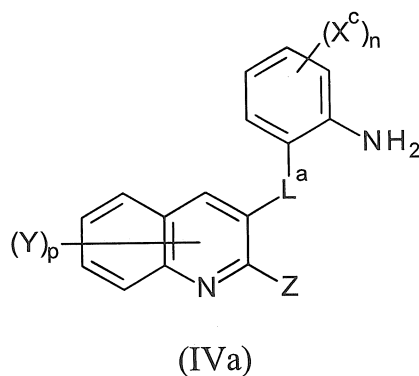
Các hợp chất có công thức (Iib) được ưu tiên theo sáng chế là:

- 2-(2-bromophenoxy)-5,6-difloquinoxalin,
- 2-(2-bromophenoxy)-5,6-diflo-3-metylquinoxalin,
- 2-(2-bromo-6-metylphenoxy)-5,6-diflo-3-metylquinoxalin,
- 2-(2-bromo-6-flophenoxy)-5,6-diflo-3-metylquinoxalin,
- 2-(2-bromo-6-clophenoxy)-5,6-diflo-3-metylquinoxalin,
- 2-(2-bromo-5-metylphenoxy)-5,6-diflo-3-metylquinoxalin,
- 2-(2-bromo-5-flophenoxy)-5,6-diflo-3-metylquinoxalin,
- 2-(2-bromo-5-clophenoxy)-5,6-diflo-3-metylquinoxalin,
- 2-(2-bromo-4-metylphenoxy)-5,6-diflo-3-metylquinoxalin,
- 2-(2-bromo-4-flophenoxy)-5,6-diflo-3-metylquinoxalin,
- 2-(2-bromo-4-clophenoxy)-5,6-diflo-3-metylquinoxalin,
- 2-(2-bromo-3-metylphenoxy)-5,6-diflo-3-metylquinoxalin,
- 2-(2-bromo-3-metoxypheoxy)-5,6-diflo-3-metylquinoxalin,
- 2-(2-bromo-3-flophenoxy)quinoxalin,
- 2-(2-bromo-3-flophenoxy)-5,6-difloquinoxalin,
- 2-(2-bromo-3-flophenoxy)-5,6-diflo-3-metylquinoxalin,
- 2-(2-bromo-3-flophenoxy)-3-metylquinoxalin,
- 2-(2-bromo-3-clophenoxy)-5,6-diflo-3-metylquinoxalin,
- 5-bromo-4-[(5,6-difloquinoxalin-2-yl)oxy]-2-flobenzonitril,

- 4-bromo-3-[(5,6-diflo-3-metylquinoxalin-2-yl)oxy]benzonitril,
- 3-bromo-2-[(5,6-difloquinoxalin-2-yl)oxy]-4-flobenzonitril,
- 2-bromo-3-[(5,6-diflo-3-metylquinoxalin-2-yl)oxy]benzonitril, và
- 2-[2-bromo-3-(triflometoxy)phenoxy]-5,6-diflo-3-metylquinoxalin.

Các hợp chất có công thức (II) được ưu tiên khác theo sáng chế là 2-bromo-3-[(5,6-difloquinoxalin-2-yl)oxy]benzaldehyt.

Sáng chế cũng đề cập đến các hợp chất có công thức (IVa) cũng như muối chấp nhận được của chúng:



trong đó:

L^a là O, S, CH_2 hoặc NR^6 ;

X^c là nguyên tử halogen, nhóm C_1 - C_8 -alkyl, nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, nhóm C_1 - C_8 -alkoxy, nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkoxy chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, nhóm C_1 - C_8 -alkylsulfanyl, nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkylsulfanyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, hoặc xyano; và

n, p, Y, Z và R^6 như được xác định ở đây,

với điều kiện là hợp chất có công thức (IVa) không phải là:

- 2-clo-6-[(8-floquinolin-3-yl)oxy]anilin [1417192-69-8],
 - 2-flo-6-[(8-floquinolin-3-yl)oxy]anilin [1417192-68-7],
 - 4-[3-(2-aminophenoxy)-7-chloroquinolin-4-yl]-5-metoxi-2-metyl-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-on [1099507-90-0],
 - 3-[(2-aminophenyl)sulfanyl]-6-clo-4-phenylquinolin-2(1H)-on [727373-79-7],
- và
- 2-[(2-metylquinolin-3-yl)metyl]anilin [412336-26-6].

Các hợp chất có công thức (IVa) sau đây cũng được đề cập trong các cơ sở dữ liệu hóa học và/hoặc các cơ sở dữ liệu của nhà cung cấp nhưng không được ưu tiên bất kỳ hoặc không có thông tin để không điều chế và tách chúng:

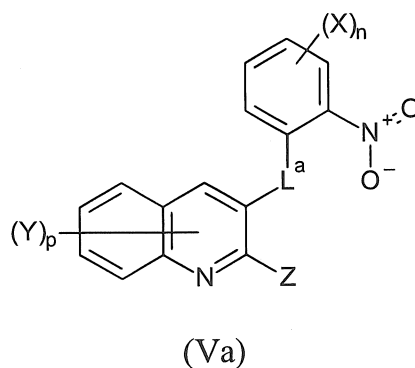
- 2-clo-6-(quinolin-3-yloxy)anilin [1965174-36-0],
- 2-etoxy-6-(quinolin-3-yloxy)anilin [1962433-63-1],
- 3-amino-4-(quinolin-3-yloxy)benzonitril [1962433-62-0],
- 3,4-diflo-2-(quinolin-3-yloxy)anilin [1961697-86-8],
- 4-clo-5-flo-2-(quinolin-3-yloxy)anilin [1936776-00-9],
- 2-metyl-6-(quinolin-3-yloxy)anilin [1931475-56-7],
- 3-metyl-2-(quinolin-3-yloxy)anilin [1929234-81-0],
- 5-clo-4-flo-2-(quinolin-3-yloxy)anilin [1929234-79-6],
- 4-clo-2-(quinolin-3-yloxy)anilin [1929231-29-7],
- 2-amino-3-(quinolin-3-yloxy)benzonitril [1929005-25-3],
- 4-metoxy-2-(quinolin-3-yloxy)anilin [1928990-92-4],
- 5-metyl-2-(quinolin-3-yloxy)anilin [1928990-89-9],
- 4-bromo-2-(quinolin-3-yloxy)anilin [1928857-57-1],
- 5-bromo-2-(quinolin-3-yloxy)anilin [1928857-56-0],
- 5-clo-2-(quinolin-3-yloxy)anilin [1928857-55-9],
- 4-metyl-2-(quinolin-3-yloxy)anilin [1928857-54-8],
- 5-flo-2-(quinolin-3-yloxy)anilin [1928620-30-7],
- 5-flo-4-metoxy-2-(quinolin-3-yloxy)anilin [1928620-20-5],
- 4,5-diclo-2-(quinolin-3-yloxy)anilin [1927506-45-3],
- 2-metoxy-6-(quinolin-3-yloxy)anilin [1927506-43-1],
- 4-amino-3-(quinolin-3-yloxy)benzonitril [1927506-39-5],
- 4-flo-5-iodo-2-(quinolin-3-yloxy)anilin [1927139-87-4],
- 2-(quinolin-3-yloxy)anilin [1927139-86-3],
- 2-flo-6-(quinolin-3-yloxy)anilin [1927074-28-9],
- 2,4-diflo-6-(quinolin-3-yloxy)anilin [1926935-19-4],
- 4-flo-2-(quinolin-3-yloxy)anilin [1926934-99-7],
- 3-clo-2-(quinolin-3-yloxy)anilin [1925620-69-4],
- 4-bromo-5-flo-2-(quinolin-3-yloxy)anilin [1925620-65-0],
- 5-bromo-4-flo-2-(quinolin-3-yloxy)anilin [1925620-60-5],

- 5-iodo-2-(quinolin-3-yloxy)anilin [1925480-40-5],
- 5-flo-4-metyl-2-(quinolin-3-yloxy)anilin [1925480-34-7], và
- 5-metoxi-2-(quinolin-3-yloxy)anilin [1925480-32-5].

Các hợp chất có công thức (IVa) được ưu tiên theo sáng chế là:

- N-(quinolin-3-yl)benzen-1,2-diamin,
- 2-flo-6-[(2-metylquinolin-3-yl)oxy]anilin,
- 2-[(7,8-difloquinolin-3-yl)oxy]anilin,
- 2-[(7,8-difloquinolin-3-yl)oxy]-6-floanilin,
- 2-[(7,8-diflo-2-metylquinolin-3-yl)oxy]anilin,
- 2-[(7,8-diflo-2-metylquinolin-3-yl)oxy]-6-floanilin và
- 2-[(2-metylquinolin-3-yl)oxy]anilin.

Sáng chế cũng đề cập đến các hợp chất có công thức (Va) cũng như muối chấp nhận được của chúng:



trong đó:

L^a là O, S, CH_2 hoặc NR^6 ; và

n, p, X, Y, Z và R^6 như được xác định ở đây,

với điều kiện là hợp chất có công thức (Va) không phải là:

- N-[2,6-dinitro-4-(triflometyl)phenyl]quinolin-3-amin [1638502-56-3],
- N-(2,4-dinitrophenyl)quinolin-3-amin [1638502-54-1],
- 3-(3-clo-2-nitrophenoxy)-8-floquinolin [1417192-66-5],
- 8-flo-3-(3-flo-2-nitrophenoxy)quinolin [1417192-65-4],
- 3-(2-nitrophenoxy)quinolin [1417192-64-3],
- N-(4,6-dimetyl-2-oxo-1,2-dihydroquinolin-3-yl)-N-(5-metyl-2,4-dinitrophenyl)axetamit [107403-93-0],
- N-(4,6-dimetyl-2-oxo-1,2-dihydroquinolin-3-yl)-N-(2-nitrophenyl)axetamit [107403-92-9],

- 4,6-dimetyl-3-[(5-metyl-2,4-dinitrophenyl)amino]quinolin-2(1H)-on [107403-91-8],
- 4,6-dimetyl-3-[(2-nitrophenyl)amino]quinolin-2(1H)-on [107403-90-7], và
- 3-[(2-nitrophenyl)sulfanyl]quinolin [100461-52-7].

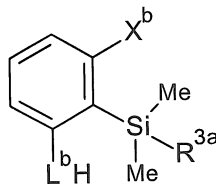
Các hợp chất có công thức (Va) sau đây cũng được đề cập trong các cơ sở dữ liệu hóa học và/hoặc các cơ sở dữ liệu của nhà cung cấp nhưng không được ưu tiên bất kỳ hoặc không có thông tin để không điều chế và tách chúng:

- 3-(4-bromo-2-nitrophenoxy)quinolin [1973729-88-2],
- 2-nitro-3-(quinolin-3-yloxy)anilin [1961752-50-0],
- 3-(3-clo-2-nitrophenoxy)quinolin [1928857-81-1],
- 3-(3-flo-2-nitrophenoxy)quinolin [1928857-78-6],
- N-(4-bromo-2-nitrophenyl)quinolin-3-amin [1408734-82-6],
- 4-hydroxy-3-[(2-nitrophenyl)sulfanyl]quinolin-2(1H)-on [685890-60-2], và
- 4-[(7-metoxiquinolin-3-yl)amino]-5-nitrophthalonitril [540512-77-4].

Các hợp chất có công thức (Va) được ưu tiên theo sáng chế là:

- 7,8-diflo-3-(3-flo-2-nitrophenoxy)quinolin,
- 7,8-diflo-3-(3-flo-2-nitrophenoxy)-2-metylquinolin,
- 7,8-diflo-3-(2-nitrophenoxy)quinolin,
- 7,8-diflo-2-metyl-3-(2-nitrophenoxy)quinolin,
- 3-(3-flo-2-nitrophenoxy)quinolin,
- 3-(3-flo-2-nitrophenoxy)-2-metylquinolin, và
- 2-metyl-3-(2-nitrophenoxy)quinolin.

Sáng chế cũng đề cập đến các hợp chất có công thức (IXa):



(IXa)

trong đó:

X^b là nguyên tử hydro, nguyên tử clo hoặc nguyên tử flo;

L^b là O, S và NH; và

R^{3a} là nguyên tử hydro; hoặc C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau; C_2 - C_8 -alkenyl không được thế hoặc được thế; C_2 - C_8 -alkynyl không được thế hoặc được thế; C_3 - C_7 -xycloalkyl không được thế hoặc được thế; C_4 - C_7 -xycloalkenyl không được thế hoặc được thế; aryl không được thế hoặc được thế; aryl- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; heteroxyclyl không được thế hoặc được thế; heteroxyclyl- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; hydroxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkoxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkylcacbonyloxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; aryloxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; heteroxyclyloxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; amino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; di- C_1 - C_8 -alkylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; arylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; di-arylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; heteroxyclylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkylcacbonylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkoxycarbonylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkylsulfanyl- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkylsulfinyl- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkylsulfonyl- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế hoặc xyano- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế;

với điều kiện là hợp chất có công thức (IXa) không phải là:

- 2-[dimetyl(phenyl)silyl]anilin [1819368-37-0],
- 3-flo-2-(trimetylsilyl)phenol [1808920-27-5],
- 3-clo-2-(trimetylsilyl)phenol [1808920-08-2],
- 2-[heptyl(dimetyl)silyl]anilin [1427772-62-0],
- 2-[hexyl(dimetyl)silyl]anilin [217662-68-5],
- 2,2'-(dimetylsilandiyl)diphenol [122397-35-7],
- 2,2'-(dimetylsilandiyl)dibenzenthioi [117526-69-9],
- 2-{dimetyl[(trimetylsilyl)metyl]silyl}benzenthioi [117526-66-6],
- 2-[tert-butyl(dimetyl)silyl]benzenthioi [117526-58-6],
- 2-[tert-butyl(dimetyl)silyl]phenol [82772-29-0],
- 2-(trimetylsilyl)anilin [57792-17-3],
- 2-(dimetylsilyl)phenol [33367-00-9],

- 2-(trimethylsilyl)benzenthion [33356-45-5], và
- 2-(trimethylsilyl)phenol [15288-53-6].

Các hợp chất có công thức (IXa) sau đây cũng được đề cập trong các cơ sở dữ liệu hóa học và/hoặc các cơ sở dữ liệu của nhà cung cấp nhưng không được ưu tiên bất kỳ hoặc không có thông tin để không điều chế và tách chúng:

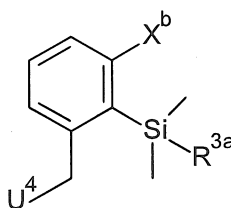
- 2-[{4-[(2-ethylhexyl)oxy]phenyl}(dimethyl)silyl]phenol [1398044-32-0], và
- 2-[allyl(dimethyl)silyl]benzenthion [699532-17-7].

Các hợp chất có công thức (IXa) được ưu tiên theo sáng chế là:

- 3-fluoro-2-[isopropyl(dimethyl)silyl]phenol,
- 2-[isopropyl(dimethyl)silyl]phenol,
- 2-[isobutyl(dimethyl)silyl]phenol,
- 2-[ethyl(dimethyl)silyl]phenol,
- 2-[cyclohexyl(dimethyl)silyl]phenol, và
- 2-[benzyl(dimethyl)silyl]phenol.

Các hợp chất có công thức (IXa) được ưu tiên khác theo sáng chế là 2-(triethylsilyl)phenol và 3-fluoro-2-(triethylsilyl)phenol.

Sáng chế cũng đề cập đến các hợp chất có công thức (XIa):



(XIa)

trong đó:

X^b là nguyên tử hydro, nguyên tử clo hoặc nguyên tử flo;

U^4 là nguyên tử brom, nguyên tử clo, nguyên tử iot, nhóm mesyl, nhóm tosyl hoặc nhóm triflyl; và

R^{3a} là nguyên tử hydro; hoặc C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau; C_2 - C_8 -alkenyl không được thế hoặc được thế; C_2 - C_8 -alkynyl không được thế hoặc được thế; C_3 - C_7 -xycloalkyl không được thế hoặc được thế; C_4 - C_7 -xycloalkenyl không được thế hoặc được thế; aryl không được thế hoặc được thế; aryl- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; heteroxyclyl không được thế hoặc được thế; heteroxyclyl- C_1 - C_8 -alkyl

không được thế hoặc được thế; hydroxy-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; C₁-C₈-alkoxy-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; C₁-C₈-alkylcacbonyloxy-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; aryloxy-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; heteroxyclyloxy-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; amino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; C₁-C₈-alkylamino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; di-C₁-C₈-alkylamino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; arylamino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; di-arylamino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; heteroxyclylamino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; C₁-C₈-alkylcacbonylamino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; C₁-C₈-alkoxycacbonylamino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; C₁-C₈-alkylsulfanyl-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; C₁-C₈-alkylsulfinyl-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; C₁-C₈-alkylsulfonyl-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế hoặc xyano-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế;

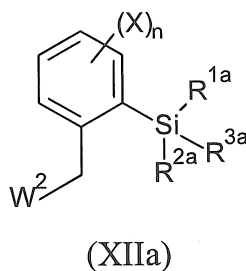
với điều kiện là hợp chất có công thức (XIa) không phải là:

- [2-(clometyl)phenyl](trimetyl)silan [1379234-14-6],
- [2-(bromometyl)phenyl](3-clopropyl)dimetylsilan [130284-14-9],
- [2-(iodometyl)phenyl](trimetyl)silan [126328-94-7],
- [2-(bromometyl)phenyl](clometyl)dimetylsilan [54848-87-2],
- bis[2-(bromometyl)phenyl](dimetyl)silan [19421-15-9], và
- [2-(bromometyl)phenyl](trimetyl)silan [17903-43-4].

Các hợp chất có công thức (XIa) được ưu tiên theo sáng chế là: - 5-{[2-(bromometyl)phenyl](dimetyl)silyl}-2-clopyridin,

- [2-(iodometyl)phenyl](dimetyl)phenylsilan,
- [2-(bromometyl)phenyl](dimetyl)phenylsilan,
- [2-(bromometyl)phenyl](dimetyl)2-thienylsilan,
- [2-(bromometyl)phenyl](dimetyl)(4-phenoxyphenyl)silan,
- [2-(bromometyl)phenyl](4-clophenyl)dimetylsilan,
- benzyl[2-(bromometyl)phenyl]dimetylsilan,
- biphenyl-4-yl[2-(bromometyl)phenyl]dimetylsilan, và
- (4-benzylphenyl)[2-(bromometyl)phenyl]dimetylsilan.

Sáng chế cũng đề cập đến các hợp chất có công thức (XIIa):



trong đó:

W^2 là dẫn xuất bo như axit boronic, este boronic hoặc dẫn xuất kali trifloborat; R^{1a} và R^{2a} độc lập là C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, C_2 - C_8 -alkenyl không được thế hoặc được thế, C_3 - C_7 -xycloalkyl không được thế hoặc được thế, aryl không được thế hoặc được thế, heteroxyclyl không được thế hoặc được thế;

R^{3a} là nguyên tử hydro; hoặc C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau; C_2 - C_8 -alkenyl không được thế hoặc được thế; C_2 - C_8 -alkynyl không được thế hoặc được thế; C_3 - C_7 -xycloalkyl không được thế hoặc được thế; C_4 - C_7 -xycloalkenyl không được thế hoặc được thế; aryl không được thế hoặc được thế; aryl- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; heteroxyclyl không được thế hoặc được thế; heteroxyclyl- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; hydroxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkoxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkylcacbonyloxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; aryloxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; heteroxyclyloxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; amino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; di- C_1 - C_8 -alkylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; arylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; di-arylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; heteroxyclylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkylcacbonylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkoxycarbonylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkylsulfanyl- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkylsulfinyl- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkylsulfonyl- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; hoặc xyano- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; và

n và X như được xác định ở đây,

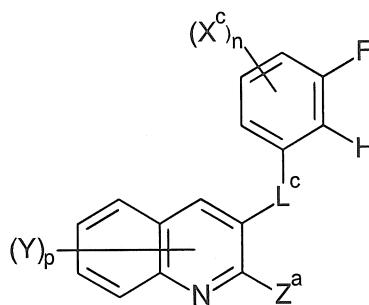
với điều kiện là hợp chất có công thức (XIIa) không phải là:

- dimethyl{2-[(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)methyl]phenyl}silan
[1639367-72-8],
- methyl(phenyl){2-[(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)methyl]phenyl}silan
[1639367-73-9], và
- diphenyl{2-[(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)methyl]phenyl}silan
[1639367-74-0].

Hợp chất có công thức (XIIa) được ưu tiên theo sáng chế là

- trimethyl{2-[(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)methyl]phenyl}silan.

Sáng chế cũng đề cập đến các hợp chất có công thức (VIIa) cũng như muối chấp nhận được của chúng:



(VIIa)

trong đó:

L^c là O hoặc S;

X^c là nguyên tử halogen, nhóm C_1 - C_8 -alkyl, nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, nhóm C_1 - C_8 -alkoxy, nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkoxy chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, nhóm C_1 - C_8 -alkylsulfanyl, nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkylsulfanyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, hoặc xyano;

Z^a là nguyên tử hydro, nguyên tử halogen, nhóm C_1 - C_8 -alkyl, nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, nhóm C_1 - C_8 -alkoxy, nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkoxy chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, nhóm C_1 - C_8 -alkylsulfanyl, hoặc nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkylsulfanyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau; và

n , p và Y như được xác định ở đây,

với điều kiện là hợp chất có công thức (VIIa) không phải là:

- 3-[(3-flophenyl)sulfanyl]quinolin [1299398-31-4],
- 8-clo-3-[(3-flophenyl)sulfanyl]quinolin [1060579-26-1],
- 3-[(3-flophenyl)sulfanyl]-8-iodoquinolin [607743-40-8],
- 3-[(3-flophenyl)sulfanyl]quinolin-8-amin [607743-39-5], và
- 3-[(3-clophenyl)sulfanyl]-8-nitroquinolin [607743-33-9].

Các hợp chất có công thức (VIIa) sau đây cũng được đề cập trong các cơ sở dữ liệu hóa học và/hoặc các cơ sở dữ liệu của nhà cung cấp nhưng không được ưu tiên bất kỳ hoặc không có thông tin để không điều chế và tách chúng:

- 3-flo-5-(quinolin-3-yloxy)benzonitril [1961698-21-4], và
- 3-[3-(clometyl)-5-flophenoxy]quinolin [1927507-05-8].

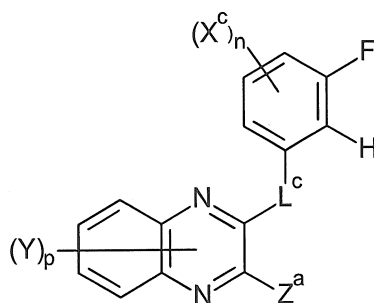
Các hợp chất có công thức (VIIa) được ưu tiên theo sáng chế là:

- 2-clo-3-(3-flophenoxy)quinolin,
- 2-etoxy-3-(3-flophenoxy)quinolin,
- 3-(3-flophenoxy)-2-(metylsulfanyl)quinolin,
- 3-(3-flophenoxy)-2-metylquinolin,
- 3-(3-flophenoxy)quinolin, và
- 3-(3-flophenoxy)quinolin 1-oxit.

Các hợp chất có công thức (VII) được ưu tiên khác theo sáng chế là:

- (3-flophenyl)(quinolin-3-yl)metanol,
- (3-flophenyl)(quinolin-3-yl)metanon,
- 2-(diflometyl)-N-(3-flophenyl)quinolin-3-amin,
- 3-[(3-flophenyl)sulfinyl]quinolin, và
- 3-[(3-flophenyl)sulfonyl]quinolin.

Sáng chế cũng đề cập đến các hợp chất có công thức (VIIb) cũng như muối chấp nhận được của chúng:



(VIIb)

trong đó:

L^c là O hoặc S;

X^c là nguyên tử halogen, nhóm C_1 - C_8 -alkyl, nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, nhóm C_1 - C_8 -alkoxy, nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkoxy chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, nhóm C_1 - C_8 -alkylsulfanyl, nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkylsulfanyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, hoặc xyano;

Z^a là nguyên tử hydro, nguyên tử halogen, nhóm C_1 - C_8 -alkyl, nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, nhóm C_1 - C_8 -alkoxy, nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkoxy chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, nhóm C_1 - C_8 -alkylsulfanyl, hoặc nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkylsulfanyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau; và

n, p và Y như được xác định ở đây,

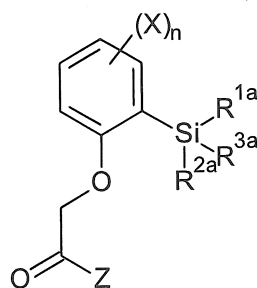
Với điều kiện là hợp chất có công thức (VIIb) không phải là 2-(4-clo-3-flophenoxy)-3-metylquinoxalin [477870-89-6].

Các hợp chất có công thức (VIIb) sau đây

cũng được đề cập trong các cơ sở dữ liệu hóa học và/hoặc các cơ sở dữ liệu của nhà cung cấp nhưng không được ưu tiên bất kỳ hoặc không có thông tin để không điều chế và tách chúng:

- 2-(2-bromo-5-flophenoxy)-3-metylquinoxalin [1540198-72-8],
- 2-(3-bromo-5-flophenoxy)-3-metylquinoxalin [1506611-98-8],
- 2-(3-bromo-5-flophenoxy)quinoxalin [1504501-15-8],
- 2-(2-bromo-5-flophenoxy)quinoxalin [1503431-97-7],
- 2-(4-bromo-3-flophenoxy)-3-metylquinoxalin [1486151-04-5],
- 2-(4-bromo-3-flophenoxy)quinoxalin [1478282-37-9], và
- 6,7-diclo-2-(4-clo-3-flophenoxy)-3-(triflometyl)quinoxalin [478039-58-6].

Sáng chế cũng đề cập đến các hợp chất có công thức (XIV) cũng như muối chấp nhận được của chúng:



(XIV)

trong đó:

R^{1a} và R^{2a} độc lập là C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, C_2 - C_8 -alkenyl không được thế hoặc được thế, C_3 - C_7 -xycloalkyl không được thế hoặc được thế, aryl không được thế hoặc được thế, heteroxyclyl không được thế hoặc được thế;

R^{3a} là nguyên tử hydro; hoặc C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau; C_2 - C_8 -alkenyl không được thế hoặc được thế; C_2 - C_8 -alkynyl không được thế hoặc được thế; C_3 - C_7 -xycloalkyl không được thế hoặc được thế; C_4 - C_7 -xycloalkenyl không được thế hoặc được thế; aryl không được thế hoặc được thế; aryl- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; heteroxyclyl không được thế hoặc được thế; heteroxyclyl- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; hydroxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkoxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkylcarbonyloxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; aryloxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; heteroxyclyloxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; amino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; di- C_1 - C_8 -alkylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; arylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; di-arylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; heteroxyclylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkylcarbonylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkoxycarbonylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkylsulfonyl- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkylsulfinyl- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkylsulfonyl- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế hoặc xyano- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế;

và n, X và Z như được xác định ở đây,

với điều kiện là hợp chất có công thức (XIV) không phải là:

- 2-[2-bromo-6-(trimethylsilyl)phenoxy]-1-phenyletanon [918304-52-6],

- methyl {2-[methoxy(dimethyl)silyl]phenoxy}acetat [187871-83-6],
- N-[2-(dimethylamino)ethyl]-2-[2-(trimethylsilyl)phenoxy]acetamid [126485-69-6],
- 2-(dimethylamino)ethyl [2-(trimethylsilyl)phenoxy]acetat [126485-64-1],
- butyl {2-[methoxy(dimethyl)silyl]phenoxy}acetat [122397-19-7],
- ethyl [2-(trimethylsilyl)phenoxy]acetat [104653-63-6], và
- axit [2-(trimethylsilyl)phenoxy]acetic [104653-62-5].

Hợp chất có công thức (XIV) được ưu tiên theo sáng chế là 1-[2-(trimethylsilyl)phenoxy]axeton.

Chế phẩm và chế phẩm phối chế

Sáng chế cũng đề cập đến chế phẩm, cụ thể là chế phẩm để phòng trừ vi sinh vật không mong muốn, chứa một hoặc nhiều hợp chất thức (I). Chế phẩm này tốt hơn là chế phẩm diệt nấm.

Chế phẩm này thường chứa một hoặc nhiều hợp chất có công thức (I) và một hoặc nhiều chất mang chấp nhận được, cụ thể là một hoặc nhiều chất mang chấp nhận được trong nông nghiệp.

Chất mang là chất vô cơ hoặc hữu cơ tự nhiên hoặc tổng hợp mà các thành phần hoạt tính được phối trộn hoặc kết hợp nó để có khả năng ứng dụng tốt hơn, cụ thể là để ứng dụng cho thực vật, bộ phận của thực vật hoặc hạt tốt hơn. Chất mang, mà có thể là rắn hoặc lỏng, thường trơ.

Ví dụ về các chất mang rắn thích hợp bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, muối amoni, bột đá tự nhiên, như cao lanh, đất sét, talc, đá phấn, thạch anh, attapulgit, montmorillonit hoặc đất diatomit, và bột đá tổng hợp, như silic oxit nghiền mịn, nhôm oxit và các silicat. Ví dụ về các chất mang rắn hữu dụng điển hình để tạo hạt mịn bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, đá tự nhiên nghiền và phân mảnh như canxit, đá hoa cương, đá bọt, sepiolit, dolomit và các hạt mịn tổng hợp từ bột vô cơ và hữu cơ và hạt mịn từ vật liệu hữu cơ như giấy, mùn cưa, vỏ dừa, lõi ngô và cuống thuốc lá.

Ví dụ về các chất mang lỏng thích hợp bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, nước, các chất lỏng hữu cơ phân cực và không phân cực, ví dụ từ nhóm các hydrocacbon thơm và không thơm (như xyclohexan, parafin, alkylbenzen, xylen, toluen alkylnaphtalen, các hydrocacbon thơm được clo hóa hoặc béo được clo hóa như clobenzen, cloetylen hoặc metylen clorua), các rượu và rượu đa chức (mà tùy ý cũng có thể được este hóa và/hoặc este hóa, như butanol hoặc glycol), các keton (như axeton, methyl ethyl keton,

metyl isobutyl keton xyclohexanon), các este (bao gồm chất béo và dầu) và các (poly)ete, các amin không được thế và được thế, các amit (như dimetylformamit), các lactam (như N-alkylpyrrolidon) và các lacton, sulphon và sulphoxit (như dimetyl sulphoxit). Chất mang cũng có thể là chất độn dạng khí hóa lỏng, tức là chất lỏng ở dạng khí ở nhiệt độ tiêu chuẩn và áp suất tiêu chuẩn, ví dụ các chất đẩy dạng sol khí như halohydrocacbon, butan, propan, nitơ và cacbon dioxit.

Chế phẩm có thể còn chứa một hoặc nhiều chất phụ trợ chấp nhận được mà thường để phối chế chế phẩm (ví dụ các chế phẩm hóa nông), như một hoặc nhiều chất hoạt động bề mặt.

Ví dụ về các chất hoạt động bề mặt thích hợp bao gồm chất nhũ hóa và/hoặc chất tạo bọt, chất phân tán hoặc chất làm ẩm có đặc tính ion hoặc không ion, hoặc hỗn hợp của chúng. Ví dụ về các chất này là muối của axit polyacrylic, muối của axit lignosulphonic, muối của axit phenolsulphonic hoặc axit naphtalensulphonic, sản phẩm trùng ngưng của etylen và/hoặc propylen oxit với rượu béo, axit béo hoặc amin béo (các este của polyoxyetylen và axit béo, các ete polyoxyetylen của rượu béo, ví dụ alkylaryl polyglycol ete), phenol được thế (tốt hơn là alkylphenol hoặc arylphenol), muối của este của sulphosuccinic, dẫn xuất taurin (tốt hơn là alkyl taurat), este phosphoric của rượu polyetoxyl hóa hoặc phenol, este béo của polyol, và dẫn xuất của hợp chất chứa sulphat, sulphonat và phosphat, ví dụ alkylaryl polyglycol ete, alkylsulphonat, alkylsulphat, arylsulphonat, dịch thủy phân protein, dịch thải lignosulphit và metylxenluloza. Chất hoạt động bề mặt thường được sử dụng khi thành phần hoạt tính và/hoặc chất mang không hòa tan trong nước và việc ứng dụng được thực hiện với nước. Khi đó, lượng chất hoạt động bề mặt thường nằm trong khoảng từ 5 đến 40% khối lượng của chế phẩm.

Các ví dụ khác về chất phụ trợ mà thường để phối chế các chế phẩm hóa nông bao gồm chất đẩy nước, chất hút ẩm, chất liên kết (chất kết dính, chất dính, tác nhân cố định, như carboxymetylxenluloza, các polyme tự nhiên và tổng hợp ở dạng bột, hạt mịn hoặc nhựa, như gôm arabic, rượu polyvinyl và polyvinyl axetat, các phospholipit tự nhiên như xephalin và lexithin và các phospholipit tổng hợp, polyvinylpyrrolidon, polyvinyl axetat, rượu polyvinyl và tyloza), chất làm đặc, chất ổn định (ví dụ chất ổn định trong điều kiện lạnh, chất bảo quản, chất chống oxy hóa, chất ổn định ánh sáng, hoặc các chất khác mà cải thiện độ ổn định hóa học và/hoặc vật lý), thuốc nhuộm hoặc chất màu (như chất màu vô cơ, ví dụ sắt oxit, titan oxit và xanh Prussian; thuốc nhuộm hữu cơ, ví dụ

alizarin, azo và thuốc nhuộm phtaloxyanin kim loại), chất chống tạo bọt (ví dụ chất chống tạo bọt silicon và magie stearat), chất bảo quản (ví dụ diclophen và rượu benzylic hemiformal), các chất làm đặc thứ cấp (các dẫn xuất xenluloza, các dẫn xuất axit acrylic, xanthan, đất sét biến tính và silic oxit nghiền mịn), chất kết dính, gibberelin và các chất phụ trợ gia công, các dầu khoáng và dầu thực vật, nước hoa, sáp và chất dinh dưỡng (bao gồm các chất dinh dưỡng vi lượng, như muối của sắt, mangan, bo, đồng, coban, molybden và kẽm), các chất keo bảo vệ, các chất thuận nghịch sol-gel, chất thấm, tác nhân chelat hóa và chất tạo phức.

Việc lựa chọn chất mang và/hoặc chất phụ trợ sẽ phụ thuộc vào kiểu ứng dụng được định của chế phẩm và/hoặc các đặc tính vật lý của (các) thành phần hoạt tính.

Các chế phẩm có thể được phối chế ở dạng chế phẩm phối chế thông thường bất kỳ, như dung dịch (ví dụ dung dịch nước), nhũ tương, bột thấm ướt, huyền phù nền nước và nền dầu, bột, mù, hồ, bột hoà tan, hạn mịn hòa tan, hạn mịn để rắc, thể đặc huyền phù nhũ tương, các sản phẩm tự nhiên tẩm (các) thành phần hoạt tính, các chất tổng hợp tẩm (các) thành phần hoạt tính, phân bón và cả vi nang trong chất nền polyme. Trong dạng phối chế của chế phẩm, thành phần hoạt tính có thể có mặt ở dạng được tạo huyền phù, tạo nhũ tương hoặc hòa tan.

Các chế phẩm có thể là chế phẩm dùng ngay, tức là chế phẩm có thể được áp dụng trực tiếp lên thực vật hoặc hạt bằng dụng cụ thích hợp, như dụng cụ phun hoặc dụng cụ phun mù. Theo cách khác, các chế phẩm có thể ở dạng thể đặc thương mại mà cần phải được pha loãng, tốt hơn là bằng nước, trước khi sử dụng.

Các chế phẩm có thể được điều chế theo cách thông thường, ví dụ bằng cách trộn (các) thành phần hoạt tính với một hoặc nhiều chất mang và/hoặc một hoặc nhiều chất phụ trợ thích hợp, như đã bộc lộ trên đây.

Các chế phẩm này thường chứa từ 0,05 đến 99% khối lượng, từ 0,01 đến 98% khối lượng, tốt hơn là từ 0,1 đến 95% khối lượng, tốt hơn nữa là từ 0,5 đến 90% khối lượng, tốt nhất là từ 10 đến 70% khối lượng thành phần hoạt tính hoặc hỗn hợp của chúng.

Các chế phẩm được mô tả trên đây có thể được sử dụng để phòng trừ các vi sinh vật không mong muốn. Các chế phẩm này có thể được áp dụng lên vi sinh vật và/hoặc môi trường sống của chúng.

Các hợp chất có công thức (I) có thể được sử dụng như vậy hoặc ở dạng chế phẩm phối chế của chúng. Chúng cũng có thể được trộn hoặc dùng kết hợp với các chất diệt

nấm, chất diệt vi khuẩn, chất trừ nhện, chất diệt giun tròn, chất diệt côn trùng đã biết hoặc hỗn hợp các chất này. Việc sử dụng các chất diệt nấm, chất diệt vi khuẩn, chất trừ nhện, chất diệt giun tròn hoặc chất diệt côn trùng đã biết có thể cho phép mở rộng phổ hoạt tính hoặc ngăn ngừa sự phát triển tính kháng. Ví dụ về các chất diệt nấm, chất diệt côn trùng, chất trừ nhện, chất diệt giun tròn, hoặc chất diệt vi khuẩn đã biết được bộc lộ trong Pesticide Manual, 14th ed..

Các hợp chất có công thức (I) cũng có thể được trộn hoặc sử dụng kết hợp với các hoạt chất đã biết, như chất diệt cỏ, hoặc với phân bón, chất điều hòa sinh trưởng, chất an toàn và/hoặc chất truyền tín hiệu.

Do đó, theo một số phương án, chế phẩm này còn chứa thêm hoạt chất bổ sung được chọn từ chất diệt nấm, chất diệt vi khuẩn, chất trừ nhện, chất diệt giun tròn, chất diệt côn trùng, chất diệt cỏ, phân bón, chất điều hòa sinh trưởng, chất an toàn, chất truyền tín hiệu và hỗn hợp của chúng.

Ví dụ về các chất diệt nấm mà có thể được trộn với hợp chất và chế phẩm theo sáng chế là:

1) Các chất ức chế sinh tổng hợp ergosterol, ví dụ (1.001) cyproconazole, (1.002) difenoconazole, (1.003) epoxiconazole, (1.004) fenhexamid, (1.005) fenpropidin, (1.006) fenpropimorph, (1.007) fenpyrazamin, (1.008) fluquinconazole, (1.009) flutriafol, (1.010) imazalil, (1.011) imazalil sulfat, (1.012) ipconazole, (1.013) metconazole, (1.014) myclobutanil, (1.015) paclobutrazol, (1.016) prochloraz, (1.017) propiconazole, (1.018) prothioconazole, (1.019) Pyrisoxazole, (1.020) spiroxamin, (1.021) tebuconazole, (1.022) tetraconazole, (1.023) triadimenol, (1.024) tridemorph, (1.025) triticonazole, (1.026) (1R,2S,5S)-5-(4-clobenzyl)-2-(clometyl)-2-metyl-1-(1H-1,2,4-triazol-1-ylmetyl)xylopentanol, (1.027) (1S,2R,5R)-5-(4-clobenzyl)-2-(clometyl)-2-metyl-1-(1H-1,2,4-triazol-1-ylmetyl)xylopentanol, (1.028) (2R)-2-(1-chloroxypropyl)-4-[(1R)-2,2-dicloxypropyl]-1-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)butan-2-ol, (1.029) (2R)-2-(1-chloroxypropyl)-4-[(1S)-2,2-dicloxypropyl]-1-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)butan-2-ol, (1.030) (2R)-2-[4-(4-clophenoxy)-2-(triflometyl)phenyl]-1-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)propan-2-ol, (1.031) (2S)-2-(1-chloroxypropyl)-4-[(1R)-2,2-dicloxypropyl]-1-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)butan-2-ol, (1.032) (2S)-2-(1-chloroxypropyl)-4-[(1S)-2,2-dicloxypropyl]-1-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)butan-2-ol, (1.033) (2S)-2-[4-(4-clophenoxy)-2-(triflometyl)phenyl]-1-(1H-1,2,4-triazol-1-

yl)propan-2-ol, (1.034) (R)-[3-(4-clo-2-flophenyl)-5-(2,4-diflophenyl)-1,2-oxazol-4-yl](pyridin-3-yl)metanol, (1.035) (S)-[3-(4-clo-2-flophenyl)-5-(2,4-diflophenyl)-1,2-oxazol-4-yl](pyridin-3-yl)metanol, (1.036) [3-(4-clo-2-flophenyl)-5-(2,4-diflophenyl)-1,2-oxazol-4-yl](pyridin-3-yl)metanol, (1.037) 1-((2R,4S)-2-[2-clo-4-(4-clophenoxy)phenyl]-4-metyl-1,3-dioxolan-2-yl)metyl)-1H-1,2,4-triazol, (1.038) 1-((2S,4S)-2-[2-clo-4-(4-clophenoxy)phenyl]-4-metyl-1,3-dioxolan-2-yl)metyl)-1H-1,2,4-triazol, (1.039) 1-{[3-(2-clophenyl)-2-(2,4-diflophenyl)oxiran-2-yl]metyl}-1H-1,2,4-triazol-5-yl thiocyanate, (1.040) 1-{[rel(2R,3R)-3-(2-clophenyl)-2-(2,4-diflophenyl)oxiran-2-yl]metyl}-1H-1,2,4-triazol-5-yl thiocyanate, (1.041) 1-{[rel(2R,3S)-3-(2-clophenyl)-2-(2,4-diflophenyl)oxiran-2-yl]metyl}-1H-1,2,4-triazol-5-yl thiocyanate, (1.042) 2-[(2R,4R,5R)-1-(2,4-diclophenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimetylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (1.043) 2-[(2R,4R,5S)-1-(2,4-diclophenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimetylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (1.044) 2-[(2R,4S,5R)-1-(2,4-diclophenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimetylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (1.045) 2-[(2R,4S,5S)-1-(2,4-diclophenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimetylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (1.046) 2-[(2S,4R,5R)-1-(2,4-diclophenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimetylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (1.047) 2-[(2S,4R,5S)-1-(2,4-diclophenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimetylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (1.048) 2-[(2S,4S,5R)-1-(2,4-diclophenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimetylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (1.049) 2-[(2S,4S,5S)-1-(2,4-diclophenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimetylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (1.050) 2-[1-(2,4-diclophenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimetylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (1.051) 2-[2-clo-4-(2,4-diclophenoxy)phenyl]-1-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)propan-2-ol, (1.052) 2-[2-clo-4-(4-clophenoxy)phenyl]-1-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)butan-2-ol, (1.053) 2-[4-(4-clophenoxy)-2-(triflometyl)phenyl]-1-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)butan-2-ol, (1.054) 2-[4-(4-clophenoxy)-2-(triflometyl)phenyl]-1-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)pentan-2-ol, (1.055) 2-[4-(4-clophenoxy)-2-(triflometyl)phenyl]-1-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)propan-2-ol, (1.056) 2-{[3-(2-clophenyl)-2-(2,4-diflophenyl)oxiran-2-yl]metyl}-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (1.057) 2-{[rel(2R,3R)-3-(2-clophenyl)-2-(2,4-diflophenyl)oxiran-2-yl]metyl}-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (1.058) 2-{[rel(2R,3S)-3-(2-clophenyl)-2-(2,4-diflophenyl)oxiran-2-yl]metyl}-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-

thion, (1.059) 5-(4-clobenzyl)-2-(clometyl)-2-metyl-1-(1H-1,2,4-triazol-1-ylmetyl)xyclopentanol, (1.060) 5-(allylsulfanyl)-1-{[3-(2-clophenyl)-2-(2,4-diflophenyl)oxiran-2-yl]metyl}-1H-1,2,4-triazol, (1.061) 5-(allylsulfanyl)-1-{[rel(2R,3R)-3-(2-clophenyl)-2-(2,4-diflophenyl)oxiran-2-yl]metyl}-1H-1,2,4-triazol, (1.062) 5-(allylsulfanyl)-1-{[rel(2R,3S)-3-(2-clophenyl)-2-(2,4-diflophenyl)oxiran-2-yl]metyl}-1H-1,2,4-triazol, (1.063) N'-(2,5-dimetyl-4-{[3-(1,1,2,2-tetrafloetoxy)phenyl]sulfanyl}phenyl)-N-etyl-N-metylimidoformamit, (1.064) N'-(2,5-dimetyl-4-{[3-(2,2,2-trifloetoxy)phenyl]sulfanyl}phenyl)-N-etyl-N-metylimidoformamit, (1.065) N'-(2,5-dimetyl-4-{[3-(2,2,3,3-tetraflopropoxy)phenyl]sulfanyl}phenyl)-N-etyl-N-metylimidoformamit, (1.066) N'-(2,5-dimetyl-4-{[3-(pentafloetoxy)phenyl]sulfanyl}phenyl)-N-etyl-N-metylimidoformamit, (1.067) N'-(2,5-dimetyl-4-{3-[(1,1,2,2-tetrafloetyl)sulfanyl]phenoxy}phenyl)-N-etyl-N-metylimidoformamit, (1.068) N'-(2,5-dimetyl-4-{3-[(2,2,2-trifloetyl)sulfanyl]phenoxy}phenyl)-N-etyl-N-metylimidoformamit, (1.069) N'-(2,5-dimetyl-4-{3-[(2,2,3,3-tetraflopropyl)sulfanyl]phenoxy}phenyl)-N-etyl-N-metylimidoformamit, (1.070) N'-(2,5-dimetyl-4-{3-[(pentafloetyl)sulfanyl]phenoxy}phenyl)-N-etyl-N-metylimidoformamit, (1.071) N'-(2,5-dimetyl-4-phenoxyphenyl)-N-etyl-N-metylimidoformamit, (1.072) N'-(4-{[3-(diflometoxy)phenyl]sulfanyl}-2,5-dimetylphenyl)-N-etyl-N-metylimidoformamit, (1.073) N'-(4-{3-[(diflometyl)sulfanyl]phenoxy}-2,5-dimetylphenyl)-N-etyl-N-metylimidoformamit, (1.074) N'-[5-bromo-6-(2,3-dihydro-1H-inden-2-yloxy)-2-metylpyridin-3-yl]-N-etyl-N-metylimidoformamit, (1.075) N'-{4-[(4,5-diclo-1,3-thiazol-2-yl)oxy]-2,5-dimetylphenyl}-N-etyl-N-metylimidoformamit, (1.076) N'-{5-bromo-6-[(1R)-1-(3,5-diflophenyl)etoxy]-2-metylpyridin-3-yl}-N-etyl-N-metylimidoformamit, (1.077) N'-{5-bromo-6-[(1S)-1-(3,5-diflophenyl)etoxy]-2-metylpyridin-3-yl}-N-etyl-N-metylimidoformamit, (1.078) N'-{5-bromo-6-[(cis-4-isopropylxyclohexyl)oxy]-2-metylpyridin-3-yl}-N-etyl-N-metylimidoformamit, (1.079) N'-{5-bromo-6-[(trans-4-isopropylxyclohexyl)oxy]-2-metylpyridin-3-yl}-N-etyl-N-metylimidoformamit, (1.080) N'-{5-bromo-6-[1-(3,5-diflophenyl)etoxy]-2-metylpyridin-3-yl}-N-etyl-N-metylimidoformamit, (1.081) Mefentrifluconazole, (1.082) Ipfentrifluconazole.

2) Các chất ức chế chuỗi hô hấp ở phức I hoặc II, ví dụ (2.001) benzovindiflupyr, (2.002) bixafen, (2.003) boscalid, (2.004) carboxin, (2.005) fluopyram, (2.006) flutolanil, (2.007) fluxapyroxad, (2.008) furametpyr, (2.009) Isofetamid, (2.010) isopyrazam (anti-epimeric enantiomer 1R,4S,9S), (2.011) isopyrazam (anti-epimeric enantiomer 1S,4R,9R), (2.012) isopyrazam (anti-epimeric racemate 1RS,4SR,9SR), (2.013) isopyrazam (mixture of syn-epimeric racemate 1RS,4SR,9RS và anti-epimeric racemate 1RS,4SR,9SR), (2.014) isopyrazam (syn-epimeric enantiomer 1R,4S,9R), (2.015) isopyrazam (syn-epimeric enantiomer 1S,4R,9S), (2.016) isopyrazam (syn-epimeric racemate 1RS,4SR,9RS), (2.017) penflufen, (2.018) penthiopyrad, (2.019) pydiflumetofen, (2.020) Pyraziflumid, (2.021) sedaxane, (2.022) 1,3-dimetyl-N-(1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl)-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.023) 1,3-dimetyl-N-[(3R)-1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.024) 1,3-dimetyl-N-[(3S)-1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.025) 1-metyl-3-(triflometyl)-N-[2'-(triflometyl)biphenyl-2-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.026) 2-flo-6-(triflometyl)-N-(1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl)benzamit, (2.027) 3-(diflometyl)-1-metyl-N-(1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl)-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.028) 3-(diflometyl)-1-metyl-N-[(3R)-1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.029) 3-(diflometyl)-1-metyl-N-[(3S)-1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.030) 3-(diflometyl)-N-(7-flo-1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.031) 3-(diflometyl)-N-[(3R)-7-flo-1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl]-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.032) 3-(diflometyl)-N-[(3S)-7-flo-1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl]-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.033) 5,8-diflo-N-[2-(2-flo-4-{[4-(triflometyl)pyridin-2-yl]oxy}phenyl)etyl]quinazolin-4-amin, (2.034) N-(2-xyclopentyl-5-flobenzyl)-N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.035) N-(2-tert-butyl-5-metylbenzyl)-N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.036) N-(2-tert-butylbenzyl)-N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.037) N-(5-clo-2-etylbenzyl)-N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.038) N-(5-clo-2-isopropylbenzyl)-N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.039) N-[(1R,4S)-9-(diclometylene)-1,2,3,4-tetrahydro-1,4-

metanonaphtalen-5-yl]-3-(diflometyl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.040) N-[(1S,4R)-9-(diclometylene)-1,2,3,4-tetrahydro-1,4-metanonaphtalen-5-yl]-3-(diflometyl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.041) N-[1-(2,4-diclophenyl)-1-metoxypopan-2-yl]-3-(diflometyl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.042) N-[2-clo-6-(triflometyl)benzyl]-N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.043) N-[3-clo-2-flo-6-(triflometyl)benzyl]-N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.044) N-[5-clo-2-(triflometyl)benzyl]-N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.045) N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-N-[5-metyl-2-(triflometyl)benzyl]-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.046) N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-N-(2-flo-6-isopropylbenzyl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.047) N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-N-(2-isopropyl-5-metylbenzyl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.048) N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-N-(2-isopropylbenzyl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-carbothioamit, (2.049) N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-N-(2-isopropylbenzyl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.050) N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-N-(5-flo-2-isopropylbenzyl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.051) N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-N-(2-etyl-4,5-dimetylbenzyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.052) N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-N-(2-etyl-5-flobenzyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.053) N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-N-(2-etyl-5-metylbenzyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.054) N-xyclopropyl-N-(2-xyclopropyl-5-flobenzyl)-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.055) N-xyclopropyl-N-(2-xyclopropyl-5-metylbenzyl)-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.056) N-xyclopropyl-N-(2-xyclopropylbenzyl)-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit.

3) Các chất ức chế chuỗi hô hấp ở phức III, ví dụ (3.001) ametotradin, (3.002) amisulbrom, (3.003) azoxystrobin, (3.004) coumetoxystrobin, (3.005) coumoxystrobin, (3.006) cyazofamid, (3.007) dimoxystrobin, (3.008) enoxastrobin, (3.009) famoxadon, (3.010) fenamidon, (3.011) flufenoxystrobin, (3.012) fluoxastrobin, (3.013) kresoxim-metyl, (3.014) metominostrobin, (3.015) orysastrobin, (3.016) picoxystrobin, (3.017) pyraclostrobin, (3.018) pyrametostrobin, (3.019) pyraoxystrobin, (3.020) trifloxystrobin (3.021) (2E)-2-{2-[(1E)-1-(3-[(E)-1-flo-2-phenylvinyl]oxy}phenyl)etyliden]

amino}oxy)methyl]phenyl}-2-(methoxyimino)-N-methylacetamit, (3.022) (2E,3Z)-5-{{1-(4-chlorophenyl)-1H-pyrazol-3-yl}oxy}-2-(methoxyimino)-N,3-dimethylpent-3-enamit, (3.023) (2R)-2-{2-[(2,5-dimethylphenoxy)methyl]phenyl}-2-methoxy-N-methylacetamit, (3.024) (2S)-2-{2-[(2,5-dimethylphenoxy)methyl]phenyl}-2-methoxy-N-methylacetamit, (3.025) (3S,6S,7R,8R)-8-benzyl-3-[(3-[(isobutyryloxy)methoxy]-4-methoxypyridin-2-yl)carbonyl]amino]-6-methyl-4,9-dioxo-1,5-dioxonan-7-yl 2-methylpropanoat, (3.026) 2-{2-[(2,5-dimethylphenoxy)methyl]phenyl}-2-methoxy-N-methylacetamit, (3.027) N-(3-ethyl-3,5,5-trimethylcyclohexyl)-3-formamido-2-hydroxybenzamid, (3.028) (2E,3Z)-5-{{1-(4-chloro-2-fluorophenyl)-1H-pyrazol-3-yl}oxy}-2-(methoxyimino)-N,3-dimethylpent-3-enamit.

4) Các chất ức chế nguyên phân và phân chia tế bào, ví dụ (4.001) carbendazim, (4.002) diethofencarb, (4.003) etheboxam, (4.004) fluopicolide, (4.005) pencycuron, (4.006) thiabendazole, (4.007) thiophanate-methyl, (4.008) zoxamide, (4.009) 3-chloro-4-(2,6-difluorophenyl)-6-methyl-5-phenylpyridazin, (4.010) 3-chloro-5-(4-chlorophenyl)-4-(2,6-difluorophenyl)-6-methylpyridazin, (4.011) 3-chloro-5-(6-chloropyridin-3-yl)-6-methyl-4-(2,4,6-trifluorophenyl)pyridazin, (4.012) 4-(2-bromo-4-fluorophenyl)-N-(2,6-difluorophenyl)-1,3-dimethyl-1H-pyrazol-5-amin, (4.013) 4-(2-bromo-4-fluorophenyl)-N-(2-bromo-6-fluorophenyl)-1,3-dimethyl-1H-pyrazol-5-amin, (4.014) 4-(2-bromo-4-fluorophenyl)-N-(2-bromophenyl)-1,3-dimethyl-1H-pyrazol-5-amin, (4.015) 4-(2-bromo-4-fluorophenyl)-N-(2-chloro-6-fluorophenyl)-1,3-dimethyl-1H-pyrazol-5-amin, (4.016) 4-(2-bromo-4-fluorophenyl)-N-(2-chlorophenyl)-1,3-dimethyl-1H-pyrazol-5-amin, (4.017) 4-(2-bromo-4-fluorophenyl)-N-(2-fluorophenyl)-1,3-dimethyl-1H-pyrazol-5-amin, (4.018) 4-(2-chloro-4-fluorophenyl)-N-(2,6-difluorophenyl)-1,3-dimethyl-1H-pyrazol-5-amin, (4.019) 4-(2-chloro-4-fluorophenyl)-N-(2-chloro-6-fluorophenyl)-1,3-dimethyl-1H-pyrazol-5-amin, (4.020) 4-(2-chloro-4-fluorophenyl)-N-(2-chlorophenyl)-1,3-dimethyl-1H-pyrazol-5-amin, (4.021) 4-(2-chloro-4-fluorophenyl)-N-(2-fluorophenyl)-1,3-dimethyl-1H-pyrazol-5-amin, (4.022) 4-(4-chlorophenyl)-5-(2,6-difluorophenyl)-3,6-dimethylpyridazin, (4.023) N-(2-bromo-6-fluorophenyl)-4-(2-chloro-4-fluorophenyl)-1,3-dimethyl-1H-pyrazol-5-amin, (4.024) N-(2-bromophenyl)-4-(2-chloro-4-fluorophenyl)-1,3-dimethyl-1H-pyrazol-5-amin, (4.025) N-(4-chloro-2,6-difluorophenyl)-4-(2-chloro-4-fluorophenyl)-1,3-dimethyl-1H-pyrazol-5-amin.

5) Các hợp chất có khả năng hoạt động nhiều vị trí, ví dụ (5.001) bordeaux mixture, (5.002) captafol, (5.003) captan, (5.004) chlorothalonil, (5.005) đồng hydroxit, (5.006) đồng naphthenat, (5.007) đồng oxit, (5.008) đồng oxyclozua, (5.009) đồng(2+) sulfat, (5.010) dithianon, (5.011) dodine, (5.012) folpet, (5.013) mancozeb, (5.014) maneb, (5.015) metiram, (5.016) metiram kẽm, (5.017) oxine-đồng, (5.018) propineb, (5.019) lưu huỳnh và chế phẩm chứa lưu huỳnh bao gồm canxi polysulfua, (5.020) thiram, (5.021) zineb, (5.022) ziram, (5.023) 6-etyl-5,7-dioxo-6,7-dihydro-5H-pyrrolo[3',4':5,6][1,4]dithiino[2,3-c][1,2]thiazol-3-carbonitril.

6) Các hợp chất có khả năng cảm ứng cơ chế phòng vệ của vật chủ, ví dụ (6.001) acibenzolar-S-metyl, (6.002) isotianil, (6.003) probenazole, (6.004) tiadinil.

7) Các chất ức chế sinh tổng hợp axit amin và/hoặc protein, ví dụ (7.001) cyprodinil, (7.002) kasugamycin, (7.003) kasugamycin hydroclorua hydrat, (7.004) oxytetracycline, (7.005) pyrimethanil, (7.006) 3-(5-flo-3,3,4,4-tetrametyl-3,4-dihydroisoquinolin-1-yl)quinolin.

8) Chất ức chế sản sinh ATP, ví dụ (8.001) silthiofam.

9) Các chất chế tổng hợp thành ức tế bào, ví dụ (9.001) benthiavalicarb, (9.002) dimethomorph, (9.003) flumorph, (9.004) iprovalicarb, (9.005) mandipropamid, (9.006) pyrimorph, (9.007) valifenalate, (9.008) (2E)-3-(4-tert-butylphenyl)-3-(2-chloropyridin-4-yl)-1-(morpholin-4-yl)prop-2-en-1-on, (9.009) (2Z)-3-(4-tert-butylphenyl)-3-(2-clopyridin-4-yl)-1-(morpholin-4-yl)prop-2-en-1-on.

10) Các chất ức chế tổng hợp lipid và màng, ví dụ (10.001) propamocarb, (10.002) propamocarb hydroclorua, (10.003) tolclofos-metyl.

11) Các chất ức chế sinh tổng hợp melanin, ví dụ (11.001) tricyclazole, (11.002) 2,2,2-trifloetyl {3-metyl-1-[(4-metylbenzoyl)amino]butan-2-yl}carbamate.

12) Các chất ức chế tổng hợp axit nucleic, ví dụ (12.001) benalaxyl, (12.002) benalaxyl-M (kiralaxyl), (12.003) metalaxyl, (12.004) metalaxyl-M (mefenoxam).

13) Các chất ức chế truyền tín hiệu, ví dụ (13.001) fludioxonil, (13.002) iprodione, (13.003) procymidone, (13.004) proquinazid, (13.005) quinoxifen, (13.006) vinclozolin.

14) Các hợp chất có khả năng hoạt động dưới dạng chất phân tách, ví dụ (14.001) fluazinam, (14.002) meptyldinocap.

15) Các hợp chất khác, ví dụ (15.001) axit Absciscic, (15.002) benthiazole, (15.003) bethoxazin, (15.004) capsimycin, (15.005) carvone, (15.006) chinomethionat, (15.007) cufraneb, (15.008) cyflufenamid, (15.009) cymoxanil, (15.010) cyprosulfamide, (15.011) flutianil, (15.012) fosetyl-nhôm, (15.013) fosetyl-canxi, (15.014) fosetyl-natri, (15.015) methyl isothiocyant, (15.016) metrafenone, (15.017) mildiomicin, (15.018) natamycin, (15.019) nicken dimetyldithiocarbamat, (15.020) nitrothal-isopropyl, (15.021) oxamocarb, (15.022) Oxathiapiprolin, (15.023) oxyfenthiin, (15.024) pentaclophenol và muối, (15.025) axit phosphor và muối của nó, (15.026) propamocarb-fosetyl, (15.027) pyriofenone (chlazafenone) (15.028) tebufloquin, (15.029) tecloftalam, (15.030) tolnifanide, (15.031) 1-(4-{4-[(5R)-5-(2,6-diflophenyl)-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl]-1,3-thiazol-2-yl}piperidin-1-yl)-2-[5-metyl-3-(triflometyl)-1H-pyrazol-1-yl]ethanon, (15.032) 1-(4-{4-[(5S)-5-(2,6-diflophenyl)-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl]-1,3-thiazol-2-yl}piperidin-1-yl)-2-[5-metyl-3-(triflometyl)-1H-pyrazol-1-yl]ethanon, (15.033) 2-(6-benzylpyridin-2-yl)quinazolin, (15.034) 2,6-dimetyl-1H,5H-[1,4]dithiino[2,3-c:5,6-c']dipyrol-1,3,5,7(2H,6H)-tetron, (15.035) 2-[3,5-bis(diflometyl)-1H-pyrazol-1-yl]-1-[4-(4-{5-[2-(prop-2-yn-1-yloxy)phenyl]-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl}-1,3-thiazol-2-yl)piperidin-1-yl]etanon, (15.036) 2-[3,5-bis(diflometyl)-1H-pyrazol-1-yl]-1-[4-(4-{5-[2-clo-6-(prop-2-yn-1-yloxy)phenyl]-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl}-1,3-thiazol-2-yl)piperidin-1-yl]etanon, (15.037) 2-[3,5-bis(diflometyl)-1H-pyrazol-1-yl]-1-[4-(4-{5-[2-flo-6-(prop-2-yn-1-yloxy)phenyl]-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl}-1,3-thiazol-2-yl)piperidin-1-yl]etanon, (15.038) 2-[6-(3-flo-4-metoxiphenyl)-5-metylpyridin-2-yl]quinazolin, (15.039) 2-{(5R)-3-[2-(1-{[3,5-

bis(diflometyl)-1H-pyrazol-1-yl]axetyl}piperidin-4-yl)-1,3-thiazol-4-yl]-4,5-dihydro-1,2-oxazol-5-yl}-3-clophenyl metansulfonat, (15.040) 2-{(5S)-3-[2-(1-{[3,5-bis(diflometyl)-1H-pyrazol-1-yl]axetyl}piperidin-4-yl)-1,3-thiazol-4-yl]-4,5-dihydro-1,2-oxazol-5-yl}-3-clophenyl metansulfonat, (15.041) 2-{2-[(7,8-diflo-2-metylquinolin-3-yl)oxy]-6-flophenyl}propan-2-ol, (15.042) 2-{2-flo-6-[(8-flo-2-metylquinolin-3-yl)oxy]phenyl}propan-2-ol, (15.043) 2-{3-[2-(1-{[3,5-bis(diflometyl)-1H-pyrazol-1-yl]axetyl}piperidin-4-yl)-1,3-thiazol-4-yl]-4,5-dihydro-1,2-oxazol-5-yl}-3-chlorophenyl metansulfonat, (15.044) 2-{3-[2-(1-{[3,5-bis(diflometyl)-1H-pyrazol-1-yl]axetyl}piperidin-4-yl)-1,3-thiazol-4-yl]-4,5-dihydro-1,2-oxazol-5-yl}phenyl metansulfonat, (15.045) 2-phenylphenol và muối, (15.046) 3-(4,4,5-triflo-3,3-dimetyl-3,4-dihydroisoquinolin-1-yl)quinolin, (15.047) 3-(4,4-diflo-3,3-dimetyl-3,4-dihydroisoquinolin-1-yl)quinolin, (15.048) 4-amino-5-flopyrimidin-2-ol (dạng tautome: 4-amino-5-flopyrimidin-2(1H)-on), (15.049) axit 4-oxo-4-[(2-phenyletyl)amino]butanoic, (15.050) 5-amino-1,3,4-thiadiazol-2-thiol, (15.051) 5-clo-N'-phenyl-N'-(prop-2-yn-1-yl)thiophen-2-sulfonohydrazit, (15.052) 5-flo-2-[(4-flobenzyl)oxy]pyrimidin-4-amin, (15.053) 5-flo-2-[(4-metylbenzyl)oxy]pyrimidin-4-amin, (15.054) 9-flo-2,2-dimetyl-5-(quinolin-3-yl)-2,3-dihydro-1,4-benzoxazepin, (15.055) but-3-yn-1-yl {6-[(Z)-(1-metyl-1H-tetrazol-5-yl)(phenyl)metylen]amino}oxy)metyl]pyridin-2-yl}carbamat, (15.056) etyl (2Z)-3-amino-2-xyano-3-phenylacrylat, (15.057) axit phenazine-1-carboxylic, (15.058) propyl 3,4,5-trihydroxybenzoat, (15.059) quinolin-8-ol, (15.060) quinolin-8-ol sulfat (2:1), (15.061) tert-butyl {6-[(Z)-(1-metyl-1H-tetrazol-5-yl)(phenyl)metylen]amino}oxy)metyl]pyridin-2-yl}carbamat, (15.062) 5-flo-4-imino-3-metyl-1-[(4-metylphenyl)sulfonyl]-3,4-dihdropyrimidin-2(1H)-on.

Tất cả các thành phần phối trộn đã biết thuộc nhóm (1) đến (15) mô tả trên đây có thể có mặt ở dạng hợp chất tự do và/hoặc ở dạng muối chấp nhận được trong nông nghiệp nếu nhóm chức của chúng cho phép.

Các phương pháp và sử dụng

Các hợp chất có công thức (I) có hoạt tính diệt vi sinh vật tiềm năng. Do đó, các hợp chất có công thức (I) hoặc chế phẩm chứa chúng có thể được sử dụng để phòng trừ các vi sinh vật không mong muốn, như nấm và vi khuẩn. Chúng có thể đặc biệt hữu

dụng trong bảo vệ cây trồng – chúng phòng trừ các vi sinh vật gây bệnh ở thực vật - hoặc trong bảo vệ cây gỗ, sản phẩm lưu kho hoặc các vật liệu khác nhau, như được mô tả chi tiết hơn sau đây. Cụ thể hơn, các hợp chất có công thức (I) hoặc chế phẩm chứa chúng có thể được sử dụng để bảo vệ hạt, thực vật nảy mầm, cây giống đã nhú lên, thực vật, bộ phận của thực vật, quả và đất trên đó thực vật sinh trưởng khỏi các vi sinh vật không mong muốn.

Thuật ngữ “phòng trừ” hoặc “việc” phòng trừ như được sử dụng ở đây bao gồm việc phòng trừ mang tính chữa trị và bảo vệ khỏi vi sinh vật không mong muốn. Các vi sinh vật không mong muốn có thể là vi khuẩn gây bệnh hoặc nấm gây bệnh, cụ thể hơn là vi khuẩn gây bệnh ở thực vật hoặc nấm gây bệnh ở thực vật. Như được mô tả chi tiết sau đây, các vi sinh vật gây bệnh thực vật này là nguyên nhân của phổ rộng các bệnh thực vật

Cụ thể hơn, các hợp chất có công thức (I) hoặc chế phẩm chứa chúng có thể hữu dụng làm chất diệt nấm. Cụ thể, chúng có thể hữu dụng trong bảo vệ cây trồng, ví dụ để phòng trừ nấm không mong muốn, như *Plasmodiophoromycetes*, *Oomycetes*, *Chytridiomycetes*, *Zygomycetes*, *Ascomycetes*, *Basidiomycetes* và *Deuteromycetes*.

Các hợp chất có công thức (I) hoặc chế phẩm chứa chúng cũng có thể hữu dụng làm chất diệt vi khuẩn. Cụ thể, chúng có thể được sử dụng trong bảo vệ cây trồng, ví dụ để phòng trừ vi khuẩn không mong muốn, như *Pseudomonadaceae*, *Rhizobiaceae*, *Enterobacteriaceae*, *Corynebacteriaceae* và *Streptomycetaceae*.

Do đó, sáng chế cũng đề cập đến phương pháp phòng trừ các vi sinh vật gây bệnh thực vật không mong muốn, như nấm và vi khuẩn, bao gồm bước áp dụng một hoặc nhiều hợp chất có công thức (I) hoặc chế phẩm chứa chúng lên các vi sinh vật và/hoặc môi trường sống của chúng.

Cụ thể hơn, sáng chế đề cập đến các phương pháp mang tính chữa trị hoặc bảo vệ để phòng trừ các vi sinh vật không mong muốn, cụ thể hơn là nấm gây bệnh thực vật, mà bao gồm bước áp dụng một hoặc nhiều hợp chất có công thức (I) hoặc chế phẩm chứa chúng lên hạt, thực vật, bộ phận của thực vật, quả hoặc đất trên đó thực vật sinh trưởng.

Thông thường, khi các hợp chất có công thức (I) hoặc chế phẩm chứa chúng được dự định để sử dụng trong các phương pháp mang tính chữa trị hoặc bảo vệ để phòng trừ nấm gây bệnh thực vật, lượng hữu hiệu và không độc cho thực vật của một hoặc nhiều

hợp chất có công thức (I) hoặc chế phẩm chứa chúng, thường được áp dụng lên thực vật, bộ phận của thực vật, quả, hạt hoặc đất trên đó thực vật sinh trưởng. Cách biểu hiện "lượng hữu hiệu và-không độc cho thực vật" nghĩa là lượng đủ để phòng trừ hoặc tiêu diệt nấm có mặt hoặc có khả năng xuất hiện trên đất trồng và mà không đưa đến triệu chứng đáng kể về độ thực vật bất kỳ cho cây trồng. Lượng như vậy có thể thay đổi trong khoảng rộng tùy thuộc vào nấm cần phòng trừ, loại cây trồng, điều kiện khí hậu và các hợp chất có công thức (I). Lượng này có thể được xác định bằng các thử nghiệm có hệ thống trên đồng ruộng mà nằm trong khả năng của người có hiểu biết trung bình về lĩnh vực này.

Thuật ngữ "xử lý" như được sử dụng trong bản mô tả chỉ bước áp dụng một hoặc nhiều hợp chất có công thức (I) hoặc chế phẩm chứa chúng lên thực vật, bộ phận của thực vật, quả, hạt hoặc đất cần được bảo vệ hoặc chữa trị.

Thực vật và bộ phận của thực vật

Tất cả thực vật và các bộ phận của thực vật có thể được xử lý bằng phương pháp theo sáng chế

Thực vật ở đây được hiểu với nghĩa là toàn bộ thực vật và quần thể thực vật như thực vật hoang dại mong muốn và không mong muốn hoặc cây trồng (gồm cả cây trồng mọc tự nhiên). Cây trồng có thể là thực vật thu được bằng cách nhân giống thông thường và các phương pháp tối ưu hóa hoặc bằng các phương pháp công nghệ sinh học và thao tác di truyền hoặc sự kết hợp của các phương pháp này, bao gồm cả thực vật chuyển gen và giống cây trồng có khả năng bảo vệ hoặc không có khả năng bảo vệ bởi quyền của người chọn tạo giống cây trồng.

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

Thực vật mà có thể được xử lý bằng phương pháp theo sáng chế bao gồm các thực vật sau: bông, lanh, nho, cây ăn quả, rau, như *Rosaceae sp.* (ví dụ cây dòng táo như táo và lê, nhưng cũng cả cây dạng quả hạch như mơ, anh đào, quả hạnh và đào, và cây dạng quả mềm như dâu tây), *Ribesioideae sp.*, *Juglandaceae sp.*, *Betulaceae sp.*,

Anacardiaceae sp., *Fagaceae sp.*, *Moraceae sp.*, *Oleaceae sp.*, *Actinidaceae sp.*, *Lauraceae sp.*, *Musaceae sp.* (ví dụ chuối và các khu vườn ươm), *Rubiaceae sp.* (ví dụ cà phê), *Theaceae sp.*, *Sterculiaceae sp.*, *Rutaceae sp.* (ví dụ chanh, cam và bưởi); *Solanaceae sp.* (ví dụ cà chua), *Liliaceae sp.*, *Asteraceae sp.* (ví dụ rau diếp), *Umbelliferae sp.*, *Cruciferae sp.*, *Chenopodiaceae sp.*, *Cucurbitaceae sp.* (ví dụ dưa chuột), *Alliaceae sp.* (ví dụ tỏi tây, hành), *Papilionaceae sp.* (ví dụ đậu Hà Lan); các loại cây trồng chính, như *Gramineae sp.* (ví dụ ngô, vạt cỏ, ngũ cốc như lúa mì, lúa mạch đen, lúa, lúa mạch, yến mạch, kê và tiểu hắc mạch), *Asteraceae sp.* (ví dụ hướng dương), *Brassicaceae sp.* (ví dụ bắp cải trắng, bắp cải đỏ, cải xanh, súp lơ, cải tí hon Brussels, cải thìa pak Choi, su hào kohlrabi, củ cải đỏ, và cải dầu, mùa tạc, củ cải ngựa và cải xoong), *Fabaceae sp.* (ví dụ đậu, lạc), *Papilionaceae sp.* (ví dụ đậu nành), *Solanaceae sp.* (ví dụ khoai tây), *Chenopodiaceae sp.* (ví dụ củ cải đường, củ cải đường cho chăn nuôi, cải cầu vòng, củ dền); thực vật hữu dụng và thực vật làm cảnh cho các khu vườn và các khu vực lấy gỗ; và các giống biến đổi gen của mỗi một trong số các thực vật này.

Theo một số phương án được ưu tiên, các loài cây dại và các cây trồng, hoặc những cây thu nhận bằng các phương pháp gây giống sinh học thông thường, như lai giống hoặc dung hợp thể nguyên sinh, và các phần của nó, được xử lý bằng các phương pháp theo sáng chế.

Theo một số phương án được ưu tiên khác, thực vật chuyển gen và giống thực vật thu được bằng kỹ thuật di truyền, nếu thích hợp, kết hợp với các phương pháp thông thường (sinh vật biến đổi gen), và các bộ phận của chúng cũng được xử lý bằng các phương pháp theo sáng chế. Tốt hơn, nếu các cây thuộc cây trồng có bán trên thị trường hoặc đang sử dụng được xử lý theo sáng chế. Các giống thực vật được hiểu có là thực vật có các đặc tính ("tính trạng") mới và đã thu được bằng các kỹ thuật chọn giống thông thường, bằng kỹ thuật gây đột biến hoặc bằng kỹ thuật ADN tái tổ hợp. Thực vật có thể là giống cây trồng, giống thực vật, các kiểu sinh học hoặc kiểu gen

Phương pháp theo sáng chế có thể được sử dụng trong xử lý sinh vật biến đổi gen (GMO), ví dụ, thực vật hoặc hạt. Thực vật biến đổi gen (hoặc thực vật chuyển gen) là thực vật mà một gen khác loại đã được tích hợp ổn định vào trong hệ gen của nó. Cách biểu thị "gen khác loại" cơ bản nghĩa là gen mà được cung cấp hoặc được thu thập bên ngoài thực vật và khi được đưa vào trong nhân, hệ gen lục lạp hoặc ty thể mang đến cho

thực vật chuyển dạng các đặc tính nông học mới hoặc đặc tính nông học được cải thiện hoặc các đặc tính khác bằng cách biểu hiện protein hoặc polypeptit mong muốn hoặc bằng cách điều chỉnh theo hướng làm giảm hoặc làm câm (các) gen khác mà chúng có mặt ở thực vật (ví dụ, sử dụng công nghệ đối nghĩa, công nghệ đồng ức chế, công nghệ can thiệp ARN – RNAi hoặc công nghệ ARN nhỏ – miRNA). Gen khác loại nằm trong hệ gen còn được gọi là gen chuyển. Gen chuyển được xác định bởi vị trí cụ thể của nó trong hệ gen thực vật được gọi là sự biến nạp di truyền hoặc sự kiện chuyển gen.

Thực vật và giống thực vật có thể được xử lý bằng các phương pháp đã mô tả trên đây bao gồm tất cả các thực vật có vật liệu di truyền mà chúng truyền các tính trạng hữu dụng, đặc biệt có lợi cho các thực vật này (bất luận thu được bằng phương pháp chọn giống và/hoặc phương pháp công nghệ sinh học hay không).

Thực vật và giống thực vật mà có thể được xử lý bằng phương pháp được mô tả trên đây bao gồm thực vật và giống thực vật kháng lại một hoặc nhiều điều kiện bất lợi sinh học, tức là, thực vật này thể hiện khả năng phòng vệ tốt hơn chống lại động vật và vi sinh vật gây hại, như chống lại giun tròn, côn trùng, ve bét, nấm gây bệnh cho thực vật, vi khuẩn, virus và/hoặc viroït.

Thực vật và giống thực vật mà có thể được xử lý bằng các phương pháp đã mô tả trên đây là thực vật kháng lại một hoặc nhiều điều kiện bất lợi phi sinh học. Các điều kiện bất lợi phi sinh học có thể bao gồm, ví dụ, hạn hán, tiếp xúc với nhiệt độ lạnh, tiếp xúc nhiệt, điều kiện bất lợi về thẩm thấu, ngập lụt, độ mặn trong đất cao, tiếp xúc khoáng chất cao, tiếp xúc ozon, tiếp xúc ánh sáng cao, tình trạng sẵn có giới hạn về các chất dinh dưỡng nitơ, tình trạng sẵn có giới hạn của các chất dinh dưỡng phospho, tránh hiệu ứng bóng.

Thực vật và giống thực vật mà có thể được xử lý bằng các phương pháp đã mô tả trên đây là thực vật đặc trưng bởi các đặc tính về năng suất được tăng cường. Năng suất được nâng cao ở thực vật này có thể là kết quả của, ví dụ, sinh lý thực vật được cải thiện, khả năng sinh trưởng và phát triển, như hiệu suất sử dụng nước, hiệu suất giữ nước, sử dụng nitơ tốt hơn, tăng đồng hóa cacbon, quang hợp được cải thiện, hiệu suất nảy mầm tăng và chín nhanh. Ngoài ra, năng suất có thể bị ảnh hưởng bởi kết cấu thực vật được cải thiện (trong các điều kiện bất lợi và không bất lợi), bao gồm nhưng không bị giới hạn ở, ra hoa sớm, kiểm soát ra hoa để sản xuất hạt lai, sức sống của cây con, kích cỡ thực vật, số lượng và khoảng cách giống, sinh trưởng rễ, kích thước hạt, kích thước quả,

kích thước vỏ, số lượng vỏ hoặc bông, số lượng hạt trên mỗi vỏ hoặc bông, khối lượng hạt, tăng hạt nảy, giảm phân tán hạt, giảm tách vỏ và chống đổ rạp. Các tính trạng về năng suất khác bao gồm thành phần hạt, như hàm lượng và thành phần hydrat cacbon, ví dụ, bông hoặc tinh bột, hàm lượng protein, hàm lượng và thành phần dầu, giá trị dinh dưỡng, giảm thiểu các hợp chất kháng dinh dưỡng, khả năng chế biến cải thiện và độ ổn định khi bảo quản thích hợp hơn.

Thực vật và giống thực vật mà có thể được xử lý bằng các phương pháp đã mô tả trên đây là thực vật lai đã thể hiện đặc tính về ưu thế lai hoặc sức lai mà thường dẫn đến năng suất, sức sống, sức khỏe và tính kháng lại các điều kiện bất lợi sinh học và phi sinh học cao hơn.

Thực vật và giống thực vật (thu được bằng phương pháp công nghệ sinh học thực vật như kỹ thuật di truyền) mà có thể được xử lý bằng các phương pháp đã mô tả trên đây bao gồm thực vật và giống thực vật mà chịu được chất diệt cỏ, tức là, thực vật chịu được một hoặc nhiều chất diệt cỏ nhất định. Thực vật như vậy có thể thu được bằng phương pháp biến nạp di truyền hoặc bằng phương pháp chọn lọc thực vật chứa đột biến truyền khả năng chịu chất diệt cỏ này.

Thực vật và giống thực vật (thu được bằng phương pháp công nghệ sinh học thực vật như kỹ thuật di truyền) mà có thể được xử lý bằng các phương pháp đã mô tả trên đây bao gồm thực vật chuyển gen kháng côn trùng, tức là, thực vật được tạo tính kháng lại sự tấn công của các côn trùng đích nhất định. Thực vật như vậy có thể thu được bằng phương pháp biến nạp di truyền, hoặc bằng phương pháp chọn lọc thực vật chứa đột biến truyền khả năng kháng côn trùng như vậy.

Thực vật và giống thực vật (thu được bằng phương pháp công nghệ sinh học thực vật như kỹ thuật di truyền) mà có thể được xử lý bằng các phương pháp đã mô tả trên đây bao gồm thực vật và giống thực vật mà chịu được các điều kiện bất lợi phi sinh học. Thực vật như vậy có thể thu được bằng phương pháp biến nạp di truyền, hoặc bằng phương pháp chọn lọc thực vật chứa đột biến truyền tính chịu điều kiện bất lợi này.

Thực vật và giống thực vật (thu được bằng phương pháp công nghệ sinh học thực vật như kỹ thuật di truyền) mà cũng có thể được xử lý bằng các phương pháp đã mô tả trên đây bao gồm thực vật và giống thực vật thể hiện số lượng, chất lượng và/hoặc độ ổn định bảo quản của sản phẩm thu hoạch thay đổi và/hoặc đặc tính của các thành phần đặc trưng của sản phẩm thu hoạch thay đổi.

Thực vật và giống thực vật (thu được bằng phương pháp công nghệ sinh học thực vật như kỹ thuật di truyền) mà có thể được xử lý bằng các phương pháp đã mô tả trên đây bao gồm thực vật và giống thực vật như cây bông, với các đặc tính sợi thay đổi. Thực vật như vậy có thể thu được bằng phương pháp biến nạp di truyền, hoặc bằng phương pháp chọn lọc thực vật chứa đột biến truyền các đặc tính sợi thay đổi như vậy.

Thực vật và giống thực vật (thu được bằng phương pháp công nghệ sinh học thực vật như kỹ thuật di truyền) mà có thể được xử lý bằng các phương pháp đã mô tả trên đây bao gồm thực vật và giống thực vật mà chịu được các điều kiện bất lợi phi sinh học. Thực vật như vậy có thể thu được bằng phương pháp biến nạp di truyền, hoặc bằng phương pháp chọn lọc thực vật chứa đột biến truyền các đặc tính về dầu thay đổi như vậy.

Thực vật và giống thực vật (thu được bằng phương pháp công nghệ sinh học thực vật như kỹ thuật di truyền) mà có thể được xử lý bằng các phương pháp đã mô tả trên đây bao gồm thực vật và giống thực vật như cải dầu hoặc cây Brassica có liên quan, với các đặc tính vỡ hạt thay đổi. Thực vật như vậy có thể thu được bằng phương pháp biến nạp di truyền, hoặc bằng phương pháp chọn lọc thực vật chứa đột biến truyền các đặc tính vỡ hạt thay đổi như vậy và bao gồm thực vật như cây cải dầu với đặc tính vỡ hạt chậm hoặc giảm.

Thực vật và giống thực vật (thu được bằng phương pháp công nghệ sinh học thực vật như kỹ thuật di truyền) mà có thể được xử lý bằng các phương pháp đã mô tả trên đây bao gồm thực vật và giống thực vật như cây thuốc lá, với các đặc tính cải biến protein sau dịch mã thay đổi.

Mầm bệnh và bệnh

Các phương pháp được mô tả trên đây có thể được sử dụng để phòng trừ các vi sinh vật, cụ thể là nấm gây bệnh thực vật, gây ra các bệnh như:

các bệnh do mầm bệnh phấn trắng, như loài *Blumeria* (ví dụ *Blumeria graminis*), loài *Podosphaera* (ví dụ *Podosphaera leucotricha*), loài *Sphaerotheca* (ví dụ *Sphaerotheca fuliginea*), loài *Uncinula* (ví dụ *Uncinula necator*) gây ra;

các bệnh do mầm bệnh rỉ sét, như loài *Gymnosporangium* (ví dụ *Gymnosporangium sabinae*), loài *Hemileia* (ví dụ *Hemileia vastatrix*), loài *Phakopsora* (ví dụ *Phakopsora pachyrhizi* hoặc *Phakopsora meibomia*), loài *Puccinia* (ví dụ *Puccinia recondita*,

Puccinia graminis hoặc *Puccinia striiformis*), loài *Uromyces* (ví dụ *Uromyces appendiculatus*) gây ra;

các bệnh do mầm bệnh từ nhóm Oomycetes, như loài *Albugo* (ví dụ *Albugo candida*), loài *Bremia* (ví dụ *Bremia lactucae*), loài *Peronospora* (ví dụ *Peronospora pisi* hoặc *P. brassicae*), loài *Phytophthora* (ví dụ *Phytophthora infestans*), loài *Plasmopara* (ví dụ *Plasmopara viticola*), loài *Pseudoperonospora* (ví dụ *Pseudoperonospora humuli* hoặc *Pseudoperonospora cubensis*), loài *Pythium* (ví dụ *Pythium ultimum*) gây ra;

bệnh đốm lá và bệnh bạc lá do, ví dụ, loài *Alternaria* (ví dụ *Alternaria solani*), loài *Cercospora* (ví dụ *Cercospora beticola*), loài *Cladosporium* (ví dụ *Cladosporium cucumerinum*), loài *Cochliobolus* (ví dụ *Cochliobolus sativus* (dạng bào tử: *Drechslera*, syn: *Helminthosporium*) hoặc *Cochliobolus miyabeanus*), loài *Colletotrichum* (ví dụ *Colletotrichum lindemuthianum*), loài *Cycloconium* (ví dụ *Cycloconium oleaginum*), loài *Diaporthe* (ví dụ *Diaporthe citri*), loài *Elsinoe* (ví dụ *Elsinoe fawcettii*), loài *Gloeosporium* (ví dụ *Gloeosporium laeticolor*), loài *Glomerella* (ví dụ *Glomerella cingulate*), loài *Guignardia* (ví dụ *Guignardia bidwelli*), loài *Leptosphaeria* (ví dụ *Leptosphaeria maculans*), loài *Magnaporthe* (ví dụ *Magnaporthe grisea*), loài *Microdochium* (ví dụ *Microdochium nivale*), loài *Mycosphaerella* (ví dụ *Mycosphaerella graminicola*, *Mycosphaerella* hoặc *Mycosphaerella fijiensis*), loài *Phaeosphaeria* (ví dụ *Phaeosphaeria nodorum*), loài *Pyrenophora* (ví dụ *Pyrenophora teres* hoặc *Pyrenophora tritici repentis*), loài *Ramularia* (ví dụ *Ramularia collo-cygni* hoặc *Ramularia areola*), loài *Rhynchosporium* (ví dụ *Rhynchosporium secalis*), loài *Septoria* (ví dụ *Septoria apii* hoặc *Septoria lycopersici*), loài *Stagonospora* (ví dụ *Stagonospora nodorum*), loài *Typhula* (ví dụ *Typhula incarnate*), loài *Venturia* (ví dụ *Venturia inaequalis*) gây ra,

các bệnh ở rễ và thân do, ví dụ, loài *Corticium* (ví dụ *Corticium graminearum*), loài *Fusarium* (ví dụ *Fusarium oxysporum*), loài *Gaeumannomyces*, (ví dụ *Gaeumannomyces graminis*), loài *Plasmodiophora*, (ví dụ *Plasmodiophora brassicae*), loài *Rhizoctonia*, (ví dụ *Rhizoctonia solani*), loài *Sarocladium*, (ví dụ *Sarocladium oryzae*), loài *Sclerotium*, (ví dụ *Sclerotium oryzae*), loài *Tapesia*, (ví dụ *Tapesia acuformis*), loài *Thielaviopsis*, (ví dụ *Thielaviopsis basicola*) gây ra;

các bệnh ở tai và chùm (bao gồm lõi ngô) do, ví dụ, loài *Alternaria* (ví dụ *Alternaria* spp.), loài *Aspergillus* (ví dụ *Aspergillus flavus*), loài *Cladosporium* (ví dụ

Cladosporium cladosporioides, loài *Claviceps* (ví dụ *Claviceps purpurea*), loài *Fusarium*, (ví dụ *Fusarium culmorum*), loài *Gibberella* (ví dụ *Gibberella zeae*), loài *Monographella*, (ví dụ *Monographella nivalis*), loài *Stagnospora*, (ví dụ *Stagnospora nodorum*) gây ra;

các bệnh do nấm than, ví dụ loài *Sphacelotheca* (ví dụ *Sphacelotheca reiliana*), loài *Tilletia* (ví dụ *Tilletia caries* hoặc *Tilletia controversa*), loài *Urocystis* (ví dụ *Urocystis occulta*), loài *Ustilago* (ví dụ *Ustilago nuda*) gây ra;

thối quả do, ví dụ, loài *Aspergillus* (ví dụ *Aspergillus flavus*), loài *Botrytis* (ví dụ *Botrytis cinerea*), loài *Penicillium* (ví dụ *Penicillium expansum* hoặc *Penicillium purpurogenum*), loài *Rhizopus* (ví dụ *Rhizopus stolonifer*), loài *Sclerotinia* (ví dụ *Sclerotinia sclerotiorum*), loài *Verticillium* (ví dụ *Verticillium alboatrum*) gây ra;

các bệnh thối và héo từ hạt và từ đất, và cả các bệnh ở cây non do, ví dụ, loài *Alternaria* (ví dụ *Alternaria brassicicola*), loài *Aphanomyces* (ví dụ *Aphanomyces euteiches*), *Ascochyta* (ví dụ *Ascochyta lentis*), loài *Aspergillus* (ví dụ *Aspergillus flavus*), loài *Cladosporium* (ví dụ *Cladosporium herbarum*), loài *Cochliobolus* (ví dụ *Cochliobolus sativus* (dạng bào tử: *Drechslera*, *Bipolaris* Syn: *Helminthosporium*)), loài *Colletotrichum* (ví dụ *Colletotrichum coccodes*), loài *Fusarium* (ví dụ *Fusarium culmorum*), loài *Gibberella* (ví dụ *Gibberella zeae*), loài *Macrophomina* (ví dụ *Macrophomina phaseolina*), loài *Microdochium* (ví dụ *Microdochium nivale*), loài *Monographella* (ví dụ *Monographella nivalis*), loài *Penicillium* (ví dụ *Penicillium expansum*), loài *Phoma* (ví dụ *Phoma lingam*), loài *Phomopsis* (ví dụ *Phomopsis sojae*), loài *Phytophthora* (ví dụ *Phytophthora cactorum*), loài *Pyrenophora* (ví dụ *Pyrenophora graminea*), loài *Pyricularia* (ví dụ *Pyricularia oryzae*), loài *Pythium* (ví dụ *Pythium ultimum*), loài *Rhizoctonia* (ví dụ *Rhizoctonia solani*), loài *Rhizopus* (ví dụ *Rhizopus oryzae*), loài *Sclerotium* (ví dụ *Sclerotium rolfsii*), loài *Septoria* (ví dụ *Septoria nodorum*), loài *Typhula* (ví dụ *Typhula incarnate*), loài *Verticillium* (ví dụ *Verticillium dahlia*) gây ra;

các bệnh ung thư, sần mụn cây và đám cành quái do, ví dụ, loài *Nectria* (ví dụ, *Nectria galligena*) gây ra;

bệnh héo do, ví dụ, loài *Monilinia* (ví dụ, *Monilinia laxa*) gây ra;

bệnh gây biến dạng lá, hoa và quả do, ví dụ, loài *Exobasidium* (ví dụ, *Exobasidium vexans*), loài *Taphrina* (ví dụ, *Taphrina deformans*) gây ra;

bệnh thoái hóa ở thực vật thân gỗ do, ví dụ, loài *Esca* (ví dụ, *Phaeomoniella chlamydospora*, *Phaeoacremonium aleophilum* hoặc *Fomitiporia mediterranea*), loài *Ganoderma* (ví dụ, *Ganoderma boninense*) gây ra;

bệnh ở hoa và hạt do, ví dụ loài *Botrytis* (ví dụ, *Botrytis cinerea*) gây ra;

bệnh ở củ của thực vật do, ví dụ loài *Rhizoctonia* (ví dụ, *Rhizoctonia solani*), loài *Helminthosporium* (ví dụ, *Helminthosporium solani*) gây ra;

Các bệnh do mầm bệnh vi khuẩn, ví dụ loài *Xanthomonas* (ví dụ *Xanthomonas campestris* pv. *Oryzae*), loài *Pseudomonas* (ví dụ *Pseudomonas syringae* pv. *Lachrymans*), loài *Erwinia* (ví dụ *Erwinia amylovora*) gây ra.

Xử lý hạt

Phương pháp phòng trừ các vi sinh vật không mong muốn có thể được sử dụng để bảo vệ hạt khỏi các vi sinh vật gây bệnh thực vật, như nấm.

Thuật ngữ “(các) hạt” như được sử dụng trong bản mô tả bao gồm hạt ở trạng thái ngủ, hạt đã ngâm nước, hạt trước khi nhú mầm và hạt với rễ và lá đã nhú.

Do đó, sáng chế cũng đề cập đến phương pháp bảo vệ hạt và/hoặc cây trồng khỏi các vi sinh vật không mong muốn, như vi khuẩn hoặc nấm, mà bao gồm bước xử lý hạt bằng một hoặc nhiều hợp chất có công thức (I) hoặc chế phẩm chứa chúng. Việc xử lý hạt bằng (các) hợp chất có công thức (I) hoặc chế phẩm chứa chúng không chỉ bảo vệ hạt khỏi các vi sinh vật gây bệnh thực vật, mà cả cả thực vật nảy mầm, cây non đã nhú lên và thực vật sau khi nhú.

Việc xử lý hạt có thể được thực hiện trước khi gieo, ở thời điểm gieo hoặc một thời gian ngắn sau đó.

Khi thực hiện xử lý hạt trước khi gieo (ví dụ gọi là ứng dụng trên hạt), việc xử lý hạt có thể được thực hiện như sau: hạt có thể được đưa vào máy trộn với lượng mong muốn (các) hợp chất có công thức (I) hoặc chế phẩm chứa chúng (nguyên như vậy hoặc sau khi pha loãng), hạt và (các) hợp chất có công thức (I) hoặc chế phẩm chứa chúng được trộn đến khi phân phối được đồng đều trên hạt. Nếu thích hợp, sau đó hạt có thể được làm khô.

Sáng chế cũng đề cập đến hạt được xử lý bằng một hoặc nhiều hợp chất có công thức (I) hoặc chế phẩm chứa chúng. Như nêu trên, việc sử dụng hạt đã xử lý không chỉ cho phép bảo vệ hạt trước và sau khi gieo khỏi các vi sinh vật không mong muốn, như

nấm gây bệnh thực vật, mà còn cho phép bảo vệ thực vật nảy mầm và cây non nhú lên từ hạt đã qua xử lý. Phần lớn thương tổn đối với cây trồng do sinh vật có hại gây ra đều bắt nguồn từ sự nhiễm khuẩn của hạt trước khi gieo hoặc sau khi cây nảy mầm. Pha này đặc biệt quan trọng vì rễ và chồi của thực vật đang phát triển đặc biệt nhạy cảm, và ngay cả thương tổn nhỏ cũng có thể gây chết cây.

Do đó, sáng chế cũng đề cập đến phương pháp bảo vệ hạt, thực vật nảy mầm và cây non đã nhú lên, tổng quát hơn là phương pháp bảo vệ cây trồng khỏi các vi sinh vật gây bệnh thực vật, mà bao gồm bước sử dụng hạt đã xử lý bằng một hoặc nhiều hợp chất có công thức (I) hoặc chế phẩm chứa chúng.

Tốt hơn nếu hạt được xử lý ở trạng thái trong đó hạt này đủ ổn định đủ để không xuất hiện bất kỳ tổn hại nào trong quá trình xử lý. Nói chung, hạt có thể được xử lý vào thời điểm bất kỳ trong khoảng từ lúc thu hoạch đến một thời gian ngắn sau khi gieo. Thường sử dụng hạt đã được tách ra khỏi cây và tách khỏi lõi, vỏ hạt, cuống, vỏ, lông hoặc thịt quả. Ví dụ, có thể sử dụng hạt đã được thu hoạch, làm sạch và làm khô đến hàm lượng hơi ẩm nhỏ hơn 15% trọng lượng. Theo cách khác, cũng có thể sử dụng hạt mà sau khi sấy khô, ví dụ, đã được xử lý bằng nước và sau đó sấy khô lại, hoặc hạt ngay sau khi phơi nước, hoặc hạt được bảo quản ở điều kiện phơi nước hoặc hạt trước khi nảy mầm, hoặc hạt đã gieo trong khay, băng hoặc giấy ươm hạt.

Lượng (các) hợp chất có công thức (I) hoặc chế phẩm chứa chúng được áp dụng cho hạt thường sao cho khả năng nảy mầm của hạt không bị suy yếu, hoặc sao cho thực vật thu được không bị thương tổn. Điều này phải bảo đảm, nhất là trong trường hợp các thành phần hoạt tính có thể thể hiện các tác dụng gây độc thực vật ở các tỷ lệ áp dụng nhất định. Kiểu hình thực chất của thực vật chuyển gen cũng cần được xem xét khi xác định lượng (các) hợp chất có công thức (I) hoặc chế phẩm chứa chúng cần áp dụng lên hạt để đạt được mức độ bảo vệ hạt và thực vật nảy mầm tối ưu với lượng tối thiểu (các) hợp chất có công thức (I) hoặc chế phẩm chứa chúng được sử dụng.

Như đã chỉ ra trên đây, các hợp chất có công thức (I) có thể được áp dụng, nguyên như vậy, trực tiếp lên hạt, tức là không sử dụng thành phần bất kỳ khác và không pha loãng, hoặc chế phẩm chứa các hợp chất có công thức (I) có thể được áp dụng. Tốt hơn là các chế phẩm được áp dụng lên hạt ở dạng bất kỳ thích hợp. Ví dụ về các chế phẩm thích hợp bao gồm dung dịch, nhũ tương, huyền phù, bột, bột, huyền phù đặc hoặc kết hợp với các chế phẩm bao ngoài khác dùng cho hạt, như vật liệu tạo màng, vật liệu kết viên,

bột sắt hoặc kim loại khác mịn, hạt mịn, vật liệu bao ngoài dùng cho hạt đã bất hoạt và cả các chế phẩm ULV. Các chế phẩm phối chế này là các chế phẩm phối chế dùng ngay hoặc có thể là các thể đặc cần được pha loãng trước khi sử dụng.

Các chế phẩm này được điều chế theo cách đã biết, chẳng hạn bằng cách trộn thành phần hoạt tính hoặc hỗn hợp thành phần hoạt tính với các chất phụ gia thông thường, ví dụ, chất độn thông thường và dung môi hoặc chất pha loãng, thuốc nhuộm, chất làm ướt, chất phân tán, chất nhũ tương, chất chống tạo bọt, chất bảo quản, chất gây lắng thứ cấp, chất dính bám, gibberelin và cả nước.

Các chế phẩm này được điều chế theo cách đã biết, bằng cách trộn các thành phần hoạt tính hoặc hỗn hợp thành phần hoạt tính với chất phụ gia thông thường, ví dụ, chất độn thông thường và cả dung môi hoặc chất pha loãng, thuốc nhuộm, chất làm ướt, chất phân tán, chất nhũ tương, chất chống tạo bọt, chất bảo quản, chất gây lắng thứ cấp, chất dính bám, gibberelin và cả nước.

Các thuốc nhuộm hữu ích mà có thể có mặt trong chế phẩm phối chế xử lý hạt là tất cả các thuốc nhuộm mà thường dùng cho mục đích như vậy. Có thể sử dụng các chất màu ít tan trong nước hoặc thuốc nhuộm tan trong nước. Ví dụ bao gồm các thuốc nhuộm đã biết với tên Rhodamin B, C.I. Pigment Red 112 và C.I. Solvent Red 1. Các chất làm ướt hữu ích có thể có mặt trong chế phẩm phối chế xử lý hạt là tất cả các chất mà thúc đẩy việc làm ướt và thường dùng cho các chế phẩm phối chế chứa thành phần hoạt tính hóa nông Ưu tiên sử dụng các hợp chất alkylnaphtalensulphonat, như diisopropyl- hoặc diisobutylnaphtalensulphonat. Các chất phân tán và/hoặc chất nhũ hóa hữu ích có thể có mặt trong chế phẩm phối chế xử lý hạt là tất cả các chất phân tán không ion, anion và cation thường dùng trong chế phẩm phối chế chứa thành phần hoạt tính hóa nông. Ưu tiên sử dụng chất phân tán không ion hoặc anion hoặc hỗn hợp gồm các chất phân tán không ion hoặc anion. Các chất phân tán không ion hữu dụng hợp bao gồm đặc biệt là polyme khối etylen oxit/propylen oxit, alkylphenol polyglycol ete và tristyrylphenol polyglycol ete và các dẫn xuất được phosphat hoá hoặc sulphat hoá của nó. Các chất phân tán anion thích hợp đặc biệt là lignosulphonat, muối axit polyacrylic và chất ngưng tụ arylsulphonat/formaldehyt. Các chất chống tạo bọt mà có thể có mặt trong chế phẩm phối chế xử lý hạt là tất cả các chất ức chế bọt thường dùng cho chế phẩm phối chế chứa thành phần hoạt tính hóa nông. Chất chống tạo bọt silicon và magie stearat có thể được ưu tiên sử dụng. Các chất bảo quản có thể có mặt trong chế phẩm phối chế xử lý hạt là

tất cả các chất có thể sử dụng cho mục đích như vậy trong chế phẩm hoá nông. Các ví dụ bao gồm diclophen và của hemiformal rượu benzylic. Chất làm đặc thứ cấp mà có thể có mặt trong chế phẩm phối chế xử lý hạt là tất cả các chất có thể sử dụng cho các mục đích như vậy trong chế phẩm hoá nông. Các ví dụ được ưu tiên bao gồm dẫn xuất xenluloza, dẫn xuất của axit acrylic, xanthan, đất sét biến tính và silic oxit nghiền mịn. Các chất kết dính có thể có mặt trong chế phẩm phối chế xử lý hạt là tất cả các chất kết dính thông thường có thể sử dụng trong sản phẩm xử lý hạt. Các ví dụ được ưu tiên bao gồm polyvinylpyrrolidon, polyvinyl axetat, rượu polyvinyllic và tyloza.

Các hợp chất có công thức (I) và các chế phẩm chứa chúng thích hợp để bảo vệ hạt của giống thực vật bất kỳ mà được sử dụng trong nông nghiệp, trong nhà kính, trong lâm nghiệp hoặc trong làm vườn. Cụ thể hơn, hạt là hạt ngũ cốc (như lúa mỳ, đại mạch, hắc mạch, kê, tiểu hắc mạch, và yến mạch), cây cải dầu, ngô, bông, đậu tương, lúa gạo, khoai tây, hướng dương, đậu Hà Lan, cà phê, củ cải (ví dụ củ cải đường và củ cải đường cho chăn nuôi), lạc, rau (như cà chua, dưa chuột, hành và rau diếp), bãi cỏ và cây cảnh. Đặc biệt có ý nghĩa là việc xử lý hạt lúa mỳ, đậu tương, cây cải dầu, ngô và lúa gạo.

Các hợp chất có công thức (I) hoặc chế phẩm chứa chúng có thể được sử dụng để xử lý hạt chuyển gen, cụ thể hạt của thực vật có khả năng biểu hiện protein mà hoạt động chống lại sinh vật gây hại, thương tổn do thuốc diệt cỏ gây ra hoặc điều kiện bất lợi phi sinh học, nhờ đó tăng hiệu quả bảo vệ. Tác dụng hiệp đồng bổ sung cũng có thể xảy ra khi tương tác với các chất được tạo thành bằng cách biểu hiện.

Ứng dụng

(Các) thành phần hoạt tính có thể được áp dụng nguyên như vậy, ở dạng chế phẩm phối chế của chúng hoặc ở các dạng sử dụng được điều chế từ các chế phẩm phối chế này khi chúng không dùng được ngay.

Việc ứng dụng lên thực vật, bộ phận của thực vật, quả, hạt hoặc đất được thực hiện theo cách thông thường, ví dụ bằng cách tưới nước, phun, phun sương, phát tán, rắc bụi, tạo bột, rải và tương tự. Các thành phần hoạt tính cũng có thể được sử dụng bằng phương pháp thể tích siêu nhỏ hoặc được bơm vào đất.

Lượng hữu hiệu và không độc cho thực vật của các hợp chất có công thức (I) hoặc của chế phẩm chứa chúng được áp dụng lên thực vật, bộ phận của thực vật, quả, hạt hoặc đất sẽ phụ thuộc vào nhiều yếu tố khác nhau, như hợp chất/chế phẩm được sử dụng,

đối tượng xử lý (thực vật, bộ phận của thực vật, quả, hạt hoặc đất), cách xử lý (rắc bụi, phun, xử lý hạt), mục đích của việc xử lý (để phòng ngừa hoặc để điều trị) và loại vi sinh vật.

Khi các hợp chất có công thức (I) được sử dụng làm chất diệt nấm, tỷ lệ áp dụng có thể thay đổi trong phạm vi tương đối rộng, tùy thuộc vào loại ứng dụng. Chẳng hạn, khi các hợp chất có công thức (I) được sử dụng để xử lý các bộ phận của thực vật, như lá, tỷ lệ áp dụng có thể nằm trong khoảng từ 0,1 đến 10000 g/ha, tốt hơn là từ 10 đến 1000 g/ha, tốt hơn nữa là từ 50 đến 300 g/ha (trong trường hợp ứng dụng bằng cách tưới nước hoặc nhỏ giọt, thậm chí có thể giảm tỷ lệ áp dụng, đặc biệt là khi sử dụng các vật liệu tro như bông khoáng hoặc đá trân châu). Khi các hợp chất có công thức (I) được sử dụng để xử lý hạt, tỷ lệ áp dụng có thể nằm trong khoảng từ 0,1 đến 200 g trên 100 kg hạt, tốt hơn là từ 1 đến 150 g trên 100 kg hạt, tốt hơn nữa là từ 2,5 đến 25 g trên 100 kg hạt, còn tốt hơn nữa là từ 2,5 đến 12,5 g trên 100 kg hạt. Khi các hợp chất có công thức (I) được sử dụng để xử lý đất, tỷ lệ áp dụng có thể nằm trong khoảng từ 0,1 đến 10 000 g/ha, tốt hơn là từ 1 đến 5000 g/ha.

Theo mục đích của sáng chế, các tỷ lệ áp dụng này nhằm minh họa và không phải để hạn chế.

Các độc tố nấm

Ngoài ra, hợp chất có công thức (I) hoặc chế phẩm chứa chúng có thể làm giảm hàm lượng độc tố nấm trong vật liệu sau thu hoạch và thực phẩm và thức ăn được chế biến từ vật liệu nêu trên. Độc tố nấm cụ thể bao gồm, nhưng không chỉ duy nhất ở các loại sau: deoxynivalenol (DON), nivalenol, 15-Ac-DON, 3-Ac-DON, T2- và HT2-toxin, fumonisin, zearalenon, moniliformin, fusarin, diacetoxyscirpenol (DAS), beauvericin, enniatin, fusaroproliferin, fusarenol, ochratoxin, patulin, ergot alkaloid và aflatoxin mà chúng có thể được sản sinh, ví dụ từ các nấm sau: *Fusarium* spec., như *F. acuminatum*, *F. asiaticum*, *F. avenaceum*, *F. crookwellense*, *F. culmorum*, *F. graminearum* (*Gibberella zeae*), *F. equiseti*, *F. fujikuroi*, *F. musarum*, *F. oxysporum*, *F. proliferatum*, *F. poae*, *F. pseudograminearum*, *F. sambucinum*, *F. scirpi*, *F. semitectum*, *F. solani*, *F. sporotrichoides*, *F. langsethiae*, *F. subglutinans*, *F. tricinctum*, *F. verticillioides* etc., và cả từ *Aspergillus* spec., như *A. flavus*, *A. parasiticus*, *A. nomius*, *A. ochraceus*, *A. clavatus*, *A. terreus*, *A. versicolor*, *Penicillium* spec., như *P. verrucosum*, *P. viridicatum*,

P. citrinum, *P. expansum*, *P. claviforme*, *P. roqueforti*, *Claviceps* spec., như *C. purpurea*, *C. fusiformis*, *C. paspali*, *C. africana*, *Stachybotrys* spec. và các loài khác.

Các hợp chất có công thức (I) và chế phẩm chứa chúng cũng có thể được sử dụng trong bảo vệ vật liệu, chẳng hạn vật liệu công nghiệp, khỏi sự tấn công và phá hủy của vi sinh vật, như nấm.

Thuật ngữ “vật liệu công nghiệp” như được sử dụng trong bản mô tả chỉ các vật liệu vô tri vô giác mà có thể được sử dụng trong công nghiệp. Ví dụ về các vật liệu công nghiệp bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, chất kết dính, keo, giấy, giấy dán tường, giấy bồi/bìa cứng, vải, thảm, da, gỗ, sợi, khăn giấy, sơn, vật dụng bằng chất dẻo, chất bôi trơn làm mát, chất lỏng truyền nhiệt và các vật liệu khác mà có thể bị nhiễm hoặc bị phá hủy bởi các vi sinh vật. Các vật liệu công nghiệp được ưu tiên bao gồm chất kết dính, hồ dán, giấy và thẻ, da, gỗ, sơn, vật liệu bôi trơn làm mát và các chất lỏng truyền nhiệt, tốt hơn là gỗ. Các hợp chất có công thức (I) và các chế phẩm chứa chúng có thể ngăn ngừa các ảnh hưởng bất lợi, như thối, mục, mất màu hoặc hình thành mốc.

Các vật liệu khác mà có thể được bảo vệ bằng các hợp chất và chế phẩm theo sáng chế bao gồm các bộ phận của cơ sở sản xuất và các toà nhà mà có thể bị hư hỏng do sự tăng sinh của các vi sinh vật, ví dụ các vòng tuần hoàn nước làm mát, hệ thống gia nhiệt và làm mát và các bộ thông hơi và điều hòa không khí.

Ngoài ra, các hợp chất có công thức (I) và chế phẩm chứa chúng có thể được sử dụng để bảo vệ các đối tượng tiếp xúc với nước mặn hoặc nước lợ, đặc biệt là thân tàu thủy, sàn, lưới, tòa nhà, nơi neo giữ tàu và các hệ thống truyền tín hiệu, chống lại sự đóng cặn. Nhờ đó, hợp chất có công thức (I) và chế phẩm chứa chúng có thể được sử dụng làm tác nhân chống đóng cặn, đơn độc hoặc kết hợp với các thành phần hoạt tính khác.

Các hợp chất có công thức (I) và chế phẩm chứa chúng cũng có thể được sử dụng để xử lý gỗ, cụ thể là để xử lý gỗ chống lại các bệnh nấm có khả năng phát triển trên hoặc trong thân gỗ. Thuật ngữ “thân gỗ” chỉ tất cả các loại và loài gỗ và tất cả các loại gỗ xây dựng, ví dụ gỗ đặc, gỗ tỷ trọng-cao, gỗ lát, và gốc dán. Phương pháp làm ví dụ để xử lý thân gỗ bao gồm bước cho một hoặc nhiều hợp chất có công thức (I) hoặc chế phẩm chứa chúng tiếp xúc với thân gỗ. Bước tiếp xúc có thể được thực hiện bằng cách áp dụng trực tiếp, phun, nhúng, tiêm hoặc bằng cách thích hợp bất kỳ khác.

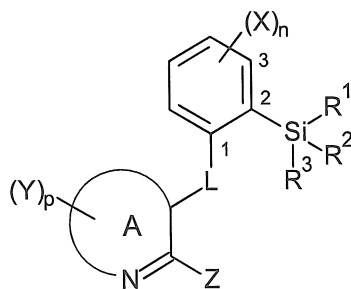
Các hợp chất có công thức (I) và chế phẩm chứa chúng cũng có thể được sử dụng để bảo vệ hàng hóa lưu kho. Thuật ngữ “hàng hóa lưu kho” như được sử dụng trong bản mô tả chỉ các vật chất tự nhiên có nguồn gốc từ thực vật hoặc động vật hoặc sản phẩm đã qua xử lý từ đó mà mong muốn bảo quản lâu dài. Ví dụ về hàng hóa lưu kho có nguồn gốc thực vật mà có thể được bảo vệ bao gồm thực vật hoặc bộ phận của thực vật, như thân, lá, củ, hạt giống, quả và hạt. Chúng có thể được bảo vệ ở trạng thái mới thu hoạch hoặc sau khi đã chế biến, như bằng cách làm khô (sơ bộ), làm ẩm, tán, nghiền, ép và/hoặc rang. Ví dụ về hàng hóa lưu kho có nguồn gốc động vật bao gồm da sống, da thuộc, bộ da lông và lông. Các hợp chất có công thức (I) hoặc chế phẩm chứa chúng có thể ngăn ngừa các ảnh hưởng bất lợi, như thối, mục, mất màu hoặc hình thành mốc.

Vi sinh vật mà có khả năng làm thoái biến hoặc làm thay đổi vật liệu công nghiệp bao gồm, ví dụ, vi khuẩn, nấm, nấm men, tảo và các sinh vật tạo nhớt. Hợp chất có công thức (I) tốt hơn hoạt động chống lại nấm, nhất là mốc, nấm làm phai màu gỗ và nấm phá hủy gỗ (*Ascomycetes*, *Basidiomycetes*, *Deuteromycetes* và *Zygomycetes*), và chống lại các sinh vật tạo nhớt và tảo. Ví dụ bao gồm các vi sinh vật thuộc các chi sau: *Alternaria*, như *Alternaria tenuis*; *Aspergillus*, như *Aspergillus niger*; *Chaetomium*, như *Chaetomium globosum*; *Coniophora*, như *Coniophora puetana*; *Lentinus*, như *Lentinus tigrinus*; *Penicillium*, như *Penicillium glaucum*; *Polyporus*, như *Polyporus versicolor*; *Aureobasidium*, như *Aureobasidium pullulans*; *Sclerophoma*, như *Sclerophoma pityophila*; *Trichoderma*, như *Trichoderma viride*; *Ophiostoma spp.*, *Ceratocystis spp.*, *Humicola spp.*, *Petriella spp.*, *Trichurus spp.*, *Coriolus spp.*, *Gloeophyllum spp.*, *Pleurotus spp.*, *Poria spp.*, *Serpula spp.* và *Tyromyces spp.*, *Cladosporium spp.*, *Paecilomyces spp.* *Mucor spp.*, *Escherichia*, như *Escherichia coli*; *Pseudomonas*, như *Pseudomonas aeruginosa*; *Staphylococcus*, như *Staphylococcus aureus*, *Candida spp.* và *Saccharomyces spp.*, như *Saccharomyces cerevisiae*.

Các khía cạnh của sáng chế có thể được hiểu thêm dựa trên các ví dụ sau đây, các ví dụ này không được hiểu là để giới hạn phạm vi của các khía cạnh theo cách bất kỳ.

Ví dụ thực hiện sáng chế

Bảng 1 minh họa, theo cách không giới hạn, ví dụ về các hợp chất có công thức (I) sáng chế:



(I)

Các hợp chất có công thức (I) được nêu trong bảng 1 sau đây được điều chế theo các quy trình chi tiết dưới đây kết hợp với các ví dụ cụ thể và với phần mô tả chung về các quy trình được mô tả trong bản mô tả.

Trong bảng 1, trừ khi được chỉ định khác, M+H (ApCI+) nghĩa là đỉnh ion phân tử cộng 1 đơn vị khối lượng nguyên tử (atomic mass unit - a.m.u.) như quan sát được trong phổ khối qua ion hóa hóa học ở áp suất khí quyển.

Trong bảng 1, các giá trị logP được xác định theo EEC Directive 79/831 Annex V.A8 bằng phương pháp sắc ký lỏng hiệu năng cao (High Performance Liquid Chromatography - HPLC) trên cột đảo pha (C 18), bằng các phương pháp được mô tả sau đây:

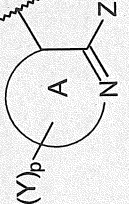
Phương pháp A: nhiệt độ: 40°C; pha động: 0,1% dung dịch nước axit formic và axetonitril; gradien tuyến tính từ 10% axetonitril đến 95% axetonitril;

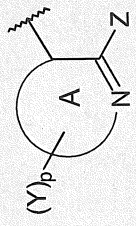
Phương pháp B: nhiệt độ: 40°C; pha động: dung dịch nước amoni axetat 0,001 M trong nước và axetonitril; gradien tuyến tính từ 10% axetonitril đến 95% axetonitril.

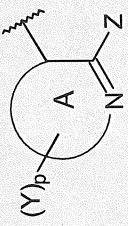
Việc hiệu chuẩn được thực hiện bằng các sử dụng các alkan-2-on không phân nhánh (chứa 3 đến 16 nguyên tử cacbon) với các giá trị logP đã biết (xác định giá trị logP bằng thời gian lưu sử dụng phương pháp nội suy tuyến tính giữa hai alkanon liên tiếp). Các giá trị lambda-max được xác định bằng phổ UV từ 200 nm đến 400 nm và các giá trị đỉnh của tín hiệu sắc ký.

Trong bảng 1, điểm gắn kết của gốc (X)_n với vòng phenyl là dựa trên cách đánh số trên đây của vòng phenyl.

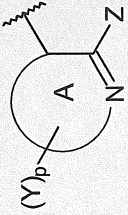
Bảng 1:

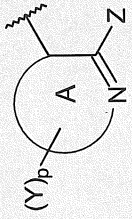
Ví dụ	R ¹	R ²	R ³	(X) _n	L		M+H	logP	Phương pháp logP
I.001	Me	Me	Me	-	O	quinolin-3-yl	294	5,17	A
I.002	Me	Me	OH	-	O	quinolin-3-yl	296	2,82	A
I.003	Me	Me	OH	3-F	O	quinolin-3-yl	314	2,90	A
I.004	Me	Me	-OCH ₂ -		O	quinolin-3-yl	308	3,64	A
I.005	Me	Me	Et	3-F	O	quinolin-3-yl	326	5,47	A
I.006	Me	Me	vinyl	3-F	O	quinolin-3-yl	324	5,24	A
I.007	Me	Me	clometyl	3-F	O	quinolin-3-yl	346	5,00	A
I.008	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	Me	Me	3-F	O	quinolin-3-yl	324	5,39	A
I.009	Me	Me	OH	-	NH	quinolin-3-yl	295	3,20	B
I.010	Me	Me	-OCH ₂ -		NH	quinolin-3-yl	307	3,15	B
I.011	Me	Me	Me	-	NH	quinolin-3-yl	293	3,46	A
I.012	Me	Me	Me	-	CH ₂	quinolin-3-yl	292	4,06	A
I.013	Me	Me	phenyl	-	CH ₂	quinolin-3-yl	354	4,20	A
I.014	Me	Me	4-clophenyl	-	CH ₂	quinolin-3-yl	388	4,74	A

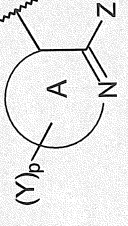
Ví dụ	R ¹	R ²	R ³	(X) _n	L		M+H	logP	Phương pháp logP
I.015	Me	Me	2-thienyl	-	CH ₂	quinolin-3-yl	360	4,04	A
I.016	Me	Me	4-phenoxyphenyl	-	CH ₂	quinolin-3-yl	446	5,62	A
I.017	Me	Me	Me	3-F	C=O	quinolin-3-yl	324	4,49	A
I.018	Me	Me	OH	4-F	O	8-cloquinolin-3-yl	348	3,50	A
I.019	Me	Me	Me	4-F	O	8-cloquinolin-3-yl	346	5,62	A
I.020	Me	Me	Me	-	O	7,8-difloquinolin-3-yl	330	5,39	A
I.021	Me	Me	Me	3-F	O	7,8-difloquinolin-3-yl	348	5,32	A
I.022	Me	Me	OH	3-F	O	7,8-difloquinolin-3-yl	350	2,35	A
I.023	Me	Me	OH	-	O	7,8-difloquinolin-3-yl	332	3,27	A
I.024	Me	Me	Me	-	O	7,8-diflo-2-methylquinolin-3-yl	344	6,01	A
I.025	Me	Me	OH	3-F	O	7,8-diflo-2-methylquinolin-3-yl	364	3,55	A
I.026	Me	Me	OH	-	O	7,8-diflo-2-methylquinolin-3-yl	346	3,51	A
I.027	Me	Me	Me	3-F	O	7,8-diflo-2-methylquinolin-3-yl	362	5,54	B
I.028	Me	Me	phenyl	3-F	O	7,8-diflo-2-methylquinolin-3-yl	424	6,01	A

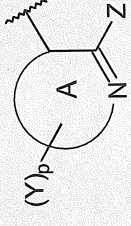
Ví dụ	R ¹	R ²	R ³	(X) _n	L		M+H	logP	Phương pháp logP
I.029	Me	Me	Me	5-NH ₂	O	7,8-diflo-2-methylquinolin-3-yl	359	4,59	A
I.030	Me	Me	2-thienyl	3-F	O	7,8-diflo-2-methylquinolin-3-yl	430	5,65	A
I.031	Me	Me	Me	5-NO ₂	O	7,8-diflo-2-methylquinolin-3-yl	389	5,34	A
I.032	Me	Me	F	3-F	O	7,8-diflo-2-methylquinolin-3-yl	366	4,75	A
I.033	Me	Me	OH	3-OMe	O	7,8-diflo-2-methylquinolin-3-yl	376	3,69	A
I.034	Me	Me	OH	3-Cl	O	7,8-diflo-2-methylquinolin-3-yl	380	3,83	A
I.035	Me	Me	OH	5-F	O	7,8-diflo-2-methylquinolin-3-yl	364	3,55	A
I.036	Me	Me	OH	3-OCF ₃	O	7,8-diflo-2-methylquinolin-3-yl	430	4,20	A
I.037	Me	Me	OH	4-F	O	7,8-diflo-2-methylquinolin-3-yl	364	3,55	A
I.038	Me	Me	Me	3-OMe	O	7,8-diflo-2-methylquinolin-3-yl	374	5,85	A
I.039	Me	Me	Et	3-CN	O	7,8-diflo-2-methylquinolin-3-yl	383	5,22	A
I.040	Me	Me	Me	-	CH ₂	7,8-diflo-2-methylquinolin-3-yl	342	5,54	A
I.041	Me	Me	Et	-	O	5,6,7,8-tetrahydroquinolin-3-yl	312	3,68	A
I.042	Me	Me	Me	3-F	O	4-methylquinolin-3-yl	326	5,62	A
I.043	Me	Me	Et	3-CN	O	4-[ethyl(dimethyl)silyl]-7,8-diflo-	469	7,36	A

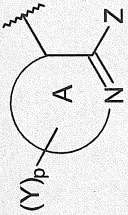
Ví dụ	R ¹	R ²	R ³	(X) _n	L		M+H	logP	Phương pháp logP
						2-methylquinolin-3-yl			
I.044	Me	Me	Me	3-F	O	2-vinylquinolin-3-yl	338	6,30	A
I.045	Me	Me	Me	3-F	O	2-phenylquinolin-3-yl	388	6,40	A
I.046	Me	Me	Me	3-F	O	2-methylquinolin-3-yl	326	5,08	A
I.047	Me	Me	Me	-	O	2-methylquinolin-3-yl	308	4,85	A
I.048	Me	Me	OH	-	O	2-methylquinolin-3-yl	310	2,16	A
I.049	Me	Me	OH	3-F	O	2-methylquinolin-3-yl	328	2,41	A
I.050	Me	Me	OH	3-OCF ₃	O	2-methylquinolin-3-yl	394	3,35	A
I.051	Me	Me	OH	3-Cl	O	2-methylquinolin-3-yl	344	2,80	A
I.052	Me	Me	Et	3-F	O	2-methylquinolin-3-yl	340	5,62	A
I.053	Me	Me	H	3-F	O	2-methylquinolin-3-yl	312	4,56	A
I.054	Me	Me	Me	-	NH	2-methylquinolin-3-yl	307	2,46	A
I.055	Me	Me	Me	4-F	NH	2-methylquinolin-3-yl	325	2,63	A
I.056	Me	Me	Me	-	NEt	2-methylquinolin-3-yl	335	3,16	A
I.057	Me	Me	Et	3-F	O	2-methyl-1-oxidoquinolin-3-yl	356	4,54	A

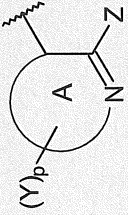
Ví dụ	R ¹	R ²	R ³	(X) _n	L		M+H	logP	Phương pháp logP
I.058	Me	Me	Me	-	NH	2-methyl-1-oxidoquinolin-3-yl	323	3,62	A
I.059	Me	Me	Me	3-F	O	2-hydroxyquinolin-3-yl	328	3,85	A
I.060	Me	Me	Me	3-F	O	2-etoxyquinolin-3-yl	356	6,79	A
I.061	Me	Me	Me	3-F	O	2-xyclopropylquinolin-3-yl	352	6,90	A
I.062	Me	phenyl	H	3-F	O	2-cloquinolin-3-yl	394	5,78	A
I.063	Me	Me	Me	3-F	O	2-cloquinolin-3-yl	346	5,90	A
I.064	Me	Me	Me	3-F	O	2-(methylsulfanyl)quinolin-3-yl	358	6,79	A
I.065	Me	Me	Me	3-F	O	2-(diflometyl)quinolin-3-yl	362	5,45	A
I.066	Me	Me	Me	3-F	NH	2-(diflometyl)quinolin-3-yl	361	5,68	A
I.067	Me	Me	Me	3-F	O	2-(3-thienyl)quinolin-3-yl	394	6,66	A
I.068	Me	Me	Me	-	O	quinoxalin-2-yl	295	5,05	A
I.069	Me	Me	Me	3-F	O	quinoxalin-2-yl	313	5,22	A
I.070	Me	Me	OH	-	O	quinoxalin-2-yl	297	2,86	A
I.071	Me	Me	OH	3-F	O	quinoxalin-2-yl	315	3,01	A
I.072	Me	Me	ter-butyl	-	O	quinoxalin-2-yl	337	6,30	A

Ví dụ	R ¹	R ²	R ³	(X) _n	L		M+H	logP	Phương pháp logP
I.073	Me	Me	isobutyl	-	O	quinoxalin-2-yl	337	6,33	A
I.074	Et	Et	Et	-	O	quinoxalin-2-yl	337	6,43	A
I.075	Me	Me	isopropyl	-	O	quinoxalin-2-yl	323	5,91	A
I.076	Me	Me	Et	-	O	quinoxalin-2-yl	309	5,48	A
I.077	Me	Me	Et	-	O	5,6-difloquinoxalin-2-yl	345	5,62	A
I.078	Me	Me	Me	3-F	O	5,6-difloquinoxalin-2-yl	349	5,20	A
I.079	Me	Me	Me	-	O	5,6-difloquinoxalin-2-yl	331	5,28	A
I.080	Me	Me	cyclohexyl	-	O	5,6-difloquinoxalin-2-yl	399	6,94	A
I.081	Me	Me	OH	-	O	5,6-difloquinoxalin-2-yl	333	3,23	A
I.082	Me	Me	OH	3-F	O	5,6-difloquinoxalin-2-yl	351	3,33	A
I.083	Me	Me	F	3-F	O	5,6-difloquinoxalin-2-yl	353	5,01	A
I.084	Me	Me	Me	-	NH	5,6-difloquinoxalin-2-yl	330	4,49	A
I.085	Me	Me	OH	3-F	O	5,6-diflo-3-methylquinoxalin-2-yl	365	3,67	A
I.086	Me	Me	Me	-	O	5,6-diflo-3-methylquinoxalin-2-yl	345	5,46	A
I.087	Me	Me	OH	-	O	5,6-diflo-3-methylquinoxalin-2-yl	347	3,35	A

Ví dụ	R ¹	R ²	R ³	(X) _n	L		M+H	logP	Phương pháp logP
I.088	Me	Me	Me	3-F	O	5,6-diflo-3-methylquinoxalin-2-yl	363	5,65	A
I.089	Me	Me	OH	6-F	O	5,6-diflo-3-methylquinoxalin-2-yl	365	3,62	A
I.090	Me	Me	OH	3-Cl	O	5,6-diflo-3-methylquinoxalin-2-yl	381	3,94	A
I.091	Me	Me	vinyl	3-F	O	5,6-diflo-3-methylquinoxalin-2-yl	375	5,62	A
I.092	Me	Me	F	3-F	O	5,6-diflo-3-methylquinoxalin-2-yl	367	4,75	A
I.093	Me	Me	OH	5-CN	O	5,6-diflo-3-methylquinoxalin-2-yl	372	3,39	A
I.094	Me	Me	OH	3-OMe	O	5,6-diflo-3-methylquinoxalin-2-yl	377	3,60	A
I.095	Me	Me	OH	3-OCF ₃	O	5,6-diflo-3-methylquinoxalin-2-yl	431	4,34	A
I.096	Me	Me	OH	5-Me	O	5,6-diflo-3-methylquinoxalin-2-yl	361	3,76	A
I.097	Me	Me	OH	3-Me	O	5,6-diflo-3-methylquinoxalin-2-yl	361	3,76	A
I.098	Me	Me	OH	4-F	O	5,6-diflo-3-methylquinoxalin-2-yl	365	3,63	A
I.099	Me	Me	OH	4-Me	O	5,6-diflo-3-methylquinoxalin-2-yl	361	3,85	A
I.100	Me	Me	Me	4-F	O	5,6-diflo-3-methylquinoxalin-2-yl	363	5,57	A
I.101	Me	Me	Me	4-Cl	O	5,6-diflo-3-methylquinoxalin-2-yl	379	6,11	A
I.102	Me	Me	OH	4-Cl	O	5,6-diflo-3-methylquinoxalin-2-yl	381	4,01	A

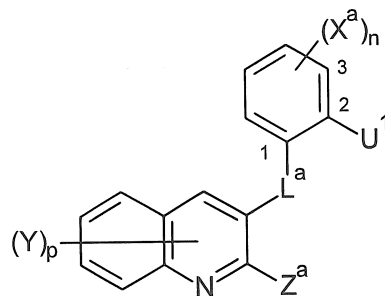
Ví dụ	R ¹	R ²	R ³	(X) _n	L		M+H	logP	Phương pháp logP
I.103	Me	Me	OH	6-Cl	O	5,6-diflo-3-metylquininoxalin-2-yl	381	3,96	A
I.104	Me	Me	OH	6-Me	O	5,6-diflo-3-metylquininoxalin-2-yl	361	3,73	A
I.105	Me	Me	OH	5-F	O	5,6-diflo-3-metylquininoxalin-2-yl	365	3,58	A
I.106	Me	Me	Me	6-Cl	O	5,6-diflo-3-metylquininoxalin-2-yl	379	6,07	A
I.107	Me	Me	Me	6-Me	O	5,6-diflo-3-metylquininoxalin-2-yl	359	5,88	A
I.108	Me	Me	Me	5-F	O	5,6-diflo-3-metylquininoxalin-2-yl	363	5,57	A
I.109	Me	Me	OH	3-F	O	3-metylquininoxalin-2-yl	329	3,25	A
I.110	Me	Me	Me	-	O	3-metylquininoxalin-2-yl	309	5,31	A
I.111	Me	Me	Me	3-F	O	3-metylquininoxalin-2-yl	327	5,45	A
I.112	Me	Me	OH	-	O	3-metylquininoxalin-2-yl	311	3,01	A
I.113	Me	Me	2-thienyl	3-F	O	3-metylquininoxalin-2-yl	395	5,51	A
I.114	Me	Me	4-metoxyphe- nyl	3-F	O	3-metylquininoxalin-2-yl	419	5,35	A
I.115	Me	Me	phenyl	3-F	O	3-metylquininoxalin-2-yl	389	5,59	A
I.116	Me	Me	Me	3-F	O	1,5-naphthyridin-3-yl	313	4,15	A

Ví dụ	R ¹	R ²	R ³	(X) _n	L		M+H	logP	Phương pháp logP
I.117	Me	Me	OH	3-F	O	thieno[3,2-b]pyridin-6-yl	320	2,80	A
I.118	Me	Me	Me	3-F	O	thieno[3,2-b]pyridin-6-yl	318	5,22	A
I.119	Me	Me	OH	3-F	O	thieno[2,3-b]pyridin-5-yl	320	3,09	A
I.120	Me	Me	Me	3-F	O	thieno[2,3-b]pyridin-5-yl	318	5,45	A
I.121	Me	Me	OH	3-F	O	pyrazolo[1,5-a]pyrimidin-6-yl	304	2,07	A
I.122	Me	Me	Me	3-F	O	pyrazolo[1,5-a]pyrimidin-6-yl	302	4,23	A
I.123	Me	Me	Me	-	O	pyrazolo[1,5-a]pyrimidin-6-yl	284	4,11	A
I.124	Me	Me	Me	-	O	imidazo[1,2-a]pyrimidin-6-yl	284	2,78	A
I.125	Me	Me	OH	-	O	imidazo[1,2-a]pyrimidin-6-yl	286	2,10	A
I.126	Me	Me	OH	-	O	3-flopyrazolo[1,5-a]pyrimidin-6-yl	304	2,50	A
I.127	Me	Me	OH	3-F	O	3-flopyrazolo[1,5-a]pyrimidin-6-yl	322	2,60	A
I.128	Me	Me	Me	3-F	O	3-flopyrazolo[1,5-a]pyrimidin-6-yl	320	4,61	A
I.129	Me	Me	Me	-	O	3-flopyrazolo[1,5-a]pyrimidin-6-yl	302	4,56	A
I.130	Me	Me	Me	-	CH ₂	4-methylquinolin-3-yl	306	3,19	A

Ví dụ	R ¹	R ²	R ³	(X) _n	L		M+H	logP	Phương pháp logP
I.131	Me	Me	Me	3-F	S	quinolin-3-yl	328	5,72	A
I.132	Me	Me	Me	3-F	S(=O)	quinolin-3-yl	344	3,63	A
I.133	Me	Me	Me	3-F	CH(OH)	quinolin-3-yl	326	4,16	A
I.134	Me	Me	Me	4-Cl	O	2-methylquinolin-3-yl	342	5,68	A
I.135	Me	Me	Me	4-phenyl	O	2-methylquinolin-3-yl	384	6,27	A
I.136	Me	Me	Me	4-cyclopropyl	O	2-methylquinolin-3-yl	348	5,68	A
I.137	Me	Me	Me	4-vinyl	O	2-methylquinolin-3-yl	334	5,51	A
I.138	Me	Me	Me	4-(3-thienyl)	O	2-methylquinolin-3-yl	390	5,85	A
I.139	Me	Me	Me	-	CH ₂	2-methylquinolin-3-yl	306	2,76	A
I.140	Me	Me	phenyl	-	CH ₂	2-methylquinolin-3-yl	368	2,88	A
I.141	Me	Me	phenyl	-	CH ₂	1,5-naphthyridin-3-yl	355	4,14	A
I.142	Me	Me	benzyl	-	CH ₂	quinolin-3-yl	368	4,94	A
I.143	Me	Me	4-benzylphenyl	-	CH ₂	quinolin-3-yl	444	5,78	A

Lưu ý: Me: methyl; Et: ethyl

Bảng 2 minh họa, theo cách không giới hạn, ví dụ về các hợp chất có công thức (IIa) theo sáng chế cũng như muối chấp nhận được của chúng:



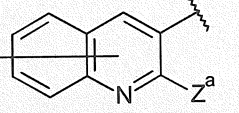
(IIa)

Trong bảng 2, M+H (ApI+) và logP được xác định như đối với bảng 1.

Trong bảng 2, điểm gắn kết của gốc $(X^a)_n$ với vòng phenyl là dựa trên cách đánh số trên đây của vòng phenyl.

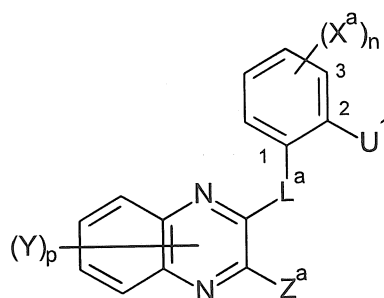
Bảng 2:

Ví dụ	U ¹	(X ^a) _n	L ^a	(Y) _p	M+H	logP	Phương pháp logP
IIa.01	I	3-F	O	quinolin-3-yl	366	3,71	A
IIa.02	I	-	O	quinolin-3-yl	348	3,71	A
IIa.03	Br	-	O	quinolin-3-yl		3,47	A
IIa.04	Br	-	O	8-floquinolin-3-yl	318	3,61	A
IIa.05	Br	-	O	8-flo-2-metylquinolin-3-yl	332	3,96	A
IIa.06	Br	-	O	7,8-difloquinolin-3-yl	336	3,92	A
IIa.07	Br	-	O	7,8-diflo-2-metylquinolin-3-yl	350	4,25	A
IIa.08	Br	-	O	2-metylquinolin-3-yl	314	3,96	A
IIa.09	Br	6-F	O	7,8-diflo-2-metylquinolin-3-yl	368	4,25	A
IIa.10	Br	5-F	O	7,8-diflo-2-metylquinolin-3-yl	368	4,34	A
IIa.11	Br	4-F	O	8-cloquinolin-3-yl	352	4,18	A
IIa.12	Br	4-F	O	7,8-diflo-2-metylquinolin-3-yl	368	4,25	A

Ví dụ	U ¹	(X ^a) _n	L ^a	(Y) _p 	M+H	logP	Phương pháp logP
IIa.13	Br	4-F	O	2-metylquinolin-3-yl	332	3,35	A
IIa.14	Br	3-OMe	O	7,8-diflo-2-metylquinolin-3-yl	380	4,11	A
IIa.15	Br	3-F	O	7,8-difloquinolin-3-yl	354	3,90	A
IIa.16	Br	3-F	O	7,8-diflo-2-metylquinolin-3-yl	368	4,29	A
IIa.17	Br	3-F	O	4-metylquinolin-3-yl	332	3,89	A
IIa.18	Br	3-F	O	2-metylquinolin-3-yl	332	3,58	A
IIa.19	Br	3-F	O	2-(diflometyl)quinolin-3-yl	368	3,99	A
IIa.20	Br	3-Cl	O	7,8-diflo-2-metylquinolin-3-yl	384	4,72	A
IIa.21	Br	3-Cl	O	2-metylquinolin-3-yl	348	3,99	A
IIa.22	Br	3-F	NH	2-(diflometyl)quinolin-3-yl	367	4,34	A
IIa.23	Cl	4-F	O	8-cloquinolin-3-yl	308	4,11	A
IIa.24	Br	3-OCF ₃	O	7,8-diflo-2-metylquinolin-3-yl	434	4,90	A
IIa.25	Br	3-OCF ₃	O	2-metylquinolin-3-yl	398	4,30	A
IIa.26	Br	4-Cl	O	2-metylquinolin-3-yl	348	4,13	A

Lưu ý: Me: methyl

Bảng 3 minh họa, theo cách không giới hạn, ví dụ về các hợp chất có công thức (IIb) theo sáng chế cũng như muối chấp nhận được của chúng:

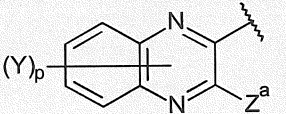


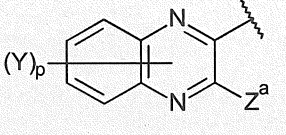
(IIb)

Trong bảng 3, M+H (ApI+) và logP được xác định như đối với bảng 1.

Trong bảng 3, điểm gắn kết của gốc (X^a)_n với vòng phenyl là dựa trên cách đánh số trên đây của vòng phenyl.

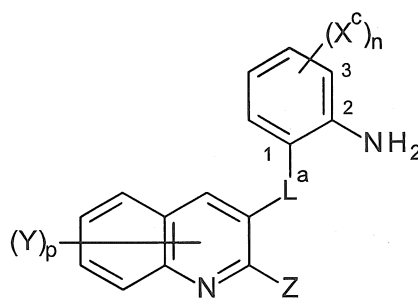
Bảng 3:

Ví dụ	U ¹	(X ^a) _n	L ^a		M+H	logP	Phương pháp logP
IIb.01	Br	-	O	5,6-difloquinoxalin-2-yl	337	3,92	A
IIb.02	Br	-	O	5,6-diflo-3-metylquinoxalin-2-yl	351	4,38	A
IIb.03	Br	6-Me	O	5,6-diflo-3-metylquinoxalin-2-yl	365	4,80	A
IIb.04	Br	6-F	O	5,6-diflo-3-metylquinoxalin-2-yl	369	2,67	A
IIb.05	Br	6-Cl	O	5,6-diflo-3-metylquinoxalin-2-yl	385	4,87	A
IIb.06	Br	5-Me	O	5,6-diflo-3-metylquinoxalin-2-yl	365	4,85	A
IIb.07	Br	5-F	O	5,6-diflo-3-metylquinoxalin-2-yl	369	4,51	A
IIb.08	Br	5-Cl	O	5,6-diflo-3-metylquinoxalin-2-yl	385	5,05	A
IIb.09	Br	4-Me	O	5,6-diflo-3-metylquinoxalin-2-yl	365	4,92	A
IIb.10	Br	4-F	O	5,6-diflo-3-metylquinoxalin-2-yl	369	4,54	A
IIb.11	Br	4-Cl	O	5,6-diflo-3-metylquinoxalin-2-yl	385	5,16	A
IIb.12	Br	3-Me	O	5,6-diflo-3-metylquinoxalin-2-yl	365	4,85	A
IIb.13	Br	3-OMe	O	5,6-diflo-3-metylquinoxalin-2-yl	381	4,19	A
IIb.14	Br	3-F	O	quinoxalin-2-yl	319	3,78	A
IIb.15	Br	3-F	O	5,6-difloquinoxalin-2-yl	355	3,97	A
IIb.16	Br	3-F	O	5,6-diflo-3-metylquinoxalin-2-yl	369	4,44	A
IIb.17	Br	3-F	O	3-metylquinoxalin-2-yl	333	4,11	A
IIb.18	Br	3-Cl	O	5,6-diflo-3-metylquinoxalin-2-yl	385	4,82	A
IIb.19	Br	4-CN-5-F	O	5,6-difloquinoxalin-2-yl	380	3,81	A

Ví dụ	U ¹	(X ^a) _n	L ^a		M+H	logP	Phương pháp logP
IIb.20	Br	5-CN	O	5,6-diflo-3-metylquinoxalin-2-yl	376	4,03	A
IIb.21	Br	6-CN-3-F	O	5,6-difloquinoxalin-2-yl	380	3,72	A
IIb.22	Br	3-CN	O	5,6-diflo-3-metylquinoxalin-2-yl	376	3,83	A
IIb.23	Br	3-OCF ₃	O	5,6-diflo-3-metylquinoxalin-2-yl	435	5,08	A

Lưu ý: Me: metyl

Bảng 4 minh họa, theo cách không giới hạn, ví dụ về các hợp chất có công thức (IVa) theo sáng chế cũng như muối chấp nhận được của chúng:

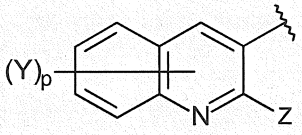


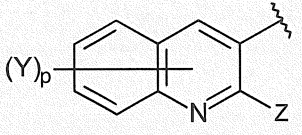
(IVa)

Trong bảng 4, M+H (ApcI⁺) và logP được xác định như đối với bảng 1.

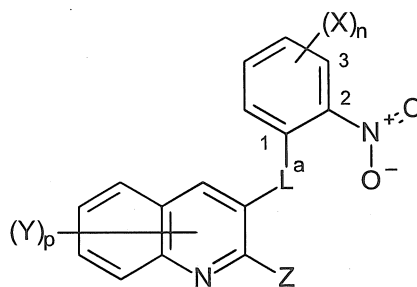
Trong bảng 4, điểm gắn kết của gốc (X^c)_n với vòng phenyl là dựa trên cách đánh số trên đây của vòng phenyl.

Bảng 4:

Ví dụ	(X ^c) _n	L ^a		M+H	logP	Phương pháp logP
IVa.01	-	NH	quinolin-3-yl	236	1,28	A
IVa.02	3-F	O	2-metylquinolin-3-yl	269	2,15	A
IVa.03	-	O	7,8-difloquinolin-3-yl	273	2,71	A
IVa.04	3-F	O	7,8-difloquinolin-3-yl	291	3,02	A
IVa.05	-	O	7,8-diflo-2-metylquinolin-3-yl	287	2,99	A

Ví dụ	(X ^c) _n	L ^a		M+H	logP	Phương pháp logP
IVa.06	3-F	O	7,8-diflo-2-metylquinolin-3-yl	305	3,27	A
IVa.07	-	O	2-metylquinolin-3-yl	251	1,66	A

Bảng 5 minh họa, theo cách không giới hạn, ví dụ về các hợp chất có công thức (Va) theo sáng chế cũng như muối chấp nhận được của chúng:

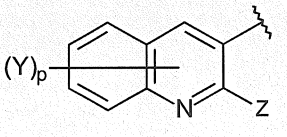


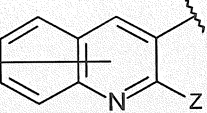
(Va)

Trong bảng 5, M+H (ApcI⁺) và logP được xác định như đối với bảng 1.

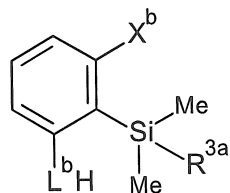
Trong bảng 5, điểm gắn kết của gốc (X)_n với vòng phenyl là dựa trên cách đánh số trên đây của vòng phenyl.

Bảng 5:

Ví dụ	(X) _n	L ^a		M+H	logP	Phương pháp logP
Va.01	3-F	O	7,8-difloquinolin-3-yl	321	3,35	A
Va.02	3-F	O	7,8-diflo-2-metylquinolin-3-yl	335	3,64	A
Va.03	-	O	7,8-difloquinolin-3-yl	303	3,06	A
Va.04	-	O	7,8-diflo-2-metylquinolin-3-yl	317	3,42	A
Va.05	3-F	O	quinolin-3-yl	285	3,13	A
Va.06	3-F	O	2-metylquinolin-3-yl	299	3,15	A
Va.07	-	O	quinolin-3-yl	267	1,62	A

Ví dụ	(X) _n	L ^a	(Y) _p 	M+H	logP	Phương pháp logP
Va.08	-	O	2-methylquinolin-3-yl	281	2,64	A

Bảng 6 minh họa, theo cách không giới hạn, ví dụ về các hợp chất có công thức (IXa) sáng chế:



(IXa)

Trong bảng 6, M+H (Apcl⁺) và logP được xác định như đối với bảng 1.

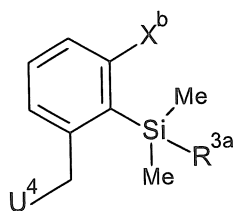
Bảng 6:

Ví dụ	X ^b	L ^b	R ^{3a}	M+H	logP	Phương pháp logP
IXa.01	3-F	O	isopropyl	169 ⁽¹⁾	4,27	A
IXa.02	-	O	isopropyl	151 ⁽¹⁾	4,25	A
IXa.03	-	O	isobutyl	151 ⁽¹⁾	4,67	A
IXa.04	-	O	ethyl	180 ⁽²⁾	3,90	B
IXa.05	-	O	cyclohexyl	151 ⁽¹⁾	5,25	A
IXa.06	-	O	benzyl	242 ⁽²⁾	5,14	A

Lưu ý ⁽¹⁾: Khối lượng M - R^{3a} đo được bằng phương pháp phổ khối - sắc ký khí (GC-mass)

Lưu ý ⁽²⁾: Khối lượng M đo được bằng phương pháp phổ khối - sắc ký khí

Bảng 7 minh họa, theo cách không giới hạn, ví dụ về các hợp chất có công thức (XIa) sáng chế:



(XIa)

Trong bảng 7, M+H (ApCI+) và logP được xác định như đối với bảng 1.

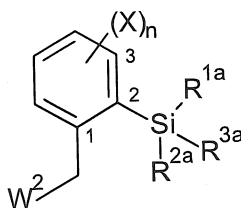
Bảng 7:

Ví dụ	X ^b	U ⁴	R ^{3a}	M+H	logP	Phương pháp logP
XIa.01	-	Br	6-clopyridin-3-yl	324 ⁽¹⁾	4,51	A
XIa.02	-	I	phenyl	225 ⁽²⁾	6,82	A
XIa.03	-	Br	phenyl		5,46	A
XIa.04	-	Br	2-thienyl	295 ⁽¹⁾	5,19	A
XIa.05	-	Br	4-phenoxyphenyl	381 ⁽¹⁾	6,43	A
XIa.06	-	Br	4-clophenyl	323 ⁽¹⁾	5,94	A
XIa.07	-	Br	benzyl	238 ⁽²⁾	5,59	A
XIa.08	-	Br	biphenyl-4-yl	365 ⁽¹⁾	6,53	A
XIa.09	-	Br	4-benzylphenyl	314 ⁽²⁾	6,50	A

Lưu ý ⁽¹⁾: Khối lượng M - CH₃ đo được bằng phương pháp phổ khối - sắc ký khí

Lưu ý ⁽²⁾: Khối lượng M - U⁴ đo được bằng phương pháp phổ khối - sắc ký khí

Bảng 8 minh họa, theo cách không giới hạn, ví dụ về các hợp chất có công thức (XIIa) sáng chế:



(XIIa)

Trong bảng 8, M+H (ApI+) và logP được xác định như đối với bảng 1.

Trong bảng 8, điểm gắn kết của gốc (X)_n với vòng phenyl là dựa trên cách đánh số trên đây của vòng phenyl.

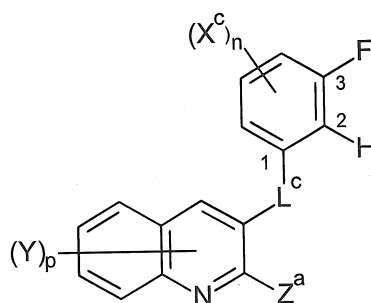
Bảng 8:

Ví dụ	W ²	(X) _n	R ^{1a}	R ^{2a}	R ^{3a}	M+H	logP	Phương pháp logP
XIIa.01	4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl	-	Me	Me	Me	-(¹)	5,68	A

Lưu ý: Me: methyl

Lưu ý (¹): không ion hóa

Bảng 9 minh họa, theo cách không giới hạn, ví dụ về các hợp chất có công thức (VIIa) sáng chế:



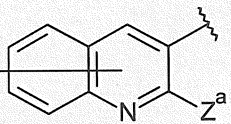
(VIIa)

Trong bảng 9, M+H (ApI+) và logP được xác định như đối với bảng 1.

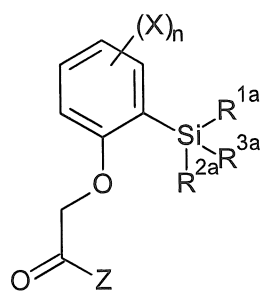
Trong bảng 9, điểm gắn kết của gốc (X)_n với vòng phenyl là dựa trên cách đánh số trên đây của vòng phenyl.

Bảng 9:

Ví dụ	(X ^c) _n	L ^c	(Y) _p	M+H	logP	Phương pháp logP
VIIa.01	-	O	2-cloquinolin-3-yl	274	3,99	A
VIIa.02	-	O	2-etoxyquinolin-3-yl	284	4,74	A
VIIa.03	-	O	2-(metylsulfanyl)quinolin-3-yl	286	4,92	A

Ví dụ	(X ^c) _n	L ^c	(Y) _p - 	M+H	logP	Phương pháp logP
VIIa.04	-	O	2-metylquinolin-3-yl	254	2,96	A
VIIa.05	-	O	quinolin-3-yl	240	3,21	A
VIIa.06	-	O	1-oxidoquinolin-3-yl	256	2,14	A

Bảng 10 minh họa, theo cách không giới hạn, ví dụ về các hợp chất có công thức (XIV) sáng chế:



(XIV)

Trong bảng 10, M+H (ApcI⁺) và logP được xác định như đối với bảng 1.

Trong bảng 10, điểm gắn kết của gốc (X)_n với vòng phenyl là dựa trên cách đánh số trên đây của vòng phenyl.

Bảng 10:

Ví dụ	Z	(X) _n	R ^{1a}	R ^{2a}	R ^{3a}	M+H	logP	Phương pháp logP
XIV.01	CH ₃	-	Me	Me	Me	222 ⁽¹⁾	1,39	A

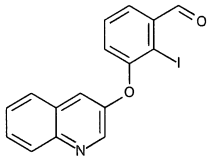
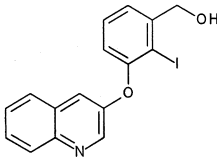
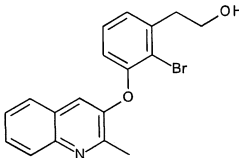
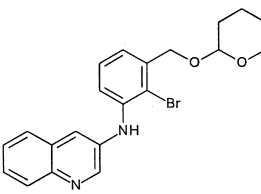
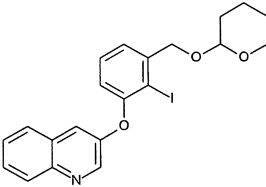
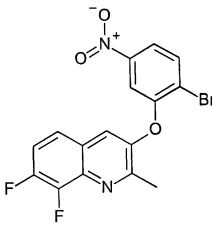
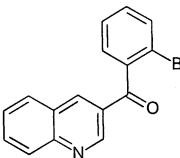
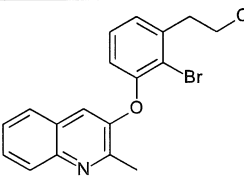
Lưu ý: Me: metyl

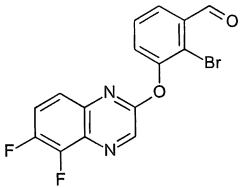
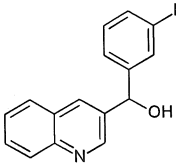
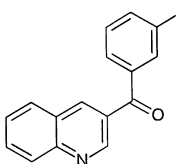
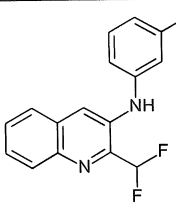
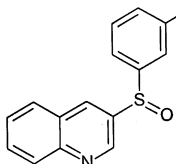
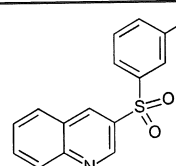
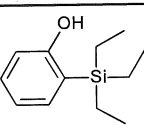
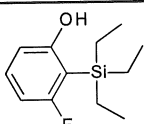
Lưu ý ⁽¹⁾: Khối lượng M đo được bằng phương pháp phổ khối - sắc ký khí

Bảng 11 minh họa các hợp chất có công thức (II), (VII) và (IX) được ưu tiên khác theo sáng chế.

Trong bảng 11, M+H (ApcI⁺) và logP được xác định như đối với bảng 1.

Bảng 11:

Ví dụ	Cấu tạo	M+H	logP	Phương pháp logP
II.01A		376	3,29	A
II.02A		378	2,59	A
II.03A		358	2,14	A
II.04A		413	4,13	B
II.05A		462	4,56	B
II.06A		395	4,04	A
II.07A				
II.08A		376	3,99	A

Ví dụ	Cấu tạo	M+H	logP	Phương pháp logP
II.01B		365	3,48	A
VII.01A		254	1,54	A
VII.02A		252	2,73	A
VII.03A		289	3,68	A
VII.04A		2,10	272	A
VII.05A		2,68	288	A
IX.01A		208 ⁽¹⁾	4,72	A
IX.02A		226 ⁽¹⁾	4,69	A

Lưu ý ⁽¹⁾: Khối lượng M (thứ yếu) đo được bằng phương pháp phổ khối - sắc ký khí cùng với M - Et, M - 2Et và M - 3Et.

Bảng 12 cung cấp dữ liệu NMR (¹H) của một số hợp chất đã chọn từ bảng 1, bảng 2, bảng 3, bảng 4, bảng 5, bảng 6, bảng 7, bảng 8, bảng 9, bảng 10 và bảng 11.

Dữ liệu $^1\text{H-NMR}$ của các ví dụ được chọn được đưa ra dưới dạng danh sách đỉnh $^1\text{H-NMR}$. Đối với mỗi một đỉnh tín hiệu, giá trị δ tính bằng ppm và cường độ tín hiệu trong ngoặc đơn được liệt kê.

Cường độ của các tín hiệu rõ nét tương ứng với độ cao của các tín hiệu trong ví dụ được in ra về phổ NMR tính bằng cm và thể hiện các mối quan hệ thực của các cường độ tín hiệu. Từ các tín hiệu rộng, một số đỉnh hoặc giá trị trung bình của tín hiệu và cường độ tương đối của chúng so với tín hiệu cường độ cao nhất trong phổ có thể được thể hiện.

Danh mục đỉnh $^1\text{H-NMR}$ là tương tự như trong bản in $^1\text{H-NMR}$ cổ điển và do đó thường chứa tất cả các đỉnh mà các đỉnh này được liệt kê ở phần diễn giải NMR cổ điển. Ngoài ra, các bảng này có thể cũng thể hiện các tín hiệu in $^1\text{H-NMR}$ cổ điển tương tự của các dung môi, chất đồng phân lập thể của các hợp chất đích, các hợp chất này cũng là đối tượng của sáng chế và/hoặc đỉnh của các tạp chất. Để thể hiện các tín hiệu hợp chất trong khoảng delta của dung môi và/hoặc nước, các đỉnh thường dùng của dung môi, ví dụ các đỉnh DMSO trong d6-DMSO và đỉnh của nước được thể hiện trong bảng liệt kê đỉnh $^1\text{H-NMR}$ của tác giả sáng chế và thường lấy giá trị trung bình của cường độ cao.

Các đỉnh của chất đồng phân lập thể của hợp chất đích và/hoặc các đỉnh của tạp chất thường có giá trị trung bình của cường độ thấp hơn các đỉnh của hợp chất đích (ví dụ, với độ tinh khiết >90%). Các chất đồng phân lập thể và/hoặc tạp chất có thể là điển hình trong quy trình điều chế cụ thể. Do đó, các đỉnh của chúng có thể giúp để nhận diện sự mô phỏng quy trình của tác giả sáng chế thông qua “các dấu ấn sản phẩm phụ”.

Chuyên gia sẽ tính toán các đỉnh của hợp chất đích bằng các phương pháp đã biết (Mestrec, mô phỏng ACD, và cả bằng các giá trị kỳ vọng được đánh giá theo kinh nghiệm), có thể tách riêng các đỉnh của hợp chất đích khi cần tùy ý sử dụng các bộ lọc cường độ. Sự tách riêng này có thể sẽ tương tự như việc chọn đỉnh thích hợp trong cách diễn giải $^1\text{H-NMR}$ cổ điển.

Chi tiết hơn về dữ liệu NMR với danh mục đỉnh có thể xem trong ấn phẩm “Citation of NMR Peaklist Data within Patent Applications”, Research Disclosure Database Number 564025.

Bảng 12: Danh mục đỉnh NMR

Ví dụ	$^1\text{H-NMR}$ [CDCl_3 ở 300 Mhz]
I.001	8,794 (0,71); 8,784 (0,72); 8,115 (0,34); 8,088 (0,38); 7,658 (0,44); 7,63 (0,37); 7,625 (0,4); 7,602 (0,33); 7,586 (0,36); 7,58 (0,37); 7,562 (0,41); 7,556 (0,42); 7,541 (0,34); 7,537 (0,33); 7,514 (0,42); 7,5 (0,55); 7,491 (0,69); 7,378 (0,33); 7,372 (0,32); 7,259 (1,34); 7,232 (0,32); 7,229 (0,32); 7,208 (0,51); 7,204 (0,49); 6,917 (0,47); 6,915 (0,45); 6,89 (0,42); 1,656 (0,42); 0,302 (0,58); 0,291 (16); 0,28 (0,78); 0 (0,96)
I.002	8,831 (0,95); 8,822 (0,95); 8,159 (0,5); 8,132 (0,56); 7,737 (0,46); 7,719 (0,64); 7,713 (1,1); 7,709 (1,01); 7,704 (0,49); 7,695 (0,65); 7,689 (0,7); 7,685 (0,68); 7,68 (0,63); 7,675 (0,33); 7,657 (0,48); 7,652 (0,37); 7,6 (0,81); 7,592 (1,2); 7,59 (1,09); 7,566 (0,6); 7,562 (0,38); 7,44 (0,49); 7,437 (0,47); 7,434 (0,49); 7,431 (0,4); 7,412 (0,45); 7,406 (0,41); 7,299 (6,28); 7,293 (0,72); 7,29 (0,59); 7,269 (0,78); 7,266 (0,73); 7,245 (0,33); 6,935 (0,71); 6,908 (0,64); 2,239 (0,61); 1,608 (3,75); 0,482 (0,68); 0,471 (16); 0,459 (0,73); 0,039 (6,19)
I.003	8,814 (2,06); 8,805 (2,11); 8,174 (1); 8,146 (1,13); 7,775 (0,91); 7,748 (1,32); 7,742 (0,8); 7,736 (0,69); 7,718 (1,07); 7,713 (1,19); 7,708 (0,62); 7,69 (0,95); 7,685 (0,76); 7,665 (1,63); 7,657 (1,56); 7,622 (0,91); 7,618 (0,92); 7,595 (1,21); 7,591 (0,75); 7,572 (0,53); 7,568 (0,49); 7,399 (0,59); 7,376 (0,73); 7,372 (1,31); 7,349 (1,34); 7,344 (0,84); 7,322 (0,8); 7,3 (16,11); 6,937 (0,88); 6,935 (0,85); 6,908 (1,53); 6,881 (0,78); 6,879 (0,72); 6,685 (1,63); 6,658 (1,5); 5,339 (1,16); 2,679 (1); 2,672 (0,95); 1,604 (15,76); 0,547 (0,88); 0,535 (16); 0,53 (15,95); 0,518 (0,69); 0,501 (0,5); 0,495 (0,46); 0,418 (0,46); 0,412 (0,44); 0,103 (0,7); 0,049 (0,44); 0,038 (10,86); 0,028 (0,42)
I.004	8,848 (1,07); 8,838 (1,11); 8,16 (0,55); 8,132 (0,64); 7,736 (0,48); 7,709 (1,02); 7,685 (0,57); 7,68 (0,61); 7,676 (0,34); 7,658 (0,48); 7,652 (0,37); 7,594 (0,48); 7,59 (0,5); 7,567 (0,66); 7,563 (0,48); 7,555 (0,9); 7,545 (1,06); 7,478 (0,55); 7,453 (1,06); 7,427 (0,7); 7,3 (2,82); 7,136 (0,76); 7,135 (0,76); 7,111 (0,66); 7,11 (0,66); 6,89 (0,75); 6,888 (0,75); 6,863 (0,7); 5,234 (3,08); 1,678 (0,33); 1,293 (0,44); 0,357 (0,54); 0,345 (16); 0,333 (0,8); 0,109 (0,33); 0,038 (1,27)
I.005 (1)	8,757 (2,02); 8,751 (2,01); 8,12 (1,38); 8,099 (1,44); 7,706 (1,24); 7,685 (1,58); 7,664 (0,75); 7,66 (0,73); 7,646 (1,14); 7,643 (1,39); 7,626 (0,92); 7,622 (0,79); 7,553 (1,08); 7,551 (1,09); 7,533 (1,54); 7,517 (2,4); 7,512 (2,38); 7,329 (0,62); 7,312 (0,89); 7,309 (1,38); 7,292 (1,41); 7,289 (0,95); 7,272 (0,8); 7,259 (4,9); 6,871 (0,97); 6,849 (1,8); 6,829 (0,88); 6,673 (1,93); 6,653 (1,8); 1,602 (1,08); 1,256 (0,94); 0,982 (1,6); 0,962 (5,06); 0,953 (0,84); 0,944 (3,19); 0,869 (1,19); 0,85 (2,14); 0,831 (1,66); 0,811 (0,41); 0,472 (1,04); 0,338 (16); 0,333 (15,8); 0 (3,76)

Ví dụ	$^1\text{H-NMR}$ [CDCl_3 ở 300 Mhz]
I.006	8,783 (1,92); 8,774 (1,98); 8,16 (1,13); 8,132 (1,28); 7,744 (1,02); 7,717 (1,49); 7,711 (0,86); 7,706 (0,71); 7,687 (1,03); 7,682 (1,22); 7,678 (0,68); 7,659 (0,88); 7,654 (0,74); 7,597 (0,94); 7,594 (1,06); 7,57 (1,29); 7,544 (2,26); 7,535 (1,79); 7,391 (0,57); 7,369 (0,66); 7,364 (1,32); 7,342 (1,29); 7,337 (0,89); 7,314 (0,72); 7,298 (3,01); 6,924 (0,92); 6,896 (1,66); 6,868 (0,81); 6,721 (1,77); 6,694 (1,62); 6,471 (0,49); 6,467 (0,56); 6,423 (0,63); 6,418 (0,67); 6,404 (0,62); 6,399 (0,66); 6,355 (0,75); 6,351 (0,82); 5,993 (1,31); 5,982 (1,53); 5,945 (1,12); 5,933 (1,18); 5,789 (1,47); 5,778 (1,28); 5,722 (1,17); 5,71 (1,07); 1,292 (1,48); 0,568 (0,52); 0,493 (0,62); 0,482 (15,28); 0,475 (16); 0,037 (3)
I.007	8,813 (1,82); 8,804 (1,83); 8,186 (1,04); 8,158 (1,16); 7,774 (1,01); 7,747 (1,46); 7,738 (0,76); 7,733 (0,71); 7,714 (1,08); 7,71 (1,25); 7,705 (0,67); 7,686 (0,91); 7,682 (0,73); 7,651 (1,8); 7,642 (1,8); 7,621 (1,02); 7,617 (1,02); 7,594 (1,3); 7,57 (0,52); 7,567 (0,49); 7,408 (0,6); 7,386 (0,75); 7,381 (1,34); 7,359 (1,36); 7,354 (0,9); 7,331 (0,76); 7,297 (3,6); 6,929 (0,93); 6,9 (1,71); 6,872 (0,87); 6,694 (1,8); 6,667 (1,66); 3,258 (0,38); 3,194 (5,53); 3,191 (5,52); 1,469 (0,33); 1,323 (0,73); 1,291 (4,98); 0,916 (0,62); 0,892 (0,48); 0,878 (0,33); 0,863 (0,59); 0,69 (1,18); 0,552 (0,67); 0,54 (15,94); 0,535 (16); 0,109 (4,46); 0,036 (2,86)
I.008	8,796 (2,24); 8,788 (3,9); 8,781 (3,33); 8,154 (2,41); 8,127 (2,34); 7,738 (2,31); 7,71 (3,17); 7,687 (1,55); 7,675 (2,43); 7,659 (1,32); 7,652 (1,55); 7,588 (2,14); 7,564 (3,28); 7,553 (3,32); 7,545 (4,89); 7,538 (4,26); 7,439 (0,67); 7,431 (1,02); 7,404 (2,16); 7,389 (1,53); 7,382 (2,07); 7,362 (0,85); 7,354 (0,9); 7,301 (2,39); 7,294 (2,79); 7,208 (1,06); 6,952 (1,77); 6,931 (2,01); 6,925 (2,75); 6,905 (1,07); 6,898 (1,29); 6,784 (0,61); 6,771 (2,08); 6,764 (3,01); 6,744 (1,9); 6,737 (2,5); 2,668 (0,61); 2,268 (0,35); 2,253 (0,59); 2,242 (0,76); 2,234 (1,04); 2,219 (1,09); 2,213 (1,25); 2,2 (1,4); 2,192 (1,56); 2,18 (1,33); 2,171 (1,3); 2,164 (1,55); 2,158 (1,61); 2,146 (1,1); 2,139 (1,51); 2,132 (1,65); 2,115 (1,07); 2,107 (1,21); 2,1 (1,13); 2,091 (0,94); 2,084 (0,75); 2,076 (0,63); 2,066 (0,61); 1,709 (1,18); 1,701 (1,2); 1,642 (0,47); 1,491 (1,3); 1,466 (2,35); 1,46 (2,35); 1,449 (2,38); 1,442 (2,59); 1,416 (2,73); 1,384 (1,49); 1,289 (3); 1,261 (2,29); 1,25 (2,42); 1,239 (2,94); 1,231 (2,98); 1,218 (3,02); 1,211 (3,31); 1,192 (2,11); 1,168 (1,35); 1,16 (1,13); 0,89 (0,77); 0,581 (3,28); 0,568 (11,28); 0,561 (16); 0,305 (0,64); 0,298 (0,97); 0,234 (0,45); 0,216 (0,41); 0,208 (0,42); 0,191 (0,57); 0,175 (0,61); 0,167 (0,8); 0,115 (0,95); 0,108 (1,12); 0,054 (0,45); 0,041 (1,44); 0,034 (1,86)
I.009	8,69 (1,13); 8,681 (1,15); 8,023 (0,44); 8,018 (0,47); 7,993 (0,53); 7,849 (0,63); 7,763 (0,91); 7,754 (0,88); 7,669 (0,45); 7,664 (0,39); 7,66 (0,32); 7,644 (0,67); 7,637 (0,62); 7,552 (0,34); 7,535 (0,68); 7,529 (0,65); 7,525 (0,48); 7,515 (1,23); 7,511 (1,2); 7,502 (0,73); 7,49 (1,38); 7,463 (1,06);

Ví dụ	$^1\text{H-NMR}$ [CDCl_3 ở 300 Mhz]
	7,46 (1,05); 7,45 (0,63); 7,445 (0,56); 7,427 (0,6); 7,422 (0,61); 7,3 (4,89); 7,12 (0,42); 7,115 (0,43); 7,096 (0,62); 7,092 (0,66); 7,072 (0,43); 7,068 (0,43); 1,295 (0,54); 0,692 (1,88); 0,506 (0,71); 0,495 (16); 0,484 (0,73); 0,111 (0,72); 0,04 (2,59)
I.010	8,739 (1,02); 8,73 (1,04); 8,072 (0,51); 8,045 (0,55); 7,681 (0,41); 7,677 (0,4); 7,655 (0,6); 7,65 (0,63); 7,613 (0,83); 7,603 (1,03); 7,598 (0,39); 7,58 (0,55); 7,575 (0,5); 7,553 (0,54); 7,547 (0,43); 7,538 (0,53); 7,533 (0,58); 7,511 (0,5); 7,508 (0,43); 7,453 (0,46); 7,427 (1,01); 7,402 (0,66); 7,3 (4,04); 7,227 (0,78); 7,201 (0,61); 7,032 (0,7); 7,007 (0,62); 5,711 (0,53); 5,214 (2,95); 1,658 (1,42); 0,442 (0,55); 0,43 (16); 0,419 (0,59); 0,039 (2,64)
I.011	8,655 (0,73); 8,646 (0,75); 8,045 (0,34); 8,019 (0,38); 7,613 (0,38); 7,607 (0,7); 7,6 (0,5); 7,589 (0,41); 7,584 (0,43); 7,527 (0,4); 7,521 (0,33); 7,5 (0,68); 7,493 (0,71); 7,469 (0,42); 7,444 (0,44); 7,439 (0,33); 7,423 (0,7); 7,416 (0,95); 7,392 (0,61); 7,298 (1,11); 7,226 (0,43); 7,222 (0,42); 5,792 (0,39); 0,375 (0,65); 0,365 (16); 0,354 (0,74); 0,041 (1,18)
I.012	8,817 (0,63); 8,81 (0,65); 8,142 (0,39); 8,114 (0,45); 7,756 (0,91); 7,73 (0,71); 7,711 (0,36); 7,706 (0,4); 7,648 (0,35); 7,626 (0,46); 7,619 (0,41); 7,569 (0,33); 7,546 (0,46); 7,348 (0,35); 7,342 (0,39); 7,326 (0,67); 7,32 (0,61); 7,303 (0,44); 7,297 (1,51); 7,071 (0,38); 7,065 (0,41); 7,042 (0,33); 4,377 (1,9); 0,381 (0,68); 0,371 (16); 0,36 (0,85); 0,039 (1,08)
I.013	8,558 (0,94); 8,551 (0,91); 8,103 (0,64); 8,075 (0,75); 7,724 (0,55); 7,718 (0,47); 7,714 (0,44); 7,71 (0,45); 7,705 (0,56); 7,701 (0,76); 7,694 (0,67); 7,688 (0,53); 7,682 (0,74); 7,677 (0,39); 7,66 (0,75); 7,655 (0,54); 7,637 (0,86); 7,553 (0,77); 7,545 (1,45); 7,54 (0,9); 7,534 (1,3); 7,529 (0,7); 7,521 (1,5); 7,514 (0,55); 7,484 (0,95); 7,481 (0,91); 7,385 (0,59); 7,379 (0,62); 7,362 (1,28); 7,357 (1,33); 7,349 (2,34); 7,342 (2,71); 7,333 (1,48); 7,327 (1,13); 7,315 (0,47); 7,303 (1,23); 7,068 (0,61); 7,062 (0,62); 7,039 (0,51); 4,163 (3,02); 0,646 (0,8); 0,635 (16); 0,624 (0,62); 0,051 (0,9)
I.014	8,594 (1,07); 8,587 (1,08); 8,107 (0,62); 8,079 (0,73); 7,718 (0,35); 7,712 (0,39); 7,699 (0,62); 7,695 (0,94); 7,69 (0,85); 7,684 (0,44); 7,677 (0,73); 7,67 (0,74); 7,662 (0,81); 7,632 (0,84); 7,555 (0,59); 7,551 (0,53); 7,532 (0,52); 7,528 (0,68); 7,524 (0,36); 7,46 (0,9); 7,456 (0,88); 7,433 (0,46); 7,427 (1,74); 7,42 (0,61); 7,408 (0,89); 7,399 (2,3); 7,393 (0,47); 7,385 (0,71); 7,378 (0,92); 7,371 (0,62); 7,352 (0,64); 7,348 (0,57); 7,304 (1,26); 7,281 (2,36); 7,275 (0,66); 7,259 (0,64); 7,254 (1,5); 7,099 (0,63); 7,095 (0,63); 7,073 (0,54); 7,071 (0,53); 4,142 (2,9); 1,791 (1,56); 0,624 (0,69); 0,614 (16); 0,603 (0,66); 0,048 (1,14)

Ví dụ	$^1\text{H-NMR}$ [CDCl_3 ở 300 Mhz]
I.015	8,618 (1,04); 8,61 (1,05); 8,111 (0,64); 8,083 (0,62); 7,717 (0,32); 7,713 (0,44); 7,704 (0,59); 7,697 (1,06); 7,69 (1,24); 7,681 (0,79); 7,674 (0,79); 7,671 (0,8); 7,666 (1,51); 7,628 (0,91); 7,626 (0,84); 7,613 (0,97); 7,61 (0,87); 7,564 (0,88); 7,56 (0,89); 7,554 (0,81); 7,55 (0,57); 7,531 (0,45); 7,525 (0,73); 7,388 (0,58); 7,382 (0,6); 7,364 (0,64); 7,357 (0,94); 7,351 (0,62); 7,332 (0,6); 7,328 (0,57); 7,31 (1,09); 7,304 (2,38); 7,299 (1,21); 7,297 (1); 7,183 (0,82); 7,172 (0,79); 7,168 (0,82); 7,156 (0,66); 7,078 (0,6); 7,074 (0,63); 7,05 (0,53); 4,257 (2,91); 1,716 (1,83); 0,702 (0,64); 0,691 (16); 0,68 (0,63); 0,047 (1,89)
I.016	8,586 (1,13); 8,578 (1,12); 8,115 (0,64); 8,087 (0,78); 7,717 (0,93); 7,712 (0,53); 7,694 (1,48); 7,688 (1,55); 7,666 (0,69); 7,659 (0,93); 7,556 (0,59); 7,553 (0,54); 7,534 (0,58); 7,53 (0,69); 7,525 (0,5); 7,514 (0,98); 7,51 (1,04); 7,508 (1,02); 7,497 (0,35); 7,49 (1,96); 7,483 (0,65); 7,468 (0,76); 7,461 (2,03); 7,454 (0,33); 7,384 (0,7); 7,378 (1,27); 7,369 (0,41); 7,361 (1,29); 7,352 (1,9); 7,338 (0,71); 7,333 (0,74); 7,33 (0,66); 7,324 (1,12); 7,315 (0,36); 7,304 (4); 7,173 (0,37); 7,17 (0,57); 7,145 (0,85); 7,12 (0,37); 7,073 (0,63); 7,067 (0,66); 7,044 (0,55); 7,016 (1,34); 7,013 (1,54); 7,006 (0,38); 6,991 (0,86); 6,987 (1,32); 6,984 (1,01); 6,97 (0,33); 6,962 (2,16); 6,956 (0,66); 6,94 (0,71); 6,934 (1,81); 4,187 (3,01); 1,664 (4,76); 0,635 (0,8); 0,625 (16); 0,614 (0,67); 0,046 (3,58)
I.017	9,445 (1,37); 9,438 (1,4); 8,577 (1,33); 8,571 (1,32); 8,255 (0,83); 8,227 (1,06); 7,964 (0,83); 7,946 (0,63); 7,94 (1,09); 7,937 (1,14); 7,923 (0,77); 7,919 (0,83); 7,895 (0,54); 7,891 (0,44); 7,71 (0,63); 7,686 (0,97); 7,662 (0,43); 7,517 (0,35); 7,499 (0,39); 7,491 (0,67); 7,472 (0,66); 7,465 (0,56); 7,446 (0,51); 7,305 (1,8); 7,261 (0,63); 7,232 (1,01); 7,206 (1,65); 7,182 (1,09); 1,295 (0,41); 0,308 (0,38); 0,297 (15,16); 0,291 (16); 0,166 (0,79); 0,04 (1,36)
I.018	8,925 (1,19); 8,916 (1,23); 7,801 (0,62); 7,797 (0,69); 7,776 (0,76); 7,772 (0,8); 7,65 (0,55); 7,646 (0,59); 7,623 (0,83); 7,619 (0,78); 7,519 (1,23); 7,51 (1,38); 7,481 (0,92); 7,454 (0,5); 7,416 (0,66); 7,406 (0,66); 7,39 (0,61); 7,379 (0,63); 7,297 (3,58); 7,14 (0,37); 7,137 (0,46); 7,13 (0,36); 7,126 (0,43); 7,111 (0,41); 7,101 (0,37); 6,963 (0,67); 6,95 (0,69); 6,934 (0,51); 6,92 (0,5); 2,123 (0,65); 1,616 (3,17); 0,435 (0,59); 0,424 (16); 0,412 (0,62); 0,035 (3,15)
I.019	8,922 (0,78); 8,913 (0,78); 7,79 (0,44); 7,786 (0,45); 7,765 (0,51); 7,761 (0,52); 7,64 (0,36); 7,636 (0,37); 7,612 (0,53); 7,608 (0,49); 7,498 (0,55); 7,473 (0,61); 7,461 (0,79); 7,452 (0,79); 7,446 (0,38); 7,298 (7,2); 7,282 (0,43); 7,265 (0,37); 7,254 (0,4); 7,112 (0,32); 7,076 (0,38); 6,97 (0,45); 6,956 (0,57); 6,94 (0,36); 6,927 (0,43); 4,743 (0,65); 2,046 (0,33); 1,591

Ví dụ	$^1\text{H-NMR}$ [CDCl_3 ở 300 Mhz]
	(8,01); 0,341 (7,36); 0,33 (1,15); 0,305 (0,58); 0,294 (16); 0,283 (0,63); 0,276 (0,32); 0,036 (7,02)
I.020	8,895 (0,62); 8,886 (0,62); 7,638 (0,35); 7,632 (0,37); 7,613 (0,41); 7,608 (0,42); 7,509 (0,48); 7,504 (0,53); 7,5 (0,54); 7,496 (0,46); 7,466 (0,76); 7,46 (0,66); 7,455 (0,49); 7,44 (1,42); 7,425 (0,38); 7,415 (0,32); 7,302 (1,74); 7,277 (0,53); 7,274 (0,51); 6,959 (0,51); 6,932 (0,46); 1,624 (1,12); 1,296 (0,49); 0,325 (0,68); 0,314 (16); 0,303 (0,65); 0,112 (5,48); 0,04 (1,32)
I.021	8,864 (1,17); 8,855 (1,2); 7,525 (0,89); 7,52 (0,96); 7,516 (1); 7,512 (0,87); 7,487 (1,63); 7,475 (0,76); 7,464 (1,7); 7,444 (0,68); 7,412 (0,45); 7,389 (0,46); 7,384 (0,88); 7,362 (0,88); 7,357 (0,54); 7,335 (0,48); 7,301 (2,28); 6,954 (0,55); 6,952 (0,55); 6,925 (0,98); 6,898 (0,5); 6,896 (0,47); 6,729 (1,05); 6,702 (0,98); 1,631 (1,95); 0,392 (0,64); 0,381 (16); 0,375 (15,93); 0,363 (0,67); 0,123 (0,64); 0,111 (16,17); 0,099 (0,59); 0,039 (2,07)
I.022	8,823 (2,03); 8,814 (1,98); 7,609 (1,56); 7,604 (1,78); 7,602 (1,75); 7,491 (0,51); 7,477 (2,37); 7,457 (2,07); 7,446 (1,18); 7,425 (1,25); 7,394 (1,61); 7,371 (1,45); 7,344 (0,69); 7,302 (0,6); 6,953 (1); 6,925 (1,81); 6,897 (0,89); 6,698 (1,98); 6,67 (1,75); 3,077 (0,98); 1,285 (0,62); 0,509 (16); 0,505 (15,33); 0,476 (0,88); 0,47 (0,81); 0,441 (0,46); 0,436 (0,45); 0,209 (0,72); 0,172 (0,84); 0,169 (0,87); 0,132 (0,45); 0,111 (3,35); 0,07 (1,08); 0,026 (0,45)
I.023	7,742 (0,67); 7,737 (0,64); 7,718 (0,76); 7,712 (0,69); 7,552 (0,9); 7,547 (0,96); 7,544 (0,96); 7,539 (0,72); 7,468 (0,44); 7,462 (0,38); 7,437 (2,31); 7,422 (0,94); 7,416 (1,57); 7,41 (1,18); 7,391 (0,58); 7,301 (0,48); 7,296 (0,62); 7,293 (0,54); 7,271 (1); 7,269 (0,84); 7,247 (0,43); 7,244 (0,36); 6,93 (0,95); 6,903 (0,86); 3,174 (0,7); 1,293 (1,21); 0,93 (0,41); 0,908 (1,13); 0,885 (0,45); 0,448 (0,91); 0,436 (16); 0,425 (0,69); 0,26 (0,4); 0,252 (0,38); 0,149 (0,34); 0,118 (1,78); 8,829 (1,15); 8,82 (1,12)
I.024	7,641 (0,34); 7,635 (0,37); 7,616 (0,39); 7,611 (0,42); 7,432 (0,32); 7,426 (0,33); 7,368 (0,45); 7,363 (0,46); 7,358 (0,6); 7,34 (0,94); 7,326 (0,98); 7,321 (0,76); 7,3 (1,8); 7,29 (0,34); 7,287 (0,34); 7,266 (0,5); 7,262 (0,5); 6,886 (0,47); 6,861 (0,43); 2,865 (4,23); 1,615 (1,09); 0,328 (0,6); 0,317 (16); 0,306 (0,62); 0,039 (1,81)
I.025	7,447 (2,44); 7,402 (0,37); 7,391 (0,44); 7,388 (0,41); 7,382 (1,15); 7,373 (1,78); 7,36 (0,86); 7,354 (1,03); 7,348 (0,79); 7,342 (1,02); 7,334 (1,01); 7,331 (1,41); 7,323 (0,49); 7,318 (1,42); 7,315 (0,89); 7,301 (0,72); 7,261 (2,63); 6,895 (0,93); 6,878 (1,75); 6,861 (0,91); 6,532 (1,86); 6,516 (1,82); 2,763 (12,8); 2,54 (1,78); 2,535 (1,68); 1,601 (1,87); 0,485 (16); 0,483 (15,55); 0,457 (0,4); 0,454 (0,37); 0 (2,55)

Ví dụ	$^1\text{H-NMR}$ [CDCl_3 ở 300 Mhz]
I.026	7,744 (0,52); 7,738 (0,57); 7,719 (0,6); 7,714 (0,61); 7,454 (0,48); 7,451 (0,47); 7,448 (0,5); 7,427 (0,45); 7,421 (0,44); 7,406 (1,12); 7,401 (1,11); 7,387 (1,11); 7,383 (0,71); 7,376 (0,61); 7,363 (1,61); 7,345 (0,51); 7,312 (0,54); 7,309 (0,56); 7,3 (4,96); 7,288 (0,8); 7,285 (0,78); 7,263 (0,33); 7,261 (0,32); 6,861 (0,74); 6,834 (0,68); 2,846 (6,46); 2,013 (1,74); 1,604 (3,87); 0,466 (0,53); 0,454 (16); 0,443 (0,62); 0,039 (5,04)
I.027	7,4 (0,33); 7,393 (1,9); 7,381 (0,9); 7,369 (2,3); 7,364 (1,32); 7,357 (0,51); 7,347 (1,68); 7,342 (2,27); 7,337 (0,81); 7,314 (0,52); 7,3 (3); 6,936 (0,55); 6,934 (0,55); 6,907 (0,99); 6,88 (0,5); 6,878 (0,47); 6,628 (1,05); 6,602 (0,98); 2,832 (8,27); 1,623 (3,11); 1,191 (2,86); 1,152 (2,86); 0,397 (0,66); 0,386 (16); 0,38 (15,97); 0,368 (0,74); 0,038 (2,65)
I.028	7,469 (1,99); 7,462 (1,9); 7,456 (1,58); 7,45 (2,65); 7,445 (2,18); 7,348 (0,67); 7,328 (1,53); 7,311 (1,95); 7,288 (1,35); 7,27 (1,37); 7,258 (22,84); 7,246 (1,06); 7,204 (0,86); 7,2 (0,89); 7,192 (0,93); 7,187 (0,94); 7,182 (0,66); 7,177 (0,63); 7,169 (0,57); 7,164 (0,67); 7,151 (0,76); 7,147 (0,63); 7,139 (2,58); 7,132 (1,73); 7,125 (4,35); 7,121 (4,26); 6,916 (3,14); 6,891 (2,05); 6,87 (1); 6,516 (2,17); 6,496 (2,07); 2,543 (14,72); 1,536 (13,75); 0,659 (15,74); 0,653 (16); 0,008 (1,01); 0 (22,32)
I.029	7,383 (1,89); 7,379 (1,53); 7,357 (1,36); 7,35 (0,45); 7,33 (0,36); 7,301 (0,77); 6,598 (0,49); 6,591 (0,49); 6,571 (0,46); 6,564 (0,46); 6,162 (0,88); 6,155 (0,84); 3,823 (0,35); 2,843 (4,65); 1,297 (0,32); 0,268 (0,61); 0,258 (16); 0,247 (0,85); 0,113 (4,59); 0,039 (0,54)
I.030	7,449 (1,75); 7,446 (1,72); 7,433 (1,88); 7,43 (1,84); 7,407 (0,73); 7,385 (1,17); 7,38 (1,53); 7,358 (1,78); 7,353 (1,72); 7,332 (1,51); 7,322 (1,03); 7,309 (1,42); 7,3 (19,81); 7,291 (1,62); 7,288 (1,41); 7,281 (2,05); 7,278 (2,02); 7,27 (1,99); 7,267 (1,79); 7,257 (0,4); 7,119 (2,29); 7,115 (2,3); 7,023 (1,67); 7,012 (1,66); 7,008 (1,66); 6,996 (1,43); 6,958 (0,95); 6,956 (0,92); 6,929 (1,67); 6,902 (0,85); 6,899 (0,78); 6,574 (1,77); 6,547 (1,66); 2,679 (13,51); 1,591 (11,36); 0,769 (0,74); 0,758 (16); 0,75 (15,89); 0,738 (0,72); 0,05 (0,75); 0,039 (20,83); 0,028 (0,77)
I.031	8,056 (0,44); 8,05 (0,44); 8,03 (0,54); 8,023 (0,54); 7,785 (0,95); 7,758 (0,8); 7,563 (0,9); 7,557 (0,86); 7,491 (0,93); 7,487 (0,87); 7,45 (0,99); 7,431 (0,77); 7,42 (0,4); 7,4 (0,37); 7,302 (0,46); 2,825 (4,68); 0,422 (0,73); 0,411 (16); 0,4 (0,71); 0,112 (3,57)
I.032	7,481 (0,7); 7,459 (0,83); 7,454 (1,54); 7,439 (0,37); 7,432 (1,72); 7,426 (1,11); 7,409 (6,92); 7,394 (1,6); 7,389 (2,01); 7,382 (1,57); 7,363 (1,22); 7,332 (0,34); 7,301 (5,85); 6,983 (1,12); 6,955 (2,09); 6,928 (1,01); 6,677 (2,19); 6,649 (2,04); 2,817 (16); 2,807 (0,92); 1,626 (1,47); 0,632 (0,36);

Ví dụ	$^1\text{H-NMR}$ [CDCl_3 ở 300 Mhz]
	0,62 (10,09); 0,614 (10,13); 0,595 (10,12); 0,589 (10,08); 0,577 (0,47); 0,527 (0,64); 0,522 (0,64); 0,038 (5,95)
I.033	7,404 (1,08); 7,397 (1,91); 7,39 (2,46); 7,376 (2,46); 7,366 (1,52); 7,349 (1,17); 7,345 (0,77); 7,301 (2,1); 6,804 (1,26); 6,776 (1,15); 6,474 (1,29); 6,446 (1,22); 3,958 (9,47); 3,526 (1,28); 2,818 (8,49); 1,682 (0,71); 0,435 (0,78); 0,424 (16); 0,412 (0,85); 0,037 (1,54)
I.034	7,43 (1,42); 7,422 (2,08); 7,406 (0,73); 7,4 (0,88); 7,394 (0,63); 7,375 (0,54); 7,35 (0,51); 7,323 (1,34); 7,302 (1,85); 7,297 (1,2); 7,27 (1,1); 7,267 (1,16); 7,244 (0,54); 7,24 (0,43); 6,713 (0,81); 6,71 (0,78); 6,687 (0,76); 6,683 (0,71); 2,933 (0,97); 2,81 (6,81); 2,084 (0,37); 1,655 (0,67); 0,569 (0,67); 0,558 (16); 0,546 (0,64); 0,038 (1,39)
I.035	7,715 (0,57); 7,691 (0,68); 7,688 (0,7); 7,664 (0,6); 7,51 (1,1); 7,506 (1,09); 7,439 (1,01); 7,418 (0,94); 7,406 (0,52); 7,386 (0,48); 7,302 (1,95); 7,005 (0,34); 6,998 (0,35); 6,978 (0,66); 6,97 (0,67); 6,95 (0,33); 6,943 (0,32); 6,52 (0,59); 6,513 (0,58); 6,486 (0,6); 6,479 (0,57); 2,814 (6,33); 2,11 (0,47); 1,648 (0,45); 0,479 (0,58); 0,468 (16); 0,456 (0,62); 0,039 (1,55)
I.036	7,524 (1,29); 7,52 (1,21); 7,447 (1,16); 7,443 (1,11); 7,426 (1); 7,414 (1,93); 7,394 (0,58); 7,386 (0,89); 7,302 (3,6); 7,149 (0,49); 7,145 (0,5); 7,121 (0,41); 7,118 (0,41); 6,701 (1,01); 6,673 (0,93); 2,808 (6,85); 2,602 (0,82); 1,616 (1,93); 0,545 (0,7); 0,533 (16); 0,521 (0,66); 0,039 (2,88)
I.037	7,434 (0,59); 7,423 (0,63); 7,407 (0,63); 7,396 (0,64); 7,378 (0,8); 7,374 (0,82); 7,369 (0,91); 7,351 (1,59); 7,337 (0,55); 7,318 (1,26); 7,314 (1,21); 7,301 (1,11); 7,138 (0,43); 7,134 (0,46); 7,127 (0,41); 7,124 (0,42); 7,108 (0,41); 7,098 (0,37); 6,889 (0,64); 6,876 (0,67); 6,86 (0,53); 6,846 (0,51); 2,844 (6,65); 2,08 (0,43); 1,294 (0,36); 0,437 (0,71); 0,426 (16); 0,414 (0,65); 0,112 (2,23); 0,036 (0,83)
I.038	7,388 (0,4); 7,361 (0,85); 7,35 (0,43); 7,344 (0,44); 7,339 (0,62); 7,334 (0,58); 7,322 (0,86); 7,308 (0,36); 7,297 (3,89); 7,222 (0,66); 7,218 (0,67); 6,773 (0,53); 6,746 (0,48); 6,495 (0,52); 6,47 (0,5); 3,891 (4,62); 2,845 (3,99); 1,606 (3,21); 0,311 (0,54); 0,3 (16); 0,288 (0,51); 0,036 (3,62)
I.039 (²)	7,571 (1,18); 7,556 (1,46); 7,438 (0,86); 7,422 (1,48); 7,406 (0,78); 7,365 (1,45); 7,353 (2,07); 7,344 (0,72); 7,28 (2,2); 7,261 (5,45); 6,98 (1,36); 6,964 (1,26); 2,788 (8,96); 1,559 (7,06); 1,256 (0,46); 0,984 (0,48); 0,976 (3,88); 0,971 (7,17); 0,958 (0,66); 0,465 (16); 0 (5,16)
I.040	7,646 (0,37); 7,514 (0,63); 7,384 (0,37); 7,367 (0,46); 7,36 (0,8); 7,349 (1); 7,337 (0,68); 7,331 (0,66); 7,304 (1,22); 6,966 (0,32); 4,293 (1,68); 2,776

Ví dụ	$^1\text{H-NMR}$ [CDCl_3 ở 300 Mhz]
	(4,18); 1,668 (2,25); 0,334 (0,59); 0,323 (16); 0,312 (0,62); 0,115 (0,47); 0,043 (0,88)
I.041	8,173 (0,74); 8,164 (0,75); 7,536 (0,54); 7,53 (0,58); 7,512 (0,62); 7,506 (0,64); 7,354 (0,33); 7,335 (0,49); 7,333 (0,49); 7,33 (0,51); 7,327 (0,43); 7,308 (0,47); 7,302 (0,55); 7,298 (1,48); 7,166 (0,48); 7,163 (0,49); 7,142 (0,79); 7,139 (0,78); 7,118 (0,35); 7,115 (0,33); 7,013 (0,77); 7,004 (0,75); 6,804 (0,75); 6,803 (0,74); 6,777 (0,68); 2,964 (0,53); 2,943 (1,12); 2,922 (0,65); 2,793 (0,55); 2,772 (0,99); 2,751 (0,52); 1,958 (0,39); 1,941 (0,57); 1,927 (0,51); 1,921 (0,56); 1,851 (0,59); 1,844 (0,55); 1,83 (0,57); 1,824 (0,46); 1,814 (0,4); 1,478 (0,34); 1,466 (0,39); 1,426 (0,34); 1,414 (0,35); 1,304 (0,88); 1,293 (1,89); 1,282 (0,64); 1,016 (0,51); 1,011 (0,81); 1,007 (0,56); 0,983 (2,68); 0,971 (0,35); 0,959 (1,56); 0,862 (0,66); 0,857 (0,58); 0,836 (1,3); 0,831 (0,54); 0,811 (0,79); 0,809 (0,83); 0,32 (0,81); 0,311 (0,73); 0,301 (16); 0,29 (0,73); 0,037 (0,59)
I.042	8,601 (2,65); 8,176 (0,7); 8,172 (0,78); 8,145 (0,84); 8,075 (0,71); 8,071 (0,71); 8,048 (0,85); 8,043 (0,85); 7,769 (0,34); 7,764 (0,4); 7,746 (0,65); 7,742 (0,83); 7,737 (0,39); 7,719 (0,6); 7,714 (0,56); 7,691 (0,6); 7,686 (0,66); 7,668 (0,4); 7,663 (0,8); 7,659 (0,6); 7,64 (0,32); 7,305 (1,47); 7,243 (0,39); 7,22 (0,45); 7,215 (0,88); 7,193 (0,87); 7,188 (0,56); 7,166 (0,47); 6,806 (0,63); 6,778 (1,13); 6,75 (0,55); 6,307 (1,22); 6,28 (1,15); 2,634 (9,67); 1,747 (0,62); 1,302 (0,46); 0,504 (0,62); 0,493 (15,63); 0,487 (16); 0,475 (0,69); 0,132 (0,35); 0,12 (8,56); 0,107 (0,32); 0,046 (1,1)
I.043 (2)	7,562 (1,18); 7,547 (1,47); 7,431 (0,92); 7,415 (1,52); 7,399 (0,85); 7,383 (0,96); 7,377 (0,96); 7,291 (2,09); 7,261 (5,57); 6,972 (1,38); 6,956 (1,28); 2,78 (9,04); 1,563 (8,23); 1,256 (5,47); 1,218 (0,49); 0,994 (0,51); 0,985 (3,75); 0,979 (7,64); 0,963 (3,8); 0,948 (2,47); 0,894 (0,44); 0,882 (1,19); 0,868 (1,9); 0,852 (1,44); 0,836 (0,49); 0,469 (15,53); 0,4 (0,33); 0,357 (16); 0 (5,14)
I.044	8,146 (0,88); 8,118 (0,82); 7,692 (0,53); 7,687 (0,59); 7,665 (1,34); 7,641 (1,72); 7,528 (0,74); 7,525 (0,7); 7,506 (0,61); 7,5 (0,98); 7,478 (0,4); 7,475 (0,36); 7,448 (2,29); 7,392 (0,68); 7,356 (0,9); 7,334 (1,38); 7,304 (2,8); 7,298 (1,02); 7,282 (0,5); 6,909 (0,67); 6,88 (1,15); 6,853 (0,58); 6,773 (0,97); 6,767 (0,97); 6,716 (0,81); 6,709 (0,78); 6,615 (1,2); 6,587 (1,11); 5,727 (0,92); 5,72 (0,87); 5,691 (0,87); 5,684 (0,86); 1,666 (0,76); 1,301 (1,09); 0,41 (16); 0,404 (15,43); 0,118 (1,12); 0,046 (1,47)
I.045	8,238 (0,9); 8,21 (1); 8,008 (1,3); 8,001 (1,18); 7,981 (1,48); 7,976 (1,26); 7,735 (1,21); 7,71 (2,11); 7,681 (0,64); 7,606 (2,5); 7,582 (0,76); 7,557 (0,99); 7,532 (0,59); 7,524 (0,46); 7,518 (0,38); 7,506 (1,61); 7,484 (2,56); 7,468 (0,5); 7,36 (0,38); 7,333 (0,88); 7,305 (3,87); 7,283 (0,46); 6,881 (0,68); 6,852 (1,23); 6,824 (0,63); 6,727 (1,32); 6,7 (1,21); 1,677 (0,34);

Ví dụ	$^1\text{H-NMR}$ [CDCl_3 ở 300 Mhz]
	1,301 (1,45); 0,907 (0,4); 0,887 (0,42); 0,281 (16); 0,275 (15,35); 0,118 (0,7); 0,046 (2,92)
I.046	8,088 (0,8); 8,058 (0,77); 7,675 (1,44); 7,649 (1,7); 7,645 (1,09); 7,627 (0,64); 7,622 (0,38); 7,522 (0,62); 7,519 (0,61); 7,5 (0,47); 7,495 (0,84); 7,472 (0,34); 7,469 (0,33); 7,402 (2,07); 7,36 (0,39); 7,338 (0,47); 7,333 (0,87); 7,311 (0,88); 7,306 (0,6); 7,3 (1,25); 7,284 (0,47); 6,905 (0,58); 6,903 (0,57); 6,876 (1,07); 6,849 (0,52); 6,847 (0,5); 6,613 (1,12); 6,586 (1,04); 2,781 (8,7); 0,418 (0,68); 0,407 (15,93); 0,401 (16); 0,39 (0,81); 0,115 (0,72); 0,04 (1,02)
I.047	8,08 (0,38); 8,05 (0,36); 7,647 (0,34); 7,642 (0,34); 7,631 (0,82); 7,625 (0,57); 7,621 (0,55); 7,615 (0,54); 7,607 (0,75); 7,601 (0,5); 7,476 (0,41); 7,401 (0,33); 7,38 (1,24); 7,374 (0,39); 7,3 (5,19); 7,258 (0,33); 7,236 (0,49); 7,233 (0,49); 6,874 (0,46); 6,847 (0,42); 5,339 (1,25); 2,81 (4,26); 1,609 (5,62); 0,348 (0,58); 0,337 (16); 0,326 (0,62); 0,039 (4,98)
I.048	7,639 (0,75); 7,629 (0,57); 7,522 (0,51); 7,518 (0,48); 7,5 (0,44); 7,494 (0,67); 7,464 (1,57); 7,452 (0,34); 7,427 (0,48); 7,425 (0,47); 7,422 (0,5); 7,4 (0,47); 7,394 (0,46); 7,302 (6,77); 7,282 (0,53); 7,279 (0,56); 7,258 (0,8); 7,255 (0,78); 7,234 (0,55); 6,842 (0,76); 6,814 (0,68); 2,791 (6,68); 2,554 (0,8); 2,142 (0,88); 1,623 (5,43); 1,306 (0,63); 1,027 (0,92); 0,989 (0,93); 0,922 (0,75); 0,489 (0,53); 0,478 (16); 0,466 (0,63); 0,295 (0,33); 0,276 (0,57); 0,177 (0,34); 0,04 (6,77); 8,089 (0,6); 8,06 (0,58); 7,73 (0,54); 7,724 (0,58); 7,706 (0,61); 7,7 (0,63); 7,676 (0,48); 7,672 (0,53); 7,666 (0,48); 7,659 (0,35); 7,654 (0,84); 7,644 (0,81)
I.049	8,104 (1,19); 8,076 (1,18); 7,717 (2,16); 7,692 (3,29); 7,666 (0,92); 7,661 (0,6); 7,555 (4); 7,529 (1,24); 7,505 (0,57); 7,374 (0,58); 7,346 (1,29); 7,323 (1,37); 7,319 (0,89); 7,304 (11,28); 7,296 (0,94); 6,918 (0,95); 6,889 (1,66); 6,862 (0,84); 6,555 (1,79); 6,527 (1,69); 2,775 (0,42); 2,767 (0,39); 2,75 (12,65); 2,694 (1,87); 2,684 (1,73); 1,625 (16); 1,31 (1,35); 0,946 (0,48); 0,924 (1,42); 0,902 (0,55); 0,55 (15,81); 0,545 (15,06); 0,515 (0,51); 0,51 (0,48); 0,476 (0,35); 0,471 (0,33); 0,297 (0,95); 0,278 (0,97); 0,234 (0,62); 0,216 (0,54); 0,179 (1); 0,098 (0,75); 0,053 (0,38); 0,042 (10,19); 0,032 (0,37)
I.050	8,107 (0,78); 8,079 (0,78); 7,724 (1,4); 7,698 (2,07); 7,673 (0,58); 7,574 (2,02); 7,56 (0,7); 7,534 (0,81); 7,51 (0,37); 7,405 (0,63); 7,378 (1,39); 7,35 (0,81); 7,303 (1,63); 7,115 (0,62); 7,112 (0,61); 7,088 (0,51); 7,084 (0,5); 6,677 (1,14); 6,649 (1,05); 2,8 (1,15); 2,748 (7,56); 1,697 (0,66); 0,553 (16); 0,041 (1,24)
I.051	8,095 (0,61); 8,066 (0,59); 7,703 (1,13); 7,698 (0,44); 7,679 (0,96); 7,676 (1,12); 7,671 (0,71); 7,655 (0,51); 7,546 (0,45); 7,542 (0,46); 7,524 (0,35);

Ví dụ	$^1\text{H-NMR}$ [CDCl_3 ở 300 Mhz]
	7,518 (0,65); 7,491 (1,8); 7,312 (0,47); 7,302 (1,33); 7,286 (1,29); 7,259 (1,07); 7,234 (1,02); 7,23 (1,14); 7,208 (0,51); 7,204 (0,41); 6,687 (0,75); 6,683 (0,75); 6,66 (0,7); 6,657 (0,69); 2,75 (6,72); 2,084 (0,54); 1,298 (0,41); 0,593 (0,55); 0,581 (16); 0,569 (0,62); 0,113 (3,79); 0,039 (0,94)
I.052	8,086 (1,2); 8,057 (1,17); 7,674 (2,21); 7,668 (0,89); 7,65 (1,86); 7,646 (2,2); 7,642 (1,39); 7,626 (1); 7,621 (0,55); 7,521 (0,9); 7,517 (0,91); 7,499 (0,69); 7,493 (1,27); 7,471 (0,52); 7,468 (0,49); 7,404 (3,14); 7,353 (0,61); 7,331 (0,71); 7,326 (1,36); 7,304 (1,45); 7,298 (3,8); 7,277 (0,74); 6,898 (0,86); 6,896 (0,88); 6,869 (1,61); 6,842 (0,78); 6,84 (0,78); 6,599 (1,68); 6,572 (1,57); 2,773 (13,4); 1,72 (0,37); 1,292 (0,74); 1,043 (0,49); 1,035 (1,03); 1,03 (0,74); 1,019 (0,77); 1,008 (4,38); 0,985 (2,82); 0,93 (0,77); 0,926 (1,01); 0,921 (0,72); 0,903 (1,72); 0,893 (0,56); 0,878 (1,32); 0,868 (0,38); 0,393 (0,58); 0,382 (15,78); 0,376 (16); 0,365 (0,79); 0,128 (0,57); 0,036 (2,76)
I.053	8,09 (1,51); 8,06 (1,45); 7,673 (2,26); 7,666 (1,14); 7,651 (2,16); 7,644 (2,66); 7,639 (1,69); 7,626 (1,27); 7,621 (0,63); 7,523 (1,18); 7,52 (1,11); 7,501 (0,91); 7,496 (1,6); 7,473 (0,65); 7,47 (0,59); 7,421 (0,72); 7,398 (0,94); 7,394 (1,61); 7,371 (2,17); 7,365 (4,5); 7,344 (0,89); 7,304 (4,49); 6,952 (1,13); 6,925 (2,08); 6,898 (1); 6,692 (2,17); 6,665 (2,02); 4,605 (0,77); 4,592 (1,27); 4,58 (1,28); 4,567 (0,79); 2,785 (16); 2,752 (0,42); 1,336 (0,36); 1,298 (2,94); 0,922 (0,38); 0,905 (0,43); 0,899 (0,44); 0,884 (0,43); 0,551 (0,49); 0,546 (0,47); 0,436 (11,65); 0,432 (11,04); 0,423 (11,84); 0,419 (10,72); 0,115 (0,32); 0,042 (3,31)
I.054 (1)	7,95 (0,44); 7,929 (0,47); 7,578 (0,41); 7,574 (0,44); 7,56 (0,46); 7,556 (0,47); 7,533 (0,39); 7,513 (0,51); 7,469 (0,38); 7,466 (0,48); 7,449 (0,33); 7,396 (1,67); 7,383 (0,41); 7,379 (0,61); 7,377 (0,57); 7,282 (0,63); 7,257 (2,25); 7,179 (0,54); 7,177 (0,52); 5,598 (0,43); 2,724 (4,45); 0,32 (1,05); 0,313 (16); 0,305 (0,94); 0 (1,84)
I.055	7,998 (0,34); 7,97 (0,38); 7,527 (0,6); 7,503 (0,37); 7,498 (0,34); 7,441 (0,33); 7,437 (0,35); 7,414 (0,37); 7,312 (0,45); 7,302 (1,81); 7,293 (0,34); 7,283 (0,51); 7,274 (0,46); 7,264 (0,4); 7,188 (1,02); 5,479 (0,4); 2,771 (3,98); 1,298 (0,62); 0,495 (0,4); 0,327 (0,61); 0,316 (16); 0,306 (0,68); 0,042 (1,16)
I.056	7,983 (0,39); 7,956 (0,44); 7,682 (0,72); 7,676 (0,51); 7,657 (0,87); 7,652 (0,78); 7,564 (0,36); 7,56 (0,44); 7,484 (0,33); 7,48 (0,33); 7,457 (0,47); 7,442 (1,09); 7,331 (0,39); 7,325 (0,38); 7,301 (1,51); 7,251 (0,34); 7,247 (0,35); 7,226 (0,51); 7,223 (0,49); 6,975 (0,48); 6,972 (0,47); 6,949 (0,42); 6,946 (0,4); 3,77 (0,93); 3,746 (0,95); 2,447 (4,5); 1,309 (1,25); 1,286 (2,36); 1,262 (1,03); 0,33 (0,68); 0,319 (16); 0,308 (0,72); 0,042 (1,33)

Ví dụ	$^1\text{H-NMR}$ [CDCl_3 ở 300 Mhz]
I.057	7,62 (1,07); 7,6 (1,02); 7,592 (0,51); 7,574 (0,44); 7,398 (0,59); 7,376 (0,76); 7,371 (1,32); 7,349 (1,38); 7,344 (0,83); 7,322 (0,72); 7,304 (3,43); 7,072 (2,78); 6,948 (0,95); 6,919 (1,72); 6,892 (0,85); 6,666 (1,82); 6,639 (1,7); 2,788 (10,53); 1,294 (1,88); 1,033 (0,58); 1,027 (1,19); 0,999 (4,43); 0,976 (2,93); 0,919 (0,38); 0,906 (1,14); 0,882 (1,92); 0,857 (1,42); 0,379 (0,72); 0,368 (16); 0,362 (15,77); 0,112 (0,69); 0,04 (2,95); 8,782 (1,18); 8,753 (1,29); 7,734 (0,52); 7,729 (0,59); 7,706 (1,98); 7,679 (2,92); 7,623 (1,12)
I.058	8,718 (0,38); 8,69 (0,43); 7,629 (0,38); 7,624 (0,41); 7,604 (0,7); 7,599 (0,8); 7,573 (1,06); 7,547 (0,47); 7,534 (0,47); 7,528 (0,48); 7,504 (0,33); 7,446 (0,41); 7,441 (0,39); 7,301 (1,12); 7,272 (0,33); 7,25 (0,52); 7,247 (0,54); 7,222 (0,79); 7,195 (0,47); 7,081 (1,05); 5,625 (0,5); 2,797 (4,17); 0,353 (0,78); 0,343 (16); 0,332 (0,82); 0,039 (1,13)
I.059	12,096 (0,48); 7,484 (0,76); 7,48 (0,75); 7,467 (1,03); 7,458 (1,05); 7,454 (1,03); 7,443 (0,93); 7,411 (1,19); 7,386 (0,82); 7,364 (0,52); 7,359 (0,84); 7,337 (0,86); 7,332 (0,55); 7,304 (3,38); 7,277 (0,6); 7,273 (0,54); 7,25 (0,85); 7,228 (0,4); 7,224 (0,35); 7,182 (2,57); 6,927 (0,59); 6,898 (1,07); 6,87 (0,53); 6,803 (1,18); 6,776 (1,09); 1,673 (0,92); 1,299 (1,14); 0,44 (16); 0,434 (15,53); 0,043 (2,55)
I.060	7,892 (0,75); 7,89 (0,75); 7,864 (0,95); 7,641 (0,73); 7,623 (0,67); 7,618 (1,08); 7,614 (1); 7,6 (0,83); 7,596 (0,74); 7,591 (0,39); 7,572 (0,55); 7,567 (0,38); 7,438 (2,35); 7,429 (0,76); 7,425 (0,63); 7,405 (0,8); 7,403 (0,88); 7,379 (0,43); 7,375 (0,35); 7,33 (0,39); 7,304 (1,79); 7,28 (0,91); 7,275 (0,53); 7,253 (0,48); 6,874 (0,63); 6,872 (0,52); 6,845 (1,06); 6,818 (0,56); 6,815 (0,45); 6,654 (1,18); 6,626 (1,13); 4,655 (0,73); 4,631 (2,31); 4,608 (2,34); 4,584 (0,75); 1,635 (0,52); 1,444 (2,4); 1,421 (4,9); 1,397 (2,33); 0,497 (1,44); 0,427 (0,78); 0,416 (16); 0,41 (14,91); 0,399 (0,61); 0,05 (1,02)
I.061	7,999 (0,7); 7,972 (0,85); 7,646 (0,69); 7,634 (0,53); 7,629 (0,5); 7,62 (1); 7,61 (0,84); 7,606 (0,74); 7,601 (0,42); 7,583 (0,57); 7,578 (0,43); 7,468 (0,6); 7,464 (0,61); 7,442 (0,87); 7,438 (0,54); 7,418 (0,37); 7,414 (0,36); 7,389 (2,15); 7,36 (0,4); 7,338 (0,46); 7,333 (0,88); 7,311 (0,93); 7,305 (1,97); 7,284 (0,48); 6,894 (0,57); 6,892 (0,56); 6,865 (1,04); 6,838 (0,52); 6,835 (0,49); 6,641 (1,1); 6,614 (1,03); 2,62 (0,34); 2,609 (0,37); 2,593 (0,72); 2,576 (0,4); 2,565 (0,38); 1,388 (0,34); 1,375 (0,99); 1,365 (1,21); 1,359 (1,11); 1,354 (0,78); 1,349 (1,11); 1,338 (0,44); 1,305 (0,62); 1,116 (0,37); 1,105 (1,1); 1,095 (0,97); 1,089 (0,55); 1,078 (1,07); 1,068 (0,95); 0,448 (0,63); 0,437 (16); 0,431 (15,91); 0,419 (0,69); 0,049 (1,4)
I.062	5,098 (3,96); 5,089 (2,9); 5,081 (0,99); 1,576 (10,29); 1,256 (1,43); 0,746 (14,93); 0,738 (16); 0,694 (0,38); 0,687 (0,33); 0,073 (0,71); 0 (6,18);

Ví dụ	$^1\text{H-NMR}$ [CDCl_3 ở 300 Mhz]
	8,003 (4,72); 7,986 (5,18); 7,664 (0,4); 7,647 (1,92); 7,642 (2,08); 7,635 (2,33); 7,63 (3,97); 7,626 (2,16); 7,618 (2,2); 7,614 (2,32); 7,559 (0,38); 7,545 (4,84); 7,538 (7,32); 7,531 (6,78); 7,526 (5,43); 7,504 (1,61); 7,49 (10,93); 7,488 (10,37); 7,478 (4,86); 7,462 (1,27); 7,393 (1,81); 7,376 (4,07); 7,363 (4,23); 7,347 (2,1); 7,256 (8,03); 7,181 (0,45); 7,17 (2,54); 7,164 (8,83); 7,163 (8,66); 7,156 (13,45); 7,152 (12,4); 7,134 (12,55); 6,953 (3,07); 6,936 (5,9); 6,92 (3,02); 6,653 (6,11); 6,636 (5,94); 5,115 (0,81); 5,106 (2,78)
I.063 (2)	8,048 (0,86); 8,03 (0,87); 7,679 (1,04); 7,666 (1,18); 7,662 (1,3); 7,651 (0,64); 7,553 (0,66); 7,536 (0,89); 7,522 (0,43); 7,506 (2,23); 7,33 (0,32); 7,316 (0,61); 7,314 (0,71); 7,3 (0,81); 7,284 (0,36); 7,259 (2,43); 6,886 (0,58); 6,869 (1,07); 6,852 (0,54); 6,604 (1,13); 6,588 (1,08); 1,55 (1,25); 0,377 (16); 0,374 (13,09); 0 (2,44)
I.064	8,045 (0,81); 8,018 (0,72); 8,016 (0,78); 7,652 (0,37); 7,647 (0,57); 7,639 (0,68); 7,633 (0,7); 7,629 (0,54); 7,624 (1,11); 7,618 (0,44); 7,612 (0,95); 7,607 (1); 7,6 (0,78); 7,468 (0,63); 7,464 (0,6); 7,446 (0,53); 7,44 (0,92); 7,418 (0,38); 7,414 (0,35); 7,364 (0,39); 7,342 (0,48); 7,336 (0,87); 7,314 (0,91); 7,309 (0,68); 7,304 (2,43); 7,287 (0,48); 7,253 (2,2); 6,914 (0,58); 6,912 (0,54); 6,885 (1,03); 6,858 (0,53); 6,855 (0,47); 6,692 (1,11); 6,664 (1,03); 2,75 (10,67); 1,598 (1,62); 0,46 (0,49); 0,44 (0,64); 0,429 (16); 0,423 (15,64); 0,412 (0,62); 0,047 (2,31)
I.065	8,245 (0,7); 8,217 (0,83); 7,769 (0,36); 7,764 (0,43); 7,741 (1,35); 7,714 (1,74); 7,65 (0,68); 7,629 (0,63); 7,621 (0,34); 7,547 (1,81); 7,405 (0,39); 7,382 (0,48); 7,377 (0,87); 7,355 (0,89); 7,35 (0,54); 7,328 (0,48); 7,304 (4,92); 7,252 (0,76); 7,072 (1,56); 6,958 (0,59); 6,956 (0,58); 6,93 (1,07); 6,902 (0,54); 6,9 (0,53); 6,892 (0,81); 6,71 (1,12); 6,683 (1,05); 1,604 (3,79); 0,411 (0,69); 0,4 (16); 0,394 (15,83); 0,382 (0,7); 0,044 (5,04)
I.066	8,044 (0,63); 8,018 (0,72); 7,631 (0,46); 7,614 (2,23); 7,607 (1,06); 7,6 (1,17); 7,58 (1,01); 7,574 (0,51); 7,569 (0,35); 7,555 (1,51); 7,55 (1,12); 7,532 (0,5); 7,526 (0,5); 7,421 (0,34); 7,394 (0,8); 7,372 (0,84); 7,367 (0,54); 7,345 (0,48); 7,304 (9,55); 7,183 (1,2); 7,156 (0,96); 7,129 (0,7); 6,947 (1,44); 6,916 (0,59); 6,886 (1,01); 6,858 (0,52); 6,766 (0,71); 6,395 (0,55); 1,597 (11,08); 0,412 (0,66); 0,401 (16); 0,394 (15,88); 0,383 (0,67); 0,054 (0,33); 0,044 (9,62); 0,032 (0,34)
I.067	8,289 (0,91); 8,285 (1,04); 8,279 (1,04); 8,275 (1,03); 8,182 (0,79); 8,154 (0,82); 8,098 (0,97); 8,094 (0,98); 8,081 (1,07); 8,077 (1,04); 7,706 (0,4); 7,702 (0,53); 7,684 (1,07); 7,679 (1,77); 7,653 (2,07); 7,541 (0,65); 7,538 (0,68); 7,519 (0,61); 7,514 (0,9); 7,494 (2,43); 7,447 (0,93); 7,437 (0,98); 7,43 (0,96); 7,42 (0,9); 7,381 (0,39); 7,358 (0,46); 7,354 (0,88); 7,331 (0,87); 7,326 (0,57); 7,305 (3,79); 6,933 (0,6); 6,906 (1,1); 6,877 (0,53);

Ví dụ	$^1\text{H-NMR}$ [CDCl_3 ở 300 Mhz]
	6,718 (1,17); 6,691 (1,08); 1,301 (1,01); 0,908 (0,35); 0,901 (0,34); 0,887 (0,39); 0,38 (0,54); 0,369 (15,51); 0,363 (16); 0,118 (1,75); 0,046 (2,9)
I.068	8,662 (1,36); 8,063 (0,4); 8,057 (0,35); 7,795 (0,35); 7,776 (0,32); 7,773 (0,38); 7,769 (0,44); 7,669 (0,39); 7,663 (0,35); 7,642 (0,56); 7,635 (0,55); 7,614 (0,36); 7,609 (0,37); 7,602 (0,36); 7,597 (0,38); 7,578 (0,4); 7,572 (0,42); 7,464 (0,32); 7,462 (0,32); 7,438 (0,32); 7,31 (0,33); 7,289 (0,49); 7,285 (0,51); 7,258 (1,33); 7,247 (0,53); 7,244 (0,48); 7,219 (0,4); 7,217 (0,37); 1,255 (0,49); 0,256 (0,6); 0,244 (16); 0,233 (0,75); 0 (0,82)
I.069	8,689 (2,64); 8,135 (0,59); 8,13 (0,49); 8,127 (0,43); 8,109 (0,78); 8,102 (0,66); 7,835 (0,46); 7,83 (0,66); 7,811 (0,61); 7,808 (0,71); 7,804 (0,85); 7,739 (0,38); 7,722 (0,77); 7,716 (0,68); 7,696 (1,32); 7,689 (1,18); 7,673 (0,38); 7,669 (0,65); 7,664 (0,63); 7,476 (0,39); 7,454 (0,45); 7,449 (0,88); 7,427 (0,88); 7,422 (0,54); 7,399 (0,47); 7,3 (3,24); 7,036 (0,95); 7,034 (1,04); 7,01 (1,27); 6,984 (0,94); 6,956 (0,49); 6,954 (0,44); 1,616 (4,92); 0,347 (0,7); 0,335 (16); 0,33 (15,83); 0,318 (0,74); 0,039 (2,67)
I.070	8,732 (2,12); 8,134 (0,47); 8,129 (0,38); 8,125 (0,32); 8,108 (0,62); 8,101 (0,53); 7,828 (0,37); 7,821 (0,52); 7,803 (0,48); 7,8 (0,57); 7,796 (0,7); 7,74 (0,66); 7,735 (0,72); 7,716 (1,19); 7,71 (1,12); 7,693 (0,78); 7,691 (0,68); 7,686 (0,74); 7,667 (0,52); 7,661 (0,51); 7,542 (0,5); 7,539 (0,49); 7,536 (0,5); 7,534 (0,41); 7,515 (0,46); 7,509 (0,42); 7,39 (0,49); 7,387 (0,48); 7,366 (0,79); 7,363 (0,75); 7,342 (0,34); 7,301 (4,81); 7,271 (0,79); 7,244 (0,65); 2,206 (1,55); 1,614 (4,15); 1,323 (0,36); 1,307 (1,19); 0,944 (0,43); 0,922 (1,35); 0,899 (0,5); 0,436 (0,55); 0,425 (16); 0,413 (0,61); 0,04 (5,01)
I.071	8,71 (4,25); 8,134 (0,93); 8,129 (0,76); 8,108 (1,2); 8,102 (1,06); 7,828 (0,71); 7,821 (0,94); 7,802 (0,95); 7,799 (1,1); 7,795 (1,39); 7,75 (0,48); 7,744 (0,58); 7,727 (1,22); 7,721 (1,05); 7,703 (1,58); 7,696 (1,46); 7,677 (0,98); 7,671 (0,96); 7,654 (0,43); 7,648 (0,35); 7,519 (0,56); 7,496 (0,7); 7,492 (1,1); 7,469 (1,28); 7,464 (0,8); 7,442 (0,69); 7,301 (3,7); 7,049 (3,19); 7,021 (3,34); 6,992 (0,87); 2,527 (0,49); 1,649 (1,8); 1,306 (0,77); 0,922 (0,86); 0,899 (0,33); 0,471 (0,59); 0,46 (16); 0,454 (15,75); 0,442 (0,77); 0,291 (1,39); 0,273 (1,42); 0,192 (1,03); 0,174 (1,47); 0,151 (0,56); 0,04 (3,69); -0,026 (1,46)
I.072	8,68 (1,77); 8,127 (0,43); 8,122 (0,38); 8,101 (0,56); 8,095 (0,5); 7,848 (0,43); 7,843 (0,46); 7,823 (0,44); 7,82 (0,5); 7,816 (0,59); 7,71 (0,49); 7,704 (0,46); 7,681 (0,62); 7,674 (0,59); 7,654 (0,45); 7,648 (0,46); 7,638 (0,42); 7,632 (0,59); 7,614 (0,46); 7,608 (0,57); 7,497 (0,42); 7,491 (0,46); 7,471 (0,39); 7,465 (0,35); 7,34 (0,37); 7,338 (0,44); 7,313 (1,22); 7,302 (1,35); 7,292 (0,32); 7,288 (0,41); 7,284 (0,6); 1,642 (0,76); 0,96 (16); 0,37 (0,89); 0,283 (0,62); 0,274 (11,93); 0,043 (1,07)

Ví dụ	$^1\text{H-NMR}$ [CDCl_3 ở 300 Mhz]
I.073 (3)	8,653 (3,62); 7,892 (0,77); 7,887 (0,86); 7,878 (0,34); 7,868 (1,08); 7,549 (0,75); 7,543 (0,69); 7,531 (1,25); 7,527 (1,17); 7,515 (1,94); 7,512 (2,01); 7,508 (1,52); 7,502 (0,84); 7,498 (1,19); 7,493 (1); 7,488 (0,6); 7,482 (0,44); 7,477 (0,37); 7,374 (0,85); 7,37 (0,97); 7,356 (0,98); 7,352 (1,07); 7,333 (0,5); 7,329 (0,47); 7,313 (0,94); 7,31 (0,88); 7,295 (0,71); 7,29 (0,59); 7,135 (0,83); 7,117 (1,5); 7,11 (1,61); 7,101 (0,67); 7,099 (0,69); 7,09 (1,2); 3,351 (0,39); 3,341 (0,57); 3,218 (400,25); 3,163 (0,44); 2,309 (12,66); 2,305 (16); 2,301 (11,68); 1,436 (0,58); 1,42 (0,75); 1,403 (0,61); 0,651 (0,98); 0,635 (0,93); 0,503 (10,94); 0,486 (10,49); 0,454 (3,11); 0,437 (2,95); 0,031 (1,87); 0 (19,76)
I.074 (3)	9,338 (0,57); 8,847 (5,15); 8,094 (1,09); 8,089 (1,22); 8,079 (0,47); 8,069 (1,49); 7,769 (0,38); 7,765 (0,44); 7,751 (1,25); 7,743 (0,8); 7,732 (1,73); 7,728 (1,62); 7,723 (1,04); 7,718 (1,9); 7,707 (2,22); 7,704 (2,99); 7,701 (2,45); 7,687 (1,28); 7,681 (0,85); 7,552 (1,15); 7,548 (1,48); 7,534 (1,85); 7,53 (1,83); 7,519 (1,52); 7,515 (1,15); 7,499 (1,06); 7,495 (0,8); 7,343 (1,17); 7,325 (1,96); 7,314 (2,18); 7,294 (1,69); 6,746 (0,38); 3,569 (0,33); 3,556 (0,41); 3,551 (0,53); 3,421 (561,36); 3,383 (0,78); 3,369 (0,41); 2,512 (16,49); 2,508 (21,21); 2,503 (15,55); 0,911 (0,87); 0,89 (2,65); 0,873 (1,8); 0,847 (5,15); 0,826 (16); 0,818 (2,3); 0,808 (9,79); 0,78 (1,42); 0,759 (1,03); 0,727 (3,33); 0,724 (3,3); 0,708 (8,05); 0,688 (5,7); 0,67 (1,33); 0,666 (1,28)
I.075 (3)	8,708 (3,95); 7,956 (0,87); 7,951 (0,97); 7,941 (0,38); 7,931 (1,25); 7,63 (0,33); 7,615 (0,82); 7,608 (0,77); 7,597 (1,44); 7,593 (1,35); 7,582 (2,21); 7,579 (2,28); 7,575 (1,73); 7,57 (0,96); 7,565 (1,32); 7,56 (1,11); 7,556 (0,66); 7,549 (0,5); 7,544 (0,4); 7,43 (0,98); 7,426 (1,12); 7,412 (1,15); 7,408 (1,31); 7,401 (0,69); 7,397 (0,56); 7,381 (1,1); 7,362 (0,81); 7,358 (0,66); 7,203 (0,92); 7,185 (1,54); 7,17 (1,97); 7,151 (1,35); 3,411 (0,39); 3,285 (400,84); 2,376 (12,72); 2,372 (16); 2,367 (11,76); 0,863 (0,48); 0,845 (0,66); 0,832 (0,43); 0,826 (0,72); 0,809 (0,5); 0,766 (1,31); 0,748 (1,24); 0,726 (10,32); 0,708 (6,79); 0,044 (2,64); 0 (22,55)
I.076 (3)	9,216 (0,43); 8,708 (4,28); 7,942 (0,92); 7,937 (1,06); 7,928 (0,42); 7,917 (1,35); 7,614 (0,35); 7,599 (0,87); 7,593 (0,82); 7,581 (1,54); 7,577 (1,47); 7,567 (2,37); 7,564 (2,47); 7,56 (1,88); 7,554 (1,02); 7,55 (1,42); 7,545 (1,21); 7,54 (0,72); 7,534 (0,53); 7,529 (0,44); 7,416 (1,03); 7,412 (1,23); 7,398 (1,23); 7,394 (1,44); 7,387 (0,78); 7,383 (0,62); 7,367 (1,18); 7,364 (1,06); 7,348 (0,88); 7,344 (0,73); 7,188 (1,01); 7,17 (1,66); 7,152 (2,39); 7,132 (1,45); 3,327 (1,57); 3,269 (403,6); 3,215 (0,53); 2,36 (12,5); 2,356 (16); 2,351 (11,82); 0,732 (0,73); 0,714 (0,51); 0,688 (1,92); 0,668 (5,14); 0,649 (3,02); 0,588 (0,37); 0,518 (1); 0,5 (2,56); 0,48 (2,02); 0,461 (0,46); 0,459 (0,46); 0,049 (3,73); 0 (25,64)

Ví dụ	$^1\text{H-NMR}$ [CDCl_3 ở 300 Mhz]
I.077	8,755 (2,01); 7,636 (0,58); 7,63 (0,63); 7,612 (0,72); 7,606 (0,78); 7,594 (0,83); 7,591 (0,88); 7,585 (0,88); 7,582 (0,78); 7,568 (1,69); 7,551 (0,56); 7,532 (0,33); 7,507 (0,59); 7,505 (0,58); 7,502 (0,57); 7,481 (0,52); 7,475 (0,45); 7,367 (0,54); 7,364 (0,54); 7,343 (0,84); 7,34 (0,82); 7,319 (0,37); 7,316 (0,35); 7,3 (1,83); 7,251 (0,88); 7,224 (0,72); 1,296 (1,23); 0,961 (0,89); 0,934 (2,71); 0,92 (0,41); 0,91 (1,7); 0,783 (0,55); 0,779 (0,52); 0,758 (1,4); 0,731 (1,03); 0,253 (0,87); 0,242 (16); 0,232 (0,83); 0,04 (1,75)
I.078	8,747 (2,13); 7,608 (0,76); 7,592 (1,85); 7,578 (0,98); 7,576 (1,07); 7,571 (0,89); 7,565 (0,82); 7,487 (0,42); 7,465 (0,47); 7,459 (0,89); 7,437 (0,81); 7,432 (0,59); 7,41 (0,49); 7,3 (5,67); 7,034 (0,5); 7,031 (0,61); 7,006 (1,91); 7,004 (1,89); 6,978 (1,36); 1,589 (2,42); 0,36 (0,48); 0,351 (0,33); 0,344 (0,38); 0,328 (0,95); 0,317 (16); 0,311 (15,98); 0,3 (0,87); 0,198 (0,56); 0,105 (0,4); 0,039 (6)
I.079	8,76 (1,23); 7,646 (0,35); 7,64 (0,37); 7,622 (0,41); 7,616 (0,44); 7,596 (0,49); 7,593 (0,52); 7,588 (0,47); 7,583 (0,42); 7,57 (1,11); 7,553 (0,34); 7,511 (0,33); 7,368 (0,33); 7,347 (0,5); 7,344 (0,49); 7,3 (2,96); 7,254 (0,5); 7,252 (0,48); 7,227 (0,41); 1,589 (2,17); 0,278 (0,57); 0,267 (16); 0,256 (0,61); 0,039 (3,17)
I.080	8,762 (1,91); 7,609 (0,56); 7,603 (0,61); 7,59 (0,75); 7,582 (1,15); 7,577 (1,67); 7,561 (1,33); 7,557 (0,77); 7,547 (0,58); 7,526 (0,33); 7,502 (0,54); 7,499 (0,53); 7,496 (0,5); 7,493 (0,45); 7,475 (0,51); 7,469 (0,44); 7,361 (0,5); 7,358 (0,53); 7,337 (0,8); 7,333 (0,8); 7,312 (0,36); 7,309 (0,37); 7,3 (1,93); 7,24 (0,8); 7,238 (0,77); 7,213 (0,66); 7,211 (0,62); 1,656 (1,31); 1,619 (1,34); 1,604 (1,39); 1,108 (0,49); 1,071 (0,79); 1,053 (0,51); 1,027 (0,56); 1,022 (0,57); 0,229 (0,8); 0,219 (16); 0,208 (0,79); 0,04 (1,96)
I.081	8,778 (1,87); 7,741 (0,5); 7,736 (0,56); 7,717 (0,6); 7,711 (0,64); 7,594 (0,52); 7,579 (1,36); 7,569 (0,43); 7,564 (1); 7,558 (0,71); 7,551 (1,11); 7,544 (0,56); 7,523 (0,48); 7,518 (0,46); 7,405 (0,47); 7,402 (0,49); 7,38 (0,76); 7,378 (0,76); 7,356 (0,33); 7,301 (1,42); 7,253 (0,78); 7,252 (0,76); 7,226 (0,66); 1,655 (0,55); 0,416 (0,54); 0,404 (16); 0,393 (0,6); 0,188 (0,52); 0,04 (1,43)
I.082	8,765 (3,81); 7,611 (1,01); 7,59 (3,05); 7,58 (1,15); 7,571 (1,42); 7,567 (2,3); 7,559 (0,4); 7,536 (0,64); 7,513 (0,72); 7,508 (1,29); 7,486 (1,26); 7,481 (0,83); 7,459 (0,71); 7,302 (6,25); 7,07 (0,9); 7,041 (1,76); 7,035 (2,03); 7,013 (0,99); 7,008 (1,73); 5,34 (1,31); 1,626 (1,8); 1,34 (0,58); 1,324 (0,48); 1,306 (0,7); 1,293 (1,09); 0,919 (0,33); 0,449 (0,54); 0,438 (15,7); 0,433 (16); 0,421 (0,77); 0,271 (0,35); 0,264 (0,35); 0,039 (4,72)

Ví dụ	$^1\text{H-NMR}$ [CDCl_3 ở 300 Mhz]
I.083	8,77 (7,19); 8,763 (2,72); 7,621 (0,53); 7,605 (0,68); 7,588 (3,15); 7,574 (1,05); 7,565 (5,76); 7,561 (5,3); 7,543 (5,59); 7,538 (3,34); 7,533 (2,65); 7,51 (1,67); 7,504 (0,96); 7,482 (0,77); 7,477 (0,6); 7,454 (0,52); 7,297 (6,87); 7,091 (4,05); 7,064 (3,9); 7,057 (3,32); 7,032 (2,29); 7,03 (2,32); 7,006 (1,32); 1,618 (1,15); 1,29 (0,32); 1,244 (1,02); 1,212 (0,56); 0,545 (0,37); 0,533 (14,98); 0,527 (15,89); 0,507 (15,25); 0,501 (16); 0,49 (0,96); 0,448 (0,37); 0,436 (9,86); 0,43 (10,63); 0,419 (0,66); 0,108 (1,69); 0,035 (6,98); 0,024 (0,34)
I.084	8,392 (1,37); 7,651 (0,86); 7,625 (1,07); 7,622 (1,09); 7,539 (0,41); 7,522 (1,22); 7,505 (1,04); 7,499 (0,99); 7,365 (0,37); 7,362 (0,35); 7,34 (0,56); 7,3 (1,22); 1,294 (0,56); 0,371 (16); 0,111 (0,39); 0,039 (1,05)
I.085	7,531 (0,66); 7,504 (2,6); 7,497 (1,5); 7,492 (1,95); 7,481 (1,77); 7,476 (3,48); 7,461 (1,08); 7,454 (0,83); 7,302 (14,43); 7,066 (0,85); 7,064 (0,82); 7,036 (1,55); 7,009 (0,79); 7,007 (0,73); 6,97 (1,7); 6,942 (1,53); 2,907 (13,52); 2,14 (1,99); 2,131 (2,01); 1,595 (8,15); 1,373 (0,43); 1,35 (0,43); 0,421 (16); 0,416 (16); 0,404 (0,73); 0,262 (0,49); 0,257 (0,37); 0,247 (0,58); 0,237 (0,38); 0,15 (0,51); 0,139 (0,67); 0,092 (0,35); 0,051 (0,56); 0,04 (14,56); 0,029 (0,59); -0,042 (0,49); -0,072 (0,34)
I.086	7,649 (0,33); 7,643 (0,36); 7,624 (0,4); 7,619 (0,42); 7,509 (0,4); 7,506 (0,45); 7,503 (0,43); 7,501 (0,35); 7,492 (1,21); 7,482 (0,4); 7,475 (0,86); 7,464 (0,39); 7,443 (0,34); 7,367 (0,34); 7,364 (0,34); 7,342 (0,53); 7,339 (0,51); 7,3 (1,25); 7,188 (0,5); 7,186 (0,48); 7,16 (0,43); 7,158 (0,41); 2,931 (4,44); 2,916 (0,33); 1,613 (1,58); 0,268 (0,66); 0,257 (16); 0,246 (0,64); 0,04 (1,08)
I.087	7,74 (0,53); 7,734 (0,57); 7,716 (0,62); 7,71 (0,65); 7,553 (0,53); 7,551 (0,49); 7,547 (0,51); 7,526 (0,47); 7,52 (0,44); 7,49 (1,18); 7,485 (0,7); 7,476 (0,59); 7,466 (1,54); 7,445 (0,5); 7,403 (0,5); 7,4 (0,49); 7,379 (0,81); 7,376 (0,75); 7,355 (0,35); 7,301 (4,64); 7,211 (0,81); 7,184 (0,68); 5,341 (0,4); 2,932 (6,98); 1,925 (1,44); 1,604 (4,7); 0,408 (0,57); 0,397 (16); 0,385 (0,77); 0,04 (3,9)
I.088	7,504 (1,25); 7,498 (0,89); 7,491 (0,74); 7,48 (2,39); 7,46 (0,67); 7,456 (0,53); 7,451 (0,89); 7,429 (0,99); 7,424 (0,55); 7,401 (0,48); 7,301 (5,09); 7,029 (0,54); 7,027 (0,54); 7 (0,97); 6,973 (0,49); 6,97 (0,47); 6,911 (1,05); 6,884 (0,96); 2,909 (8,71); 1,597 (3,26); 0,306 (0,64); 0,294 (16); 0,288 (15,98); 0,277 (0,65); 0,04 (4,69)
I.089	7,473 (0,72); 7,468 (1,14); 7,463 (1,26); 7,461 (1,17); 7,446 (1,87); 7,438 (0,88); 7,43 (0,61); 7,375 (0,34); 7,363 (0,59); 7,348 (0,56); 7,339 (0,41); 7,324 (0,39); 7,314 (0,52); 7,308 (0,52); 7,297 (0,74); 7,28 (0,62); 7,274

Ví dụ	$^1\text{H-NMR}$ [CDCl_3 ở 300 Mhz]
	(0,51); 5,331 (0,73); 2,936 (7,17); 2,218 (0,73); 0,398 (0,66); 0,386 (16); 0,375 (0,71); 0,034 (0,59)
I.090	7,488 (0,64); 7,481 (0,7); 7,476 (0,98); 7,46 (1,36); 7,454 (0,74); 7,445 (0,54); 7,427 (1,3); 7,4 (1,05); 7,369 (0,96); 7,365 (1,12); 7,342 (0,52); 7,339 (0,45); 7,297 (0,81); 7,027 (0,79); 7,023 (0,82); 7 (0,71); 6,997 (0,71); 2,89 (6,85); 2,485 (1,34); 0,453 (0,57); 0,441 (16); 0,429 (0,65); 0,034 (0,58)
I.091	7,506 (1,43); 7,501 (1,05); 7,494 (1,31); 7,482 (3,89); 7,466 (1,68); 7,463 (1,43); 7,453 (1,81); 7,431 (1,1); 7,426 (0,88); 7,403 (0,49); 7,304 (22,43); 7,049 (0,51); 7,032 (0,67); 7,02 (0,87); 7,002 (1,03); 6,992 (0,47); 6,975 (0,64); 6,933 (0,92); 6,912 (1,22); 6,886 (1,03); 6,275 (0,32); 6,227 (0,42); 6,208 (0,39); 6,159 (0,5); 6,156 (0,44); 5,796 (0,74); 5,785 (0,85); 5,748 (0,6); 5,736 (0,65); 5,594 (0,77); 5,582 (0,68); 5,526 (0,63); 5,514 (0,57); 2,911 (8,82); 2,876 (7,1); 1,599 (31,81); 1,52 (1,51); 0,382 (8,32); 0,375 (8,23); 0,308 (0,64); 0,296 (16); 0,291 (15,73); 0,053 (0,7); 0,042 (21,33); 0,032 (0,83); 0,016 (1,03); 0,004 (0,34)
I.092	7,592 (0,74); 7,568 (0,99); 7,564 (1,54); 7,542 (1,63); 7,537 (1); 7,514 (0,91); 7,49 (1,62); 7,483 (1,88); 7,478 (2,58); 7,462 (3,39); 7,447 (1,26); 7,304 (9,4); 7,083 (1,05); 7,061 (2,72); 7,035 (2,14); 7,027 (1); 3,476 (1,33); 3,456 (3,6); 3,438 (1,36); 2,896 (16); 1,682 (1,33); 1,672 (2,01); 1,662 (3,94); 1,653 (2,17); 1,642 (1,65); 1,621 (2,68); 1,523 (0,32); 1,475 (0,59); 0,526 (0,36); 0,514 (9,54); 0,508 (9,49); 0,489 (9,61); 0,482 (9,54); 0,042 (8,82); 0,031 (0,36)
I.093	7,865 (1,01); 7,84 (1,27); 7,654 (1,09); 7,65 (1,02); 7,629 (0,74); 7,625 (0,71); 7,538 (1,74); 7,518 (1,39); 7,508 (0,68); 7,494 (1,31); 7,304 (2,51); 2,927 (6,98); 2,918 (1,39); 2,073 (0,37); 2,05 (1,68); 1,635 (0,69); 0,425 (0,63); 0,414 (16); 0,402 (0,61); 0,041 (2,36)
I.094	7,504 (1,8); 7,498 (0,82); 7,485 (1,13); 7,47 (1,47); 7,453 (0,59); 7,443 (0,87); 7,304 (22,25); 6,894 (1,02); 6,866 (0,97); 6,772 (1,11); 6,744 (1,01); 3,967 (7,43); 3,253 (2,06); 2,909 (0,4); 2,896 (7,08); 1,595 (26,8); 1,309 (1,77); 1,102 (0,35); 1,064 (0,32); 0,946 (0,62); 0,924 (1,85); 0,902 (0,73); 0,387 (0,55); 0,339 (0,61); 0,327 (16); 0,298 (0,78); 0,292 (0,53); 0,278 (1,34); 0,268 (0,66); 0,256 (0,39); 0,249 (0,63); 0,238 (0,46); 0,198 (0,73); 0,185 (0,55); 0,179 (0,81); 0,155 (0,4); 0,128 (0,56); 0,112 (1,76); 0,104 (0,49); 0,053 (0,74); 0,042 (21,02); 0,031 (0,69); -0,066 (0,4)
I.095	7,57 (0,6); 7,543 (1,43); 7,515 (1,47); 7,506 (1,11); 7,501 (1,3); 7,485 (1,74); 7,47 (0,61); 7,304 (12,01); 7,269 (0,58); 7,266 (0,55); 7,244 (0,53); 7,106 (1,21); 7,079 (1,1); 2,913 (7,51); 2,109 (2,18); 1,596 (15,64); 0,468 (0,58); 0,451 (1,13); 0,432 (16); 0,42 (1,08); 0,216 (0,55); 0,202 (0,44);

Ví dụ	$^1\text{H-NMR}$ [CDCl_3 ở 300 Mhz]
	0,191 (0,34); 0,173 (0,44); 0,163 (0,39); 0,148 (0,63); 0,14 (0,68); 0,13 (0,78); 0,12 (1,31); 0,112 (1,26); 0,082 (0,54); 0,076 (0,6); 0,053 (0,63); 0,042 (11,6); 0,031 (0,74); 0,028 (0,72); 0,018 (1,45); 0,005 (0,4); -0,008 (0,74); -0,151 (0,62); -0,166 (1,55)
I.096	7,612 (1,07); 7,587 (1,23); 7,507 (1,09); 7,491 (0,69); 7,487 (0,76); 7,482 (0,6); 7,473 (0,6); 7,45 (0,58); 7,304 (3,38); 7,209 (0,72); 7,184 (0,65); 7 (1,27); 2,921 (7,42); 2,438 (5,71); 2,427 (0,73); 1,96 (1,52); 1,632 (6,29); 0,385 (0,9); 0,374 (16); 0,366 (1,66); 0,336 (0,57); 0,273 (0,54); 0,266 (0,85); 0,259 (1,22); 0,25 (0,78); 0,243 (0,64); 0,218 (0,33); 0,178 (0,5); 0,169 (1,28); 0,162 (0,41); 0,152 (0,59); 0,135 (0,39); 0,114 (0,77); 0,043 (2,39); -0,026 (0,99)
I.097	7,5 (1,58); 7,48 (1,11); 7,47 (0,6); 7,447 (0,55); 7,41 (0,55); 7,384 (1,05); 7,358 (0,73); 7,304 (1,96); 7,168 (0,87); 7,143 (0,71); 6,931 (0,8); 6,904 (0,72); 2,909 (7,57); 2,652 (0,57); 2,632 (5,79); 2,042 (1,61); 1,65 (2,68); 0,432 (0,61); 0,421 (16); 0,41 (0,73); 0,401 (1,54); 0,274 (0,64); 0,266 (1,02); 0,258 (1,85); 0,244 (0,58); 0,188 (0,46); 0,178 (0,69); 0,167 (1,24); 0,162 (0,52); 0,153 (0,49); 0,146 (0,56); 0,136 (0,52); 0,044 (2,7)
I.098	7,649 (0,35); 7,502 (0,76); 7,489 (1,34); 7,474 (1,39); 7,46 (0,68); 7,405 (0,47); 7,395 (0,58); 7,378 (0,48); 7,368 (0,61); 7,303 (67,28); 7,22 (0,61); 7,211 (0,61); 7,191 (1,19); 7,176 (0,93); 7,16 (0,39); 6,952 (0,38); 5,344 (0,7); 2,922 (7,25); 2,912 (1,24); 1,892 (2,03); 1,588 (62,91); 0,397 (0,63); 0,386 (16); 0,37 (0,91); 0,34 (2,26); 0,273 (1,56); 0,264 (1,86); 0,256 (1,23); 0,248 (1,66); 0,218 (0,67); 0,208 (0,69); 0,198 (2,48); 0,185 (0,52); 0,172 (0,56); 0,159 (0,77); 0,152 (0,67); 0,123 (0,46); 0,111 (0,87); 0,09 (2,24); 0,053 (2,16); 0,042 (64,21); 0,031 (2,36); 0,013 (0,89)
I.099	7,506 (1,02); 7,501 (1,05); 7,492 (1,84); 7,474 (1,19); 7,464 (0,58); 7,442 (0,51); 7,361 (0,45); 7,356 (0,42); 7,334 (0,57); 7,328 (0,54); 7,303 (10,52); 7,102 (1,13); 7,074 (0,91); 2,922 (7); 2,466 (5,28); 1,895 (1,63); 1,594 (7,73); 0,394 (0,63); 0,383 (16); 0,372 (0,61); 0,273 (1,1); 0,264 (1,16); 0,259 (0,86); 0,256 (0,79); 0,248 (0,79); 0,246 (0,77); 0,242 (0,71); 0,238 (0,67); 0,171 (0,39); 0,159 (0,43); 0,053 (0,41); 0,042 (10,76); 0,031 (0,38)
I.100	7,499 (0,53); 7,494 (0,48); 7,489 (0,46); 7,476 (1,15); 7,458 (0,34); 7,303 (6,66); 7,296 (0,44); 7,286 (0,39); 7,179 (0,4); 7,17 (0,37); 7,157 (0,61); 7,144 (0,64); 5,343 (0,96); 2,922 (4,68); 1,595 (5,01); 0,26 (0,52); 0,249 (16); 0,238 (0,66); 0,042 (5,65)
I.101	7,546 (0,74); 7,537 (0,9); 7,509 (0,47); 7,503 (0,5); 7,498 (0,62); 7,481 (1,01); 7,47 (0,62); 7,466 (0,47); 7,462 (0,46); 7,441 (0,6); 7,433 (0,51); 7,303 (13,77); 7,136 (0,89); 7,107 (0,72); 5,343 (1,23); 2,92 (4,6); 1,593

Ví dụ	$^1\text{H-NMR}$ [CDCl_3 ở 300 Mhz]
	(15,41); 0,268 (0,65); 0,257 (16); 0,246 (0,59); 0,053 (0,41); 0,042 (11,29); 0,031 (0,38)
I.102	7,656 (1,29); 7,512 (0,89); 7,503 (0,83); 7,495 (1,36); 7,483 (1,09); 7,479 (1,28); 7,475 (1,45); 7,467 (0,65); 7,305 (4,54); 7,168 (1,32); 7,14 (1,12); 2,919 (6,99); 1,957 (1,46); 1,615 (7,36); 0,402 (0,57); 0,391 (16); 0,38 (0,66); 0,113 (0,66); 0,043 (4,13); 7,665 (1,16)
I.103	7,636 (1,55); 7,631 (1,67); 7,612 (1,84); 7,606 (2,03); 7,596 (1,83); 7,59 (1,45); 7,569 (2,36); 7,564 (1,59); 7,481 (1,2); 7,465 (3,39); 7,451 (1,92); 7,448 (2,02); 7,443 (1,84); 7,438 (1,51); 7,378 (1,96); 7,354 (2,41); 7,328 (1,34); 7,304 (6,64); 2,96 (16); 2,092 (1,53); 1,635 (9,77); 1,308 (0,51); 0,923 (0,54); 0,384 (13,68); 0,112 (1,04); 0,041 (4,38)
I.104	7,562 (0,99); 7,557 (1,1); 7,538 (1,25); 7,533 (1,31); 7,464 (1,36); 7,455 (1,7); 7,451 (2,72); 7,435 (3,04); 7,431 (2,34); 7,422 (1,84); 7,404 (1,55); 7,39 (0,34); 7,348 (1,88); 7,324 (2,41); 7,304 (6,08); 2,95 (16); 2,087 (0,47); 2,067 (12,15); 2,009 (0,56); 1,886 (1,37); 1,642 (9,21); 1,35 (0,55); 1,309 (3,52); 1,278 (0,37); 0,946 (1,25); 0,924 (3,9); 0,901 (1,47); 0,382 (0,33); 0,344 (15,2); 0,286 (0,54); 0,273 (2,52); 0,263 (1,96); 0,256 (1,38); 0,246 (1,68); 0,238 (1,14); 0,229 (0,37); 0,217 (0,64); 0,206 (0,42); 0,179 (0,52); 0,167 (0,44); 0,157 (1,05); 0,152 (0,55); 0,144 (0,52); 0,138 (0,38); 0,126 (0,67); 0,124 (0,8); 0,114 (1,21); 0,043 (4,26)
I.105	7,715 (0,55); 7,691 (0,67); 7,687 (0,68); 7,663 (0,61); 7,526 (1,28); 7,512 (0,57); 7,503 (1,23); 7,481 (0,5); 7,304 (6,93); 7,132 (0,34); 7,125 (0,37); 7,105 (0,64); 7,097 (0,69); 7,069 (0,33); 7 (0,64); 6,992 (0,56); 6,967 (0,65); 6,96 (0,56); 2,924 (6,88); 1,904 (0,98); 1,613 (14,91); 0,401 (0,62); 0,39 (16); 0,379 (0,61); 0,112 (1,08); 0,042 (5,44)
I.106	7,552 (0,32); 7,539 (0,32); 7,533 (0,36); 7,526 (0,45); 7,514 (0,45); 7,469 (0,39); 7,452 (0,59); 7,344 (0,35); 7,319 (0,54); 7,304 (5,13); 2,955 (2,82); 1,613 (16); 0,232 (0,4); 0,221 (10,04); 0,21 (0,36); 0,042 (3,12)
I.107	7,487 (1,01); 7,482 (1,14); 7,467 (3,11); 7,462 (2,8); 7,456 (2,22); 7,443 (4); 7,424 (1,14); 7,387 (0,75); 7,385 (0,78); 7,381 (0,84); 7,362 (1,63); 7,36 (1,65); 7,356 (1,39); 7,32 (2,02); 7,304 (6,53); 7,296 (2,38); 7,272 (0,8); 2,949 (16); 2,033 (12,63); 1,627 (14,05); 0,19 (2,26); 0,179 (57,05); 0,168 (2,13); 0,043 (4,16)
I.108	7,604 (0,38); 7,58 (0,49); 7,577 (0,47); 7,553 (0,43); 7,531 (1,17); 7,513 (0,76); 7,503 (0,38); 7,481 (0,34); 7,305 (4,27); 7,074 (0,43); 7,066 (0,46); 6,97 (0,44); 6,962 (0,38); 6,936 (0,44); 6,929 (0,37); 2,926 (4,62); 1,596 (3,09); 0,265 (0,65); 0,254 (16); 0,243 (0,63); 0,043 (4,36)

Ví dụ	$^1\text{H-NMR}$ [CDCl_3 ở 300 Mhz]
I.109	8,04 (0,88); 8,029 (0,74); 8,023 (0,67); 8,015 (0,61); 8,007 (1,02); 7,746 (0,73); 7,736 (0,57); 7,73 (0,6); 7,724 (0,98); 7,713 (1,29); 7,655 (0,44); 7,651 (0,38); 7,642 (2,49); 7,632 (1,33); 7,628 (1,52); 7,622 (1,5); 7,618 (1,05); 7,609 (2,06); 7,511 (0,58); 7,488 (0,72); 7,484 (1,31); 7,461 (1,35); 7,457 (0,84); 7,434 (0,75); 7,298 (10,36); 7,043 (0,81); 7,041 (0,84); 7,013 (1,49); 6,986 (0,75); 6,984 (0,76); 6,97 (1,7); 6,942 (1,49); 2,856 (14,43); 2,34 (0,83); 1,608 (6,51); 0,465 (0,64); 0,458 (0,72); 0,449 (0,85); 0,438 (16); 0,433 (15,98); 0,421 (0,64); 0,122 (0,51); 0,048 (0,37); 0,037 (10,34); 0,026 (0,37); -0,087 (1,53)
I.110	8,068 (0,37); 8,057 (0,36); 8,036 (0,43); 7,784 (0,34); 7,762 (0,42); 7,751 (0,51); 7,673 (0,43); 7,667 (0,46); 7,648 (0,58); 7,643 (0,66); 7,632 (1,1); 7,622 (0,63); 7,619 (0,62); 7,613 (0,64); 7,609 (0,49); 7,6 (0,88); 7,521 (0,42); 7,519 (0,42); 7,516 (0,41); 7,495 (0,38); 7,489 (0,33); 7,369 (0,43); 7,366 (0,42); 7,344 (0,68); 7,341 (0,67); 7,32 (0,35); 7,249 (0,65); 7,222 (0,54); 2,916 (5,48); 1,224 (1,68); 1,186 (1,66); 0,318 (0,95); 0,308 (16); 0,296 (0,92)
I.111	8,053 (0,62); 8,041 (0,62); 8,035 (0,48); 8,029 (0,45); 8,02 (0,71); 7,766 (0,54); 7,756 (0,45); 7,752 (0,47); 7,745 (0,75); 7,734 (0,85); 7,65 (0,35); 7,647 (0,33); 7,637 (1,83); 7,626 (1,11); 7,624 (1,13); 7,617 (1,11); 7,604 (1,44); 7,467 (0,4); 7,445 (0,53); 7,44 (0,89); 7,418 (0,93); 7,413 (0,6); 7,39 (0,53); 7,3 (0,37); 7,013 (0,58); 7,011 (0,6); 6,984 (1,06); 6,956 (0,58); 6,954 (0,59); 6,944 (1,17); 6,917 (1,02); 2,872 (9,18); 1,204 (1,12); 1,166 (1,09); 0,327 (16); 0,321 (15,3)
I.112	8,038 (0,44); 8,028 (0,34); 8,022 (0,38); 8,006 (0,53); 7,742 (0,87); 7,735 (0,7); 7,726 (0,4); 7,717 (0,72); 7,71 (1,18); 7,629 (1,15); 7,62 (0,65); 7,614 (0,77); 7,61 (0,77); 7,604 (0,52); 7,596 (1,02); 7,544 (0,49); 7,541 (0,48); 7,538 (0,49); 7,536 (0,42); 7,517 (0,46); 7,511 (0,42); 7,388 (0,48); 7,385 (0,49); 7,364 (0,78); 7,361 (0,75); 7,34 (0,34); 7,301 (5,52); 7,221 (0,77); 7,194 (0,65); 2,885 (7,41); 2,12 (1,7); 1,611 (5,06); 0,426 (0,58); 0,415 (16); 0,403 (0,63); 0,175 (0,32); 0,041 (5,67)
I.113	7,99 (0,95); 7,978 (1,06); 7,971 (0,72); 7,967 (0,67); 7,958 (1,13); 7,698 (0,7); 7,686 (0,71); 7,677 (1,08); 7,665 (1,56); 7,653 (0,45); 7,629 (0,68); 7,618 (3,16); 7,606 (2,23); 7,597 (1,9); 7,585 (2,07); 7,511 (0,62); 7,489 (0,78); 7,484 (1,39); 7,462 (1,41); 7,457 (0,89); 7,434 (0,75); 7,402 (1,71); 7,4 (1,65); 7,387 (1,81); 7,385 (1,71); 7,302 (3,36); 7,14 (1,68); 7,137 (1,64); 7,128 (1,87); 7,126 (1,72); 7,051 (0,92); 7,049 (0,91); 7,021 (1,7); 6,994 (0,84); 6,992 (0,8); 6,926 (1,85); 6,914 (1,63); 6,898 (3,22); 6,887 (1,38); 2,608 (15,2); 1,299 (0,55); 0,674 (0,87); 0,662 (16); 0,654 (15,81); 0,643 (0,76); 0,044 (1,65)

Ví dụ	$^1\text{H-NMR}$ [CDCl_3 ở 300 Mhz]
I.114	7,96 (0,82); 7,95 (0,54); 7,946 (0,63); 7,939 (0,99); 7,928 (0,95); 7,663 (0,47); 7,65 (0,64); 7,645 (0,59); 7,638 (0,74); 7,63 (1,56); 7,621 (0,49); 7,614 (0,65); 7,61 (0,58); 7,601 (2,88); 7,591 (1,5); 7,588 (1,21); 7,579 (1,41); 7,568 (1,86); 7,497 (0,64); 7,475 (0,82); 7,47 (1,38); 7,448 (1,4); 7,443 (0,86); 7,42 (0,73); 7,325 (0,51); 7,318 (3,22); 7,311 (1,29); 7,302 (11,66); 7,297 (1,58); 7,289 (3,44); 7,281 (0,53); 7,046 (0,81); 7,044 (0,84); 7,017 (1,48); 6,99 (0,74); 6,987 (0,71); 6,904 (1,58); 6,877 (1,44); 6,57 (0,46); 6,563 (3,46); 6,556 (1,15); 6,54 (1,08); 6,534 (3,2); 6,526 (0,4); 3,557 (16); 2,542 (14,31); 1,608 (4,11); 1,524 (0,63); 1,478 (0,59); 1,13 (0,58); 1,085 (0,57); 0,613 (0,65); 0,601 (14,44); 0,594 (14,53); 0,582 (0,72); 0,111 (0,37); 0,052 (0,35); 0,041 (10,26); 0,03 (0,38)
I.115	7,958 (0,88); 7,948 (0,64); 7,944 (0,68); 7,937 (1,05); 7,926 (1,04); 7,68 (0,61); 7,668 (0,83); 7,661 (0,65); 7,656 (0,74); 7,647 (1,67); 7,637 (0,4); 7,619 (0,55); 7,616 (0,53); 7,607 (3,09); 7,596 (1,7); 7,584 (1,55); 7,574 (2,02); 7,508 (0,63); 7,485 (0,77); 7,48 (1,39); 7,458 (1,42); 7,453 (0,88); 7,431 (0,84); 7,416 (1,59); 7,41 (2,05); 7,401 (1,29); 7,395 (1,61); 7,385 (1,96); 7,301 (14,84); 7,097 (0,43); 7,091 (0,71); 7,081 (3,46); 7,076 (3,66); 7,067 (1,32); 7,063 (1,65); 7,061 (1,71); 7,058 (1,98); 7,052 (1,28); 7,049 (1,13); 7,041 (0,58); 7,023 (1,64); 6,996 (0,83); 6,993 (0,75); 6,918 (1,74); 6,891 (1,59); 2,469 (15,17); 1,605 (3,41); 1,473 (0,35); 1,295 (0,88); 0,618 (0,66); 0,607 (16); 0,599 (15,91); 0,588 (0,74); 0,128 (1,14); 0,123 (1,72); 0,111 (41,11); 0,098 (1,68); 0,086 (0,7); 0,051 (0,58); 0,041 (15); 0,03 (0,59)
I.116	8,951 (0,75); 8,945 (0,79); 8,937 (0,79); 8,931 (0,8); 8,891 (1,42); 8,882 (1,44); 8,444 (0,54); 8,442 (0,61); 8,439 (0,61); 8,437 (0,51); 8,416 (0,58); 8,414 (0,66); 8,411 (0,64); 8,409 (0,54); 7,699 (1); 7,697 (0,97); 7,69 (1,02); 7,609 (0,94); 7,595 (0,93); 7,581 (0,89); 7,566 (0,87); 7,419 (0,4); 7,397 (0,46); 7,392 (0,87); 7,37 (0,87); 7,365 (0,54); 7,343 (0,48); 7,302 (0,65); 6,964 (0,57); 6,961 (0,56); 6,935 (0,98); 6,907 (0,51); 6,905 (0,48); 6,824 (1,05); 6,797 (0,96); 0,372 (0,65); 0,361 (16); 0,355 (15,7); 0,344 (0,71); 0,108 (3,85); 0,028 (0,41)
I.117	8,538 (1,18); 7,825 (1,27); 7,735 (1,1); 7,717 (1,42); 7,683 (0,33); 7,665 (0,43); 7,645 (0,34); 7,637 (0,34); 7,589 (1,33); 7,57 (1,05); 7,558 (0,4); 7,367 (0,41); 7,34 (0,95); 7,317 (1,05); 7,304 (2,02); 7,289 (0,52); 6,898 (0,77); 6,87 (1,43); 6,842 (0,7); 6,606 (1,43); 6,579 (1,34); 0,556 (0,33); 0,544 (16); 0,539 (15,97); 0,528 (0,94); 0,438 (2,38); 0,432 (2,38); 0,114 (7,2); 0,101 (0,36); 0,039 (1,37)
I.118	8,542 (1,58); 8,533 (1,6); 7,766 (1,22); 7,765 (1,19); 7,758 (1,22); 7,702 (1,27); 7,683 (1,71); 7,584 (1,36); 7,566 (1); 7,564 (0,92); 7,348 (0,35); 7,325 (0,52); 7,321 (0,79); 7,304 (0,73); 7,298 (0,87); 7,294 (0,5); 7,271 (0,42); 6,881 (0,59); 6,852 (1,07); 6,825 (0,53); 6,642 (1,17); 6,615 (1,09);

Ví dụ	$^1\text{H-NMR}$ [CDCl_3 ở 300 Mhz]
	0,42 (0,71); 0,409 (16); 0,403 (15,21); 0,392 (0,65); 0,12 (2,39); 0,041 (0,33)
I.119	8,453 (1,86); 8,444 (1,83); 7,728 (2,19); 7,72 (2,08); 7,661 (1,84); 7,641 (2,03); 7,357 (0,53); 7,334 (0,8); 7,33 (1,21); 7,307 (1,79); 7,304 (2,27); 7,28 (0,65); 7,252 (2,35); 7,232 (2,17); 6,889 (0,9); 6,86 (1,6); 6,833 (0,82); 6,59 (1,74); 6,563 (1,63); 1,297 (0,45); 0,557 (0,68); 0,546 (16); 0,54 (14,81); 0,529 (0,66); 0,445 (0,98); 0,439 (0,92); 0,115 (5,95); 0,04 (1,14)
I.120	8,441 (1,47); 8,432 (1,51); 7,661 (1,7); 7,653 (1,69); 7,638 (1,51); 7,618 (1,64); 7,339 (0,4); 7,316 (0,49); 7,312 (0,91); 7,304 (0,63); 7,29 (0,91); 7,285 (0,57); 7,262 (0,48); 7,241 (1,83); 7,222 (1,66); 6,872 (0,66); 6,844 (1,19); 6,816 (0,59); 6,624 (1,28); 6,597 (1,19); 0,425 (0,69); 0,415 (16); 0,409 (15,87); 0,398 (0,77); 0,123 (3,56)
I.121	8,522 (0,99); 8,516 (1,21); 8,458 (2,14); 8,449 (1,69); 8,16 (2,1); 8,152 (2,13); 7,403 (0,56); 7,38 (0,7); 7,376 (1,24); 7,353 (1,28); 7,348 (0,79); 7,326 (0,69); 7,301 (4,11); 6,934 (0,88); 6,932 (0,84); 6,906 (1,57); 6,878 (0,8); 6,876 (0,74); 6,803 (1,53); 6,801 (1,5); 6,795 (1,56); 6,793 (1,41); 6,654 (1,64); 6,626 (1,53); 2,724 (0,79); 1,659 (0,82); 0,567 (0,71); 0,555 (16); 0,55 (15,65); 0,538 (0,67); 0,477 (0,33); 0,037 (3)
I.122	8,445 (4,75); 8,142 (1,47); 8,134 (1,48); 7,37 (0,39); 7,348 (0,47); 7,343 (0,86); 7,321 (0,88); 7,316 (0,53); 7,301 (1,45); 7,294 (0,5); 6,906 (0,6); 6,877 (1,08); 6,85 (0,54); 6,79 (1,18); 6,782 (1,15); 6,657 (1,14); 6,63 (1,06); 2,082 (0,87); 2,045 (5,79); 1,708 (0,38); 1,296 (0,49); 0,432 (0,66); 0,421 (16); 0,415 (15,64); 0,404 (0,75); 0,108 (1,77); 0,035 (1,08)
I.123	8,476 (0,53); 8,468 (0,75); 8,432 (0,52); 8,425 (0,4); 8,13 (0,57); 8,123 (0,58); 7,594 (0,34); 7,589 (0,38); 7,57 (0,4); 7,564 (0,42); 7,399 (0,33); 7,393 (0,33); 7,301 (0,7); 7,249 (0,33); 7,225 (0,53); 7,222 (0,5); 6,884 (0,52); 6,856 (0,47); 6,79 (0,48); 6,783 (0,48); 0,372 (0,61); 0,37 (0,45); 0,361 (16); 0,352 (0,54); 0,35 (0,62); 0,039 (0,43)
I.124	8,369 (0,39); 8,363 (0,37); 8,347 (0,41); 8,341 (0,38); 7,557 (0,37); 7,539 (0,37); 7,533 (0,42); 7,403 (0,34); 7,38 (0,33); 7,301 (1,01); 7,259 (0,62); 7,247 (0,4); 7,234 (0,41); 7,232 (0,41); 7,223 (0,57); 7,22 (0,46); 6,938 (0,39); 6,931 (1,36); 6,925 (0,42); 6,916 (0,35); 0,335 (0,6); 0,333 (0,45); 0,324 (16); 0,313 (0,61); 0,037 (0,76)
I.125	8,46 (3,25); 8,113 (1,19); 8,104 (1,2); 7,688 (0,53); 7,682 (0,56); 7,664 (0,61); 7,658 (0,61); 7,415 (0,51); 7,413 (0,49); 7,41 (0,51); 7,407 (0,41); 7,388 (0,45); 7,382 (0,41); 7,301 (1); 7,262 (0,51); 7,26 (0,48); 7,238 (0,84); 7,236 (0,76); 7,214 (0,36); 7,211 (0,32); 6,868 (0,79); 6,841 (0,72);

Ví dụ	$^1\text{H-NMR}$ [CDCl_3 ở 300 Mhz]
	6,765 (0,86); 6,757 (0,85); 4,186 (0,48); 4,162 (1,47); 4,139 (1,5); 4,115 (0,51); 2,076 (6,73); 2,039 (2,67); 1,313 (1,82); 1,289 (3,63); 1,265 (1,75); 0,496 (0,59); 0,484 (16); 0,473 (0,63); 0,031 (0,7)
I.126	7,431 (0,48); 7,428 (0,51); 7,426 (0,43); 7,407 (0,45); 7,401 (0,42); 7,297 (0,73); 7,282 (0,49); 7,279 (0,5); 7,258 (0,8); 7,255 (0,79); 7,233 (0,35); 7,231 (0,33); 6,885 (0,78); 6,858 (0,71); 0,485 (0,64); 0,474 (16); 0,462 (0,69); 0,031 (0,39); 8,431 (1,07); 8,423 (1,17); 8,267 (0,79); 8,263 (0,86); 8,259 (0,8); 8,255 (0,73); 7,982 (1,14); 7,97 (1,14); 7,691 (0,54); 7,685 (0,58); 7,667 (0,62); 7,661 (0,64); 7,434 (0,49)
I.127	8,952 (0,55); 8,419 (1,94); 8,411 (2,28); 8,324 (1,6); 8,32 (1,74); 8,316 (1,59); 8,312 (1,44); 8,025 (2,09); 8,014 (2,11); 7,419 (0,55); 7,396 (0,73); 7,391 (1,27); 7,369 (1,29); 7,364 (0,86); 7,341 (0,7); 7,297 (3); 6,948 (0,93); 6,92 (1,7); 6,892 (0,83); 6,664 (1,8); 6,637 (1,68); 2,64 (0,55); 1,67 (1,28); 0,539 (15,76); 0,534 (16); 0,46 (0,37); 0,453 (0,36); 0,032 (1,59)
I.128	8,409 (1,27); 8,401 (1,43); 8,25 (0,91); 8,246 (1,06); 8,242 (1); 8,238 (0,94); 8,009 (1,37); 7,997 (1,38); 7,386 (0,38); 7,364 (0,43); 7,359 (0,86); 7,337 (0,85); 7,332 (0,55); 7,31 (0,47); 7,298 (1,11); 6,923 (0,52); 6,921 (0,57); 6,893 (1,01); 6,867 (0,48); 6,865 (0,51); 6,667 (1,05); 6,64 (0,96); 0,421 (0,61); 0,41 (15,5); 0,404 (16); 0,392 (0,75); 0,107 (4,21); 0,033 (0,82); -0,02 (0,86)
I.129	8,438 (0,72); 8,43 (0,77); 8,231 (0,52); 8,228 (0,56); 8,223 (0,53); 8,22 (0,47); 7,991 (0,73); 7,979 (0,73); 7,596 (0,36); 7,59 (0,39); 7,572 (0,42); 7,566 (0,44); 7,41 (0,34); 7,408 (0,32); 7,404 (0,34); 7,297 (0,64); 7,264 (0,33); 7,261 (0,33); 7,24 (0,54); 7,237 (0,51); 6,892 (0,52); 6,864 (0,47); 0,357 (0,61); 0,346 (16); 0,335 (0,74); 0,034 (0,4)
IIa.01 (1)	8,857 (15,86); 8,85 (16); 8,155 (7,5); 8,133 (8,31); 7,733 (6,71); 7,712 (9,11); 7,708 (5,64); 7,704 (4,73); 7,69 (7,03); 7,687 (8,77); 7,683 (4,5); 7,669 (6,06); 7,666 (4,98); 7,588 (5,87); 7,585 (6,24); 7,57 (5,13); 7,568 (8,92); 7,565 (5,62); 7,55 (3,62); 7,547 (3,63); 7,517 (11,38); 7,51 (11,17); 7,372 (4,33); 7,356 (4,69); 7,351 (9,41); 7,336 (9,46); 7,331 (5,5); 7,315 (5,15); 7,286 (8,11); 6,993 (5,14); 6,99 (5,62); 6,975 (5,92); 6,972 (9,43); 6,97 (6,33); 6,954 (4,76); 6,951 (4,96); 6,803 (5,81); 6,8 (10,37); 6,797 (6,24); 6,782 (5,53); 6,779 (9,68); 6,777 (5,75); 2,069 (0,61); 1,88 (1,76); 1,338 (0,85); 1,321 (1,94); 1,303 (2,51); 1,298 (2,52); 1,281 (9,73); 1,263 (1,64); 0,918 (4,82); 0,901 (15,32); 0,883 (6,33); 0,866 (0,35); 0,021 (7,33)
IIa.02 (1)	8,862 (16); 8,855 (15,96); 8,143 (7,47); 8,123 (8,2); 8,122 (8,15); 7,966 (9,4); 7,962 (9,74); 7,946 (9,88); 7,942 (10,02); 7,703 (6); 7,7 (6,7); 7,68 (9,75); 7,678 (9,42); 7,674 (5,12); 7,66 (7,68); 7,656 (9,24); 7,652 (4,68); 7,639 (6,53); 7,635 (5,2); 7,56 (6,32); 7,558 (6,42); 7,543 (5,58); 7,54

Ví dụ	$^1\text{H-NMR}$ [CDCl_3 ở 300 Mhz]
	(9,22); 7,537 (5,45); 7,523 (3,77); 7,52 (3,64); 7,423 (11,45); 7,416 (15,4); 7,412 (6,05); 7,397 (6,79); 7,395 (7,56); 7,393 (7,46); 7,391 (6,69); 7,377 (6,2); 7,373 (6,08); 7,284 (8,06); 7,063 (9,27); 7,06 (11,07); 7,043 (8,61); 7,039 (9,69); 7,026 (6,46); 7,022 (5,53); 7,007 (8,35); 7,006 (8,35); 7,003 (7,7); 6,987 (5,5); 6,984 (4,93); 2,017 (0,87); 1,798 (13,25); 1,282 (0,69); 0,026 (6,82)
IIa.03 (1)	8,846 (15,65); 8,84 (16); 8,823 (0,92); 8,816 (0,63); 8,121 (10,46); 8,1 (11,28); 7,72 (8,59); 7,717 (9,63); 7,7 (9,24); 7,697 (10,31); 7,682 (9,51); 7,661 (13,02); 7,637 (9,4); 7,619 (5,98); 7,617 (5,8); 7,57 (0,44); 7,54 (8,43); 7,522 (10,63); 7,503 (4,73); 7,486 (0,46); 7,478 (0,44); 7,416 (0,5); 7,39 (13,54); 7,384 (13,8); 7,375 (5,56); 7,358 (9,17); 7,356 (9,52); 7,339 (6,02); 7,336 (6,09); 7,319 (0,52); 7,295 (0,39); 7,284 (0,37); 7,259 (52,44); 7,228 (0,47); 7,208 (0,51); 7,188 (0,34); 7,175 (0,57); 7,169 (0,65); 7,16 (5,08); 7,157 (6,29); 7,138 (10,57); 7,122 (4,74); 7,118 (6); 7,112 (11,34); 7,11 (10,65); 7,092 (9,06); 7,089 (8,92); 1,825 (0,34); 1,723 (1,36); 1,255 (0,47); -0,001 (54,77)
IIa.04 (4)	8,942 (15,92); 8,933 (15,8); 8,919 (1,08); 8,901 (0,6); 8,892 (0,59); 8,054 (0,53); 8,05 (0,51); 8,028 (0,58); 8,023 (0,51); 7,879 (10,62); 7,874 (10,34); 7,852 (11,84); 7,848 (10,85); 7,787 (9,6); 7,761 (12,68); 7,719 (11,58); 7,714 (13,59); 7,711 (13,03); 7,706 (10,25); 7,671 (0,76); 7,666 (0,8); 7,63 (3,85); 7,613 (5,01); 7,604 (8,96); 7,587 (8,95); 7,578 (6,87); 7,568 (6,52); 7,562 (9,25); 7,56 (9,84); 7,556 (10,24); 7,551 (9,56); 7,543 (10,94); 7,54 (11,64); 7,538 (10,8); 7,53 (5,7); 7,516 (16); 7,493 (5,06); 7,402 (12,35); 7,397 (13,09); 7,374 (9,56); 7,37 (8,85); 7,341 (7,75); 7,336 (6,38); 7,316 (10,52); 7,314 (10,85); 7,311 (9,68); 7,29 (5,79); 7,285 (4,84); 7,256 (0,89); 7,23 (0,68); 7,174 (0,36); 7,148 (0,55); 7,123 (0,4); 5,789 (1,09); 3,366 (16,77); 3,342 (0,41); 2,676 (1,45); 2,539 (9,09); 2,533 (11,41); 2,527 (8,18); 2,47 (0,52); 0,022 (4,96)
IIa.05 (4)	7,875 (1,88); 7,87 (1,8); 7,849 (2,07); 7,844 (1,89); 7,7 (1,27); 7,696 (1,04); 7,69 (0,85); 7,677 (1,6); 7,669 (1,57); 7,566 (0,96); 7,561 (0,91); 7,542 (1,65); 7,539 (1,85); 7,536 (1,78); 7,534 (1,73); 7,514 (2,3); 7,509 (2,58); 7,495 (4,67); 7,489 (5,56); 7,463 (1,86); 7,461 (1,87); 7,454 (1,53); 7,435 (0,59); 7,428 (0,41); 7,37 (2,07); 7,365 (2,36); 7,342 (1,8); 7,337 (2,1); 7,335 (1,87); 7,329 (1,13); 7,31 (1,79); 7,308 (1,83); 7,305 (1,52); 7,283 (1,04); 7,278 (0,83); 3,367 (12,9); 2,754 (16); 2,538 (0,99); 2,532 (1,14); 2,526 (0,79)
IIa.06	8,954 (9,73); 8,945 (9,78); 7,773 (6,63); 7,768 (6,86); 7,746 (7,32); 7,741 (7,46); 7,498 (0,63); 7,488 (0,5); 7,467 (7,94); 7,461 (8,77); 7,457 (13,7); 7,44 (16); 7,432 (8,43); 7,431 (8,49); 7,427 (11,88); 7,406 (5,16); 7,401 (4,91); 7,372 (7,78); 7,367 (8,52); 7,363 (8,42); 7,358 (7,29); 7,301 (16,65); 7,244 (4,25); 7,239 (5,07); 7,218 (5,82); 7,213 (7,09); 7,192

Ví dụ	$^1\text{H-NMR}$ [CDCl_3 ở 300 Mhz]
	(4,28); 7,187 (12,17); 7,182 (7,08); 7,16 (6,99); 7,155 (5,8); 1,629 (6,36); 0,122 (0,96); 0,11 (21,08); 0,098 (0,84); 0,049 (0,72); 0,038 (17,4); 0,027 (0,68)
IIa.07	7,77 (1,56); 7,765 (1,55); 7,744 (1,72); 7,738 (1,68); 7,455 (0,76); 7,45 (0,74); 7,43 (1,5); 7,425 (1,44); 7,403 (1,2); 7,398 (1,12); 7,37 (1,8); 7,364 (1,98); 7,359 (2,61); 7,342 (3,53); 7,329 (1,35); 7,299 (5,45); 7,235 (1,03); 7,23 (1,11); 7,209 (1,46); 7,204 (1,56); 7,183 (0,82); 7,178 (0,84); 7,162 (3,01); 7,158 (2,86); 7,147 (2,05); 7,142 (1,69); 7,12 (1,63); 7,115 (1,42); 5,338 (0,61); 2,892 (16); 1,62 (4,22); 0,038 (4,56)
IIa.08	8,082 (1,52); 8,052 (1,42); 7,757 (1,54); 7,752 (1,56); 7,73 (1,7); 7,725 (1,7); 7,66 (0,72); 7,656 (0,97); 7,638 (2,1); 7,633 (2,16); 7,628 (0,86); 7,616 (1,75); 7,611 (2,54); 7,501 (1,17); 7,498 (1,14); 7,479 (0,99); 7,473 (1,68); 7,451 (0,67); 7,448 (0,62); 7,413 (0,73); 7,408 (0,73); 7,387 (1,41); 7,383 (1,4); 7,362 (1,12); 7,356 (1,04); 7,3 (1,26); 7,243 (3,87); 7,19 (0,98); 7,185 (1,09); 7,164 (1,43); 7,16 (1,53); 7,139 (0,77); 7,134 (0,78); 7,095 (1,87); 7,09 (1,66); 7,068 (1,56); 7,063 (1,4); 5,33 (3,52); 2,832 (16); 0,117 (0,4); 0,04 (1,3)
IIa.09	7,571 (0,77); 7,563 (1,07); 7,559 (0,94); 7,547 (0,85); 7,54 (1,53); 7,534 (0,99); 7,36 (1,34); 7,347 (3,47); 7,33 (2,62); 7,325 (2,11); 7,319 (2,15); 7,302 (2,91); 7,298 (1,84); 7,291 (1,39); 7,283 (1,49); 7,268 (1,66); 7,262 (2,21); 7,239 (1,14); 7,23 (0,43); 6,999 (2,88); 2,975 (16); 2,085 (1,11); 1,673 (0,63); 1,298 (0,69); 0,038 (2,32)
IIa.10	7,72 (1,51); 7,7 (1,55); 7,69 (1,65); 7,671 (1,61); 7,441 (0,32); 7,423 (0,5); 7,41 (4,13); 7,393 (2,5); 7,382 (1,43); 7,362 (1,27); 7,332 (0,36); 7,301 (2,13); 7,298 (2,97); 7,293 (2,72); 6,968 (0,84); 6,959 (0,96); 6,943 (1); 6,939 (0,92); 6,933 (1,14); 6,929 (0,99); 6,913 (0,78); 6,904 (0,87); 6,83 (1,66); 6,82 (1,43); 6,8 (1,66); 6,79 (1,41); 2,861 (0,46); 2,847 (16); 0,113 (2,6); 0,032 (0,93)
IIa.11	8,987 (15,81); 8,977 (16); 7,822 (0,32); 7,799 (9,03); 7,795 (9,47); 7,774 (10,69); 7,77 (10,86); 7,716 (0,75); 7,706 (0,68); 7,69 (0,73); 7,681 (0,87); 7,66 (0,33); 7,643 (1,41); 7,636 (7,02); 7,632 (7,3); 7,609 (10,74); 7,605 (10,05); 7,52 (5,69); 7,518 (6,1); 7,512 (6); 7,51 (6,47); 7,502 (11,72); 7,493 (7,05); 7,485 (7,05); 7,477 (11,92); 7,45 (6,62); 7,355 (0,4); 7,332 (15,98); 7,323 (15,67); 7,298 (146,91); 7,221 (1,81); 7,203 (2,64); 7,193 (10,97); 7,191 (10,53); 7,186 (9,67); 7,177 (10,06); 7,175 (11,85); 7,162 (8,51); 7,153 (7,46); 7,148 (1,86); 7,137 (1,03); 7,132 (1,72); 7,123 (1,98); 7,107 (0,37); 7,09 (0,43); 7,052 (0,33); 6,947 (0,76); 5,337 (2,74); 2,046 (0,36); 1,658 (0,43); 1,592 (181,38); 1,463 (0,59); 1,34 (0,71); 1,321 (0,88); 1,291 (1,59); 1,219 (3,23); 1,14 (1,67); 0,917 (0,53); 0,231 (0,58); 0,047 (4,51); 0,036 (138,67); 0,025 (4,76); -0,163 (0,48)

Ví dụ	$^1\text{H-NMR}$ [CDCl_3 ở 300 Mhz]
IIa.12	7,521 (1,11); 7,518 (1,09); 7,514 (1,19); 7,511 (0,94); 7,496 (0,99); 7,491 (1,39); 7,485 (0,89); 7,374 (1,44); 7,361 (3,36); 7,345 (2,61); 7,339 (1,82); 7,334 (1,7); 7,301 (4,16); 7,182 (1,82); 7,176 (3,24); 7,175 (3,24); 7,159 (3,04); 7,153 (3,28); 7,144 (0,39); 7,09 (3,1); 7,086 (2,89); 7,017 (0,55); 6,998 (0,38); 6,995 (0,37); 5,339 (0,4); 2,897 (16); 2,839 (1,05); 1,652 (1,95); 1,221 (0,43); 0,037 (3,75)
IIa.13	8,076 (1,66); 8,049 (1,75); 7,655 (0,83); 7,651 (0,97); 7,628 (3,23); 7,603 (3,74); 7,498 (2,68); 7,478 (2,43); 7,473 (2,92); 7,45 (0,74); 7,302 (0,83); 7,17 (0,42); 7,153 (4,47); 7,14 (1,75); 7,131 (2); 7,126 (2,54); 7,116 (1,89); 7,108 (3,6); 7,097 (0,5); 2,84 (16); 0,039 (0,52)
IIa.14	8,093 (0,7); 8,089 (0,72); 8,065 (0,76); 8,06 (0,77); 7,588 (0,32); 7,578 (0,33); 7,571 (0,34); 7,565 (0,45); 7,558 (0,46); 7,548 (0,42); 7,541 (0,43); 7,427 (0,46); 7,404 (0,51); 7,396 (1,82); 7,369 (3,72); 7,356 (1,63); 7,351 (1,72); 7,342 (3,45); 7,328 (3,27); 7,314 (1,19); 7,302 (2,41); 7,188 (2,41); 7,184 (2,46); 6,886 (1,43); 6,882 (1,58); 6,858 (1,32); 6,854 (1,37); 6,757 (1,65); 6,753 (1,64); 6,73 (1,53); 6,726 (1,45); 4,007 (16); 2,88 (14,38); 2,831 (8,68); 1,746 (2,78); 0,034 (1,93)
IIa.15	8,948 (7,36); 8,939 (7,42); 7,526 (0,35); 7,519 (0,51); 7,495 (6,95); 7,493 (7,18); 7,488 (6,17); 7,484 (5,96); 7,469 (16); 7,461 (7,39); 7,457 (7,88); 7,453 (8,82); 7,421 (2,94); 7,401 (2,87); 7,393 (5,84); 7,373 (5,88); 7,365 (3,8); 7,345 (3,51); 7,3 (35,3); 7,139 (3,36); 7,134 (3,56); 7,111 (4,76); 7,108 (5,24); 7,084 (2,86); 7,08 (2,85); 6,946 (3,7); 6,942 (6,46); 6,937 (3,48); 6,918 (3,27); 6,914 (5,67); 6,91 (3,08); 1,6 (35,18); 0,049 (1,32); 0,038 (34,78); 0,027 (1,3)
IIa.16	7,652 (0,45); 7,414 (0,83); 7,4 (2,84); 7,395 (2,07); 7,386 (2,27); 7,376 (4,09); 7,366 (1,85); 7,358 (2,28); 7,338 (1); 7,3 (7,59); 7,274 (2,7); 7,27 (2,72); 7,127 (0,93); 7,123 (1,02); 7,1 (1,44); 7,096 (1,57); 7,073 (0,79); 7,068 (0,8); 6,889 (1,01); 6,885 (1,81); 6,881 (1,04); 6,862 (0,91); 6,857 (1,62); 6,853 (0,91); 3,107 (2,2); 2,863 (16); 2,047 (1,06); 1,607 (3,56); 0,038 (7,28)
IIa.17	8,667 (1,28); 8,193 (1,27); 8,165 (1,44); 8,082 (1,23); 8,054 (1,42); 7,796 (0,6); 7,791 (0,69); 7,773 (1,1); 7,768 (1,44); 7,745 (0,96); 7,741 (0,9); 7,702 (1,23); 7,678 (1,46); 7,651 (0,68); 7,305 (6,67); 7,215 (0,73); 7,195 (0,78); 7,188 (1,68); 7,167 (1,69); 7,16 (1,06); 7,139 (0,98); 6,961 (0,98); 6,957 (1,09); 6,934 (1,59); 6,93 (1,75); 6,907 (0,84); 6,903 (0,87); 6,439 (1,01); 6,435 (1,85); 6,43 (1,15); 6,411 (0,95); 6,407 (1,72); 2,629 (16); 1,659 (5,22); 1,531 (0,87); 1,318 (0,36); 1,298 (1,55); 1,288 (0,84); 1,279 (0,47); 1,255 (0,35); 0,126 (1,36); 0,114 (32,76); 0,102 (1,25); 0,043 (4,69)

Ví dụ	$^1\text{H-NMR}$ [CDCl_3 ở 300 Mhz]
IIa.18	8,094 (1,44); 8,064 (1,41); 7,696 (0,62); 7,691 (1,36); 7,688 (1,4); 7,682 (1,15); 7,674 (0,78); 7,669 (2,05); 7,66 (2,1); 7,655 (1,75); 7,644 (1,33); 7,64 (0,64); 7,536 (1,1); 7,532 (1,14); 7,513 (0,84); 7,508 (1,54); 7,486 (0,6); 7,482 (0,59); 7,371 (1,12); 7,364 (3,73); 7,351 (0,85); 7,344 (1,62); 7,323 (1,62); 7,316 (1,04); 7,302 (4,09); 7,295 (1,1); 7,088 (0,92); 7,083 (0,99); 7,06 (1,47); 7,056 (1,57); 7,033 (0,78); 7,029 (0,79); 6,831 (1); 6,826 (1,77); 6,822 (1,01); 6,803 (0,91); 6,799 (1,6); 6,795 (0,9); 2,798 (16); 2,745 (0,34); 0,124 (0,34); 0,112 (8,71); 0,1 (0,34); 0,04 (3,93)
IIa.19	8,253 (6,5); 8,225 (7,63); 8,188 (0,38); 8,16 (0,41); 8,092 (0,83); 7,849 (0,41); 7,844 (0,42); 7,82 (0,49); 7,773 (3,45); 7,768 (3,92); 7,75 (5,18); 7,745 (7,76); 7,739 (6,03); 7,735 (5,84); 7,731 (5,37); 7,723 (3,72); 7,718 (6,34); 7,707 (9,76); 7,682 (0,54); 7,668 (1,94); 7,655 (6,53); 7,629 (5,59); 7,605 (2,38); 7,462 (0,47); 7,441 (6,13); 7,434 (16); 7,421 (3,82); 7,414 (7,76); 7,393 (7,22); 7,386 (4,88); 7,366 (4,32); 7,344 (6,5); 7,303 (10,28); 7,254 (0,65); 7,236 (0,46); 7,164 (13,77); 7,158 (5,23); 7,154 (4,65); 7,13 (7,14); 7,127 (7,01); 7,104 (3,78); 7,099 (3,52); 7,074 (1,26); 7,055 (0,83); 7,019 (0,5); 7,006 (5,47); 7,002 (8,24); 6,998 (4,41); 6,985 (7,59); 6,979 (5,25); 6,974 (7,43); 6,97 (4,11); 6,964 (0,94); 6,956 (0,41); 6,953 (0,36); 6,936 (0,5); 6,921 (0,61); 6,913 (0,52); 6,894 (0,81); 6,889 (0,46); 6,88 (0,68); 6,874 (0,65); 2,653 (4,35); 1,671 (12,51); 1,237 (1,05); 1,226 (7,18); 1,147 (3,7); 1,134 (0,43); 0,118 (0,92); 0,053 (0,37); 0,042 (9,69)
IIa.20	7,442 (1,15); 7,436 (1,3); 7,415 (2,68); 7,409 (2,46); 7,399 (0,33); 7,393 (0,69); 7,386 (3,51); 7,374 (3,61); 7,363 (2,96); 7,347 (3,62); 7,342 (1,54); 7,32 (1,41); 7,312 (0,35); 7,302 (1,29); 7,222 (2,75); 7,217 (2,66); 7,011 (1,91); 7,006 (1,92); 6,984 (1,65); 6,979 (1,61); 2,861 (16); 2,079 (0,9); 1,774 (0,39); 1,293 (0,5); 0,032 (1,11)
IIa.21	8,089 (1,44); 8,073 (0,33); 8,06 (1,39); 7,689 (0,67); 7,684 (1,2); 7,679 (1,26); 7,674 (1,1); 7,661 (1,9); 7,652 (1,89); 7,647 (1,68); 7,637 (1,28); 7,632 (0,54); 7,53 (1,1); 7,527 (1,07); 7,508 (0,85); 7,502 (1,54); 7,48 (0,6); 7,477 (0,56); 7,412 (1,04); 7,407 (1,17); 7,385 (2,12); 7,38 (2,06); 7,372 (0,41); 7,366 (0,34); 7,354 (0,33); 7,336 (2,01); 7,329 (0,86); 7,315 (3,54); 7,309 (3,58); 7,302 (4,86); 7,282 (1,24); 6,949 (1,65); 6,944 (1,67); 6,922 (1,43); 6,917 (1,44); 4,197 (0,41); 4,173 (1,24); 4,149 (1,26); 4,126 (0,43); 2,804 (16); 2,086 (5,69); 1,69 (2,33); 1,323 (1,52); 1,299 (3,05); 1,275 (1,48); 0,039 (3,45)
IIa.22	8,119 (8,17); 8,098 (2,93); 8,075 (0,61); 7,819 (0,34); 7,767 (2,35); 7,742 (3,12); 7,738 (3,28); 7,718 (1,26); 7,713 (1,43); 7,695 (2,6); 7,69 (2,52); 7,668 (2,51); 7,662 (1,88); 7,648 (2,6); 7,644 (2,61); 7,621 (2,67); 7,597 (0,96); 7,474 (0,5); 7,464 (0,7); 7,454 (0,61); 7,304 (40,56); 7,289 (1,25); 7,282 (2,61); 7,262 (2,54); 7,254 (1,89); 7,234 (1,91); 7,193 (3,94); 7,165 (2,53); 7,135 (2,48); 7,124 (0,35); 7,111 (0,49); 7,104 (0,34); 7,097 (0,59);

Ví dụ	$^1\text{H-NMR}$ [CDCl_3 ở 300 Mhz]
	7,076 (0,6); 7,07 (0,35); 6,954 (6,51); 6,864 (1,82); 6,859 (1,68); 6,837 (3,44); 6,832 (3,07); 6,81 (1,7); 6,805 (1,49); 6,773 (2,55); 6,593 (0,66); 6,578 (0,49); 6,566 (0,65); 6,55 (0,79); 6,522 (0,41); 5,344 (16); 4,258 (0,34); 2,053 (0,44); 1,594 (42,05); 0,113 (0,52); 0,054 (1,39); 0,043 (40,32); 0,032 (1,52)
IIa.23	8,988 (15,67); 8,979 (16); 7,796 (8,56); 7,792 (9,47); 7,772 (10,17); 7,767 (10,99); 7,643 (0,68); 7,634 (7,23); 7,63 (7,97); 7,607 (11,12); 7,603 (10,85); 7,5 (11,2); 7,475 (11,84); 7,448 (6,61); 7,358 (7,94); 7,349 (8,81); 7,33 (20,09); 7,321 (21,54); 7,297 (54,56); 7,237 (5,63); 7,22 (6,1); 7,207 (10,63); 7,19 (10,42); 7,145 (6,24); 7,135 (5,78); 7,12 (6,44); 7,115 (4,45); 7,11 (6,18); 7,105 (3,83); 7,09 (3,42); 7,08 (3,17); 2,392 (0,43); 1,597 (58,65); 1,29 (0,43); 1,218 (4,08); 1,14 (2,06); 0,046 (1,82); 0,035 (53,12); 0,024 (2,09)
IIa.24	7,463 (1,34); 7,435 (3,42); 7,416 (0,62); 7,407 (5,62); 7,393 (1,47); 7,384 (2,29); 7,381 (1,77); 7,362 (1,26); 7,331 (0,33); 7,302 (2,35); 7,298 (1,44); 7,293 (1,77); 7,284 (3,19); 7,28 (2,88); 7,27 (0,94); 7,266 (1,12); 7,261 (0,77); 7,026 (1,93); 7,022 (1,9); 6,999 (1,73); 6,994 (1,65); 2,859 (16); 1,292 (0,35); 0,113 (5,64); 0,036 (1,67)
IIa.25	8,337 (0,44); 8,111 (1,54); 8,082 (1,49); 7,702 (0,66); 7,697 (1,31); 7,693 (1,39); 7,688 (1,17); 7,675 (1,96); 7,666 (2,04); 7,661 (1,73); 7,65 (1,27); 7,646 (0,6); 7,54 (1,13); 7,537 (1,11); 7,518 (0,88); 7,512 (1,6); 7,49 (0,64); 7,487 (0,6); 7,415 (1,2); 7,387 (3,08); 7,377 (3,86); 7,36 (1,92); 7,302 (1,18); 7,259 (0,98); 7,254 (1,41); 7,25 (1,03); 7,231 (0,71); 7,226 (0,97); 7,222 (0,68); 6,964 (1,75); 6,96 (1,71); 6,936 (1,56); 6,932 (1,49); 2,8 (16); 0,119 (3,21); 0,039 (0,77)
IIb.01	8,874 (13,84); 7,751 (6,89); 7,746 (7,31); 7,724 (7,71); 7,719 (8,05); 7,617 (1,65); 7,596 (0,66); 7,585 (6,07); 7,564 (8); 7,56 (10,36); 7,554 (7,12); 7,538 (16); 7,527 (2,3); 7,509 (1,4); 7,503 (3,24); 7,498 (3,25); 7,478 (5,1); 7,476 (6,24); 7,474 (5,75); 7,471 (5,72); 7,452 (5,98); 7,447 (5,72); 7,37 (8,36); 7,364 (9,85); 7,342 (5,9); 7,337 (5,85); 7,3 (16,95); 7,288 (5,37); 7,283 (4,83); 7,264 (5,87); 7,262 (6,43); 7,258 (5,88); 7,257 (5,58); 7,237 (3,78); 7,232 (3,46); 3,32 (0,33); 2,084 (0,59); 1,614 (9,15); 1,322 (0,35); 1,293 (1,18); 0,11 (1,35); 0,049 (0,44); 0,038 (13,12); 0,027 (0,52)
IIb.02	7,737 (1,44); 7,732 (1,5); 7,71 (1,61); 7,705 (1,65); 7,503 (0,69); 7,498 (0,68); 7,48 (2,39); 7,476 (2,94); 7,471 (2,8); 7,467 (1,86); 7,453 (4,64); 7,447 (1,68); 7,437 (1,24); 7,392 (1,86); 7,386 (2,11); 7,365 (1,19); 7,36 (1,1); 7,298 (2,23); 7,275 (1,07); 7,269 (0,98); 7,25 (1,21); 7,248 (1,3); 7,245 (1,21); 7,243 (1,12); 7,224 (0,79); 7,218 (0,72); 2,96 (16); 1,63 (2,84); 0,111 (1,48); 0,037 (2,01)

Ví dụ	$^1\text{H-NMR}$ [CDCl_3 ở 300 Mhz]
IIb.03	7,559 (1,18); 7,556 (1,17); 7,533 (1,35); 7,53 (1,34); 7,478 (1,49); 7,47 (1,78); 7,466 (2,54); 7,449 (3,2); 7,435 (1,21); 7,332 (1,14); 7,33 (1,09); 7,304 (8,43); 7,185 (1,62); 7,159 (2,41); 7,133 (1,04); 2,981 (16); 2,262 (12,4); 1,609 (11,61); 0,113 (0,76); 0,042 (6,55)
IIb.04	7,535 (0,79); 7,53 (0,94); 7,522 (1,19); 7,515 (0,82); 7,506 (0,99); 7,502 (1,23); 7,498 (2,17); 7,489 (1,74); 7,484 (2,93); 7,469 (2,77); 7,464 (1,6); 7,455 (1,27); 7,302 (5,27); 7,294 (0,45); 7,274 (1,85); 7,271 (1,87); 7,266 (1,43); 7,248 (4,38); 7,236 (1,38); 7,228 (1,34); 2,984 (16); 1,603 (5,63); 0,112 (0,61); 0,04 (4,75)
IIb.06	7,594 (1,55); 7,566 (1,7); 7,509 (0,33); 7,496 (2,58); 7,478 (1,63); 7,469 (0,84); 7,447 (0,76); 7,304 (8,62); 7,183 (1,24); 7,178 (1,35); 7,078 (0,75); 7,073 (0,71); 7,051 (0,67); 7,046 (0,61); 5,455 (0,63); 5,343 (0,85); 2,95 (10,32); 2,436 (7,9); 2,325 (1,3); 1,604 (16); 0,112 (0,82); 0,042 (7,6)
IIb.07	7,705 (1,4); 7,685 (1,39); 7,675 (1,5); 7,656 (1,47); 7,521 (1,65); 7,516 (1,81); 7,511 (2,01); 7,508 (1,6); 7,494 (3,58); 7,478 (1,15); 7,304 (18); 7,215 (1,38); 7,205 (1,51); 7,186 (1,37); 7,176 (1,49); 7,053 (0,87); 7,044 (0,77); 7,027 (1,1); 7,024 (0,94); 7,018 (0,99); 7,014 (0,79); 6,998 (0,78); 6,988 (0,68); 2,959 (16); 1,598 (27,82); 0,112 (1,74); 0,053 (0,65); 0,042 (16,84); 0,031 (0,57)
IIb.08	7,664 (1,56); 7,636 (1,79); 7,522 (1,32); 7,516 (0,92); 7,51 (0,81); 7,498 (2,26); 7,479 (0,66); 7,434 (0,77); 7,424 (1,6); 7,416 (1,74); 7,406 (0,85); 7,304 (10,23); 7,269 (0,98); 7,261 (0,92); 7,241 (0,86); 7,233 (0,81); 7,086 (0,74); 7,078 (0,79); 6,876 (0,42); 6,869 (0,38); 6,848 (0,38); 6,84 (0,37); 5,613 (1,14); 5,344 (1,87); 2,952 (9,26); 1,6 (16); 0,112 (1); 0,053 (0,33); 0,042 (9,27); 0,032 (0,32)
IIb.09	7,539 (2,4); 7,496 (0,46); 7,487 (2,89); 7,473 (1,3); 7,464 (2,78); 7,441 (1,17); 7,305 (11,01); 7,29 (0,34); 7,261 (2,59); 7,255 (6,17); 7,228 (0,33); 5,345 (0,91); 2,955 (16); 2,453 (13,05); 1,598 (11,44); 0,055 (0,37); 0,044 (10,89); 0,034 (0,41)
IIb.10	7,503 (0,91); 7,488 (3,47); 7,478 (1,45); 7,472 (1,55); 7,469 (1,56); 7,464 (2,12); 7,453 (1,24); 7,373 (0,91); 7,356 (0,92); 7,343 (1,36); 7,326 (1,38); 7,303 (25,85); 7,231 (0,8); 7,221 (0,7); 7,205 (0,9); 7,201 (0,65); 7,195 (0,82); 7,191 (0,54); 7,175 (0,54); 7,166 (0,48); 5,343 (16); 2,956 (12,46); 2,052 (2,33); 1,591 (33,58); 0,112 (1,97); 0,053 (0,87); 0,042 (23,64); 0,031 (0,85)
IIb.11	7,737 (2,82); 7,729 (2,95); 7,51 (1,25); 7,494 (3,49); 7,476 (3,17); 7,472 (2,38); 7,468 (2,79); 7,447 (2,14); 7,439 (2,05); 7,338 (3,64); 7,304 (27,4);

Ví dụ	$^1\text{H-NMR}$ [CDCl_3 ở 300 Mhz]
	5,344 (2,06); 2,954 (16); 2,053 (0,77); 1,595 (43,11); 1,579 (0,36); 0,112 (0,38); 0,054 (0,93); 0,043 (24,76); 0,032 (0,93)
IIb.12	7,65 (0,33); 7,492 (0,53); 7,483 (2,91); 7,469 (1,25); 7,46 (2,9); 7,438 (1,21); 7,393 (1,04); 7,367 (2,55); 7,341 (1,99); 7,304 (55,38); 7,267 (1,56); 7,243 (0,93); 7,212 (1,5); 7,185 (1,09); 6,953 (0,33); 5,63 (0,36); 5,344 (8,62); 2,968 (16); 2,531 (12,83); 2,443 (0,83); 2,053 (2,85); 1,596 (95,82); 0,112 (7,27); 0,054 (1,45); 0,043 (46,71); 0,032 (1,84)
IIb.13	7,48 (1,48); 7,474 (0,96); 7,466 (1); 7,462 (1,09); 7,455 (2,34); 7,435 (2,28); 7,407 (1,08); 7,304 (7,09); 7,024 (1,17); 7,02 (1,08); 6,997 (1,05); 6,992 (0,92); 6,943 (1,07); 6,939 (0,86); 6,915 (0,96); 6,911 (0,76); 4,009 (9,84); 3,934 (0,59); 2,964 (9,22); 1,607 (16); 0,042 (5,72)
IIb.14	8,829 (16); 8,159 (0,38); 8,148 (3,46); 8,142 (2,54); 8,136 (2,13); 8,124 (3,95); 8,116 (3,9); 8,102 (0,46); 7,787 (2,1); 7,779 (2,93); 7,765 (2,76); 7,759 (3,87); 7,754 (5,88); 7,743 (1,03); 7,735 (1,61); 7,728 (2,44); 7,712 (5,67); 7,705 (5,04); 7,7 (5,68); 7,689 (7,85); 7,678 (3,87); 7,674 (4,31); 7,667 (3,81); 7,651 (1,48); 7,645 (1,02); 7,474 (2,07); 7,453 (2,24); 7,446 (4,98); 7,426 (5,02); 7,418 (3,22); 7,398 (3,06); 7,3 (4,83); 7,213 (3,09); 7,209 (5,7); 7,204 (3,88); 7,186 (3,05); 7,181 (8,03); 7,177 (5,24); 7,154 (5,44); 7,15 (4,61); 7,127 (2,57); 7,122 (2,28); 1,672 (4,31); 1,304 (0,45); 1,298 (0,45); 0,921 (0,47); 0,116 (7,82); 0,04 (4,97)
IIb.15	8,886 (16); 7,631 (1,52); 7,608 (1,09); 7,599 (4,82); 7,576 (4,89); 7,567 (5,13); 7,563 (6,25); 7,559 (5,13); 7,546 (7,3); 7,544 (9,06); 7,532 (1,39); 7,528 (1,88); 7,511 (1,45); 7,485 (2,55); 7,465 (2,85); 7,458 (5,09); 7,438 (6,1); 7,43 (3,91); 7,41 (3,66); 7,298 (11,19); 7,2 (2,79); 7,196 (5,65); 7,192 (4,16); 7,187 (8,55); 7,182 (3,24); 7,173 (7); 7,168 (6,89); 7,16 (7,14); 7,156 (2,98); 7,145 (3,55); 7,141 (2,62); 1,607 (14,27); 0,12 (0,77); 0,108 (16,99); 0,096 (0,66); 0,046 (0,41); 0,036 (9,57); 0,025 (0,37)
IIb.16	7,496 (1,26); 7,488 (1,07); 7,481 (3,53); 7,467 (2,17); 7,463 (2,39); 7,46 (2,77); 7,453 (1,69); 7,44 (1,68); 7,433 (1,14); 7,413 (1); 7,298 (2,83); 7,217 (0,97); 7,212 (1,81); 7,208 (1,33); 7,19 (1,94); 7,185 (2,26); 7,181 (1,08); 7,163 (1,68); 7,158 (1,44); 7,136 (0,83); 7,131 (0,75); 2,961 (16); 1,618 (2,91); 1,296 (0,37); 0,11 (1,13); 0,036 (2,58)
IIb.17	8,048 (0,97); 8,04 (0,73); 8,035 (0,77); 8,023 (0,72); 8,016 (1,14); 7,723 (0,75); 7,716 (0,6); 7,706 (0,93); 7,7 (0,86); 7,691 (1,5); 7,653 (0,5); 7,638 (1,85); 7,633 (1,91); 7,63 (1,51); 7,62 (2,5); 7,609 (1,13); 7,605 (1,42); 7,602 (1,19); 7,477 (0,59); 7,457 (0,65); 7,45 (1,43); 7,429 (1,44); 7,422 (0,94); 7,402 (0,89); 7,298 (2); 7,242 (0,94); 7,238 (1,73); 7,234 (1,06); 7,215 (0,77); 7,21 (1,35); 7,206 (0,79); 7,172 (0,91); 7,168 (0,81); 7,145

Ví dụ	$^1\text{H-NMR}$ [CDCl_3 ở 300 Mhz]
	(1,49); 7,141 (1,38); 7,118 (0,73); 7,113 (0,68); 2,914 (16); 1,656 (1,69); 0,113 (2,02); 0,039 (2,09)
IIb.18	7,51 (0,97); 7,503 (1,51); 7,501 (1,44); 7,485 (4,18); 7,478 (2,4); 7,47 (2,62); 7,465 (1,68); 7,458 (1,5); 7,448 (1,82); 7,421 (2,87); 7,394 (1,25); 7,302 (6,27); 7,301 (6,11); 7,294 (1,92); 7,273 (1,26); 7,267 (1,21); 2,962 (16); 1,599 (5,86); 0,112 (0,83); 0,041 (5,46)
IIb.19	10,183 (0,63); 8,922 (16); 8,022 (9,45); 8 (9,45); 7,706 (1,61); 7,681 (1,56); 7,674 (4,52); 7,65 (4,77); 7,642 (3,59); 7,62 (7,75); 7,615 (4,4); 7,603 (5,34); 7,598 (4,17); 7,589 (1,67); 7,583 (1,89); 7,571 (1,32); 7,567 (1,58); 7,41 (9,77); 7,38 (9,69); 7,304 (28,2); 5,343 (3,36); 1,598 (29,49); 1,306 (0,62); 0,923 (0,6); 0,111 (1,51); 0,052 (1,03); 0,041 (27,89); 0,03 (1,06)
IIb.20	7,881 (0,53); 7,853 (0,62); 7,727 (0,55); 7,721 (0,58); 7,557 (0,39); 7,55 (0,39); 7,529 (0,34); 7,523 (0,41); 7,51 (0,48); 7,492 (0,81); 7,304 (6,36); 2,968 (3,21); 1,603 (16); 0,111 (1,34); 0,041 (4,53)
IIb.21	10,185 (0,63); 9,013 (0,44); 8,995 (16); 7,982 (5,15); 7,963 (5,33); 7,952 (5,67); 7,933 (5,49); 7,68 (1,64); 7,654 (1,68); 7,648 (4,74); 7,623 (4,57); 7,616 (3,53); 7,592 (3,85); 7,583 (4,14); 7,577 (3,89); 7,566 (4,48); 7,561 (3,92); 7,551 (1,82); 7,545 (2,07); 7,534 (1,4); 7,529 (1,77); 7,304 (67,59); 7,244 (5,64); 7,218 (6,51); 7,214 (5,72); 7,188 (5,15); 6,953 (0,42); 5,344 (1,09); 1,595 (103,18); 1,303 (0,76); 0,924 (0,79); 0,112 (5,84); 0,053 (2,57); 0,042 (64,52); 0,032 (2,37)
IIb.22	7,718 (0,66); 7,708 (0,78); 7,696 (0,91); 7,686 (1,25); 7,639 (0,43); 7,621 (2,7); 7,618 (2,37); 7,612 (1,41); 7,596 (1,23); 7,525 (0,67); 7,502 (0,67); 7,493 (0,64); 7,487 (0,85); 7,483 (0,69); 7,472 (0,93); 7,468 (1,26); 7,304 (7,77); 2,974 (9,1); 1,604 (16); 0,041 (6,69)
IIb.23	7,548 (1,15); 7,522 (1,63); 7,519 (1,72); 7,508 (1,21); 7,493 (3,23); 7,49 (4,29); 7,478 (1,39); 7,471 (1,74); 7,466 (2,34); 7,372 (4,02); 7,347 (2,38); 7,344 (2,47); 7,304 (12,58); 2,972 (16); 1,592 (9,63); 0,053 (0,42); 0,043 (13,16); 0,032 (0,46)
IVa.01	8,679 (15,79); 8,67 (15,95); 8,039 (5,85); 8,034 (6,54); 8,009 (7,34); 7,622 (5,59); 7,617 (4,95); 7,614 (4,31); 7,597 (8,96); 7,59 (8,62); 7,567 (0,4); 7,532 (2,6); 7,526 (3,52); 7,509 (8,03); 7,503 (6,38); 7,499 (3,36); 7,484 (16); 7,477 (14,19); 7,457 (5,96); 7,453 (6,46); 7,434 (2,54); 7,43 (2,02); 7,3 (16,48); 7,232 (6,86); 7,228 (7,61); 7,206 (7,83); 7,202 (8,81); 7,181 (3,9); 7,176 (3,6); 7,156 (18,92); 7,149 (16,01); 7,13 (5,71); 7,125 (4,98); 6,928 (8,64); 6,924 (10,31); 6,901 (7,53); 6,897 (8,08); 6,883 (6,19); 6,878 (5,12); 6,858 (9,07); 6,853 (7,98); 6,832 (4,27); 6,828 (3,84); 6,754

Ví dụ	$^1\text{H-NMR}$ [CDCl_3 ở 300 Mhz]
	(11,03); 5,565 (6,67); 3,852 (5,68); 3,447 (0,44); 2,039 (1,99); 1,768 (0,55); 1,297 (0,64); 0,054 (0,54); 0,043 (17,12); 0,032 (0,6)
IVa.02	8,072 (1,37); 8,044 (1,31); 7,658 (2,56); 7,632 (3,96); 7,607 (1,13); 7,602 (0,7); 7,507 (1,06); 7,503 (1,1); 7,48 (1,35); 7,457 (0,59); 7,453 (0,58); 7,36 (3,64); 7,298 (2,07); 6,991 (0,62); 6,984 (0,67); 6,967 (0,73); 6,959 (1,09); 6,943 (0,74); 6,94 (0,64); 6,925 (0,77); 6,76 (0,41); 6,732 (1,34); 6,716 (1,85); 6,711 (2,89); 6,703 (1,68); 6,697 (2,8); 6,683 (0,44); 3,896 (1,71); 2,816 (16); 0,113 (0,48); 0,038 (2,07)
IVa.03	8,97 (8,18); 8,961 (8,3); 7,473 (0,41); 7,464 (0,46); 7,442 (6,8); 7,438 (7,14); 7,434 (7,21); 7,431 (7,12); 7,415 (16); 7,407 (8,46); 7,402 (9,63); 7,37 (0,89); 7,3 (9,85); 7,169 (2,39); 7,164 (2,59); 7,143 (4,88); 7,139 (5,12); 7,118 (3,62); 7,114 (3,85); 7,019 (4,57); 7,015 (4,68); 6,992 (6,52); 6,988 (6,06); 6,957 (6,19); 6,952 (7,06); 6,93 (5,03); 6,925 (5,23); 6,861 (4,19); 6,856 (3,9); 6,836 (4,8); 6,834 (4,85); 6,831 (4,87); 6,81 (2,66); 6,804 (2,48); 3,87 (7,01); 1,659 (6,91); 0,11 (3,07); 0,048 (0,41); 0,037 (10,16); 0,026 (0,36)
IVa.04	8,962 (8,04); 8,953 (8,1); 7,492 (0,66); 7,467 (10,51); 7,461 (12,07); 7,456 (12,24); 7,452 (8,77); 7,447 (8,07); 7,442 (16); 7,425 (4,87); 7,395 (0,98); 7,3 (12,27); 7,028 (2,22); 7,02 (2,26); 7,003 (2,96); 6,995 (4,25); 6,988 (2,55); 6,967 (3,07); 6,962 (3); 6,817 (1,73); 6,812 (2,11); 6,789 (8,4); 6,781 (10,35); 6,764 (5,17); 6,756 (4,48); 6,737 (4,94); 6,729 (1,44); 6,71 (1,73); 3,91 (6,16); 1,641 (7,48); 0,109 (4,86); 0,047 (0,48); 0,036 (13,07); 0,025 (0,48)
IVa.05	7,356 (0,5); 7,35 (2,95); 7,346 (1,8); 7,337 (1,44); 7,325 (3,63); 7,307 (1,29); 7,3 (1,71); 7,254 (2,72); 7,249 (2,72); 7,164 (0,63); 7,159 (0,68); 7,137 (1,29); 7,134 (1,3); 7,113 (0,95); 7,108 (1,04); 6,962 (2,84); 6,957 (2,09); 6,94 (2,04); 6,935 (3,06); 6,931 (1,72); 6,86 (1,16); 6,855 (1,08); 6,835 (1,25); 6,83 (1,29); 6,809 (0,64); 6,804 (0,61); 3,84 (2,27); 2,89 (16); 1,736 (0,59); 0,037 (1,48)
IVa.06	7,386 (3,57); 7,372 (1,48); 7,362 (2,83); 7,341 (1,26); 7,311 (3,62); 7,3 (25,35); 7,023 (0,63); 7,016 (0,66); 6,998 (0,76); 6,99 (1,13); 6,975 (0,75); 6,971 (0,64); 6,957 (0,76); 6,789 (0,44); 6,761 (1,37); 6,744 (1,95); 6,738 (3,22); 6,726 (3,03); 6,711 (0,47); 3,872 (2,36); 2,88 (16); 1,592 (32,97); 0,049 (0,58); 0,038 (15,66); 0,028 (0,62)
IVa.07	8,064 (1,47); 8,034 (1,39); 7,627 (2,63); 7,622 (1,11); 7,604 (2,41); 7,6 (2,74); 7,596 (1,73); 7,58 (1,25); 7,575 (0,69); 7,481 (1,14); 7,477 (1,13); 7,459 (0,88); 7,453 (1,56); 7,431 (0,63); 7,427 (0,59); 7,304 (3,83); 7,137 (0,66); 7,132 (0,69); 7,11 (1,33); 7,107 (1,34); 7,086 (0,99); 7,081 (1,07); 6,948 (3,01); 6,944 (3,08); 6,922 (3,16); 6,917 (3,28); 6,84 (1,21); 6,835

Ví dụ	$^1\text{H-NMR}$ [CDCl_3 ở 300 Mhz]
	(1,09); 6,815 (1,3); 6,813 (1,27); 6,81 (1,27); 6,789 (0,63); 6,784 (0,61); 3,862 (1,75); 2,839 (16); 0,12 (1,7); 0,042 (0,91)
IXa.04	7,421 (0,49); 7,415 (0,54); 7,397 (0,55); 7,391 (0,59); 7,308 (0,33); 7,3 (0,81); 7,283 (0,55); 7,277 (0,52); 7,256 (0,42); 7,251 (0,37); 6,998 (0,47); 6,995 (0,45); 6,974 (0,8); 6,971 (0,76); 6,949 (0,36); 6,947 (0,34); 6,729 (0,79); 6,703 (0,72); 4,826 (2,25); 1,665 (1,22); 1,038 (0,35); 1,031 (0,68); 1,027 (0,47); 1,012 (0,57); 1,004 (2,42); 0,981 (1,47); 0,899 (0,56); 0,894 (0,51); 0,874 (1,28); 0,869 (0,45); 0,864 (0,36); 0,848 (0,72); 0,846 (0,76); 0,346 (0,61); 0,335 (16); 0,324 (0,61); 0,182 (0,53); 0,049 (0,65)
Va.01	8,897 (14,04); 8,889 (14,22); 7,771 (10,43); 7,766 (11,48); 7,762 (11,51); 7,758 (9,94); 7,591 (2,65); 7,574 (3,27); 7,569 (2,94); 7,557 (10,36); 7,546 (11,49); 7,538 (8,76); 7,534 (6,74); 7,525 (16); 7,516 (8,73); 7,505 (10,41); 7,496 (11,11); 7,485 (2,76); 7,477 (5,7); 7,463 (2,75); 7,298 (6,03); 7,183 (6,14); 7,18 (6,22); 7,154 (10,96); 7,151 (10,92); 7,125 (5,3); 7,122 (5,16); 6,894 (10,22); 6,869 (6,43); 6,865 (9,36); 2,07 (0,61); 1,71 (6,24); 1,285 (0,37); 0,104 (6,74); 0,024 (5,73)
Va.02	7,655 (2,75); 7,651 (2,68); 7,523 (1,18); 7,504 (1,28); 7,495 (2,24); 7,488 (1,58); 7,475 (3,99); 7,469 (1,63); 7,467 (1,48); 7,454 (1,14); 7,446 (1,6); 7,444 (1,61); 7,423 (1,21); 7,414 (0,38); 7,392 (0,43); 7,3 (5,44); 7,163 (1,05); 7,16 (1,06); 7,134 (1,82); 7,131 (1,8); 7,105 (0,89); 7,102 (0,87); 6,77 (1,11); 6,766 (1,68); 6,762 (1,07); 6,742 (1,04); 6,738 (1,54); 6,734 (0,97); 5,338 (1,03); 2,772 (16); 1,618 (6,84); 0,036 (3,77)
Va.03	8,931 (10,31); 8,922 (10,43); 8,121 (6,58); 8,116 (6,86); 8,094 (7,2); 8,088 (7,35); 7,713 (3,71); 7,708 (3,77); 7,688 (5,47); 7,686 (5,8); 7,683 (5,96); 7,68 (5,22); 7,661 (5,08); 7,655 (4,86); 7,586 (8,19); 7,581 (8,41); 7,577 (8,88); 7,572 (7,58); 7,532 (1,02); 7,513 (2,27); 7,504 (16); 7,491 (6,93); 7,481 (12,42); 7,46 (6,44); 7,453 (5,34); 7,449 (5,59); 7,428 (6,51); 7,426 (7,27); 7,424 (7,06); 7,422 (6,21); 7,401 (3,95); 7,397 (3,97); 7,298 (10,79); 7,228 (8,18); 7,224 (8,01); 7,2 (7,26); 7,196 (7,05); 2,077 (0,32); 1,653 (9,38); 0,106 (2,37); 0,042 (0,44); 0,031 (10,9); 0,02 (0,37)
Va.04	8,144 (1,47); 8,138 (1,51); 8,116 (1,61); 8,111 (1,61); 7,709 (0,79); 7,704 (0,79); 7,684 (1,27); 7,682 (1,35); 7,679 (1,37); 7,657 (1,09); 7,651 (1,04); 7,446 (1,12); 7,442 (1,17); 7,413 (3,37); 7,407 (2,11); 7,402 (1,86); 7,387 (5,99); 7,381 (3,41); 7,372 (1,59); 7,341 (0,34); 7,3 (12,83); 7,163 (1,8); 7,16 (1,76); 7,136 (1,65); 7,132 (1,57); 2,849 (16); 1,602 (8,26); 0,048 (0,39); 0,038 (8,79); 0,027 (0,42)
Va.05	8,85 (11,05); 8,84 (11,18); 8,193 (5,64); 8,164 (6,43); 7,818 (5,29); 7,797 (12,25); 7,791 (16); 7,78 (4,45); 7,761 (5,91); 7,757 (6,85); 7,752 (3,54); 7,733 (4,88); 7,728 (3,96); 7,655 (4,91); 7,651 (5,06); 7,628 (6,89); 7,624

Ví dụ	$^1\text{H-NMR}$ [CDCl_3 ở 300 Mhz]
	(4,38); 7,605 (2,68); 7,601 (2,62); 7,503 (3,3); 7,483 (3,54); 7,475 (7,39); 7,455 (7,4); 7,446 (4,35); 7,426 (4,12); 7,3 (8,33); 7,136 (4,36); 7,133 (4,54); 7,107 (7,39); 7,104 (7,51); 7,078 (3,81); 7,075 (3,76); 6,858 (4,67); 6,854 (7,03); 6,85 (4,67); 6,83 (4,32); 6,826 (6,44); 6,822 (4,23); 1,731 (6,41); 0,111 (3,2); 0,036 (8,64); 0,025 (0,38)
Va.06	8,104 (1,27); 8,076 (1,57); 8,074 (1,48); 7,757 (1,31); 7,747 (1,08); 7,742 (0,87); 7,731 (2); 7,724 (1,84); 7,719 (1,38); 7,714 (0,84); 7,696 (4,74); 7,578 (1,09); 7,575 (1,06); 7,552 (1,55); 7,528 (0,66); 7,524 (0,61); 7,469 (0,78); 7,449 (0,84); 7,44 (1,72); 7,42 (1,75); 7,412 (1); 7,392 (0,96); 7,3 (1,19); 7,105 (1,04); 7,102 (1,03); 7,076 (1,75); 7,073 (1,69); 7,047 (0,91); 7,044 (0,86); 6,725 (1,11); 6,721 (1,63); 6,717 (1,03); 6,696 (1,04); 6,692 (1,51); 6,688 (0,94); 2,704 (16); 1,862 (1,26); 0,032 (1,11)
Va.07	8,875 (13,29); 8,865 (13,52); 8,182 (6,53); 8,153 (7,51); 8,102 (7,08); 8,097 (7,46); 8,075 (7,7); 8,07 (7,97); 7,769 (6); 7,748 (8,44); 7,743 (12,23); 7,725 (7,35); 7,72 (7,33); 7,715 (3,93); 7,697 (5,84); 7,692 (4,41); 7,665 (4,02); 7,659 (4,19); 7,64 (16); 7,631 (15,87); 7,623 (7,01); 7,619 (6,75); 7,612 (6,04); 7,606 (5,77); 7,596 (8,05); 7,592 (5,09); 7,572 (3,09); 7,569 (3,01); 7,398 (5,17); 7,394 (5,57); 7,37 (7,76); 7,367 (6,69); 7,346 (4,17); 7,342 (4,22); 7,3 (13,25); 7,186 (8,74); 7,182 (8,7); 7,158 (7,75); 7,154 (7,66); 5,335 (0,56); 2,041 (0,37); 1,709 (10,32); 0,11 (3,34); 0,047 (0,49); 0,036 (13,62); 0,026 (0,47)
Va.08	8,114 (1,46); 8,109 (1,64); 8,102 (1,56); 8,087 (1,74); 8,082 (1,79); 8,074 (1,3); 8,072 (1,41); 7,711 (0,71); 7,706 (1,03); 7,695 (1,19); 7,689 (1,76); 7,683 (2,06); 7,678 (0,81); 7,668 (1,68); 7,663 (2,17); 7,659 (1,84); 7,654 (1,26); 7,649 (0,93); 7,629 (1,2); 7,627 (1,27); 7,624 (1,29); 7,621 (1,09); 7,602 (1,09); 7,596 (1,04); 7,543 (1,08); 7,54 (1,09); 7,521 (0,87); 7,515 (1,59); 7,493 (0,64); 7,49 (0,63); 7,472 (3,58); 7,384 (1,06); 7,38 (1,11); 7,359 (1,24); 7,357 (1,53); 7,356 (1,47); 7,353 (1,27); 7,332 (0,89); 7,328 (0,85); 7,3 (3,64); 7,107 (1,71); 7,103 (1,67); 7,079 (1,55); 7,075 (1,49); 2,782 (16); 1,7 (4,88); 0,037 (2,79)
XIa.01	8,479 (1); 8,477 (1,03); 8,473 (1,06); 7,752 (0,74); 7,745 (0,76); 7,725 (0,84); 7,718 (0,86); 7,538 (0,71); 7,515 (0,94); 7,499 (1,6); 7,494 (1,44); 7,477 (0,79); 7,382 (0,51); 7,374 (0,42); 7,359 (1,58); 7,333 (1,09); 7,304 (2,17); 4,507 (0,53); 4,436 (5,02); 1,629 (1,81); 0,746 (0,8); 0,735 (16); 0,723 (2,08); 0,042 (1,92)
XIa.02	7,551 (0,73); 7,544 (1); 7,536 (0,67); 7,528 (0,96); 7,519 (1,28); 7,512 (1,18); 7,508 (1,09); 7,482 (1,62); 7,422 (0,73); 7,417 (0,66); 7,409 (1,83); 7,405 (1,81); 7,398 (1,32); 7,391 (1,14); 7,386 (0,99); 7,373 (0,48); 7,368 (0,55); 7,298 (4,52); 7,275 (0,72); 7,271 (0,63); 4,433 (4,84); 1,583 (5,72); 0,704 (0,59); 0,694 (16); 0,683 (0,68); 0,039 (4,03)

Ví dụ	$^1\text{H-NMR}$ [CDCl_3 ở 300 Mhz]
XIa.03	7,528 (0,62); 7,527 (0,62); 7,506 (1,47); 7,501 (1,72); 7,492 (0,74); 7,491 (0,73); 7,484 (1,11); 7,476 (1,34); 7,466 (0,47); 7,461 (0,49); 7,44 (0,99); 7,436 (0,99); 7,423 (0,54); 7,419 (0,53); 7,399 (0,8); 7,395 (0,73); 7,378 (0,53); 7,375 (0,57); 7,362 (2,18); 7,353 (0,95); 7,343 (0,99); 7,339 (1,1); 7,322 (0,33); 7,31 (0,66); 7,305 (0,53); 7,286 (0,72); 7,281 (0,69); 7,243 (0,47); 6,809 (0,38); 6,808 (0,34); 4,41 (5,08); 1,523 (0,59); 1,265 (0,6); 0,881 (0,58); 0,654 (16); 0,643 (0,91); 0 (0,6)
XIa.04	7,7 (0,79); 7,698 (0,85); 7,685 (0,86); 7,683 (0,91); 7,58 (0,54); 7,558 (0,64); 7,555 (0,67); 7,522 (0,36); 7,5 (0,84); 7,496 (0,87); 7,482 (0,47); 7,478 (0,47); 7,458 (0,64); 7,454 (0,61); 7,362 (0,46); 7,357 (0,46); 7,344 (0,79); 7,342 (0,9); 7,333 (1,56); 7,305 (1,51); 7,261 (0,81); 7,25 (0,7); 7,246 (0,82); 7,235 (0,6); 4,544 (4,77); 1,597 (2,99); 0,777 (0,56); 0,766 (16); 0,755 (0,66); 0,05 (1,23)
XIa.05	7,583 (0,48); 7,58 (0,5); 7,559 (0,6); 7,555 (0,64); 7,516 (0,41); 7,504 (1,77); 7,497 (1,18); 7,491 (0,95); 7,482 (0,72); 7,476 (2,36); 7,452 (0,67); 7,447 (0,61); 7,426 (0,37); 7,418 (0,71); 7,41 (0,33); 7,393 (1,18); 7,39 (1,14); 7,371 (0,42); 7,365 (1,52); 7,36 (0,61); 7,34 (0,65); 7,335 (0,62); 7,304 (2,68); 7,19 (0,49); 7,166 (0,78); 7,141 (0,34); 7,097 (1,1); 7,093 (1,37); 7,086 (0,38); 7,071 (0,69); 7,067 (1,12); 7,065 (0,97); 7,05 (0,32); 7,042 (1,99); 7,036 (0,65); 7,02 (0,57); 7,014 (1,71); 4,484 (4,69); 1,59 (3,56); 0,704 (0,59); 0,694 (16); 0,683 (0,66); 0,048 (2,55)
XIa.06	7,559 (0,52); 7,535 (0,64); 7,532 (0,65); 7,498 (0,85); 7,492 (0,94); 7,486 (0,82); 7,48 (1,45); 7,474 (0,53); 7,463 (0,84); 7,459 (1,25); 7,452 (2,34); 7,446 (0,48); 7,438 (0,32); 7,391 (2,43); 7,385 (0,64); 7,37 (0,97); 7,364 (1,58); 7,346 (0,61); 7,34 (0,56); 7,304 (0,81); 4,438 (4,76); 1,595 (1,21); 0,707 (0,67); 0,696 (16); 0,685 (0,62); 0,052 (0,75)
VIIa.0 1 (3)	2,503 (40,74); 8,849 (0,52); 8,162 (16); 8,015 (11,05); 7,992 (12,55); 7,809 (3,07); 7,806 (2,98); 7,792 (4,47); 7,788 (5); 7,77 (2,92); 7,767 (3,15); 7,684 (3,95); 7,682 (3,85); 7,664 (5,19); 7,646 (2,41); 7,644 (2,64); 7,511 (2,32); 7,491 (5,2); 7,473 (5,22); 7,453 (2,56); 7,13 (2,55); 7,124 (5,07); 7,118 (3,45); 7,099 (6,69); 7,093 (4,6); 7,079 (4,83); 7,074 (3,37); 7,058 (2,32); 7,054 (1,69); 7,009 (0,35); 6,99 (4,59); 6,984 (4,16); 6,969 (4,15); 6,964 (3,75); 3,486 (0,41); 3,415 (1,88); 3,359 (563,3); 2,677 (0,36); 2,512 (43,27); 2,508 (55,8)
VIIa.0 2	4,595 (5,17); 4,172 (2,77); 1,632 (0,35); 1,612 (7,11); 1,447 (16,57); 1,423 (33,47); 1,4 (16); 1,302 (0,61); 0,125 (0,78); 0,121 (1,05); 0,058 (0,43); 0,047 (12,42); 0,036 (0,42); 7,901 (4,46); 7,873 (5,48); 7,672 (4,45); 7,65 (7,37); 7,645 (8,3); 7,626 (4,67); 7,622 (4,98); 7,617 (2,66); 7,599 (3,36); 7,594 (2,65); 7,566 (14,03); 7,546 (0,64); 7,456 (0,33); 7,448 (3,71); 7,444 (3,75); 7,434 (0,53); 7,421 (5,56); 7,418 (3,57); 7,398 (2,53); 7,394 (2,52);

Ví dụ	$^1\text{H-NMR}$ [CDCl_3 ở 300 Mhz]
	7,377 (2,19); 7,366 (0,35); 7,355 (2,56); 7,349 (4,87); 7,327 (4,97); 7,322 (3,11); 7,304 (12,88); 7,3 (3,55); 6,917 (1,63); 6,914 (1,87); 6,909 (1,98); 6,906 (2,19); 6,887 (3,83); 6,879 (7,26); 6,87 (4,46); 6,862 (1,87); 6,859 (2,06); 6,851 (4,56); 6,843 (3,93); 6,829 (0,42); 6,821 (3,35); 6,813 (4,65); 6,806 (1,97); 6,796 (0,39); 6,788 (3,21); 6,78 (4,82); 6,772 (2,12); 4,666 (4,98); 4,642 (15,74); 4,619 (15,97)
VIIa.0 3	8,057 (1,23); 8,03 (1,2); 7,679 (2,4); 7,654 (3,36); 7,629 (0,92); 7,624 (0,55); 7,492 (0,96); 7,489 (0,89); 7,466 (1,27); 7,442 (0,62); 7,439 (0,56); 7,419 (3,45); 7,392 (0,63); 7,387 (1,13); 7,364 (1,06); 7,359 (0,71); 7,337 (0,64); 7,304 (1,95); 6,96 (0,43); 6,958 (0,45); 6,952 (0,52); 6,95 (0,5); 6,931 (1,89); 6,923 (2,19); 6,903 (1,24); 6,895 (1,82); 6,874 (0,76); 6,866 (1,06); 6,858 (0,45); 6,841 (0,72); 6,833 (1,07); 6,825 (0,48); 3,002 (0,33); 2,744 (16); 1,616 (1,81); 0,048 (1,76)
VIIa.0 4	8,096 (0,33); 8,069 (0,39); 7,717 (0,34); 7,692 (0,5); 7,682 (0,45); 7,677 (0,38); 7,564 (0,95); 7,522 (0,4); 7,384 (0,36); 7,362 (0,4); 7,3 (7,66); 6,853 (0,33); 6,826 (0,32); 6,807 (0,35); 6,774 (0,38); 2,739 (4,27); 1,61 (16); 0,039 (5,49)
VIIa.0 5 (1)	8,804 (16); 8,797 (15,96); 8,138 (9,46); 8,117 (10,23); 7,739 (8,32); 7,719 (10,35); 7,69 (5,26); 7,687 (5,12); 7,673 (7,98); 7,669 (10,22); 7,666 (5,46); 7,652 (7,23); 7,648 (6,89); 7,64 (14,18); 7,634 (13,75); 7,577 (7,23); 7,574 (7,05); 7,557 (10,29); 7,539 (4,39); 7,537 (4,09); 7,377 (4,19); 7,361 (5,34); 7,357 (9,21); 7,34 (9,38); 7,336 (5,83); 7,32 (4,9); 7,258 (22,46); 7,25 (5,82); 7,19 (1,06); 7,186 (0,72); 7,169 (2,35); 7,151 (3,08); 7,132 (1,48); 6,924 (3,65); 6,922 (3,9); 6,918 (4,22); 6,916 (4,16); 6,903 (6,74); 6,901 (7,25); 6,897 (7,77); 6,895 (7,67); 6,882 (10,03); 6,876 (11,51); 6,861 (6,2); 6,856 (7,67); 6,833 (6,2); 6,827 (8,97); 6,821 (4,32); 6,808 (5,93); 6,802 (9,03); 6,796 (4,31); 6,659 (2,6); 6,654 (2,95); 6,653 (2,93); 6,636 (4,08); 6,632 (3,9); 6,613 (6,22); 6,61 (5,49); 6,59 (4,25); 6,585 (3,21); 6,579 (1,16); 1,649 (8,11); 1,183 (2,5); 1,11 (0,74); 1,104 (3,72); 0,008 (1,21); 0 (20,49); -0,008 (1,03)
VIIa.0 6 (1)	E 8,693 (8,3); 8,671 (8,31); 8,471 (16); 8,466 (15,73); 8,042 (0,54); 7,951 (0,39); 7,932 (0,4); 7,75 (6,74); 7,732 (9,16); 7,729 (9,5); 7,702 (3,61); 7,698 (4); 7,685 (7,28); 7,681 (7,9); 7,677 (4,2); 7,663 (7,08); 7,659 (5,81); 7,645 (7,2); 7,642 (7,52); 7,625 (7,85); 7,608 (2,94); 7,605 (2,69); 7,493 (0,37); 7,407 (3,63); 7,39 (4,67); 7,386 (7,97); 7,37 (8,13); 7,366 (5,19); 7,349 (4,25); 7,341 (0,48); 7,263 (21,57); 7,244 (13,08); 7,239 (12,7); 6,971 (3,57); 6,965 (3,77); 6,95 (6,48); 6,944 (6,76); 6,93 (3,45); 6,924 (3,93); 6,916 (6,5); 6,911 (7,29); 6,895 (5,59); 6,89 (6,86); 6,867 (5,4);

Ví dụ	$^1\text{H-NMR}$ [CDCl_3 ở 300 Mhz]
	6,861 (7,87); 6,856 (3,86); 6,843 (5,15); 6,837 (7,87); 6,832 (3,81); 5,298 (1,27); 1,717 (0,34); 1,677 (0,35); 1,64 (0,45); 1,256 (0,51); 0 (3,31)
II.01A	10,257 (11,41); 10,255 (10,28); 10,106 (16); 10,105 (14,12); 8,979 (0,81); 8,974 (0,88); 8,965 (0,87); 8,959 (0,84); 8,907 (7,07); 8,898 (7,19); 8,28 (0,66); 8,253 (0,72); 8,192 (4,03); 8,164 (4,89); 7,91 (0,73); 7,883 (0,91); 7,823 (4,26); 7,818 (4,46); 7,807 (0,78); 7,798 (5,22); 7,792 (5,27); 7,784 (1,22); 7,755 (3,67); 7,743 (2,5); 7,738 (2,35); 7,728 (5,28); 7,72 (4,62); 7,715 (3,3); 7,71 (2); 7,692 (3,16); 7,687 (2,24); 7,649 (0,86); 7,646 (0,91); 7,624 (3,96); 7,621 (3,93); 7,598 (4,36); 7,574 (1,64); 7,57 (1,55); 7,539 (3,03); 7,537 (2,75); 7,513 (6,31); 7,501 (9,33); 7,494 (10,41); 7,487 (4,83); 7,476 (7,47); 7,47 (7,45); 7,393 (3,73); 7,367 (7,98); 7,342 (4,71); 7,328 (0,35); 7,313 (5,4); 7,308 (5,79); 7,3 (19,08); 7,296 (9,66); 7,287 (4,48); 7,281 (4,35); 7,275 (4,7); 7,27 (4); 7,108 (1,17); 5,335 (0,7); 2,443 (2,24); 2,085 (0,71); 1,724 (1,95); 1,304 (0,43); 1,297 (0,66); 1,281 (0,4); 0,917 (0,32); 0,046 (0,43); 0,036 (13,14); 0,025 (0,45)
II.01B	15,065 (0,81); 10,458 (14,23); 8,942 (3,46); 7,976 (4,12); 7,963 (3,89); 7,958 (4,32); 7,945 (5,22); 7,93 (0,98); 7,646 (1,78); 7,639 (2,06); 7,613 (9,32); 7,608 (12,38); 7,595 (16); 7,582 (4,78); 7,575 (3,45); 7,55 (5,59); 7,533 (3,7); 7,519 (1,7); 7,5 (1,24); 7,368 (1,16); 7,3 (332,81); 7,258 (1,04); 7,237 (1,2); 6,949 (1,95); 4,172 (0,87); 3,483 (0,83); 2,998 (1,75); 2,924 (1,73); 2,085 (2,85); 1,653 (1,61); 1,586 (433,23); 1,52 (1,42); 1,322 (0,91); 1,299 (2,47); 1,274 (0,89); 1,254 (0,95); 0,235 (1,91); 0,107 (1,5); 0,049 (13,71); 0,038 (331,49); 0,028 (13,11); -0,027 (1,08); -0,159 (1,61); -0,285 (0,87); -1,452 (0,9)
II.02A	8,969 (1,19); 8,963 (1,22); 8,955 (1,26); 8,949 (1,24); 8,872 (6,7); 8,863 (6,73); 8,748 (0,34); 8,25 (0,98); 8,246 (0,96); 8,222 (1,04); 8,181 (1,32); 8,166 (3,26); 8,155 (1,63); 8,139 (3,69); 7,893 (1,02); 7,867 (1,38); 7,802 (0,75); 7,797 (0,72); 7,779 (1,1); 7,774 (1,5); 7,769 (0,72); 7,75 (1,1); 7,745 (0,93); 7,724 (2,92); 7,708 (2,6); 7,702 (4,43); 7,698 (4,57); 7,684 (4,01); 7,68 (3,39); 7,674 (1,95); 7,657 (3,1); 7,651 (2,2); 7,634 (1,1); 7,63 (1,05); 7,607 (1,65); 7,604 (1,09); 7,593 (3,13); 7,588 (3,17); 7,581 (0,93); 7,566 (3,74); 7,562 (2,36); 7,542 (1,57); 7,539 (1,44); 7,488 (1,44); 7,474 (1,45); 7,466 (1,41); 7,46 (1,7); 7,446 (6,4); 7,44 (10,96); 7,429 (5,72); 7,419 (16); 7,404 (1,25); 7,3 (34,16); 7,287 (0,72); 7,278 (8,31); 7,252 (6,2); 7,081 (4,87); 7,078 (5,03); 7,076 (5,32); 7,056 (4,04); 7,053 (3,96); 7,051 (4,04); 7,037 (0,72); 7,022 (3,58); 7,012 (3,76); 6,998 (6,97); 6,993 (6,68); 6,971 (4,83); 6,966 (4,25); 6,104 (1,39); 5,051 (0,6); 4,847 (5,32); 4,838 (5,33); 4,732 (7,51); 4,722 (7,46); 4,172 (0,48); 4,149 (0,52); 2,442 (2,86); 2,373 (1,2); 2,31 (1,44); 2,154 (1,89); 2,085 (2,34); 1,671 (10,92); 1,47 (11,75); 1,322 (0,71); 1,298 (1,69); 1,274 (1,05); 0,049 (1,21); 0,038 (30,44); 0,027 (1,08)

Ví dụ	$^1\text{H-NMR}$ [CDCl_3 ở 300 Mhz]
II.03A	5,339 (0,98); 4,036 (0,71); 4,014 (1,84); 3,994 (1,92); 3,973 (0,81); 3,21 (1,35); 3,188 (2,65); 3,166 (1,23); 2,832 (9,37); 2,085 (1,34); 2,048 (2,15); 1,606 (16); 1,533 (0,81); 1,514 (1,67); 1,494 (0,78); 1,322 (0,51); 1,299 (1,23); 1,275 (0,4); 0,92 (0,68); 0,049 (0,59); 0,038 (16,51); 0,028 (0,68); 8,08 (0,85); 8,05 (0,81); 7,664 (0,41); 7,659 (0,65); 7,651 (0,73); 7,646 (0,84); 7,642 (0,61); 7,636 (1,2); 7,63 (0,54); 7,625 (1,06); 7,619 (1,12); 7,612 (0,89); 7,508 (0,64); 7,504 (0,65); 7,486 (0,53); 7,48 (0,92); 7,458 (0,36); 7,362 (0,69); 7,336 (1,57); 7,309 (1,52); 7,3 (16,6); 7,253 (2,26); 7,242 (1,19); 7,222 (0,73); 7,216 (0,61); 6,983 (1,03); 6,978 (1); 6,957 (0,88); 6,951 (0,86)
II.04A	17,544 (0,47); 9,388 (0,48); 8,833 (15,69); 8,824 (16); 8,1 (7,66); 8,073 (8,39); 7,842 (11,64); 7,833 (11,7); 7,739 (6,34); 7,717 (8,4); 7,712 (8,64); 7,653 (3,73); 7,648 (4,52); 7,63 (7,1); 7,625 (7,93); 7,62 (3,91); 7,603 (6,8); 7,598 (5,37); 7,572 (6,7); 7,568 (7,16); 7,545 (8,2); 7,522 (3,3); 7,518 (2,96); 7,481 (0,45); 7,366 (0,75); 7,327 (2,37); 7,312 (33,18); 7,3 (266,57); 7,293 (25,11); 7,266 (2,8); 7,227 (1,24); 7,213 (7,88); 7,202 (5,28); 7,194 (6,05); 7,183 (4,28); 7,17 (0,67); 6,949 (1,36); 6,392 (10,27); 6,004 (0,45); 4,938 (10,33); 4,894 (14,32); 4,873 (5,77); 4,861 (10,08); 4,85 (6,03); 4,688 (14,61); 4,644 (10,79); 4,05 (0,48); 4,037 (1,98); 4,027 (2,77); 4,01 (2,33); 3,999 (5,11); 3,99 (3,15); 3,972 (2,19); 3,961 (3,32); 3,673 (2,32); 3,654 (4,38); 3,639 (3,02); 3,617 (3,3); 3,603 (2,06); 3,562 (0,48); 3,458 (0,48); 2,016 (0,92); 1,972 (2,58); 1,947 (2,64); 1,92 (1,5); 1,888 (2,77); 1,878 (1,5); 1,857 (3,52); 1,846 (5,69); 1,835 (3,52); 1,804 (5,88); 1,789 (4,25); 1,746 (2,02); 1,733 (1,78); 1,717 (2,45); 1,703 (2,83); 1,687 (3,29); 1,666 (5,8); 1,653 (7,31); 1,64 (10,01); 1,624 (7,13); 1,599 (313,86); 0,233 (0,81); 0,117 (0,49); 0,105 (0,56); 0,049 (7,56); 0,038 (221,58); 0,027 (7,18); -0,029 (0,52); -0,161 (0,68)
II.05A	8,889 (0,36); 8,88 (0,36); 7,432 (0,84); 7,424 (0,47); 7,417 (0,34); 7,41 (0,42); 7,3 (8,95); 5,004 (0,66); 4,994 (1,05); 4,987 (0,73); 4,978 (0,72); 4,885 (0,44); 4,863 (0,43); 4,855 (0,5); 4,847 (0,45); 4,654 (0,35); 4,609 (0,39); 4,603 (0,36); 3,956 (0,4); 3,946 (0,42); 3,932 (0,34); 3,919 (0,68); 3,908 (0,49); 3,897 (0,4); 3,884 (0,49); 3,62 (0,38); 3,594 (0,49); 3,582 (0,53); 3,576 (0,74); 3,564 (0,45); 3,558 (0,58); 3,544 (0,34); 3,538 (0,43); 3,534 (0,4); 1,943 (0,34); 1,925 (0,5); 1,912 (0,57); 1,899 (0,59); 1,888 (0,66); 1,875 (0,47); 1,866 (0,5); 1,854 (0,4); 1,844 (0,48); 1,834 (0,75); 1,824 (0,56); 1,804 (0,79); 1,792 (0,93); 1,783 (0,75); 1,766 (0,75); 1,734 (0,39); 1,724 (0,33); 1,703 (0,41); 1,695 (0,52); 1,67 (0,93); 1,658 (1,11); 1,653 (1,03); 1,641 (1,06); 1,627 (1,42); 1,612 (16); 1,603 (2,38); 1,602 (2,4); 1,6 (2,4); 1,584 (2,14); 1,571 (1,29); 1,566 (1,14); 1,559 (0,73); 1,546 (0,48); 1,47 (0,49); 0,037 (7,23)

Ví dụ	$^1\text{H-NMR}$ [CDCl_3 ở 300 Mhz]
II.06A (⁵)	8,163 (1,72); 8,157 (0,66); 8,149 (0,85); 8,143 (3,4); 8,11 (1,67); 8,105 (3,03); 8,095 (2,92); 8,091 (5,57); 7,793 (3,52); 7,726 (0,58); 7,724 (0,58); 7,712 (0,69); 7,706 (1,2); 7,696 (1,07); 7,695 (1,07); 7,68 (0,85); 7,666 (0,86); 7,66 (1,06); 7,646 (0,97); 7,641 (0,58); 7,627 (0,46); 5,753 (0,54); 3,309 (1,51); 3,026 (1,58); 2,742 (16); 2,508 (1,59); 2,505 (2,15); 2,502 (1,61); 1,228 (0,43); 0 (1,31)
II.07A (²)	9,38 (11,61); 9,375 (11,9); 8,514 (9,06); 8,51 (9,21); 8,222 (6,09); 8,205 (6,8); 7,935 (6,02); 7,918 (6,97); 7,911 (4,35); 7,908 (3,9); 7,897 (5,06); 7,894 (7,23); 7,891 (3,85); 7,88 (4,23); 7,877 (3,74); 7,754 (4,3); 7,752 (7,93); 7,74 (2,82); 7,736 (8,53); 7,673 (4,31); 7,67 (4,38); 7,656 (7,43); 7,642 (3,52); 7,64 (3,44); 7,544 (2,35); 7,542 (2,45); 7,532 (3,01); 7,527 (9,02); 7,515 (6,96); 7,513 (6,57); 7,494 (0,61); 7,485 (16); 7,47 (11,58); 7,468 (8,04); 7,456 (3,3); 7,452 (2,62); 7,288 (27,45); 5,325 (0,57); 1,6 (11,08); 1,217 (0,9)
II.08A	8,082 (1,11); 8,053 (1,02); 7,67 (0,56); 7,665 (0,83); 7,656 (0,92); 7,65 (1,04); 7,642 (1,58); 7,636 (0,67); 7,629 (1,33); 7,624 (1,51); 7,617 (1,21); 7,512 (0,84); 7,508 (0,85); 7,49 (0,69); 7,484 (1,19); 7,462 (0,47); 7,459 (0,44); 7,373 (0,92); 7,347 (1,98); 7,321 (1,64); 7,3 (15,12); 7,257 (2,76); 7,24 (1,3); 7,235 (1,39); 7,214 (0,89); 7,209 (0,84); 7 (1,25); 6,995 (1,21); 6,974 (1,1); 6,968 (1,06); 5,339 (0,53); 3,878 (1,77); 3,854 (3,97); 3,83 (2,16); 3,385 (1,79); 3,361 (3,21); 3,337 (1,47); 2,827 (12,09); 1,609 (16); 0,05 (0,6); 0,039 (15,3); 0,028 (0,58)
VII.01 A (³)	8,904 (14,15); 8,899 (14,16); 8,311 (11,78); 8,306 (11,6); 7,998 (14,31); 7,977 (16); 7,747 (4,37); 7,744 (4,43); 7,73 (6,34); 7,726 (8,11); 7,723 (4,8); 7,709 (4,56); 7,705 (4,7); 7,618 (5,53); 7,615 (5,5); 7,598 (8,33); 7,595 (6,33); 7,578 (3,92); 7,409 (2,82); 7,389 (6,58); 7,374 (6,05); 7,37 (5,72); 7,354 (3,96); 7,325 (5,5); 7,321 (4,93); 7,301 (14,2); 7,298 (14,48); 7,28 (6,32); 7,093 (3,18); 7,088 (2,96); 7,072 (5,44); 7,068 (5,8); 7,05 (2,65); 7,046 (2,4); 6,36 (13,98); 6,349 (14,52); 6,018 (9,73); 6,009 (9,04); 3,322 (35,48); 2,508 (13,38); 2,504 (17,32); 2,499 (12,66); 1,991 (0,54); 0 (17,65); -0,008 (0,82)
VII.02 A (³)	9,845 (0,57); 9,225 (16); 9,219 (15,97); 8,788 (13,87); 8,783 (13,07); 8,223 (8,43); 8,204 (9,04); 8,154 (8,55); 8,133 (10,35); 7,974 (5,19); 7,97 (5,39); 7,957 (6,82); 7,953 (9,39); 7,95 (5,22); 7,936 (4,97); 7,932 (4,7); 7,761 (5,94); 7,758 (6,19); 7,741 (9,87); 7,723 (5,46); 7,721 (5,96); 7,715 (4,29); 7,711 (3,81); 7,699 (15,85); 7,696 (13,86); 7,689 (12,87); 7,682 (13,67); 7,668 (9,34); 7,664 (7,81); 7,661 (7,58); 7,651 (3,55); 7,631 (3,71); 7,625 (4,84); 7,618 (2,86); 7,608 (5,9); 7,605 (5,61); 7,602 (4,89); 7,589 (2,57); 7,585 (2,85); 7,579 (1,9); 7,565 (1); 7,53 (0,33); 7,525 (0,39); 7,51 (0,4);

Ví dụ	$^1\text{H-NMR}$ [CDCl_3 ở 300 Mhz]
	7,237 (0,32); 3,319 (41,41); 2,508 (14,62); 2,504 (18,84); 2,5 (13,81); 1,236 (0,88); 0 (9,85); -0,008 (0,48)
VII.03 A	8,075 (15,43); 8,052 (4,15); 7,737 (2,95); 7,732 (2,61); 7,711 (4,93); 7,705 (4,75); 7,666 (1,37); 7,66 (1,84); 7,643 (4,08); 7,637 (3,22); 7,617 (7,9); 7,61 (6,77); 7,587 (3,37); 7,568 (1,14); 7,563 (0,96); 7,39 (1,78); 7,38 (0,43); 7,367 (2,28); 7,362 (3,9); 7,348 (0,78); 7,34 (4,24); 7,334 (2,61); 7,313 (2,64); 7,304 (14,74); 7,119 (4,13); 7,004 (6,73); 6,996 (4,39); 6,988 (3,74); 6,984 (3,68); 6,981 (3,73); 6,968 (2,77); 6,96 (4,11); 6,953 (2,09); 6,938 (8,39); 6,838 (1,68); 6,835 (1,71); 6,83 (1,66); 6,827 (1,53); 6,81 (3,3); 6,807 (3,26); 6,802 (3,11); 6,782 (1,61); 6,78 (1,58); 6,774 (1,54); 6,756 (4,2); 6,502 (2,58); 1,616 (16); 0,117 (0,48); 0,056 (0,47); 0,045 (14,74); 0,034 (0,5)

Lưu ý ⁽¹⁾: trong CDCl_3 ở 400 Mhz

Lưu ý ⁽²⁾: trong CDCl_3 ở 500 Mhz

Lưu ý ⁽³⁾: trong $\text{d}_6\text{-DMSO}$ ở 400 Mhz

Lưu ý ⁽⁴⁾: trong $\text{d}_6\text{-DMSO}$ ở 300 Mhz

Lưu ý ⁽⁵⁾: trong $\text{d}_6\text{-DMSO}$ ở 500 Mhz

Các ví dụ sau đây minh họa, theo cách không giới hạn, việc điều chế và hiệu lực của các hợp chất có công thức (I) theo sáng chế.

Ví dụ điều chế 1: Điều chế 3-[2-(trimetylsilyl)phenoxy]quinolin (hợp chất I.001)

Trong lọ vi sóng 5 mL, 145 mg (0,68 mmol) 3-bromoquinolin và 136 mg 2-(trimetylsilyl)-phenol được hòa tan trong 4 ml toluen. 300 mg (1,37 mmol) kali phosphat dihydrat được bổ sung vào, tiếp theo là 3 mg (0,014 mmol) paladi (II) axetat và 9 mg (0,021 mol) 2-di-*tert*-butyl-phosphino-2',4',6'-triisopropylbiphenyl. Hỗn hợp này được đun nóng bằng vi sóng [Biotage Initiator™] ở 120°C trong 3 giờ. Hỗn hợp phản ứng đã làm mát được lọc ra và dịch lọc được pha loãng bằng etyl axetat, rửa bằng nước và làm khô bằng magie sulfat. Pha hữu cơ được cô đặc trong chân không để tạo ra 199 mg sản phẩm thô dưới dạng dầu màu cam. Phần còn lại được tinh chế bằng phương pháp HPLC điều chế (gradien axetonitril / nước + 0,1% HCO_2H) để tạo ra 74 mg (hiệu suất 37%) 3-[2-(trimetylsilyl)phenoxy]quinolin dưới dạng dầu màu cam nhạt. $\text{LogP} = 5,17$ [Phương pháp A]. Khối lượng ($\text{M}+\text{H}$) = 294.

Ví dụ điều chế 2: điều chế {2-[(7,8-diflo-2-metylquinolin-3-yl)oxy]phenyl}(dimetyl)silanol (hợp chất I.026)

Bước 1: Điều chế 7,8-diflo-2-metyl-3-(2-nitrophenoxy)quinolin (hợp chất Va.04)

Trong agon, 1 g (5,12 mmol) 7,8-diflo-2-metylquinolin-3-ol và 723 mg (5,12 mmol) 1-flo-2-nitrobenzen được hòa tan trong 10 ml DMF [N,N-dimetylformamit]. 1,10 g (5,63 mmol) xesi cacbonat được bổ sung vào và hỗn hợp phản ứng được khuấy ở nhiệt độ phòng trong 5 ngày. Hỗn hợp phản ứng được pha loãng bằng 500 ml nước. Sau 4 giờ, chất kết tủa được lọc ra và làm khô ở 40°C trong chân không để tạo ra 1,33 g (82%) 7,8-diflo-2-metyl-3-(2-nitrophenoxy)quinolin tinh khiết được sử dụng nguyên như vậy cho bước tiếp theo. LogP = 3,37 [Phương pháp A]. Khối lượng (M+H) = 317.

Bước 2: Điều chế 2-[(7,8-diflo-2-metylquinolin-3-yl)oxy]anilin (hợp chất IVa.05)

Dung dịch 0,05 M chứa 1,25 g (3,95 mmol) 7,8-diflo-2-metyl-3-(2-nitrophenoxy)quinolin trong etyl axetat được khử trong H-Cube™ [thiết bị phản ứng hydro hóa kiểu dòng liên tục] qua cột 10% Pd/C ở tốc độ 1 mL/phút. Bước làm bay hơi dung môi tạo ra 1,13 g (95%) 2-[(7,8-diflo-2-metylquinolin-3-yl)oxy]anilin dưới dạng chất rắn có độ tinh khiết 95% được sử dụng nguyên như vậy cho bước tiếp theo. LogP = 2,99 [Phương pháp A]. Khối lượng (M+H) = 287.

Bước 3: điều chế 3-(2-bromophenoxy)-7,8-diflo-2-metylquinolin (hợp chất IIa.07)

Bổ sung từng giọt dung dịch chứa 1,05 g (3,66 mmol) 2-[(7,8-diflo-2-metylquinolin-3-yl)oxy]anilin trong 20 ml axetonitril khan trong khoảng thời gian 10 phút vào huyền phù chứa 630 mg (4,40 mmol) đồng (I) bromua, 955 mg (11 mmol) lithi bromua và 0,630 mL (4,76 mmol) *tert*-butyl nitrit trong 20 ml axetonitril khan được làm ấm nhẹ ở 60°C. Sau khi bổ sung, hỗn hợp phản ứng được khuấy trong thêm 30 phút. Hỗn hợp phản ứng đã làm mát được pha loãng bằng etyl axetat và lọc qua bánh lọc đất diatomit. Pha hữu cơ được cô đặc trong chân không và phần còn lại được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột trên silica gel (gradien n-heptan/etyl axetat) để tạo ra 0,90 g (70%) 3-(2-bromophenoxy)-7,8-diflo-2-metylquinolin dưới dạng dầu nhớt mà được hóa rắn. LogP = 4,25 [Phương pháp A]. Khối lượng (M+H) = 350.

Bước 4: điều chế {2-[(7,8-diflo-2-metylquinolin-3-yl)oxy]phenyl}(dimetyl)silanol (hợp chất I.026)

Trong lọ Radleys™ khô trong agon, hỗn hợp gồm 250 mg (0,71 mmol) 3-(2-bromophenoxy)-7,8-diflo-2-metylquinolin, 21 mg (0,071 mmol) biphenyl-2-yl(di-*tert*-butyl)phosphin [Johnphos], 6,3 mg (0,036 mmol) paladi (II) clorua và 0,37 mL (2,14 mmol) N,N-diisopropyletylamin trong 1,5 ml NMP [N-metylpyrrolidon], được đun nóng ở 80°C trong 10 phút. Sau khi bổ sung tiếp 295 mg (1,42 mmol) 1,2-dietoxy-1,1,2,2-tetrametyldisilan, ống này được bịt kín và khuấy ở 80°C trong 20 giờ. Sau đó, bổ sung 1 ml axetonitril và 2 ml dung dịch nước axit axetic 1M vào hỗn hợp phản ứng đã làm mát. Hỗn hợp phản ứng được khuấy mạnh liệt ở nhiệt độ trong phòng trong 2 giờ. Hỗn hợp phản ứng được chiết bằng etyl axetat (3 x 50 mL), và các phần chiết hữu cơ được rửa bằng nước sau đó bằng nước muối và làm khô bằng natri sulfat. Pha hữu cơ được cô đặc trong chân không và phần còn lại được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột trên silica gel (gradien n-heptan/etyl axetat) để tạo ra 101 mg (41%) {2-[(7,8-diflo-2-metylquinolin-3-yl)oxy]phenyl}(dimetyl)silanol dưới dạng chất rắn. LogP = 3,51 [Phương pháp A]. Khối lượng (M+H) = 346.

Ví dụ điều chế 3: điều chế N-(1,1-dimetyl-1,3-dihydro-2,1-benzoxasilol-7-yl)quinolin-3-amin (hợp chất I.010)

Bước 1: điều chế 2-[(2-bromo-3-iodobenzyl)oxy]tetrahydro-2H-pyran

Bổ sung 25 mg (0,1 mmol) pyridini *p*-toluensulfonat vào dung dịch chứa 3,15 g (10 mmol) (2-bromo-3-iodophenyl)metanol và 1,5 g (15 mmol) 3,4-dihydro-2H-pyran trong 15 ml hỗn hợp diclometan: tetrahydrofuran tỷ lệ 2:1. Hỗn hợp phản ứng được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong thời gian 3 ngày. Dung môi được loại bỏ trong chân không và phần còn lại được hòa tan trong 200 ml diclometan. Pha hữu cơ được rửa bằng dung dịch nước NaHCO₃ bão hòa, làm khô và cô đặc trong chân không để tạo ra 4,35 g (87%) 2-[(2-bromo-3-iodobenzyl)oxy]tetrahydro-2H-pyran dưới dạng dầu nhớt có độ tinh khiết 80% được sử dụng nguyên như vậy cho bước tiếp theo. Phân tích phổ khối - sắc ký khí: (M) = 396.

Bước 2: điều chế N-{2-bromo-3-[(tetrahydro-2H-pyran-2-yloxy)metyl]phenyl}quinolin-3-amin (hợp chất II.04A)

Trong lọ Radleys™ khô bị kín trong agon, hỗn hợp gồm 300 mg (2,03 mmol) quinolin-3-amin, 962 mg (1,93 mmol) 2-[(2-bromo-3-iodobenzyl)oxy]tetrahydro-2H-pyran, 127 mg (0,105 mmol) 4,5-bis(diphenylphosphino)-9,9-dimetylanten

[Xantphos] và 93 mg (0,102 mmol) tris(dibenzyliden-axeton)dipaladi(0), được đun nóng ở 90°C trong 6 giờ. Hỗn hợp phản ứng đã làm mát được pha loãng bằng etyl axetat và lọc qua bánh lọc đất diatomit. Pha hữu cơ được cô đặc trong chân không và phần còn lại được tinh chế bằng pháp sắc ký cột trên silica gel (gradien *n*-heptan/etyl axetat) để tạo ra 556 mg (66%) N-{2-bromo-3-[(tetrahydro-2H-pyran-2-yloxy)-metyl]phenyl}quinolin-3-amin dưới dạng chất rắn. LogP = 4,13 [Phương pháp B]. Khối lượng (M+H) = 413.

Bước 3: điều chế N-(1,1-dimetyl-1,3-dihydro-2,1-benzoxasilol-7-yl)quinolin-3-amin (hợp chất I.010)

Trong lọ Radleys™ khô trong agon, hỗn hợp gồm 250 mg (0,60 mmol) N-{2-bromo-3-[(tetrahydro-2H-pyran-2-yloxy)metyl]phenyl}quinolin-3-amin, 18 mg (0,06 mmol) biphenyl-2-yl(di-*tert*-butyl)-phosphin, 5,3 mg (0,03 mmol) paladi (II) clorua và 0,42 mL (2,42 mmol) N,N-diisopropyl-etylamin trong 1,5 ml NMP khan, được đun nóng ở 80°C trong 10 phút. Sau khi bổ sung tiếp 374 mg (1,81 mmol) 1,2-diethoxy-1,1,2,2-tetrametyldisilan, ống này được bịt kín và khuấy ở 80°C trong 36 giờ. Sau đó, bổ sung 1 ml axetonitril và 2 ml dung dịch nước axit axetic 1M vào hỗn hợp phản ứng đã làm mát. Hỗn hợp phản ứng được khuấy mạnh liệt ở nhiệt độ trong phòng trong 2 giờ. Hỗn hợp phản ứng được chiết bằng etyl axetat (3 x 50 mL), và các phần chiết hữu cơ được rửa bằng nước sau đó bằng nước muối và làm khô bằng natri sulfat. Pha hữu cơ được cô đặc trong chân không và phần còn lại được tinh chế bằng pháp sắc ký cột trên silica gel (gradien *n*-heptan/etyl axetat) để tạo ra 150 mg dầu nhớt. Phần dầu còn lại này được hòa tan trong 40 ml metanol và 230 mg (1,21 mmol) axit 4-toluensulfonic monohydrat được bổ sung vào. Hỗn hợp phản ứng được khuấy thêm ở nhiệt độ trong phòng trong thời gian 4 ngày. Dung môi được loại bỏ trong chân không và phần còn lại được pha loãng bằng diclometan. Pha hữu cơ được rửa bằng dung dịch nước NaHCO₃ bão hòa, làm khô và cô đặc trong chân không để tạo ra 16 mg dầu nhớt. Tinh chế bằng phương pháp HPLC điều chế (gradien axetonitril / nước + 0,1% HCO₂H) tạo ra 4 mg (hiệu suất 2%) N-(1,1-dimetyl-1,3-dihydro-2,1-benzoxasilol-7-yl)-quinolin-3-amin dưới dạng dầu nhớt. LogP = 3,15 [Phương pháp B]. Khối lượng (M+H) = 307.

Ví dụ điều chế 4: điều chế 3-[3-flo-2-(1-metylsiletan-1-yl)phenoxy]quinolin (hợp chất I.008)

Bổ sung 122 mg (0,99 mmol) 1-clo-1-metylsiletan trong dung dịch trong 4 ml THF vào dung dịch chứa 100 mg (0,39 mmol) 3-(3-flophenoxy)quinolin trong 4 ml tetrahydrofuran [THF]. Hỗn hợp phản ứng được làm lạnh đến -78°C và 0,218 ml dung dịch 2M chứa lithi diisopropylamin [LDA] trong THF được bổ sung vào từ từ. Hỗn hợp phản ứng được khuấy thêm ở -78°C trong 4 giờ. Hỗn hợp phản ứng được điều chỉnh đến nhiệt độ trong phòng, pha loãng bằng nước và chiết bằng etyl axetat. Pha hữu cơ được rửa bằng nước, làm khô bằng magie sulfat và cô đặc trong chân không để tạo ra 170 mg sản phẩm thô dưới dạng dầu màu cam. Phần còn lại được tinh chế bằng phương pháp HPLC điều chế (gradient axetonitril / nước + 0,1% HCO_2H) để tạo ra 30 mg (hiệu suất 23%) 3-[3-flo-2-(1-metylsiletan-1-yl)phenoxy]-quinolin dưới dạng dầu màu cam. $\text{LogP} = 5,39$ [Phương pháp A]. Khối lượng ($\text{M}+\text{H}$) = 324.

Ví dụ điều chế 5: điều chế 3-{2-[(4-clophenyl)(dimetyl)silyl]benzyl}quinolin (hợp chất I.014)

Bước 1: điều chế [2-(bromometyl)phenyl](4-clophenyl)dimetylsilan (hợp chất XIa.06)

Bổ sung 313 mg (1,4 mmol) metansulfonyl bromua vào hỗn hợp chứa 390 mg (1,40 mmol) {2-[(4-clophenyl)(dimetyl)silyl]phenyl}metanol và 156 mg (1,55 mmol) trietylamin trong 10 ml diclometan. Hỗn hợp phản ứng được khuấy trong 4 giờ ở nhiệt độ trong phòng. Dung môi được loại bỏ trong chân không, phần còn lại được hòa tan trong lượng tối thiểu diclometan và tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột trên silica gel (*n*-heptan/etyl axetat 95/5) để tạo ra 399 mg (79%) [2-(bromometyl)-phenyl](4-clophenyl)dimetylsilan dưới dạng chất rắn. $\text{LogP} = 5,94$ [Phương pháp A]. Phân tích phổ khối - sắc ký khí: ($\text{M}-\text{CH}_3$) = 323.

Bước 2: điều chế 3-{2-[(4-clophenyl)(dimetyl)silyl]benzyl}quinolin (hợp chất I.014)

Trong lọ vi sóng 5 ml, 100 mg (0,57 mmol) axit 3-quinolylboronic được hòa tan cùng với 196 mg (0,57 mmol) [2-(bromometyl)phenyl](4-clophenyl)dimetylsilan trong 3 ml 1-4-dioxan. 239 mg (1,73 mmol) kali cacbonat trong dung dịch trong 1 ml nước được bổ sung vào, và hỗn hợp phản ứng được đuổi khí bằng agon trong vài phút. 33 mg (0,029 mmol) tetrakis(triphenyl-phosphin)paladi(0) được bổ sung thêm và hỗn hợp này được đun nóng bằng vi sóng ở 80°C trong 10 phút. Hỗn hợp phản ứng đã làm mát được lọc qua cột ChemElut™ (3 g) và cột này được rửa tiếp bằng 1-4-dioxan. Các phần chiết hữu cơ được cô đặc trong chân không và phần còn lại được tinh chế bằng pháp sắc ký cột trên silica gel (*n*-heptan/etyl axetat 90/10) để tạo ra 161 mg (68%) 3-{2-[(4-

clophenyl)(dimethyl)silyl]benzyl}quinolin. LogP = 4,74 [Phương pháp A]. Khối lượng (M+H) = 388.

Ví dụ điều chế 6: điều chế 7,8-diflo-3-{3-flo-2-[flo(dimethyl)silyl]phenoxy}-2-metylquinolin (hợp chất I.032)

Bổ sung 0,066 mL (0,519 mmol) bo triflorua dietyl eterat theo một phần vào dung dịch chứa 200 mg (0,519 mmol) {2-[(7,8-diflo-2-metylquinolin-3-yl)oxy]-6-flophenyl}-(dimethyl)silanol trong 2 mL trong THF khan. Hỗn hợp phản ứng được khuấy trong 30 phút và để yên qua đêm ở nhiệt độ trong phòng. Hỗn hợp phản ứng được pha loãng bằng dung dịch nước natri bicacbonat bão hòa và chiết bằng diclometan. Các phần chiết hữu cơ được làm khô bằng natri sulfat và pha hữu cơ được cô đặc trong chân không để tạo ra 275 mg dầu nhớt. Phần còn lại được tinh chế bằng phương pháp HPLC điều chế (gradien axetonitril / nước + 0,1% HCO₂H). Các phân đoạn được bổ sung vào dung dịch nước natri bicacbonat bão hòa và chiết bằng diclometan. Các phần chiết hữu cơ kết hợp được làm khô bằng natri sulfat và cô đặc trong chân không để tạo ra 96 mg (45%) 7,8-diflo-3-{3-flo-2-[flo(dimethyl)silyl]phenoxy}-2-metylquinolin dưới dạng dầu có độ tinh khiết 90%. LogP = 4,75 [Phương pháp A]. Khối lượng (M+H) = 366.

Ví dụ điều chế 7: điều chế 2-clo-3-{3-flo-2-[metyl(phenyl)silyl]phenoxy}quinolin (hợp chất I.062)

Bước 1: điều chế 3-(3-flophenoxy)quinolin (hợp chất VIIa.05)

Trong lọ vi sóng 10 mL, 1 g (4,71 mmol) 3-bromoquinolin, 0,566 g (4,94 mmol) 3-flophenol và 174 mg (0,94 mmol) dipivaloylmetan được hòa tan trong 5 ml N,N-dimetylaxetamit. 1 g (5,18 mmol) đồng(I) iodua và 1,697 g (5,18 mmol) xesi cacbonat được bổ sung tiếp vào và hỗn hợp này được đun nóng bằng vi sóng ở 200°C trong 1 giờ. Thử nghiệm được lặp lại ba lần. Các hỗn hợp phản ứng kết hợp được pha loãng bằng etyl axetat và lọc qua bánh lọc đất diatomit. Các pha hữu cơ được rửa bằng nước, làm khô bằng magie sulfat và cô đặc trong chân không để tạo ra 6,76 g dầu màu nâu sẫm. Phần còn lại được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột trên silica gel (*n*-heptan/etyl axetat 95/5 đến 85/15) để tạo ra 3,03 g (64%) 3-(3-flophenoxy)quinolin dưới dạng dầu màu cam. LogP = 3,21 [Phương pháp A]. Khối lượng (M+H) = 240.

Bước 2: điều chế 3-(3-flophenoxy)quinolin 1-oxit (hợp chất VIIa.06)

Bổ sung từ từ ở 0°C, dung dịch chứa 1,80 g (6,27 mmol) axit metacloperoxybenzoic [độ tinh khiết 60%] trong 30 ml cloroform vào dung dịch chứa 1,5 g (6,27 mmol) 3-(3-flophenoxy)quinolin trong 30 ml cloroform. Hỗn hợp phản ứng được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 90 phút. Hỗn hợp phản ứng được rót vào 100 ml dung dịch nước natri thiosulfat 1M. Pha hữu cơ được tách, rửa bằng nước và làm khô bằng magie sulfat. Cô đặc trong chân không tạo ra 2,40 g dầu màu cam dưới dạng phần còn lại. Phần còn lại được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột trên silica gel (*n*-heptan/ethyl axetat 65/35 đến 50/50) để tạo ra 1,30 g (78%) 3-(3-flophenoxy)quinolin 1-oxit dưới dạng dầu màu cam mà kết tinh. LogP = 2,14 [Phương pháp A]. Khối lượng (M+H) = 256.

Bước 3: điều chế 2-clo-3-(3-flophenoxy)quinolin (hợp chất VIIa.01)

Bổ sung 182 mg (2,49 mmol) DMF vào dung dịch chứa 1,27 g (4,98 mmol) 3-(3-flophenoxy)quinolin 1-oxit trong 50 ml diclometan. Hỗn hợp phản ứng được làm mát đến 0°C và 917 mg (5,98 mmol) phosphor oxyclorea được bổ sung vào từ từ ở 0°C. Hỗn hợp phản ứng được khuấy tiếp ở nhiệt độ trong phòng trong 8 giờ. Hỗn hợp phản ứng được rót vào 150 ml dung dịch nước natri bicarbonat bão hòa và chiết bằng diclometan. Các phần chiết hữu cơ được kết hợp và làm khô bằng magie sulfat. Cô đặc trong chân không tạo ra 1,40 g dầu màu vàng. Phần còn lại được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột trên silica gel (*n*-heptan/ethyl axetat 80/20) để tạo ra 1,27 g (93%) 2-clo-3-(3-flophenoxy)quinolin dưới dạng dầu màu cam nhạt. LogP = 3,99 [Phương pháp A]. Khối lượng (M+H) = 274.

Bước 4: điều chế 2-clo-3-{3-flo-2-[metyl(phenyl)silyl]phenoxy}quinolin (hợp chất I.062)

Bổ sung 153 mg (0,91 mmol) clo(metyl)phenylsilan trong dung dịch trong 4 ml THF vào dung dịch chứa 100 mg (0,36 mmol) 2-clo-3-(3-flophenoxy)quinolin trong 4 ml THF. Hỗn hợp phản ứng được làm lạnh đến -78°C và 0,365 ml dung dịch 2M chứa LDA trong THF được bổ sung vào từ từ. Hỗn hợp phản ứng được khuấy thêm ở -78°C trong 7 giờ. Hỗn hợp phản ứng được điều chỉnh đến nhiệt độ trong phòng, pha loãng bằng nước và chiết bằng ethyl axetat. Pha hữu cơ được rửa bằng nước, làm khô bằng magie sulfat và cô đặc trong chân không để tạo ra 243 mg dầu màu vàng. Phần còn lại được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột trên silica gel (*n*-heptan/ethyl axetat 96/4) để

tạo ra 58 mg (38%) 2-clo-3-{3-flo-2-[metyl(phenyl)silyl]phenoxy}quinolin dưới dạng dầu màu cam nhạt. LogP = 5,78 [Phương pháp A]. Khối lượng (M+H) = 394. Tinh chế tiếp phân đoạn thứ hai tạo ra 17 mg (11%) 2-clo-3-(3-flophenoxy)-4-[metyl(phenyl)silyl]quinolin và 20 mg (13%) 6-clo-11-flo-12-metyl-12-phenyl-12H-[1,4]benz-oxasilino[2,3-c]quinolin. LogP lần lượt = 5,90 và 5,94 [Phương pháp A].

Ví dụ điều chế 8: điều chế 2-metyl-3-[2-(trimetylsilyl)phenoxy]quinolin (hợp chất I.047)

Bước 1: điều chế 1-[2-(trimetylsilyl)phenoxy]axeton (hợp chất XIV.01)

Bổ sung 1,2 g (11,6 mmol) cloroaxeton [độ tinh khiết 90%] cùng với 100 mg (0,6 mmol) kali iodua và 1 g (7,21 mmol) kali cacbonat vào dung dịch chứa 1 g (6 mmol) 2-trimetylsilylphenol trong 50 ml axeton. Hỗn hợp phản ứng được khuấy ở 50°C trong 7 giờ. Hỗn hợp phản ứng đã làm mát được lọc qua thủy tinh thiêu kết, rửa bằng etyl axetat và dung môi được loại bỏ tiếp trong chân không. Phần còn lại dạng dầu màu cam 1,29 g được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột trên silica gel (n-heptan/diclorometan 75/25) để tạo ra 924 mg (66%) 1-[2-(trimetylsilyl)phenoxy]axeton dưới dạng dầu màu cam. LogP = 1,39 [Phương pháp A]. Phân tích phổ khối - sắc ký khí: khối lượng (M) = 322.

Bước 2: điều chế 2-metyl-3-[2-(trimetylsilyl)phenoxy]quinolin (hợp chất I.047)

Trong lọ vi sóng 5 mL, 100 mg (0,45 mmol) 1-[2-(trimetylsilyl)phenoxy]axeton được trộn với 56 mg (0,45 mmol) 2-aminobenzaldehyt trong 5 ml axit axetic. Hỗn hợp này được đun nóng bằng vi sóng ở 120°C trong 8 giờ. Hỗn hợp phản ứng đã làm mát được rót vào 100 ml dung dịch nước chứa 7 g kali bicacbonat và chiết bằng etyl axetat. Các phần chiết hữu cơ được cô đặc trong chân không để còn lại 198 mg phần còn lại màu hơi nâu. Phần còn lại được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột trên silica gel (n-heptan/etyl axetat 97/3 đến 90/10) để tạo ra 40 mg (21%) 2-metyl-3-[2-(trimetylsilyl)phenoxy]quinolin dưới dạng dầu màu cam. LogP = 4,85 [Phương pháp A]. Khối lượng (M+H) = 308.

Trong phần sau đây:

CMP1 là 7,8-diflo-2-metyl-3-{2-[(trimetylsilyl)metyl]phenoxy}quinolin (được điều chế theo mô tả trong JP2014/166991).

CMP2 là 8-clo-4-[4-flo-2-(trimetylsilyl)phenoxy]quinolin (được điều chế theo mô tả trong EP 0326330).

CMP3 là 7,8-diflo-4-[3-flo-2-(trimetylsilyl)phenoxy]-2-metylquinolin (được điều chế theo mô tả trong EP 0326330).

CMP4 là 4-[3-flo-2-(trimetylsilyl)-phenoxy]-1,5-naphtyridin (được điều chế theo mô tả trong EP 0410762).

Ví dụ A: Thử nghiệm tế bào *in vitro* trên *Pyricularia oryzae*

Dung môi: dimetyl sulfoxit

Môi trường nuôi cấy: 14,6 g D-glucoza khan (VWR),

7,1 g pepton nấm (Oxoid),

1,4 g chất chiết nấm men nghiền nhỏ (Merck), QSP 1 lít

Chủng cấy: Huyền phù bào tử

Các hợp chất thử nghiệm được hòa tan trong dimetyl sulfoxit và dung dịch này được sử dụng để tạo ra nồng độ mong muốn. Nồng độ cuối của dimetyl sulfoxit được sử dụng trong thử nghiệm là $\leq 1\%$.

Huyền phù bào tử của *Pyricularia oryzae* được chuẩn bị và pha loãng đến mật độ bào tử mong muốn.

Các hợp chất được đánh giá về khả năng ức chế của chúng đối với sự nảy mầm của bào tử và sự phát triển của sợi nấm trong thử nghiệm nuôi cấy lỏng. Các hợp chất được bổ sung với nồng độ mong muốn vào môi trường nuôi cấy chứa bào tử. Sau 5 ngày ủ, độc tính kháng nấm của các hợp chất được xác định bằng các xác định phổ phát triển của sợi nấm. Khả năng ức chế sự phát triển của nấm được xác định bằng cách so sánh các giá trị độ hấp thụ trong các giếng chứa chất diệt nấm với độ hấp thụ trong các giếng đối chứng không chứa chất diệt nấm.

Trong thử nghiệm này, các hợp chất theo sáng chế sau thể hiện hiệu quả nằm trong khoảng từ 70% đến 79% ở nồng độ 20 ppm thành phần hoạt tính: I.125.

Trong thử nghiệm này, các hợp chất theo sáng chế sau thể hiện hiệu quả nằm trong khoảng từ 80% đến 89% ở nồng độ 20 ppm thành phần hoạt tính: I.010; I.042; I.099; I.118; I.121; I.122.

Trong thử nghiệm này, các hợp chất theo sáng chế sau thể hiện hiệu quả nằm trong khoảng từ 90% đến 100% ở nồng độ 20 ppm thành phần hoạt tính: I.001; I.002; I.003; I.004; I.005; I.006; I.007; I.008; I.009; I.011; I.012; I.013; I.017; I.018; I.019; I.020; I.021; I.022; I.023; I.024; I.025; I.026; I.027; I.028; I.029; I.030; I.031; I.032; I.033;

I.034; I.035; I.036; I.037; I.038; I.039; I.041; I.044; I.045; I.046; I.047; I.049; I.050; I.051; I.052; I.053; I.054; I.056; I.057; I.059; I.062; I.063; I.065; I.066; I.067; I.069; I.070; I.071; I.072; I.073; I.074; I.075; I.076; I.077; I.078; I.081; I.082; I.084; I.085; I.086; I.087; I.088; I.089; I.090; I.091; I.093; I.094; I.095; I.096; I.097; I.098; I.100; I.109; I.110; I.111; I.112; I.113; I.114; I.115; I.116; I.120; I.123; I.124; I.127; I.129.

Trong thử nghiệm này, hợp chất theo sáng chế sau thể hiện hiệu quả nằm trong khoảng từ 90% đến 100% ở nồng độ 4 ppm thành phần hoạt tính: I.119.

Trong thử nghiệm này, hợp chất I.024 thể hiện hiệu lực ít nhất 80% khi được thử nghiệm ở liều 0,25 ppm hoặc 0,06 ppm trong khi đó CMP1 (hợp chất có cấu tạo gần giống, không theo sáng chế) thể hiện hiệu lực thấp hơn nhiều ở cùng liều này như được thể hiện trong bảng A1.

Bảng A1:

Hợp chất	liều (ppm)	Hiệu lực
I.024	0,25	96
I.024	0,06	89
CMP1	0,25	56
CMP1	0,06	1

Trong thử nghiệm này, các hợp chất.019, I.027 và I.116 thể hiện hiệu lực ít nhất 90% khi được thử nghiệm ở liều 20 ppm hoặc 4 ppm trong khi đó các hợp chất CMP2, CMP3 và CMP4 có cấu tạo gần giống (không theo sáng chế) thể hiện hiệu lực thấp hơn nhiều ở liều 4 ppm, như được thể hiện trong bảng A2.

Bảng A2:

Ví dụ	Hiệu lực		
	20 ppm	4 ppm	1 ppm
I.019	97	98	45
CMP2	93	46	0
I.027	100	94	85
CMP3	96	25	0
I.116	100	100	90
CMP4	44	11	0

Ví dụ B: Thử nghiệm ngăn ngừa *in vivo* trên *Botrytis cinerea* (mốc xám)

Dung môi: 5% thể tích dimetyl sulfoxit

10% thể tích axeton

Chất nhũ hóa: 1 µL Tween® 80 trên một mg thành phần hoạt tính

Các hợp chất thử nghiệm được hòa tan và đồng hóa trong hỗn hợp dimetyl sulfoxit/axeton/ Tween® 80 và sau đó pha loãng trong nước đến nồng độ mong muốn.

Các cây dưa chuột ri non được xử lý bằng cách phun các hợp chất thử nghiệm được điều chế như đã mô tả ở trên. Các cây đối chứng chỉ được xử lý bằng dung dịch nước chứa axeton/dimetyl sulfoxit/Tween® 80.

Sau thời gian 24 giờ, các cây được gây nhiễm bằng cách phun lên lá bằng huyền phù nước chứa bào tử *Botrytis cinerea*. Các cây dưa chuột ri đã gây nhiễm được ủ trong thời gian 4 đến 5 ngày ở nhiệt độ 17°C và độ ẩm tương đối 90%.

Thử nghiệm được đánh giá 4 đến 5 ngày sau khi ủ. 0% có nghĩa là hiệu lực tương ứng với hiệu lực của cây đối chứng trong khi hiệu lực 100% có nghĩa là không quan sát thấy bệnh xuất hiện.

Trong thử nghiệm này, các hợp chất theo sáng chế sau thể hiện hiệu lực nằm trong khoảng từ 70% đến 79% ở nồng độ 500 ppm thành phần hoạt tính: I.013; I.033; I.096; I.116.

Trong thử nghiệm này, các hợp chất theo sáng chế sau thể hiện hiệu lực nằm trong khoảng từ 80% đến 89% ở nồng độ 500 ppm thành phần hoạt tính: I.005; I.053; I.056; I.069; I.089.

Trong thử nghiệm này, các hợp chất theo sáng chế sau thể hiện hiệu lực nằm trong khoảng từ 90% đến 100% ở nồng độ 500 ppm thành phần hoạt tính: I.006; I.020; I.021; I.022; I.023; I.024; I.025; I.026; I.027; I.028; I.029; I.030; I.031; I.032; I.037; I.040; I.046; I.047; I.049; I.054; I.055; I.071; I.078; I.079; I.080; I.081; I.082; I.084; I.085; I.086; I.087; I.088; I.090; I.094; I.095; I.097; I.098; I.099; I.100.

Trong thử nghiệm này, các hợp chất I.027 và I.116 thể hiện hiệu lực ít nhất 70% khi được thử nghiệm ở liều 500 ppm trong khi đó các hợp chất CMP3 và CMP4 có cấu tạo gần giống (không theo sáng chế) không thể hiện hiệu lực ở liều 500 ppm, như được thể hiện trong bảng B.

Bảng B:

Ví dụ	liều (ppm)	Hiệu lực
I.027	500	92
CMP3	500	0
I.116	500	73
CMP4	500	0

Ví dụ C: Thử nghiệm ngăn ngừa *in vivo* trên *Leptosphaeria nodorum* (lúa mỳ)

Dung môi: 49 phần khối lượng N,N-dimethylacetamid

Chất nhũ hóa: 1 phần khối lượng alkylaryl polyglycol ete

Để tạo ra chế phẩm thích hợp chứa hoạt chất, 1 phần khối lượng hoạt chất được trộn với lượng xác định dung môi và chất nhũ hóa, và thể đặc này được pha loãng bằng nước đến nồng độ mong muốn.

Để thử nghiệm về hoạt tính phòng ngừa, các cây non được phun bằng chế phẩm chứa hoạt chất theo tỷ lệ áp dụng đã đưa ra.

Sau khi lớp phun phủ đã khô, các cây được phun huyền phù nước chứa bào tử *Leptosphaeria nodorum*. Các cây được giữ 48 giờ trong phòng ủ ở khoảng 20°C và độ ẩm tương đối của khí quyển là khoảng 100%.

Các cây được đặt trong nhà kính ở nhiệt độ khoảng 25°C và độ ẩm tương đối của khí quyển khoảng 80%.

Thử nghiệm được đánh giá 8 ngày sau khi ủ. 0% có nghĩa là hiệu quả tương ứng với hiệu quả của cây đối chứng trong khi hiệu quả 100% có nghĩa là không hề quan sát thấy bệnh xuất hiện.

Trong thử nghiệm này, các hợp chất theo sáng chế sau thể hiện hiệu lực nằm trong khoảng từ 90% đến 100% ở nồng độ 500 ppm thành phần hoạt tính: I.025; I.026; I.085.

Ví dụ D: Thử nghiệm phòng ngừa *in vivo* trên *Septoria tritici* (bệnh đốm lá ở lúa mì)

Dung môi: 5% thể tích dimethyl sulfoxit

10% thể tích axeton

Chất nhũ hóa: 1 µL Tween® 80 trên một mg thành phần hoạt tính

Các hoạt chất được hòa tan và đồng hóa trong hỗn hợp dimethyl sulfoxit/axeton/Tween® 80 và tiếp theo được pha loãng trong nước tới nồng độ mong muốn.

Cây lúa mì non được xử lý bằng cách phun hoạt chất được điều chế như đã mô tả ở trên. Các cây đối chứng chỉ được xử lý bằng dung dịch nước chứa axeton/dimetyl sulfoxit/Tween® 80.

Sau thời gian 24 giờ, các cây được gây nhiễm bằng cách phun lên lá bằng huyền phù nước chứa các bào tử *Septoria tritici*. Các cây lúa mì đã gây nhiễm được ủ trong thời gian 72 giờ ở nhiệt độ 18°C và độ ẩm tương đối 100% và sau đó, trong thời gian 21 ngày ở nhiệt độ 20°C và tại độ ẩm tương đối 90%.

Thử nghiệm được đánh giá 24 ngày sau khi ủ. 0% có nghĩa là hiệu lực tương ứng với hiệu lực của cây đối chứng trong khi hiệu lực 100% có nghĩa là không quan sát thấy bệnh xuất hiện.

Trong thử nghiệm này, các hợp chất theo sáng chế sau thể hiện hiệu lực nằm trong khoảng từ 70% đến 79% ở nồng độ 500 ppm thành phần hoạt tính: I.048; I.109; I.112; I.116.

Trong thử nghiệm này, các hợp chất theo sáng chế sau thể hiện hiệu lực nằm trong khoảng từ 80% đến 89% ở nồng độ 500 ppm thành phần hoạt tính: I.024; I.033; I.051.

Trong thử nghiệm này, các hợp chất theo sáng chế sau thể hiện hiệu lực nằm trong khoảng từ 90% đến 100% ở nồng độ 500 ppm thành phần hoạt tính: I.025; I.026; I.030; I.032; I.034; I.049; I.081; I.082; I.085; I.087; I.090; I.091; I.094; I.095; I.097; I.117.

Trong cùng điều kiện, đã quan sát thấy khả năng bảo vệ cao (ít nhất 80%) ở liều 500 ppm hợp chất I.024, trong khi đó không quan sát thấy khả năng bảo vệ của hợp chất CMP1, như được thể hiện trong bảng D:

Bảng D:

Hợp chất	liều (ppm)	Hiệu lực
I.024	500	81
CMP1	500	0

Ví dụ E: Thử nghiệm ngăn ngừa in vivo trên *Venturia* (táo)

Dung môi: 24,5 phần khối lượng axeton

24,5 phần khối lượng N,N-dimetylaxetamit

Chất nhũ hóa: 1 phần khối lượng alkylaryl polyglycol ete

Để tạo ra chế phẩm thích hợp chứa hoạt chất, 1 phần khối lượng hoạt chất được trộn với lượng xác định dung môi và chất nhũ hóa, và thể đặc này được pha loãng bằng nước đến nồng độ mong muốn.

Để thử nghiệm về hoạt tính phòng ngừa, các cây non được phun bằng chế phẩm chứa hoạt chất theo tỷ lệ áp dụng đã đưa ra. Sau khi lớp phun phủ đã khô, các cây được ủ với huyền phù nước chứa bào tử đỉnh của tác nhân gây bệnh ghẻ táo (*Venturia inaequalis*) và sau đó giữ 1 ngày trong phòng ủ ở khoảng 20°C và độ ẩm tương đối của khí quyển là 100%.

Sau đó, các cây được đặt trong nhà kính ở khoảng 21°C và độ ẩm tương đối của khí quyển là khoảng 90%.

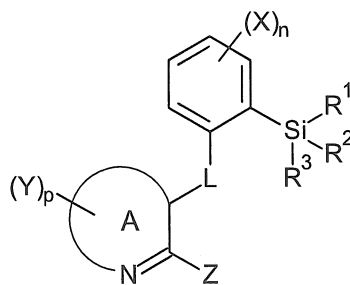
Thử nghiệm được đánh giá 10 ngày sau khi ủ. 0% có nghĩa là hiệu quả tương ứng với hiệu quả của cây đối chứng trong khi hiệu quả 100% có nghĩa là không hề quan sát thấy bệnh xuất hiện.

Trong thử nghiệm này, các hợp chất theo sáng chế sau thể hiện hiệu lực nằm trong khoảng từ 80% đến 89% ở nồng độ 250 ppm thành phần hoạt tính: I.031; I.032.

Trong thử nghiệm này, các hợp chất theo sáng chế sau thể hiện hiệu lực nằm trong khoảng từ 90% đến 100% ở nồng độ 250 ppm thành phần hoạt tính: I.020; I.021; I.022; I.023; I.025; I.026; I.037; I.046; I.047; I.049; I.054; I.071; I.079; I.082; I.085; I.086; I.087; I.088; I.090.

YÊU CẦU BẢO HỘ

1. Hợp chất có công thức (I):



(I)

trong đó:

- A là vòng heterocyclyl 9, 10 hoặc 11 cạnh hai vòng ngưng tụ no hoặc không no từng phần chứa ít nhất 1 nguyên tử nitơ và từ 0 đến 4 nguyên tử khác loại nữa độc lập được chọn từ danh mục gồm N, O và S;
- Z được chọn từ nhóm gồm nguyên tử hydro, nguyên tử halogen, C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C₂-C₈-alkenyl không được thế hoặc được thế, C₂-C₈-halogenoalkenyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C₂-C₈-alkynyl không được thế hoặc được thế, C₂-C₈-halogenoalkynyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C₃-C₇-xycloalkyl không được thế hoặc được thế, C₄-C₇-xycloalkenyl không được thế hoặc được thế, hydroxyl, C₁-C₈-alkoxy không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-halogenoalkoxy chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, aryl không được thế hoặc được thế, heterocyclyl không được thế hoặc được thế, formyl, C₁-C₈-alkylcarbonyl không được thế hoặc được thế, (hydroxyimino)C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, (C₁-C₈-alkoxyimino)C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, carboxyl, C₁-C₈-alkoxycarbonyl không được thế hoặc được thế, carbamoyl, C₁-C₈-alkylcarbamoyl không được thế hoặc được thế, di-C₁-C₈-alkylcarbamoyl không được thế hoặc được thế, amino, C₁-C₈-alkylamino không được thế hoặc được thế, di-C₁-C₈-alkylamino không được thế hoặc được thế, sulfanyl, C₁-C₈-alkylsulfanyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-alkylsulfinyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-alkylsulfonyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₆-trialkylsilyl không được thế hoặc được thế, xyano và nitro;

- n là 0, 1, 2, 3 hoặc 4;
- p là 0, 1, 2, 3, 4 hoặc 5;
- L là O, S, SO, SO₂, CR⁴R⁵ hoặc NR⁶ trong đó
 - R⁴ và R⁵ độc lập được chọn từ nhóm gồm nguyên tử hydro, nguyên tử halogen, hydroxyl, C₁-C₈-alkoxy không được thế hoặc được thế và C₁-C₈ alkyl không được thế hoặc được thế, hoặc chúng có thể cùng với nguyên tử cacbon mà chúng gắn vào tạo thành nhóm cacbonyl;
 - R⁶ được chọn từ nhóm gồm nguyên tử hydro, C₁-C₈-alkyl được thế hoặc không được thế, C₁-C₈-halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C₂-C₈-alkenyl không được thế hoặc được thế, C₂-C₈-halogenoalkenyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C₃-C₈-alkynyl không được thế hoặc được thế, C₃-C₈-halogenoalkynyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C₃-C₇-xycloalkyl không được thế hoặc được thế, C₃-C₇-halogenoxycloalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C₃-C₇-xycloalkyl-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, formyl, C₁-C₈-alkylcacbonyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-halogenoalkylcacbonyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C₁-C₈-alkoxycacbonyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-halogenoalkoxycacbonyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C₁-C₈-alkylsulfonyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-halogenoalkylsulfonyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, aryl-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế và phenylsulfonyl không được thế hoặc được thế;
- X độc lập được chọn từ nhóm gồm nguyên tử halogen, C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C₂-C₈-alkenyl không được thế hoặc được thế, C₂-C₈-halogenoalkenyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C₂-C₈-alkynyl không được thế hoặc được thế, C₂-C₈-halogenoalkynyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C₃-C₇-xycloalkyl không được thế hoặc được thế, C₄-C₇-xycloalkenyl không được thế hoặc được thế, hydroxyl, C₁-C₈-alkoxy không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-halogenoalkoxy chứa

không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, aryl không được thế hoặc được thế, heteroxyclyl không được thế hoặc được thế, formyl, C₁-C₈-alkylcarbonyl không được thế hoặc được thế, (hydroxyimino)C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, (C₁-C₈-alkoxyimino)C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, carboxyl, C₁-C₈-alkoxycarbonyl không được thế hoặc được thế, carbamoyl, C₁-C₈-alkylcarbamoyl không được thế hoặc được thế, di-C₁-C₈-alkylcarbamoyl không được thế hoặc được thế, amino, C₁-C₈-alkylamino không được thế hoặc được thế, di-C₁-C₈-alkylamino không được thế hoặc được thế, sulfanyl, C₁-C₈-alkylsulfanyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-alkylsulfinyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-alkylsulfonyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₆-trialkylsilyl không được thế hoặc được thế, xyano, nitro, hydroxymetyl và (tetrahydro-2H-pyran-2-yloxy)metyl;

- Y độc lập được chọn từ nhóm gồm nguyên tử halogen, C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C₂-C₈-alkenyl không được thế hoặc được thế, C₂-C₈-halogenoalkenyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C₂-C₈-alkynyl không được thế hoặc được thế, C₂-C₈-halogenoalkynyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C₃-C₇-xycloalkyl không được thế hoặc được thế, C₄-C₇-xycloalkenyl không được thế hoặc được thế, hydroxyl, C₁-C₈-alkoxy không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-halogenoalkoxy chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, aryl không được thế hoặc được thế, heteroxyclyl không được thế hoặc được thế, formyl, C₁-C₈-alkylcarbonyl không được thế hoặc được thế, (hydroxyimino)C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, (C₁-C₈-alkoxyimino)C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, carboxyl, C₁-C₈-alkoxycarbonyl không được thế hoặc được thế, carbamoyl, C₁-C₈-alkylcarbamoyl không được thế hoặc được thế, di-C₁-C₈-alkylcarbamoyl không được thế hoặc được thế, amino, C₁-C₈-alkylamino không được thế hoặc được thế, di-C₁-C₈-alkylamino không được thế hoặc được thế, sulfanyl, C₁-C₈-alkylsulfanyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-alkylsulfinyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-alkylsulfonyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₆-trialkylsilyl không được thế hoặc được thế, xyano và nitro;

- R^1 được chọn từ nhóm gồm C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, C_2 - C_8 -alkenyl không được thế hoặc được thế, C_2 - C_8 -alkynyl không được thế hoặc được thế, C_3 - C_7 -xycloalkyl không được thế hoặc được thế, C_4 - C_7 -xycloalkenyl không được thế hoặc được thế, aryl không được thế hoặc được thế và heteroxyclyl không được thế hoặc được thế;
- R^2 được chọn từ nhóm gồm hydroxyl không được thế hoặc được thế, C_1 - C_8 -alkoxy không được thế hoặc được thế, C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, C_2 - C_8 -alkenyl không được thế hoặc được thế, C_2 - C_8 -alkynyl không được thế hoặc được thế, C_3 - C_7 -xycloalkyl không được thế hoặc được thế, C_4 - C_7 -xycloalkenyl không được thế hoặc được thế, aryl không được thế hoặc được thế và heteroxyclyl không được thế hoặc được thế;
- Khi R^1 và R^2 là C_1 - C_8 alkyl không được thế hoặc được thế hoặc C_2 - C_8 alkenyl không được thế hoặc được thế, chúng có thể cùng với nguyên tử silic mà chúng gắn vào tạo thành vòng C_3 - C_8 -silaxycloalkyl không được thế hoặc được thế hoặc vòng C_4 - C_8 -silaxycloalkenyl không được thế hoặc được thế;
- R^3 được chọn từ nhóm gồm nguyên tử hydro, nguyên tử halogen, C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, C_1 - C_8 -halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C_2 - C_8 -alkenyl không được thế hoặc được thế, C_2 - C_8 -alkynyl không được thế hoặc được thế, C_3 - C_7 -xycloalkyl không được thế hoặc được thế, C_4 - C_7 -xycloalkenyl không được thế hoặc được thế, hydroxyl, C_1 - C_8 -alkoxy không được thế hoặc được thế, aryl không được thế hoặc được thế, aryl- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, heteroxyclyl không được thế hoặc được thế, heteroxyclyl- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, hydroxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, C_1 - C_8 -alkoxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, C_1 - C_8 -alkylcacbonyloxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, aryloxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, heteroxyclyloxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, amino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, C_1 - C_8 -alkylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, di- C_1 - C_8 -alkylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, arylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, di-arylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, heteroxyclylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, C_1 - C_8 -alkylcacbonylamino- C_1 - C_8 -alkyl không

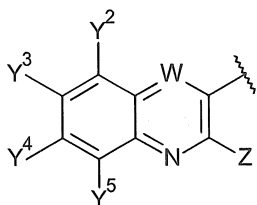
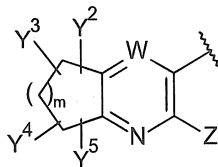
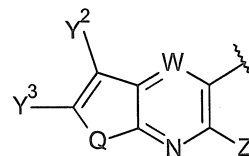
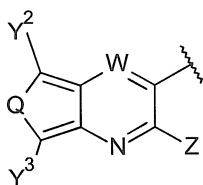
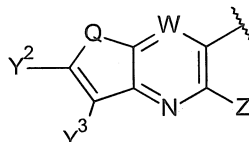
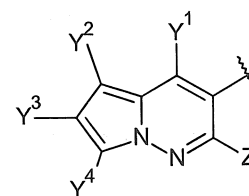
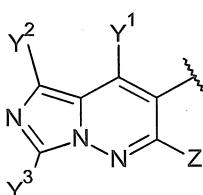
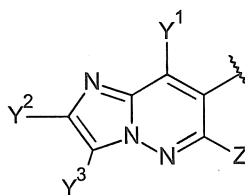
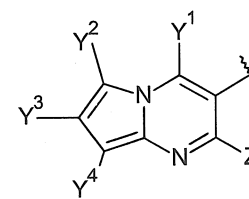
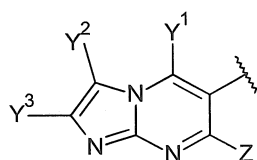
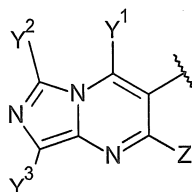
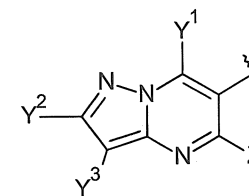
được thế hoặc được thế, C₁-C₈-alkoxycarbonylamino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-alkylsulfanyl-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-alkylsulfinyl-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-alkylsulfonyl-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế và xyano-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế;

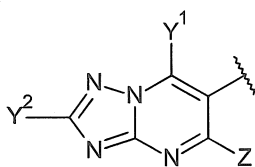
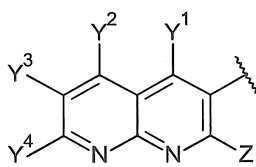
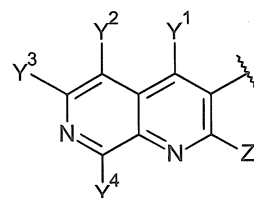
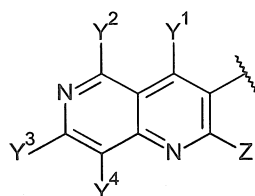
- R³ và X, khi X này nằm gần SiR¹R²R³, có thể, cùng với nguyên tử silic và nguyên tử cacbon mà chúng lần lượt gắn vào, tạo thành dị vòng 5, 6 hoặc 7 cạnh, no từng phần không được thế hoặc được thế;
- Khi R² là C₁-C₈-alkoxy không được thế hoặc được thế và R³ là C₁-C₈-alkoxy không được thế hoặc được thế hoặc C₁-C₈ alkyl không được thế hoặc được thế, chúng có thể, cùng với nguyên tử silic mà chúng gắn vào tạo thành dị vòng 5, 6 hoặc 7 cạnh không được thế hoặc được thế;

trong đó mỗi nhóm trong số các nhóm được thế có thể được thế bằng một hoặc nhiều phần tử thế độc lập được chọn từ nhóm gồm nguyên tử halogen, nitro, hydroxyl, xyano, amino, sulfanyl, pentafluoro-λ⁶-sulfanyl, formyl, carbamoyl, carbamat, C₁-C₈-alkyl, tri(C₁-C₈-alkyl)silyl, C₃-C₇-xycloalkyl, C₁-C₈-halogenoalkyl có 1 đến 5 nguyên tử halogen, C₃-C₈-halogenoxycycloalkyl có 1 đến 5 nguyên tử halogen, C₂-C₈-alkenyl, C₂-C₈-alkynyl, C₁-C₈-alkylamino, di-C₁-C₈-alkylamino, C₁-C₈-alkoxy, C₁-C₈-halogenoalkoxy có 1 đến 5 nguyên tử halogen, C₁-C₈-alkylsulfanyl, C₁-C₈-halogenoalkylsulfanyl có 1 đến 5 nguyên tử halogen, C₁-C₈-alkylcarbonyl, C₁-C₈-halogenoalkylcarbonyl có 1 đến 5 nguyên tử halogen, C₁-C₈-alkylcarbamoyl, di-C₁-C₈-alkylcarbamoyl, C₁-C₈-halogenoalkoxycarbonyl có 1 đến 5 nguyên tử halogen, C₁-C₈-alkylcarbonyloxy, C₁-C₈-halogenoalkylcarbonyloxy có 1 đến 5 nguyên tử halogen, C₁-C₈-alkylcarbonylamino, C₁-C₈-halogenoalkylcarbonylamino có 1 đến 5 nguyên tử halogen, C₁-C₈-alkylsulfanyl, C₁-C₈-halogenoalkylsulfanyl có 1 đến 5 nguyên tử halogen, C₁-C₈-alkylsulfinyl, C₁-C₈-halogenoalkylsulfinyl có 1 đến 5 nguyên tử halogen, C₁-C₈-alkylsulfonyl và C₁-C₈-halogenoalkylsulfonyl có 1 đến 5 nguyên tử halogen; cũng như muối, N-oxit và các chất đồng phân hoạt động về mặt quang học hoặc các chất đồng phân hình học của nó.

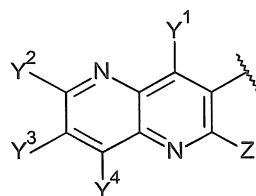
2. Hợp chất theo điểm 1, trong đó Y độc lập được chọn từ nhóm gồm nguyên tử halogen, C₁-C₆-alkyl được thế hoặc không được thế, C₁-C₆-halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C₁-C₆-alkoxy không được thế hoặc được thế, C₁-C₆-halogenoalkoxy chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau và xyano.

3. Hợp chất theo điểm 1 hoặc 2, trong đó A được chọn từ danh mục gồm:

(A¹)(A²)(A³)(A⁴)(A⁵)(A⁶)(A⁷)(A⁸)(A⁹)(A¹⁰)(A¹¹)(A¹²)

(A¹³)(A¹⁴)(A¹⁵)(A¹⁶)

và

(A¹⁷)

trong đó:

W là CY¹ hoặc N;

Q là O, S hoặc NY⁶ với Y⁶ là nguyên tử hydro hoặc C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế;

Y¹, Y², Y³, Y⁴ và Y⁵ độc lập là nguyên tử hydro hoặc Y như được xác định trong điểm 1 hoặc 2;

Z như được xác định trong điểm 1; và

m là 1, 2 hoặc 3.

4. Hợp chất theo điểm bất kỳ trong số các điểm nêu trên, trong đó Z được chọn từ nhóm gồm nguyên tử hydro, nguyên tử halogen, hydroxyl, C₁-C₆-alkyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₆-halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C₁-C₆-alkoxy không được thế hoặc được thế, C₁-C₆-halogenoalkoxy chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau và xyano.

5. Hợp chất theo điểm bất kỳ trong số các điểm nêu trên, trong đó X độc lập là nguyên tử halogen hoặc nhóm C₁-C₆-alkyl không được thế hoặc được thế.

6. Hợp chất theo điểm bất kỳ trong số các điểm nêu trên, trong đó L là O hoặc CH₂.

7. Hợp chất theo điểm bất kỳ trong số các điểm nêu trên, trong đó n là 0 hoặc 1.

8. Hợp chất theo điểm bất kỳ trong số các điểm nêu trên, trong đó:

- R^1 là C_1 - C_6 -alkyl không được thế hoặc được thế; và/hoặc
- R^2 là C_1 - C_6 -alkyl không được thế hoặc được thế; và/hoặc
- R^3 được chọn từ nhóm gồm nguyên tử hydro, C_1 - C_6 -alkyl không được thế hoặc được thế, C_3 - C_7 -xycloalkyl không được thế hoặc được thế, aryl không được thế hoặc được thế, aryl- C_1 - C_6 -alkyl không được thế hoặc được thế, heteroxyclyl không được thế hoặc được thế, heteroxyclyl- C_1 - C_6 -alkyl không được thế hoặc được thế và hydroxyl.

9. Hợp chất theo điểm bất kỳ trong số các điểm nêu trên, trong đó A được chọn từ danh mục gồm A^1 , A^2 , A^3 , A^5 , A^{10} , A^{12} và A^{17} như được xác định trong điểm 3, tốt hơn là trong đó A là A^1 .

10. Hợp chất theo điểm bất kỳ trong số các điểm nêu trên, trong đó A là dị vòng có công thức (A^1) như được xác định trong điểm 3, trong đó:

W là CY^1 hoặc N;

Y^1 đến Y^5 độc lập là nguyên tử hydro, nguyên tử flo hoặc nhóm methyl; và

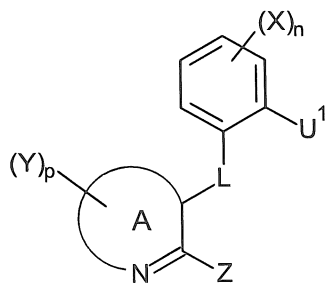
Z là nguyên tử hydro hoặc nhóm methyl.

11. Chế phẩm phòng trừ vi sinh vật không mong muốn chứa một hoặc nhiều hợp chất có công thức (I) theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 10 và một hoặc nhiều chất mang chấp nhận được.

12. Phương pháp phòng trừ vi sinh vật không mong muốn gây bệnh ở thực vật bao gồm bước áp dụng một hoặc nhiều hợp chất có công thức (I) theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 10 hoặc chế phẩm theo điểm 11 lên các vi sinh vật này và/hoặc môi trường sống của chúng.

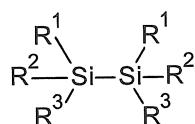
13. Quy trình điều chế hợp chất có công thức (I) theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 10 bao gồm bước:

- cho halogenoaryl có công thức (II) hoặc một trong số các muối của nó:



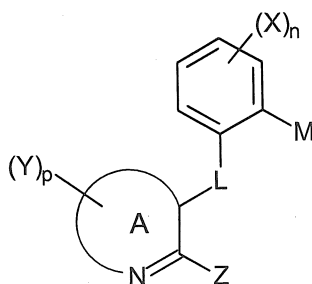
(II)

trong đó A, L, n, p, X, Y và Z như được xác định trong điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 8 và U^1 là nguyên tử clo, nguyên tử brom, nguyên tử iot, nhóm mesyl, nhóm tosyl hoặc nhóm triflyl, phản ứng với dẫn xuất disilyl có công thức (IIIa):



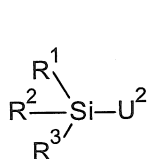
(IIIa)

trong đó R^1 , R^2 và R^3 như được xác định trong điểm 1 hoặc 8; hoặc
- cho hợp chất có công thức (VI) hoặc một trong số các muối của nó:

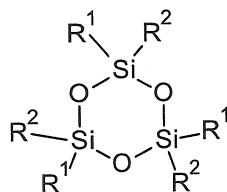


(VI)

trong đó A, L, n, p, X, Y và Z như được xác định trong điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 10 và M là kim loại kiềm mà có thể được tạo phức bằng 1 đến 2 phối tử hoặc halogenomagnezium mà có thể được tạo phức bằng 1 đến 2 phối tử, phản ứng với dẫn xuất silyl có công thức (IIIb) hoặc dẫn xuất silyl có công thức (IIIc):



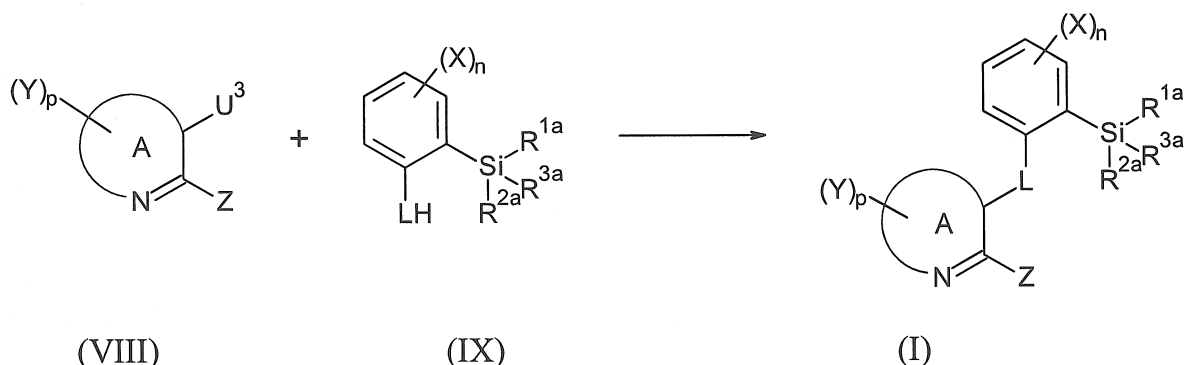
(IIIb)



(IIIc)

trong đó R^1 , R^2 và R^3 như được xác định trong điểm 1 hoặc 8 và U^2 là nguyên tử clo, nguyên tử brom, nguyên tử iot hoặc C_1 - C_6 -alkoxy không được thế hoặc được thế; hoặc

- cho hợp chất có công thức (VIII) hoặc một trong số các muối của nó phản ứng với hợp chất có công thức (IX):



trong đó L là O, S hoặc NR⁶;

U³ là nguyên tử clo, nguyên tử brom, nguyên tử iot, nhóm mesyl, nhóm tosyl hoặc nhóm triflyl;

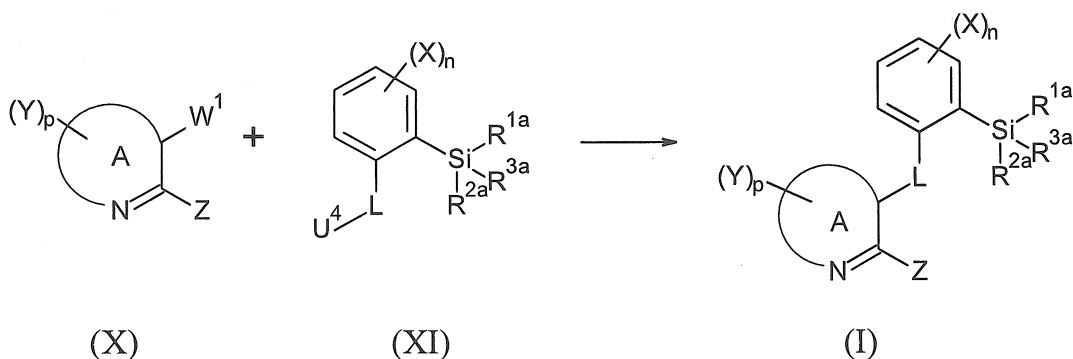
R^{1a} và R^{2a} độc lập là C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, C₂-C₈-alkenyl không được thế hoặc được thế, C₃-C₇-xycloalkyl không được thế hoặc được thế, aryl không được thế hoặc được thế hoặc heteroxyclyl không được thế hoặc được thế; và

R^{3a} là nguyên tử hydro, C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C₂-C₈-alkenyl không được thế hoặc được thế, C₂-C₈-alkynyl không được thế hoặc được thế, C₃-C₇-xycloalkyl không được thế hoặc được thế, C₄-C₇-xycloalkenyl không được thế hoặc được thế, aryl không được thế hoặc được thế, aryl-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, heteroxyclyl không được thế hoặc được thế, heteroxyclyl-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, hydroxy-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-alkoxy-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-alkylcarbonyloxy-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, aryloxy-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, heteroxyclyloxy-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, amino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-alkylamino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, di-C₁-C₈-alkylamino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, arylamino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, di-arylamino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, heteroxyclylamino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-alkylcarbonylamino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-alkoxycarbonylamino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-alkylsulfanyl-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-alkylsulfinyl-C₁-C₈-alkyl không được

thể hoặc được thể, C₁-C₈-alkylsulfonyl-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể hoặc xyano-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể; và

A, n, p, X, Y, R⁶ và Z như được xác định trong điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 10; hoặc

- cho hợp chất có công thức (X) hoặc một trong số các muối của nó phản ứng với hợp chất có công thức (XI):



trong đó L là CR⁴R⁵;

R⁴ và R⁵ độc lập là nguyên tử hydro hoặc C₁-C₈ alkyl không được thể hoặc được thể;

U⁴ là nguyên tử brom, nguyên tử clo, nguyên tử iot, nhóm mesyl, nhóm tosyl hoặc nhóm triflyl;

W¹ là axit boronic, este boronic hoặc kali trifloborat;

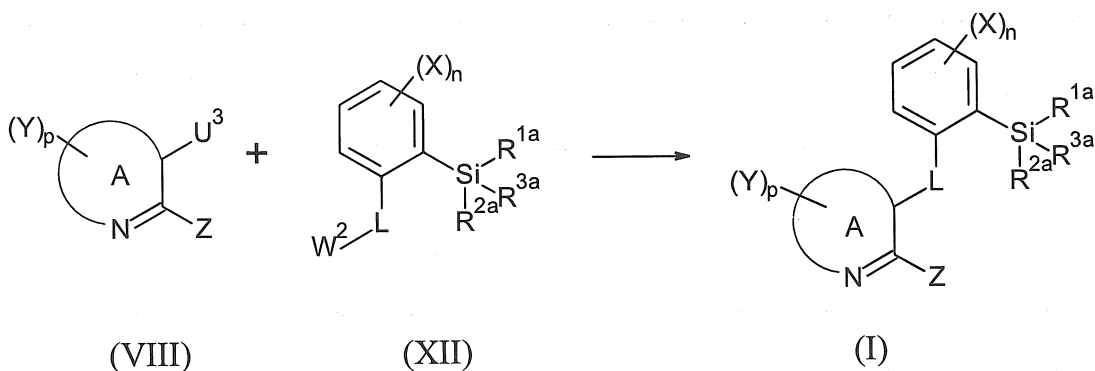
R^{1a} và R^{2a} độc lập là C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể, C₂-C₈-alkenyl không được thể hoặc được thể, C₃-C₇-xycloalkyl không được thể hoặc được thể, aryl không được thể hoặc được thể, hoặc heteroxyclyl không được thể hoặc được thể;

R^{3a} là nguyên tử hydro, C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể, C₁-C₈-halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C₂-C₈-alkenyl không được thể hoặc được thể, C₂-C₈-alkynyl không được thể hoặc được thể, C₃-C₇-xycloalkyl không được thể hoặc được thể, C₄-C₇-xycloalkenyl không được thể hoặc được thể, aryl không được thể hoặc được thể, aryl-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể, heteroxyclyl không được thể hoặc được thể, heteroxyclyl-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể, hydroxy-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể, C₁-C₈-alkoxy-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể, C₁-C₈-alkylcarbonyloxy-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể, aryloxy-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể, heteroxycyloxy-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể, amino-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể, C₁-C₈-alkylamino-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc

được thế, di- C_1 - C_8 -alkylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, arylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, di-arylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, heteroxycylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, C_1 - C_8 -alkylcacbonylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, C_1 - C_8 -alkoxycacbonylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, C_1 - C_8 -alkylsulfanyl- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, C_1 - C_8 -alkylsulfinyl- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, C_1 - C_8 -alkylsulfonyl- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế hoặc xyano- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; và

A, n, p, X, Y và Z như được xác định trong điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 10; hoặc

- cho hợp chất có công thức (VIII) hoặc một trong số các muối của nó phản ứng với hợp chất có công thức (XII):



trong đó L là CR^4R^5 ;

R^4 và R^5 độc lập là nguyên tử hydro, C_1 - C_8 -alkoxy không được thế hoặc được thế hoặc C_1 - C_8 alkyl không được thế hoặc được thế;

U^3 là nguyên tử brom, nguyên tử clo, nguyên tử iot, nhóm mesyl, nhóm tosyl hoặc nhóm triflyl;

W^2 là axit boronic, este boronic hoặc kali trifloborat;

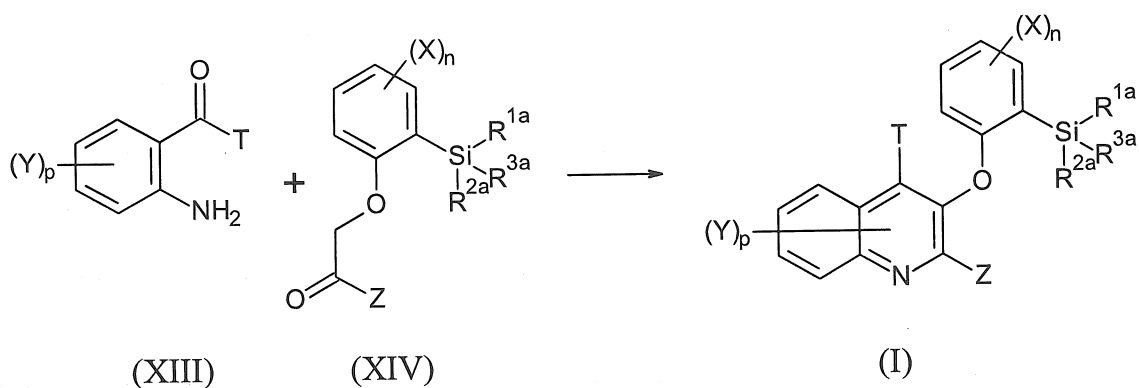
R^{1a} và R^{2a} độc lập là C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, C_2 - C_8 -alkenyl không được thế hoặc được thế, C_3 - C_7 -xycloalkyl không được thế hoặc được thế, aryl không được thế hoặc được thế, hoặc heteroxycyl không được thế hoặc được thế;

R^{3a} là nguyên tử hydro, C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, C_1 - C_8 -halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C_2 - C_8 -alkenyl không được thế hoặc được thế, C_2 - C_8 -alkynyl không được thế hoặc được thế, C_3 - C_7 -xycloalkyl không được thế hoặc được thế, C_4 - C_7 -xycloalkenyl không được

thể hoặc được thể, aryl không được thể hoặc được thể, aryl-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể, heteroxyclyl không được thể hoặc được thể, heteroxyclyl-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể, hydroxy-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể, C₁-C₈-alkoxy-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể, C₁-C₈-alkylcacbonyloxy-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể, aryloxy-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể, heteroxycyloxy-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể, amino-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể, C₁-C₈-alkylamino-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể, di-C₁-C₈-alkylamino-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể, arylamino-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể, di-arylamino-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể, heteroxycylamino-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể, C₁-C₈-alkylcacbonylamino-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể, C₁-C₈-alkoxycacbonylamino-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể, C₁-C₈-alkylsulfanyl-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể, C₁-C₈-alkylsulfinyl-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể, C₁-C₈-alkylsulfonyl-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể hoặc xcyano-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể; và

A, n, p, X, Y và Z như được xác định trong điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 10; hoặc

- cho hợp chất có công thức (XIII) hoặc một trong số các muối của nó phản ứng với hợp chất có công thức (XIV):



trong đó T là nguyên tử hydro, C₁-C₈ alkyl không được thể hoặc được thể, C₃-C₇-xycloalkyl không được thể hoặc được thể, aryl không được thể hoặc được thể, hoặc heteroxyclyl không được thể hoặc được thể;

p là 0, 1, 2, 3 hoặc 4;

Z là C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể, C₃-C₇-xycloalkyl không được thể hoặc được thể, aryl không được thể hoặc được thể hoặc heteroxyclyl không được thể hoặc được thể;

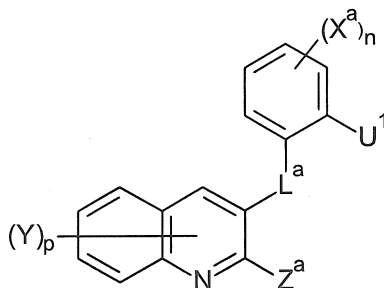
R^{1a} và R^{2a} độc lập là C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, C_2 - C_8 -alkenyl không được thế hoặc được thế, C_3 - C_7 -xycloalkyl không được thế hoặc được thế, aryl không được thế hoặc được thế, hoặc heteroxyclyl không được thế hoặc được thế;

R^{3a} là nguyên tử hydro, hoặc C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, C_1 - C_8 -halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C_2 - C_8 -alkenyl không được thế hoặc được thế, C_2 - C_8 -alkynyl không được thế hoặc được thế, C_3 - C_7 -xycloalkyl không được thế hoặc được thế, C_4 - C_7 -xycloalkenyl không được thế hoặc được thế, aryl không được thế hoặc được thế, aryl- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, heteroxyclyl không được thế hoặc được thế, heteroxyclyl- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, hydroxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, C_1 - C_8 -alkoxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, C_1 - C_8 -alkylcacbonyloxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, aryloxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, heteroxyclyloxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, amino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, C_1 - C_8 -alkylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, di- C_1 - C_8 -alkylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, arylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, di-arylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, heteroxyclylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, C_1 - C_8 -alkylcacbonylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, C_1 - C_8 -alkoxycarbonylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, C_1 - C_8 -alkylsulfanyl- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, C_1 - C_8 -alkylsulfinyl- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, C_1 - C_8 -alkylsulfonyl- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, hoặc xyano- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; và

n , X và Y như được xác định trong điểm 1.

14. Hợp chất trung gian để điều chế hợp chất có công thức (I) theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 10, trong đó hợp chất này được chọn từ nhóm gồm:

- các hợp chất có công thức (IIa):



(IIa)

trong đó:

L^a là O, S, CH_2 hoặc NR^6 ;

U^1 là nguyên tử clo, nguyên tử brom, nguyên tử iot, nhóm mesyl, nhóm tosyl hoặc nhóm triflyl;

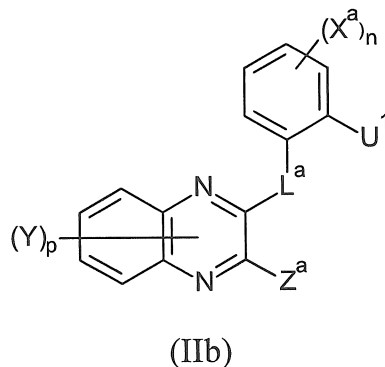
X^a là nguyên tử halogen, nhóm C_1 - C_8 -alkyl, nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkyl chứa 2 đến 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, nhóm C_1 - C_8 -alkoxy, nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkoxy chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, nhóm C_1 - C_8 -alkylsulfanyl, nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkylsulfanyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau hoặc xyano;

Z^a là nguyên tử hydro, nguyên tử halogen, nhóm C_1 - C_8 -alkyl, nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, nhóm C_1 - C_8 -alkoxy, nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkoxy chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, nhóm C_1 - C_8 -alkylsulfanyl, hoặc nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkylsulfanyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau; và

n, p, Y và R^6 như được xác định trong điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 10, với điều kiện là hợp chất có công thức (IIa) không phải là:

- 3-(2-clobenzyl)-2-metoxi-6-(pyridin-3-yl)quinolin [1574532-60-7],
- 3-clo-4-(quinolin-3-ylamino)benzonitril [1407301-89-6],
- 8-flo-3-(3-flo-2-iodophenoxy)quinolin [1314012-45-7],
- 3-[(2-bromophenyl)sulfanyl]quinolin [1299398-51-8],
- N-(2-clophenyl)quinolin-3-amin [1021328-11-9],
- 6-bromo-3-(2-clobenzyl)-2-metoxiquinolin [930406-96-5],
- 2-clo-3-(2-clobenzyl)-6-floquinolin [924658-62-8],
- 2-clo-3-(2-clobenzyl)quinolin [924658-58-2],
- N-[2-bromo-5-(triflometyl)phenyl]quinolin-3-amin [891779-92-3],
- N-(2-bromo-4-clophenyl)quinolin-3-amin [891779-90-1],
- N-(2-bromo-4-metylphenyl)quinolin-3-amin [891779-88-7],
- 3-(2-bromo-4,5-dimetoxibenzyl)quinolin-4-ol [856100-31-7],
- 3-(2-bromo-4,5-dimetoxibenzyl)-4-cloquinolin [856089-71-9],
- 3-(2-clobenzyl)-4-phenyl-8-(triflometyl)quinolin [854770-03-9],

- N-(2-bromophenyl)quinolin-3-amin [848086-11-3],
 - 3-[(2-clophenyl)sulfanyl]-8-nitroquinolin [607743-29-3]; và
 - 3-bromo-4-(quinolin-3-ylamino)benzonitril [1551935-00-2];
- các hợp chất có công thức (IIb) cũng như muối chấp nhận được của chúng:



trong đó:

L^a là O, S, CH_2 hoặc NR^6 ;

U^1 là nguyên tử clo, nguyên tử brom, nguyên tử iot, nhóm mesyl, nhóm tosyl hoặc nhóm triflyl;

X^a là nguyên tử halogen, nhóm C_1 - C_8 -alkyl, nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkyl chứa 2 đến 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, nhóm C_1 - C_8 -alkoxy, nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkoxy chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, nhóm C_1 - C_8 -alkylsulfanyl, nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkylsulfanyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, hoặc xyano;

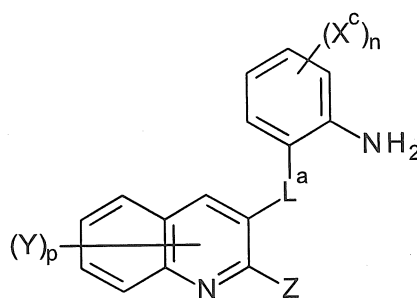
Z^a là nguyên tử hydro, nguyên tử halogen, nhóm C_1 - C_8 -alkyl, nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, nhóm C_1 - C_8 -alkoxy, nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkoxy chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, nhóm C_1 - C_8 -alkylsulfanyl, hoặc nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkylsulfanyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau; và

n , p , Y và R^6 như được xác định trong điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 10,

với điều kiện là hợp chất có công thức (IIb) không phải là:

- 2-(2-clophenoxy)-3-metylquinoxalin [1792986-07-2],
- 2-bromo-3-[(2-bromo-4-clophenyl)sulfanyl]quinoxalin [1674381-01-1],
- 2-bromo-3-(2-bromo-4-clophenoxy)quinoxalin [1674380-91-6],
- 2-(2-iodophenoxy)quinoxalin [1055190-73-2],

- N-[2,6-diclo-4-(triflometyl)phenyl]-3-(triflometyl)quinoxalin-2-amin [803726-02-5],
 - N-(2-clophenyl)-3-metylquinoxalin-2-amin [438481-21-1],
 - 2-[(2-clophenyl)sulfanyl]-3-(triflometyl)quinoxalin [338773-65-2],
 - 2-[(2-clophenyl)sulfanyl]quinoxalin [338394-57-3],
 - 2-(2-bromophenoxy)quinoxalin [223592-42-5],
 - 2-(2-clophenoxy)quinoxalin [223592-28-7],
 - N-(2,4-diclophenyl)quinoxalin-2-amin [128499-91-2], và
 - 2-(2-clobenzyl)quinoxalin [108852-34-2];
- các hợp chất có công thức (IVa) cũng như muối chấp nhận được của chúng:



(IVa)

trong đó:

L^a là O, S, CH_2 hoặc NR^6 ;

X^c là nguyên tử halogen, nhóm C_1 - C_8 -alkyl, nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, nhóm C_1 - C_8 -alkoxy, nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkoxy chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, nhóm C_1 - C_8 -alkylsulfanyl, nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkylsulfanyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, hoặc xyano; và

Z được chọn từ nhóm gồm nguyên tử hydro, nguyên tử halogen, C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, C_1 - C_8 -halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C_2 - C_8 -alkenyl không được thế hoặc được thế, C_2 - C_8 -halogenoalkenyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C_2 - C_8 -alkynyl không được thế hoặc được thế, C_2 - C_8 -halogenoalkynyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, C_3 - C_7 -xycloalkyl không được thế hoặc được thế, C_4 - C_7 -xycloalkenyl không được thế hoặc được thế, hydroxyl, C_1 - C_8 -alkoxy không được thế hoặc được thế, C_1 - C_8 -halogenoalkoxy chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, heteroxyclyl không được thế hoặc được thế,

formyl, C₁-C₈-alkylcarbonyl không được thế hoặc được thế, (hydroxyimino)C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, (C₁-C₈-alkoxyimino)C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế, carboxyl, C₁-C₈-alkoxycarbonyl không được thế hoặc được thế, carbamoyl, C₁-C₈-alkylcarbamoyl không được thế hoặc được thế, di-C₁-C₈-alkylcarbamoyl không được thế hoặc được thế, amino, C₁-C₈-alkylamino không được thế hoặc được thế, di-C₁-C₈-alkylamino không được thế hoặc được thế, sulfanyl, C₁-C₈-alkylsulfanyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-alkylsulfinyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₈-alkylsulfonyl không được thế hoặc được thế, C₁-C₆-trialkylsilyl không được thế hoặc được thế, xyano và nitro;

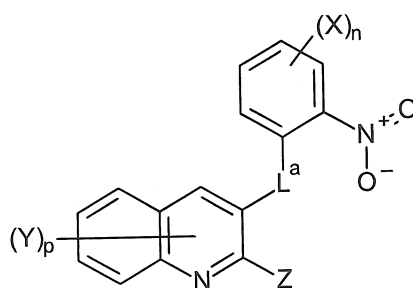
n, p, Y, và R⁶ như được xác định trong điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 10;

với điều kiện là hợp chất có công thức (IVa) không phải là:

- 2-clo-6-[(8-floquinolin-3-yl)oxy]anilin [1417192-69-8],
- 2-flo-6-[(8-floquinolin-3-yl)oxy]anilin [1417192-68-7],
- 4-[3-(2-aminophenoxy)-7-chloroquinolin-4-yl]-5-metoxi-2-metyl-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-on [1099507-90-0],
- 3-[(2-aminophenyl)sulfanyl]-6-clo-4-phenylquinolin-2(1H)-on [727373-79-7],

và

- 2-[(2-metylquinolin-3-yl)metyl]anilin [412336-26-6];
- các hợp chất có công thức (Va) cũng như muối chấp nhận được của chúng:



(Va)

trong đó:

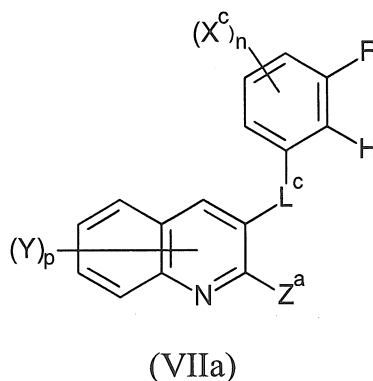
L^a là O, S, CH₂ hoặc NR⁶; và

n, p, X, Y, Z và R⁶ như được xác định trong điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 10,

với điều kiện là hợp chất có công thức (Va) không phải là:

- N-[2,6-dinitro-4-(triflometyl)phenyl]quinolin-3-amin [1638502-56-3],

- N-(2,4-dinitrophenyl)quinolin-3-amin [1638502-54-1],
- 3-(3-clo-2-nitrophenoxy)-8-floquinolin [1417192-66-5],
- 8-flo-3-(3-flo-2-nitrophenoxy)quinolin [1417192-65-4],
- 3-(2-nitrophenoxy)quinolin [1417192-64-3],
- N-(4,6-dimetyl-2-oxo-1,2-dihydroquinolin-3-yl)-N-(5-metyl-2,4-dinitrophenyl)axetamit [107403-93-0],
- N-(4,6-dimetyl-2-oxo-1,2-dihydroquinolin-3-yl)-N-(2-nitrophenyl)axetamit [107403-92-9],
- 4,6-dimetyl-3-[(5-metyl-2,4-dinitrophenyl)amino]quinolin-2(1H)-on [107403-91-8],
- 4,6-dimetyl-3-[(2-nitrophenyl)amino]quinolin-2(1H)-on [107403-90-7],
- 3-[(2-nitrophenyl)sulfanyl]quinolin [100461-52-7];
- 4-[(7-methoxyquinolin-3-yl)amino]-5-nitrophthalonitril [540512-77-4], và
- N-(4-bromo-2-nitrophenyl)quinolin-3-amin [1408734-82-6];
- các hợp chất có công thức (VIIa):



trong đó:

L^c là O hoặc S;

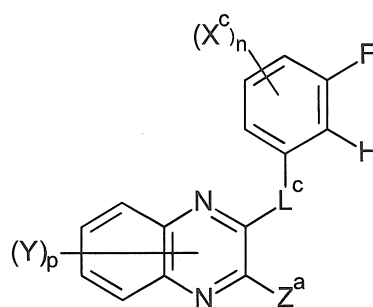
X^c là nguyên tử halogen, nhóm C_1 - C_8 -alkyl, nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, nhóm C_1 - C_8 -alkoxy, nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkoxy chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, nhóm C_1 - C_8 -alkylsulfanyl, nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkylsulfanyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, hoặc xyano;

Z^a là nguyên tử hydro, nguyên tử halogen, nhóm C_1 - C_8 -alkyl, nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, nhóm C_1 - C_8 -alkoxy, nhóm C_1 - C_8 -halogenoalkoxy chứa không quá 9 nguyên tử halogen

mà có thể giống hoặc khác nhau, nhóm C₁-C₈-alkylsulfanyl, hoặc nhóm C₁-C₈-halogenoalkylsulfanyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau; và

n, p và Y như được xác định trong điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 10, với điều kiện là hợp chất có công thức (VIIa) không phải là:

- 3-[(3-flophenyl)sulfanyl]quinolin [1299398-31-4],
- 8-clo-3-[(3-flophenyl)sulfanyl]quinolin [1060579-26-1],
- 3-[(3-flophenyl)sulfanyl]-8-iodoquinolin [607743-40-8],
- 3-[(3-flophenyl)sulfanyl]quinolin-8-amin [607743-39-5], và
- 3-[(3-flophenyl)sulfanyl]-8-nitroquinolin [607743-33-9]; và
- các hợp chất có công thức (VIIb) cũng như muối chấp nhận được của chúng:



(VIIb)

trong đó:

L^c là O hoặc S;

X^c là nguyên tử halogen, nhóm C₁-C₈-alkyl, nhóm C₁-C₈-halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, nhóm C₁-C₈-alkoxy, nhóm C₁-C₈-halogenoalkoxy chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, nhóm C₁-C₈-alkylsulfanyl, nhóm C₁-C₈-halogenoalkylsulfanyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, hoặc xyano;

Z^a là nguyên tử hydro, nguyên tử halogen, nhóm C₁-C₈-alkyl, nhóm C₁-C₈-halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, nhóm C₁-C₈-alkoxy, nhóm C₁-C₈-halogenoalkoxy chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau, nhóm C₁-C₈-alkylsulfanyl, hoặc nhóm C₁-C₈-halogenoalkylsulfanyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau; và

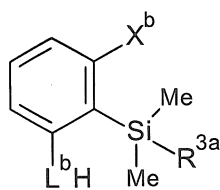
n, p và Y như được xác định trong điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 10,

với điều kiện là hợp chất có công thức (VIIb) không phải là 2-(4-clo-3-flophenoxy)-3-metylquinoxalin [477870-89-6];

trong đó mỗi nhóm trong số các nhóm được thể có thể được thể bằng một hoặc nhiều phần tử thể độc lập được chọn từ nhóm gồm nguyên tử halogen, nitro, hydroxyl, xyano, amino, sulfanyl, pentafluor- λ^6 -sulfanyl, formyl, carbamoyl, carbamat, C₁-C₈-alkyl, tri(C₁-C₈-alkyl)silyl, C₃-C₇-xycloalkyl, C₁-C₈-halogenoalkyl có 1 đến 5 nguyên tử halogen, C₃-C₈-halogenoxycycloalkyl có 1 đến 5 nguyên tử halogen, C₂-C₈-alkenyl, C₂-C₈-alkynyl, C₁-C₈-alkylamino, di-C₁-C₈-alkylamino, C₁-C₈-alkoxy, C₁-C₈-halogenoalkoxy có 1 đến 5 nguyên tử halogen, C₁-C₈-alkylsulfanyl, C₁-C₈-halogenoalkylsulfanyl có 1 đến 5 nguyên tử halogen, C₁-C₈-alkylcarbonyl, C₁-C₈-halogenoalkylcarbonyl có 1 đến 5 nguyên tử halogen, C₁-C₈-alkylcarbamoyl, di-C₁-C₈-alkylcarbamoyl, C₁-C₈-halogenoalkoxycarbonyl có 1 đến 5 nguyên tử halogen, C₁-C₈-alkylcarbonyloxy, C₁-C₈-halogenoalkylcarbonyloxy có 1 đến 5 nguyên tử halogen, C₁-C₈-alkylcarbonylamino, C₁-C₈-halogenoalkylcarbonylamino có 1 đến 5 nguyên tử halogen, C₁-C₈-alkylsulfanyl, C₁-C₈-halogenoalkylsulfanyl có 1 đến 5 nguyên tử halogen, C₁-C₈-alkylsulfinyl, C₁-C₈-halogenoalkylsulfinyl có 1 đến 5 nguyên tử halogen, C₁-C₈-alkylsulfonyl và C₁-C₈-halogeno-alkyl-sulfonyl có 1 đến 5 nguyên tử halogen.

15. Hợp chất được chọn từ nhóm bao gồm:

- hợp chất có công thức (IXa):



(IXa)

trong đó:

X^b là nguyên tử hydro, nguyên tử clo hoặc nguyên tử flo;

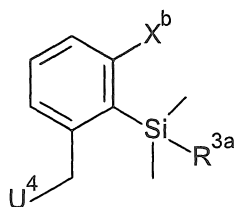
L^b là O, S và NH; và

R^{3a} là nguyên tử hydro; hoặc C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể; C₁-C₈-halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau; C₂-C₈-alkenyl không được thể hoặc được thể; C₂-C₈-alkynyl không được thể hoặc được thể; C₃-C₇-xycloalkyl không được thể hoặc được thể; C₄-C₇-xycloalkenyl không được

thể hoặc được thể; aryl không được thể hoặc được thể; aryl-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể; heteroxyclyl không được thể hoặc được thể; heteroxyclyl-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể; hydroxy-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể; C₁-C₈-alkoxy-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể; C₁-C₈-alkylcacbonyloxy-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể; aryloxy-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể; heteroxycyloxy-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể; amino-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể; C₁-C₈-alkylamino-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể; di-C₁-C₈-alkylamino-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể; arylamino-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể; di-aryl-amino-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể; heteroxycylamino-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể; C₁-C₈-alkylcacbonylamino-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể; C₁-C₈-alkoxycacbonylamino-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể; C₁-C₈-alkylsulfanyl-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể; C₁-C₈-alkylsulfinyl-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể; C₁-C₈-alkylsulfonyl-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể hoặc xyano-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể;

với điều kiện là hợp chất có công thức (IXa) không phải là:

- 2-[dimetyl(phenyl)silyl]anilin [1819368-37-0],
- 3-flo-2-(trimetylsilyl)phenol [1808920-27-5],
- 3-clo-2-(trimetylsilyl)phenol [1808920-08-2],
- 2-[heptyl(dimetyl)silyl]anilin [1427772-62-0],
- 2-[hexyl(dimetyl)silyl]anilin [217662-68-5],
- 2,2'-(dimetylsilandiyl)diphenol [122397-35-7],
- 2,2'-(dimetylsilandiyl)dibenzenthio [117526-69-9],
- 2-{dimetyl[(trimetylsilyl)metyl]silyl}benzenthio [117526-66-6],
- 2-[tert-butyl(dimetyl)silyl]benzenthio [117526-58-6],
- 2-[tert-butyl(dimetyl)silyl]phenol [82772-29-0],
- 2-(trimetylsilyl)anilin [57792-17-3],
- 2-(dimetylsilyl)phenol [33367-00-9],
- 2-(trimetylsilyl)benzenthio [33356-45-5],
- 2-(trimetylsilyl)phenol [15288-53-6]; và
- 2-[alyl(dimetyl)silyl]benzenthio [699532-17-7];
- hợp chất có công thức (XIa):



(XIa)

trong đó:

X^b là nguyên tử hydro, nguyên tử clo hoặc nguyên tử flo;

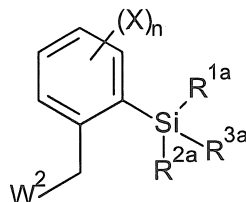
U^4 là nguyên tử brom, nguyên tử clo, nguyên tử iot, nhóm mesyl, nhóm tosyl hoặc nhóm triflyl; và

R^{3a} là nguyên tử hydro; hoặc C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau; C_2 - C_8 -alkenyl không được thế hoặc được thế; C_2 - C_8 -alkynyl không được thế hoặc được thế; C_3 - C_7 -xycloalkyl không được thế hoặc được thế; C_4 - C_7 -xycloalkenyl không được thế hoặc được thế; aryl không được thế hoặc được thế; aryl- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; heteroxyclyl không được thế hoặc được thế; heteroxyclyl- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; hydroxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkoxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkylcacbonyloxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; aryloxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; heteroxyclyloxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; amino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; di- C_1 - C_8 -alkylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; arylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; di-arylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; heteroxyclylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkylcacbonylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkoxycarbonylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkylsulfanyl- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkylsulfinyl- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkylsulfonyl- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế hoặc xcyano- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế;

với điều kiện là hợp chất có công thức (XIa) không phải là:

- [2-(clometyl)phenyl](trimetyl)silan [1379234-14-6],
- [2-(bromometyl)phenyl](3-clopropyl)dimetyl silan [130284-14-9],
- [2-(iodometyl)phenyl](trimetyl)silan [126328-94-7],

- [2-(bromomethyl)phenyl](clometyl)dimethylsilan [54848-87-2],
 - bis[2-(bromomethyl)phenyl](dimetyl)silan [19421-15-9], và
 - [2-(bromometyl)phenyl](trimetyl)silan [17903-43-4];
- hợp chất có công thức (XIIa):



(XIIa)

trong đó:

W^2 là axit boronic, este boronic hoặc kali trifloborat;

R^{1a} và R^{2a} độc lập là C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế, C_2 - C_8 -alkenyl không được thế hoặc được thế, C_3 - C_7 -xycloalkyl không được thế hoặc được thế, aryl không được thế hoặc được thế, heteroxyclyl không được thế hoặc được thế;

R^{3a} là nguyên tử hydro hoặc C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau; C_2 - C_8 -alkenyl không được thế hoặc được thế; C_2 - C_8 -alkynyl không được thế hoặc được thế; C_3 - C_7 -xycloalkyl không được thế hoặc được thế; C_4 - C_7 -xycloalkenyl không được thế hoặc được thế; aryl không được thế hoặc được thế; aryl- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; heteroxyclyl không được thế hoặc được thế; heteroxyclyl- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; hydroxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkoxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkylcacbonyloxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; aryloxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; heteroxyclyloxy- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; amino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; di- C_1 - C_8 -alkylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; arylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; di-arylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; heteroxyclylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkylcacbonylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkoxycarbonylamino- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkylsulfanyl- C_1 - C_8 -alkyl không được thế hoặc được thế; C_1 - C_8 -alkylsulfinyl- C_1 - C_8 -alkyl không được

thể hoặc được thể; C₁-C₈-alkylsulfonyl-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể; hoặc xyno-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể; và

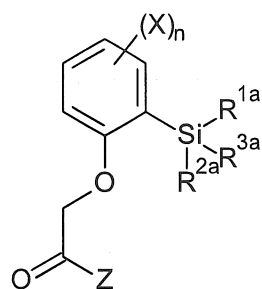
n và X như được xác định trong điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 10; với điều kiện là hợp chất có công thức (XIIa) không phải là:

- dimethyl{2-[(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)methyl]phenyl}silan [1639367-72-8],

- methyl(phenyl){2-[(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)methyl]phenyl}silan [1639367-73-9], và

- diphenyl{2-[(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)methyl]phenyl}silan [1639367-74-0]; và

- hợp chất có công thức (XIV) cũng như muối chấp nhận được của nó:



(XIV)

trong đó:

R^{1a} và R^{2a} độc lập là C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể, C₂-C₈-alkenyl không được thể hoặc được thể, C₃-C₇-xycloalkyl không được thể hoặc được thể, aryl không được thể hoặc được thể, heteroxyclyl không được thể hoặc được thể;

R^{3a} là nguyên tử hydro; hoặc C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể; C₁-C₈-halogenoalkyl chứa không quá 9 nguyên tử halogen mà có thể giống hoặc khác nhau; C₂-C₈-alkenyl không được thể hoặc được thể; C₂-C₈-alkynyl không được thể hoặc được thể; C₃-C₇-xycloalkyl không được thể hoặc được thể; C₄-C₇-xycloalkenyl không được thể hoặc được thể; aryl không được thể hoặc được thể; aryl-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể; heteroxyclyl không được thể hoặc được thể; heteroxyclyl-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể; hydroxy-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể; C₁-C₈-alkoxy-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể; C₁-C₈-alkylcarbonyloxy-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể; aryloxy-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể; heteroxyclyloxy-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể; amino-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc được thể; C₁-C₈-alkylamino-C₁-C₈-alkyl không được thể hoặc

được thế; di-C₁-C₈-alkylamino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; arylamino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; di-arylamino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; heteroxyclylamino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; C₁-C₈-alkylcacbonylamino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; C₁-C₈-alkoxycacbonylamino-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; C₁-C₈-alkylsulfanyl-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; C₁-C₈-alkylsulfinyl-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế; C₁-C₈-alkylsulfonyl-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế hoặc xyano-C₁-C₈-alkyl không được thế hoặc được thế;

và n, X và Z như được xác định trong điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 10; với điều kiện là hợp chất có công thức (XIV) không phải là:

- 2-[2-bromo-6-(trimethylsilyl)phenoxy]-1-phenyletanon [918304-52-6],
- methyl {2-[metoxy(dimethyl)silyl]phenoxy}axetat [187871-83-6],
- N-[2-(dimethylamino)etyl]-2-[2-(trimethylsilyl)phenoxy]axetamit [126485-69-6],
- 2-(dimethylamino)etyl [2-(trimethylsilyl)phenoxy]axetat [126485-64-1],
- butyl {2-[metoxy(dimethyl)silyl]phenoxy}axetat [122397-19-7],
- etyl [2-(trimethylsilyl)phenoxy]axetat [104653-63-6], và
- axit [2-(trimethylsilyl)phenoxy]axetic [104653-62-5];

trong đó mỗi nhóm trong số các nhóm được thế có thể được thế bằng một hoặc nhiều phần tử thế độc lập được chọn từ nhóm gồm nguyên tử halogen, nitro, hydroxyl, xyano, amino, sulfanyl, pentaflor-λ⁶-sulfanyl, formyl, carbamoyl, caramat, C₁-C₈-alkyl, tri(C₁-C₈-alkyl)silyl, C₃-C₇-xycloalkyl, C₁-C₈-halogenoalkyl có 1 đến 5 nguyên tử halogen, C₃-C₈-halogenoxycloalkyl có 1 đến 5 nguyên tử halogen, C₂-C₈-alkenyl, C₂-C₈-alkynyl, C₁-C₈-alkylamino, di-C₁-C₈-alkylamino, C₁-C₈-alkoxy, C₁-C₈-halogenoalkoxy có 1 đến 5 nguyên tử halogen, C₁-C₈-alkylsulfanyl, C₁-C₈-halogenoalkylsulfanyl có 1 đến 5 nguyên tử halogen, C₁-C₈-alkylcacbonyl, C₁-C₈-halogenoalkylcacbonyl có 1 đến 5 nguyên tử halogen, C₁-C₈-alkylcarbamoyl, di-C₁-C₈-alkylcarbamoyl, C₁-C₈-halogenoalkoxycacbonyl có 1 đến 5 nguyên tử halogen, C₁-C₈-alkylcacbonyloxy, C₁-C₈-halogenoalkylcacbonyloxy có 1 đến 5 nguyên tử halogen, C₁-C₈-alkylcacbonylamino, C₁-C₈-halogenoalkylcacbonylamino có 1 đến 5 nguyên tử halogen, C₁-C₈-alkylsulfanyl, C₁-C₈-halogenoalkylsulfanyl có 1 đến 5 nguyên tử halogen, C₁-C₈-alkylsulfinyl, C₁-C₈-halogenoalkylsulfinyl có 1 đến 5 nguyên tử halogen, C₁-C₈-alkylsulfonyl và C₁-C₈-halogeno-alkyl-sulfonyl có 1 đến 5 nguyên tử halogen.