(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) **1-0033017**

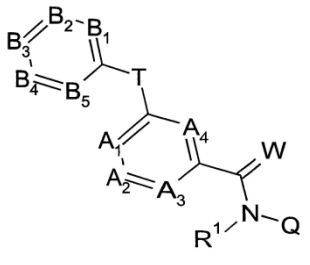
(51)[7] **C07D 231/12**; A01N 43/72; A01N 43/80; A01P 7/00; C07D 403/04; C07D 261/08; C07D 401/04; A01N 43/56; C07D 207/337

(13) **B**

(21) 1-2016-01974 (22) 05/11/2014
(86) PCT/EP2014/073795 05/11/2014 (87) WO2015/067647 14/05/2015
(30) 13191610.8 05/11/2013 EP; 14181149.7 15/08/2014 EP
(45) 25/08/2022 413 (43) 25/08/2016 341A
(73) BAYER ANIMAL HEALTH GMBH (DE)
Kaiser-Wilhelm-Allee 20, 51373 Leverkusen, Germany
(72) HALLENBACH, Werner (DE); SCHWARZ, Hans-Georg (DE); ILG, Kerstin (DE); GÖRGENS, Ulrich (DE); KÖBBERLING, Johannes (DE); TURBERG, Andreas (DE); BÖHNKE, Niels (DE); MAUE, Michael (DE); VELTEN, Robert (DE); HARSCHNECK, Tobias (DE); HAHN, Julia Johanna (DE); HORSTMANN, Sebastian (DE).
(74) Công ty Luật TNHH T&G (TGVN)

(54) HỢP CHẤT BENZAMIT ĐƯỢC THẾ VÀ CHẾ PHẨM DIỆT CÔN TRÙNG CHỨA HỢP CHẤT NÀY ĐỂ KIỂM SOÁT ĐỘNG VẬT CHÂN KHỚP

(57) Sáng chế, ngoài những nội dung khác, đề cập đến hợp chất có công thức chung (I):



(I)

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

Lĩnh vực kỹ thuật được đề cập

Sáng chế đề cập đến các hợp chất triflo và quy trình điều chế các hợp chất này. Các hợp chất theo sáng chế là hữu dụng để kiểm soát động vật gây hại, cụ thể là động vật chân khớp và đặc biệt là côn trùng, nhện và giun tròn.

Tình trạng kỹ thuật của sáng chế

Đã biết rằng các hợp chất được thế halogen cụ thể có hoạt tính diệt côn trùng (EP 1911751, WO2012/069366, WO2012/080376, WO2012/107434 và WO2012/175474).

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

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

Các chế phẩm bảo vệ mùa màng hiện đại cần phải đáp ứng nhiều yêu cầu, ví dụ, liên quan đến mức hiệu lực, mức độ tồn dư và phổ tác dụng và ứng dụng có thể có của chúng. Các vấn đề về độc tính và khả năng kết hợp với các thành phần hoạt tính khác hoặc các chất phụ gia phối chế đóng vai trò nhất định, vì vấn đề chi phí mà quá trình tổng hợp một thành phần hoạt tính đòi hỏi. Ngoài ra, tính kháng có thể xuất hiện. Vì tất cả những lý do này, vấn đề tìm kiếm chế phẩm và dược phẩm bảo vệ cây trồng mới có thể không bao giờ được coi là hoàn thành và vẫn luôn thường trực nhu cầu về các hợp chất mới có các đặc tính được cải thiện hơn so với các hợp chất đã biết, ít nhất về từng khía cạnh riêng biệt.

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

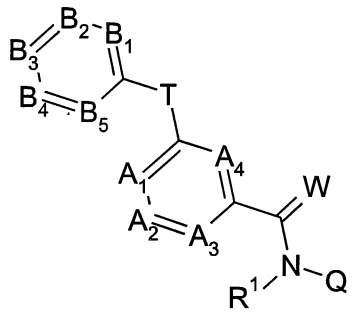
Hiện đã bất ngờ phát hiện rằng, hợp chất được thế halogen cụ thể và muối của chúng có các đặc tính sinh học và đặc biệt thích hợp để phòng trừ động vật gây hại, và

do đó có khả năng sử dụng đặc biệt tốt trong lĩnh vực hóa nông và lĩnh vực sức khỏe động vật.

Các hợp chất tương tự là đã biết trong tài liệu WO 2010/051926.

Bản chất kỹ thuật của sáng chế

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



(I)

trong đó:

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

các gốc sau đây là như sau:

A_1 là CR^2 hoặc N,

A_2 là CR^3 hoặc N,

A_3 là CR^4 hoặc N,

A_4 là CR^5 hoặc N,

B_1 là CR^6 hoặc N,

B_2 là CR^7 hoặc N,

B_3 là CR^8 hoặc N,

B_4 là CR^9 hoặc N, và

B_5 là CR^{10} hoặc N,

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

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

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

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

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

W là O hoặc S;

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

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

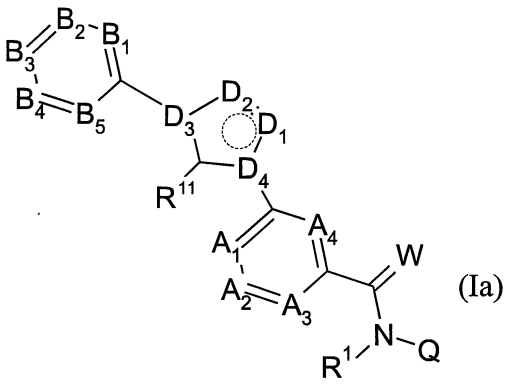
là dị vòng 4, 5 hoặc 6 cạnh không no tùy ý được thế poly-V, trong đó

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

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

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

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



(Ia)

trong đó:

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

mỗi gốc D_3 và D_4 độc lập là C hoặc nguyên tử khác loại được chọn từ N (có nghĩa là mỗi gốc D_3 và D_4 độc lập là C hoặc N);

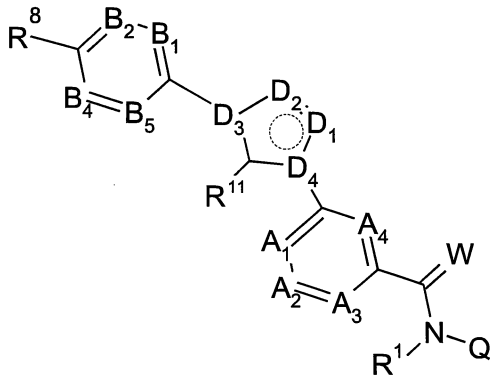
trong đó không nhiều hơn một (1) hoặc hai gốc được chọn từ D_1, D_2, D_3 và D_4 là nguyên tử khác loại, trong đó một (1) hoặc hai gốc được chọn từ D_1, D_2, D_3 và D_4 là nguyên tử khác loại được chọn từ N và O trong trường hợp là D_1 và D_2, hoặc N trong trường hợp là D_3 và D_4;

◌ là hệ thơm; và

mỗi R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, B_1, B_2, B_3, B_4, B_5, R^2, R^3, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8, R^9, R^{10}, R^{11}, W, Q, V, và T được xác định như được mô tả ở đây, trong đó không nhiều hơn một gốc được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 là N và không nhiều hơn một gốc được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N; hoặc trong đó một hoặc hai gốc được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 có thể là N và không nhiều hơn một gốc được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N,

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

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



(Ia')

trong đó:

mỗi R^1, R^{11}, Q, W, A_1, A_2, A_3, A_4, B_1, B_2, B_4 và B_5 được xác định như được mô tả ở đây, trong đó không nhiều hơn một gốc được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 là N và không nhiều hơn một gốc được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N; hoặc trong đó một hoặc hai gốc được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 có thể là N và không nhiều hơn một gốc được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N;

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

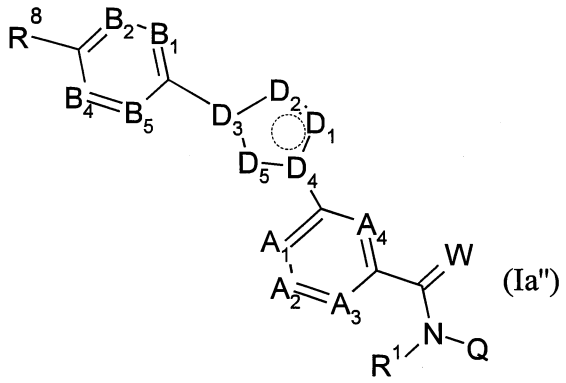
mỗi gốc D_3 và D_4 độc lập là C hoặc nguyên tử khác loại được chọn từ N;

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

◌ là hệ thơm

và R^8 là như được xác định ở đây, tốt hơn là C_1-C_4-alkyl perflo hóa.

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



(Ia")

trong đó:

D_1 là C-R^{11} hoặc nguyên tử khác loại được chọn từ N và O;
D_2 là C-R^{11} hoặc nguyên tử khác loại được chọn từ N và O;
D_3 là C hoặc N;
D_4 là C hoặc N;
D_5 là C-R^{11} hoặc N;

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

◌ là hệ thơm; và

R^1 là H, trong mỗi trường hợp là C_2-C_6-alkenyl, C_2-C_6-alkynyl, C_3-C_7-xycloalkyl, C_1-C_6-alkylcacbonyl, C_1-C_6-alkoxycacbonyl, aryl(C_1-C_3)-

alkyl tùy ý được thế, hoặc heteroaryl(C_1-C_3)-alkyl, hoặc C_1-C_6-alkyl tùy ý được thế, tốt hơn nữa là H;

các gốc sau đây là như sau:

A_1 là CR^2 hoặc N,

A_2 là CR^3 hoặc N,

A_3 là CR^4 hoặc N,

A_4 là CR^5 hoặc N,

B_1 là CR^6 hoặc N,

B_2 là CR^7 hoặc N,

B_3 là CR^8 hoặc N,

B_4 là CR^9 hoặc N, và

B_5 là CR^{10} hoặc N,

nhưng không nhiều hơn ba trong số các gốc từ A_1 đến A_4 là N và không nhiều hơn ba trong số các gốc từ B_1 đến B_5 đồng thời là N;

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

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

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

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

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

W là O hoặc S;

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

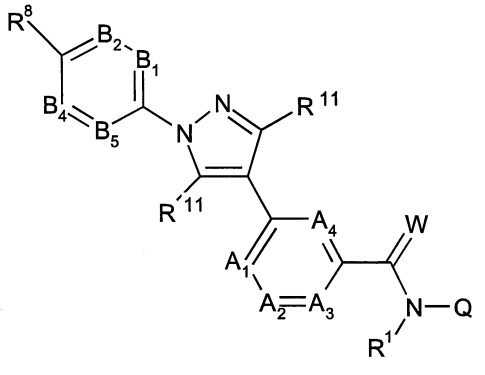
là vòng cacbon 6 cạnh không no tùy ý được thế poly-V; hoặc

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

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

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

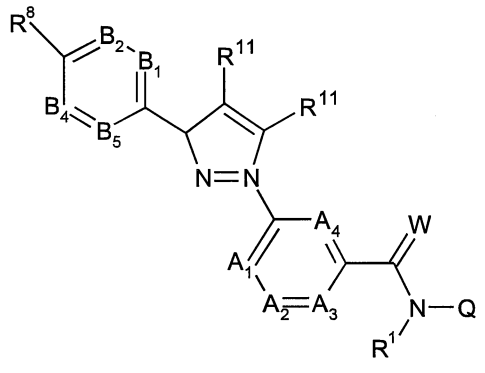
Theo một phương án nữa, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (Ia"), trong đó các hợp chất có công thức (Ia") là các hợp chất có công thức (I-T3)



(I-T3)

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

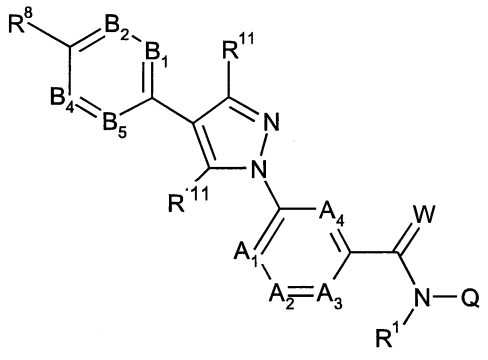
Theo một phương án nữa, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (Ia"), trong đó các hợp chất có công thức (Ia") là các hợp chất có công thức (I-T2)



(I-T2)

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

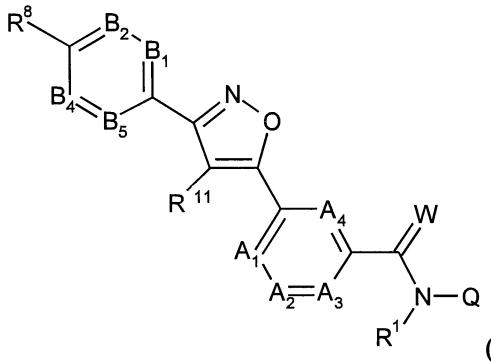
Theo một phương án nữa, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (Ia"), trong đó các hợp chất có công thức (Ia") là các hợp chất có công thức (I-T4)



(I-T4)

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

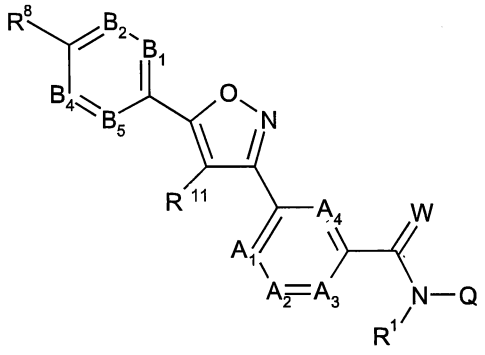
Theo một phương án nữa, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (Ia"), trong đó các hợp chất có công thức (Ia") là các hợp chất có công thức (I-T22)



(I-T-22)

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

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



(I-T23)

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

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

Theo một phương án nữa, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức và các phương án được mô tả ở đây, trong đó R^{11} độc lập là H và W là O và B_3 là C-R^8, R^8 là C_1-C_3-alkyl được thế halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkyl perhalogen hóa, tốt hơn nữa là C_1-C_3-alkyl perflo hóa) hoặc C_1-C_3-alkoxy được thế halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkoxy perhalogen hóa, tốt hơn nữa là C_1-C_3-alkoxy perflo hóa).

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

A_1 là C-H,

A_2 là CR^3 hoặc N,

A_3 là CR^4,

A_4 là C-H,

B_1 là CR^6 hoặc N,

B_2 là C-H,

B_3 là CR^8,

B_4 là C-H và

B_5 là CR^{10} hoặc N.

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

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

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

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

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

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

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

A_1 là C-H,

A_2 là CR^3 hoặc N,

A_3 là CR^4,

A_4 là C-H,

B_1 là CR^6 hoặc N,

B_2 là C-H,

B_3 là CR^8,

B_4 là C-H và

B_5 là CR^{10} hoặc N.

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

Theo một phương án nữa, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức được mô tả ở đây, trong đó Q là C_1-C_4-alkyl được thế bằng flo hoặc bằng cacbonamit (–$C(=O)N(R)_2$ trong đó R độc lập là H, C_1-C_3-alkyl hoặc C_1-C_3-alkyl được thế halogen), C_3-C_4-xycloalkyl, C_4-C_6-heteroxycloalkyl, 1-oxidothietan-3-yl, 1,1-dioxidothietan-3-yl, benzyl, pyridin-2-ylmetyl, metylsulphonyl hoặc 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetylamino)etyl tùy ý được thế xyano hoặc flo.

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

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

Theo một khía cạnh, sáng chế đề cập đến các chế phẩm diệt côn trùng, khác biệt bởi chế phẩm này chứa ít nhất một hợp chất có công thức (I) như được mô tả ở đây và một chất độn và/hoặc một chất có hoạt tính bề mặt.

Theo một khía cạnh, sáng chế đề cập đến phương pháp bảo vệ hạt chuyển gen hoặc hạt thông thường và thực vật xuất phát từ hạt nêu trên không bị nhiễm bởi sinh vật gây hại, khác biệt ở chỗ, hạt được xử lý bằng ít nhất một hợp chất có công thức (I) như được mô tả ở đây.

Phần mô tả cũng mô tả việc sử dụng hợp chất có công thức (I) như được mô tả ở đây hoặc chế phẩm diệt côn trùng như được mô tả ở đây để phòng trừ sinh vật gây hại.

Phần mô tả cũng mô tả việc sử dụng hợp chất có công thức (I) như được mô tả ở đây trong việc kiểm soát vectơ.

Theo một khía cạnh nữa, sáng chế đề cập đến hạt trong đó, hợp chất có công thức (I) như được mô tả ở đây đã được áp dụng lên hạt làm một thành phần của lớp phủ hoặc làm một lớp khác hoặc các lớp khác ngoài lớp phủ.

Do đó, theo một khía cạnh, sáng chế đề cập đến phương pháp áp dụng lớp phủ chứa ít nhất một hợp chất có công thức (I) như được mô tả ở đây hoặc phương pháp áp dụng hợp chất có công thức (I) như được mô tả ở đây, áp dụng lên hạt dưới dạng một lớp hoặc các lớp khác ngoài lớp phủ, bao gồm các bước a) trộn lẫn hạt với nguyên liệu phủ gồm hoặc chứa hợp chất có công thức (I) như được mô tả ở đây, b) làm giàu hỗn hợp hạt phủ thu được, c) sấy khô hỗn hợp hạt đã làm giàu thu được, d) tách hoặc làm rời hỗn hợp hạt sấy khô thu được.

Mô tả chi tiết sáng chế

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

Hợp chất theo sáng chế cũng có thể ở dạng các phức kim loại.

Các định nghĩa

Người có hiểu biết trung bình về lĩnh vực này nhận thức được rằng, nếu như không được thông báo một cách rõ ràng, các diễn giải "số ít" ("a" hoặc "an") như được sử dụng trong sáng chế này, tùy thuộc vào tính huống, có thể có nghĩa là "một (1)", "một (1) hoặc nhiều" hoặc "ít nhất một (1)".

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

Các cấu trúc có số lượng nguyên tử cacbon có thể khác nhau (các nguyên tử C) có thể được đề cập trong sáng chế này là các công thức cấu tạo $C_{\text{giới hạn dưới về các nguyên tử cacbon}}$-$C_{\text{giới hạn trên về nguyên tử cacbon}}$ (các công thức cấu tạo C_{LL}-C_{UL}), như vậy để quy định cụ thể hơn. Ví dụ,: nhóm alkyl có thể bao gồm 3 đến 10 nguyên tử cacbon và trường hợp này tương ứng với C_3-C_{10}-alkyl. Các cấu trúc vòng bao gồm nguyên tử cacbon và các nguyên tử khác loại có thể được đề cập ở dạng "LL- UL-số cạnh" công thức cấu tạo. Một ví dụ, về cấu trúc vòng 6 cạnh là toluen (cấu trúc vòng 6 cạnh được thế bởi nhóm metyl).

Nếu thuật ngữ chung dùng cho phần tử thế, ví dụ, (C_{LL}-C_{UL})-alkyl, đặt ở cuối phần tử thế phức hợp, ví dụ, (C_{LL}-C_{UL})-xycloalkyl-(C_{LL}-C_{UL})-alkyl, thì thành phần cấu thành khởi đầu của phần tử thế phức hợp, ví dụ, (C_{LL}-C_{UL})-xycloalkyl, có thể được thế một lần hoặc nhiều lần giống nhau hoặc khác nhau và độc lập bởi phần tử thế nêu sau, ví dụ, (C_{LL}-C_{UL})-alkyl. Tất cả các thuật ngữ chung sử dụng trong sáng chế này cho các nhóm hóa học, các hệ vòng và các nhóm vòng có thể được quy định cụ thể hơn thông qua việc bổ sung "C_{LL}-C_{UL}" hoặc "LL-UL-số cạnh".

Trừ khi được định nghĩa theo cách khác, định nghĩa về các thuật ngữ chung cũng áp dụng cho các thuật ngữ chung này trong các phần tử thế phức hợp. Ví dụ,: định nghĩa về C_{LL}-C_{UL}-alkyl cũng áp dụng cho C_{LL}-C_{UL}-alkyl là một phần của phần tử thế phức hợp, ví dụ, C_{LL}-C_{UL}-xycloalkyl-C_{LL}-C_{UL}-alkyl.

Rõ ràng đối với người có hiểu biết trung bình về lĩnh vực này rằng, các ví dụ, được viện dẫn trong sáng chế này không được xem xét theo cách giới hạn, mà chỉ mô tả chi tiết một số phương án.

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

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

Ví dụ, về các nguyên tử khác loại là N, O, S, P, B, Si. Thuật ngữ "nguyên tử khác loại" tốt hơn là đề cập đến N, S và O.

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

Theo sáng chế, "alkenyl" – bản thân nó hoặc là một phần của nhóm hóa học – là các hydrocacbon mạch thẳng hoặc mạch nhánh, tốt hơn là có từ 2 đến 6 nguyên tử cacbon và ít nhất một liên kết đôi, ví dụ, vinyl, 2-propenyl, 2-butenyl, 3-butenyl, 1-metyl-2-propenyl, 2-metyl-2-propenyl, 2-pentenyl, 3-pentenyl, 4-pentenyl, 1-metyl-2-butenyl, 2-metyl-2-butenyl, 3-metyl-2-butenyl, 1-metyl-3-butenyl, 2-metyl-3-butenyl, 3-metyl-3-butenyl, 1,1-dimetyl-2-propenyl, 1,2-dimetyl-2-propenyl, 1-etyl-2-propenyl, 2-hexenyl, 3-hexenyl, 4-hexenyl, 5-hexenyl, 1-metyl-2-pentenyl, 2-metyl-2-pentenyl, 3-metyl-2-pentenyl, 4-metyl-2-pentenyl, 3-metyl-3-pentenyl, 4-metyl-3-pentenyl, 1-

metyl-4-pentenyl, 2-metyl-4-pentenyl, 3-metyl-4-pentenyl, 4-metyl-4-pentenyl, 1,1-dimetyl-2-butenyl, 1,1-dimetyl-3-butenyl, 1,2-dimetyl-2-butenyl, 1,2-dimetyl-3-butenyl, 1,3-dimetyl-2-butenyl, 2,2-dimetyl-3-butenyl, 2,3-dimetyl-2-butenyl, 2,3-dimetyl-3-butenyl, 1-etyl-2-butenyl, 1-etyl-3-butenyl, 2-etyl-2-butenyl, 2-etyl-3-butenyl, 1,1,2-trimetyl-2-propenyl, 1-etyl-1-metyl-2-propenyl và 1-etyl-2-metyl-2-propenyl. Cũng được ưu tiên là alkenyl có từ 2 đến 4 nguyên tử cacbon như, không kể các nhóm khác, 2-propenyl, 2-butenyl hoặc 1-metyl-2-propenyl. Các alkenyl theo sáng chế có thể được thế bởi một hoặc nhiều gốc giống nhau hoặc khác nhau.

Theo sáng chế, "alkynyl" – bản thân nó hoặc là một phần của nhóm hóa học – là các hydrocacbon mạch thẳng hoặc mạch nhánh, tốt hơn là có từ 2 đến 6 nguyên tử cacbon và ít nhất một liên kết ba, ví dụ, 2-propynyl, 2-butynyl, 3-butynyl, 1-metyl-2-propynyl, 2-pentynyl, 3-pentynyl, 4-pentynyl, 1-metyl-3-butynyl, 2-metyl-3-butynyl, 1-metyl-2-butynyl, 1,1-dimetyl-2-propynyl, 1-etyl-2-propynyl, 2-hexynyl, 3-hexynyl, 4-hexynyl, 5-hexynyl, 1-metyl-2-pentynyl, 1-metyl-3-pentynyl, 1-metyl-4-pentynyl, 2-metyl-3-pentynyl, 2-metyl-4-pentynyl, 3-metyl-4-pentynyl, 4-metyl-2-pentynyl, 1,1-dimetyl-3-butynyl, 1,2-dimetyl-3-butynyl, 2,2-dimetyl-3-butynyl, 1-etyl-3-butynyl, 2-etyl-3-butynyl, 1-etyl-1-metyl-2-propynyl và 2,5-hexadiynyl. Cũng được ưu tiên là các alkynyl có từ 2 đến 4 nguyên tử cacbon như, không kể các nhóm khác, etynyl, 2-propynyl hoặc 2-butynyl-2-propenyl. Các alkynyl theo sáng chế có thể được thế bởi một hoặc nhiều gốc giống nhau hoặc khác nhau.

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

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

etylxyclopropyl, isopropylxyclobutyl, 3-metylxyclopentyl và 4-metylxyclohexyl. Cũng được ưu tiên là các alkylxycloalkyl có 4, 5 hoặc 7 nguyên tử cacbon như, không kể các nhóm khác, etylxyclopropyl hoặc 4-metylxyclohexyl. Các alkylxycloalkyl theo sáng chế có thể được thế bởi một hoặc nhiều gốc giống nhau hoặc khác nhau.

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

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

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

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

Theo sáng chế, "alkylsulphinyl" là alkylsulphinyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh, tốt hơn là có từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon, ví dụ, metylsulphinyl, etylsulphinyl, n-propylsulphinyl, isopropylsulphinyl, n-butylsulphinyl, isobutylsulphinyl, s-

butylsulphinyl và t-butylsulphinyl. Cũng được ưu tiên là các nhóm alkylsulphinyl có từ 1 đến 4 nguyên tử cacbon. Các nhóm alkylsulphinyl theo sáng chế có thể được thế bởi một hoặc nhiều gốc giống nhau hoặc khác nhau.

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

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

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

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

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

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

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

Ví dụ, về các aryl được thế là arylalkyl, tương tự nhóm này có thể được thế bởi một hoặc nhiều gốc giống nhau hoặc khác nhau ở phần C_1-C_4-alkyl và/hoặc C_6-C_{14}-aryl. Ví dụ, về arylalkyl như vậy bao gồm benzyl và 1-phenyletyl.

Theo sáng chế, "dị vòng", "vòng dị vòng" hoặc "hệ vòng dị vòng" là hệ vòng cacbon vòng có ít nhất một vòng, trong đó ít nhất một nguyên tử cacbon được thay thế bằng nguyên tử khác loại, tốt hơn là bằng nguyên tử khác loại từ nhóm bao gồm N, O, S, P, B, Si, Se, và hệ vòng này là no, không no hoặc dị vòng thơm và có thể không được thế hoặc được thế, trong đó vị trí liên kết nằm ở trên nguyên tử vòng. Trừ khi được định nghĩa theo cách khác, vòng dị vòng tốt hơn là chứa từ 3 đến 9 nguyên tử vòng, đặc biệt là từ 3 đến 6 nguyên tử vòng, và một hoặc nhiều, tốt hơn là từ 1 đến 4, đặc biệt là 1, 2 hoặc 3 nguyên tử khác loại ở vòng dị vòng, tốt hơn là từ nhóm bao gồm

N, O, và S, mặc dù hai nguyên tử oxy không được trực tiếp liền kề nhau. Các vòng dị vòng thường chứa không nhiều hơn 4 nguyên tử nitơ và/hoặc không nhiều hơn 2 nguyên tử oxy và/hoặc không nhiều hơn 2 nguyên tử lưu huỳnh. Khi gốc heteroxyclyl hoặc vòng dị vòng tùy ý được thế, nó có thể được ngưng tụ với các vòng cacbon vòng hoặc vòng dị vòng khác. Trong trường hợp heteroxyclyl tùy ý được thế, sáng chế cũng bao gồm các hệ đa vòng, ví dụ, 8-azabixyclo[3.2.1]octanyl hoặc 1-azabixyclo[2.2.1]heptyl. Trong trường hợp heteroxyclyl tùy ý được thế, sáng chế cũng bao gồm các hệ vòng xoắn, ví dụ, 1-oxa-5-azaspiro[2.3]hexyl.

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

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

Thuật ngữ các nhóm/các phần tử thế "được thế (tùy ý)" như gốc alkyl, alkenyl, alkynyl, alkoxy, alkylsulphanyl, alkylsulphinyl, alkylsulphonyl, xycloalkyl, aryl, phenyl, benzyl, heteroxyclyl và heteroaryl tùy ý được thế có nghĩa là, ví dụ, một gốc được thế xuất phát từ một cấu trúc cơ bản chưa được thế, trong đó các phần tử thế, ví

dụ, một (1) phần tử thế hoặc nhiều phần tử thế, tốt hơn là 1, 2, 3, 4, 5, 6 hoặc 7, được chọn từ nhóm bao gồm amino, hydroxyl, halogen, nitro, xyano, isoxyano, mercapto, isothioxyanato, C_1-C_4-carboxyl, cacbonamit, SF_5, aminosulphonyl, C_1-C_4-alkyl, C_3-C_4-xycloalkyl, C_2-C_4-alkenyl, C_3-C_4-xycloalkenyl, C_2-C_4-alkynyl, *N*-mono-C_1-C_4-alkylamino, *N,N*-di-C_1-C_4-alkylamino, *N*-C_1-C_4-alkanoylamino, C_1-C_4-alkoxy, C_2-C_4-alkenyloxy, C_2-C_4-alkynyloxy, C_3-C_4-xycloalkoxy, C_3-C_4-xycloalkenyloxy, C_1-C_4-alkoxycacbonyl, C_2-C_4- C_2-C_4-alkenyloxycacbonyl, C_2-C_4-alkynyloxycacbonyl, C_6-,C_{10}-,C_{14}-aryloxycacbonyl, C_1-C_4-alkanoyl, C_2-C_4-alkenylcacbonyl, C_2-C_4-alkynyl-cacbonyl, C_6-,C_{10}-,C_{14}-arylcacbonyl, C_1-C_4-alkylsulphanyl, C_3-C_4-xycloalkyl-sulphanyl, C_1-C_4-alkylthio, C_2-C_4-alkenylthio, C_3-C_4-xycloalkenylthio, C_2-C_4-alkynyl-thio, C_1-C_4-alkylsulphenyl và C_1-C_4-alkylsulphinyl, bao gồm cả các chất đồng phân đối ảnh của nhóm C_1-C_4-alkylsulphinyl, C_1-C_4-alkylsulphonyl, *N*-mono-C_1-C_4-alkylaminosulphonyl, *N,N*-di-C_1-C_4-alkylaminosulphonyl, C_1-C_4-alkylphosphinyl, C_1-C_4-alkylphosphonyl, bao gồm cả các chất đồng phân đối ảnh của C_1-C_4-alkylphosphinyl và C_1-C_4-alkylphosphonyl, *N*-C_1-C_4-alkylaminocacbonyl, *N,N*-di-C_1-C_4-alkylaminocacbonyl, N-C_1-C_4-alkanoylaminocacbonyl, N-C_1-C_4-alkanoyl-N-C_1-C_4-alkylaminocacbonyl, C_6-,C_{10}-,C_{14}-aryl, C_6-,C_{10}-,C_{14}-aryloxy, benzyl, benzyloxy, benzylthio, C_6-,C_{10}-,C_{14}-arylthio, C_6-,C_{10}-,C_{14}-arylamino, benzylamino, heteroxyclyl và trialkylsilyl, các phần tử thế được liên kết thông qua liên kết đôi như C_1-C_4-alkyliden (ví dụ, metyliden hoặc etyliden), nhóm oxo, nhóm thioxo, nhóm imino và nhóm imino được thế. Khi hai hoặc nhiều gốc tạo ra một hoặc nhiều vòng, các vòng này có thể là vòng cacbon, dị vòng, no, no một phần, không no, ví dụ, bao gồm các vòng thơm và được thế tiếp.

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

Các nhóm hóa học được thế halogen hoặc các nhóm halogen hóa theo sáng chế (ví dụ, alkyl hoặc alkoxy) được thế một lần hoặc nhiều lần bằng halogen tới số lượng phần tử thế nhiều nhất có thể. Các nhóm như vậy cũng được gọi là nhóm halo (ví dụ, haloalkyl). Trong trường hợp thế nhiều lần bằng halogen, các nguyên tử halogen có thể giống nhau hoặc khác nhau, và tất cả có thể được liên kết với một nguyên tử cacbon hoặc có thể được liên kết với nhiều nguyên tử cacbon. Halogen cụ thể là flo, clo, brom hoặc iot, tốt hơn là flo, clo hoặc brom và tốt hơn nữa là flo. Các nhóm được thế halogen tốt hơn nữa là monohaloxycloalkyl như 1-floxyclopropyl, 2-floxyclopropyl hoặc 1-floxyclobutyl, monohaloalkyl như 2-cloetyl, 2-floetyl, 1-cloetyl, 1-floetyl, clometyl, hoặc flometyl; perhaloalkyl như triclometyl hoặc triflometyl hoặc CF_2CF_3, polyhaloalkyl như diflometyl, 2-flo-2-cloetyl, diclometyl, 1,1,2,2-tetrafloetyl hoặc 2,2,2-trifloetyl. Các ví dụ, khác về haloalkyl là triclometyl, clodiflometyl, dicloflometyl, clometyl, bromometyl, 1-floetyl, 2-floetyl, 2,2-difloetyl, 2,2,2-trifloetyl, 2,2,2-tricloetyl, 2-clo-2,2-difloetyl, pentafloetyl, 3,3,3-triflopropyl và pentaflo-t-butyl. Được ưu tiên là các haloalkyl có từ 1 đến 4 nguyên tử cacbon và từ 1 đến 9, tốt hơn là từ 1 đến 5 nguyên tử halogen giống nhau hoặc khác nhau được chọn từ flo, clo và brom. Đặc biệt được ưu tiên là các haloalkyl có 1 hoặc 2 nguyên tử cacbon và từ 1 đến 5 nguyên tử halogen giống nhau hoặc khác nhau được chọn từ flo và clo, như diflometyl, triflometyl hoặc 2,2-difloetyl, không kể các nhóm khác. Các ví dụ, khác về hợp chất được thế halogen là haloalkoxy như OCF_3, $OCHF_2$, OCH_2F, OCF_2CF_3, OCH_2CF_3, OCH_2CHF_2 và OCH_2CH_2Cl, các haloalkylsulphanyl như diflometylthio, triflometylthio, triclometylthio, clodiflometylthio, 1-floetylthio, 2-floetylthio, 2,2-difloetylthio, 1,1,2,2-tetrafloetylthio, 2,2,2-trifloetylthio hoặc 2-clo-1,1,2-trifloetylthio, các haloalkylsulphinyl như diflometylsulphinyl, triflometyl-sulphinyl, triclometylsulphinyl, clodiflometylsulphinyl, 1-floetylsulphinyl, 2-floetyl-sulphinyl, 2,2-difloetylsulphinyl, 1,1,2,2-tetrafloetylsulphinyl, 2,2,2-trifloetylsulphinyl và 2-clo-1,1,2-trifloetylsulphinyl, các haloalkylsulphinyl như diflometylsulphinyl, triflometylsulphinyl, triclometylsulphinyl, clodiflometylsulphinyl, 1-floetylsulphinyl, 2-floetylsulphinyl, 2,2-difloetylsulphinyl, 1,1,2,2-tetrafloetylsulphinyl, 2,2,2-trifloetyl-sulphinyl và 2-clo-1,1,2-trifloetylsulphinyl, các nhóm haloalkylsulphonyl như diflometylsulphonyl, triflometylsulphonyl, triclometylsulphonyl, clodiflometyl-

sulphonyl, 1-floetylsulphonyl, 2-floetylsulphonyl, 2,2-difloetylsulphonyl, 1,1,2,2-tetrafloetylsulphonyl, 2,2,2-trifloetylsulphonyl và 2-clo-1,1,2-trifloetylsulphonyl.

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

Amino được thế như amino được thế một lần hoặc hai lần có nghĩa là gốc từ nhóm các gốc amino được thế, các gốc này được thế *N*, ví dụ, bởi một hoặc hai gốc giống nhau hoặc khác nhau từ nhóm alkyl, hydroxy, amino, alkoxy, axyl và aryl; tốt hơn là *N*-mono- và N,N-dialkylamino, (ví dụ, metylamino, etylamino, *N,N*-dimetylamino, *N,N*-dietylamino, *N,N*-di-n-propylamino, *N,N*-diisopropylamino hoặc N,*N*-dibutylamino), các nhóm *N*-mono- hoặc N,*N*-dialkoxyalkylamino (ví dụ, *N*-metoxymetylamino, *N*-metoxyetylamino, *N,N*-di(metoxymetyl)amino hoặc N,*N*-di(metoxyetyl)amino), *N*-mono- và *N,N*-diarylamino, như các anilin tùy ý được thế, axylamino, *N,N*-diaxylamino, *N*-alkyl-*N*-arylamino, *N*-alkyl-*N*-axylamino và cả các *N*-dị vòng no; được ưu tiên ở đây là các gốc alkyl có từ 1 đến 4 nguyên tử cacbon; ở đây, aryl tốt hơn là phenyl hoặc phenyl được thế; đối với axyl, định nghĩa bổ sung dưới đây được áp dụng, tốt hơn là (C_1-C_4)-alkanoyl. Định nghĩa tương tự áp dụng cho hydroxylamino hoặc hydrazino được thế.

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

Ví dụ, về các nhóm amino vòng có các nhóm một vòng no và không no có nguyên tử nitơ làm nguyên tử khác loại bao gồm 1-azetidinyl, pyrolidino, 2-pyrolidin-1-yl, 1-pyrolyl, piperidino, 1,4-dihydropyrazin-1-yl, 1,2,5,6-tetrahydropyrazin-1-yl, 1,4-dihydropyridin-1-yl, 1,2,5,6-tetrahydropyridin-1-yl, homopiperidinyl; ví dụ, về các nhóm amino vòng có các nhóm một vòng no và không no có hai hoặc nhiều nguyên tử nitơ làm nguyên tử khác loại bao gồm 1-imidazolidinyl, 1-imidazolyl, 1-pyrazolyl, 1-triazolyl, 1-tetrazolyl, 1-piperazinyl, 1-homopiperazinyl, 1,2-dihydropiperazin-1-yl, 1,2-dihydropyrimidin-1-yl, perhydropyrimidin-1-yl, 1,4-diazaxycloheptan-1-yl; ví dụ, về các nhóm amino vòng có các nhóm một vòng no và không no có một hoặc hai nguyên tử oxy và từ 1 đến 3 nguyên tử nitơ làm nguyên tử khác loại, ví dụ, oxazolidin-3-yl, 2,3-dihydroisoxazol-2-yl, isoxazol-2-yl, 1,2,3-oxadiazin-2-yl, morpholino, ví dụ, về các nhóm amino vòng có các nhóm một vòng no và không no có từ 1 đến 3 nguyên tử nitơ và từ 1 đến 2 nguyên tử lưu huỳnh làm nguyên tử khác loại bao gồm thiazolidin-3-yl, isothiazolin-2-yl, thiomorpholino, hoặc dioxothiomorpholino; ví dụ, về nhóm amino vòng có nhóm vòng ngưng tụ no và không no bao gồm indol-1-yl, 1,2-dihydrobenzimidazol-1-yl, perhydropyrolo[1,2-a]pyrazin-2-yl; ví dụ, về các nhóm amino vòng có các nhóm vòng xoắn bao gồm 2-azaspiro[4,5]decan-2-yl; ví dụ, về các nhóm amino vòng có các nhóm dị vòng có cầu bao gồm 2-azabixyclo[2.2.1]heptan-7-yl.

Amino được thế cũng bao gồm các hợp chất amoni bậc bốn (các muối) có 4 phần tử thế hữu cơ trên nguyên tử nitơ.

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

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

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

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

Hợp chất theo sáng chế có thể xuất hiện trong các phương án được ưu tiên. Từng phương án riêng biệt mô tả ở đây có thể được kết hợp với nhau. Các kết hợp mà trái với quy luật tự nhiên thì sẽ không bao gồm trong sáng chế và do đó, người có hiểu biết trung bình về lĩnh vực này sẽ bác bỏ trên cơ sở kiến thức chuyên ngành của họ. Ví dụ, các cấu trúc vòng có 3 hoặc nhiều hơn 3 nguyên tử oxy liền kề được loại trừ.

Phương án về các hợp chất theo sáng chế

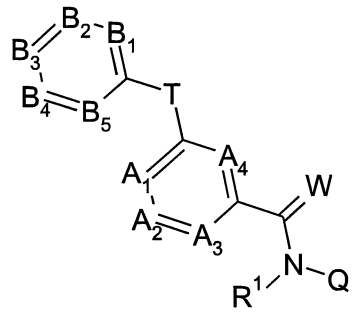
Sẽ rõ ràng đối với người có hiểu biết trung bình về lĩnh vực này rằng, tất cả mọi phương án có thể có mặt ở dạng riêng rẽ hoặc dạng kết hợp.

Các hợp chất có công thức (I), nhất là các hợp chất có công thức (Ia), (Ib), (I-T2), (I-T3), (I-T4), (I-T22) và (I-T23), trường hợp thích hợp, tùy thuộc vào bản chất

của các phần tử thế, có thể ở dạng muối, chất hỗ biến, chất đồng phân hình học và/hoặc chất đồng phân quang hoạt hoặc các hỗn hợp đồng phân tương ứng trong các chế phẩm khác nhau.

Trường hợp thích hợp, các hợp chất theo sáng chế có thể ở dạng đa hình khác nhau hoặc ở dạng hỗn hợp của các dạng đa hình khác nhau. Cả dạng đa hình tinh khiết và hỗn hợp đa hình tạo thành một phần nội dung của sáng chế và có thể được sử dụng theo sáng chế.

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



(I)

trong đó:

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

các gốc sau đây là như sau:

A_1 là CR^2 hoặc N,

A_2 là CR^3 hoặc N,

A_3 là CR^4 hoặc N,

A_4 là CR^5 hoặc N,

B_1 là CR^6 hoặc N,

B_2 là CR^7 hoặc N,

B_3 là CR^8 hoặc N,

B_4 là CR^9 hoặc N, và

B_5 là CR^{10} hoặc N,

nhưng không nhiều hơn ba trong số A_1 đến A_4 gốc là N và không nhiều hơn ba trong số B_1 đến B_5 gốc đồng thời là N;

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

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

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

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

W là O hoặc S;

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

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

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

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

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

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

R^1

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

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

W

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

Q

Theo phương án được ưu tiên khác, Q là H, trong mỗi trường hợp là metyl, etyl, n-propyl, 1-metyletyl, 1,1-dimetyletyl, 1-metylpropyl, n-butyl, 2-metylpropyl, 2-

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

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

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

metoxyiminometyl, 1-(*N*-metoxyimino)etyl, metylsulphanyl, metylsulphonyl, metylsulphinyl, triflometylsulphonyl, triflometylsulphinyl, triflometylsulphanyl, *N*,*N*-dimetylamino.

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

Theo phương án được ưu tiên hơn nữa, Q là C_1-C_4-alkyl được thế flo như 2,2,2-trifloetyl, 2,2-difloetyl, 3,3,3-triflopropyl; C_3-C_4-xycloalkyl như xyclopropyl hoặc xyclobutyl; C_3-C_4-xycloalkyl tùy ý được thế như 1-triflometylxyclopropyl, 1-tert-butylxyclopropyl, 1-thiocarbamoylxyclopropyl, 1-xyanoxyclopropyl, trans-2-floxyclopropyl, cis-2-floxyclopropyl; C_4-C_6-heteroxycloalkyl như oxetan-3-yl, thietan-3-yl, 1-oxidothietan-3-yl hoặc 1,1-dioxidothietan-3-yl; benzyl; pyridin-2-ylmetyl; metylsulphonyl; hoặc 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetylamino)etyl.

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

A1 đến A4

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

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

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

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

B1 đến B5

Theo một phương án được ưu tiên không nhiều hơn một (1) gốc từ B_1 đến B_5 là N (nói cách khác: một (1) gốc từ B_1 đến B_5 là N); hoặc không (0) gốc nào từ B_1 đến B_5 là N (mỗi gốc từ B_1 đến B_5 là CR^6, CR^7, CR^8, CR^9 và CR^{10}).

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

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

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

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

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

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

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

R8

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

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

Theo phương án được ưu tiên hơn nữa, R^8 là diflometyl, triclometyl, clodiflometyl, dicloflometyl, triflometyl, 1-floetyl, 2-floetyl, 2,2-difloetyl, 2,2,2-trifloetyl, 1,2,2,2-tetrafloetyl, 1-clo-1,2,2,2-tetrafloetyl, 2,2,2-tricloetyl, 2-clo-2,2-difloetyl, 1,1-difloetyl, pentafloetyl, pentaflo-tert-butyl, heptaflo-n-propyl,

heptafloisopropyl, nonaflo-n-butyl, nonaflo-sec-butyl, flometoxy, diflometoxy, clodiflometoxy, dicloflometoxy, triflometoxy, 2,2,2-trifloetoxy, 2-clo-2,2-difloetoxy, pentafloetoxy, triflometylsulphonyl, triflometylsulphinyl, triflometylsulphanyl.

Theo một phương án được ưu tiên nữa, R^8 là C_1-C_3-alkyl được thế halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkyl perflo hóa (CF_3, C_2F_5 hoặc C_3F_7)) hoặc alkoxy được thế halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkoxy perflo hóa (OCF_3, OC_2F_5 hoặc OC_3F_7)).

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

A và B

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

A_1 là C-H,
A_2 là CR^3 hoặc N,
A_3 là CR^4,
A_4 là CR^5 hoặc N,

B_1 là CR^6 hoặc N,
B_2 là CR^7,
B_3 là CR^8,
B_4 là CR^9 và
B_5 là CR^{10} hoặc N.

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

A_1 là C-H,
A_2 là CR^3 hoặc N,
A_3 là CR^4,
A_4 là C-H,

B_1 là CR^6 hoặc N,

B_2 là C-H,

B_3 là CR^8,

B_4 là C-H và

B_5 là CR^{10} hoặc N.

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

A_1 là C-H,

A_2 là CR^3 hoặc N,

A_3 là CR^4,

A_4 là C-H hoặc N,

B_1 là CR^6,

B_2 là C-H,

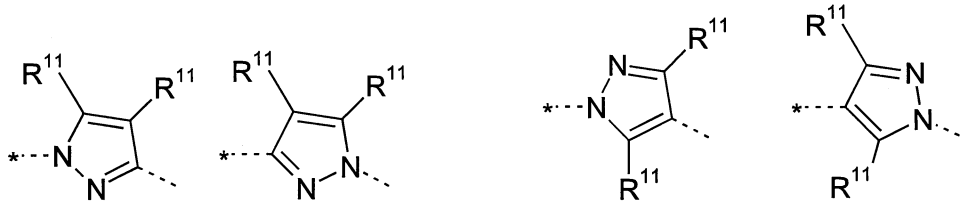
B_3 là CR^8,

B_4 là C-H và

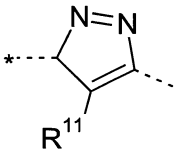
B_5 là CR^{10} hoặc N.

T

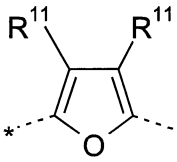
Theo phương án được ưu tiên khác, T là một trong các hệ dị vòng thơm 5 cạnh được thể hiện dưới đây, trong đó liên kết với nguyên tử cacbon của hệ vòng (C-B_1-B_5) được nhận diện bằng liên kết đường chấm có đánh dấu sao, và liên kết với nguyên tử cacbon của hệ vòng (C-A_1-A_2-A_3-C-A_4) được nhận diện bằng liên kết đường chấm.



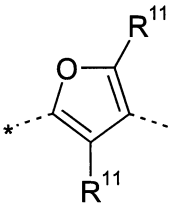
T1 T2 T3 T4



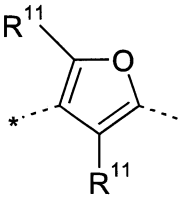
T5



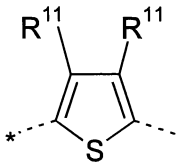
T8



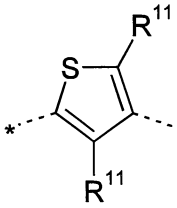
T9



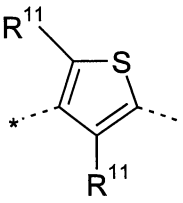
T10



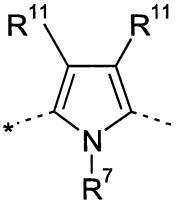
T11



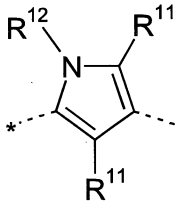
T12



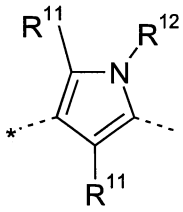
T13



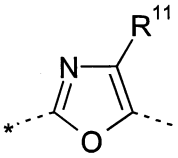
T14



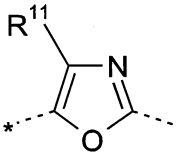
T15



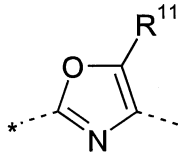
T16



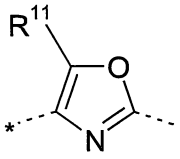
T18



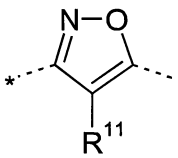
T19



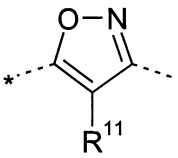
T20



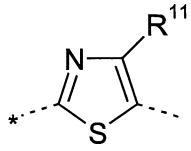
T21



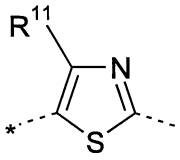
T22



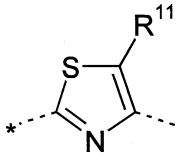
T23



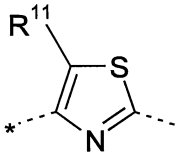
T24



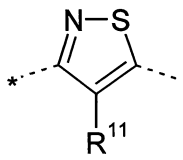
T25



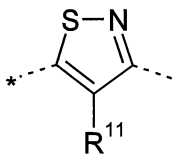
T26



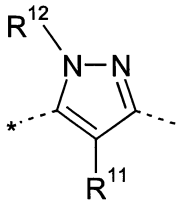
T27



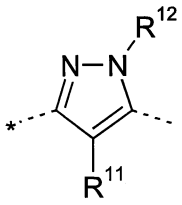
T28



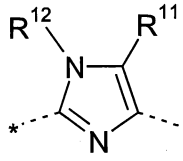
T29



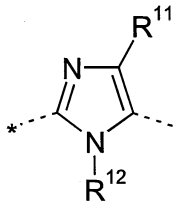
T30



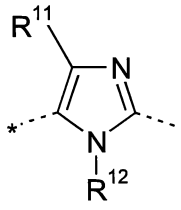
T31



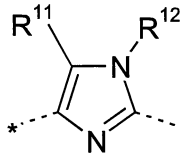
T32



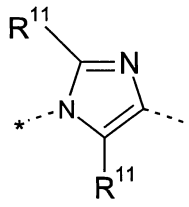
T33



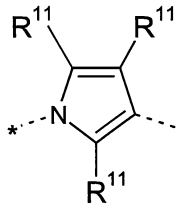
T34



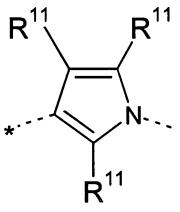
T35



T45



T46



T47

trong đó

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

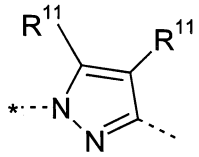
R^{12} là H, halogen, xyano, nitro, amino hoặc C_1-C_6-alkyl, C_1-C_6-alkyloxy, C_1-C_6-alkylcacbonyl, C_1-C_6-alkylsulphanyl, C_1-C_6-alkylsulphinyl, C_1-C_6-alkylsulphonyl tùy ý được thế, tốt hơn là H hoặc metyl.

Theo phương án được ưu tiên khác, R^{11} độc lập là halogen, xyano, nitro, amino, metyl, etyl, 1-metyletyl, tert-butyl, triflometyl, diflometyl, metoxy, etoxy,

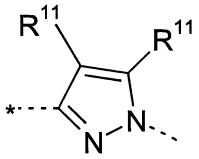
triflometoxy, 2,2-difloetoxy, 2,2,2-trifloetoxy, metylcacbonyl, etylcacbonyl, triflometylcacbonyl, metylsulphanyl, metylsulphinyl, metylsulphonyl, triflometylsulphonyl, triflometylsulphanyl hoặc triflometylsulphinyl.

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

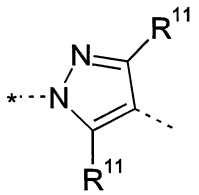
Theo phương án được ưu tiên khác, T là một trong các hệ dị vòng thơm 5 cạnh được thể hiện dưới đây, trong đó liên kết với nguyên tử cacbon của hệ vòng (C-B_1-B_5) được nhận diện bằng liên kết đường chấm có đánh dấu sao, và liên kết với nguyên tử cacbon của hệ vòng (C-A_1-A_2-A_3-C-A_4) được nhận diện bằng liên kết đường chấm.



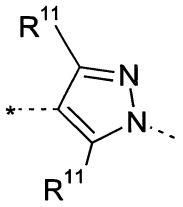
T1



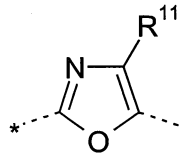
T2



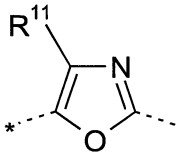
T3



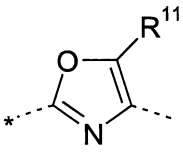
T4



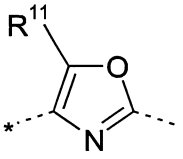
T18



T19



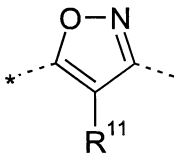
T20



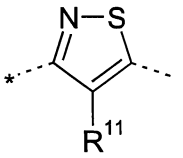
T21



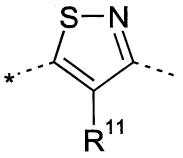
T22



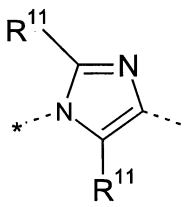
T23



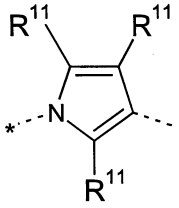
T28



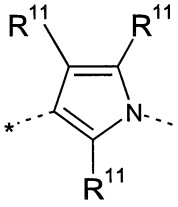
T29



T45



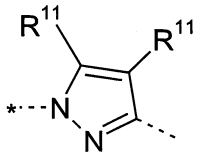
T46



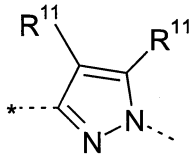
T47

trong đó R^{11} được xác định một cách độc lập như được mô tả ở đây.

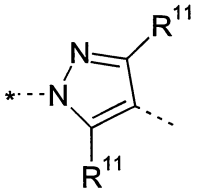
Theo phương án được ưu tiên hơn nữa, T là một trong các hệ dị vòng thơm 5 cạnh được thể hiện dưới đây, trong đó liên kết với nguyên tử cacbon của hệ vòng (C-B_1-B_5) được nhận diện bằng liên kết đường chấm có đánh dấu sao, và liên kết với nguyên tử cacbon của hệ vòng (C-A_1-A_2-A_3-C-A_4) được nhận diện bằng liên kết đường chấm.



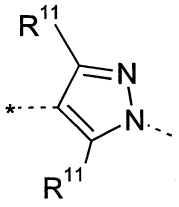
T1



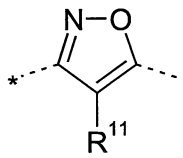
T2



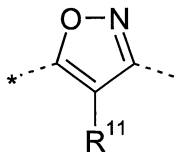
T3



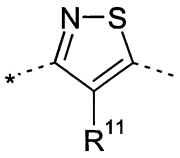
T4



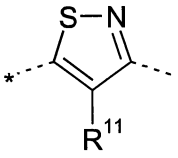
T22



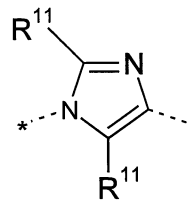
T23



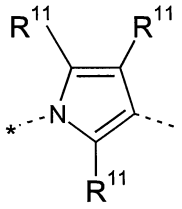
T28



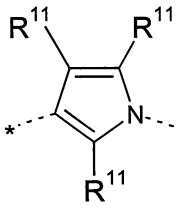
T29



T45



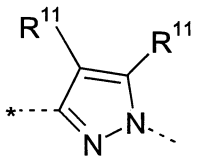
T46



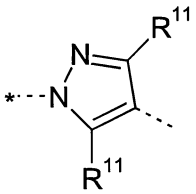
T47

trong đó R^{11} là như được xác định ở đây và n có các giá trị là 1 hoặc 2.

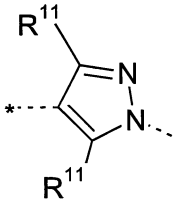
Theo phương án được đặc biệt ưu tiên, T là một trong các hệ dị vòng thơm 5 cạnh được thể hiện dưới đây, trong đó liên kết với nguyên tử cacbon của hệ vòng (C-B_1-B_5) được nhận diện bằng liên kết đường chấm có đánh dấu sao, và liên kết với nguyên tử cacbon của hệ vòng (C-A_1-A_2-A_3-C-A_4) được nhận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



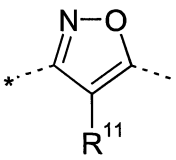
T2



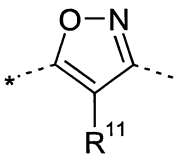
T3



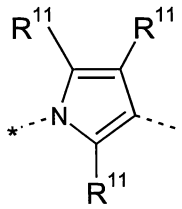
T4



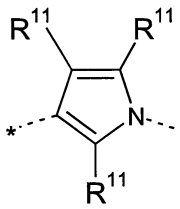
T22



T23



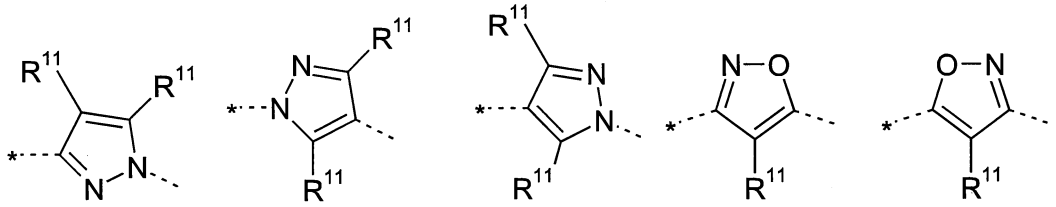
T46



T47

trong đó R^{11} được xác định một cách độc lập như được mô tả ở đây.

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



T2 T3 T4 T22 T23

trong đó R^{11} được xác định một cách độc lập như được mô tả ở đây.

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

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

A_2 là CR^3 hoặc N,

A_3 là CR^4,

A_4 là C-R^5 hoặc N,

B_1 là CR^6,

B_2 là C-H,

B_3 là CR^8,

B_4 là C-H,

B_5 là CR^{10} hoặc N,

R^1 là hydro,

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

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

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

R^5 là hydro hoặc flo, tốt hơn là H,

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

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

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

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

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

T là T được chọn từ nhóm bao gồm T1 đếnT47, tốt hơn là T2, T3, T4, T22 hoặc T23 (tốt hơn nữa là T22 hoặcT23).

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

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

A_2 là CR^3 hoặc N,

A_3 là CR^4,

A_4 là C-R^5 hoặc N,

B_1 là CR^6,

B_2 là C-H,

B_3 là CR^8,

B_4 là C-H,

B_5 là CR^{10} hoặc N,

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

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

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

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

R^5 là hydro hoặc flo, tốt hơn là H,

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

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

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

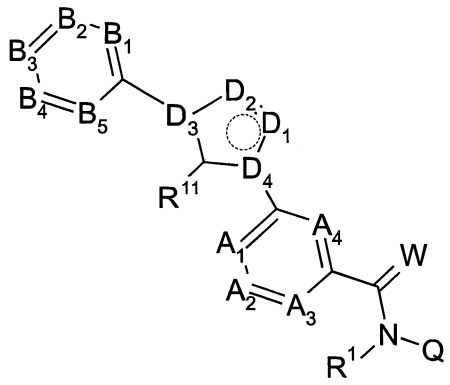
W là oxy hoặc lưu huỳnh, tốt hơn là oxy,

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

(như 1-(tert-butyl)xyclopropyl), 1-(thiocarbamoyl)xyclopropyl, C_1-C_3-alkyl được thế halogen (ví dụ, CH_2CF_3, $CH_2CH_2CF_3$), thietan-3-yl, N-metylpyrazol-3-yl, 2-oxo-2(2,2,2-trifloetylamino)etyl, và

T là T được chọn từ nhóm bao gồm T1 đếnT47, tốt hơn là T2, T3, T4, T22 hoặc T23 (tốt hơn nữa là T22 hoặcT23).

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



(Ia)

trong đó:

mỗi R^1, R^{11}, Q, W, A_1, A_2, A_3, A_4, B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 được xác định như được mô tả ở đây, trong đó không nhiều hơn một gốc được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 là N và không nhiều hơn một gốc được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N; hoặc trong đó một hoặc hai gốc được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 có thể là N và không nhiều hơn một gốc được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N; và

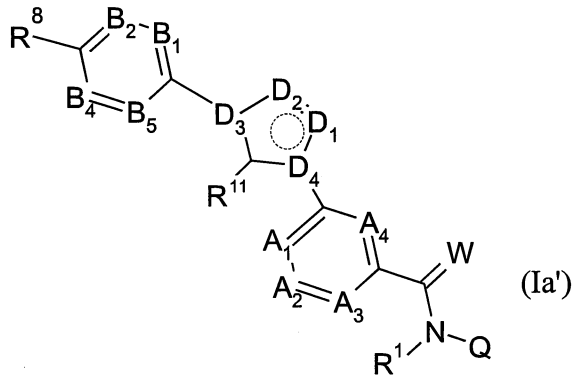
mỗi D_1 và D_2 độc lập là C-R^{11} hoặc nguyên tử khác loại, tốt hơn là C-R^{11} hoặc nguyên tử khác loại được chọn từ N, O và S, tốt hơn nữa là C-R^{11} hoặc nguyên tử khác loại được chọn từ N và O;

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

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

◌ là hệ thơm.

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



(Ia')

trong đó:

mỗi R^1, R^{11}, Q, W, A_1, A_2, A_3, A_4, B_1, B_2, B_4 và B_5 được xác định như được mô tả ở đây, trong đó không nhiều hơn một gốc được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 là N và không nhiều hơn một gốc được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N; hoặc trong đó một hoặc hai gốc được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 có thể là N và không nhiều hơn một gốc được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N;

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

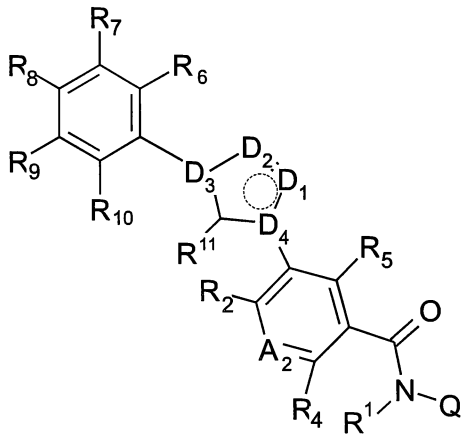
mỗi gốc D_3 và D_4 độc lập là C hoặc nguyên tử khác loại được chọn từ N;

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

◌ là hệ thơm

và R^8 là như được xác định ở đây, tốt hơn là C_1-C_4-alkyl perflo hóa.

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



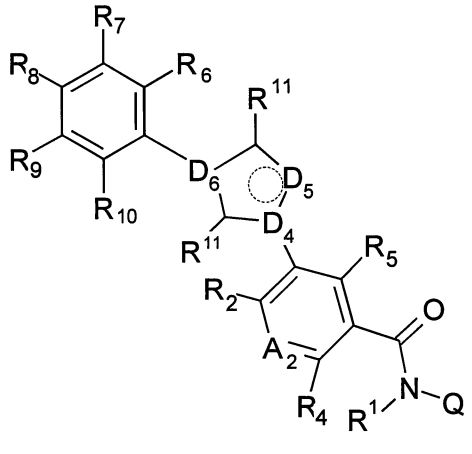
(Ib)

trong đó mỗi R_1, R_2, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9, R_{10}, R_{11}, A_2, Q, D_1, D_2, D_3 D_4 và ◌ là như được xác định ở đây, và trong đó một (1) hoặc hai gốc được chọn từ D_1, D_2, D_3 và D_4 là nguyên tử khác loại.

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

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

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



(Ic)

trong đó mỗi R_1, R_2, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9, R_{10}, R_{11}, A_2 và Q được xác định như được mô tả ở đây và ◌ là hệ thơm; và

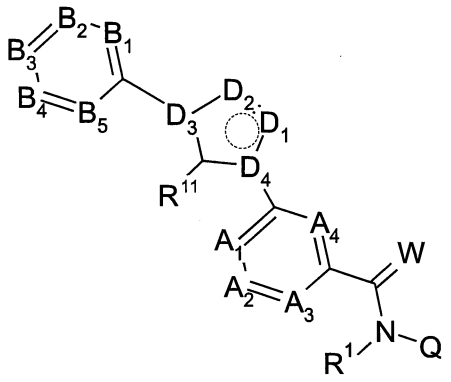
một gốc được chọn từ D_4 và D_6 là N, trong đó gốc khác tương ứng được chọn từ D_4 và D_6 là N hoặc C; và

D_5 là N hoặc C-R^{11};

với điều kiện là không nhiều hơn hai gốc được chọn từ D_4, D_5 và D_6 là N.

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

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



(Id)

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

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

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

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

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

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

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

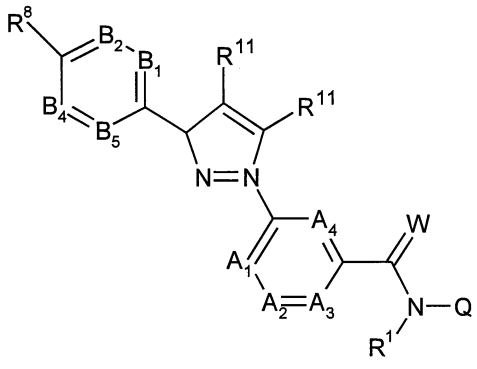
Do đó, theo một phương án được rất đặc biệt ưu tiên, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I-T2). Một phương án được ưu tiên lại đề cập đến các hợp chất có công thức (I-T2) trong đó R^1 là H. Một phương án được ưu tiên khác lại đề cập đến các hợp chất có công thức (I-T2) trong đó R^1 là metyl.

Một phương án được rất đặc biệt ưu tiên nữa đề cập đến các hợp chất có công thức (I-T3). Một phương án được ưu tiên lại đề cập đến các hợp chất có công thức (I-T3) trong đó R^1 là H. Một phương án được ưu tiên khác lại đề cập đến các hợp chất có công thức (I-T3) trong đó R^1 là metyl.

Một phương án được rất đặc biệt ưu tiên nữa đề cập đến các hợp chất có công thức (I-T4). Một phương án được ưu tiên lại đề cập đến các hợp chất có công thức (I-T4) trong đó R^1 là H. Một phương án được ưu tiên khác lại đề cập đến các hợp chất có công thức (I-T4) trong đó R^1 là metyl.

Một phương án được rất đặc biệt ưu tiên nữa đề cập đến các hợp chất có công thức (I-T22). Một phương án được ưu tiên lại đề cập đến các hợp chất có công thức (I-T22) trong đó R^1 là H. Một phương án được ưu tiên khác lại đề cập đến các hợp chất có công thức (I-T22) trong đó R^1 là metyl.

Một phương án được rất đặc biệt ưu tiên nữa đề cập đến các hợp chất có công thức (I-T23). Một phương án được ưu tiên lại đề cập đến các hợp chất có công thức (I-T23) trong đó R^1 là H. Một phương án được ưu tiên khác lại đề cập đến các hợp chất có công thức (I-T23) trong đó R^1 là metyl.

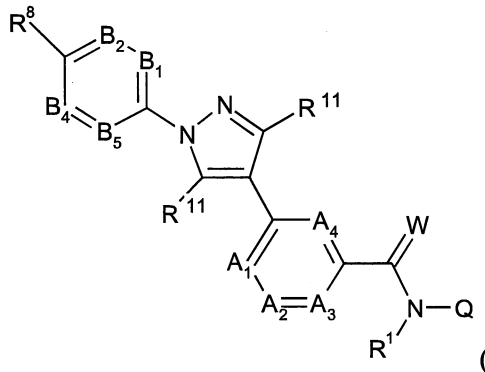


(I-T2)

trong đó:

mỗi R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, R^{11}, Q và W được xác định như được mô tả ở đây, trong đó không nhiều hơn một gốc được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 là N và không nhiều hơn một gốc được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N;

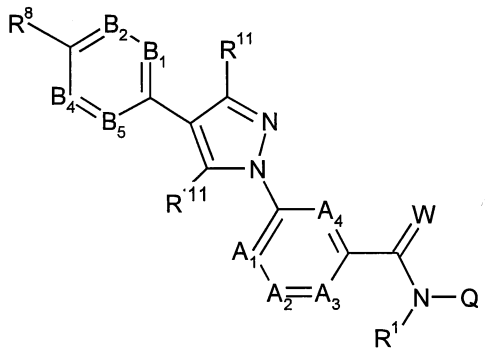
hoặc trong đó một hoặc hai gốc được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 có thể là N và không nhiều hơn một gốc được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N; hoặc



(I-T3)

trong đó:

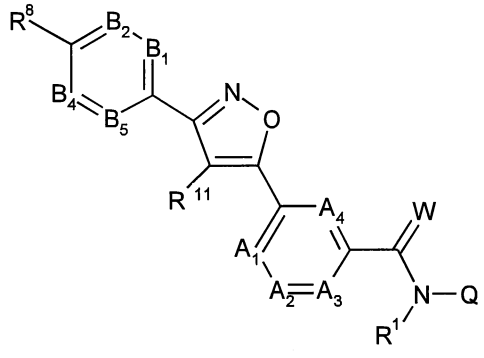
mỗi R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, R^{11}, Q và W được xác định như được mô tả ở đây, trong đó không nhiều hơn một gốc được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 là N và không nhiều hơn một gốc được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N; hoặc trong đó một hoặc hai gốc được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 có thể là N và không nhiều hơn một gốc được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N; hoặc



(I-T4)

trong đó:

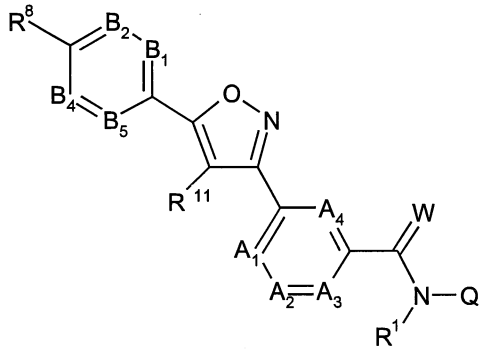
mỗi R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, R^{11}, Q và W được xác định như được mô tả ở đây, trong đó không nhiều hơn một gốc được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 là N và không nhiều hơn một gốc được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N; hoặc trong đó một hoặc hai gốc được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 có thể là N và không nhiều hơn một gốc được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N; hoặc



(T-22)

trong đó:

mỗi R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, R^{11}, Q và W được xác định như được mô tả ở đây, trong đó không nhiều hơn một gốc được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 là N và không nhiều hơn một gốc được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N; hoặc trong đó một hoặc hai gốc được chọn từ A_1, A_2, A_3, A_4 có thể là N và không nhiều hơn một gốc được chọn từ B_1, B_2, B_3, B_4 và B_5 là N; hoặc

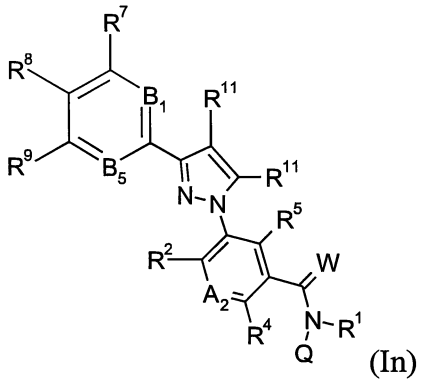


(I-T23)

trong đó:

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

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



(In)

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

Một phương án được ưu tiên nữa đề cập đến các hợp chất có công thức (In) trong đó:

W là O;

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

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

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

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

mỗi R^7 và R^9 là H;

R^{11} trong mỗi trường hợp là H;

R^1 là H;

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

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

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

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

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

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

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

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

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

C_3-alkoxy được thế halogen, tốt hơn nữa là C_1-C_3-alkyl được thế halogen như C_1-C_3-alkyl flo hóa (ví dụ, C_3-alkyl flo hóa như perflopropyl).

Một phương án được ưu tiên nữa đề cập đến các hợp chất có công thức (In) trong đó:

W là O;

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

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

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

mỗi R^7 và R^9 là H;

R^{11} trong mỗi trường hợp là H;

R^1 là metyl;

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

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

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

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

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

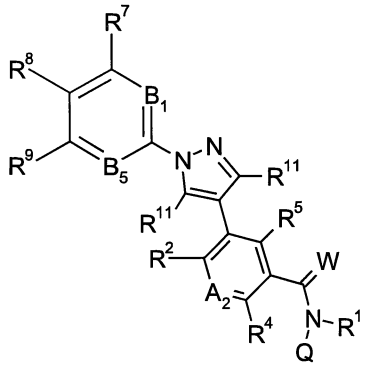
A_2 là N hoặc C-R^3, tốt hơn là C-R^3 trong đó

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

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

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

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



(Ie)

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

Một phương án được ưu tiên nữa đề cập đến các hợp chất có công thức (Ie) trong đó:

W là O;

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

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

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

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

mỗi R^7 và R^9 là H;

R^{11} trong mỗi trường hợp là H;

R^1 là H;

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

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

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

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

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

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

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

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

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

C_3-alkoxy được thế halogen, tốt hơn nữa là C_1-C_3-alkyl được thế halogen như C_1-C_3-alkyl flo hóa (ví dụ, C_3-alkyl flo hóa như perflopropyl).

Một phương án được ưu tiên nữa đề cập đến các hợp chất có công thức (Ie) trong đó:

W là O;

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

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

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

mỗi R^7 và R^9 là H;

R^{11} trong mỗi trường hợp là H;

R^1 là metyl;

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

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

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

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

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

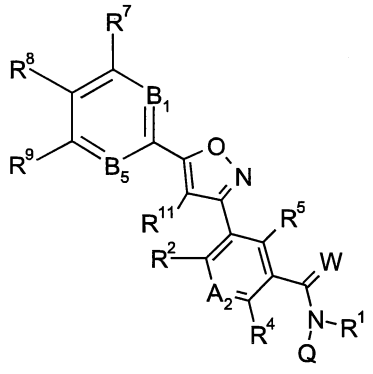
A_2 là N hoặc C-R^3, tốt hơn là C-R^3 trong đó

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

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

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

Một phương án được ưu tiên nữa đề cập đến các hợp chất có công thức (If) (T = T23)



(If)

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

Một phương án được ưu tiên đề cập đến các hợp chất có công thức (If) trong đó:

W là O;

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

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

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

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

mỗi R^7 và R^9 là H;

R^{11} trong mỗi trường hợp là H;

R^1 là H;

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

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

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

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

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

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

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

R^6 là H, halogen, C_1-C_4-alkyl tùy ý được thế hoặc C_1-C_4-alkoxy tùy ý được thế, tốt hơn là flo, clo, C_1-C_2-alkyl, C_1-C_2-alkyl được thế halogen (ví dụ, perflometyl) hoặc C_1-C_2-alkoxy tùy ý được thế halogen, tốt hơn nữa là flo, brom, clo, metyl, etyl, metyl flo hóa hoặc etyl flo hóa (tốt hơn nữa là perflometyl hoặc perfloetyl), metoxy flo hóa hoặc etoxy flo hóa (tốt hơn nữa là perflometoxy);

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

Một phương án được ưu tiên đề cập đến các hợp chất có công thức (If) trong đó:

W là O;

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

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

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

mỗi R^7 và R^9 là H;

R^{11} trong mỗi trường hợp là H;

R^1 là metyl;

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

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

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

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

R^{10} là hydro, C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkoxy, C_1-C_3-alkyl được thế halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkyl perflo hóa (CF_3, C_2F_5 hoặc C_3F_7)), C_1-C_3-alkoxy được thế halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkoxy perflo hóa (OCF_3, OC_2F_5 hoặc

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

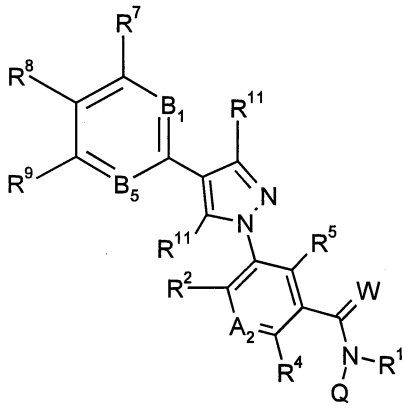
A_2 là N hoặc C-R^3, tốt hơn là C-R^3 trong đó:

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

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

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

Một phương án được ưu tiên nữa đề cập đến các hợp chất có công thức (Ig) (T = T4)



(Ig)

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

Một phương án được ưu tiên đề cập đến các hợp chất có công thức (Ig) trong đó:

W là O;

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

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

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

mỗi R^7 và R^9 là H;

R^{11} trong mỗi trường hợp là H;

R^1 là H;

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Một phương án được ưu tiên đề cập đến các hợp chất có công thức (Ig) trong đó:

W là O;

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

(=O), C_1-C_6-alkyl, C_1-C_4-alkenyl, C_1-C_6-alkoxy, C_1-C_6-alkylsulphanyl, C_1-C_6-alkylsulphinyl, C_1-C_6-alkylsulphonyl tùy ý được thế halogen;

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

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

mỗi R^7 và R^9 là H;

R^{11} trong mỗi trường hợp là H;

R^1 là metyl;

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

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

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

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

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

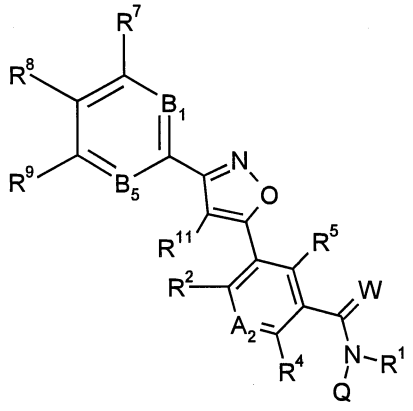
A_2 là N hoặc C-R^3, tốt hơn là C-R^3 trong đó

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

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

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

Một phương án được ưu tiên nữa đề cập đến các hợp chất có công thức (Io) (T = T22)



(Io)

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

Một phương án được ưu tiên đề cập đến các hợp chất có công thức (Io) trong đó:

W là O;

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

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

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

mỗi R^7 và R^9 là H;

R^{11} trong mỗi trường hợp là H;

R^1 là H;

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Một phương án được ưu tiên đề cập đến các hợp chất có công thức (Io) trong đó:

W là O;

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

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

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

mỗi R^7 và R^9 là H;

R^{11} trong mỗi trường hợp là H;

R^1 là metyl;

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

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

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

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

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

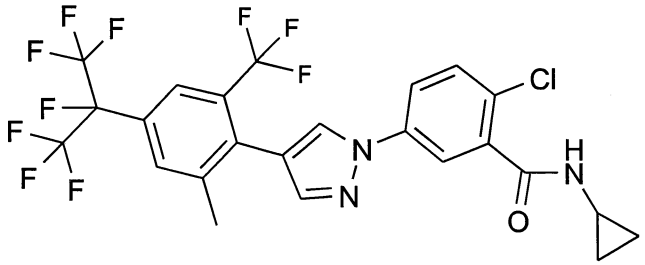
A_2 là N hoặc C-R^3, tốt hơn là C-R^3 trong đó

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

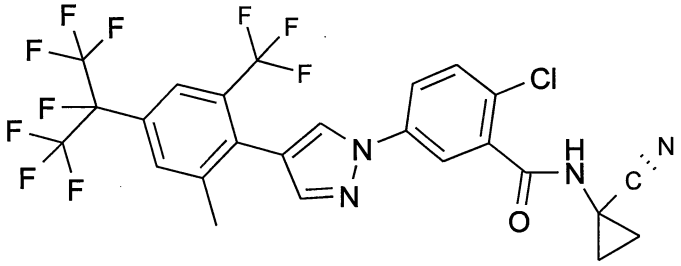
R^6 là hydro, C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkoxy, C_1-C_3-alkyl được thế halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkyl perflo hóa (CF_3, C_2F_5 hoặc C_3F_7)), C_1-C_3-alkoxy được thế halogen (tốt hơn là C_1-C_3-alkoxy perflo hóa (OCF_3, OC_2F_5 hoặc OC_3F_7)), C_1-C_3-alkylsulphanyl, C_1-C_3-alkylsulphinyl, C_1-C_3-alkylsulphonyl,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

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

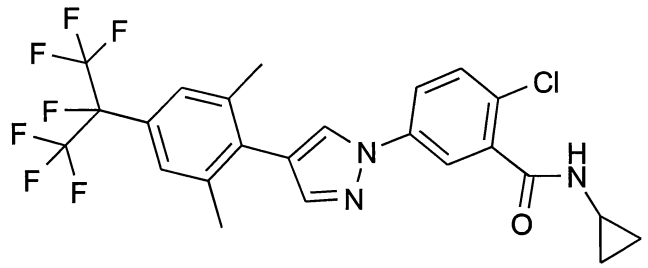
Các ví dụ, về các hợp chất có công thức (I) bao gồm các hợp chất có công thức cấu tạo sau:



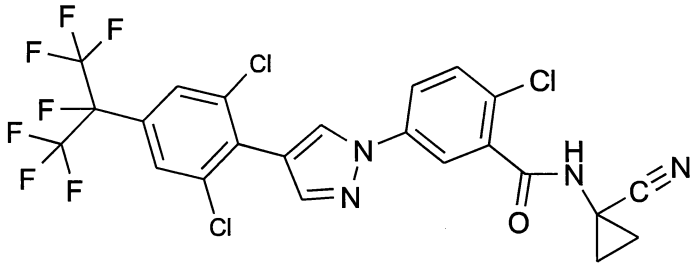
2-clo-N-xyclopropyl-5-[1-[4-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)-2-metyl-6-(triflometyl)phenyl]-1H-pyrazol-4-yl]benzamit,



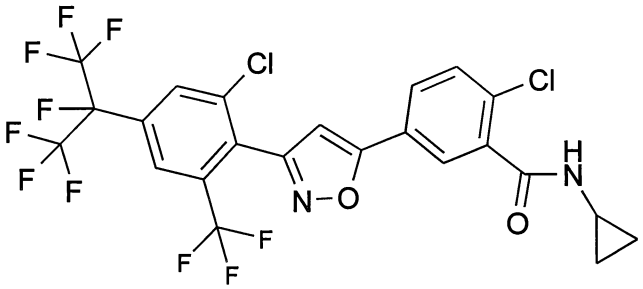
2-clo-N-(1-xyanoxyclopropyl-5-[1-[4-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)-2-metyl-6-(triflometyl)phenyl]-1H-pyrazol-4-yl]benzamit,



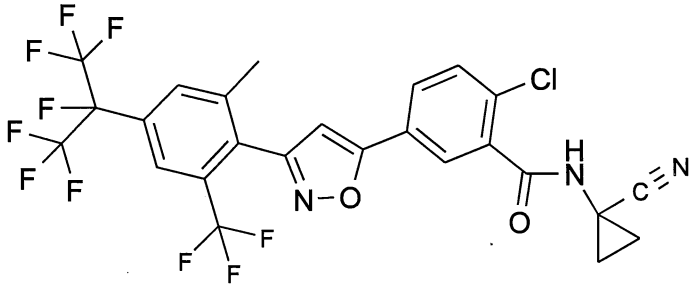
2-clo-N-xyclopropyl-5-[4-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-1-yl]benzamit,



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

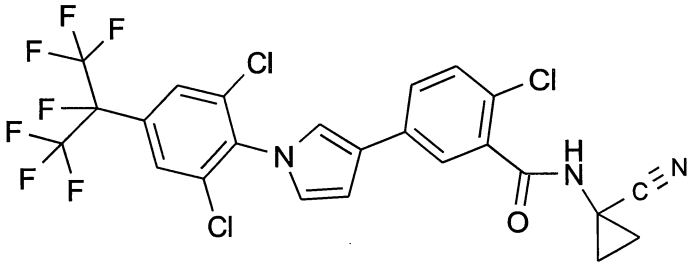


2-clo-5-[3-[2-clo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometyl)phenyl]isoxazol-5-yl]-N-xyclopropylbenzamit,

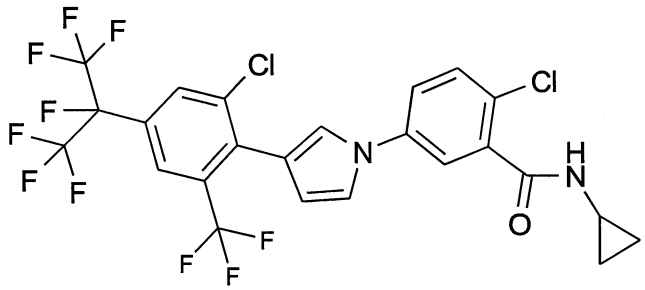


2-clo-N-(1-xyanoxyclopropyl)-5-[3-[2-metyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometyl)phenyl]isoxazol-5-yl]benzamit,

Các hợp chất khác theo sáng chế là



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



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

R1 Metyl

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

T3 - Metyl

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

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

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là metyl, T là T3, R^{11} trong T3 là H, W là O, A_1 là CH, A_2 là

CH hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CH, B_1 là CR^6, B_2 là CH, B_3 là CR^8, B_4 là CH, B_5 là CR^{10}, trong đó mỗi R^6 và R^{10} là một phần tử thế được chọn từ halogen (tốt hơn là clo, brom hoặc flo), C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkyl được thế halogen, C_1-C_3-alkoxy hoặc C_1-C_3-alkoxy được thế halogen, và tất cả các thông số khác là như được xác định ở đoạn [85] và đoạn [112].

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

T2 - Metyl

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

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

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

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

T4 - Metyl

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

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

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

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

T22 - Metyl

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

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

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

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

T23 - Metyl

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

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là metyl, T là T23, R^{11} trong T23 là H, W là O, A_1 là CR^2, A_2

là CR^3 hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CR^5, B_1 là CR^6, B_2 là CR^7, B_3 là CR^8, B_4 là CR^9, B_5 là CR^{10} và tất cả các thông số khác là như được xác định ở đoạn [85] và đoạn [0113] và các đoạn tiếp theo.

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

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

T3 - H

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

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

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là H, T là T3, R^{11} trong T3 là H, W là O, A_1 là CR^2, A_2 là CR^3 hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CR^5, B_1 là CR^6, B_2 là CR^7, B_3 là CR^8, B_4 là CR^9, B_5 là

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

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

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

T2 - H

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

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là H, T là T2, R^{11} trong T2 là H, W là O, A_1 là CR^2, A_2 là CR^3 hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CR^5, B_1 là CR^6, B_2 là CR^7, B_3 là CR^8, B_4 là CR^9, B_5 là CR^{10} và tất cả các thông số khác là như được xác định ở đoạn [85] và đoạn [0113] và các đoạn tiếp theo.

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là H, T là T2, R^{11} trong T2 là H, W là O, A_1 là CH, A_2 là CH hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CH, B_1 là CR^6, B_2 là CH, B_3 là CR^8, B_4 là CH, B_5 là CR^{10},

trong đó mỗi R^6 và R^{10} là một phần tử thế được chọn từ halogen (tốt hơn là clo, brom hoặc flo), C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkyl được thế halogen, C_1-C_3-alkoxy hoặc C_1-C_3-alkoxy được thế halogen, và tất cả các thông số khác là như được xác định ở đoạn [85] và đoạn [0113] và các đoạn tiếp theo.

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

T4 - H

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

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

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

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

T22 - H

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

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

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

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

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

T23 - H

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

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

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

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

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

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

Muối của hợp chất theo sáng chế là thích hợp theo sáng chế, ví dụ, muối với kiềm hoặc muối cộng axit, tất cả là các muối không độc thông thường, tốt hơn là muối được chấp nhận trong nông nghiệp và/hoặc được chấp nhận về mặt sinh lý. Được ưu tiên là muối với bazơ vô cơ, ví dụ, muối với kim loại kiềm (ví dụ, các muối natri, kali hoặc xesi), muối với kim loại kiềm thổ (ví dụ, các muối canxi hoặc magie), muối amoni hoặc muối với bazơ hữu cơ, đặc biệt là muối với các amin hữu cơ, ví dụ, các muối trietylamoni, dixyclohexylamoni, *N,N'*-dibenzyletylendiamoni, pyridin, picolin hoặc etanolamoni, các muối với axit vô cơ (ví dụ, hydroclorua, hydrobromua, dihydrosulphat, trihydrosulphat hoặc phosphat), các muối với axit carboxylic hữu cơ hoặc axit sulpho hữu cơ (ví dụ, format, axetat, trifloaxetat, maleat, tartrat, metansulphonat, benzensulphonat hoặc 4-toluensulphonat). Đã biết rõ rằng, các t-amin, ví dụ, một số trong số các hợp chất theo sáng chế có khả năng tạo ra N-oxit, điều này cũng tương tự với các muối theo sáng chế.

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

Sáng chế cũng đề cập đến phương pháp phòng trừ động vật gây hại, trong đó hợp chất có công thức (I) được cho tác động lên động vật gây hại và/hoặc môi trường sống của chúng. Việc phòng trừ động vật gây hại tốt hơn là được tiến hành trong nông và lâm nghiệp và trong bảo vệ nguyên liệu. Tốt hơn là sáng chế loại trừ phương pháp điều trị ngoại khoa hoặc bằng thuốc trên cơ thể người hoặc động vật và phương pháp chẩn đoán được thực hiện trên cơ thể người hoặc động vật.

Phần mô tả cũng mô tả việc sử dụng hợp chất có công thức (I) làm chất diệt sinh vật gây hại, nhất là làm chất bảo vệ cây trồng.

Trong ngữ cảnh của sáng chế, thuật ngữ "chất diệt sinh vật gây hại" cũng luôn luôn bao hàm thuật ngữ "chất bảo vệ cây trồng".

Các hợp chất có công thức (I), có khả năng dung nạp tốt trên thực vật, không gây độc đối với động vật máu nóng và tương thích tốt với môi trường, thích hợp trong bảo vệ thực vật và các bộ phận của thực vật chống lại các yếu tố kích thích sinh học và phi sinh học, để gia tăng năng suất thu hoạch, để cải thiện chất lượng của vật liệu thu hoạch và để phòng trừ động vật gây hại, nhất là côn trùng, nhện, giun sán, giun tròn và động vật thân mềm, các loại này thường gặp trong nông nghiệp, trong làm vườn, trong chăn nuôi, trong nuôi trồng thủy sản, trong trồng rừng, trong các khu vườn và cơ sở giải trí, trong bảo vệ sản phẩm và vật liệu lưu kho, và trong lĩnh vực vệ sinh. Các hợp chất này tốt hơn là được sử dụng làm chất diệt sinh vật gây hại. Chúng có hoạt tính chống lại các loài nhạy cảm và có tính kháng thông thường và chống lại tất cả hoặc một số giai đoạn phát triển. Các sinh vật gây hại đề cập trên đây bao gồm:

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

Rhipicephalus spp., Rhizoglyphus spp., Sarcoptes spp., Scorpio maurus, Steneotarsonemus spp., Steneotarsonemus spinki, Tarsonemus spp., ví dụ, Tarsonemus confusus, Tarsonemus pallidus, Tetranychus spp., ví dụ, Tetranychus canadensis, Tetranychus cinnabarinus, Tetranychus turkestani, Tetranychus urticae, Trombicula alfreddugesi, Vaejovis spp., Vasates lycopersici;

thuộc lớp chân môi (Chilopoda), ví dụ, Geophilus spp., Scutigera spp.;

thuộc bộ hoặc lớp đuôi bật (Collembola), ví dụ, Onychiurus armatus; Sminthurus viridis;

thuộc lớp chân kép (Diplopoda), ví dụ, Blaniulus guttulatus;

thuộc lớp côn trùng (Insecta), ví dụ, thuộc bộ gián (Blattodea), ví dụ, Blatta orientalis, Blattella asahinai, Blattella germanica, Leucophaea maderae, Panchlora spp., Parcoblatta spp., Periplaneta spp., ví dụ, Periplaneta americana, Periplaneta australasiae, Supella longipalpa;

thuộc bộ cánh cứng (Coleoptera), ví dụ, Acalymma vittatum, Acanthoscelides obtectus, Adoretus spp., Agelastica alni, Agriotes spp., ví dụ, Agriotes linneatus, Agriotes mancus, Alphitobius diaperinus, Amphimallon solstitialis, Anobium punctatum, Anoplophora spp., Anthonomus spp., ví dụ, Anthonomus grandis, antrenus spp., Apion spp., Apogonia spp., Atomaria spp., ví dụ, Atomaria linearis, Attagenus spp., Baris caerulescens, Bruchidius obtectus, Bruchus spp., ví dụ, Bruchus pisorum, Bruchus rufimanus, Cassida spp., Cerotoma trifurcata, Ceutorrhynchus spp., ví dụ, Ceutorrhynchus assimilis, Ceutorrhynchus quadridens, Ceutorrhynchus rapae, Chaetocnema spp., ví dụ, Chaetocnema confinis, Chaetocnema denticulata, Chaetocnema ectypa, Cleonus mendicus, Conoderus spp., Cosmopolites spp., ví dụ, Cosmopolites sordidus, Costelytra zealandica, Ctenicera spp., Curculio spp., ví dụ, Curculio caryae, Curculio caryatrypes, Curculio obtusus, Curculio sayi, Cryptolestes ferrugineus, Cryptolestes pusillus, Cryptorhynchus lapathi, Cryptorhynchus mangiferae, Cylindrocopturus spp., Cylindrocopturus adspersus, Cylindrocopturus furnissi, Dermestes spp., Diabrotica spp., ví dụ, Diabrotica balteata, Diabrotica barberi,

Diabrotica undecimpunctata howardi, Diabrotica undecimpunctata undecimpunctata, Diabrotica virgifera virgifera, Diabrotica virgifera zeae, Dichocrocis spp., Dicladispa armigera, Diloboderus spp., Epilachna spp., ví dụ, Epilachna borealis, Epilachna varivestis, Epitrix spp., ví dụ, Epitrix cucumeris, Epitrix fuscula, Epitrix hirtipennis, Epitrix subcrinita, Epitrix tuberis, Faustinus spp., Gibbium psylloides, Gnathocerus cornutus, Hellula undalis, Heteronychus arator, Heteronyx spp., Hylamorpha elegans, Hylotrupes bajulus, Hypera postica, Hypomeces squamosus, Hypothenemus spp., ví dụ, Hypothenemus hampei, Hypothenemus obscurus, Hypothenemus pubescens, Lachnosterna consanguinea, Lasioderma serricorne, Latheticus oryzae, Lathridius spp., Lema spp., Leptinotarsa decemlineata, Leucoptera spp., ví dụ, Leucoptera coffeella, Lissorhoptrus oryzophilus, Lixus spp., Luperomorpha xanthodera, Luperodes spp., Lyctus spp., Megascelis spp., Melanotus spp., ví dụ, Melanotus longulus oregonensis, Meligethes aeneus, Melolontha spp., ví dụ, Melolontha melolontha, Migdolus spp., Monochamus spp., Naupactus xanthographus, Necrobia spp., Niptus hololeucus, Oryctes rhinoceros, Oryzaephilus surinamensis, Oryzaphagus oryzae, Otiorhynchus spp., ví dụ, Otiorhynchus cribricollis, Otiorhynchus ligustici, Otiorhynchus ovatus, Otiorhynchus rugosostriarus, Otiorhynchus sulcatus, Oxycetonia jucunda, Phaedon cochleariae, Phyllophaga spp., Phyllophaga helleri, Phyllotreta spp., ví dụ, Phyllotreta armoraciae, Phyllotreta pusilla, Phyllotreta ramosa, Phyllotreta striolata, Popillia japonica, Premnotrypes spp., Prostephanus truncatus, Psylliodes spp., ví dụ, Psylliodes affinis, Psylliodes chrysocephala, Psylliodes punctulata, Ptinus spp., Rhizobius ventralis, Rhizopertha dominica, Sitophilus spp., ví dụ, Sitophilus granarius, Sitophilus linearis, Sitophilus oryzae, Sitophilus zeamais, Sphenophorus spp., Stegobium paniceum, Sternechus spp., ví dụ, Sternechus paludatus, Symphyletes spp., Tanymecus spp., ví dụ, Tanymecus dilaticollis, Tanymecus indicus, Tanymecus palliatus, Tenebrio molitor, Tenebrioides mauretanicus, Tribolium spp., ví dụ, Tribolium audax, Tribolium castaneum, Tribolium confusum, Trogoderma spp., Tychius spp., Xylotrechus spp., Zabrus spp., ví dụ, Zabrus tenebrioides;

thuộc bộ hai cánh (Diptera), ví dụ, Aedes spp., ví dụ, Aedes aegypti, Aedes albopictus, Aedes sticticus, Aedes vexans, Agromyza spp., ví dụ, Agromyza frontella, Agromyza

parvicornis, Anastrepha spp., Anopheles spp., ví dụ, Anopheles quadrimaculatus, Anopheles gambiae, Asphondylia spp., Bactrocera spp., ví dụ, Bactrocera cucurbitae, Bactrocera dorsalis, Bactrocera oleae, Bibio hortulanus, Calliphora erythrocephala, Calliphora vicina, Ceratitis capitata, Chironomus spp., Chrysomya spp., Chrysops spp., Chrysozona pluvialis, Cochliomya spp., Contarinia spp., ví dụ, Contarinia johnsoni, Contarinia nasturtii, Contarinia pyrivora, Contarinia schulzi, Contarinia sorghicola, Contarinia tritici, Cordylobia anthropophaga, Cricotopus sylvestris, Culex spp., ví dụ, Culex pipiens, Culex quinquefasciatus, Culicoides spp., Culiseta spp., Cuterebra spp., Dacus oleae, Dasineura spp., ví dụ, Dasineura brassicae, Delia spp., ví dụ, Delia antiqua, Delia coarctata, Delia florilega, Delia platura, Delia radicum, Dermatobia hominis, Drosophila spp., ví dụ, Drosphila melanogaster, Drosophila suzukii, Echinocnemus spp., Fannia spp., Gasterophilus spp., Glossina spp., Haematopota spp., Hydrellia spp., Hydrellia griseola, Hylemya spp., Hippobosca spp., Hypoderma spp., Liriomyza spp., ví dụ, Liriomyza brassicae, Liriomyza huidobrensis, Liriomyza sativae, Lucilia spp., ví dụ, Lucilia cuprina, Lutzomyia spp., Mansonia spp., Musca spp., ví dụ, Musca domestica, Musca domestica vicina, Oestrus spp., Oscinella frit, Paratanytarsus spp., Paralauterborniella subcincta, Pegomya spp., ví dụ, Pegomya betae, Pegomya hyoscyami, Pegomya rubivora, Phlebotomus spp., Phorbia spp., Phormia spp., Piophila casei, Prodiplosis spp., Psila rosae, Rhagoletis spp., ví dụ, Rhagoletis cingulata, Rhagoletis completa, Rhagoletis fausta, Rhagoletis indifferens, Rhagoletis mendax, Rhagoletis pomonella, Sarcophaga spp., Simulium spp., ví dụ, Simulium meridionale, Stomoxys spp., Tabanus spp., Tetanops spp., Tipula spp., ví dụ, Tipula paludosa, Tipula simplex;

thuộc bộ cánh nửa (Heteroptera), ví dụ, Anasa tristis, Antestiopsis spp., Boisea spp., Blissus spp., Calocoris spp., Campylomma livida, Cavelerius spp., Cimex spp., ví dụ, Cimex adjunctus, Cimex hemipterus, Cimex lectularius, Cimex pilosellus, Collaria spp., Creontiades dilutus, Dasynus piperis, Dichelops furcatus, Diconocoris hewetti, Dysdercus spp., Euschistus spp., ví dụ, Euschistus heros, Euschistus servus, Euschistus tristigmus, Euschistus variolarius, Eurygaster spp., Halyomorpha halys, Heliopeltis spp., Horcias nobilellus, Leptocorisa spp., Leptocorisa varicornis, Leptoglossus

occidentalis, Leptoglossus phyllopus, Lygocoris spp., ví dụ, Lygocoris pabulinus, Lygus spp., ví dụ, Lygus elisus, Lygus hesperus, Lygus lineolaris, Macropes excavatus, Monalonion atratum, Nezara spp., ví dụ, Nezara viridula, Oebalus spp., Piesma quadrata, Piezodorus spp., ví dụ, Piezodorus guildinii, Psallus spp., Pseudacysta persea, Rhodnius spp., Sahlbergella singularis, Scaptocoris castanea, Scotinophora spp., Stephanitis nashi, Tibraca spp., Triatoma spp.;

thuộc bộ cánh đều (Homoptera), ví dụ, Acizzia acaciaebaileyanae, Acizzia dodonaeae, Acizzia uncatoides, Acrida turrita, Acyrthosipon spp., ví dụ, Acyrthosiphon pisum, Acrogonia spp., Aeneolamia spp., Agonoscena spp., Aleyrodes proletella, Aleurolobus barodensis, Aleurothrixus floccosus, Allocaridara malayensis, Amrasca spp., ví dụ, Amrasca bigutulla, Amrasca devastans, Anuraphis cardui, Aonidiella spp., ví dụ, Aonidiella aurantii, Aonidiella citrina, Aonidiella inornata, Aphanostigma piri, Aphis spp., ví dụ, Aphis craccivora, Aphis fabae, Aphis forbesi, Aphis glycines, Aphis gossypii, Aphis hederae, Aphis illinoisensis, Aphis middletoni, Aphis nasturtii, Aphis nerii, Aphis pomi, Aphis spiraecola, Aphis viburniphila, Arboridia apicalis, Arytainilla spp., Aspidiella spp., Aspidiotus spp., ví dụ, Aspidiotus nerii, Atanus spp., Aulacorthum solani, Bemisia tabaci, Blastopsylla occidentalis, Boreioglycaspis melaleucae, Brachycaudus helichrysi, Brachycolus spp., Brevicoryne brassicae, Cacopsylla spp., ví dụ, Cacopsylla pyricola, Calligypona marginata, Carneocephala fulgida, Ceratovacuna lanigera, Cercopidae, Ceroplastes spp., Chaetosiphon fragaefolii, Chionaspis tegalensis, Chlorita onukii, Chondracris rosea, Chromaphis juglandicola, Chrysomphalus ficus, Cicadulina mbila, Coccomytilus halli, Coccus spp., ví dụ, Coccus hesperidum, Coccus longulus, Coccus pseudomagnoliarum, Coccus viridis, Cryptomyzus ribis, Cryptoneossa spp., Ctenarytaina spp., Dalbulus spp., Dialeurodes citri, Diaphorina citri, Diaspis spp., Drosicha spp., Dysaphis spp., ví dụ, Dysaphis apiifolia, Dysaphis plantaginea, Dysaphis tulipae, Dysmicoccus spp., Empoasca spp., ví dụ, Empoasca abrupta, Empoasca fabae, Empoasca maligna, Empoasca solana, Empoasca stevensi, Eriosoma spp., ví dụ, Eriosoma americanum, Eriosoma lanigerum, Eriosoma pyricola, Erythroneura spp., Eucalyptolyma spp., Euphyllura spp., Euscelis bilobatus, Ferrisia spp., Geococcus coffeae, Glycaspis spp.,

Heteropsylla cubana, Heteropsylla spinulosa, Homalodisca coagulata, Hyalopterus arundinis, Hyalopterus pruni, Icerya spp., ví dụ, Icerya purchasi, Idiocerus spp., Idioscopus spp., Laodelphax striatellus, Lecanium spp., ví dụ, Lecanium corni (=Parthenolecanium corni), Lepidosaphes spp., ví dụ, Lepidosaphes ulmi, Lipaphis erysimi, Macrosiphum spp., ví dụ, Macrosiphum euphorbiae, Macrosiphum lilii, Macrosiphum rosae, Macrosteles facifrons, Mahanarva spp., Melanaphis sacchari, Metcalfiella spp., Metopolophium dirhodum, Monellia costalis, Monelliopsis pecanis, Myzus spp., ví dụ, Myzus ascalonicus, Myzus cerasi, Myzus ligustri, Myzus ornatus, Myzus persicae, Myzus nicotianae, Nasonovia ribisnigri, Nephotettix spp., ví dụ, Nephotettix cincticeps, Nephotettix nigropictus, Nilaparvata lugens, Oncometopia spp., Orthezia praelonga, Oxya chinensis, Pachypsylla spp., Parabemisia myricae, Paratrioza spp., ví dụ, Paratrioza cockerelli, Parlatoria spp., Pemphigus spp., ví dụ, Pemphigus bursarius, Pemphigus populivenae, Peregrinus maidis, Phenacoccus spp., ví dụ, Phenacoccus madeirensis, Phloeomyzus passerinii, Phorodon humuli, Phylloxera spp., ví dụ, Phylloxera devastatrix, Phylloxera notabilis, Pinnaspis aspidistrae, Planococcus spp., ví dụ, Planococcus citri, Prosopidopsylla flava, Protopulvinaria pyriformis, Pseudaulacaspis pentagona, Pseudococcus spp., ví dụ, Pseudococcus calceolariae, Pseudococcus comstocki, Pseudococcus longispinus, Pseudococcus maritimus, Pseudococcus viburni, Psyllopsis spp., Psylla spp., ví dụ, Psylla buxi, Psylla mali, Psylla pyri, Pteromalus spp., Pyrilla spp., Quadraspidiotus spp., ví dụ, Quadraspidiotus juglansregiae, Quadraspidiotus ostreaeformis, Quadraspidiotus perniciosus, Quesada gigas, Rastrococcus spp., Rhopalosiphum spp., ví dụ, Rhopalosiphum maidis, Rhopalosiphum oxyacanthae, Rhopalosiphum padi, Rhopalosiphum rufiabdominale, Saissetia spp., ví dụ, Saissetia coffeae, Saissetia miranda, Saissetia neglecta, Saissetia oleae, Scaphoideus titanus, Schizaphis graminum, Selenaspidus articulatus, Sitobion avenae, Sogata spp., Sogatella furcifera, Sogatodes spp., Stictocephala festina, Siphoninus phillyreae, Tenalaphara malayensis, Tetragonocephela spp., Tinocallis caryaefoliae, Tomaspis spp., Toxoptera spp., ví dụ, Toxoptera aurantii, Toxoptera citricidus, Trialeurodes vaporariorum, Trioza spp., ví dụ, Trioza diospyri, Typhlocyba spp., Unaspis spp., Viteus vitifolii, Zygina spp.;

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

thuộc bộ chân đều (Isopoda), ví dụ, Armadillidium vulgare, Oniscus asellus, Porcellio scaber;

thuộc bộ cánh đều (Isoptera), ví dụ, Coptotermes spp., ví dụ, Coptotermes formosanus, Cornitermes cumulans, Cryptotermes spp., Incisitermes spp., Microtermes obesi, Odontotermes spp., Reticulitermes spp., ví dụ, Reticulitermes flavipes, Reticulitermes hesperus;

thuộc bộ cánh vẩy (Lepidoptera), ví dụ, Achroia grisella, Acronicta major, Adoxophyes spp., ví dụ, Adoxophyes orana, Aedia leucomelas, Agrotis spp., ví dụ, Agrotis segetum, Agrotis ipsilon, Alabama spp., ví dụ, Alabama argillacea, Amyelois transitella, Anarsia spp., Anticarsia spp., ví dụ, Anticarsia gemmatalis, Argyroploce spp., Barathra brassicae, Borbo cinnara, Bucculatrix thurberiella, Bupalus piniarius, Busseola spp., Cacoecia spp., Caloptilia theivora, Capua reticulana, Carpocapsa pomonella, Carposina niponensis, Cheimatobia brumata, Chilo spp., ví dụ, Chilo plejadellus, Chilo suppressalis, Choristoneura spp., Clysia ambiguella, Cnaphalocerus spp., Cnaphalocrocis medinalis, Cnephasia spp., Conopomorpha spp., Conotrachelus spp., Copitarsia spp., Cydia spp., ví dụ, Cydia nigricana, Cydia pomonella, Dalaca noctuides, Diaphania spp., Diatraea saccharalis, Earias spp., Ecdytolopha aurantium, Elasmopalpus lignosellus, Eldana saccharina, Ephestia spp., ví dụ, Ephestia elutella, Ephestia kuehniella, Epinotia spp., Epiphyas postvittana, Etiella spp., Eulia spp., Eupoecilia ambiguella, Euproctis spp., ví dụ, Euproctis chrysorrhoea, Euxoa spp., Feltia spp., Galleria mellonella, Gracillaria spp., Grapholitha spp., ví dụ, Grapholita molesta, Grapholita prunivora, Hedylepta spp., Helicoverpa spp., ví dụ, Helicoverpa armigera, Helicoverpa zea, Heliothis spp., ví dụ, Heliothis virescens, Hofmannophila pseudospretella, Homoeosoma spp., Homona spp., Hyponomeuta padella, Kakivoria

flavofasciata, Laphygma spp., Leucinodes orbonalis, Leucoptera spp., ví dụ, Leucoptera coffeella, Lithocolletis spp., ví dụ, Lithocolletis blancardella, Lithophane antennata, Lobesia spp., ví dụ, Lobesia botrana, Loxagrotis albicosta, Lymantria spp., ví dụ, Lymantria dispar, Lyonetia spp., ví dụ, Lyonetia clerkella, Malacosoma neustria, Maruca testulalis, Mamestra brassicae, Melanitis leda, Mocis spp., Monopis obviella, Mythimna separata, Nemapogon cloacellus, Nymphula spp., Oiketicus spp., Oria spp., Orthaga spp., Ostrinia spp., ví dụ, Ostrinia nubilalis, Oulema melanopus, Oulema oryzae, Panolis flammea, Parnara spp., Pectinophora spp., ví dụ, Pectinophora gossypiella, Perileucoptera spp., Phthorimaea spp., ví dụ, Phthorimaea operculella, Phyllocnistis citrella, Phyllonorycter spp., ví dụ, Phyllonorycter blancardella, Phyllonorycter crataegella, Pieris spp., ví dụ, Pieris rapae, Platynota stultana, Plodia interpunctella, Plusia spp., Plutella xylostella (=Plutella maculipennis), Prays spp., Prodenia spp., Protoparce spp., Pseudaletia spp., ví dụ, Pseudaletia unipuncta, Pseudoplusia bao gồmns, Pyrausta nubilalis, Rachiplusia nu, Schoenobius spp., ví dụ, Schoenobius bipunctifer, Scirpophaga spp., ví dụ, Scirpophaga innotata, Scotia segetum, Sesamia spp., ví dụ, Sesamia inferens, Sparganothis spp., Spodoptera spp., ví dụ, Spodoptera eradiana, Spodoptera exigua, Spodoptera frugiperda, Spodoptera praefica, Stathmopoda spp., Stomopteryx subsecivella, Synanthedon spp., Tecia solanivora, Thermesia gemmatalis, Tinea cloacella, Tinea pellionella, Tineola bisselliella, Tortrix spp., Trichophaga tapetzella, Trichoplusia spp., ví dụ, Trichoplusia ni, Tryporyza incertulas, Tuta absoluta, Virachola spp.;

thuộc bộ cánh thẳng (Orthoptera hoặc Saltatoria), ví dụ, Acheta domesticus, Dichroplus spp., Gryllotalpa spp., ví dụ, Gryllotalpa gryllotalpa, Hieroglyphus spp., Locusta spp., ví dụ, Locusta migratoria, Melanoplus spp., ví dụ, Melanoplus devastator, Schistocerca gregaria;

thuộc bộ chấy (Phthiraptera), ví dụ, Damalinia spp., Haematopinus spp., Linognathus spp., Pediculus spp., Phylloxera vastatrix, Phthirus pubis, Trichodectes spp.;

thuộc bộ rệp, sáp, mọt (Psocoptera), ví dụ, Lepinotus spp., Liposcelis spp.;

thuộc bộ cánh ống (Siphonaptera), ví dụ, Ceratophyllus spp., Ctenocephalides spp., ví dụ, Ctenocephalides canis, Ctenocephalides felis, Pulex irritans, Tunga penetrans, Xenopsylla cheopis;

thuộc bộ đuôi tơ (Thysanoptera), ví dụ, Anaphothrips obscurus, Baliothrips biformis, Drepanothrips reuteri, Enneothrips flavens, Frankliniella spp., ví dụ, Frankliniella fusca, Frankliniella occidentalis, Frankliniella schultzei, Frankliniella tritici, Frankliniella vaccinii, Frankliniella williamsi, Heliothrips spp., Hercinothrips femoralis, Rhipiphorothrips cruentatus, Scirtothrips spp., Taeniothrips cardamomi, bọ trĩ spp., ví dụ, bọ trĩ palmi, bọ trĩ tabaci;

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

thuộc lớp rết tơ (Symphyla), ví dụ, Scutigerella spp., ví dụ, Scutigerella immaculata;

sinh vật gây hại thuộc ngành thân mềm (Mollusca), ví dụ, thuộc lớp hai mảnh vỏ (Bivalvia), ví dụ, Dreissena spp.,

và cũng thuộc lớp chân bụng (Gastropoda), ví dụ, Arion spp., ví dụ, Arion ater rufus, Biomphalaria spp., Bulinus spp., Deroceras spp., ví dụ, Deroceras laeve, Galba spp., Lymnaea spp., Oncomelania spp., Pomacea spp., Succinea spp.;

động vật ký sinh thuộc ngành giun dẹp và giun tròn (Plathelminthes và Nematoda), ví dụ, Ancylostoma spp., ví dụ, Ancylostoma duodenale, Ancylostoma ceylanicum, Ancylostoma braziliensis, Ascaris spp., Brugia malayi, Brugia timori, Bunostomum spp., Chabertia spp., Clonorchis spp., Cooperia spp., Dicrocoelium spp., Dictyocaulus filaria, Diphyllobothrium latum, Dracunculus medinensis, Echinococcus granulosus, Echinococcus multilocularis, Enterobius vermicularis, Faciola spp., Haemonchus spp., Heterakis spp., Hymenolepis nana, Hyostrongulus spp., Loa Loa, Nematodirus spp., Oesophagostomum spp., Opisthorchis spp., Onchocerca volvulus, Ostertagia spp., Paragonimus spp., Schistosomen spp., Strongyloides fuelleborni, Strongyloides stercoralis, Stronyloides spp., Taenia saginata, Taenia solium,

Trichinella spiralis, Trichinella nativa, Trichinella britovi, Trichinella nelsoni, Trichinella pseudopsiralis, Trichostrongulus spp., Trichuris trichuria, Wuchereria bancrofti;

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

Ngoài ra, từ phân giới của động vật nguyên sinh (động vật nguyên sinh), có thể phòng trừ bộ rệp sáp (Coccidia), ví dụ, Eimeria spp.

Các hợp chất có công thức (I), ở nồng độ hoặc tỷ lệ áp dụng nhất định, tùy ý cũng có thể được sử dụng làm chất diệt cỏ, chất an toàn, chất điều hòa sinh trưởng hoặc các chất để cải thiện đặc tính của thực vật, làm chất diệt vi sinh vật hoặc chất diệt giao tử, ví dụ, làm chất diệt nấm, chất chống nấm, chất diệt khuẩn, chất diệt virut (bao gồm cả các chất chống viroit) hoặc làm chất chống sinh vật giống mycoplasma (mycoplasma-like organisms - MLO) và sinh vật giống rickettsia (rickettsia-like organisms - RLO). Nếu thích hợp, các hợp chất nêu trên cũng có thể được sử dụng làm hợp chất trung gian hoặc tiền chất để tổng hợp các hoạt chất khác.

Sáng chế còn đề cập đến các chế phẩm và các dạng sử dụng từ chế phẩm này làm chất diệt sinh vật gây hại, ví dụ, các dung dịch ngâm, nhúng và phun, chứa ít nhất một hợp chất có công thức (I). Trong một số trường hợp, các dạng sử dụng còn bao gồm chất diệt sinh vật gây hại và/hoặc chất phụ gia để cải thiện sự hoạt động, như chất thấm, ví dụ, dầu thực vật, ví dụ, dầu cải dầu, dầu hướng dương, dầu khoáng, ví dụ, dầu parafin, alkyl este của axit béo thực vật, ví dụ, metyl este của dầu cải dầu hoặc metyl este của dầu đậu nành hoặc alkanol alkoxylat và/hoặc chất loang, ví dụ, alkylsiloxan và/hoặc các muối, ví dụ, các muối amoni hoặc phosphoni hữu cơ hoặc vô cơ, ví dụ, amoni sulphat hoặc diamoni hydrophosphat và/hoặc chất tăng cường khả năng duy trì, ví dụ, các polyme guar của dioctyl sulphosuxinat hoặc hydroxypropyl và/hoặc chất hút ẩm, ví dụ, glyxerol và/hoặc phân bón, ví dụ, phân bón chứa amoni, kali hoặc phospho.

Các chế phẩm thông thường là, ví dụ, dạng chất lỏng hòa tan trong nước (SL), nhũ tương cô đặc (EC), nhũ tương trong nước (EW), huyền phù cô đặc (SC, SE, FS, OD), dạng hạt phân tán trong nước (WG), dạng hạt (GR) và dạng cô bao nang (CS); các chế phẩm loại này và các loại chế phẩm khác được mô tả, ví dụ, bởi Crop Life International và trong tài liệu Pesticide Specifications, Manual on development và use of FAO and WHO specifications for pesticides, FAO Plant Production and Protection Papers – 173, prepared by the FAO/WHO Joint Meeting on Pesticide Specifications, 2004, ISBN: 9251048576. Các chế phẩm này, ngoài một hoặc nhiều hợp chất có công thức (I), còn tùy ý chứa các hoạt chất hóa nông.

Tốt hơn là, các chế phẩm này hoặc các dạng sử dụng của chúng chứa chất bổ trợ, ví dụ, chất độn, dung môi, chất tăng cường khả năng tự phát, chất mang, chất nhũ hóa, chất phân tán, chất bảo vệ chống sương giá, chất diệt sinh vật, chất cô đặc và/hoặc các chất bổ trợ khác, ví dụ, chất phụ gia. Chất phụ gia trong bối cảnh này là thành phần làm tăng cường tác dụng sinh học của chế phẩm, nhưng bản thân thành phần này không có bất kỳ tác dụng sinh học nào. Ví dụ, về chất phụ gia đó là các chất làm đẩy mạnh sự duy trì, lan rộng, bám dính lên bề mặt lá hoặc tăng tính thấm.

Các chế phẩm này được sản xuất theo phương thức đã biết, ví dụ, bằng cách trộn kết hợp hợp chất có công thức (I) với chất bổ trợ, ví dụ, chất độn, dung môi và/hoặc chất mang rắn và/hoặc chất bổ trợ khác, ví dụ, chất hoạt động bề mặt. Các chế phẩm này được sản xuất trong các cơ sở thích hợp hoặc nơi khác trước hoặc trong quá trình áp dụng.

Chất bổ trợ được sử dụng có thể là các chất thích hợp để truyền các đặc tính riêng biệt, như các đặc tính vật lý, kỹ thuật và/hoặc sinh học cụ thể, cho chế phẩm chứa hợp chất có công thức (I), hoặc cho các dạng sử dụng được điều chế từ chế phẩm này (ví dụ, các chất diệt sinh vật gây hại sẵn sàng để sử dụng như dung dịch phun hoặc các sản phẩm phủ ngoài hạt).

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

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

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

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

Về mặt nguyên lý, có thể sử dụng tất cả các chất mang thích hợp. Chất mang hữu dụng đặc biệt bao gồm: ví dụ, các muối amoni và các chất khoáng tự nhiên nghiền nhỏ như kaolin, đất sét, bột talc, đá phấn, thạch anh, attapulgit, monmorilonit hoặc diatomit và các chất khoáng tổng hợp nghiền nhỏ như silic dioxit nghiền mịn, alumin và các silicat tự nhiên hoặc tổng hợp, các nhựa, sáp và/hoặc phân bón rắn. Hỗn hợp các chất mang có thể được sử dụng tương tự. Chất mang hữu dụng cho hạt bao gồm: ví dụ, đá tự nhiên nghiền và phân mảnh như canxit, đá hoa, đá bọt, sepiolit, dolomit và các hạt tổng hợp từ vật liệu vô cơ và hữu cơ, và cả hạt từ vật liệu hữu cơ như mùn cưa, giấy, vỏ dừa, lõi ngô và cuộng thuốc lá.

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

Ví dụ, về chất nhũ hóa và/hoặc chất tạo bọt, chất phân tán hoặc chất làm ẩm có các đặc tính phân ly hoặc không phân ly, hoặc hỗn hợp của các chất hoạt động bề mặt này, đó là muối của axit polyacrylic, muối của axit lignosulphonic, muối của axit phenolsulphonic hoặc axit naphtalensulphonic, chất đa trùng ngưng của etylen oxit với các rượu béo hoặc với các axit béo hoặc với các amin béo, với các phenol được thế (tốt

hơn là alkylphenol hoặc arylphenol), muối của các este sulphosuxinic, các dẫn xuất taurin (tốt hơn là alkyl taurat), các este phosphoric của các rượu hoặc phenol polyetoxyl hóa, các este axit béo của polyol, và các dẫn xuất của hợp chất chứa sulphat, sulphonat và phosphat, ví dụ, alkylaryl polyglycol ete, alkylsulphonat, alkyl sulphat, arylsulphonat, các sản phẩm thủy phân protein, dịch thải lignosulphit, và metyl xenluloza. Sự có mặt của chất hoạt động bề mặt là thuận lợi nếu như một trong số các hợp chất có công thức (I) và/hoặc một trong số các chất mang trơ không hòa tan được trong nước và khi việc áp dụng diễn ra trong nước.

Các chất bổ trợ khác mà có thể có mặt trong chế phẩm và các dạng sử dụng dẫn xuất từ chế phẩm này bao gồm chất màu như chất màu vô cơ, ví dụ, sắt oxit, titan oxit và xanh Prussian, và chất màu hữu cơ như chất màu alizarin, chất màu azo và chất màu kim loại phtaloxyanin, và các chất dinh dưỡng và các chất vi dinh dưỡng như muối của sắt, mangan, bo, đồng, coban, molybden và kẽm.

Các thành phần bổ sung có thể là chất ổn định, như chất ổn định nhiệt độ thấp, chất bảo quản, chất chống oxy hóa, chất ổn định ánh sáng, hoặc các chất khác giúp cải thiện độ ổn định hóa học và/hoặc vật lý. Các chất tạo bọt hoặc các chất chống tạo bọt cũng có thể có mặt.

Ngoài ra, các chế phẩm và dạng sử dụng thu được từ chúng đó cũng có thể chứa, làm các chất bổ trợ bổ sung, chất kết dính như cacboxymetyl xenluloza và các polyme tự nhiên và tổng hợp ở dạng bột, hạt hoặc latec, như gôm arabic, rượu polyvinyl và polyvinyl axetat, hoặc ngoài ra cả các phospholipit tự nhiên như các xephalin và các lexithin và các phospholipit tổng hợp. Các chất bổ trợ có thể khác là dầu khoáng và dầu thực vật.

Một cách tùy ý, các chất bổ trợ khác có thể có mặt trong chế phẩm và các dạng sử dụng thu được từ chúng. Ví dụ, về các chất phụ gia như vậy bao gồm chất tạo hương, các chất keo bảo vệ, chất kết dính, chất dính kết, chất cô đặc, chất sol-gel thuận nghịch, chất thấm, chất tăng cường khả năng duy trì, chất ổn định, chất chelat hóa, chất tạo phức, chất hút ẩm, chất loang. Nói chung, hợp chất có công thức (I) có thể

được kết hợp với chất phụ gia đặc hoặc lỏng bất kỳ thường được sử dụng cho các mục đích của chế phẩm.

Chất tăng cường khả năng duy trì hữu dụng bao gồm tất cả các chất mà làm giảm sức căng bề mặt động lực, ví dụ, dioctyl sulphosuxinat, hoặc làm tăng độ nhớt đàn hồi, ví dụ, các polyme hydroxypropylguar.

Chất thấm hữu dụng trong ngữ cảnh của sáng chế là tất cả các chất mà điển hình được sử dụng để cải thiện tính thấm của hoạt chất hóa nông vào trong thực vật. Chất thấm được xác định trong ngữ cảnh này bằng khả năng thấm của chúng từ chất lỏng áp dụng (thường ở dạng nước) và/hoặc từ lớp phun phủ vào trong biểu bì của thực vật và bằng cách đó làm tăng khả năng di chuyển của hoạt chất trong biểu bì. Phương pháp mô tả trong tài liệu (Baur et al., 1997, Pesticide Science 51, 131-152) có thể được sử dụng để xác định đặc tính này. Các ví dụ bao gồm rượu alkoxylat như etoxylat béo của dừa (10) hoặc isotridexyl etoxylat (12), este axit béo, ví dụ, metyl este dầu cải dầu hoặc metyl este dầu đậu nành, alkoxylat amin béo, ví dụ, tallowamin etoxylat (15), hoặc các muối amoni và/hoặc phosphoni, ví dụ, amoni sulphat hoặc diamoni hydrophosphat.

Tốt hơn là, các chế phẩm này chứa hợp chất có công thức (I) với lượng nằm trong khoảng từ 0,00000001% đến 98% khối lượng, tốt hơn là nữa chứa từ 0,01% đến 95% khối lượng, tốt nhất chứa từ 0,5% đến 90% khối lượng so với khối lượng của chế phẩm.

Hàm lượng hợp chất có công thức (I) trong các dạng sử dụng được điều chế từ các chế phẩm (nhất là các chất diệt sinh vật gây hại) có thể thay đổi trong phạm vi rộng. Nồng độ của hợp chất có công thức (I) trong các dạng sử dụng điển hình có thể nằm trong khoảng từ 0,00000001% đến 95% khối lượng của hợp chất có công thức (I), tốt hơn là nằm trong khoảng từ 0,00001% đến 1% khối lượng, dựa vào khối lượng của dạng sử dụng. Việc áp dụng được thực hiện theo cách thông thường thích hợp với dạng sử dụng.

Các hợp chất có công thức (I) cũng có thể được sử dụng ở dạng hỗn hợp cùng với một hoặc nhiều chất diệt nấm, chất diệt khuẩn, chất diệt ve bét, chất diệt động vật thân mềm, chất diệt giun tròn, chất diện côn trùng, chất diện vi sinh vật, các sinh vật có lợi, chất diệt cỏ, phân bón, chất xua đuổi chim, chất bổ dưỡng thực vật, chất tiệt trùng, chất an toàn, chất truyền tín hiệu và/hoặc chất điều hòa sinh trưởng thực vật thích hợp, bằng cách đó, ví dụ, để mở rộng phổ tác dụng, để kéo dài thời gian tác dụng, để gia tăng tỷ lệ tác động, để ngăn chặn sự đẩy ngược hoặc ngăn chặn sự phát triển tính kháng. Ngoài ra, các hỗn hợp hoạt chất thuộc loại này có thể giúp cải thiện sự phát triển của thực vật và/hoặc khả năng chịu các yếu tố phi sinh học, ví dụ, nhiệt độ cao hoặc thấp, khả năng chịu được hạn hán hoặc chịu được hàm lượng nước tăng cao hoặc độ mặn của đất. Cũng có thể cải thiện đặc tính trổ hoa và kết trái, tối ưu hóa khả năng nảy mầm và phát triển rễ, tạo thuận lợi cho việc thu hoạch và cải thiện năng suất, tác động lên quá trình chín, cải thiện chất lượng và/hoặc giá trị dinh dưỡng của các sản phẩm thu hoạch, kéo dài thời gian bảo quản và/hoặc cải thiện khả năng xử lý của các sản phẩm thu hoạch.

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

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

Nếu như một trong các hợp chất nêu dưới đây có thể xuất hiện ở các dạng hỗ biến khác nhau, thì cũng bao gồm cả các dạng này, thậm chí ngay cả không được nêu một cách rõ ràng trong mỗi trường hợp.

Chất diệt côn trùng/chất diệt ve bét/chất diệt giun tròn:

Các hoạt chất được xác định rõ ở đây bằng "tên chung" của chúng là đã biết và được mô tả, ví dụ, trong tài liệu The Pesticide Manual, 16th ed., British Crop Protection Council 2012, hoặc có thể được tìm thấy trên Internet (ví dụ, trang web với địa chỉ http://www.alanwood.net/pesticides).

(1) Các chất ức chế axetylcholinsterase (AChE), ví dụ, cacbamat, ví dụ, alanycarb, aldicarb, bendiocarb, benfuracarb, butocarboxim, butoxycarboxim, carbaryl, carbofuran, carbosulfan, ethiofencarb, fenobucarb, formetanat, furathiocarb, isoprocarb, methiocarb, methomyl, metolcarb, oxamyl, pirimicarb, propoxur, thiodicarb, thiofanox, triazamat, trimethacarb, XMC và xylylcarb; hoặc các phosphat hữu cơ, ví dụ, axephat, azamethiphos, azinphos-etyl, azinphos-metyl, cadusafos, chloretoxyfos, chlorfenvinphos, chlormephos, chlorpyrifos, chlorpyrifos-metyl, coumaphos, xyanophos, demeton-S-metyl, diazinon, dichlorvos/DDVP, dicrotophos, dimethoat, dimetylvinphos, disulfoton, EPN, ethion, ethoprophos, famphur, fenamiphos, fenitrothion, fenthion, fosthiazat, heptenophos, imicyafos, isofenphos, isopropyl O-(metoxyaminothiophosphoryl) salixylat, isoxathion, malathion, mecarbam, methamidophos, methidathion, mevinphos, monocrotophos, naled, omethoat, oxydemeton-metyl, parathion, parathion-metyl, phenthoat, phorat, phosalon, phosmet, phosphamidon, phoxim, pirimiphos-metyl, profenofos, propetamphos, prothiofos, pyraclofos, pyridaphenthion, quinalphos, sulfotep, tebupirimfos, temephos, terbufos, tetrachlorvinphos, thiometon, triazophos, triclorfon và vamidothion.

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

(3) Các chất điều biến kênh natri/các chất phong bế kênh natri đóng mở theo điện thế, ví dụ, các pyrethroid, ví dụ, acrinathrin, allethrin, d-cis-trans allethrin, d-trans allethrin, bifenthrin, bioallethrin, chất đồng phân bioallethrin s-xyclopentenyl, bioresmethrin, xycloprothrin, cyfluthrin, beta-cyfluthrin,

xyhalothrin, lambda-xyhalothrin, gamma-xyhalothrin, xypermethrin, alpha-xypermethrin, beta-xypermethrin, theta-xypermethrin, zeta-xypermethrin, chất đồng phân xyphenothrin [(1R)-trans], deltamethrin, chất đồng phân empenthrin [(EZ)-(1R)], esfenvalerat, etofenprox, fenpropathrin, fenvalerat, flucythrinat, flumethrin, tau-fluvalinat, halfenprox, imiprothrin, kadethrin, permethrin, phenothrin [chất đồng phân (1R)-trans], prallethrin, các pyrethrin (pyrethrum), resmethrin, silafluofen, tefluthrin, tetramethrin, tetramethrin [(chất đồng phân (1R))], tralomethrin và transfluthrin hoặc DDT hoặc metoxychlor.

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

(5) Các chất kích hoạt dị lập thể của thụ thể axetylcholin nicotinrgic (nicotinergic axetylcholine receptor - nAChR), ví dụ, các spinosyn, ví dụ, spinetoram và spinosad.

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

(7) Các chất bắt chước hocmon ấu trùng, ví dụ, các chất tương tự hocmon ấu trùng, ví dụ, hydropren, kinopren và methopren hoặc fenoxycarb hoặc pyriproxyfen.

(8) Các hoạt chất không rõ cơ chế tác động hoặc có cơ chế tác động không đặc hiệu, ví dụ,

các alkyl halogenua, ví dụ, metyl bromua và các alkyl halogenua khác; hoặc clopicrin hoặc thuốc gây nôn sulphuryl florua hoặc borax hoặc tartar.

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

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

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

(12) Các chất ức chế quá trình phosphoryl hóa oxy hóa, các chất phá hủy ATP, ví dụ, diafenthiuron hoặc các hợp chất hữu cơ - thiếc, ví dụ, azoxyclotin, xyhexatin và fenbutatin oxit hoặc propargite hoặc tetradifon.

(13) Các chất phân tách quá trình phosphoryl hóa oxy hóa làm gián đoạn quá trình gradien proton H, ví dụ, chlorfenapyr, DNOC và sulfluramid.

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

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

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

(17) Các chất ức chế quá trình lột xác (nhất là đối với Diptera (bộ côn trùng hai cánh), tức là, các côn trùng hai cánh (dipteran), ví dụ, xyromazin.

(18) Các chất chủ vận thụ thể hocmon lột xác, ví dụ, chromafenozit, halofenozit, metoxyfenozit và tebufenozit.

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

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

(21) Các chất ức chế vận chuyển điện tử phức - I, ví dụ, từ nhóm của các chất diệt ve bét METI, ví dụ, fenazaquin, fenpyroximat, pyrimidifen, pyridaben, tebufenpyrad và tolfenpyrad hoặc rotenon (Derris).

(22) Các chất phong bế kênh natri đóng mở theo điện thế, ví dụ, iindoxacarb hoặc metaflumizon.

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

(24) Các chất ức chế vận chuyển điện tử phức-IV ví dụ, các phosphin, ví dụ, nhôm phosphua, canxi phosphua, phosphin và kẽm phosphua hoặc xyanua.

(25) Các chất ức chế vận chuyển điện tử phức-II, ví dụ, xyenopyrafen và xyflumetofen.

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

các hoạt chất khác, ví dụ, afidopyropen, azadirachtin, benclothiaz, benzoximat, bifenazat, bromopropylat, chinomethionat, cryolite,

dicofol, diflovidazin, fluensulfon, flometoquin, flufenerim, flufenoxystrobin, flufiprol, fluopyram, flupyradifuron, fufenozit, heptafluthrin, imidaclothiz, iprodion, meperfluthrin, paichongding, pyflubumit, pyrifluquinazon, pyriminostrobin, tetrametylfluthrin và iodometan; và cả các chế phẩm trên cơ sở Bacillus firmus (I-1582, BioNeem, Votivo), và cả các hợp chất sau: 3-bromo-N-{2-bromo-4-clo-6-[(1-xyclopropyletyl)carbamoyl]phenyl}-1-(3-clopyridin-2-yl)-1H-pyrazol-5-carboxamit (đã biết trong tài liệu WO2005/077934) và 1-{2-flo-4-metyl-5-[(2,2,2-trifloetyl)-sulphinyl]phenyl}-3-(triflometyl)-1H-1,2,4-triazol-5-amin (đã biết trong tài liệu WO2006/043635), {1'-[(2E)-3-(4-clophenyl)prop-2-en-1-yl]-5-flospiro[indol-3,4'-piperidin]-1(2H)-yl}(2-clopyridin-4-yl)metanon (đã biết trong tài liệu WO2003/106457), 2-clo-N-[2-{1-[(2E)-3-(4-clophenyl)prop-2-en-1-yl]piperidin-4-yl}-4-(triflometyl)phenyl]isonicotinamit (đã biết trong tài liệu WO2006/003494), 3-

(2,5-dimetylphenyl)-4-hydroxy-8-metoxy-1,8-diazaspiro[4.5]dec-3-en-2-on (đã biết trong tài liệu WO2009/049851), 3-(2,5-dimetylphenyl)-8-metoxy-2-oxo-1,8-diazaspiro[4.5]dec-3-en-4-yl-etylcacbonat (đã biết trong tài liệu WO2009/049851), 4-(but-2-yn-1-yloxy)-6-(3,5-dimetylpiperidin-1-yl)-5-flopyrimidin (đã biết trong tài liệu WO2004/099160), 4-(but-2-yn-1-yloxy)-6-(3-clophenyl)pyrimidin (đã biết trong tài liệu WO2003/076415), PF1364 (số đăng ký CAS 1204776-60-2), 4-[5-(3,5-diclophenyl)-5-(triflometyl)-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl]-2-metyl-N-{2-oxo-2-[(2,2,2-trifloetyl)amino]etyl}benzamit (đã biết trong tài liệu WO2005/085216), 4-{5-[3-clo-5-(triflometyl)phenyl]-5-(triflometyl)-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl}-N-{2-oxo-2-[(2,2,2-trifloetyl)amino]etyl}-1-naphtamit (đã biết trong tài liệu WO2009/002809), metyl 2-[2-({[3-bromo-1-(3-clopyridin-2-yl)-1H-pyrazol-5-yl]cacbonyl}amino)-5-clo-3-metylbenzoyl]-2-metylhydrazincarboxylat (đã biết trong tài liệu WO2005/085216), metyl 2-[2-({[3-bromo-1-(3-clopyridin-2-yl)-1H-pyrazol-5-yl]cacbonyl}amino)-5-xyano-3-metylbenzoyl]-2-etylhydrazincarboxylat (đã biết trong tài liệu WO2005/085216), metyl 2-[2-({[3-bromo-1-(3-clopyridin-2-yl)-1H-pyrazol-5-yl]cacbonyl}amino)-5-xyano-3-metylbenzoyl]-2-metylhydrazincarboxylat (đã biết trong tài liệu WO2005/085216), metyl 2-[3,5-dibromo-2-({[3-bromo-1-(3-clopyridin-2-yl)-1H-pyrazol-5-yl]cacbonyl}amino)benzoyl]-2-etylhydrazincarboxylat (đã biết trong tài liệu WO2005/085216), 1-(3-clopyridin-2-yl)-N-[4-xyano-2-metyl-6-(metylcarbamoyl)phenyl]-3-{[5-(triflometyl)-2H-tetrazol-2-yl]metyl}-1H-pyrazol-5-carboxamit (đã biết trong tài liệu WO2010/069502), N-[2-(5-amino-1,3,4-thiadiazol-2-yl)-4-clo-6-metylphenyl]-3-bromo-1-(3-clopyridin-2-yl)-1H-pyrazol-5-carboxamit (đã biết trong tài liệu CN102057925), 3-clo-N-(2-xyanopropan-2-yl)-N-[4-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)-2-metylphenyl]phtalamit (đã biết trong tài liệu WO2012/034472), 8-clo-N-[(2-clo-5-metoxyphenyl)sulphonyl]-6-(triflometyl)imidazo[1,2-a]pyridin-2-carboxamit (đã biết trong tài liệu WO2010/129500), 4-[5-(3,5-diclophenyl)-5-(triflometyl)-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl]-2-metyl-N-(1-oxidothietan-3-yl)benzamit (đã biết trong tài liệu WO2009/080250), 4-[5-(3,5-diclophenyl)-5-(triflometyl)-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl]-2-metyl-N-(1-oxidothietan-3-yl)benzamit (đã biết trong tài liệu WO2012/029672), 1-[(2-clo-1,3-thiazol-5-yl)metyl]-4-oxo-3-phenyl-4H-pyrido[1,2-a]pyrimidin-1-i-2-olat (đã biết

trong tài liệu WO2009/099929), 1-[(6-clopyridin-3-yl)metyl]-4-oxo-3-phenyl-4H-pyrido[1,2-a]pyrimidin-1-i-2-olat (đã biết trong tài liệu WO2009/099929), (5S,8R)-1-[(6-clopyridin-3-yl)metyl]-9-nitro-2,3,5,6,7,8-hexahydro-1H-5,8-epoxyimidazo[1,2-a]azepin (đã biết trong tài liệu WO2010/069266), (2E)-1-[(6-clopyridin-3-yl)metyl]-N'-nitro-2-pentylidenhydrazincarboximidamit (đã biết trong tài liệu WO2010/060231), 4-(3-{2,6-diclo-4-[(3,3-dicloprop-2-en-1-yl)oxy]phenoxy}propoxy)-2-metoxy-6-(triflometyl)pyrimidin (đã biết trong tài liệu CN101337940), N-[2-(tert-butylcarbamoyl)-4-clo-6-metylphenyl]-1-(3-clopyridin-2-yl)-3-(flometoxy)-1H-pyrazol-5-carboxamit (đã biết trong tài liệu WO2008/134969).

Các chất diệt nấm:

Các hoạt chất được xác định rõ ở đây bằng tên chung của chúng là đã biết và được mô tả, ví dụ, trong tài liệu "Pesticide Manual" hoặc trên mạng Internet (ví dụ, tại địa chỉ: http://www.alanwood.net/pesticides).

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

2,3-dihydro-1H-inden-1-yl)-1H-imidazol-5-carboxylat, (1.62) N'-{5-(diflometyl)-2-metyl-4-[3-(trimetylsilyl)propoxy]phenyl}-N-etyl-N-metylimidoformamit, (1.63) N-etyl-N-metyl-N'-{2-metyl-5-(triflometyl)-4-[3-(trimetylsilyl)propoxy]phenyl}imidoformamit và (1.64) O-[1-(4-metoxyphenoxy)-3,3-dimetylbutan-2-yl]-1H-imidazol-1-carbothioat, (1.65) pyrisoxazol.

(2) Các chất ức chế hô hấp (các chất ức chế chuỗi hô hấp), ví dụ, (2.1) bixafen, (2.2) boscalid, (2.3) carboxin, (2.4) diflumetorim, (2.5) fenfuram, (2.6) fluopyram, (2.7) flutolanil, (2.8) fluxapyroxad, (2.9) furametpyr, (2.10) furmexyclox, (2.11) hỗn hợp isopyrazam của chất triệt quang epime hóa dạng đồng phân syn 1RS,4SR,9RS và chất triệt quang epime hóa dạng đồng phân anti 1RS,4SR,9SR, (2.12) isopyrazam (chất triệt quang epime hóa dạng đồng phân anti), (2.13) isopyrazam (chất đồng phân đối ảnh epime hóa dạng đồng phân anti 1R,4S,9S), (2.14) isopyrazam (chất đồng phân đối ảnh epime hóa dạng đồng phân anti 1S,4R,9R), (2.15) isopyrazam (chất triệt quang epime hóa dạng đồng phân syn 1RS,4SR,9RS), (2.16) isopyrazam (chất đồng phân đối ảnh epime hóa dạng đồng phân syn 1R,4S,9R), (2.17) isopyrazam (chất đồng phân đối ảnh epime hóa dạng đồng phân syn 1S,4R,9S), (2.18) mepronil, (2.19) oxycarboxin, (2.20) penflufen, (2.21) penthiopyrad, (2.22) sedaxan, (2.23) thifluzamit, (2.24) 1-metyl-N-[2-(1,1,2,2-tetrafloetoxy)phenyl]-3-(triflometyl)-1H-pyrazol-4-cacboxamit, (2.25) 3-(diflometyl)-1-metyl-N-[2-(1,1,2,2-tetrafloetoxy)phenyl]-1H-pyrazol-4-cacboxamit, (2.26) 3-(diflometyl)-N-[4-flo-2-(1,1,2,3,3,3-hexafloropropoxy)phenyl]-1-metyl-1H-pyrazol-4-cacboxamit, (2.27) N-[1-(2,4-diclophenyl)-1-metoxypropan-2-yl]-3-(diflometyl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-cacboxamit, (2.28) 5,8-diflo-N-[2-(2-flo-4-{[4-(triflometyl)pyridin-2-yl]oxy}phenyl)etyl]quinazolin-4-amin, (2.29) benzovindiflupyr, (2.30) N-[(1S,4R)-9-(diclometylen)-1,2,3,4-tetrahydro-1,4-metanonaphtalen-5-yl]-3-(diflometyl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-cacboxamit và (2.31) N-[(1R,4S)-9-(diclometylen)-1,2,3,4-tetrahydro-1,4-metanonaphtalen-5-yl]-3-(diflometyl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-cacboxamit, (2.32) 3-(diflometyl)-1-metyl-N-(1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl)-1H-pyrazol-4-cacboxamit, (2.33) 1,3,5-trimetyl-N-(1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl)-1H-pyrazol-4-cacboxamit, (2.34) 1-metyl-3-(triflometyl)-N-(1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl)-1H-pyrazol-4-cacboxamit, (2.35) 1-metyl-3-(triflometyl)-N-[(3R)-1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl]-1H-

pyrazol-4-cacboxamit, (2.36) 1-metyl-3-(triflometyl)-N-[(3S)-1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl]-1H-pyrazol-4-cacboxamit, (2.37) 3-(diflometyl)-1-metyl-N-[(3S)-1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl]-1H-pyrazol-4-cacboxamit, (2.38) 3-(diflometyl)-1-metyl-N-[(3R)-1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl]-1H-pyrazol-4-cacboxamit, (2.39) 1,3,5-trimetyl-N-[(3R)-1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl]-1H-pyrazol-4-cacboxamit, (2.40) 1,3,5-trimetyl-N-[(3S)-1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl]-1H-pyrazol-4-cacboxamit, (2.41) benodanil, (2.42) 2-clo-N-(1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl)pyridin-3-cacboxamit, (2.43) isofetamid

(3) Các chất ức chế hô hấp (các chất ức chế chuỗi hô hấp) mà tác động lên phức III của chuỗi hô hấp, ví dụ, (3.1) ametoctradin, (3.2) amisulbrom, (3.3) azoxystrobin, (3.4) xyazofamid, (3.5) coumetoxystrobin, (3.6) coumoxystrobin, (3.7) dimoxystrobin, (3.8) enestroburin, (3.9) famoxadon, (3.10) fenamidon, (3.11) flufenoxystrobin, (3.12) fluoxastrobin, (3.13) kresoxim-metyl, (3.14) metominostrobin, (3.15) orysastrobin, (3.16) picoxystrobin, (3.17) pyraclostrobin, (3.18) pyrametostrobin, (3.19) pyraoxystrobin, (3.20) pyribencarb, (3.21) triclopyricarb, (3.22) trifloxystrobin, (3.23) (2E)-2-(2-{[6-(3-clo-2-metylphenoxy)-5-flopyrimidin-4-yl]oxy}phenyl)-2-(metoxyimino)-N-metyletanamit, (3.24) (2E)-2-(metoxyimino)-N-metyl-2-(2-{[({(1E)-1-[3-(triflometyl)phenyl]etyliden}amino)oxy]metyl}phenyl)etanamit, (3.25) (2E)-2-(metoxyimino)-N-metyl-2-{2-[(E)-({1-[3-(triflometyl)phenyl]etoxy}imino)metyl]phenyl}etanamit, (3.26) (2E)-2-{2-[({[(1E)-1-(3-{[(E)-1-flo-2-phenyletenyl]oxy}phenyl)etyliden]amino}oxy)metyl]phenyl}-2-(metoxyimino)-N-metyletanamit, (3.27) (2E)-2-{2-[({[(2E,3E)-4-(2,6-diclophenyl)-but-3-en-2-yliden]amino}oxy)metyl]phenyl}-2-(metoxyimino)-N-metyletanamit, (3.28) 2-clo-N-(1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl)pyridin-3-cacboxamit, (3.29) 5-metoxy-2-metyl-4-(2-{[({(1E)-1-[3-(triflometyl)phenyl]etyliden}amino)oxy]-metyl}phenyl)-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-on, (3.30) metyl (2E)-2-{2-[({xyclopropyl[(4-metoxyphenyl)imino]metyl}sulphanyl)metyl]phenyl}-3-metoxyprop-2-enoat, (3.31) N-(3-etyl-3,5,5-trimetylxyclohexyl)-3-(formylamino)-2-hydroxybenzamit, (3.32) 2-{2-[(2,5-dimetylphenoxy)metyl]phenyl}-2-metoxy-N-metylaxetamit, (4) các chất ức chế phân báo nguyên phân và sự phân chia tế bào, ví dụ, (4.1) benomyl, (4.2) carbendazim, (4.3) chlorfenazol, (4.4) diethofencarb, (4.5)

ethaboxam, (4.6) fluopicolid, (4.7) fuberidazol, (4.8) pencycuron, (4.9) thiabendazol, (4.10) thiophanat-metyl, (4.11) thiophanat, (4.12) zoxamit, (4.13) 5-clo-7-(4-metylpiperidin-1-yl)-6-(2,4,6-triflophenyl)[1,2,4]triazolo[1,5-a]pyrimidin và (4.14) 3-clo-5-(6-clopyridin-3-yl)-6-metyl-4-(2,4,6-triflophenyl)pyridazin.

(5) Các hợp chất có hoạt tính trên nhiều vị trí, ví dụ, (5.1) hỗn hợp Bordeaux, (5.2) captafol, (5.3) captan, (5.4) clothalonil, (5.5) các chế phẩm chứa đồng như đồng hydroxit, (5.6) đồng naphtenat, (5.7) đồng oxit, (5.8) đồng oxyclorua, (5.9) đồng sulphat, (5.10) diclofluanid, (5.11) dithianon, (5.12) dodin, (5.13) bazơ không chứa dodin, (5.14) ferbam, (5.15) fluorfolpet, (5.16) folpet, (5.17) guazatin, (5.18) guazatin axetat, (5.19) iminoctadin, (5.20) iminoctadin albesilat, (5.21) iminoctadin triaxetat, (5.22) mancopper, (5.23) mancozeb, (5.24) maneb, (5.25) metiram, (5.26) kẽm metiram, (5.27) đồng-oxin, (5.28) propamidin, (5.29) propineb, (5.30) lưu huỳnh và các chế phẩm chứa lưu huỳnh, ví dụ, canxi polysulphit, (5.31) thiram, (5.32) tolylfluanid, (5.33) zineb, (5.34) ziram và (5.35) anilazin.

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

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

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

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

(10) Các chất ức chế tổng hợp lipit và màng, ví dụ, (10.1) biphenyl, (10.2) chlorneb, (10.3) dicloran, (10.4) edifenphos, (10.5) etridiazol, (10.6) iodocarb, (10.7) iprobenfos,

(10.8) isoprothiolan, (10.9) propamocarb, (10.10) propamocarb hydroclorua, (10.11) prothiocarb, (10.12) pyrazophos, (10.13) quintozen, (10.14) tecnazen và (10.15) tolclofos-metyl.

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

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

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

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

(15) Các hợp chất khác, ví dụ, (15.1) benthiazol, (15.2) bethoxazin, (15.3) capsimyxin, (15.4) carvon, (15.5) chinomethionat, (15.6) pyriofenon (chlazafenon), (15.7) cufraneb, (15.8) xyflufenamid, (15.9) xymoxanil, (15.10) xyprosulfamit, (15.11) dazomet, (15.12) debacarb, (15.13) diclophen, (15.14) diclomezin, (15.15) difenzoquat, (15.16) difenzoquat metylsulphat, (15.17) diphenylamin, (15.18) EcoMate, (15.19) fenpyrazamin, (15.20) flumetover, (15.21) fluorimid, (15.22) flusulfamit, (15.23) flutianil, (15.24) fosetyl-nhôm, (15.25) fosetyl-canxi, (15.26) fosetyl-natri, (15.27) hexaclobenzen, (15.28) irumamyxin, (15.29) methasulfocarb, (15.30) metyl isothioxyanat, (15.31) metrafenon, (15.32) mildiomyxin, (15.33) natamyxin, (15.34) niken dimetyldithiocarbamat, (15.35) nitrothal-isopropyl, (15.36) octhilinon, (15.37) oxamocarb, (15.38) oxyfenthiin, (15.39) pentachlorophenol và các muối của nó, (15.40) phenothrin, (15.41) axit phosphoric và các muối của nó, (15.42) propamocarb-fosetylat,

(15.43) propanosin-natri, (15.44) pyrimorph, (15.45) (2E)-3-(4-tert-butylphenyl)-3-(2-clopyridin-4-yl)-1-(morpholin-4-yl)prop-2-en-1-on, (15.46) (2Z)-3-(4-tert-butylphenyl)-3-(2-clopyridin-4-yl)-1-(morpholin-4-yl)prop-2-en-1-on, (15.47) pyrolnitrin, (15.48) tebufloquin, (15.49) tecloftalam, (15.50) tolnifanit, (15.51) triazoxit, (15.52) trichlamit, (15.53) zarilamid, (15.54) (3S,6S,7R,8R)-8-benzyl-3-[({3-[(isobutyryloxy)metoxy]-4-metoxypyridin-2-yl}cacbonyl)amino]-6-metyl-4,9-dioxo-1,5-dioxonan-7-yl 2-metylpropanoat, (15.55) 1-(4-{4-[(5R)-5-(2,6-diflophenyl)-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl]-1,3-thiazol-2-yl}piperidin-1-yl)-2-[5-metyl-3-(triflometyl)-1H-pyrazol-1-yl]etanon, (15.56) 1-(4-{4-[(5S)-5-(2,6-diflophenyl)-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl]-1,3-thiazol-2-yl}piperidin-1-yl)-2-[5-metyl-3-(triflometyl)-1H-pyrazol-1-yl]etanon, (15.57) 1-(4-{4-[5-(2,6-diflophenyl)-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl]-1,3-thiazol-2-yl}piperidin-1-yl)-2-[5-metyl-3-(triflometyl)-1H-pyrazol-1-yl]etanon, (15.58) 1-(4-metoxyphenoxy)-3,3-dimetylbutan-2-yl 1H-imidazol-1-carboxylat, (15.59) 2,3,5,6-tetrachloro-4-(metylsulphonyl)pyridin, (15.60) 2,3-dibutyl-6-clothieno[2,3-d]pyrimidin-4(3H)-on, (15.61) 2,6-dimetyl-1H,5H-[1,4]dithiino[2,3-c:5,6-c']dipyrol-1,3,5,7(2H,6H)-tetron, (15.62) 2-[5-metyl-3-(triflometyl)-1H-pyrazol-1-yl]-1-(4-{4-[(5R)-5-phenyl-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl]-1,3-thiazol-2-yl}piperidin-1-yl)etanon, (15.63) 2-[5-metyl-3-(triflometyl)-1H-pyrazol-1-yl]-1-(4-{4-[(5S)-5-phenyl-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl]-1,3-thiazol-2-yl}piperidin-1-yl)etanon, (15.64) 2-[5-metyl-3-(triflometyl)-1H-pyrazol-1-yl]-1-{4-[4-(5-phenyl-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl)-1,3-thiazol-2-yl]piperidin-1-yl}etanon, (15.65) 2-butoxy-6-iodo-3-propyl-4H-chromen-4-on, (15.66) 2-clo-5-[2-clo-1-(2,6-diflo-4-metoxyphenyl)-4-metyl-1H-imidazol-5-yl]pyridin, (15.67) 2-phenylphenol và các muối, (15.68) 3-(4,4,5-triflo-3,3-dimetyl-3,4-dihydroisoquinolin-1-yl)quinolin, (15.69) 3,4,5-triclopyridin-2,6-dicacbonitril, (15.70) 3-clo-5-(4-clophenyl)-4-(2,6-diflophenyl)-6-metylpyridazin, (15.71) 4-(4-clophenyl)-5-(2,6-diflophenyl)-3,6-dimetylpyridazin, (15.72) 5-amino-1,3,4-thiadiazol-2-thiol, (15.73) 5-clo-N'-phenyl-N'-(prop-2-yn-1-yl)thiophen-2-sulphonohydrazit, (15.74) 5-flo-2-[(4-flobenzyl)oxy]pyrimidin-4-amin, (15.75) 5-flo-2-[(4-metylbenzyl)oxy]pyrimidin-4-amin, (15.76) 5-metyl-6-octyl[1,2,4]triazolo[1,5-a]pyrimidin-7-amin, (15.77) etyl (2Z)-3-amino-2-xyano-3-phenylacrylate, (15.78) N'-(4-{[3-(4-clobenzyl)-1,2,4-thiadiazol-5-yl]oxy}-2,5-dimetylphenyl)-N-etyl-N-metylimidoformamit, (15.79) N-(4-clobenzyl)-3-

[3-metoxy-4-(prop-2-yn-1-yloxy)phenyl]propanamit, (15.80) N-[(4-clophenyl)(xyano)-metyl]-3-[3-metoxy-4-(prop-2-yn-1-yloxy)phenyl]propanamit, (15.81) N-[(5-bromo-3-clopyridin-2-yl)metyl]-2,4-diclonicotinamit, (15.82) N-[1-(5-bromo-3-clopyridin-2-yl)etyl]-2,4-diclonicotinamit, (15.83) N-[1-(5-bromo-3-clopyridin-2-yl)etyl]-2-flo-4-iodonicotinamit, (15.84) N-{(E)-[(xyclopropylmetoxy)imino][6-(diflometoxy)-2,3-diflophenyl]metyl}-2-phenylaxetamit, (15.85) N-{(Z)-[(xyclopropylmetoxy)imino][6-(diflometoxy)-2,3-diflophenyl]metyl}-2-phenylaxetamit, (15.86) N'-{4-[(3-tert-butyl-4-xyano-1,2-thiazol-5-yl)oxy]-2-clo-5-metylphenyl}-N-etyl-N-metylimidoformamit, (15.87) N-metyl-2-(1-{[5-metyl-3-(triflometyl)-1H-pyrazol-1-yl]axetyl}piperidin-4-yl)-N-(1,2,3,4-tetrahydronaphtalen-1-yl)-1,3-thiazol-4-carboxamit, (15.88) N-metyl-2-(1-{[5-metyl-3-(triflometyl)-1H-pyrazol-1-yl]axetyl}piperidin-4-yl)-N-[(1R)-1,2,3,4-tetrahydronaphtalen-1-yl]-1,3-thiazol-4-carboxamit, (15.89) N-metyl-2-(1-{[5-metyl-3-(triflometyl)-1H-pyrazol-1-yl]axetyl}piperidin-4-yl)-N-[(1S)-1,2,3,4-tetrahydronaphtalen-1-yl]-1,3-thiazol-4-carboxamit, (15.90) pentyl {6-[({[(1-metyl-1H-tetrazol-5-yl)(phenyl)metylen]amino}oxy)metyl]pyridin-2-yl}carbamat, (15.91) axit phenazin-1-carboxylic, (15.92) quinolin-8-ol, (15.93) quinolin-8-ol sulphat (2:1), (15.94) tert-butyl {6-[({[(1-metyl-1H-tetrazol-5-yl)(phenyl)metylen]amino}oxy)metyl]-pyridin-2-yl}carbamat, (15.95) 1-metyl-3-(triflometyl)-N-[2'-(triflometyl)biphenyl-2-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.96) N-(4'-clobiphenyl-2-yl)-3-(diflometyl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.97) N-(2',4'-diclobiphenyl-2-yl)-3-(diflometyl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.98) 3-(diflometyl)-1-metyl-N-[4'-(triflometyl)biphenyl-2-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.99) N-(2',5'-diflobiphenyl-2-yl)-1-metyl-3-(triflometyl)-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.100) 3-(diflometyl)-1-metyl-N-[4'-(prop-1-yn-1-yl)biphenyl-2-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.101) 5-flo-1,3-dimetyl-N-[4'-(prop-1-yn-1-yl)biphenyl-2-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.102) 2-clo-N-[4'-(prop-1-yn-1-yl)biphenyl-2-yl]nicotinamit, (15.103) 3-(diflometyl)-N-[4'-(3,3-dimetylbut-1-yn-1-yl)biphenyl-2-yl]-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.104) N-[4'-(3,3-dimetylbut-1-yn-1-yl)biphenyl-2-yl]-5-flo-1,3-dimetyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.105) 3-(diflometyl)-N-(4'-ethynylbiphenyl-2-yl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.106) N-(4'-ethynylbiphenyl-2-yl)-5-flo-1,3-dimetyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.107) 2-clo-N-(4'-ethynylbiphenyl-2-yl)nicotinamit, (15.108) 2-clo-N-[4'-(3,3-dimetylbut-1-yn-1-

yl)biphenyl-2-yl]nicotinamit, (15.109) 4-(diflometyl)-2-metyl-N-[4'-(triflometyl)biphenyl-2-yl]-1,3-thiazol-5-carboxamit, (15.110) 5-flo-N-[4'-(3-hydroxy-3-metylbut-1-yn-1-yl)biphenyl-2-yl]-1,3-dimetyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.111) 2-clo-N-[4'-(3-hydroxy-3-metylbut-1-yn-1-yl)biphenyl-2-yl]nicotinamit, (15.112) 3-(diflometyl)-N-[4'-(3-metoxy-3-metylbut-1-yn-1-yl)biphenyl-2-yl]-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.113) 5-flo-N-[4'-(3-metoxy-3-metylbut-1-yn-1-yl)biphenyl-2-yl]-1,3-dimetyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.114) 2-clo-N-[4'-(3-metoxy-3-metylbut-1-yn-1-yl)biphenyl-2-yl]nicotinamit, (15.115) (5-bromo-2-metoxy-4-metylpyridin-3-yl)(2,3,4-trimetoxy-6-metylphenyl)metanon, (15.116) N-[2-(4-{[3-(4-clophenyl)prop-2-yn-1-yl]oxy}-3-metoxyphenyl)etyl]-N2-(metylsulphonyl)valinamit, (15.117) axit 4-oxo-4-[(2-phenyletyl)amino]butanoic, (15.118) but-3-yn-1-yl {6-[({[(Z)-(1-metyl-1H-tetrazol-5-yl)(phenyl)metylen]amino}oxy)metyl]pyridin-2-yl}carbamat, (15.119) 4-amino-5-flopyrimidin-2-ol (dạng hỗ biến: 4-amino-5-flopyrimidin-2(1H)-on), (15.120) propyl 3,4,5-trihydroxybenzoat, (15.121) 1,3-dimetyl-N-(1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl)-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.122) 1,3-dimetyl-N-[(3R)-1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.123) 1,3-dimetyl-N-[(3S)-1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.124) [3-(4-clo-2-flophenyl)-5-(2,4-diflophenyl)-1,2-oxazol-4-yl](pyridin-3-yl)metanol, (15.125) (S)-[3-(4-clo-2-flophenyl)-5-(2,4-diflophenyl)-1,2-oxazol-4-yl](pyridin-3-yl)metanol, (15.126) (R)-[3-(4-clo-2-flophenyl)-5-(2,4-diflophenyl)-1,2-oxazol-4-yl](pyridin-3-yl)metanol, (15.127) 2-{[3-(2-clophenyl)-2-(2,4-diflophenyl)oxiran-2-yl]metyl}-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (15.128) 1-{[3-(2-clophenyl)-2-(2,4-diflophenyl)oxiran-2-yl]metyl}-1H-1,2,4-triazol-5-yl thioxyanat, (15.129) 5-(allylsulphanyl)-1-{[3-(2-clophenyl)-2-(2,4-diflophenyl)oxiran-2-yl]metyl}-1H-1,2,4-triazol, (15.130) 2-[1-(2,4-diclophenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimetylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (15.131) 2-{[rel(2R,3S)-3-(2-clophenyl)-2-(2,4-diflophenyl)oxiran-2-yl]metyl}-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (15.132) 2-{[rel(2R,3R)-3-(2-clophenyl)-2-(2,4-diflophenyl)oxiran-2-yl]metyl}-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (15.133) 1-{[rel(2R,3S)-3-(2-clophenyl)-2-(2,4-diflophenyl)oxiran-2-yl]metyl}-1H-1,2,4-triazol-5-yl thioxyanat, (15.134) 1-{[rel(2R,3R)-3-(2-clophenyl)-2-(2,4-diflophenyl)oxiran-2-yl]metyl}-1H-1,2,4-triazol-5-yl thioxyanat, (15.135) 5-(allylsulphanyl)-1-{[rel(2R,3S)-

3-(2-clophenyl)-2-(2,4-diflophenyl)oxiran-2-yl]metyl}-1H-1,2,4-triazol, (15.136) 5-(allylsulphanyl)-1-{[rel(2R,3R)-3-(2-clophenyl)-2-(2,4-diflophenyl)oxiran-2-yl]metyl}-1H-1,2,4-triazol, (15.137) 2-[(2S,4S,5S)-1-(2,4-diclophenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimetylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (15.138) 2-[(2R,4S,5S)-1-(2,4-diclophenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimetylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (15.139) 2-[(2R,4R,5R)-1-(2,4-diclophenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimetylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (15.140) 2-[(2S,4R,5R)-1-(2,4-diclophenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimetylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (15.141) 2-[(2S,4S,5R)-1-(2,4-diclophenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimetylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (15.142) 2-[(2R,4S,5R)-1-(2,4-diclophenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimetylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (15.143) 2-[(2R,4R,5S)-1-(2,4-diclophenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimetylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (15.144) 2-[(2S,4R,5S)-1-(2,4-diclophenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimetylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (15.145) 2-flo-6-(triflometyl)-N-(1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl)benzamit, (15.146) 2-(6-benzylpyridin-2-yl)quinazolin, (15.147) 2-[6-(3-flo-4-metoxyphenyl)-5-metylpyridin-2-yl]quinazolin, (15.148) 3-(4,4-diflo-3,3-dimetyl-3,4-dihydroisoquinolin-1-yl)quinolin, (15.149) axit abscisic, (15.150) 3-(diflometyl)-N-metoxy-1-metyl-N-[1-(2,4,6-triclophenyl)propan-2-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.151) N'-[5-bromo-6-(2,3-dihydro-1H-inden-2-yloxy)-2-metylpyridin-3-yl]-N-etyl-N-metylimidoformamit, (15.152) N'-{5-bromo-6-[1-(3,5-diflophenyl)etoxy]-2-metylpyridin-3-yl}-N-etyl-N-metylimidoformamit, (15.153) N'-{5-bromo-6-[(1R)-1-(3,5-diflophenyl)etoxy]-2-metylpyridin-3-yl}-N-etyl-N-metylimidoformamit, (15.154) N'-{5-bromo-6-[(1S)-1-(3,5-diflophenyl)etoxy]-2-metylpyridin-3-yl}-N-etyl-N-metylimidoformamit, (15.155) N'-{5-bromo-6-[(cis-4-isopropylxyclohexyl)oxy]-2-metylpyridin-3-yl}-N-etyl-N-metylimidoformamit, (15.156) N'-{5-bromo-6-[(trans-4-isopropylxyclohexyl)oxy]-2-metylpyridin-3-yl}-N-etyl-N-metylimidoformamit, (15.157) N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-N-(2-isopropylbenzyl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.158) N-xyclopropyl-N-(2-xyclopropylbenzyl)-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.159) N-(2-tert-butylbenzyl)-N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.160) N-(5-clo-2-etylbenzyl)-N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-1-

metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.161) N-(5-clo-2-isopropylbenzyl)-N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.162) N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-N-(2-etyl-5-flobenzyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.163) N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-N-(5-flo-2-isopropylbenzyl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.164) N-xyclopropyl-N-(2-xyclopropyl-5-flobenzyl)-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.165) N-(2-xyclopentyl-5-flobenzyl)-N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.166) N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-N-(2-flo-6-isopropylbenzyl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.167) N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-N-(2-etyl-5-metylbenzyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.168) N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-N-(2-isopropyl-5-metylbenzyl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.169) N-xyclopropyl-N-(2-xyclopropyl-5-metylbenzyl)-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.170) N-(2-tert-butyl-5-metylbenzyl)-N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.171) N-[5-clo-2-(triflometyl)benzyl]-N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.172) N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-N-[5-metyl-2-(triflometyl)benzyl]-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.173) N-[2-clo-6-(triflometyl)benzyl]-N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.174) N-[3-clo-2-flo-6-(triflometyl)benzyl]-N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.175) N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-N-(2-etyl-4,5-dimetylbenzyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.176) N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-N-(2-isopropylbenzyl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-carbothioamit, (15.177) 3-(diflometyl)-N-(7-flo-1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.178) 3-(diflometyl)-N-[(3R)-7-flo-1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl]-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.179) 3-(diflometyl)-N-[(3S)-7-flo-1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl]-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (15.180) N'-(2,5-dimetyl-4-phenoxyphenyl)-N-etyl-N-metylimidoformamit, (15.181) N'-{4-[(4,5-diclo-1,3-thiazol-2-yl)oxy]-2,5-dimetylphenyl}-N-etyl-N-metylimidoformamit, (15.182) N-(4-clo-2,6-diflophenyl)-4-(2-clo-4-flophenyl)-1,3-dimetyl-1H-pyrazol-5-amin. Tất cả các thành phần kết hợp nêu trong các nhóm từ (1) đến (15), trong trường hợp có thể, có

thể tạo thành muối cùng với các bazơ hoặc axit thích hợp nếu chúng có khả năng như vậy dựa trên cơ sở các nhóm chức của chúng.

Các chất diệt sinh vật gây hại sinh học làm các thành phần kết hợp

Các hợp chất có công thức (I) có thể được kết hợp với các chất diệt sinh vật gây hại sinh học.

Các chất diệt sinh vật gây hại sinh học bao gồm chủ yếu là vi khuẩn, nấm, nấm men, chất chiết thực vật và các sản phẩm được tạo ra bởi vi sinh vật, bao gồm cả các protein và các sản phẩm chuyển hóa thứ cấp.

Các chất diệt sinh vật gây hại sinh học bao gồm vi khuẩn như vi khuẩn sinh bào tử, vi khuẩn cư trú ở rễ và vi khuẩn mà hoạt động ở dạng chất diện côn trùng, chất diệt nấm hoặc chất diệt giun tròn sinh học.

Ví dụ, về các vi khuẩn như vậy mà chúng được sử dụng hoặc có thể được sử dụng làm chất diệt sinh vật gây hại sinh học đó là:

Bacillus amyloliquefaciens, chủng FZB42 (DSM 231179), hoặc*Bacillus cereus,* đặc biệt là *B. cereus* chủng CNCM I-1562 hoặc *Bacillus firmus*, chủng I-1582 (số truy cập CNCM I-1582) hoặc *Bacillus pumilus*, đặc biệt là chủng GB34 (số truy cập ATCC 700814) và chủng QST2808 (số truy cập NRRL B-30087), hoặc *Bacillus subtilis*, đặc biệt là chủng GB03 (số truy cập ATCC SD-1397), hoặc *Bacillus subtilis* chủng QST713 (số truy cập NRRL B-21661) hoặc *Bacillus subtilis* chủng OST 30002 (số truy cập NRRL B-50421) *Bacillus thuringiensis*, đặc biệt là *B. thuringiensis* loài phụ *israelensis* (kiểu huyết thanh H-14), chủng AM65-52 (số truy cập ATCC 1276), hoặc *B. thuringiensis subsp. aizawai*, đặc biệt là chủng ABTS-1857 (SD-1372), hoặc *B. thuringiensis subsp. kurstaki* chủng HD-1, hoặc *B. thuringiensis subsp. tenebrionis* chủng NB 176 (SD-5428), *Pasteuria penetrans*, *Pasteuria spp.* (Rotylenchulus reniformis nematode)-PR3 (số truy cập ATCC SD-5834), *Streptomyces microflavus* chủng AQ6121 (= QRD 31.013, NRRL B-50550), *Streptomyces galbus* chủng AQ 6047 (số truy cập NRRL 30232).

Ví dụ, về nấm và nấm men mà được sử dụng hoặc có thể được sử dụng làm chất diệt sinh vật gây hại sinh học là:

Beauveria bassiana, đặc biệt là chủng ATCC 74040, *Coniothyrium minitans*, đặc biệt là chủng CON/M/91-8 (số truy cập DSM-9660), *Lecanicillium spp.*, đặc biệt là chủng HRO LEC 12, *Lecanicillium lecanii*, (trước đây được biết là *Verticillium lecanii*), đặc biệt là chủng KV01, *Metarhizium anisopliae*, đặc biệt là chủng F52 (DSM3884/ ATCC 90448), *Metschnikowia fructicola*, đặc biệt là chủng NRRL Y-30752, *Paecilomyces fumosoroseus (*hiện nay: *Isaria fumosorosea)*, đặc biệt là chủng IFPC 200613, hoặc chủng Apopka 97 (số truy cập ATCC 20874), *Paecilomyces lilacinus*, đặc biệt là *P. lilacinus* chủng 251 (AGAL 89/030550), *Talaromyces flavus*, đặc biệt là chủng V117b, *Trichoderma atroviride*, đặc biệt là chủng SC1 (số truy cập CBS 122089), *Trichoderma harzianum*, đặc biệt là *T. harzianum rifai T39* (số truy cập CNCM I-952).

Ví dụ, về các virut mà được sử dụng hoặc có thể được sử dụng làm chất diệt sinh vật gây hại sinh học là:

Virut thể hạt (GV) *Adoxophyes orana* (bướm trái cây mùa hè), virut thể hạt (GV) *Cydia pomonella* (ấu trùng sâu bướm), virut đa diện nhân (NPV) *Helicoverpa armigera* (giun nang ở bông), *Spodoptera exigua* (sâu xanh da láng) mNPV, *Spodoptera frugiperda* (sâu xanh mùa thu) mNPV, *Spodoptera littoralis* (sâu ăn lá bông châu Phi) NPV.

Cũng được bao gồm là vi khuẩn và nấm mà được bổ sung làm 'chất để cấy' lên thực vật hoặc các bộ phận của thực vật hoặc các cơ quan của thực vật và mà nhờ bởi các đặc tính đặc biệt của chúng, thúc đẩy sự phát triển của thực vật và sức khỏe của thực vật. Các ví dụ bao gồm:

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

Rhizopogon spp., Scleroderma spp., Suillus spp., Streptomyces spp.

Chất an toàn làm thành phần kết hợp

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

Thực vật và các bộ phận của thực vật

Tất cả thực vật và các bộ phận của thực vật có thể được xử lý theo sáng chế. Ở đây, thực vật được hiểu có nghĩa là toàn bộ thực vật và nhóm thực vật, như thực vật hoang dại mong muốn và không mong muốn hoặc cây trồng (bao gồm cây trồng xuất hiện tự nhiên), ví dụ, ngũ cốc (lúa mì, lúa, tiểu hắc mạch, lúa mạch, lúa mạch đen, yến mạch), ngô, đậu tương, khoai tây, củ cải đường, mía đường, cà chua, đậu và các loài rau khác, bông, thuốc lá, cải dầu, và cả thực vật lấy quả (với các loại quả táo, lê, các loại quả cam quít và nho). Các cây trồng vụ mùa có thể là những cây trồng có thể thu được nhờ sự nhân giống cây trồng thông thường và các phương pháp tối ưu hoặc bằng các phương pháp công nghệ sinh học và các phương pháp kỹ thuật gen hoặc bằng các sự kết hợp của các phương pháp này, gồm các các cây trồng chuyển đổi gen và gồm các cây trồng nhà máy 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 sẽ được hiểu có 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, minh họa đó là các loại lá, lá kim, cuống, thân, hoa, thể quả, quả và hạt và cả thân củ, rễ và thân rễ. Các bộ phận của thực vật cũng bao gồm cả nguyên liệu thu hoạch và nguyên liệu gây giống sinh sản và sinh dưỡng, ví dụ, cành giâm, thân củ, thân rễ, cành ghép và hạt.

Việc xử lý thực vật và các bộ phận của thực vật theo sáng chế bằng hợp chất có công thức (I) được tiến hành trực tiếp hoặc bằng cách cho hợp chất nêu trên tác động

lên không gian xung quanh, môi trường sống hoặc không gian bảo quản của chúng bằng các phương pháp xử lý thông thường, ví dụ, bằng cách ngâm, phun, làm bay hơi, tạo mù, tung rắc, quét lên, tiêm và trong trường hợp nguyên liên nhân giống, đặc biệt là đối với hạt giống, cả bằng cách phủ một hoặc nhiều lớp phủ.

Như đã nêu trên đây, theo sáng chế, có thể xử lý tất cả thực vật và bộ phận của thực vật. Theo một phương án được ưu tiên, các loài thực vật hoang dại và giống thực vật, hoặc các loại thu được bằng phương pháp chọn tạo giống sinh học thông thường, như lai giống hoặc dung hợp tế bào trần, và các bộ phận của thực vật nêu trên, được xử lý. Theo một phương án được ưu tiên, 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 được xử lý. Thuật ngữ "bộ phận" hoặc "bộ phận của thực vật" hoặc "bộ phận thực vật" đã được giải thích ở trên. Theo sáng chế, tốt hơn là xử lý thực vật thuộc các giống thông thường trên thị trường tương ứng hoặc các loài đang sử dụng. Các loài cây được hiểu theo nghĩa là các cây có đặc tính mới ("tính trạng") thu được bằng phương pháp gây giống cây truyền thống, gây đột biến hoặc các phương pháp khác với sự hỗ trợ của các phương pháp ADN tái tổ hợp. Các loài này có thể là cây giống, giống, kiểu sinh học hoặc kiểu gen.

Thực vật chuyển gen, xử lý hạt và các sự kiện tích hợp

Thực vật hoặc giống thực vật chuyển gen được ưu tiên (các loài thu được bằng kỹ thuật di truyền) mà cần được xử lý theo sáng chế bao gồm tất cả các thực vật mà, thông qua sự biến đổi gen, thu được vật liệu di truyền mà sẽ truyền các tính trạng hữu dụng đặc biệt có lợi cho các thực vật này. Ví dụ, về các đặc tính này là sự sinh trưởng tốt hơn là, sự chịu được nhiệt độ cao hoặc thấp là tăng lên, sự kháng lại sự hạn hán hoặc các mực nước hoặc độ mặn của đất, hiệu suất ra hoa tăng cường, thu hoạch dễ hơn, tốc độ chín tăng lên, năng suất cao hơn, chất lượng cao hơn và/hoặc giá trị dinh dưỡng cao hơn của sản phẩm được thu hoạch, thời gian bảo quan tốt hơn là và/hoặc khả năng chế biến của sản phẩm được thu hoạch. Các ví dụ, khác và đặc biệt được nhấn mạnh về các đặc tính như vậy là tăng tính kháng của thực vật chống lại các động vật và vi sinh vật gây hại, như chống lại côn trùng, nhện, giun tròn, ve bét, ốc sên và

ốc, ví dụ, nhờ bởi các độc tố tạo ra trên thực vật, đặc biệt là các độc tố hình thành trên thực vật bằng vật liệu di truyền từ Bacillus thuringiensis (ví dụ, bởi các gen CryIA(a), CryIA(b), CryIA(c), CryIIA, CryIIIA, CryIIIB2, Cry9c Cry2Ab, Cry3Bb và CryIF và cả sự phối hợp của các gen này), và cũng tăng tính kháng của thực vật chống lại nấm, vi khuẩn và/hoặc virut gây bệnh trên thực vật, ví dụ, gây ra bởi tính kháng tập nhiễm hệ thống (systemic acquired resistance - SAR), systemin, phytoalexin, chất kích thích và các gen kháng và các protein và độc tố biểu hiện tương ứng, và cả tăng khả năng chống chịu của thực vật đối với một số hoạt chất diệt cỏ nhất định, ví dụ, các imidazolinon, sulphonylure, glyphosat hoặc phosphinothrixin (ví dụ, gen "PAT"). Các gen truyền tính trạng mong muốn cũng có thể có mặt kết hợp với nhau trong thực vật chuyển gen. Ví dụ, về thực vật chuyển gen bao gồm các cây trồng quan trọng, như ngũ cốc (lúa mì, lúa, tiểu hắc mạch, lúa mạch, lúa mạch đen, yến mạch), ngô, đậu tương, khoai tây, củ cải đường, mía đường, cà chua, đậu và các loại rau khác, bông, thuốc lá, cải dầu và cả thực vật lấy quả (với các loại quả táo, lê, các loại quả cam quít và nho), đặc biệt ưu tiên có thể kể đến ngô, đậu tương, lúa mì, lúa, khoai tây, bông, mía đường, thuốc lá và cải dầu. Các tính trạng đặc biệt chú ý đó là tăng tính kháng của thực vật với côn trùng, lớp nhện, giun tròn và ốc sên và ốc.

Bảo vệ cây trồng – các kiểu xử lý

Việc xử lý thực vật và các bộ phận của thực vật bằng hợp chất có công thức (I) được tiến hành trực tiếp hoặc bằng cách tác động lên vùng không gian xung quanh, môi trường sống hoặc không gian bảo quản bằng các phương pháp xử lý thông thường, ví dụ, bằng cách nhúng, phun, phun mù, tưới, làm bay hơi, phun bụi, tạo sương, gieo rắc, tạo bọt, quét lên, phết lên, tiêm, tưới nước (tưới ướt), tưới ngập và trong trường hợp nguyên liệu nhân giống, đặc biệt là trong trường hợp hạt giống, bao gồm cả phương pháp xử lý hạt khô, xử lý hạt ướt, xử lý dạng huyền phù đặc, phủ lên vỏ ngoài, phủ bằng một hoặc nhiều lớp phủ, v.v.. Cũng có thể triển khai hợp chất có công thức (I) bằng phương pháp thể tích cực nhỏ hoặc bơm dạng sử dụng hoặc chính bản thân hợp chất có công thức (I) vào trong đất.

Việc xử lý thực vật trực tiếp được ưu tiên đó là áp dụng lên lá, có nghĩa là, hợp chất có công thức (I) được áp dụng lên hệ lá, trong đó tần suất xử lý và tỷ lệ áp dụng cần được điều chỉnh theo mức độ nhiễm bởi sinh vật gây hại đích.

Trong trường hợp hợp chất tác động theo đường hệ thống, hợp chất có công thức (I) cũng được đưa vào trong thực vật thông qua hệ rễ. Sau đó, thực vật được xử lý thông qua sự tác động của hợp chất có công thức (I) lên môi trường sống của thực vật. Việc xử lý này có thể được hoàn thành, ví dụ, bằng cách tưới ướt, hoặc bằng cách kết hợp vào trong đất hoặc dung dịch chất dinh dưỡng, có nghĩa là, vị trí của thực vật (ví dụ, các hệ trồng trong đất hoặc trong nước) được thấm bởi dạng dịch lỏng của hợp chất có công thức (I), hoặc bằng cách áp dụng lên đất, có nghĩa là, hợp chất có công thức (I) được đưa ở dạng rắn (ví dụ, ở dạng hạt) vào trong vị trí của thực vật. Trong trường hợp cây trồng là lúa, việc xử lý này cũng có thể được hoàn thành bằng cách định lượng hợp chất có công thức (I) ở dạng áp dụng rắn (ví dụ, ở dạng hạt) vào trong cánh đồng lúa ngập nước.

Xử lý hạt

Việc phòng trừ động vật gây hại bằng cách xử lý hạt của thực vật đã biết từ lâu và là đối tượng cải tiến liên tục. Tuy nhiên, việc xử lý hạt dẫn đến hàng loạt vấn đề mà thường không thể giải quyết được một cách thỏa mãn. Do đó, tốt hơn là phát triển các phương pháp bảo vệ hạt và thực vật nảy mầm mà phương pháp này không cần hoặc ít nhất giảm thiểu đáng kể việc sử dụng thêm chất diệt sinh vật gây hại trong quá trình bào quản, sau khi gieo hạt hoặc sau khi thực vật nảy mầm. Hơn nữa mong muốn tối ưu hóa lượng thành phần hoạt tính được sử dụng để tạo ra sự bảo vệ tối ưu cho hạt và cây đang nảy mầm khỏi sự tấn công của các loài gây hại, mà không phá hủy chính cây này bởi thành phần hoạt tính được sử dụng. Cụ thể, các phương pháp xử lý hạt cũng cần phải tính đến các đặc tính diệt côn trùng hoặc diệt giun tròn nội sinh của thực vật chuyển gen kháng hoặc chịu được sinh vật gây hại nhằm để đạt được sự bảo vệ tối ưu cho hạt và thực vật nảy mầm với lượng sản phẩm bảo vệ cây trồng tối thiểu.

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

bằng một trong số các hợp chất có công thức (I). Phương pháp bảo vệ hạt và thực vật nảy mầm theo sáng chế chống lại sự tấn công của các sinh vật gây hại còn bao gồm phương pháp, trong đó hạt được xử lý đồng thời trong một thao tác hoặc tuần tự bằng hợp chất có công thức (I) và thành phần kết hợp. Sáng chế cũng bao gồm phương pháp, trong đó hạt được xử lý tại các thời điểm khác nhau bằng hợp chất có công thức (I) và thành phần kết hợp.

Tương tự, phần mô tả cũng mô tả việc sử dụng hợp chất có công thức (I) để xử lý hạt để bảo vệ hạt và thực vật tạo ra tránh khỏi động vật gây hại.

Sáng chế còn đề cập đến hạt mà hạt này đã được xử lý bằng hợp chất có công thức (I) để bảo vệ tránh khỏi động vật gây hại. Sáng chế cũng đề cập đến hạt mà hạt này đã được xử lý đồng thời bằng hợp chất có công thức (I) và thành phần kết hợp. Sáng chế còn đề cập đến hạt mà hạt này đã được xử lý tại các thời điểm khác nhau bằng hợp chất có công thức (I) và thành phần kết hợp. Trong trường hợp hạt mà hạt này đã được xử lý tại các thời điểm khác nhau bằng hợp chất có công thức (I) và thành phần kết hợp, các chất riêng biệt có thể có mặt trên hạt trong các lớp khác nhau. Trong trường hợp này, các lớp chứa hợp chất có công thức (I) và các thành phần kết hợp tùy ý có thể được tách riêng bằng lớp trung gian. Sáng chế cũng đề cập đến hạt, trong đó hợp chất có công thức (I) và thành phần kết hợp đã được áp dụng như một phần của lớp phủ hoặc làm một lớp khác hoặc các lớp khác ngoài lớp phủ ra.

Sáng chế còn đề cập đến hạt mà, sau khi xử lý bằng hợp chất có công thức (I), được cho tiến hành xử lý phủ màng để ngăn chặn sự bào mòn bụi trên hạt.

Một trong các lợi thế xuất hiện khi một trong số các hợp chất có công thức (I) tác động theo đường hệ thống là ở chỗ, việc xử lý hạt không chỉ bảo vệ bản thân hạt, mà còn bảo vệ cả thực vật nảy mầm từ hạt, sau khi nảy mầm, tránh khỏi động vật gây hại. Theo phương thức này, việc xử lý trung gian cho cây ở thời điểm gieo hạt hoặc sau đó một thời gian ngắn có thể được loại bỏ.

Lợi thế khác là ở chỗ, việc xử lý hạt bằng hợp chất có công thức (I) có thể tăng cường sự nảy mầm và sự phát triển của hạt đã xử lý.

Tương tự, cũng có thể được xem là lợi thế ở chỗ, hợp chất có công thức (I) đặc biệt còn có thể được sử dụng cho hạt chuyển gen.

Các hợp chất có công thức (I) cũng có thể được sử dụng kết hợp trong các chế phẩm thuộc công nghệ truyền tín hiệu, ví dụ, để dẫn đến sự tạo cụm tốt hơn là bởi các hiện tượng cộng sinh, ví dụ, chủng vi khuẩn nốt rễ, nấm cộng sinh mycorrhizae và/hoặc vi khuẩn hoặc nấm nội ký sinh thực vật và/hoặc dẫn đến sự cố định nitơ tối ưu.

Các hợp chất có công thức (I) thích hợp để bảo vệ hạt của giống thực vật bất kỳ được sử dụng trong nông nghiệp, trong nhà kính, trong trồng rừng hoặc trong làm vườn. Cụ thể hơn nữa, hạt nêu trên bao gồm hạt của ngũ cốc (ví dụ, lúa mì, lúa mạch, lúa mạch đen, kê và yến mạch), ngô, bông, đậu tương, lúa, khoai tây, hướng dương, cà phê, thuốc lá, canola, cải dầu, củ cải đường (ví dụ, củ cải đường và củ cải đường trong chăn nuôi), đậu phộng, các loại rau (ví dụ, cà chua, dưa chuột, đậu, các loại rau họ cải, hành và rau diếp), thực vật lấy quả, cỏ và cây cảnh. Đặc biệt quan trọng là việc xử lý hạt của ngũ cốc (như lúa mì, lúa mạch, lúa mạch đen và yến mạch), ngô, đậu tương, bông, canola, cải dầu và lúa.

Như đã nêu ở trên, việc xử lý hạt chuyển gen bằng hợp chất có công thức (I) cũng đặc biệt quan trọng. Đó là hạt của các cây mà thường chứa ít nhất một gen khác loại có tác dụng phòng trừ sự biểu hiện của một polypeptit có các đặc tính trừ sâu và/hoặc trừ giun tròn cụ thể. Gen khác loại ở hạt chuyển gen có thể có nguồn gốc từ vi sinh vật như Bacillus, Rhizobium, Pseudomonas, Serratia, Trichoderma, Clavibacter, Glomus hoặc Gliocladium. Sáng chế đặc biệt thích hợp để xử lý hạt chuyển gen chứa ít nhất một gen khác loại có nguồn gốc từ Bacillus sp. Gen khác loại tốt hơn là nữa có nguồn gốc từ Bacillus thuringiensis.

Trong ngữ cảnh của sáng chế, hợp chất có công thức (I) được áp dụng lên hạt. Tốt hơn là, hạt được xử lý ở trạng thái trong đó nó là đủ ổn định để không có tổn hại nào xảy ra trong quá trình xử lý. Nói chung, hạt có thể được xử lý vào thời điểm bất kỳ giữa lúc thu hoạch và gieo trồng. Thường sử dụng hạt tách biệt với thực vật và không chứa lõi, vỏ, thân, vỏ, lông hoặc thịt quả. Ví dụ, có thể sử dụng hạt mà hạt này đã được

thu hoạch, làm sạch và sấy khô tới hàm lượng ẩm cho phép để bảo quản. Theo cách khác, cũng có thể sử dụng hạt mà sau khi sấy khô, được xử lý bằng, ví dụ, nước và sau đó lại được sấy khô, ví dụ, phủ lót.

Thông thường, trong xử lý hạt, cần phải bảo đảm rằng, lượng hợp chất có công thức (I) và/hoặc các chất phụ gia khác áp dụng lên hạt được chọn theo cách sao cho, sự nảy mầm của hạt không bị ảnh hưởng và thực vật mọc lên từ hạt không bị tổn hại. Điều này cần phải được bảo đảm, nhất là trong trường hợp các hoạt chất mà có thể biểu hiện các tác dụng gây độc cho thực vật với các tỷ lệ áp dụng nhất định.

Các hợp chất có công thức (I) thông thường được áp dụng lên hạt ở dạng chế phẩm thích hợp. Chế phẩm và quy trình xử lý hạt thích hợp là đã biết đối với người có hiểu biết trung bình về lĩnh vực này.

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

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

Chất nhuộm màu hữu ích mà có thể có mặt trong chế phẩm xử lý hạt hữu dụng theo sáng chế là toàn bộ các chất nhuộm màu thông thường cho các mục đích này. Có thể sử dụng các sắc tố ít hòa tan trong nước hoặc thuốc nhuộm hòa tan trong nước. Ví dụ bao gồm cả thuốc nhuộm đã biết với tên Rhodamin B, C.I. Chất tạo màu đỏ 112 và C.I. Đỏ dung môi 1.

Chất làm ẩm hữu ích mà có thể có mặt trong chế phẩm xử lý hạt hữu dụng theo sáng chế là tất cả các chất mà tăng cường sự làm ẩm và được sử dụng thông thường trong phối chế các hoạt chất hóa nông. Được ưu tiên là sử dụng alkyl naphtalensulphonat, như diisopropyl hoặc diisobutyl naphtalensulphonat.

Chất phân tán và/hoặc chất nhũ hóa hữu ích mà có thể có mặt trong chế phẩm xử lý hạt hữu dụng theo sáng chế là tất cả các chất phân tán không ion, anion và cation được sử dụng thông thường trong phối chế các hoạt chất hóa nông. Được ưu tiên là sử dụng chất phân tán không ion hoặc anion hoặc hỗn hợp gồm các chất phân tán không ion hoặc anion. Chất phân tán không ion thích hợp bao gồm đặc biệt là các polyme khối etylen oxit/propylen oxit, alkylphenol polyglycol ete và tristryrylphenol polyglycol ete và các dẫn xuất phosphat hóa hoặc sulphat hóa của chúng. Các chất phân tán anion thích hợp đặc biệt là lignosulphonat, muối của axit polyacrylic và chất ngưng tụ arylsulphonat/formaldehyt.

Các chất chống tạo bọt mà có thể có mặt trong chế phẩm xử lý hạt hữu dụng theo sáng chế là tất cả các chất ngăn chặn sự tạo bọt được sử dụng thông thường trong phối chế các hoạt chất hóa nông. Chất chống tạo bọt silicon và magie stearat có thể được ưu tiên sử dụng.

Chất bảo quản mà có thể có mặt trong chế phẩm xử lý hạt hữu dụng theo sáng chế là tất cả các chất có thể sử dụng cho các mục đích này trong các chế phẩm hóa nông. Các ví dụ bao gồm diclophen và rượu benzylic hemiformal.

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

Chất kết dính hữu ích mà có thể có mặt trong chế phẩm xử lý hạt hữu dụng theo sáng chế là tất cả các chất kết dính thông thường có thể sử dụng trong các sản phẩm xử lý hạt. Các ví dụ, được ưu tiên bao gồm polyvinylpyrolidon, polyvinyl axetat, rượu polyvinyl và tyloza.

Giberelin mà có thể có mặt trong chế phẩm xử lý hạt hữu dụng theo sáng chế tốt hơn là các giberelin A1, A3 (= axit giberelic), A4 và A7; đặc biệt ưu tiên là sử dụng axit giberelic. Các giberelin đã được biết (xem trong tài liệu R. Wegler "Chemie der

Pflanzenschutz- und Schädlingsbekämpfungsmittel" [Chemistry of the Crop Protection Compositions and Pesticides], vol. 2, Springer Verlag, 1970, p. 401-412).

Chế phẩm xử lý hạt hữu dụng theo sáng chế có thể được sử dụng để xử lý nhiều loại hạt khác nhau, theo cách trực tiếp hoặc sau khi pha loãng trước với nước. Ví dụ, các sản phẩm cô đặc hoặc chế phẩm có thể thu được từ chúng bằng cách pha loãng với nước có thể được sử dụng để xử lý hạt của ngũ cốc, như lúa mì, lúa mạch, lúa mạch đen, yến mạch, và tiểu hắc mạch, và cả để xử lý hạt của ngô, lúa, cải dầu, đậu Hà Lan, đậu, bông, hướng dương, đậu tương và củ cải đường, hoặc theo các khác, để xử lý hạt của nhiều loại rau khác nhau. Chế phẩm xử lý hạt có thể sử dụng theo sáng chế, hoặc dạng sử dụng pha loãng của nó cũng có thể được sử dụng để xử lý hạt của thực vật chuyển gen.

Để xử lý hạt bằng chế phẩm xử lý hạt hữu dụng theo sáng chế, hoặc các dạng sử dụng được điều chế từ chúng, tất cả các đơn vị kết hợp có thể sử dụng được theo cách thông thường trong xử lý hạt đều là hữu ích. Cụ thể, quy trình trong xử lý hạt đó là đưa hạt vào trong thiết bị trộn vận hành theo từng mẻ hoặc vận hành liên tục, bổ sung lượng chế phẩm xử lý hạt mong muốn cụ thể, ở dạng nguyên như vậy hoặc sau khi pha loãng trước với nước và trộn kết hợp cho tới khi chế phẩm được phân bố đồng đều lên hạt. Nếu thích hợp, việc này được tiếp theo bằng quy trình làm khô.

Tỷ lệ áp dụng của chế phẩm xử lý hạt có thể sử dụng theo sáng chế có thể thay đổi trong một phạm vi tương đối rộng. Tỷ lệ này được quyết định bằng hàm lượng hợp chất có công thức (I) cụ thể trong chế phẩm và bởi loại hạt. Tỷ lệ áp dụng của hợp chất có công thức (I) thông thường nằm trong khoảng từ 0,001 đến 50g trên kilogam hạt, tốt hơn là từ 0,01 đến 15g trên kilogam hạt.

Sử dụng trong lĩnh vực sức khỏe động vật

Trong lĩnh vực sức khỏe động vật, tức là, trong lĩnh vực thuốc thú y, các hoạt chất theo sáng chế hoạt động chống lại động vật ký sinh, đặc biệt là ngoại ký sinh trùng hoặc theo cách khác, trong phương án khác, chống lại nội ký sinh trùng. Thuật ngữ "nội ký sinh trùng" bao gồm đặc biệt là giun sán như sán dây, giun tròn hoặc sán

lá, và động vật nguyên sinh như cầu trùng. Ngoại ký sinh trùng điển hình và tốt hơn là động vật chân khớp, đặc biệt là côn trùng như ruồi (đốt và liếm), ấu trùng ruồi ký sinh, chấy rận, chấy, rận chim, bọ chét và loài tương tự; hoặc ve bét như con ve, ví dụ, ve cứng hoặc ve mềm, hoặc các loại mạt như ghẻ, mạt mùa gặt, mạt chim và các loại tương tự, và cả các ngoại ký sinh trùng thủy sinh như phân lớp chân chèo.

Trong lĩnh vực thuốc thú y, các hợp chất có công thức (I) không gây độc đối với động vật máu nóng thích hợp để diệt trừ ký sinh trùng xuất hiện trong nhân giống động vật và chăn nuôi động vật ở gia súc, động vật gây giống, động vật trong vườn thú, động vật thí nghiệm, động vật thực nghiệm và động vật nuôi trong gia đình. Hợp chất theo sáng chế có hoạt tính chống lại tất cả hoặc các giai đoạn phát triển đặc hiệu của ký sinh trùng.

Gia súc nông nghiệp bao gồm, ví dụ, động vật có vú như cừu, dê, ngựa, lừa, lạc đà, trâu, thỏ, tuần lộc, đa ma, và nhất là gia súc và lợn; gia cầm như gà tây, vịt, ngỗng và nhất là gà; cá và các loài giáp xác, ví dụ, trong nuôi trồng thủy sản và cả côn trùng như ong.

Động vật nuôi trong gia đình bao gồm, ví dụ, động vật có vú, như chuột đồng, chuột bạch, chuột cống, chuột nhắt, sóc sinsin, chồn sương và đặc biệt là chó, mèo, chim cảnh, bò sát, động vật lưỡng cư và cá cảnh.

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

Theo phương án được ưu tiên khác, các hợp chất có công thức (I) được dùng cho chim, cụ thể là chim cảnh và đặc biệt là gia cầm.

Việc sử dụng các hợp chất có công thức (I) để phòng trừ động vật ký sinh dự định để làm giảm hoặc phòng ngừa sự ốm yếu, các trường hợp tử vong và sự suy giảm các đặc tính (trong trường hợp thịt, sữa, len, da sống, trứng, mật và đặc tính tương tự), như vậy giúp cho việc chăn nuôi động vật kinh tế hơn và đơn giản hơn và động vật có thể có được sức khỏe tốt hơn là.

Liên quan đến lĩnh vực sức khỏe động vật, thuật ngữ "kiểm soát" hoặc "việc kiểm soát" có nghĩa là, hợp chất có công thức (I) có hiệu quả trong việc làm giảm tỷ lệ mắc ký sinh trùng cụ thể ở một động vật bị nhiễm bởi ký sinh trùng này tới mức độ không độc. Cụ thể hơn nữa, thuật ngữ "việc kiểm soát" trong ngữ cảnh của sáng chế có nghĩa là hợp chất có công thức (I) có thể tiêu diệt ký sinh trùng tương ứng, ức chế sự phát triển hoặc ức chế sự tăng sinh của nó.

Các loại ký sinh trùng này bao gồm:

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

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

Thuộc bộ Diptera và các phân bộ Nematocerina và Brachycerina, ví dụ, Aedes spp., Anopheles spp., Culex spp., Simulium spp., Eusimulium spp., Phlebotomus spp., Lutzomyia spp., Culicoides spp., Chrysops spp., Odagmia spp., Wilhelmia spp., Hybomitra spp., Atylotus spp., Tabanus spp., Haematopota spp., Philipomyia spp., Braula spp., Musca spp., Hydrotaea spp., Stomoxys spp., Haematobia spp., Morellia spp., Fannia spp., Glossina spp., Calliphora spp., Lucilia spp., Chrysomyia spp., Wohlfahrtia spp., Sarcophaga spp., Oestrus spp., Hypoderma spp., Gasterophilus spp., Hippobosca spp., Lipoptena spp., Melophagus spp., Rhinoestrus spp., Tipula spp.; các ví dụ, cụ thể là: Aedes aegypti, Aedes albopictus, Aedes taeniorhynchus, Anopheles gambiae, Anopheles maculipennis, Calliphora erythrocephala, Chrysozona pluvialis, Culex quinquefasciatus, Culex pipiens, Culex tarsalis, Fannia canicularis, Sarcophaga

carnaria, Stomoxys calcitrans, Tipula paludosa, Lucilia cuprina, Lucilia sericata, Simulium reptans, Phlebotomus papatasi, Phlebotomus longipalpis, Odagmia ornata, Wilhelmia equina, Boophthora erythrocephala, Tabanus bromius, Tabanus spodopterus, Tabanus atratus, Tabanus sudeticus, Hybomitra ciurea, Chrysops caecutiens, Chrysops relictus, Haematopota pluvialis, Haematopota italica, Musca autumnalis, Musca domestica, Haematobia irritans irritans, Haematobia irritans exigua, Haematobia stimulans, Hydrotaea irritans, Hydrotaea albipuncta, Chrysomya chloropyga, Chrysomya bezziana, Oestrus ovis, Hypoderma bovis, Hypoderma lineatum, Przhevalskiana silenus, Dermatobia hominis, Melophagus ovinus, Lipoptena capreoli, Lipoptena cervi, Hippobosca variegata, Hippobosca equina, Gasterophilus intestinalis, Gasterophilus haemorroidalis, Gasterophilus inermis, Gasterophilus nasalis, Gasterophilus nigricornis, Gasterophilus pecorum, Braula coeca;

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

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

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

Thuộc phân lớp Acari (Acarina) và các bộ Meta- và Mesostigmata, ví dụ, Argas spp., Ornithodorus spp., Otobius spp., Ixodes spp., Amblyomma spp., Rhipicephalus (Boophilus) spp., Dermacentor spp., Haemophysalis spp., Hyalomma spp., Dermanyssus spp., Rhipicephalus spp. (the original genus of multihost ticks), Ornithonyssus spp., Pneumonyssus spp., Raillietia spp., Pneumonyssus spp., Sternostoma spp., Varroa spp., Acarapis spp.; các ví dụ, cụ thể là: Argas persicus, Argas reflexus, Ornithodorus moubata, Otobius megnini, Rhipicephalus (Boophilus) microplus, Rhipicephalus (Boophilus) decoloratus, Rhipicephalus (Boophilus) annulatus, Rhipicephalus (Boophilus) calceratus, Hyalomma anatolicum, Hyalomma aegypticum, Hyalomma marginatum, Hyalomma transiens, Rhipicephalus evertsi,

Ixodes ricinus, Ixodes hexagonus, Ixodes canisuga, Ixodes pilosus, Ixodes rubicundus, Ixodes scapularis, Ixodes holocyclus, Haemaphysalis concinna, Haemaphysalis punctata, Haemaphysalis cinnabarina, Haemaphysalis otophila, Haemaphysalis leachi, Haemaphysalis longicorni, Dermacentor marginatus, Dermacentor reticulatus, Dermacentor pictus, Dermacentor albipictus, Dermacentor andersoni, Dermacentor variabilis, Hyalomma mauritanicum, Rhipicephalus sanguineus, Rhipicephalus bursa, Rhipicephalus appendiculatus, Rhipicephalus capensis, Rhipicephalus turanicus, Rhipicephalus zambeziensis, Amblyomma americanum, Amblyomma variegatum, Amblyomma maculatum, Amblyomma hebraeum, Amblyomma cajennense, Dermanyssus gallinae, Ornithonyssus bursa, Ornithonyssus sylviarum, Varroa jacobsoni;

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

Thuộc phân lớp chân chèo với bộ Siphonostomatoida đặc biệt là chi Lepeophtheirus và Caligus; có thể kể đến để làm ví dụ và ưu tiên đặc biệt là loài Lepeophtheirus salmonis, Caligus elongatus và Caligus clemensi.

Nói chung, các hoạt chất theo sáng chế có thể được sử dụng trực tiếp khi chúng được sử dụng trong điều trị cho động vật. Tốt hơn là hoạt chất theo sáng chế được sử

dụng (được dùng) ở dạng dược phẩm mà dược phẩm này có thể chứa các tá dược và/hoặc chất bổ trợ dược dụng đã biết trong lĩnh vực.

Trong lĩnh vực sức khỏe động vật và trong chăn nuôi, các hoạt chất được sử dụng (= được dùng) theo cách đã biết, bằng cách dùng theo đường tiêu hóa dưới dạng, ví dụ, viên nén, viên nang, dạng lỏng, dạng uống, hạt, hồ nhão, dạng tiêm nhanh, dạng gia công thấm qua và viên đặt, bằng cách dùng theo đường ngoài tiêu hóa, ví dụ, bằng cách tiêm (trong cơ, dưới da, tĩnh mạch, trong phúc mạc, không kể đường khác), cấy ghép, bằng cách dùng theo đường mũi, bằng cách dùng theo đường da ở dạng, ví dụ, nhúng hoặc ngâm, phun, rót lên và chấm lên, rửa và thoa lên và cả với sự hỗ trợ của các vật tạo khuôn chứa hoạt chất, như vòng đeo cổ, vòng đeo ở tai, vật đeo ở đuôi, dải đeo ở chi, các dây đeo, các dụng cụ đánh dấu, v.v.. Hoạt chất có thể được phối chế thành dầu gội hoặc thành chế phẩm thích hợp có thể dùng được ở dạng sol khí hoặc dạng phun không tạo áp, ví dụ, bơm phun và phun tán,

Trong trường hợp sử dụng cho gia súc, gia cầm, động vật cảnh trong gia đình, v.v.., hoạt chất theo sáng chế có thể được sử dụng ở dạng chế phẩm (ví dụ, bột, bột có thể thấm ướt [wettable powder - "WP"], nhũ tương, dạng nhũ dầu [emulsifiable concentrates - "EC"], chế phẩm chảy tự do, dung dịch đồng nhất và huyền phù đậm đặc [suspension concentrates - "SC"]), các dạng này chứa hoạt chất với lượng nằm trong khoảng từ 1% đến 80% khối lượng, trực tiếp hoặc sau khi pha loãng (ví dụ, pha loãng 100 đến 10000 lần), hoặc chúng có thể được sử dụng ở dạng tắm hóa chất.

Trong trường hợp sử dụng trong lĩnh vực sức khỏe động vật, hoạt chất theo sáng chế, nhằm để mở rộng phổ hoạt tính, có thể được sử dụng kết hợp với chất hiệp đồng, chất xua đuổi hoặc các hoạt chất khác, ví dụ, chất diệt ve bét, chất diện côn trùng, chất diệt giun sán, chất chống động vật nguyên sinh. Các thành phần kết hợp tiềm năng với các hợp chất có công thức (I) theo sáng chế, trong trường hợp áp dụng cho sức khỏe động vật, có thể là một hoặc nhiều hợp chất từ các nhóm (In-1) đến (In-25).

(In-1) Các chất ức chế axetylcholinsteraza (AChE), ví dụ, các carbamat, ví dụ, alanycarb, aldicarb, bendiocarb, benfuracarb, butocarboxim, butoxycarboxim, carbaryl, carbofuran,

carbosulfan, ethiofencarb, fenobucarb, formetanat, furathiocarb, isoprocarb, methiocarb, methomyl, metolcarb, oxamyl, pirimicarb, propoxur, thiodicarb, thiofanox, triazamat, trimethacarb, XMC và xylylcarb; trong các ứng dụng chống lại ngoại ký sinh trùng, đặc biệt được ưu tiên ở đây là bendiocarb, carbaryl, methomyl, promaxyl và propoxur; hoặc

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

(In-2) Các chất đối kháng kênh clorua qua cổng GABA, ví dụ, clo hữu cơ, ví dụ, bromoxyclen, chlordan và endosulfan (alpha-), heptachlor, lindan và toxaphen; trong các ứng dụng chống lại ngoại ký sinh trùng, đặc biệt được ưu tiên ở đây là endosulfan (alpha-) và lindan; hoặc

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

các arylisoxazolin, các arylpyrolin, các arylpyrolidin, ví dụ, fluralaner (đã biết trong tài liệu WO2009/2024541, Example, 11-1; và cả các hợp chất trong tài liệu

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

(In-3) Các chất điều biến kênh natri/các chất phong bế kênh natri đóng mở theo điện thế, ví dụ, các pyrethroid, ví dụ, acrinathrin, allethrin (d-cis-trans, d-trans), bifenthrin, bioallethrin, bioallethrin S-xyclopentenyl, bioresmethrin, xycloprothrin, cyfluthrin (beta-), xyhalothrin (gamma-, lambda-), xypermethrin (alpha-, beta-, theta-, zeta-), xyphenothrin [(1*R*)-*trans* isomer], deltamethrin, dimefluthrin, empenthrin [(*EZ*)-(1*R*) isomer], esfenvalerat, etofenprox, fenpropathrin, fenvalerat, flucythrinat, flumethrin, fluvalinat (tau-), halfenprox, imiprothrin, metofluthrin, permethrin, phenothrin [(1*R*)-trans isomer], prallethrin, profluthrin, pyrethrins (pyrethrum), resmethrin, RU 15525, silafluofen, tefluthrin, tetramethrin [(1*R*) isomer)], tralomethrin, transfluthrin và ZXI 8901; trong các ứng dụng chống lại ngoại ký sinh trùng, đặc biệt được ưu tiên ở đây là các pyrethroid loại I allethrin, bioallethrin, permethrin, phenothrin, resmethrin, tetramethrin và các pyrethroid loại II (các alphaxyanopyrethroid) alpha-xypermethrin, cyfluthrin (beta-), xyhalothrin (lambda-), xypermethrin (alpha-, zeta-), deltamethrin, fenvalerat, flucythrinat, flumethrin, fluvalinat (tau-), và các pyrethroid không este etofenprox và silafluofen; hoặc các hợp chất clo hữu cơ, ví dụ, DDT hoặc

metoxychlor. Các hoạt chất thuộc nhóm này đặc biệt rất thích hợp làm các thành phần kết hợp, vì chúng có tác dụng xua đuổi tiếp xúc kéo dài hơn và do đó mở rộng phổ hoạt tính để bao gồm cả thành phần này.

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

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

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

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

(In-8) Các chất ức chế sinh trưởng của các loại mạt, ví dụ, clofentezin, diflovidazin, hexythiazox, etoxazol; trong các ứng dụng chống lại ngoại ký sinh trùng, đặc biệt được ưu tiên ở đây là etoxazol.

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

(In-10) Các chất ức chế quá trình phosphoryl hóa oxy hóa, các chất phá vỡ ATP, ví dụ, diafenthiuron.

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

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

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

(In-15) Các chất ức chế sự lột xác, ví dụ, xyromazin và dicxclanil; trong các ứng dụng chống lại ngoại ký sinh trùng, đặc biệt được ưu tiên ở đây là xyromazin và dicxclanil.

(In-16) Các chất chủ vận/các chất phá vỡ hocmon lột xác, ví dụ, các diaxylhydrazin, ví dụ, chromafenozit, halofenozit, metoxyfenozit và tebufenozit.

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

(In-18) Các chất ức chế vận chuyển điện tử phức III, ví dụ, hydrametylnon; axequinoxyl; fluacrypyrim.

(In-19) Các chất ức chế vận chuyển điện tử phức I, ví dụ, từ nhóm các chất diệt ve bét METI, ví dụ, fenazaquin, fenpyroximat, pyrimidifen, pyridaben, tebufenpyrad, tolfenpyrad; trong các ứng dụng chống lại ngoại ký sinh trùng, đặc biệt được ưu tiên ở đây là fenpyroximat, pyrimidifen và tolfenpyrad;

(In-20) Các chất phong bế kênh natri đóng mở theo điện thế, ví dụ, indoxacarb và metaflumizon; trong các ứng dụng chống lại ngoại ký sinh trùng, đặc biệt được ưu tiên ở đây là indoxacarb và metaflumizon.

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

(In-22) Các chất ức chế vận chuyển điện tử phức II, ví dụ, xyenopyrafen.

(In-23) Các chất tác động lên thụ thể ryanodin, ví dụ, các diamit, ví dụ, flubendiamit, chlorantraniliprol (Rynaxypyr), cyantraniliprol (Cyazypyr) và cả 3-bromo-N-{2-bromo-4-clo-6-[(1-xyclopropyletyl)carbamoyl]phenyl}-1-(3-clopyridin-2-yl)-1H-pyrazol-5-carboxamit (đã biết trong tài liệu WO2005/077934) hoặc metyl 2-[3,5-dibromo-2-({[3-bromo-1-(3-clopyridin-2-yl)-1H-pyrazol-5-yl]cacbonyl}amino)benzoyl]-1,2-dimetylhydrazincarboxylat (đã biết trong tài liệu WO2007/043677).

(In-24) Các hoạt chất khác chưa biết cơ chế tác động, ví dụ, azadirachtin, amidoflumet, benzoximat, bifenazat, chinomethionat, cryolite, cyflumetofen, dicofol, fluensulfon (5-clo-2-[(3,4,4-triflobut-3-en-1-yl)sulphonyl]-1,3-thiazol), flufenerim, pyridalyl và pyrifluquinazon; ngoài ra còn các chế phẩm trên cơ sở Bacillus firmus (I-1582, BioNeem, Votivo) và các hoạt chất đã biết sau: 4-{[(6-bromopyrid-3-yl)metyl]-(2-floetyl)amino}furan-2(5H)-on (đã biết trong tài liệu WO 2007/115644), 4-{[(6-flopyrid-3-yl)metyl](2,2-difloetyl)amino}furan-2(5H)-on (đã biết trong tài liệu WO 2007/115644), 4-{[(2-clo-1,3-thiazol-5-yl)metyl](2-floetyl)amino}furan-2(5H)-on (đã biết trong tài liệu WO 2007/115644), 4-{[(6-chloropyrid-3-yl)metyl](2-floetyl)-amino}furan-2(5H)-on (đã biết trong tài liệu WO 2007/115644), 4-{[(6-chloropyrid-3-yl)metyl](2,2-difloetyl)amino}furan-2(5H)-on (đã biết trong tài liệu WO 2007/115644), 4-{[(6-clo-5-flopyrid-3-yl)metyl](metyl)amino}furan-2(5H)-on (đã biết trong tài liệu WO 2007/115643), 4-{[(5,6-diclopyrid-3-yl)metyl](2-floetyl)amino}-furan-2(5H)-on (đã biết trong tài liệu WO 2007/115646), 4-{[(6-clo-5-flopyrid-3-yl)metyl](xyclopropyl)amino}furan-2(5H)-on (đã biết trong tài liệu WO 2007/115643), 4-{[(6-chloropyrid-3-yl)metyl](xyclopropyl)amino}furan-2(5H)-on (đã biết trong tài liệu EP-A-0 539 588), 4-{[(6-chloropyrid-3-yl)metyl](metyl)amino}-furan-2(5H)-on (đã biết trong tài liệu EP-A-0 539 588), [(6-clopyridin-3-

yl)metyl](metyl)oxido-λ^4-sulphanylidenxyanamit (đã biết trong tài liệu WO 2007/149134), [1-(6-clopyridin-3-yl)etyl](metyl)oxido-λ^4-sulphanylidenxyanamit (đã biết trong tài liệu WO 2007/149134), [(6-triflometylpyridin-3-yl)metyl](metyl)oxido-λ^4-sulphanylidenxyanamit (đã biết trong tài liệu WO 2007/095229), sulfoxaflor (tương tự như vậy đã biết trong tài liệu WO 2007/149134), 11-(4-clo-2,6-dimetylphenyl)-12-hydroxy-1,4-dioxa-9-azadispiro[4.2.4.2]tetradec-11-en-10-on (đã biết trong tài liệu WO 2006/089633), 3-(4'-flo-2,4-dimetylbiphenyl-3-yl)-4-hydroxy-8-oxa-1-azaspiro-[4.5]dec-3-en-2-on (đã biết trong tài liệu WO 2008/067911), 1-[2-flo-4-metyl-5-[(2,2,2-trifloetyl)sulphinyl]phenyl]-3-(triflometyl)-1H-1,2,4-triazol-5-amin (đã biết trong tài liệu WO 2006/043635), [(3S,4aR,12R,12aS,12bS)-3-[(xyclopropylcacbonyl)-oxy]-6,12-dihydroxy-4,12b-dimetyl-11-oxo-9-(pyridin-3-yl)-1,3,4,4a,5,6,6a,12,12a,-12b-decahydro-2H,11H-benzo[f]pyrano[4,3-b]chromen-4-yl]metyl xyclopropan-carboxylat (đã biết trong tài liệu WO 2006/129714), 2-xyano-3-(diflometoxy)-N-etyl-benzensulphonamit (đã biết trong tài liệu WO 2005/035486), N-[1-(2,3-dimetylphenyl)-2-(3,5-dimetylphenyl)etyl]-4,5-dihydro-2-thiazolamine (đã biết trong tài liệu WO 2008/104503); penigequinolon A (đã biết trong tài liệu EP 2248422 (Compound I) và WO 2009/060015 (Compound No.11).

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

Ngoài các nhóm này ra, cũng có thể sử dụng các chất xua đuổi thời hạn ngắn trong các hỗn hợp hoặc ứng dụng kết hợp. Các ví dụ, minh họa đó là DEET (N,N-dietyl-3-metylbenzamit), icaridin (axit 1-piperidincarboxylic), (1S, 20S)-2-metylpiperidinyl-3-xyclohexen-1-carboxamit (SS220), indalon (butyl 3,4-dihydro-2, 2-dimetyl-4-oxo-2H-pyran-6-carboxylat), các dihydronepetalacton, nootkaton, IR3535 (etyl este của axit 3-[N-butyl-N-axetyl]-aminopropionic), 2-etylhexan-1,3-diol, (1R,2R,5R)-2-(2-hydroxypropan-2-yl)-5-metyl-xyclohexan-1-ol, dimetyl benzen-1,2-dicarboxylat, axit dodecanoic, undecan-2-on, N,N-dietyl-2-phenylaxetamit và các tinh dầu hoặc các thành phần thực vật khác có tác dụng xua đuổi đã biết, ví dụ, borneol,

callicarpenal, 1,8-cineol (eucalyptol), carvacrol, b-citronellol, a-copaen, coumarin (hoặc các dẫn xuất tổng hợp của nó đã biết trong tài liệu US20120329832). Icaridin, indalon và IR3535 (etyl este của axit 3-[N-butyl-N-axetyl]-aminopropionic) là đặc biệt được ưu tiên để sử dụng chống lại ngoại ký sinh trùng.

Trong các nhóm từ (I-1) đến (I-25) nêu trên, các nhóm sau được ưu tiên sử dụng làm các thành phần kết hợp: (In-2), (In-3), (In-4), (In-5), (In-6), (In-17), (In-25).

Các ví dụ, được đặc biệt ưu tiên về hoạt chất, chất hiệp đồng hoặc chất xua đuổi có tác dụng diệt côn trùng hoặc diệt ve bét làm các thành phần kết hợp của hợp chất theo sáng chế có công thức (I) đó là afoxolaner, allethrin, amitraz, bioallethrin, chlothianidin, cyfluthrin (beta-), xyhalothrin (lambda-), cymiazol, xypermethrin (alpha-, zeta-), xyphenothrin, deltamethrin, demiditraz, dinotefuran, doramectin, eprinomectin, etofenprox, fenvalerat, fipronil, fluazuron, flucythrinat, flumethrin, fluralaner, fluvalinat (tau-), icaridin, imidacloprid, ivermectin, MGK264, milbemyxin oxim, moxidectin, nitenpyram, permethrin, phenothrin, piperonyl butoxide, pyriprol, resmethrin, selamectin, silafluofen, spinetoram, spinosad, tetramethrin, thiacloprid.

Kiểm soát vectơ

Các hợp chất có công thức (I) cũng có thể được sử dụng trong việc kiểm soát vectơ. Trong ngữ cảnh của sáng chế, vectơ là ngành chân khớp, đặc biệt là côn trùng hoặc lớp nhện, có khả năng truyền mầm bệnh, ví dụ, virut, ấu trùng, sinh vật đơn bào và vi khuẩn, từ ổ chứa (thực vật, động vật, người, v.v..) sang vật chủ. Mầm bệnh có thể được truyền theo đường cơ học (ví dụ, đau mắt hột bởi các loại ruồi không đốt) sang vật chủ hoặc qua tiêm đốt (ví dụ, ký sinh trùng sốt rét bởi muỗi) vào vật chủ.

Ví dụ, về các vectơ và bệnh hoặc mầm bệnh mà chúng truyền là:

1) Muỗi

- Anopheles: sốt rét, bệnh giun chỉ;

- Culex: viêm não Nhật Bản, bệnh giun chỉ, các bệnh virut khác, truyền ấu trùng;

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

- Simuliidae: truyền ấu trùng, đặc biệt là Onchocerca volvulus;

2) chấy rận: nhiễm trùng da, sốt phát ban do chấy rận;

3) Bọ chét: bệnh dịch, sốt phát ban địa phương;

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

5) Ve bét: bệnh ghẻ, sốt phát ban do chấy rận, bệnh sốt do rickettsia, bệnh tularaemia, bệnh viêm não Saint Louis, bệnh viêm não do tíc đốt (TBE), sốt xuất huyết Crimean–Congo, bệnh do xoắn khuẩn borrelia;

6) Các loại tíc: bệnh do xoắn khuẩn borellia như Borrelia duttoni, viêm não do tíc đốt, sốt Q (Coxiella burnetii), bệnh babesia (Babesia canis canis).

Các ví dụ, về các vectơ trong ngữ cảnh của sáng chế đó là côn trùng, ví dụ, rệp, ruồi, rầy hoặc bọ trĩ, các vectơ này có thể truyền virut trên thực vật sang thực vật. Các vectơ khác có khả năng truyền virut trên thực vật đó là ve bét ở nhện, chấy rận, bọ cánh cứng và giun tròn.

Ví dụ, khác về các vectơ theo sáng chế bao gồm côn trùng và lớp nhện như muỗi, đặc biệt là giống Aedes, Anopheles, ví dụ, A. gambiae, A. arabiensis, A. funestus, A. dirus (sốt rét) và Culex, chấy rận, bọ chét, ruồi, mạt và tíc, các vectơ này có khả năng truyền mầm bệnh sang động vật và/hoặc người.

Việc kiểm soát vectơ cũng có thể nếu như hợp chất có công thức (I) phá vỡ tính kháng.

Các hợp chất có công thức (I) thích hợp để sử dụng trong phòng ngừa bệnh và/hoặc mầm bệnh được truyền bởi các vectơ. Do đó, phần mô tả cũng mô tả việc sử dụng hợp chất có công thức (I) để kiểm soát vectơ, ví dụ, trong nông nghiệp, trong làm vườn, trong trồng rừng, trong các khu vườn và trong các cơ sở giải trí và cả trong bảo vệ nguyên liệu và các sản phẩm lưu kho.

Bảo vệ các nguyên liệu công nghiệp

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

Các nguyên liệu công nghiệp trong ngữ cảnh này được hiểu có nghĩa là nguyên liệu vô tri vô giác, tốt hơn là chất dẻo, chất dính kết, hồ dính, giấy và các-tông, da, gỗ, sản phẩm gỗ đã xử lý và chế phẩm phủ. Việc sử dụng theo sáng chế để bảo vệ gỗ là đặc biệt được ưu tiên.

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

Theo phương án khác, các hợp chất có công thức (I) là ở dạng chất diệt sinh vật gây hại sẵn sàng để dùng, có nghĩa là, các dạng này có thể được áp dụng lên nguyên liệu đích mà không cần làm biến đổi thêm. Các chất diệt côn trùng hoặc chất diệt nấm thích hợp khác cụ thể là các chất đã nêu ở trên.

Bất ngờ là, cũng đã phát hiện ra rằng, các hợp chất có công thức (I) có thể được sử dụng để bảo vệ các đối tượng tiếp xúc với nước mặn hoặc nước lợ, đặc biệt là thân tàu thủy, màn hình, lưới, tòa nhà, nơi neo giữ tàu và các hệ thống truyền tín hiệu, chống lại sự đóng cáu gỉ. Tương tự, cũng có thể sử dụng hợp chất có công thức (I), ở dạng riêng rẽ hoặc kết hợp với các hoạt chất khác, làm các chất chống cáu gỉ.

Kiểm soát động vật gây hại trong lĩnh vực vệ sinh

Các hợp chất có công thức (I) thích hợp để kiểm soát động vật gây hại trong lĩnh vực vệ sinh. Cụ thể hơn, sáng chế có thể được sử dụng trong lĩnh vực gia dụng, trong lĩnh vực vệ sinh và để bảo vệ các sản phẩm lưu kho, nhất là để kiểm soát côn trùng, lớp nhện và các loại mạt bắt gặp trong các không gian kín như khu vực nhà ở, các tòa nhà trong nhà máy, văn phòng, cabin của phương tiện giao thông. Để kiểm soát động vật gây hại, các hợp chất có công thức (I) được sử dụng riêng rẽ hoặc kết hợp với các hoạt chất khác và/hoặc các chất bổ trợ. Các hợp chất theo sáng chế tốt hơn là được

sử dụng trong các sản phẩm diệt côn trùng gia dụng. Các hợp chất có công thức (I) có hiệu quả chống lại các loài nhạy và kháng và chống lại tất cả các giai đoạn phát triển.

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

Ví dụ, việc ứng dụng được thực hiện ở dạng sản phẩm sol khí, sản phẩm phun không tạo áp lực, ví dụ, bơm và phun bụi, các hệ thống phun mù tự động, máy phun mù, ở dạng bọt xốp, gel, các sản phẩm bốc hơi với viên nén bốc hơi được làm từ xenluloza hoặc chất dẻo, dụng cụ làm bay hơi chất lỏng, dụng cụ làm bay hơi gel và màng, dụng cụ làm bay hơi được dẫn động bằng cánh quạt, các hệ thống làm bay hơi năng lượng tự do hoặc cưỡng bức, các giấy bắt nhậy, túi bắt nhậy và gel bắt nhậy, ở dạng hạt nhỏ hoặc bụi, trong các mồi để phát tán hoặc trong các điểm đặt mồi.

Quy trình điều chế

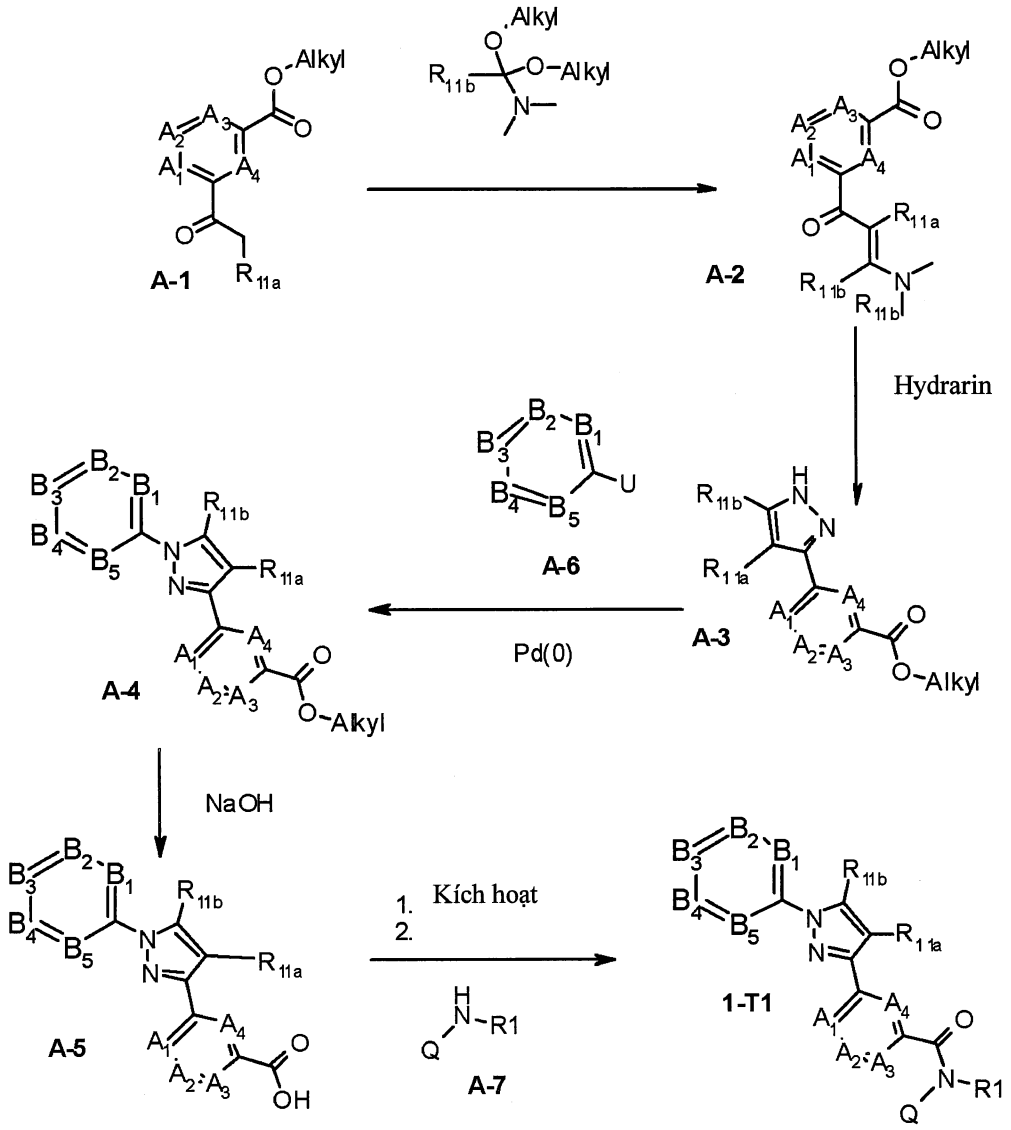
Các hợp chất theo sáng chế có thể được điều chế bằng các phương pháp thông thường đã biết đối với người có hiểu biết trung bình về lĩnh vực này kỹ thuật này.

Các hợp chất có công thức cấu tạo (I-T1) và (I-T2) có thể được điều chế bằng các phương pháp đã được mô tả trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này đối với các hợp chất tương tự:

Quy trình I-T1

Các hợp chất có công thức (I-T1) có thể được điều chế bằng quy trình được xác định trong sơ đồ phản ứng 1.

Sơ đồ phản ứng 1:



Các gốc A_1-A_4, B_1-B_5, alkyl, Q, R^1 và R^{11} mỗi gốc là như được xác định trên đây. Ví dụ, U là brom, iot hoặc triflat. Các hợp chất khởi đầu có công thức (**A-1**) (ví dụ, trong tài liệu WO 2004/099146, p. 75-76) và (**A-7**) (ví dụ, trong tài liệu US 5,739,083 page 10, US 2003/187233A1, p. 6) là đã biết hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết.

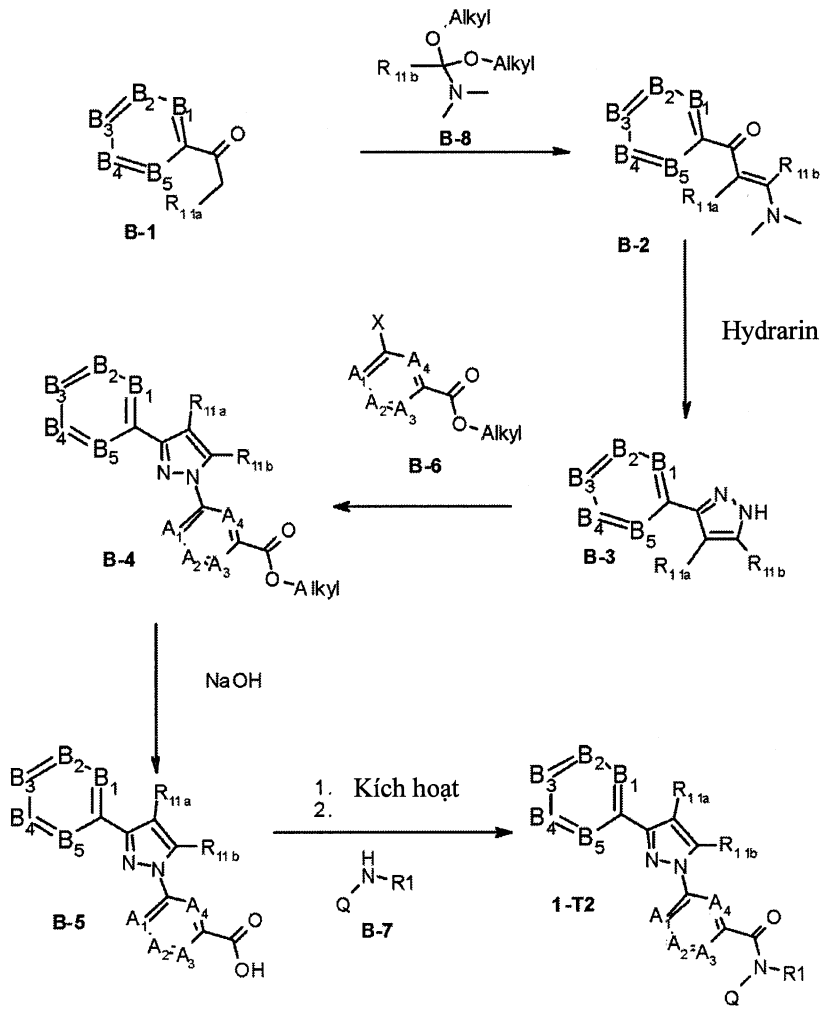
Các hợp chất có công thức chung (**A-2**) có thể được điều chế tương tự theo các phương pháp đã biết trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này đi từ các hợp chất có công thức chung (**A-1**) và các axetal carboxamit (**B-8**) (ví dụ, trong tài liệu WO

2013/009791, p. 50, Example 43; WO 2004/099146, p.75-76). Các hợp chất có công thức chung (**A-3**) có thể được điều chế tương tự theo các phương pháp đã biết trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này đi từ các hợp chất có công thức chung (**A-2**) và hydrazin (ví dụ, trong tài liệu WO 2013/009791, p. 50, Example 43; WO 2004/099146, p. 75-76). Các hợp chất có công thức chung (**A-4**) có thể được điều chế tương tự theo các phương pháp đã biết trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này đi từ các hợp chất có công thức chung (**A-3**) và (**A-6**) (ví dụ, trong tài liệu WO 2013/009791, p. 50, Example 44). Các hợp chất có công thức chung (**A-5**) có thể được điều chế tương tự theo các quy trình đã biết trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này bằng cách thủy phân este từ các hợp chất có công thức chung (**A-4**) (tham khảo, ví dụ, tài liệu WO 2010/051926 hoặc WO 2010/133312). Các hợp chất theo sáng chế có công thức chung (**I-T1**) có thể được điều chế tương tự theo các phương pháp ghép mạch peptit đã biết trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này từ các nguyên liệu khởi đầu (**A-5**) và (**A-7**) (ví dụ, trong tài liệu WO 2010/051926 hoặc WO 2010/133312).

Quy trình I-T2

Các hợp chất có công thức (I-T2) có thể được điều chế bằng quy trình được xác định trong sơ đồ phản ứng 2.

Sơ đồ phản ứng 2:

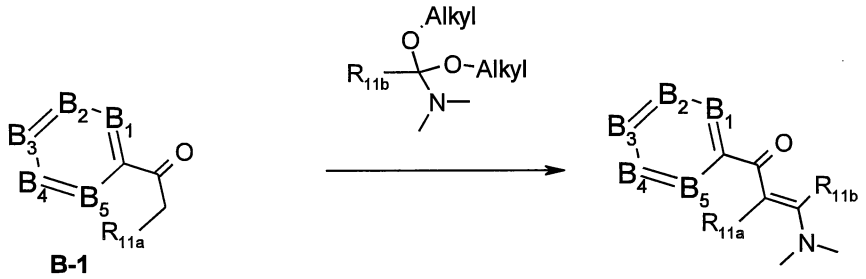


Các gốc từ A_1 đến A_4, B_1 đến B_5, alkyl, Q, R^1 và R^{11} mỗi gốc là như được xác định trên đây. Ví dụ, X là Cl, Br, I hoặc axit boric hoặc gốc este của boric. Các hợp chất khởi đầu có công thức (**B-1**) (ví dụ, trong tài liệu Filler, Robert; Kong, Zhengrong; Zhang, Zhaoxu; Sinha, Arun Kr.; Li, Xiaofang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

Các hợp chất có công thức chung (**B-2**) có thể được điều chế tương tự theo các phương pháp đã biết trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này đi từ các hợp chất có công thức chung (**B-1**) và các axetal carboxamit (**B-8**) (ví dụ, trong tài liệu WO 2006/044505, Compound 60, Part A; WO 2012/4604, Intermediate 2). Các hợp chất có

công thức chung (**B-3**) có thể được điều chế tương tự theo các phương pháp đã biết trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này đi từ các hợp chất có công thức chung (**B-2**) và hydrazin (ví dụ, trong tài liệu WO 2013/009791, p. 50, Example 43; WO 2004/099146, p. 75-76). Các hợp chất có công thức chung (**B-4**) có thể được điều chế tương tự theo các phương pháp đã biết trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này đi từ các hợp chất có công thức chung (**B-3**) và (**B-6**) (ví dụ, trong tài liệu WO 2013/009791, p. 50, Example 44, X = Br). Các hợp chất có công thức chung (**B-5**) có thể được điều chế tương tự theo các quy trình đã biết trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này bằng cách thủy phân este từ các hợp chất có công thức chung (**B-4**) (ví dụ, trong tài liệu WO 2010/051926 hoặc WO 2010/133312). Các hợp chất theo sáng chế có công thức chung (**I-T1**) có thể được điều chế tương tự theo các phương pháp ghép mạch peptit đã biết trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này từ các nguyên liệu khởi đầu (**B-5**) và (**B-7**) (ví dụ, trong tài liệu WO 2010/051926 hoặc WO 2010/133312).

Giai đoạn 1 Dialkylaminoalkenyl hóa

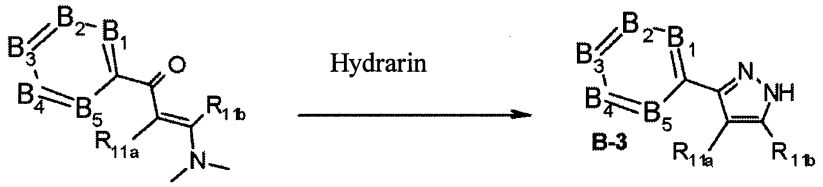


(B-1) **(B-8)** **(B-2)**

Các hợp chất có công thức chung (**B-2**) có thể được điều chế tương tự theo các phương pháp đã biết trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này từ các nguyên liệu khởi đầu có công thức (**B-1**) và (**B-8**). Các gốc B^1-B^5, alkyl và R^{11} mỗi gốc là như được xác định trên đây. Các hợp chất khởi đầu có công thức (**B-1**) (ví dụ, trong tài liệu Filler, Robert; Kong, Zhengrong; Zhang, Zhaoxu; Sinha, Arun Kr.; Li, Xiaofang Journal of Flo Chemistry, 80 (1996) p. 71 – 76; US2003/187233, p. 14, Example 21 [0294], US5739083, Example 6) là đã biết hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết. Phản ứng này được thực hiện bằng cách cho các hợp chất (**B-1**) phản ứng

với các hợp chất (**B-8**) dưới các điều kiện đã biết trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này đối với các phản ứng tương tự (ví dụ, trong tài liệu EP1204323, p. 25, Example 13).

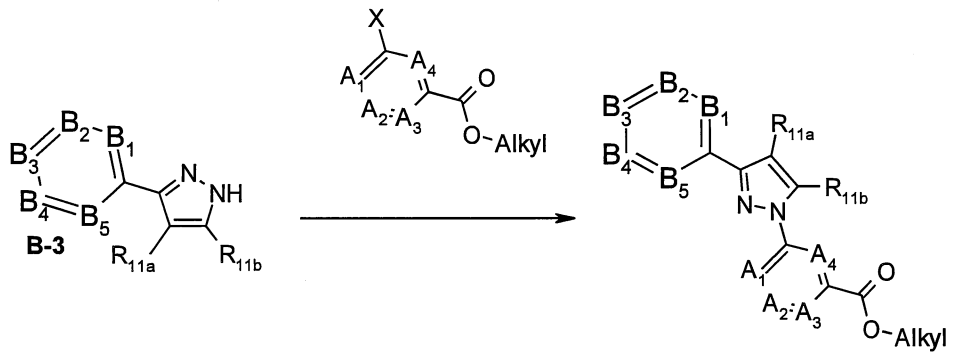
Giai đoạn 2 Đóng vòng pyrazol



(B-2) **(B-3)**

Các hợp chất có công thức chung (**B-2**) có thể được điều chế tương tự theo các phương pháp đã biết trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này từ các nguyên liệu khởi đầu có công thức (**B-2**) và hydrazin. Các gốc B^1-B^5 và R^{11} mỗi gốc là như được xác định trên đây. Việc điều chế các hợp chất khởi đầu có công thức (**B-2**) được mô tả trên đây. Phản ứng này được thực hiện bằng cách cho các hợp chất (**B-2**) phản ứng với hydrazin dưới các điều kiện đã biết trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này đối với các phản ứng tương tự (EP1382603, Example 3, p. 43)

Giai đoạn 3 Kết hợp aryl

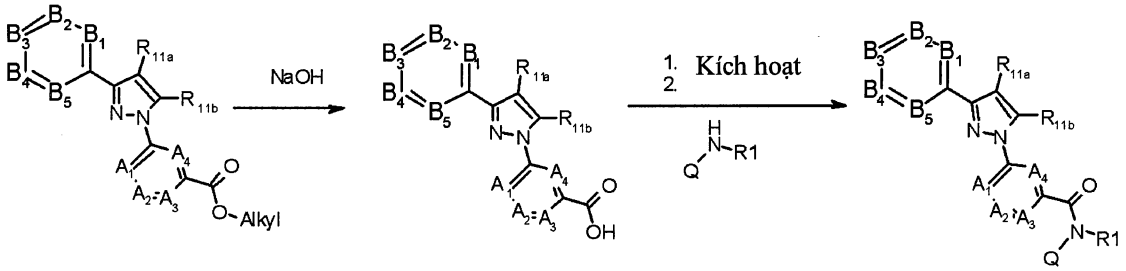


(B-3) **(B-6)** **(B-4)**

Các hợp chất có công thức chung (**B-4**) có thể được điều chế tương tự theo các phương pháp đã biết trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này từ các nguyên liệu khởi đầu có công thức (**B-3**) và (**B-6**). Các gốc A^1-A^4, B^1-B^5, alkyl, R^1 và R^{11} mỗi gốc

là như được xác định trên đây. X là axit boric hoặc gốc este của boric. Việc điều chế các hợp chất khởi đầu có công thức (**B-3**) được mô tả trên đây. Các hợp chất có công thức chung (**B-6**) là sẵn có trên thị trường hoặc có thể được điều chế bằng các quy trình mà người có hiểu biết trung bình về lĩnh vực này đã biết. Phản ứng này được thực hiện dưới các điều kiện đã biết trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này đối với các phản ứng tương tự (WO2009140342, p. 96).

Các giai đoạn 4, 5 Quá trình thủy phân, amit hóa



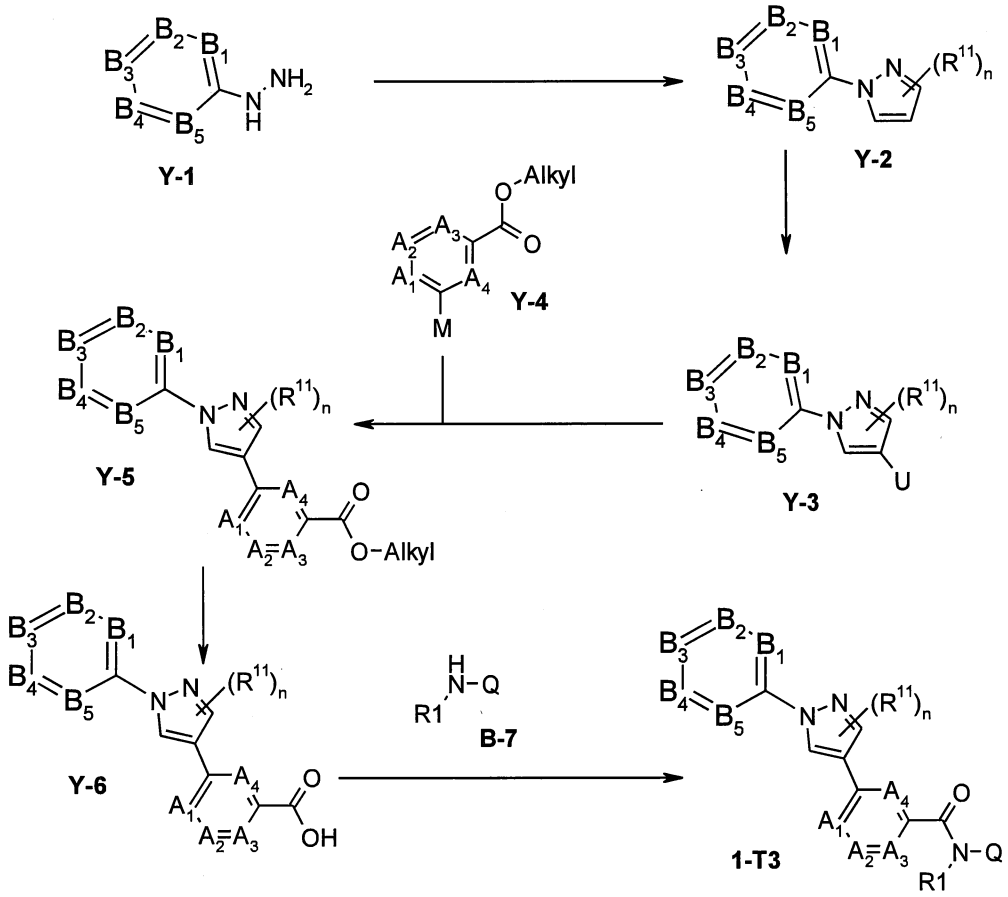
(B4) **(B5)** **(B7)** **(I-T2)**

Các hợp chất theo sáng chế có công thức chung (**I-T2**) có thể được điều chế tương tự theo các phương pháp ghép mạch peptit đã biết trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này từ các nguyên liệu khởi đầu (**B5**) và (**B7**) [WO2010-051926; WO2010-133312]. Các hợp chất có công thức chung (**B5**) có thể được điều chế tương tự theo các quy trình đã biết trong các tài liệu đã biết trong lĩnh vực kỹ thuật này bằng cách thủy phân este từ các hợp chất có công thức chung (**B4**) [WO2010-051926; WO2010-133312]. Các gốc A^1-A^4, B^1-B^5, alkyl, Q, R^1 và R^{11} mỗi gốc là như được xác định trên đây. Việc điều chế các hợp chất có công thức (**B-7**) được mô tả trên đây.

Quy trình I-T3

Các hợp chất có công thức (I-T3) có thể được điều chế bằng quy trình được xác định trong sơ đồ phản ứng 3a.

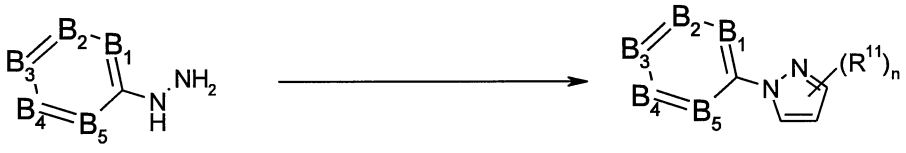
Sơ đồ phản ứng 3a



Các gốc từ A_1 đến A_4, B_1 đến B_5, alkyl, Q, R^1, n và R^{11} mỗi gốc là như được xác định trên đây. Ví dụ, M là axit boric, este của axit boric hoặc trifloboronat. Ví dụ, U là brom, iot hoặc triflat. Ví dụ, X là Cl, Br, I.

Giai đoạn 1 Pyrazol

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



Y-1 Y-2

Các hợp chất theo sáng chế có công thức chung (Y-2) có thể được điều chế tương tự theo các phương pháp đã biết trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này từ

các nguyên liệu khởi đầu có công thức (Y-1). Các gốc B_1-B_5 và R^{11} mỗi gốc là như được xác định trên đây. Các hợp chất khởi đầu có công thức (Y1) là đã biết hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết. Các ví dụ bao gồm [2,6-diclo-4-(triflometyl)phenyl]hydrazin, [3-clo-5-(triflometyl)-2-pyridyl]hydrazin, [2,6-diclo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]hydrazin, [2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]hydrazin, [2-metyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometyl)phenyl]hydrazin hoặc [2-clo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometyl)phenyl]hydrazin. Chúng có thể được điều chế, ví dụ, bằng các phương pháp được mô tả trong tài liệu US 2003/187233, p. 13; Haga, Takahiro et al., Heterocycles, 22 (1984), p. 117-124.

Giai đoạn 2 Iodopyrazol

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



Y-2 Y-3

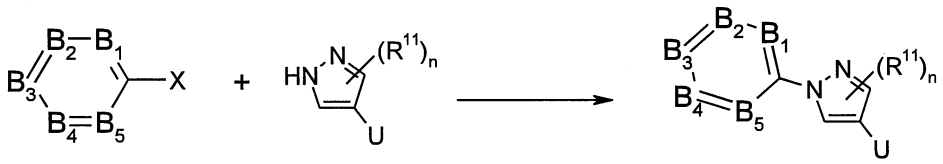
Các gốc B_1-B_5, n và R^{11} mỗi gốc là như được xác định trên đây. Ví dụ, U là brom hoặc iot.

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

Các hợp chất theo sáng chế có công thức chung (Y-3) được điều chế bằng cách cho các pyrazol có công thức (Y-2) phản ứng với các tác nhân halogen hóa. Các gốc từ B^1 đến B^5 và R^{11} mỗi gốc là như được xác định trên đây. Người có hiểu biết trung bình về lĩnh vực này đã biết các hợp chất halogen hóa thích hợp, ví dụ, clo, brom, iot N-closucxinimit, N-bromosucxinimit, N-iodosucxinimit, 1,3-diclo-5,5-dimetylhydantoin, 1,3-dibromo-5,5-dimetylhydantoin, natri hypochlorit và iot monoclorua. Ưu tiên là sử dụng brom, iot và iodosucxinimit. Có thể thuận lợi nếu thực hiện phản ứng với sự có mặt của tác nhân oxy hóa, ví dụ, hydro peroxit. Phản ứng được tiến hành trong các điều kiện đã biết từ các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này, ví dụ, Guo Li et al., Tetrahedron Letters 48 (2007), 4595-4599; Mary M. Kim et al., Tetrahedron Letters 49 (2008), 4026-4028.

Kết hợp thay thế với pyrazol

Theo cách khác, các hợp chất có công thức Y-3 cũng có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết từ các tài lệu trong lĩnh vực kỹ thuật này thông qua việc kết hợp trực tiếp của các iodopyrazol với các aryl halogenua (ví dụ, Sammelson, Robert E. et al., J. of Organic Chemistry, 68 (2003), 8075-8079).



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

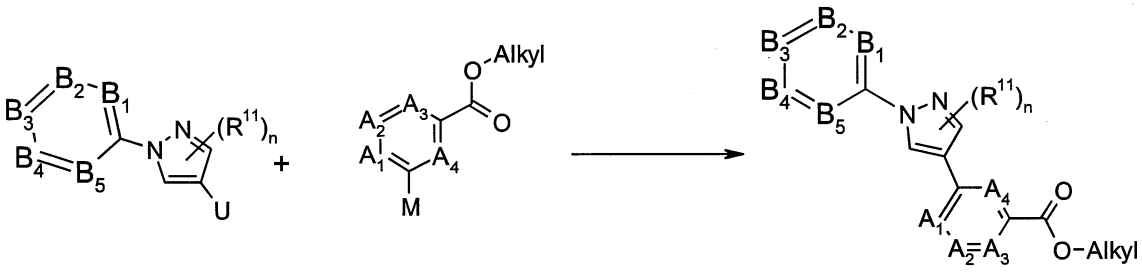
Các gốc từ B_1 đến B_5, n và R^{11} mỗi gốc là như được xác định trên đây. Ví dụ, X là halogen. Ví dụ, U là brom, iot hoặc triflat.

Các hợp chất khởi đầu có công thức (Y-8) là đã biết hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết. Các ví dụ bao gồm 2-bromo-1,3-diclo-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]benzen, 2-bromo-1,3-dimetyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]benzen, 2-bromo-1-etyl-3-metyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]benzen, 2-bromo-1-clo-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-3-

(triflometyl)benzen, 2-bromo-1-metyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-3-(triflometyl)benzen, 2-bromo-1-clo-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-3-(triflometoxy)benzen, 2-bromo-1-metyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-3-(triflometoxy)benzen. Chúng có thể được điều chế, ví dụ, bằng các phương pháp đã biết trong tài liệu EP1253128, pages 8-10.

Giai đoạn 3 Kết hợp axit boric

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

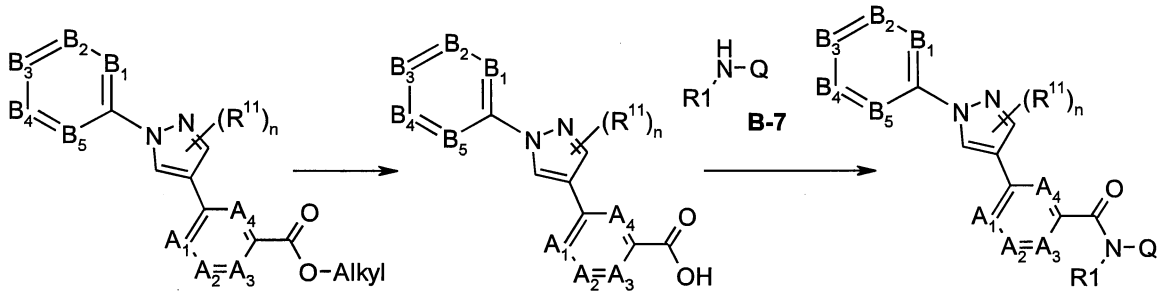


(Y-3) (Y-4) (Y-5)

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

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

Các giai đoạn 4, 5 Quá trình thủy phân, amit hóa



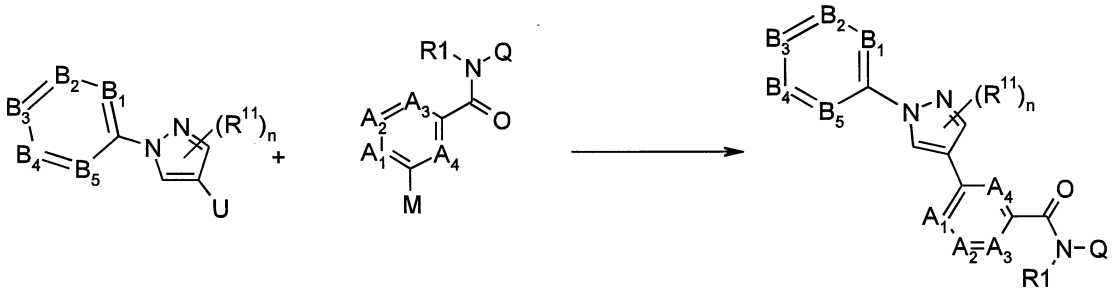
(Y-5) (Y-6) (I-T3)

Các hợp chất theo sáng chế có công thức chung **(I-T3)** có thể được điều chế tương tự theo các phương pháp ghép mạch peptit đã biết trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này từ các nguyên liệu khởi đầu **(Y-6)** và **(Y-7)** (ví dụ, WO 2010/051926 hoặc WO 2010/133312). Các hợp chất có công thức chung **(Y-6)** có thể được điều chế tương tự theo các quy trình đã biết trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này bằng cách thủy phân este từ các hợp chất có công thức chung **(Y-5)** (ví dụ, WO 2010/051926 hoặc WO 2010/133312). Các gốc từ A_1 đến A_4, B_1 đến B_5, alkyl, Q, R^1 và R^{11} mỗi gốc là như được xác định trên đây.

Giai đoạn 3 phương án khác: Kết hợp với các amit

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

Sơ đồ phản ứng 3b



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

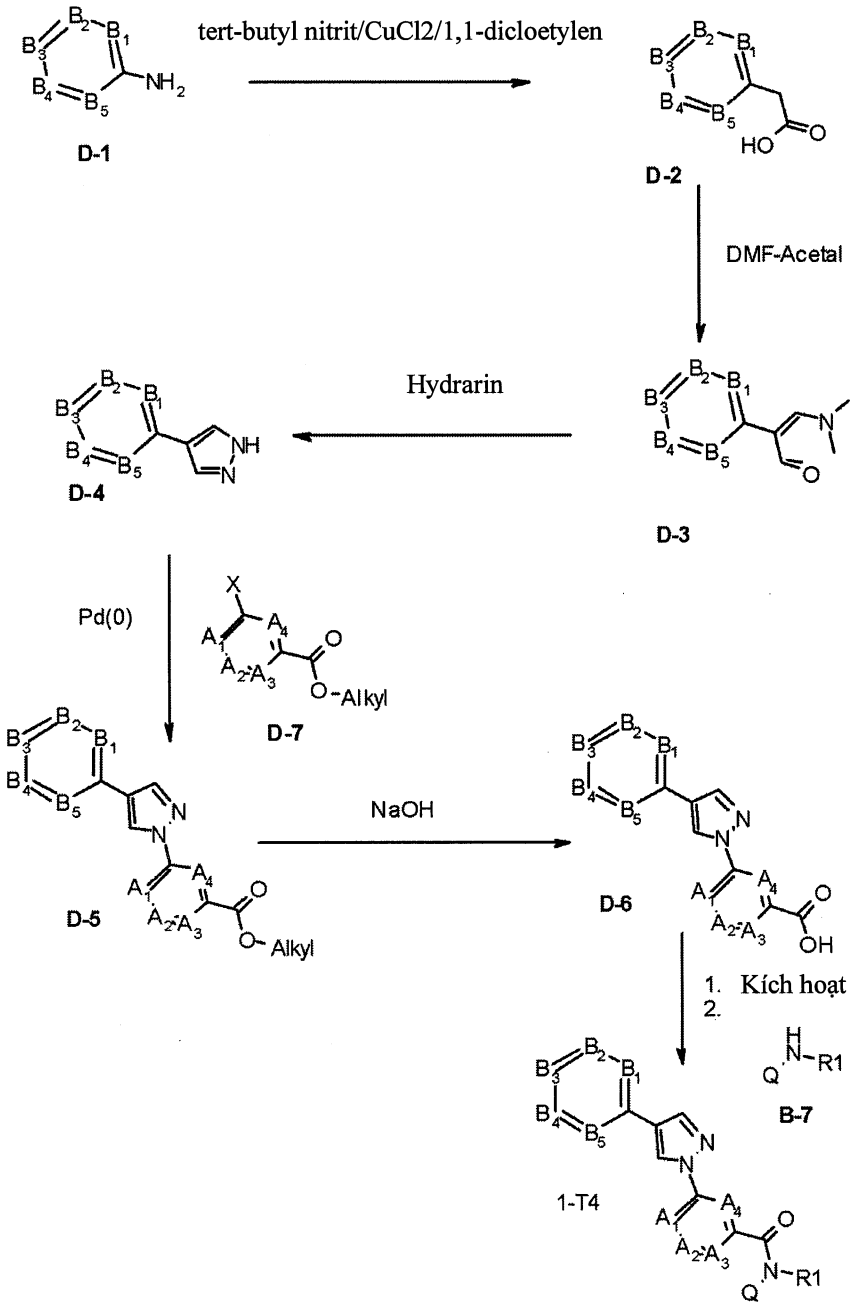
Các gốc từ A_1 đến A_4, B_1 đến B_5, alkyl, Q, R^1, n và R^{11} mỗi gốc là như được xác định trên đây. U là brom, iot hoặc triflat khi M là axit boric, este của axit boric hoặc trifloboronat. U là axit boric, este của axit boric hoặc trifloboronat khi M là brom, iot hoặc triflat.

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

Quy trình I-T4

Các hợp chất có công thức (**I-T4**) có thể được điều chế bằng quy trình được xác định trong sơ đồ phản ứng 4.

Sơ đồ phản ứng 4



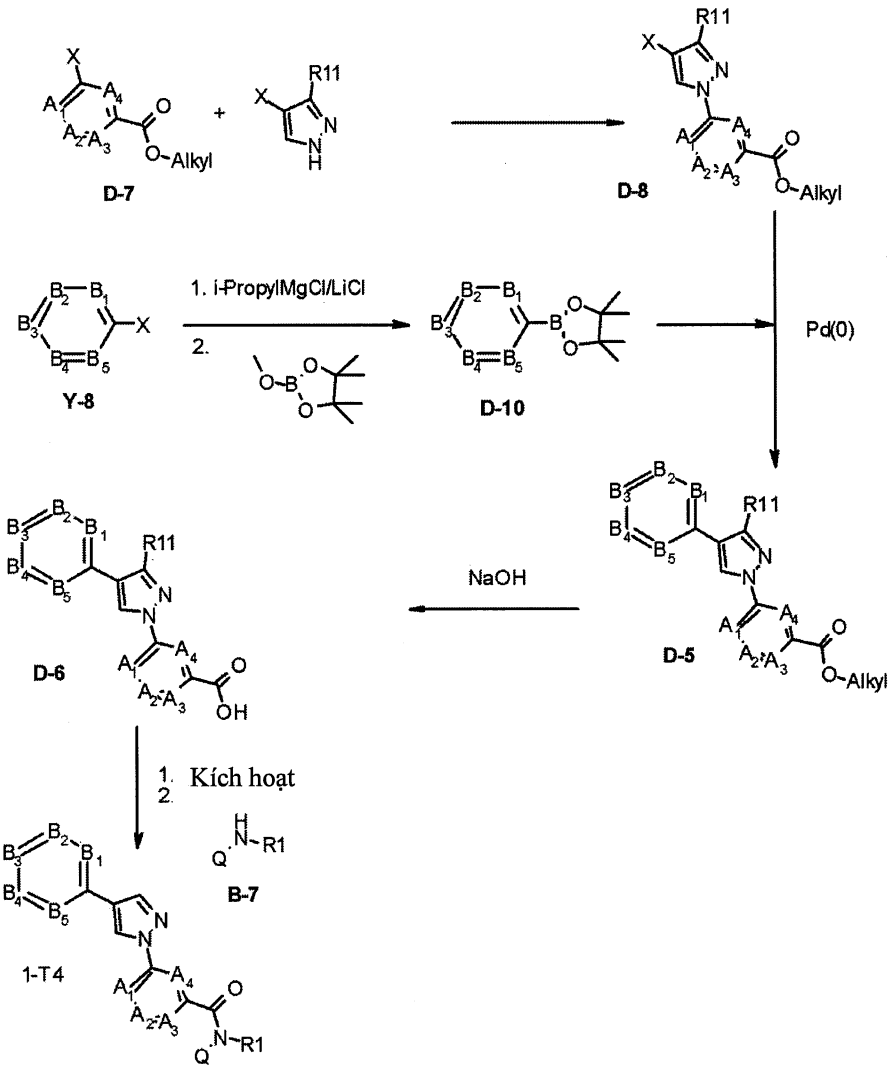
Các gốc từ A_1 đến A_4, B_1 đến B_5, alkyl, Q và R^1 mỗi gốc là như được xác định trên đây. X là Cl, Br, I. Các hợp chất khởi đầu có công thức (D-1) (ví dụ, EP2319830, p. 330) và (D-7) là đã biết hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết.

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

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

Các hợp chất có công thức (I-T4) có thể được điều chế theo cách khác bằng quy trình được xác định trong sơ đồ phản ứng 5.

Sơ đồ phản ứng 5:

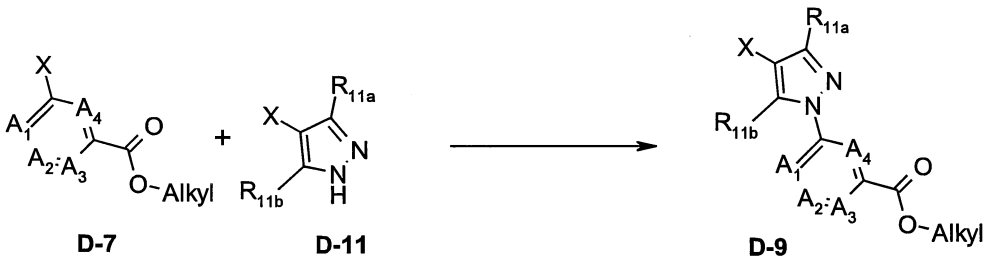


Các gốc từ A_1 đến A_4, B_1 đến B_5, alkyl, Q, R^1 và R^{11} mỗi gốc là như được xác định ở đây. X là Cl, Br, I. Các hợp chất khởi đầu có công thức (**D-7**), (**D-9**) và (**D-11**) (ví dụ, EP1253128, p. 8-10) là đã biết, và một số hợp chất là sẵn có trên thị trường hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết.

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

Giai đoạn 1 Kết hợp pyrazol

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



D-7 **D-11** **D-9**

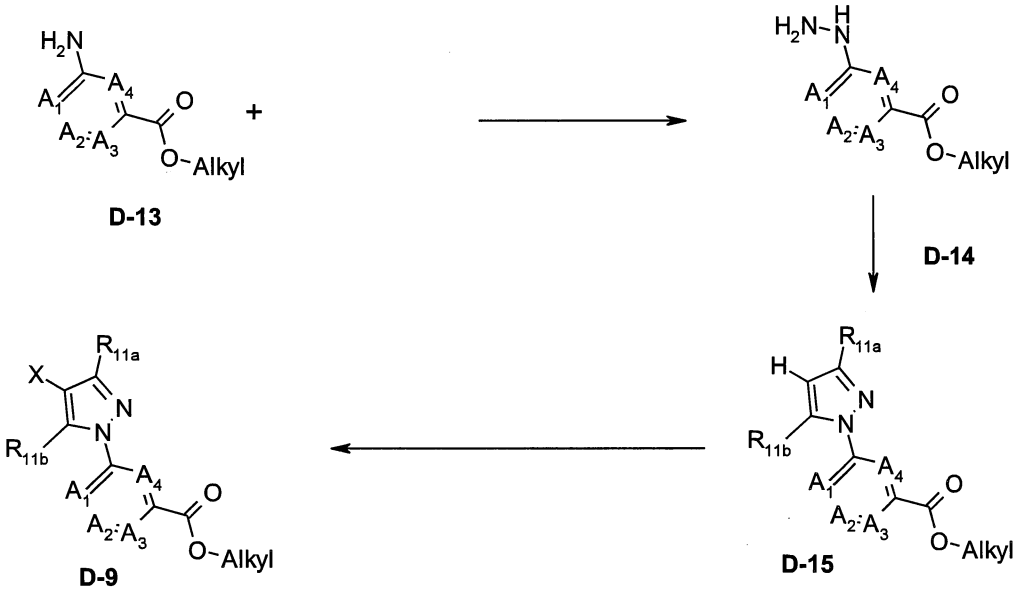
Các hợp chất có công thức chung (**D-9**) có thể được điều chế tương tự theo các phương pháp đã biết trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này từ các nguyên liệu khởi đầu có công thức (**D-7**) và (**D-11**). Các gốc từ A^1-A^4, alkyl và X mỗi gốc là như được xác định trên đây. Các hợp chất khởi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

Các hợp chất chưa biết cho đến nay (**D-9**) có thể được điều chế tương tự với các quy trình đã biết để kết hợp các pyrazol vào các hệ thơm (ví dụ, WO2013009791, p. 50, Example 44).

Điều chế pyrazol theo cách khác

Theo cách khác, các hợp chất theo sáng chế có công thức chung (**D9**) có thể thu được bằng con đường được xác định trong sơ đồ phản ứng 6.

Sơ đồ phản ứng 6:



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

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

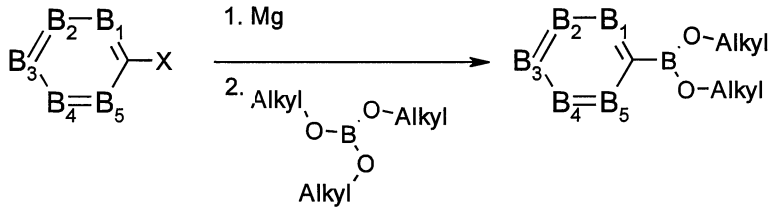
Các hợp chất theo sáng chế có công thức chung (**D-15**) có thể được điều chế tương tự theo các phương pháp đã biết trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này từ các nguyên liệu khởi đầu có công thức (**D-14**). Các gốc từ A_1 đến A_4, alkyl và R_{11} mỗi gốc là như được xác định trên đây. Các hợp chất khởi đầu có công thức (**D-14**) là đã biết hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết. Các ví dụ bao gồm metyl 2-clo-5-hydrazinobenzoat, etyl 2-clo-5-hydrazinobenzoat, metyl 2-clo-3-flo-5-hydrazinobenzoat, etyl 2-clo-5-hydrazinonicotinat. Phản ứng này có thể được thực hiện tương tự với các điều kiện cho phản ứng đóng vòng pyrazol đã biết trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này (ví dụ, Sachweh, Volker; Langhals, Heinz Chemische Berichte, 119 (1986) 1627-1639).

Các hợp chất theo sáng chế có công thức chung (**D9**) được điều chế bằng cách cho các pyrazol có công thức (**D-15**) phản ứng với các tác nhân halogen hóa. Các gốc từ A_1 đến A_4, alkyl và R_{11} mỗi gốc là như được xác định trên đây. Các hợp chất có công thức (**D15**) được ưu tiên bao gồm metyl 2-clo-5-(pyrazol-1-yl)benzoat, etyl 2-clo-5-(pyrazol-1-yl)benzoat, metyl 2-clo-3-flo-5-(pyrazol-1-yl)benzoat, etyl 2-clo-5-(pyrazol-1-yl)-nicotinat.

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

Giai đoạn 2 este của axit boric

Giai đoạn 2: Điều chế các hợp chất khởi đầu có công thức (**D12**)



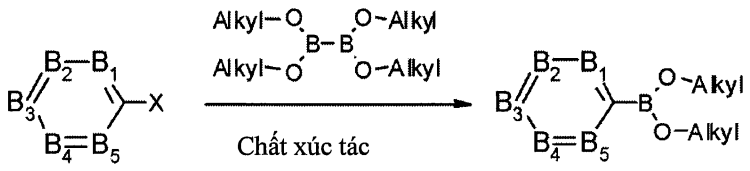
(Y-8) **(D-16)** **(D-12)**

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

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

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

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

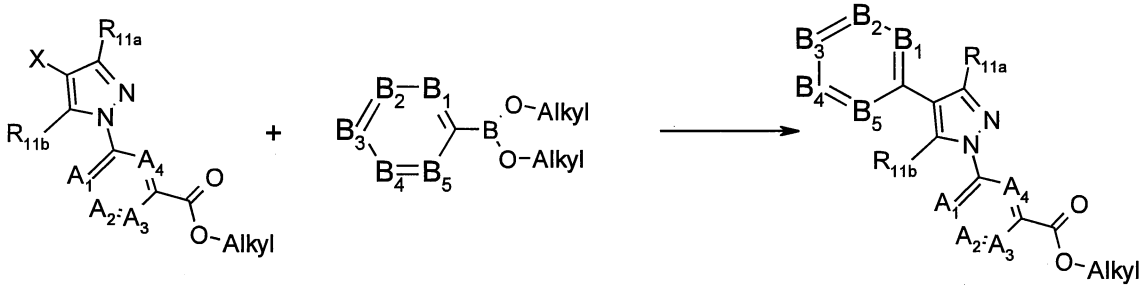


(Y-8) **(D-17)** **(D-12)**

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

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

Giai đoạn 3 Kết hợp aryl



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

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

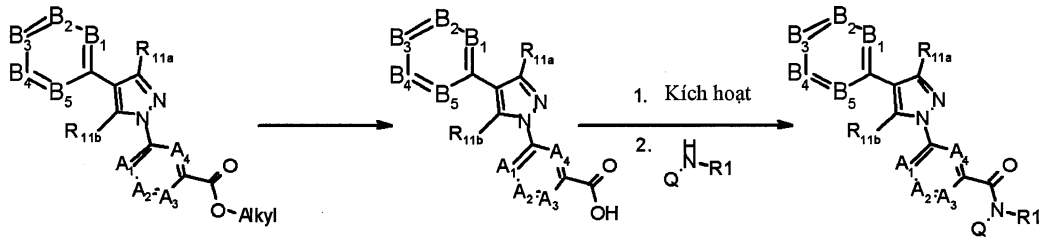
Các gốc A^1-A^4, B^1-B^5, R^{11}, alkyl và X mỗi gốc là như được xác định trên đây.

Việc điều chế các hợp chất có công thức (**D-9**) và (**D-12**) được mô tả trên đây.

Các ví dụ, về các hợp chất có công thức (**D-9**) bao gồm: metyl 5-(4-bromopyrazol-1-yl)-2-clobenzoat, metyl 5-(4-iodopyrazol-1-yl)-2-clobenzoat, etyl 5-(4-bromo-3-metylpyrazol-1-yl)-2-clobenzoat, metyl 5-(4-bromo-3-(triflometyl)pyrazol-1-yl)-2-clobenzoat, metyl 5-(4-bromo-3-(triflometyl)pyrazol-1-yl)-2-clobenzoat, metyl 5-(4-bromo-3,5-dimetylpyrazol-1-yl)-2-clobenzoat và etyl 5-(4-bromo-3-metylpyrazol-1-yl)-2-clonicotinat.

Phản ứng được thực hiện trong các điều kiện được mô tả trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật, ví dụ, WO 2005040110 hoặc WO 2009089508.

Các giai đoạn 4, 5 Quá trình thủy phân, amit hóa



(D-5) **(D-6)** **(D-8)** **(I-T4)**

Các hợp chất theo sáng chế có công thức chung (**I-T4**) có thể được điều chế tương tự theo các phương pháp ghép mạch peptit đã biết trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này từ các nguyên liệu khởi đầu (**D-6**) và (**D-8**) [WO2010051926; WO2010133312]. Các hợp chất có công thức chung (**D-6**) có thể được điều chế tương tự theo các quy trình đã biết trong các tài liệu đã biết trong lĩnh vực kỹ thuật này bằng cách thủy phân este từ các hợp chất có công thức chung (**D-5**) [WO2010-051926;

WO2010133312]. Các gốc A_1-A_4, B_1-B_5, alkyl, Q, R^1 và R^{11} mỗi gốc là như được xác định trên đây. Việc điều chế các hợp chất có công thức (**D5**) được mô tả trên đây.

(I-T5): Các hợp chất có công thức (I-T5) có thể được điều chế, ví dụ, tương tự với quy trình được mô tả trong các tài liệu Friedrich, L.E. et al. Journal of Organic Chemistry, 43 (1978), 34-38; hoặc Huettel, R. et al. Chemische Berichte, 93 (1960), p. 1425-1432; hoặc Sato, T et al., Bulletin of the Chemical Society of Japan, 41 (1968), p. 3017-3018.

(I-T8): Các hợp chất có công thức (I-T8) có thể được điều chế, ví dụ, tương tự với quy trình được mô tả trong các tài liệu EP 1 405 636, Example 5; hoặc EP 2 301 538, p. 162; hoặc Schmidt, Bernd et al., European Journal of Organic Chemistry, (2011), p. 4814-4822.

(I-T9): Các hợp chất có công thức (I-T9) có thể được điều chế, ví dụ, tương tự với quy trình được mô tả trong các tài liệu Ma, Shengming et al., Chemistry-A European Journal, 9 (2003), p. 2447-2456.

(I-T10): Các hợp chất có công thức (I-T10) có thể được điều chế, ví dụ, tương tự với quy trình được mô tả trong các tài liệu EP 2 301 538, p. 162.

(I-T11): Các hợp chất có công thức (I-T11) có thể được điều chế, ví dụ, tương tự với quy trình được mô tả trong các tài liệu EP 2 301 538, p. 165.

(I-T12): Các hợp chất có công thức (I-T12) có thể được điều chế, ví dụ, tương tự với quy trình được mô tả trong các tài liệu EP 2 301 538, p. 164.

(I-T13): Các hợp chất có công thức (I-T13) có thể được điều chế, ví dụ, tương tự với quy trình được mô tả trong các tài liệu EP 2 301 538, p. 164.

(I-T14): Các hợp chất có công thức (I-T14) có thể được điều chế, ví dụ, tương tự với quy trình được mô tả trong các tài liệu Hibi, Shigeki et al., Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters, 10 (2000), p. 623–626 hoặc Wang, Xiang et al. Journal of Organic Chemistry, 72 (2007), 1476-1479; EP1405636, page 31.

(I-T15): Các hợp chất có công thức (I-T15) có thể được điều chế, ví dụ, tương tự với quy trình được mô tả trong các tài liệu Chattopadhyay, Buddhadeb et al., Organic Letters, 13 (2011), p. 3746-3749.

(I-T16): Các hợp chất có công thức (I-T16) có thể được điều chế, ví dụ, tương tự với quy trình được mô tả trong các tài liệu Campi, Eva M. et al. Tetrahedron Letters, 32 (1991), p. 1093-1094; hoặc Thompson, Benjamin B. et al., Organic Letters, 13 (2011), p. 3289-3291; hoặc Kloetzel et al. Journal of the American Chemical Society, 79 (1957), p. 4222; hoặc Chi, Yonggui Robin et al., Journal of the American Chemical Society, 135 (2013), p. 8113-8116.

(I-T18): Các hợp chất có công thức (I-T18) có thể được điều chế, ví dụ, tương tự với quy trình được mô tả trong các tài liệu EP 2 311 455, p. 150; hoặc Balaban, A.T. et al. Tetrahedron, 19 (1963), p. 2199-2207.

(I-T19): Các hợp chất có công thức (I-T19) có thể được điều chế, ví dụ, tương tự với quy trình được mô tả trong các tài liệu WO 2004/14366, p. 108.

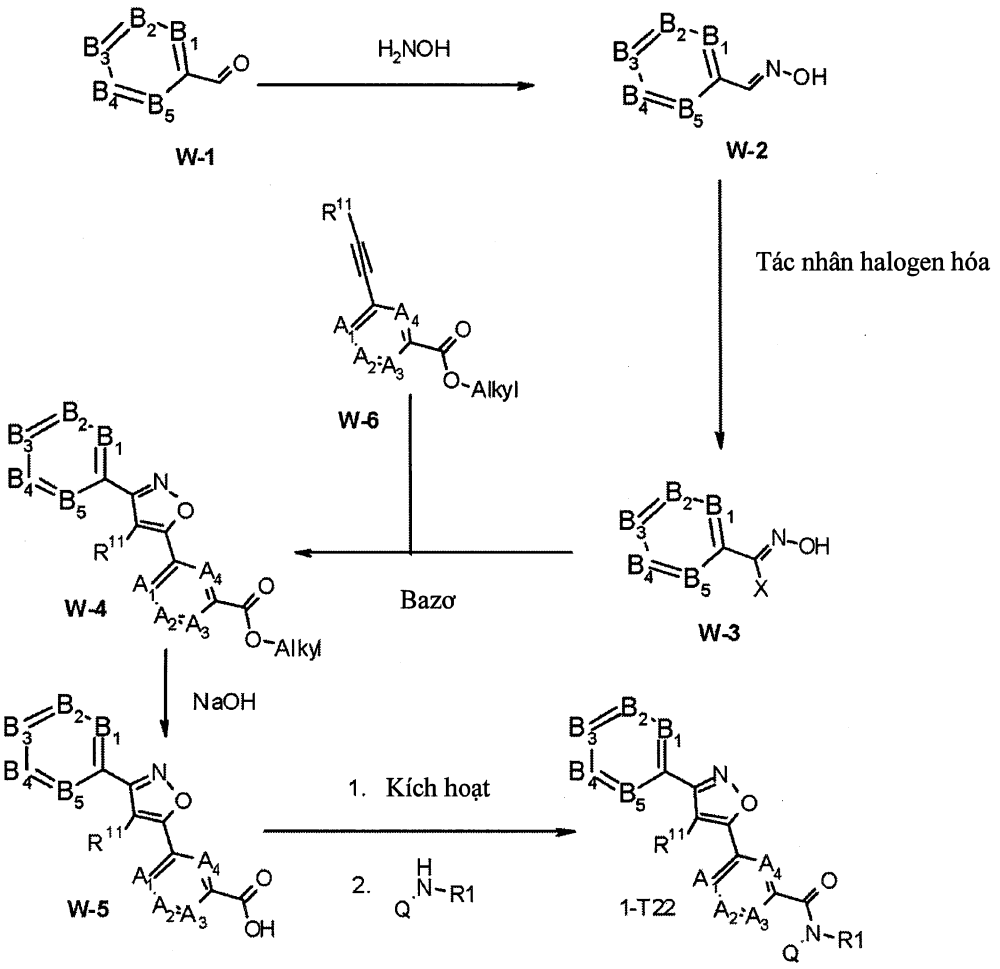
(I-T20): Các hợp chất có công thức (I-T20) có thể được điều chế, ví dụ, tương tự với quy trình được mô tả trong các tài liệu Araki, Hiroshi; Katoh, Tadashi; Inoue, Munenori; Synlett, (2006), p. 555-558; US 6,545,009, p. 27, Example 1.

(I-T21): Các hợp chất có công thức (I-T21) có thể được điều chế, ví dụ, tương tự với quy trình được mô tả trong các tài liệu WO 2004/72050, p. 13; hoặc US 6,545,009, p. 27.

Quy trình I-T22

Các hợp chất có công thức **(I-T22)** có thể được điều chế bằng quy trình được xác định trong sơ đồ 7.

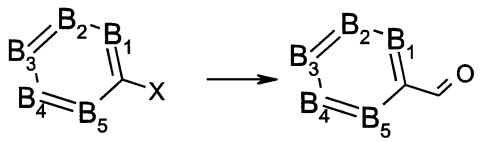
Sơ đồ phản ứng 7:



Các gốc A_1-A_4, B_1-B_5, alkyl, Q, R^1 và R^{11} mỗi gốc là như được xác định trên đây. X là Cl, Br, I. Các hợp chất khởi đầu có công thức (W-1) và (W-6) là đã biết (W1 ví dụ, US 2011/53904 p. 19, W6 ví dụ, WO 2012/175474, p. 117-118) hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết. Các phản ứng này được thực hiện theo cách tương tự với các diều kiện được xác định cho việc điều chế các hợp chất (**I-T23**).

Giai đoạn 1 Aldehyt

Giai đoạn 1 của quy trình điều chế các hợp chất theo sáng chế (**I-T22**):



(W1) **(W2)**

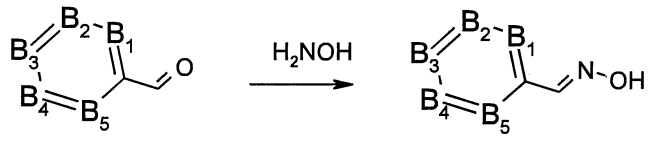
Các hợp chất theo sáng chế có công thức chung (**W2**) có thể được điều chế tương tự theo các phương pháp đã biết trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này (US5739083, Example 2; WO2011/23667, p. 34) từ các nguyên liệu khởi đầu có công thức (**W1**).

Các gốc từ B^1-B^5 và X mỗi gốc là như được xác định trên đây. Ví dụ, X là clo, brom hoặc iot.

Các hợp chất khởi đầu có công thức (**B1**) là đã biết hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết. Các ví dụ bao gồm 2-bromo-1,3-diclo-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]benzen, 2-bromo-1,3-dimetyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]benzen, 2-bromo-1-etyl-3-metyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]benzen, 2-bromo-1-clo-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-3-(triflometyl)benzen, 2-bromo-1-metyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-3-(triflometyl)benzen, 2-bromo-1-clo-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-3-(triflometoxy)benzen, 2-bromo-1-metyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-3-(triflometoxy)benzen, 1,3-dimetyl-2-iodo-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]benzen, 2-iodo-1-metyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-3-(triflometyl)benzen. Chúng có thể được điều chế, ví dụ, bằng các phương pháp đã biết trong tài liệu EP1253128, pages 8-10.

Giai đoạn 2 Oxim

Giai đoạn 2 của quy trình điều chế các hợp chất theo sáng chế (**1-T22**):



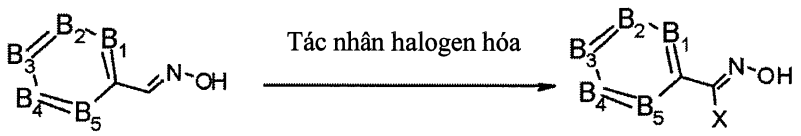
(W2) **(W3)**

Các hợp chất theo sáng chế có công thức chung (**W3**) có thể được điều chế tương tự theo các phương pháp đã biết trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này từ các nguyên liệu khởi đầu có công thức (**W2**). Các gốc từ B_1-B_5 mỗi gốc là như được xác định trên đây. Việc điều chế các hợp chất khởi đầu có công thức (**W2**) được mô tả trên đây. Các ví dụ bao gồm 2,6-diclo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]benzaldehyt, 2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]benzaldehyt, 2-etyl-6-metyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]benzaldehyt, 2-clo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometyl)benzaldehyt, 2-metyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometyl)benzaldehyt, 2-clo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometoxy)benzaldehyt, 2-metyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometoxy)benzaldehyt. Việc điều chế các hợp chất này được mô tả trên đây.

Các hợp chất có công thức cấu tạo (**W3**) là mới. Các hợp chất chưa biết cho đến nay (**W3**) có thể được điều chế theo cách tương tự với các quy trình đã biết để điều chế các oxim từ các aldehyt (H. Metzger in Houben-Weyl, volume X/4, page 55 ff., Georg Thieme Verlag Stuttgart 1968). Các hợp chất có công thức cấu tạo (**W3**) có thể ở dạng các chất đồng phân lập thể tinh khiết và cũng có thể ở dạng các hỗn hợp của các chất đồng phân lập thể này.

Giai đoạn 3 Hydroxamyl clorua

Giai đoạn 3 của quy trình điều chế các hợp chất theo sáng chế (**1-T22**):



(W3) **(W4)**

Các hợp chất theo sáng chế có công thức chung (**W4**) được điều chế bằng cách cho các oxim có công thức (**W3**) phản ứng với các tác nhân halogen hóa.

Các gốc từ B1-B5 mỗi gốc là như được xác định trên đây. X là clo, brom hoặc iot.

Các hợp chất có công thức (**W4**) điển hình là, ví dụ, 2,6-diclo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 2-etyl-6-metyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 2-clo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometyl)-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 2-metyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometyl)-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 2-clo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometoxy)-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 2-metyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometoxy)-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 2-metyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometyl)-N-hydroxybenzimidoyl bromit.

Người có hiểu biết trung bình về lĩnh vực này đã biết các hợp chất halogen hóa thích hợp, ví dụ, clo, brom, iot, N-closucxinimit, N-bromosucxinimit, N-iodosucxinimit, 1,3-diclo-5,5-dimetylhydantoin, 1,3-dibromo-5,5-dimetylhydantoin, benzyltrimetylammonium tetracloiodat và natri hypochlorit. Ưu tiên là sử dụng các chất phản ứng clo hóa.

Phản ứng có thể được thực hiện bằng cách sử dụng các dung môi thích hợp.

Các chất pha loãng hoặc dung môi hữu dụng để thực hiện các quy trình theo sáng chế về nguyên tắc bao gồm tất cả các dung môi hữu cơ trơ trong các điều kiện phản ứng cụ thể. Các ví dụ bao gồm: các hydrohalocacbon (ví dụ, các hydroclocacbon, như tetraetylen, tetracloetan, diclopropan, metylen clorua, diclobutan, clorofom, cacbon tetraclorua, tricloetan, tricloetylen, pentacloetan, diflobenzen, 1,2-dicloetan, clobenzen, bromobenzen, diclobenzen, clotoluen, triclobenzen), các rượu (ví dụ, metanol, etanol, isopropanol, butanol), các ete (ví dụ, etyl propyl ete, metyl tert-butyl ete, n-butyl ete, anisol, phenetol, xyclohexyl metyl ete, dimetyl ete, dietyl ete, dipropyl ete, diisopropyl ete, di-n-butyl ete, diisobutyl ete, diisoamyl ete, etylen glycol dimetyl ete, tetrahydrofuran, dioxan, diclodietyl ete và các polyete của etylen oxit và/hoặc propylen oxit), các amin (ví dụ, trimetyl-, trietyl-, tripropyl-, tributylamin, N-

metylmorpholin, pyridin và tetrametylendiamin), các nitrohydrocacbon (ví dụ, nitrometan, nitroetan, nitropropan, nitrobenzen, clonitrobenzen, o-nitrotoluen; các nitril như axetonitril, propionitril, butyronitril, isobutyronitril, benzonitril, m-clobenzonitril), tetrahydrothiophen dioxit, dimetyl sulphoxit, tetrametylen sulphoxit, dipropyl sulphoxit, benzyl metyl sulphoxit, diisobutyl sulphoxit, dibutyl sulphoxit, diisoamyl sulphoxit, các sulphon (ví dụ, dimetyl, dietyl, dipropyl, dibutyl, diphenyl, dihexyl, metyl etyl, etyl propyl, etyl isobutyl và pentametylen sulphon), các hydrocabon béo, vòng béo hoặc thơm (ví dụ, pentan, hexan, heptan, octan, nonan và các hydrocacbon kỹ thuật), và cả các chất được gọi là "xăng trắng" với các cấu tử có các điểm sôi nằm trong khoảng từ, ví dụ, 40°C đến 250°C, xymen, các phân đoạn dầu mỏ có điểm sôi nằm trong khoảng từ 70°C đến 190°C, xyclohexan, metylxyclohexan, ete dầu mỏ, ligroin, octan, benzen, toluen, clobenzen, bromobenzen, nitrobenzen, xylen, các este (ví dụ, metyl, etyl, butyl và isobutyl axetat, dimetyl, dibutyl và etylen cacbonat); các amit (ví dụ, hexametylenphosphoramit, formamit, N-metylformamit, N,N-dimetylformamit, N,N-dipropylformamit, N,N-dibutylformamit, N-metylpyrolidin, N-metylcaprolactam, 1,3-dimetyl-3,4,5,6-tetrahydro-2(1H)-pyrimidin, octylpyrolidon, octylcaprolactam, 1,3-dimetyl-2-imidazolinedion, N-formylpiperidin, N,N'-1,4-diformylpiperazin) và các xeton (ví dụ, axeton, axetophenon, metyl etyl xeton, metyl butyl xeton).

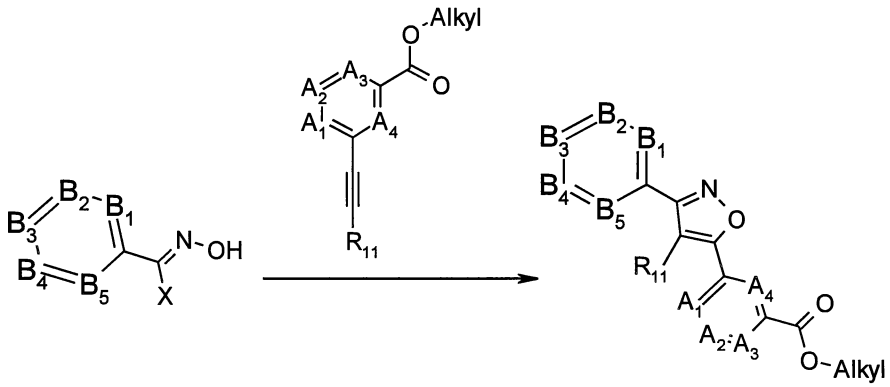
[397] Các chất pha loãng được ưu tiên sử dụng có thể là dung môi bất kỳ mà không làm ảnh hưởng bất lợi đến phản ứng, ví dụ, nước. Các ví dụ hữu dụng là các hydrocacbon thơm như benzen, toluen, xylen hoặc clobenzen; các hydrocacbon hologen hóa như diclometan, clorofom, 1,2-dicloetan hoặc cacbon tetraclorua, các ete mạch hở hoặc mạch vòng như dietyl ete, dioxan, tetrahydrofuran hoặc 1,2-dimetoxyetan; các este như etyl axetat và butyl axetat; các xeton, ví dụ, axeton, metyl isobutyl xeton và xyclohexanon; các amit như dimetylformamit và dimetylaxetamit, N-metylpyrolidon; các nitril như axetonitril hoặc propionitril; và các dung môi trơ khác như 1,3-dimetyl-2-imidazolidinon; các dung môi này có thể được sử dụng dưới dạng riêng rẽ hoặc kết hợp của hai hoặc nhiều dung môi.

Phản ứng có thể được thực hiện trong khoảng nhiệt độ rộng. Thông thường, phản ứng được thực hiện ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ -78°C đến 200°C, tốt hơn là ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ -10 đến 150°C. Phản ứng có thể được thực hiện ở áp suất cao hoặc áp suất giảm. Tuy nhiên, tốt hơn là phản ứng được thực hiện ở áp suất tiêu chuẩn. Thời gian phản ứng nằm trong khoảng từ 0,1 đến 72 giờ, tốt hơn là nằm trong khoảng từ 1 đến 24 giờ.

Để tiến hành phản ứng này, 1 đến 3 mol, tốt hơn là 1 đến 1,5 mol tác nhân halogen hóa được dùng trên một mol của hợp chất có công thức (**W3**) trong dung môi, ví dụ, dimetylformamit (DMF).

Giai đoạn 4 Đóng vòng

Giai đoạn 4 của quy trình điều chế các hợp chất theo sáng chế (**1-T22**):



(**W4**) (**W8**) (**W5**)

Các hợp chất theo sáng chế có công thức chung (**W5**) được điều chế bằng cách cho các hydroxamyl clorua có công thức (**W4**) phản ứng với các axetylen có công thức (**W8**).

Các gốc từ A_1-A_4, B_1-B_5, R^{11} và alkyl mỗi gốc là như được xác định trên đây. X là halogen, như clo, brom, iot.

Việc điều chế các hợp chất có công thức (**W4**) được mô tả trên đây. Các hợp chất có công thức (**W4**) điển hình là, ví dụ, 2,6-diclo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 2-etyl-6-metyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-

(triflometyl)etyl]-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 2-clo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometyl)-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 2-metyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometyl)-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 2-clo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometoxy)-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 2-metyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometoxy)-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 2-metyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometyl)-N-hydroxybenzimidoyl bromit.

[404] Các hợp chất có công thức (**W8**) là đã biết (WO2012107434, p. 103) hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này (Chinchilla, Rafael; Najera, Carmen, Chemical Society Reviews (2011), 40(10), 5084-5121, Chinchilla, Rafael; Najera, Carmen, Chemical Reviews (Washington, DC, United States) (2007), 107(3), 874-922). Các hợp chất có công thức (**W8**) điển hình là, ví dụ, metyl 2-clo-5-ethynylbenzoat, etyl 2-bromo-5-ethynylbenzoat, metyl 2-clo-5-ethynyl-3-flobenzoat, etyl 2-clo-5-ethynylnicotinat, etyl 5-ethynyl-2-metylnicotinat.

Phản ứng có thể được thực hiện bằng cách sử dụng các dung môi thích hợp.

Các chất pha loãng hoặc dung môi hữu dụng để thực hiện các quy trình theo sáng chế về nguyên tắc bao gồm tất cả các dung môi hữu cơ trơ trong các điều kiện phản ứng cụ thể. Các ví dụ bao gồm: các hydrohalocacbon (ví dụ, các hydroclocacbon, như tetraetylen, tetracloetan, diclopropan, metylen clorua, diclobutan, clorofom, cacbon tetraclorua, tricloetan, tricloetylen, pentacloetan, diflobenzen, 1,2-dicloetan, clobenzen, bromobenzen, diclobenzen, clotoluen, triclobenzen), các rượu (ví dụ, metanol, etanol, isopropanol, butanol), các ete (ví dụ, etyl propyl ete, metyl tert-butyl ete, n-butyl ete, anisol, phenetol, xyclohexyl metyl ete, dimetyl ete, dietyl ete, dipropyl ete, diisopropyl ete, di-n-butyl ete, diisobutyl ete, diisoamyl ete, etylen glycol dimetyl ete, tetrahydrofuran, dioxan, diclodietyl ete và các polyete của etylen oxit và/hoặc propylen oxit), các amin (ví dụ, trimetyl-, trietyl-, tripropyl-, tributylamin, N-metylmorpholin, pyridin và tetrametylendiamin), các nitrohydrocacbon (ví dụ, nitrometan, nitroetan, nitropropan, nitrobenzen, clonitrobenzen, o-nitrotoluen; các

nitril như axetonitril, propionitril, butyronitril, isobutyronitril, benzonitril, m-clobenzonitril), tetrahydrothiophen dioxit, dimetyl sulphoxit, tetrametylen sulphoxit, dipropyl sulphoxit, benzyl metyl sulphoxit, diisobutyl sulphoxit, dibutyl sulphoxit, diisoamyl sulphoxit, các sulphon (ví dụ, dimetyl, dietyl, dipropyl, dibutyl, diphenyl, dihexyl, metyl etyl, etyl propyl, etyl isobutyl và pentametylen sulphon), các hydrocabon béo, vòng béo hoặc thơm (ví dụ, pentan, hexan, heptan, octan, nonan và các hydrocacbon kỹ thuật), và cả các chất được gọi là "xăng trắng" với các cấu tử có các điểm sôi nằm trong khoảng từ, ví dụ, 40°C đến 250°C, xymen, các phân đoạn dầu mỏ có điểm sôi nằm trong khoảng từ 70°C đến 190°C, xyclohexan, metylxyclohexan, ete dầu mỏ, ligroin, octan, benzen, toluen, clobenzen, bromobenzen, nitrobenzen, xylen, các este (ví dụ, metyl, etyl, butyl và isobutyl axetat, dimetyl, dibutyl và etylen cacbonat); các amit (ví dụ, hexametylenphosphoramit, formamit, N-metylformamit, N,N-dimetylformamit, N,N-dipropylformamit, N,N-dibutylformamit, N-metylpyrolidin, N-metylcaprolactam, 1,3-dimetyl-3,4,5,6-tetrahydro-2(1H)-pyrimidin, octylpyrolidon, octylcaprolactam, 1,3-dimetyl-2-imidazolinedion, N-formylpiperidin, N,N'-1,4-diformylpiperazin) và các xeton (ví dụ, axeton, axetophenon, metyl etyl xeton, metyl butyl xeton).

Các chất pha loãng được ưu tiên sử dụng có thể là dung môi bất kỳ mà không làm ảnh hưởng bất lợi đến phản ứng, ví dụ, nước. Các ví dụ hữu dụng là các hydrocacbon thơm như benzen, toluen, xylen hoặc clobenzen; các hydrocacbon hologen hóa như diclometan, clorofom, 1,2-dicloetan hoặc cacbon tetraclorua, các ete mạch hở hoặc mạch vòng như dietyl ete, dioxan, tetrahydrofuran hoặc 1,2-dimetoxyetan; các este như etyl axetat và butyl axetat; các xeton, ví dụ, axeton, metyl isobutyl xeton và xyclohexanon; các amit như dimetylformamit và dimetylaxetamit, N-metylpyrolidon; các nitril như axetonitril hoặc propionitril; và các dung môi trơ khác như 1,3-dimetyl-2-imidazolidinon; các dung môi này có thể được sử dụng dưới dạng riêng rẽ hoặc kết hợp của hai hoặc nhiều dung môi.

Trong các phản ứng của các hợp chất có công thức (**W4**) với các axetylen có công thức (**W8**), có thể bổ sung các bazơ. Các ví dụ bao gồm các hợp chất kim loại kiềm thổ hoặc kim loại kiềm (ví dụ, các hydroxit, các hydrua, các oxit và các cacbonat

của lithi, natri, kali, magie, canxi và bari), các bazơ amidin hoặc các bazơ guanidin (ví dụ, 7-metyl-1,5,7-triazabixyclo[4.4.0]dec-5-en (MTBD); diazabixyclo[4.3.0]nonen (DBN), diazabixyclo[2.2.2]octan (DABCO), 1,8-diazabixyclo[5.4.0]undexen (DBU), xyclohexyltetrabutylguanidin (CyTBG), xyclohexyltetrametylguanidin (CyTMG), N,N,N,N-tetrametyl-1,8-naphtalenediamin, pentametylpiperidin) và các amin, đặc biệt là các amin bậc ba (ví dụ, trietylamin, trimetylamin, tribenzylamin, triisopropylamin, tributylamin, trixyclohexylamin, triamylamin, trihexylamin, N,N-dimetylanilin, N,N-dimetyltoluidin, N,N-dimetyl-p-aminopyridin, N-metylpyrolidin, N-metylpiperidin, N-metylimidazol, N-metylpyrazol, N-metylmorpholin, N-metylhexametylendiamin, pyridin, 4-pyrolidinopyridin, 4-dimetylaminopyridin, quinolin, α-picolin, β-picolin, isoquinolin, pyrimidin, axridin, N,N,N',N'-tetrametylendiamin, N,N,N',N'-tetraetylendiamin, quinoxalin, N-propyldiisopropylamin, N-etyldiisopropylamin, N,N'-dimetylxyclohexylamin, 2,6-lutidin, 2,4-lutidin hoặc trietylendiamin).

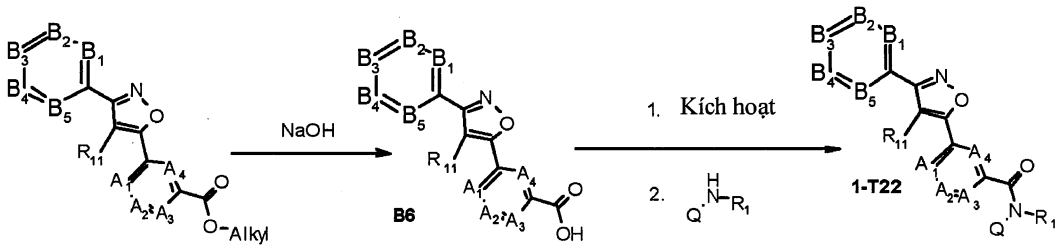
Phản ứng có bổ sung bazơ được ưu tiên dùng có thể là bazơ hữu cơ như trietylamin, etyldiisopropylamin, tri-n-butylamin, pyridin và 4-dimetylaminopyridin; ngoài ra, có thể dùng, ví dụ, các bazơ sau: các hydroxit kim loại kiềm, ví dụ, natri hydroxit và kali hydroxit; các cacbonat như natri hydrocacbonat và kali cacbonat; các phosphat như dikali hydrophosphat và trinatri phosphat.

Phản ứng có thể được thực hiện trong khoảng nhiệt độ rộng. Thông thường, phản ứng được thực hiện ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ -78°C đến 200°C, tốt hơn là ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ -10 đến 150°C. Phản ứng có thể được thực hiện ở áp suất cao hoặc áp suất giảm. Tuy nhiên, tốt hơn là phản ứng được thực hiện ở áp suất tiêu chuẩn. Thời gian phản ứng nằm trong khoảng từ 0,1 đến 72 giờ, tốt hơn là nằm trong khoảng từ 1 đến 24 giờ.

Để thực hiện phản ứng này, ví dụ, 1-2 đương lượng mol của các hợp chất có công thức (**W8**) và 1 đương lượng mol cho đến một lượng dư nhỏ của bazơ trên một mol của hợp chất có công thức (**W4**) được cho phản ứng trong dung môi, ví dụ, dimetylformamit (DMF).

Các giai đoạn 3 và 4 để điều chế các hợp chất có công thức (**W5**) có thể được thực hiện theo các bước riêng rẽ hoặc nếu không thì thực hiện theo phản ứng một giai đoạn.

Các giai đoạn 5, 6 Quá trình thủy phân, amit hóa



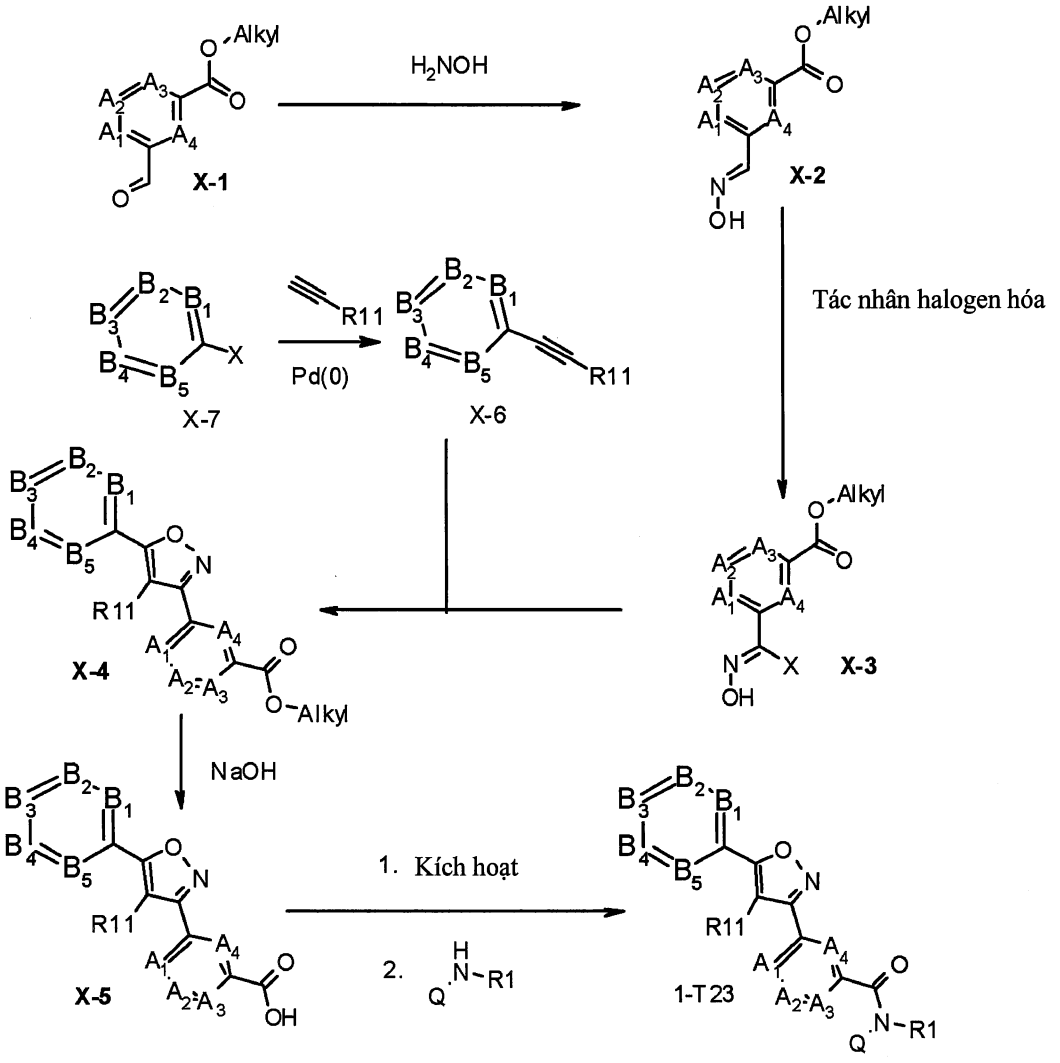
(W5) **(W6)** **(B7)** **(1-T22)**

Các hợp chất theo sáng chế có công thức chung (**I-T22**) có thể được điều chế tương tự theo các phương pháp ghép mạch peptit đã biết trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này từ các nguyên liệu khởi đầu (**W6**) và (**W9**) (WO2010051926; WO2010133312). Các hợp chất có công thức chung (**W6**) có thể được điều chế tương tự theo các quy trình đã biết trong các tài liệu đã biết trong lĩnh vực kỹ thuật này bằng cách thủy phân este từ các hợp chất có công thức chung (**W5**) (WO2010051926; WO2010133312). Các gốc A_1-A_4, B_1-B_5, alkyl, Q, R^1 và R^{11} mỗi gốc là như được xác định trên đây.

Quy trình I-T23

Các hợp chất có công thức (**I-T23**) có thể được điều chế bằng quy trình được xác định trong sơ đồ phản ứng 8.

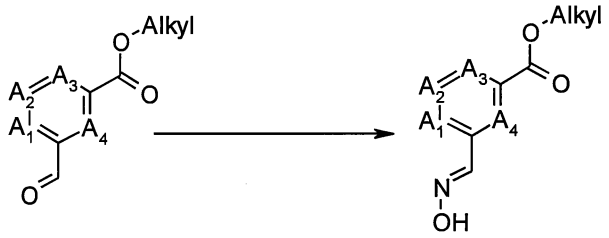
Sơ đồ phản ứng 8:



Các gốc A_1-A_4, B_1-B_5, alkyl, Q, R^1 và R^{11} mỗi gốc là như được xác định trên đây. Ví dụ, X là Cl, Br, I.

Giai đoạn 1 Oxim

Giai đoạn 1 của quy trình điều chế các hợp chất theo sáng chế (I-T23):



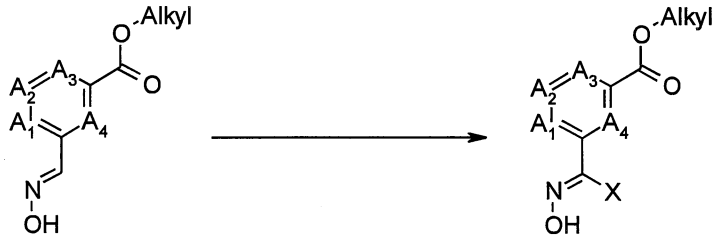
X-1 X-2

Các hợp chất theo sáng chế có công thức chung **(X-2)** có thể được điều chế tương tự theo các phương pháp đã biết trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này từ các nguyên liệu khởi đầu có công thức **(X-1)**. Các gốc từ A^1-A^4 và alkyl mỗi gốc là như được xác định trên đây. Các hợp chất khởi đầu có công thức **(X-1)** là đã biết hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết. Các ví dụ bao gồm 3-carbometoxybenzaldehyt, 3-carbometoxy-4-clobenzaldehyt, 3-carbometoxy-4-bromobenzaldehyt, 3-carbometoxy-4-flobenzaldehyt, 3-carbometoxy-4-clo-5-flobenzaldehyt và các este tương ứng. Chúng có thể được điều chế, ví dụ, bằng các phương pháp đã biết trong tài liệu WO 2010/011584, p. 19-20; Journal of Organic Chemistry, 76 (2011), p. 1062 – 1071; WO 2012/114268, p. 137; Journal of the American Chemical Society, 108 (1986), p. 452-461.

Các hợp chất chưa biết cho đến nay **(X-2)** có thể được điều chế theo cách tương tự với các quy trình đã biết để điều chế các oxim từ các aldehyt (H. Metzger in Houben-Weyl, volume X/4, p. 55 ff., Georg Thieme Verlag Stuttgart 1968). Các hợp chất có công thức cấu tạo **(X-2)** có thể ở dạng các chất đồng phân lập thể tinh khiết và cũng có thể ở dạng các hỗn hợp của các chất đồng phân lập thể này.

Giai đoạn 2 Điều chế Hydroxamyl clorua

Giai đoạn 2 của quy trình điều chế các hợp chất theo sáng chế **(I-T23):**



X-2 X-3

Các hợp chất theo sáng chế có công thức chung **(X-3)** được điều chế bằng cách cho các oxim có công thức **(X-2)** phản ứng với các tác nhân halogen hóa.

Các gốc A_1-A_4 và alkyl mỗi gốc là như được xác định trên đây.

Các hợp chất có công thức điển hình **(X-3)** là, ví dụ, carbometoxy-4-clo-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 3-carbometoxy-4-flo-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 3-carbometoxy-4-clo-5-flo-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 3-carbometoxy-4-bromo-N-hydroxybenzimidoyl clorua.

Người có hiểu biết trung bình về lĩnh vực này đã biết các hợp chất halogen hóa thích hợp, ví dụ, clo, brom, iot, N-closucxinimit, N-bromosucxinimit, N-iodosucxinimit, 1,3-diclo-5,5-dimetylhydantoin, 1,3-dibromo-5,5-dimetylhydantoin, benzyltrimetylammonium tetracloiodat và natri hypochlorit. Ưu tiên là sử dụng các chất phản ứng clo hóa.

Các chất pha loãng hoặc dung môi hữu dụng để thực hiện các quy trình theo sáng chế về nguyên tắc bao gồm tất cả các dung môi hữu cơ trơ trong các điều kiện phản ứng cụ thể. Các ví dụ bao gồm: các hydrohalocacbon (ví dụ, các hydroclocacbon, như tetraetylen, tetracloetan, diclopropan, metylen clorua, diclobutan, clorofom, cacbon tetraclorua, tricloetan, tricloetylen, pentacloetan, diflobenzen, 1,2-dicloetan, clobenzen, bromobenzen, diclobenzen, clotoluen, triclobenzen), các rượu (ví dụ, metanol, etanol, isopropanol, butanol), các ete (ví dụ, etyl propyl ete, metyl tert-butyl ete, n-butyl ete, anisol, phenetol, xyclohexyl metyl ete, dimetyl ete, dietyl ete, dipropyl ete, diisopropyl ete, di-n-butyl ete, diisobutyl ete, diisoamyl ete, etylen glycol dimetyl ete, tetrahydrofuran, dioxan, diclodietyl ete và các polyete của etylen oxit và/hoặc propylen oxit), các amin (ví dụ, trimetyl-, trietyl-, tripropyl-, tributylamin, N-metylmorpholin, pyridin và tetrametylendiamin), các nitrohydrocacbon (ví dụ, nitrometan, nitroetan, nitropropan, nitrobenzen, clonitrobenzen, o-nitrotoluen; các nitril như axetonitril, propionitril, butyronitril, isobutyronitril, benzonitril, m-clobenzonitril), tetrahydrothiophen dioxit, dimetyl sulphoxit, tetrametylen sulphoxit, dipropyl sulphoxit, benzyl metyl sulphoxit, diisobutyl sulphoxit, dibutyl sulphoxit, diisoamyl sulphoxit, các sulphon (ví dụ, dimetyl, dietyl, dipropyl, dibutyl, diphenyl, dihexyl, metyl etyl, etyl propyl, etyl isobutyl và pentametylen sulphon), các hydrocabon béo, vòng béo hoặc thơm (ví dụ, pentan, hexan, heptan, octan, nonan và

các hydrocacbon kỹ thuật), và cả các chất được gọi là "xăng trắng" với các cấu tử có các điểm sôi nằm trong khoảng từ, ví dụ, 40°C đến 250°C, xymen, các phân đoạn dầu mỏ có điểm sôi nằm trong khoảng từ 70°C đến 190°C, xyclohexan, metylxyclohexan, ete dầu mỏ, ligroin, octan, benzen, toluen, clobenzen, bromobenzen, nitrobenzen, xylen, các este (ví dụ, metyl, etyl, butyl và isobutyl axetat, dimetyl, dibutyl và etylen cacbonat); các amit (ví dụ, hexametylenphosphoramit, formamit, N-metylformamit, N,N-dimetylformamit, N,N-dipropylformamit, N,N-dibutylformamit, N-metylpyrolidin, N-metylcaprolactam, 1,3-dimetyl-3,4,5,6-tetrahydro-2(1H)-pyrimidin, octylpyrolidon, octylcaprolactam, 1,3-dimetyl-2-imidazolinedion, N-formylpiperidin, N,N'-1,4-diformylpiperazin) và các xeton (ví dụ, axeton, axetophenon, metyl etyl xeton, metyl butyl xeton).

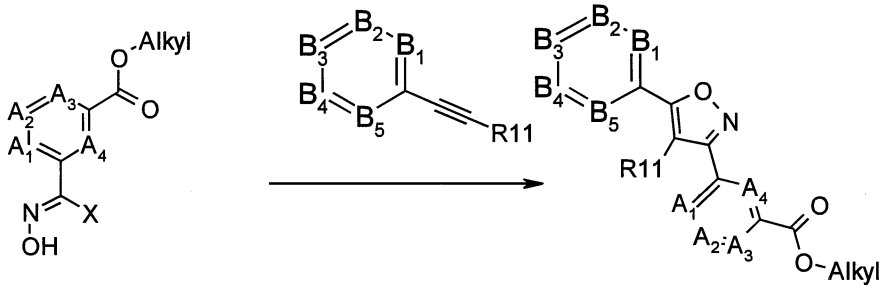
Các chất pha loãng được ưu tiên sử dụng có thể là dung môi bất kỳ mà không làm ảnh hưởng bất lợi đến phản ứng, ví dụ, nước. Các ví dụ hữu dụng là các hydrocacbon thơm như benzen, toluen, xylen hoặc clobenzen; các hydrocacbon hologen hóa như diclometan, clorofom, 1,2-dicloetan hoặc cacbon tetraclorua, các ete mạch hở hoặc mạch vòng như dietyl ete, dioxan, tetrahydrofuran hoặc 1,2-dimetoxyetan; các este như etyl axetat và butyl axetat; các xeton, ví dụ, axeton, metyl isobutyl xeton và xyclohexanon; các amit như dimetylformamit và dimetylaxetamit, N-metylpyrolidon; các nitril như axetonitril hoặc propionitril; và các dung môi trơ khác như 1,3-dimetyl-2-imidazolidinon; các dung môi này có thể được sử dụng dưới dạng riêng rẽ hoặc kết hợp của hai hoặc nhiều dung môi.

Phản ứng có thể được thực hiện trong khoảng nhiệt độ rộng. Thông thường, phản ứng được thực hiện ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ -78°C đến 200°C, tốt hơn là ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ -10 đến 150°C. Phản ứng có thể được thực hiện ở áp suất cao hoặc áp suất giảm. Tuy nhiên, tốt hơn là phản ứng được thực hiện ở áp suất tiêu chuẩn. Thời gian phản ứng nằm trong khoảng từ 0,1 đến 72 giờ, tốt hơn là nằm trong khoảng từ 1 đến 24 giờ.

Để tiến hành phản ứng này, 1 đến 3 mol, tốt hơn là 1 đến 1,5 mol tác nhân halogen hóa được dùng trên một mol của hợp chất có công thức **(X-2)** trong dung môi, ví dụ, dimetylformamit (DMF).

Giai đoạn 3 Phản ứng đóng vòng

Giai đoạn 3 của quy trình điều chế các hợp chất theo sáng chế **(1-T23):**



X-3 X-6 X-4

Các hợp chất theo sáng chế có công thức chung **(X-4)** được điều chế bằng cách cho các hydroxamyl clorua có công thức **(X-3)** phản ứng với các axetylen có công thức **(X-6)**.

Các gốc từ A^1-A^4, B^1-B^5, R^{11} và alkyl mỗi gốc là như được xác định trên đây.

Các hợp chất có công thức điển hình **(X-3)** là, ví dụ, carbometoxy-4-clo-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 3-carbometoxy-4-flo-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 3-carbometoxy-4-clo-5-flo-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 3-carbometoxy-4-bromo-N-hydroxybenzimidoyl clorua.

Các chất pha loãng hoặc dung môi hữu dụng để thực hiện các quy trình theo sáng chế về nguyên tắc bao gồm tất cả các dung môi hữu cơ trơ trong các điều kiện phản ứng cụ thể. Các ví dụ bao gồm: các hydrohalocacbon (ví dụ, các hydroclocacbon, như tetraetylen, tetracloetan, diclopropan, metylen clorua, diclobutan, clorofom, cacbon tetraclorua, tricloetan, tricloetylen, pentacloetan, diflobenzen, 1,2-dicloetan, clobenzen, bromobenzen, diclobenzen, clotoluen, triclobenzen), các rượu (ví dụ, metanol, etanol, isopropanol, butanol), các ete (ví dụ, etyl propyl ete, metyl tert-butyl ete, n-butyl ete, anisol, phenetol, xyclohexyl metyl ete, dimetyl ete, dietyl ete, dipropyl ete, diisopropyl ete, di-n-butyl ete, diisobutyl ete, diisoamyl ete, etylen glycol dimetyl

ete, tetrahydrofuran, dioxan, diclodietyl ete và các polyete của etylen oxit và/hoặc propylen oxit), các amin (ví dụ, trimetyl-, trietyl-, tripropyl-, tributylamin, N-metylmorpholin, pyridin và tetrametylendiamin), các nitrohydrocacbon (ví dụ, nitrometan, nitroetan, nitropropan, nitrobenzen, clonitrobenzen, o-nitrotoluen; các nitril như axetonitril, propionitril, butyronitril, isobutyronitril, benzonitril, m-clobenzonitril), tetrahydrothiophen dioxit, dimetyl sulphoxit, tetrametylen sulphoxit, dipropyl sulphoxit, benzyl metyl sulphoxit, diisobutyl sulphoxit, dibutyl sulphoxit, diisoamyl sulphoxit, các sulphon (ví dụ, dimetyl, dietyl, dipropyl, dibutyl, diphenyl, dihexyl, metyl etyl, etyl propyl, etyl isobutyl và pentametylen sulphon), các hydrocabon béo, vòng béo hoặc thơm (ví dụ, pentan, hexan, heptan, octan, nonan và các hydrocacbon kỹ thuật), và cả các chất được gọi là "xăng trắng" với các cấu tử có các điểm sôi nằm trong khoảng từ, ví dụ, 40°C đến 250°C, xymen, các phân đoạn dầu mỏ có điểm sôi nằm trong khoảng từ 70°C đến 190°C, xyclohexan, metylxyclohexan, ete dầu mỏ, ligroin, octan, benzen, toluen, clobenzen, bromobenzen, nitrobenzen, xylen, các este (ví dụ, metyl, etyl, butyl và isobutyl axetat, dimetyl, dibutyl và etylen cacbonat); các amit (ví dụ, hexametylenphosphoramit, formamit, N-metylformamit, N,N-dimetylformamit, N,N-dipropylformamit, N,N-dibutylformamit, N-metylpyrolidin, N-metylcaprolactam, 1,3-dimetyl-3,4,5,6-tetrahydro-2(1H)-pyrimidin, octylpyrolidon, octylcaprolactam, 1,3-dimetyl-2-imidazolinedion, N-formylpiperidin, N,N'-1,4-diformylpiperazin) và các xeton (ví dụ, axeton, axetophenon, metyl etyl xeton, metyl butyl xeton).

Các chất pha loãng được ưu tiên sử dụng có thể là dung môi bất kỳ mà không làm ảnh hưởng bất lợi đến phản ứng, ví dụ, nước. Các ví dụ hữu dụng là các hydrocacbon thơm như benzen, toluen, xylen hoặc clobenzen; các hydrocacbon hologen hóa như diclometan, clorofom, 1,2-dicloetan hoặc cacbon tetraclorua, các ete mạch hở hoặc mạch vòng như dietyl ete, dioxan, tetrahydrofuran hoặc 1,2-dimetoxyetan; các este như etyl axetat và butyl axetat; các xeton, ví dụ, axeton, metyl isobutyl xeton và xyclohexanon; các amit như dimetylformamit và dimetylaxetamit, N-metylpyrolidon; các nitril như axetonitril hoặc propionitril; và các dung môi trơ khác như 1,3-dimetyl-2-imidazolidinon; các dung môi này có thể được sử dụng dưới dạng riêng rẽ hoặc kết hợp của hai hoặc nhiều dung môi.

Trong các phản ứng của các hợp chất có công thức **(X-3)** với các axetylen có công thức (X-6), có thể bổ sung các bazơ. Các ví dụ bao gồm các hợp chất kim loại kiềm thổ hoặc kim loại kiềm (ví dụ, các hydroxit, các hydrua, các oxit và các cacbonat của lithi, natri, kali, magie, canxi và bari), các bazơ amidin hoặc các bazơ guanidin (ví dụ, 7-metyl-1,5,7-triazabixyclo[4.4.0]dec-5-en (MTBD); diazabixyclo[4.3.0]nonen (DBN), diazabixyclo[2.2.2]octan (DABCO), 1,8-diazabixyclo[5.4.0]undexen (DBU), xyclohexyltetrabutylguanidin (CyTBG), xyclohexyltetrametylguanidin (CyTMG), N,N,N,N-tetrametyl-1,8-naphtalenediamin, pentametylpiperidin) và các amin, đặc biệt là các amin bậc ba (ví dụ, trietylamin, trimetylamin, tribenzylamin, triisopropylamin, tributylamin, trixyclohexylamin, triamylamin, trihexylamin, N,N-dimetylanilin, N,N-dimetyltoluidin, N,N-dimetyl-p-aminopyridin, N-metylpyrolidin, N-metylpiperidin, N-metylimidazol, N-metylpyrazol, N-metylmorpholin, N-metylhexametylendiamin, pyridin, 4-pyrolidinopyridin, 4-dimetylaminopyridin, quinolin, α-picolin, β-picolin, isoquinolin, pyrimidin, axridin, N,N,N',N'-tetrametylendiamin, N,N,N',N'-tetraetylendiamin, quinoxalin, N-propyldiisopropylamin, N-etyldiisopropylamin, N,N'-dimetylxyclohexylamin, 2,6-lutidin, 2,4-lutidin hoặc trietylendiamin).

Phản ứng có bổ sung bazơ được ưu tiên dùng có thể là bazơ hữu cơ như trietylamin, etyldiisopropylamin, tri-n-butylamin, pyridin và 4-dimetylaminopyridin; ngoài ra, có thể dùng, ví dụ, các bazơ sau: các hydroxit kim loại kiềm, ví dụ, natri hydroxit và kali hydroxit; các cacbonat như natri hydrocacbonat và kali cacbonat; các phosphat như dikali hydrophosphat và trinatri phosphat.

Phản ứng có thể được thực hiện trong khoảng nhiệt độ rộng. Thông thường, phản ứng được thực hiện ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ -78°C đến 200°C, tốt hơn là ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ -10 đến 150°C. Phản ứng có thể được thực hiện ở áp suất cao hoặc áp suất giảm. Tuy nhiên, tốt hơn là phản ứng được thực hiện ở áp suất tiêu chuẩn. Thời gian phản ứng nằm trong khoảng từ 0,1 đến 72 giờ, tốt hơn là nằm trong khoảng từ 1 đến 24 giờ.

Để thực hiện phản ứng này, ví dụ, 1-2 đương lượng mol của các hợp chất có công thức **(X-6)** và 1 đương lượng mol cho đến một lượng dư nhỏ của bazơ trên một

mol của hợp chất có công thức **(X-3)** được cho phản ứng trong dung môi, ví dụ, dimetylformamit (DMF).

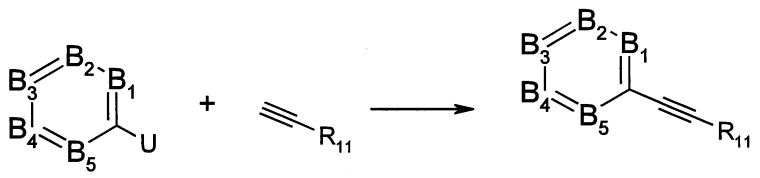
Các giai đoạn 2 và 3 để điều chế các hợp chất có công thức **(X-4)** có thể được thực hiện theo các bước riêng rẽ hoặc nếu không thì thực hiện theo phản ứng một giai đoạn.

Các giai đoạn 4, 5 Quá trình thủy phân, amit hóa

Các giai đoạn cuối cùng (các giai đoạn 4 và 5) để điều chế các hợp chất theo sáng chế (1-T23), thủy phân este carboxylic **(X-4)** và amit hóa axit carboxylic X-5 có thể được thực hiện bằng các quy trình chung được mô tả trên đây (sơ đồ phản ứng) để thủy phân este và amit hóa axit carboxylic.

Giai đoạn 6 Điều chế các axetylen

Giai đoạn 6 Điều chế các hợp chất khởi đầu có công thức **(X-6)**



X-7 X-8 X-6

Các gốc từ B_1-B_5, R^{11} và U mỗi gốc là như được xác định trên đây. Ví dụ, U là brom, iot hoặc triflat.

Các hợp chất theo sáng chế có công thức chung **(X-6)** có thể được điều chế tương tự theo các phương pháp đã biết trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này (Chinchilla, Rafael et al., Chemical Society Reviews (2011), 40(10), p. 5084-5121, Chinchilla, Rafael et al., Chemical Reviews (Washington, DC, United States) (2007), 107(3), p. 874-922) từ các nguyên liệu khởi đầu có công thức **(X-7)** với xúc tác là các chất xúc tác kim loại chuyển tiếp bao gồm paladi và đồng.

Các hợp chất khởi đầu có công thức **(X-7)** là đã biết hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết. Các ví dụ bao gồm 2-bromo-1,3-diclo-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]benzen, 2-bromo-1,3-dimetyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-

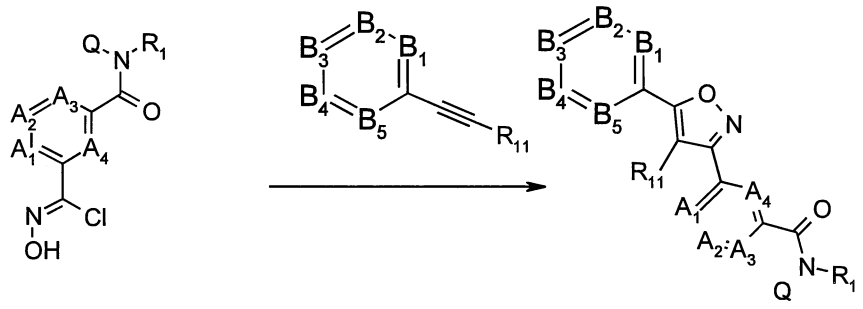
(triflometyl)etyl]benzen, 2-bromo-1-etyl-3-metyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]benzen, 2-bromo-1-clo-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-3-(triflometyl)benzen, 2-bromo-1-metyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-3-(triflometyl)benzen, 2-bromo-1-clo-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-3-(triflometoxy)benzen, 2-bromo-1-metyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-3-(triflometoxy)benzen. Chúng có thể được điều chế, ví dụ, bằng các phương pháp đã biết trong tài liệu EP 1 253 128, pages 8-10.

Các hợp chất khởi đầu có công thức **(X-8)** là đã biết hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết. Nếu R^6=H, có thể sử dụng nhóm bảo vệ trong quy trình này khác R^6. Các nhóm bảo vệ thích hợp là, ví dụ, trimetylsilyl, trietylsilyl và dimetylhydroxymetyl. Các nhóm bảo vệ thích hợp khác để đưa vào và tách ra được mô tả trong tài liệu [xem các danh sách trong tài liệu Greene's protective groups in organic synthesis, 4th edition, P. G. M. Wuts, T. W. Greene, John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, 2007, pages 927-933.]

Giai đoạn 3 phương án khác: Kết hợp với các amit

Theo cách khác, các hợp chất theo sáng chế **(I-T23)** có thể được điều chế bằng quy trình điều chế chung B (Sơ đồ phản ứng 9).

Sơ đồ phản ứng 9:



X-9 X-6 X-4

Các gốc từ A_1-A_4, B_1-B_5, Q, R^1 và R^{11} mỗi gốc là như được xác định trên đây.

Các hợp chất theo sáng chế có công thức chung **(X-4)** được điều chế bằng cách cho các hydroxamyl clorua có công thức **(X-9)** phản ứng với các axetylen có công thức **(X-6)**.

Việc điều chế các hợp chất có công thức **(X-6)** được mô tả trên đây. Các hợp chất có công thức **(X-9)** được điều chế theo cách tương tự việc điều chế các các hợp chất có công thức **(X-3)** được mô tả trên đây.

Các hợp chất có công thức điển hình **(X-3)** là, ví dụ, 4-clo-3-(xyclopropylcarbamoyl)-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 3-(xyclopropylcarbamoyl)-4-flo-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 4-clo-3-(xyclopropylcarbamoyl)-5-flo-N-hydroxybenzimidoyl clorua, 4-bromo-3-(xyclopropylcarbamoyl)-N-hydroxybenzimidoyl clorua.

(I-T24): Các hợp chất có công thức (I-24) có thể được điều chế, ví dụ, tương tự với quy trình được mô tả trong tài liệu Furukawa, Hirotoshi et al. Heterocycles, 79 (2009), p. 303-309; US 6,545,009, p. 34, Example 111.

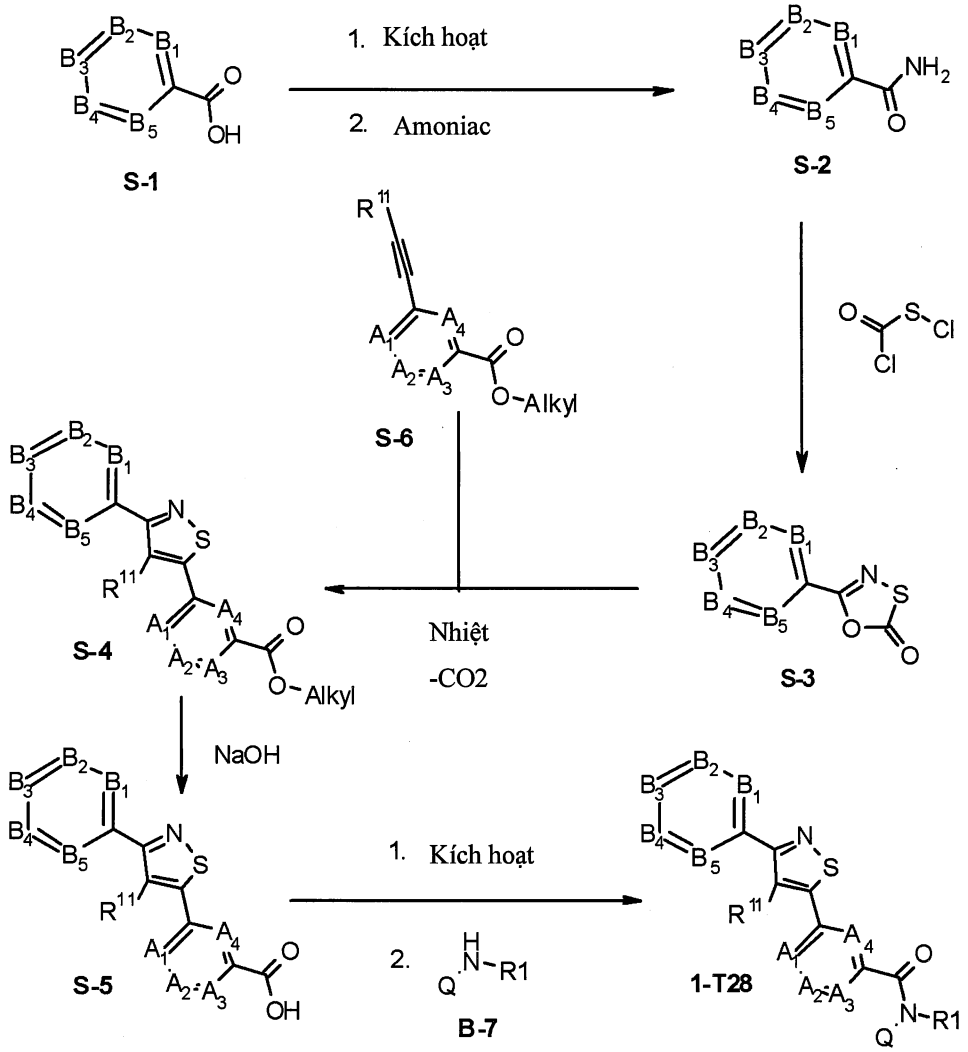
(I-T25): Các hợp chất có công thức (I-25) có thể được điều chế, ví dụ, tương tự với quy trình được mô tả trong các tài liệu WO 2004/14366, p. 113.

(I-T26): Các hợp chất có công thức (I-26) có thể được điều chế, ví dụ, tương tự với quy trình được mô tả trong tài liệu Chihiro, Masatoshi et al., Journal of Medicinal Chemistry, 38 (1995), p. 353-358.

(I-T27): Các hợp chất có công thức (I-27) có thể được điều chế, ví dụ, tương tự với quy trình được mô tả trong tài liệu US 6,545,009, p. 31, Example 74.

Các hợp chất có công thức **(I-T28)** có thể được điều chế bằng quy trình được xác định trong sơ đồ phản ứng 10.

Sơ đồ phản ứng 10

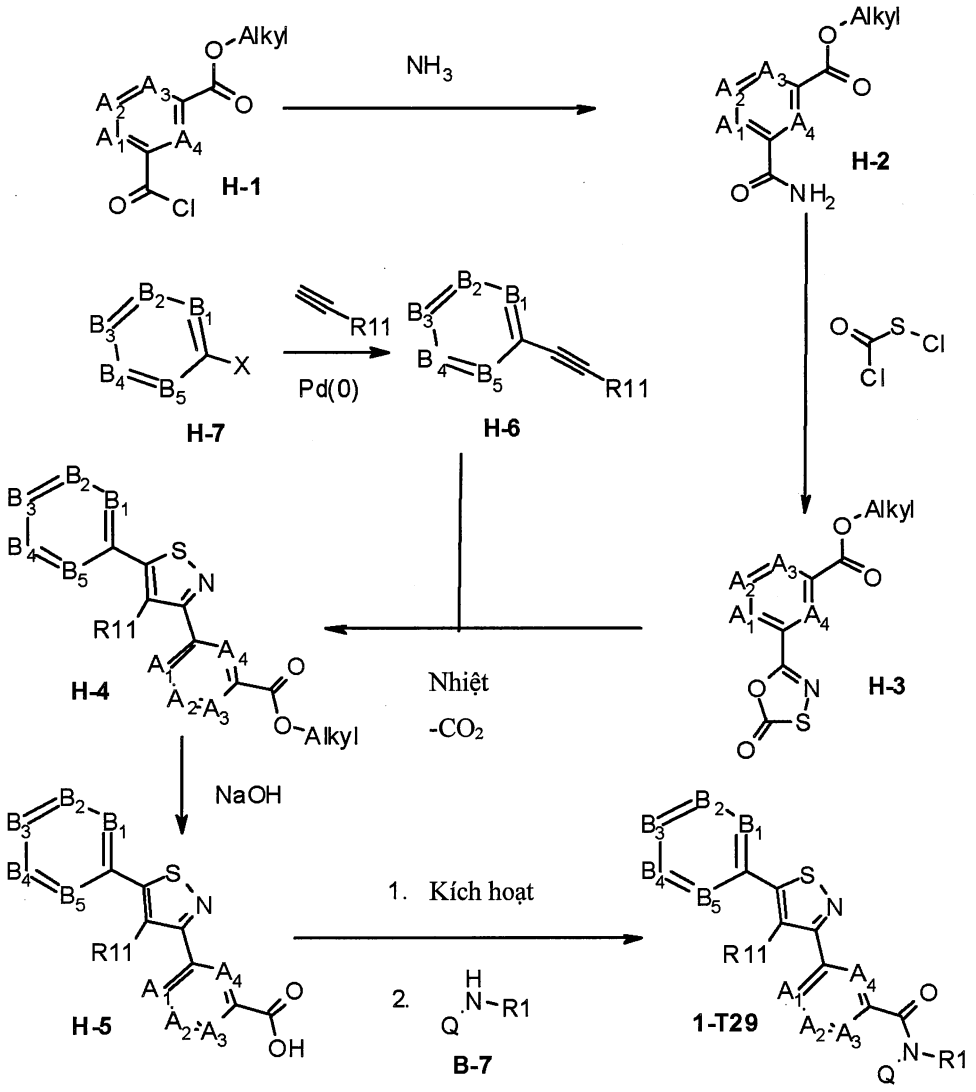


Các gốc A^1-A^4, B^1-B^5, alkyl, Q, R^1 và R^{11} mỗi gốc là như được xác định trên đây. Các hợp chất khởi đầu có công thức **(S-1)** là đã biết (ví dụ, US 5,739,083 p. 10, hoặc WO 2012/175474, p. 117-118) hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết. Các phản ứng này được tiến hành trong các điều kiện được xác định trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật (ví dụ, Abdelrahman S. Mayhoub et al., Bioorg. Med. Chem. 20 (2012) p. 2427-2434 hoặc WO 2009/023372).

Quy trình I-T29

Các hợp chất có công thức (**I-T29**) có thể được điều chế bằng quy trình được xác định trong sơ đồ phản ứng 11.

Sơ đồ phản ứng 11:



Các gốc A^1-A^4, B^1-B^5, alkyl, Q, R^1 và R^{11} mỗi gốc là như được xác định trên đây. Các hợp chất khởi đầu có công thức **(H-1)** và **(H-7)** là đã biết (ví dụ, US 3,725,417 p. 7 hoặc WO 2012/175474, p. 117-118) hoặc có thể được điều chế bằng

các phương pháp đã biết. Các phản ứng này được tiến hành trong các điều kiện được xác định trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật (ví dụ, Abdelrahman S. Mayhoub et al., Bioorg. Med. Chem. 20 (2012) p. 2427-2434 hoặc WO 2009/023372).

Quy trình I-T30

(I-T30): Các hợp chất có công thức (I-T30) có thể được điều chế, ví dụ, tương tự với quy trình được mô tả trong các tài liệu WO 2011/9484, p. 104; hoặc Gamber, Gabriel G. et al., Bioorganic và Medicinal Chemistry Letters, 21 (2011), p. 1447-1451.

(I-T31): Các hợp chất có công thức (I-T31) có thể được điều chế, ví dụ, tương tự với quy trình được mô tả trong các tài liệu Bishop, Brian C. et al., Synthesis, (2004), p. 43-52; hoặc Heller, Stephen T. et al., Organic Letters, 8 (2006), p. 2675-2678; hoặc Baddar, F.G. et al. Journal of Heterocyclic Chemistry, 15 (1978), p. 385-393.

(I-T32): Các hợp chất có công thức (I-T32) có thể được điều chế, ví dụ, tương tự với quy trình được mô tả trong tài liệu Joo, Jung Min et al., Journal of Organic Chemistry, 75 (2010), p. 4911-4920.

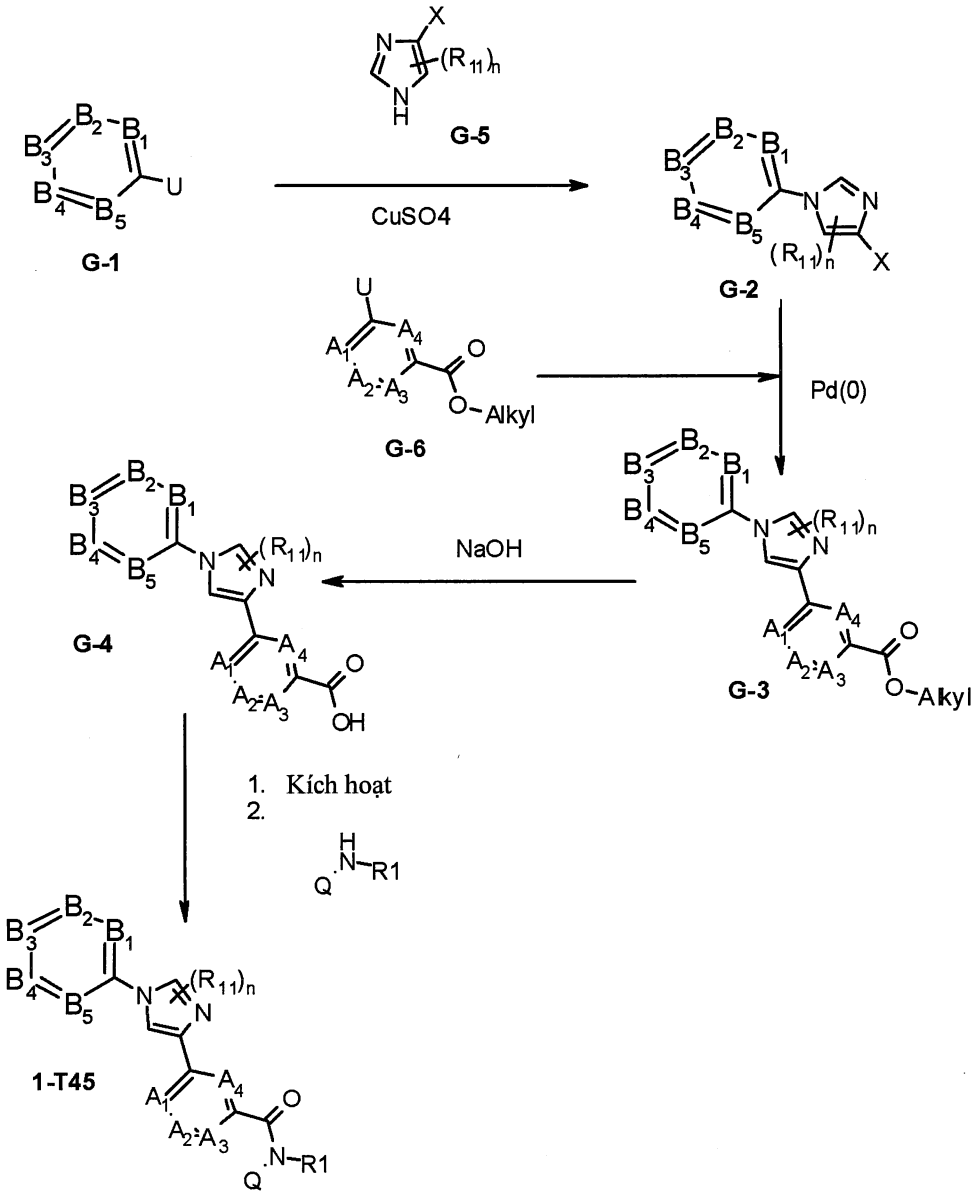
(I-T33): Các hợp chất có công thức (I-T33) có thể được điều chế, ví dụ, tương tự với quy trình được mô tả trong các tài liệu Joo, Jung Min et al., Journal of Organic Chemistry, 75 (2010), p. 4911-4920; hoặc WO 2004/91610, p. 70.

(I-T34): Các hợp chất có công thức (I-T34) có thể được điều chế, ví dụ, tương tự với quy trình được mô tả trong tài liệu Al-Tel, Taleb et al., Journal of Medicinal Chemistry, 54 (2011), p. 8373-8385.

(I-T35): Các hợp chất có công thức (I-T35) có thể được điều chế, ví dụ, tương tự với quy trình được mô tả trong các tài liệu Yang, Shu-wie et al., Bioorganic và Medicinal Chemistry Letters, 21 (2011), p. 182-185; hoặc Kennedy, Andrew J. et al, Journal of Medicinal Chemistry, 54 (2011), p. 3524-3548.

Các hợp chất có công thức (I-T45) có thể được điều chế bằng quy trình được xác định trong sơ đồ phản ứng 12.

Sơ đồ phản ứng 12



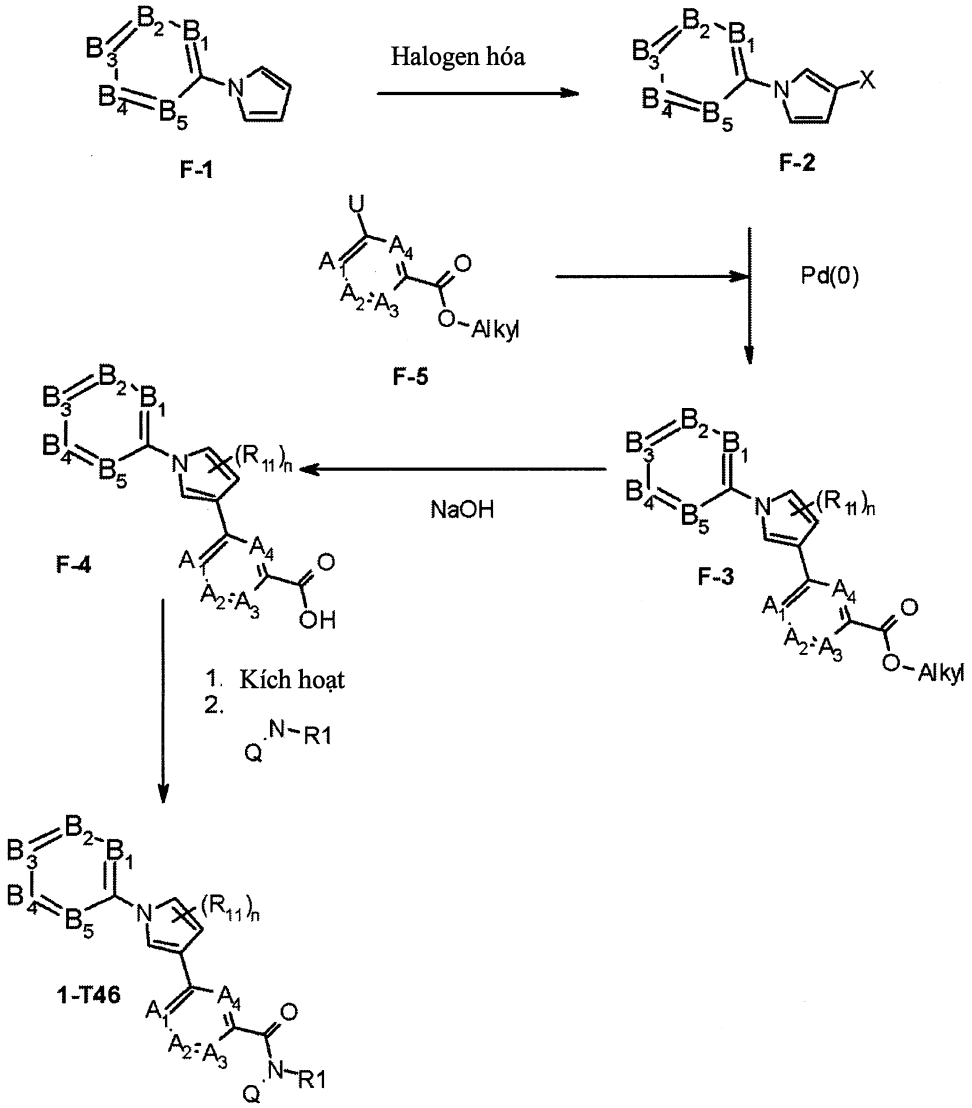
Các gốc A_1-A_4, B_1-B_5, alkyl, Q, R^1 và R^{11} mỗi gốc là như được xác định trên đây. U là axit boric, este của axit boric hoặc trifloboronat. X là brom, iot hoặc triflat. Các hợp chất khởi đầu có công thức (**G-1**), (**G-5**) và (**G6**) là đã biết hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết.

Các phản ứng có thể được thực hiện bằng các quy trình được mô tả trong các tài liệu (tham khảo, ví dụ, Stage G1->G2 US 2013/0012532, p. 29).

Quy trình I-T46

Các hợp chất có công thức (I-T46) có thể được điều chế bằng quy trình được xác định trong sơ đồ phản ứng 13.

Sơ đồ phản ứng 13



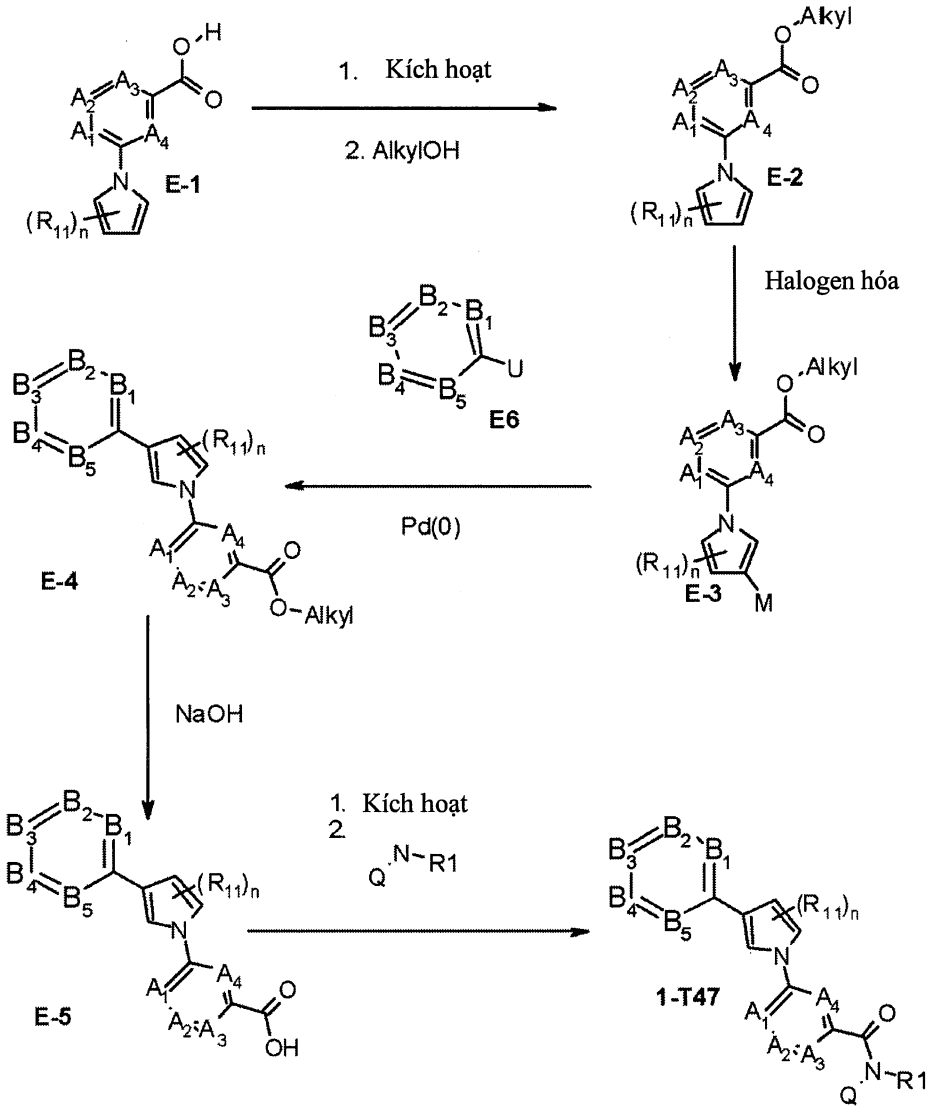
Các gốc A_1-A_4, B_1-B_5, alkyl, Q, R^1 và R^{11} mỗi gốc là như được xác định trên đây. U là axit boric, este của axit boric hoặc trifloboronat. X là brom, iot hoặc triflat. Các hợp chất khởi đầu có công thức (**F-1**) và (**F-5**) là đã biết (ví dụ, F-1: Hulcoop, David G. et al., Organic Letters, 9 (2007), p. 1761-1764) hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết.

Các phản ứng có thể được thực hiện bằng các quy trình được mô tả trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này, ví dụ, US 2009/209476, p. 18-19.

Quy trình I-T47

Các hợp chất có công thức (**I-T47**) có thể được điều chế bằng quy trình được xác định trong sơ đồ phản ứng 14.

Sơ đồ phản ứng 14



Các gốc A_1-A_4, B_1-B_5, alkyl, Q, R^1 và R^{11} mỗi gốc là như được xác định trên đây. U là brom, iot hoặc triflat khi M là axit boric, este của axit boric hoặc

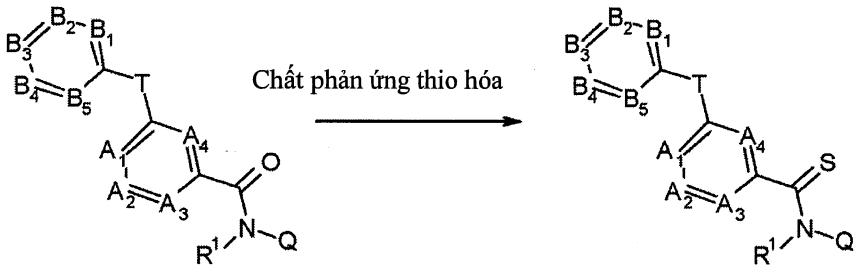
trifloboronat. U là axit boric, este của axit boric hoặc trifloboronat khi M là brom, iot hoặc triflat. Các hợp chất khởi đầu có công thức (**E-1**) và (**E-6**) là đã biết (ví dụ, Liu, Kun et al., Journal of Medicinal Chemistry, 51 (2008), p. 7843-7854; hoặc Cornet, Stephanie M. et al., Transactions, (2003), p. 4395-4405), hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết.

Các phản ứng có thể được thực hiện bằng các quy trình được mô tả trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này, ví dụ, US 2009/209476, p. 18-19.

Quy trình điều chế các thioamit

Các hợp chất có công thức (**Ii**) có thể được điều chế bằng quy trình được xác định trong sơ đồ phản ứng 15 từ các hợp chất có công thức (**Ih**) qua phản ứng với các chất phản ứng chuyển lưu huỳnh.

Sơ đồ phản ứng 15:



(Ih) (2) (Ii)

Các gốc từ A_1-A_4, B_1-B_5, alkyl, Q, T và R^1 mỗi gốc là như được xác định trên đây. Chất phản ứng thio hóa (**2**) được sử dụng có thể là, ví dụ, P_4S_{10} hoặc thuốc thử Lawesson (2,4-bis(4-metoxyphenyl)-1,3,2,4-dithiadiphosphetan 2,4-disulphit).

Việc điều chế các hợp chất (**Ih**) được mô tả trên đây.

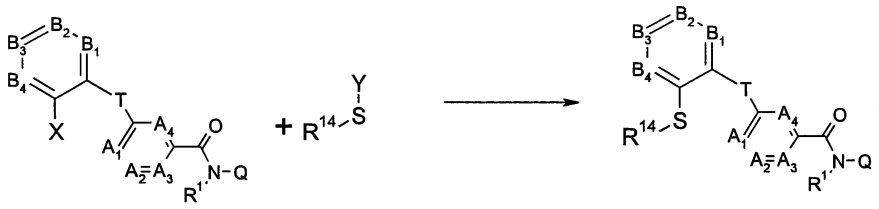
Các chất phản ứng thio hóa sẵn có trên thị trường hoặc có thể được điều chế bằng các quy trình mà người có hiểu biết trung bình về lĩnh vực này đã biết hoặc theo cách tương tự với các quy trình này.

Phản ứng được thực hiện theo cách tương tự với các phương pháp đã biết trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật đối với việc thio hóa các cacbonamit (ví dụ, WO2012056372, p. 77; WO2003066050, p. 31).

Quy trình điều chế (Ik)

Các hợp chất (**Ik**) theo sáng chế có thể được điều chế bằng quy trình được xác định trong sơ đồ phản ứng 16 từ các hợp chất (**Ij**) qua phản ứng với các hợp chất lưu huỳnh có công thức (**Y-3**).

Sơ đồ phản ứng 16



(Ij) (Y-3) **(Ik)**

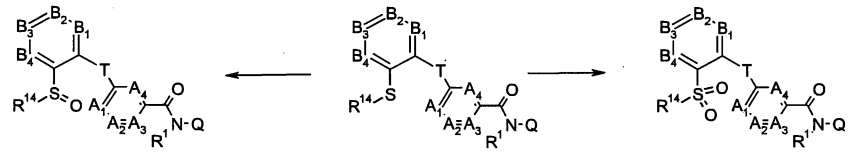
Các gốc từ A_1 đến A_4, B_1 đến B4, alkyl, Q, R^1, n và R^{11} mỗi gốc là như được xác định trên đây. X là nhóm rời chuyển thích hợp, ví dụ, flo, clo, brom hoặc iot. R^{14} là C_1-C_6-alkyl tùy ý được thế. Y là hydro hoặc kim loại kiềm, ví dụ, natri hoặc lithi.

Phản ứng được thực hiện theo cách tương tự với các phương pháp đã biết trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật đối với việc đưa các gốc alkylthio vào các hệ thơm [ví dụ, Organometallics 1989, 8(5), 1303-1308; WO1998056761, Example 63, p. 97].

Quy trình điều chế (Ika) và (Ikb)

Các hợp chất (**Ika**) và (**Ikb**) theo sáng chế có thể được điều chế bằng quy trình được xác định trong sơ đồ phản ứng 17 từ các hợp chất có công thức (Ik) qua phản ứng với các chất phản ứng oxy hóa.

Sơ đồ phản ứng 17:



(Ika) **(Ik)** **(Ikb)**

Các gốc từ A_1 đến A_4, B_1 đến B4, alkyl, Q, R^1, n và R^{11} mỗi gốc là như được xác định trên đây. R^{14} là C_1-C_6-alkyl tùy ý được thế.

Việc điều chế các hợp chất có công thức (**Ik**) được mô tả trên đây.

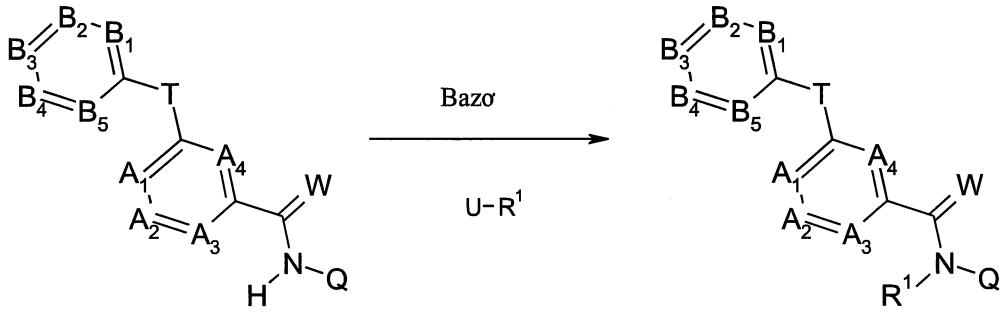
Các tác nhân oxy hóa được sử dụng có thể là các chất phản ứng đã biết đối với người có hiểu biết trung bình về lĩnh vực này từ các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật đối với việc điều chế các sulphoxit và các sulphon. Các hợp chất này sẵn có trên thị trường hoặc có thể được điều chế bằng các quy trình mà người có hiểu biết trung bình về lĩnh vực này đã biết hoặc theo cách tương tự với các quy trình này. Các ví dụ bao gồm: hydro peroxit, axit peroxyaxetic, axit 3-cloperbenzoic và axit trifloperoxyaxetic.

Phản ứng được thực hiện theo cách tương tự với các phương pháp đã biết trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật đối với việc điều chế các sulphoxit và các sulphon [các dẫn xuất của sulphoxit: WO2006/097766; WO2005/019151; các dẫn xuất của sulphon: WO2008/125214; WO2005/121087].

Quy trình điều chế các hợp chất N-alkyl

Các hợp chất có công thức (**I**) có thể được điều chế bằng quy trình được xác định trong sơ đồ phản ứng 18 từ các hợp chất có công thức (**Im**) qua phản ứng với các tác nhân alkyl hóa.

Sơ đồ phản ứng 18:



(Im) **(I)**

Các gốc từ A_1-A_4, B_1-B_5, alkyl và Q mỗi gốc là như được xác định trên đây. Ví dụ, U là brom, iot hoặc triflat. R^1 trong mỗi trường hợp là C_1-C_6-alkyl, C_3-C_6-alkenyl, C_3-C_6-alkynyl, C_4-C_7-xycloalkyl, C_1-C_6-alkylcacbonyl, C_1-C_6-alkoxycacbonyl, aryl-(C_1-C_3)-alkyl, heteroaryl-(C_1-C_3)-alkyl tùy ý được thế bậc một hoặc bậc hai. W là oxy.

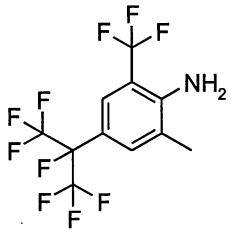
Các hợp chất có công thức U-R^1 sẵn có trên thị trường hoặc đã biết trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật hoặc có thể được điều chế tương tự theo các phương pháp đã biết trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này. Các ví dụ bao gồm: metyl clorua, metyl bromit, metyl iodua, dimetyl sulphat, metyl triflat, etyl bromit, etyl iodua, dietyl sulphat và etyl triflat.

Các bazơ được sử dụng trong phản ứng này sẵn có trên thị trường. Các ví dụ bao gồm các hợp chất kim loại kiềm thổ và kim loại kiềm (ví dụ, các hydroxit, các hydrua, các oxit và các cacbonat của lithi, natri, kali, magie, canxi và bari), ví dụ, natri hydrua, natri hydroxit và kali hydroxit; các cacbonat như natri hydrocacbonat và kali cacbonat.

Phản ứng được thực hiện theo cách tương tự với các phương pháp đã biết trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật đối với việc N-alkyl hóa các amit bậc hai (ví dụ, G.L. Gisele, A. Lüttringhaus, Synthesis (1971) p. 266, về vấn đề tổng quan, tham khảo: B.C. Challis, J.A. Challis in: The Chemistry of Functional Groups, The Chemistry of Amits, S. Patai, J. Zabicky, editors, Interscience Publishers, London, 1970, p. 734 ff).

Điều chế nguyên liệu khởi đầu 4-heptafloisopropyl-2-metyl-6-triflometylanilin

Cho đến nay, nguyên liệu khởi đầu 4-heptafloisopropyl-2-metyl-6-triflometylanilin có công thức (**D-1a**) chưa được mô tả trong các tài liệu. Việc điều chế có thể được tiến hành bằng 2 quy trình khác nhau.

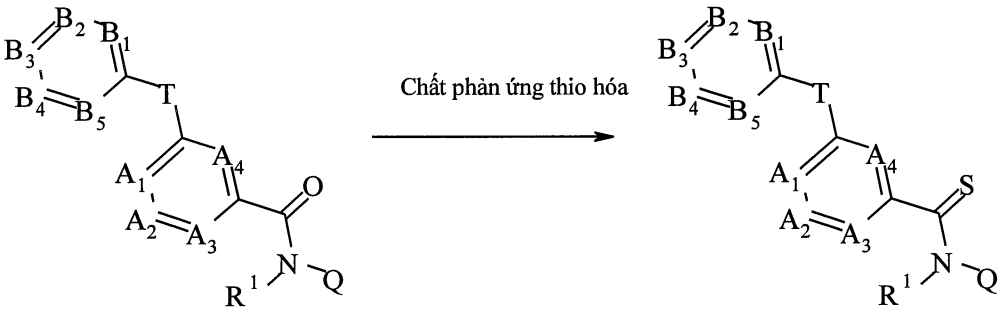


D-1a

Quy trình điều chế các thioamit

Các hợp chất có công thức (**Ii**) có thể được điều chế bằng quy trình được mô tả trong Sơ đồ phản ứng 15 từ các hợp chất có công thức (**Ih**) bằng cách phản ứng với các chất phản ứng chuyển lưu huỳnh.

Sơ đồ phản ứng 15



(Ih) (2) (Ii)

Các gốc từ A_1-A_4, B_1-B_5, alkyl, Q, T, và R^1 mỗi gốc là như được xác định trên đây. Các chất phản ứng thio hóa (**2**) được sử dụng có thể là, ví dụ, P_4S_{10} hoặc thuốc thử Lawesson (2,4-bis(4-metoxyphenyl)-1,3,2,4-dithiadiphosphetan 2,4-disulphit).

Việc điều chế các hợp chất (**Ih**) được mô tả trên đây.

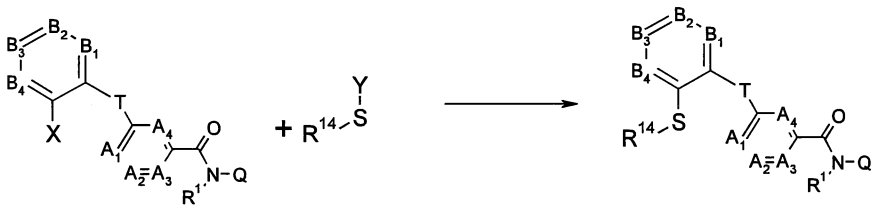
Các chất phản ứng thio hóa sẵn có trên thị trường hoặc có thể được điều chế bằng các quy trình mà người có hiểu biết trung bình về lĩnh vực này đã biết hoặc theo cách tương tự với các quy trình này.

Phản ứng được thực hiện theo cách tương tự với các phương pháp đã biết trong tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này đối với việc thio hóa các cacbonamit (ví dụ, WO2012056372, p. 77; WO2003066050, p. 31).

Quy trình điều chế (Ik)

Các hợp chất (**Ik**) theo sáng chế có thể được điều chế bằng quy trình được xác định trong sơ đồ phản ứng 16 từ các hợp chất (**Ij**) bằng cách phản ứng với các hợp chất lưu huỳnh có công thức (**Y-3**).

Sơ đồ phản ứng 16



(Ij) (Y-3) **(Ik)**

Các gốc từ A_1 đếnA_4, B_1 đến B4, alkyl, Q, R^1, n và R^{11} mỗi gốc là như được xác định trên đây. X là nhóm rời chuyển thích hợp, ví dụ, flo, clo, brom hoặc iot. R^{14} là C_1-C_6-alkyl tùy ý được thế. Y là hydro hoặc kim loại kiềm, ví dụ, natri hoặc lithi.

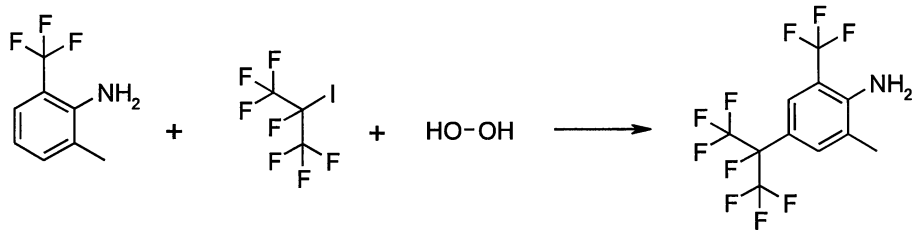
Phản ứng được thực hiện theo cách tương tự với các phương pháp đã biết trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật đối với việc đưa các gốc alkylthio vào các hợp chất thơm [ví dụ, Organometallics 1989, 8(5), 1303-1308; WO1998056761, Example 63, p. 97].

Quy trình 1:

4-Heptafloisopropyl-2-metyl-6-triflometylanilin có công thức (**K-1**) có thể được điều chế từ 2-metyl-6-triflometylanilin bằng quy trình được mô tả trong sơ đồ

phản ứng 1, bằng cách phản ứng với heptafloisopropyl iodua với sự có mặt của hydro peroxit.

Sơ đồ phản ứng 4



K-1

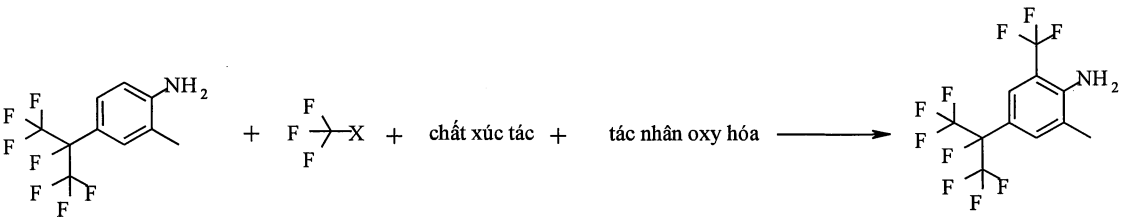
2-metyl-6-triflometylanilin là đã biết trong tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này (John P. Chupp, Terry M. Balthazor, Michael J. Miller, và Mark J. Pozzo, J. Org. Chem. 49 (1984),4711-4716 hoặc Thomas E. Nickson J. Org. Chem. 51 (1986) 3903-3904), và heptafloisopropyl iodua sẵn có trên thị trường.

Phản ứng được thực hiện theo cách tương tự với các quy trình đã biết đối với việc triflometyl hóa các hợp chất thơm (Tatsuhito Kino, Yu Nagase, Yuhki Ohtsuka, Kyoko Yamamoto, Daisuke Uraguchi,Kenji Tokuhisa và Tetsu Yamakawa, Journal of Flo Chemistry 131 (2010) 98–105).

Quy trình 2

Ngoài ra, 4-heptafloisopropyl-2-metyl-6-triflometylanilin có công thức (**K-1**) có thể được điều chế từ 4-heptafloisopropyl-2-metylanilin bằng quy trình được mô tả trong sơ đồ 2, bằng cách phản ứng với natri triflometylsulphinat với sự có mặt của các tác nhân oxy hóa và các chất xúc tác kim loại chuyển tiếp.

Sơ đồ phản ứng 5



D-1a

X là Br, I, $NaSO_2^-$ (natri triflometylsulphinat), KSO_2^- (kali triflometylsulphinat). Được đặc biệt ưu tiên là natri triflometylsulphinat.

4-Heptafloisopropyl-2-metylanilin là đã biết (US2004/92762).

Các chất xúc tác thích hợp là các kim loại chuyển tiếp như sắt(II) sulphat, sắt(III) nitrat, đồng(II) triflat hoặc feroxen. Được đặc biệt ưu tiên là sắt(II) sulphat.

Các tác nhân oxy hóa thích hợp là, đặc biệt, các peroxit như hydro peroxit, tert-butyl hydroperoxit hoặc natri peroxodisulphat, kali peroxodisulphat, natri peroxomonosulphat hoặc kali peroxomonosulphat. Được đặc biệt ưu tiên là tert-butyl hydroperoxit.

Khi tiến hành phản ứng, các dung môi thích hợp có thể được sử dụng.

Các chất pha loãng hoặc dung môi hữu dụng để tiến hành các quy trình theo sáng chế về nguyên tắc bao gồm tất cả các dung môi hữu cơ trơ trong các điều kiện phản ứng cụ thể. Các ví dụ bao gồm: các nitril như axetonitril, propionitril, butyronitril, isobutyronitril; nước, tetrahydrothiophen dioxit, dimetyl sulphoxit, tetrametylen sulphoxit, dipropyl sulphoxit, diisobutyl sulphoxit, dibutyl sulphoxit, diisoamyl sulphoxit, các sulphon (ví dụ, dimetyl, dietyl, dipropyl, dibutyl, dihexyl, metyl etyl, etyl propyl, etyl isobutyl và pentametylen sulphon); các hydrocacbon béo, vòng béo (ví dụ, pentan, hexan, heptan, octan, nonan và các hydrocacbon kỹ thuật), và cả các chất được gọi là "xăng trắng" có các cấu tử có các điểm sôi nằm trong khoảng từ, ví dụ, 40°C đến 250°C, các phân đoạn dầu mỏ có điểm sôi nằm trong khoảng từ 70°C đến 190°C, xyclohexan, metylxyclohexan, ete dầu mỏ, ligroin, octan.

Các chất pha loãng được ưu tiên sử dụng có thể là dung môi bất kỳ mà không làm ảnh hưởng bất lợi đến phản ứng, ví dụ, nước; các nitril như axetonitril, propionitril, butyronitril, isobutyronitril. Các dung môi này có thể được sử dụng dưới dạng riêng rẽ hoặc kết hợp 2 hoặc nhiều dung môi.

Các bazơ có thể được sử dụng trong các phản ứng này. Các ví dụ bao gồm các hợp chất kim loại kiềm thổ hoặc kim loại kiềm (ví dụ, hydroxit, các hydrua, các oxit và các cacbonat của lithi, natri, kali, magie, canxi và bari).

Phản ứng có bổ sung bazơ được ưu tiên dùng có thể là natri hydrocacbonat; ngoài ra, có thể sử dụng các bazơ sau, ví dụ,: các hydroxit kim loại kiềm, ví dụ, natri hydroxit và kali hydroxit; các cacbonat như natri hydrocacbonat và kali cacbonat; các phosphat như natri dihydrophosphat, dikali hydrophosphat và trinatri phosphat.

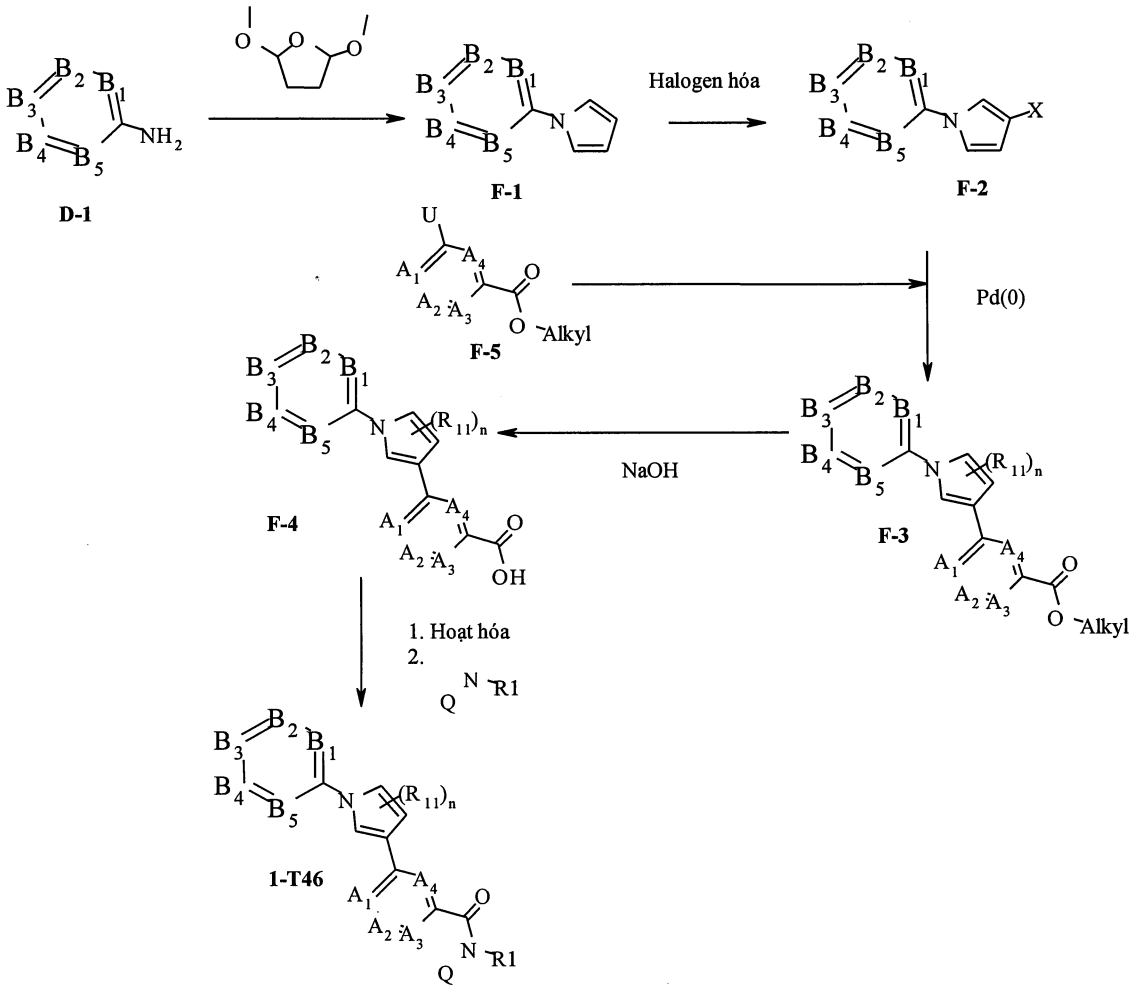
Phản ứng có thể được thực hiện trong khoảng nhiệt độ rộng. Thông thường, phản ứng được thực hiện ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ -78 đến 200°C, tốt hơn là ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ -10 đến 150°C. Phản ứng có thể được thực hiện ở áp suất cao hoặc áp suất giảm. Tuy nhiên, tốt hơn là phản ứng được thực hiện ở áp suất tiêu chuẩn. Thời gian phản ứng nằm trong khoảng từ 0,1 đến 72 giờ, tốt hơn là nằm trong khoảng từ 1 đến 24 giờ.

Để thực hiện phản ứng này, 1 đến 10 mol, tốt hơn là 1 đến 4 mol tác nhân triflometyl hóa; 1 đến 20 mol, tốt hơn là 1 đến 8 mol tác nhân oxy hóa và 0,01 đến 1 mol, tốt hơn là 0,05 đến 0,4 mol chất xúc tác trên một mol của 4-heptafloisopropyl-2-metyl-6-triflometylanilin được dùng trong dung môi hoặc hỗn hợp dung môi, ví dụ, trong hỗn hợp của axetonitril và nước.

Quy trình I-T46 kéo dài

Các hợp chất có công thức (I-T46) có thể được điều chế bằng quy trình được xác định trong Sơ đồ phản ứng.

Sơ đồ phản ứng 6

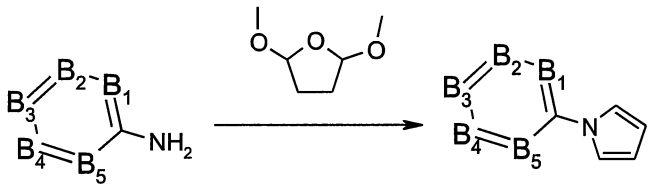


Các gốc từ A_1-A_4, B_1-B_5, alkyl, Q, R^1 và R^{11} mỗi gốc là như được xác định trên đây. U là axit boric, este của axit boric hoặc trifloboronat. X là brom, iot hoặc triflat. Các hợp chất khởi đầu có công thức (**F-1**) và (**F-5**) là đã biết (ví dụ, **F-1**: Hulcoop, David G. et al., Organic Letters, 9 (2007), p. 1761-1764, Supporting information pages 1 ff.), hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết (ví dụ, từ **D1**).

Các phản ứng có thể được thực hiện bằng các quy trình được mô tả trong các tài liệu, ví dụ, US2009/209476, p. 18-19.

Giai đoạn1 Đóng vòng pyrol

Giai đoạn1 là quy trình điều chế các hợp chất theo sáng chế (**I-T46**):

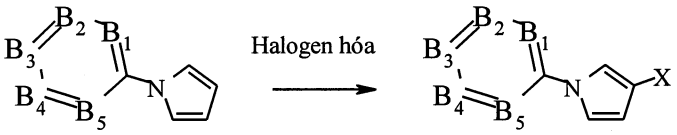


D-1 F-1b F-1

Các hợp chất theo sáng chế có công thức chung (**F-1**) có thể được điều chế tương tự theo các phương pháp đã biết trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này từ các nguyên liệu khởi đầu có công thức (**D-1**) và (**F-1b**). Các gốc từ B^1-B^5 mỗi gốc là như được xác định trên đây. Các hợp chất có các công thức (**D-1**) là đã biết trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật (ví dụ, US2002/198399, WO2009/30457, page 28) hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này. Hợp chất (**F1-b**) sẵn có trên thị trường. Các đại diện điển hình của các hợp chất có công thức (**D-1**) bao gồm 2-amino-1,3-diclo-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]benzen, 2-amino-1,3-dimetyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)-etyl]benzen, 2-amino-1-etyl-3-metyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]benzen, 2-amino-1-clo-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-3-(triflometyl)benzen, 2-amino-1-metyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-3-(triflometyl)benzen, 2- amino -1-clo-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-3-(triflometoxy)benzen, 2-amino-1-metyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-3-(triflometoxy)benzen. Phản ứng được thực hiện trong các điều kiện đã biết với các hợp chất tương tự trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này (ví dụ, Hulcoop, David G. et al., Organic Letters, 9 (2007), p. 1761-1764, Supporting information pages 1 ff.)

Giai đoạn 2 halogen hóa

Giai đoạn 2 của quy trình điều chế các hợp chất theo sáng chế (**I-T46**):



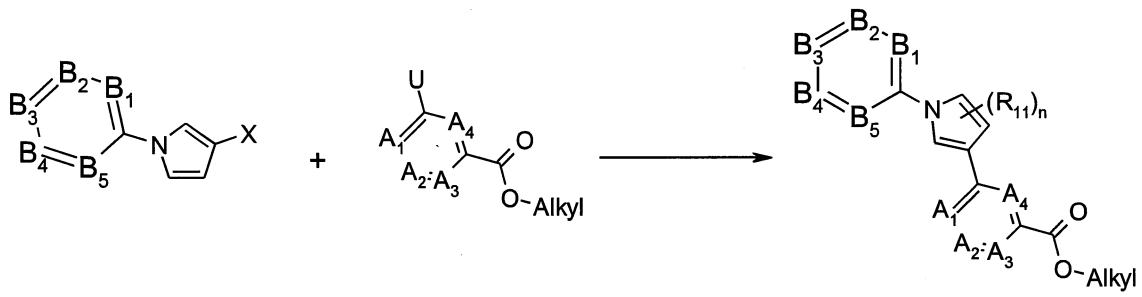
F-1 F-2

Các hợp chất theo sáng chế có công thức chung (**F-2**) có thể được điều chế theo cách tương tự với các phương pháp đã biết trong tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này từ các nguyên liệu khởi đầu có công thức (**F-1**) bằng cách halogen hóa. Các gốc từ B^1-B^5 mỗi gốc là như được xác định trên đây. Các hợp chất có các công thức (**F-1**) là đã biết trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật (ví dụ, F-1: Hulcoop, David G. et al., Organic Letters, 9 (2007), p. 1761-1764, Supporting information page 1 ff.) hoặc có thể được điều chế bằng phương pháp được mô tả trên đây. Các đại diện điển hình của các hợp chất có công thức (**F-1**) bao gồm 1-[2,6-diclo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrol, 1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrol, 1-[2-etyl-6-metyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrol, 1-[2-clo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometyl)phenyl]pyrol, 1-[2-metyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometyl)phenyl]pyrol, 1-[1-clo-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometoxy)phenyl]pyrol, 1-[1-metyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometoxy)phenyl]pyrol.

Người có hiểu biết trung bình về lĩnh vực này đã biết các hợp chất halogen hóa thích hợp, ví dụ, brom, iot, N-bromosucxinimit, N-iodosucxinimit, 1,3-dibromo-5,5-dimetylhydantoin và benzyltrimetylammonium tetracloiodat. Ưu tiên là sử dụng brom, iot và iodosucxinimit. Phản ứng được thực hiện trong các điều kiện đã biết trong tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này (ví dụ, Tatsuta; Itoh Bulletin of the Chemical Society of Japan, 67 (1994) 1449-1455).

Giai đoạn 3 kết hợp axit boric

Giai đoạn 3 của quy trình điều chế các hợp chất theo sáng chế (**I-T46**):

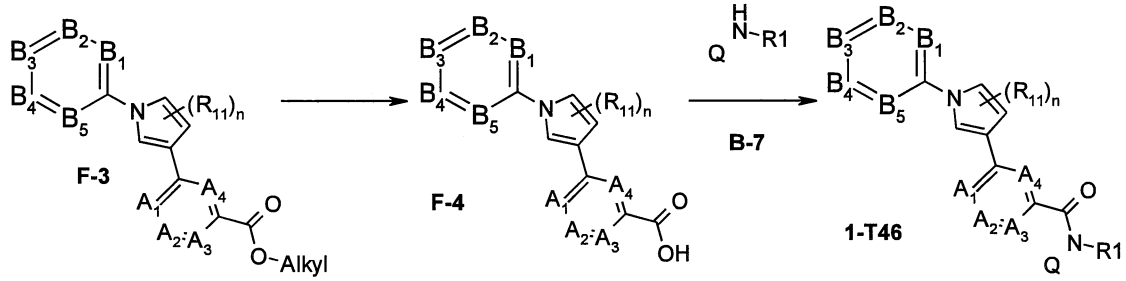


F-2 F-5 F-3

Các gốc từ A_1 đến A_4, B_1 đến B_5, alkyl, n và R^{11} mỗi gốc là như được xác định trên đây. U là, ví dụ, boric acid, este của axit boric hoặc trifloboronat, X là brom, iot hoặc triflat.

Các hợp chất theo sáng chế có công thức chung (**F-3**) có thể được điều chế bằng các quy trình đã biết trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật bằng các phản ứng có xúc tác paladi từ các chất cùng tham gia phản ứng có công thức chung (**F-2**) và (**F-5**) (ví dụ, WO 2005/040110 hoặc WO 2009/089508). Các hợp chất có công thức chung (**F-5**) là sẵn có trên thị trường hoặc có thể được điều chế bằng các quy trình mà người có hiểu biết trung bình về lĩnh vực này đã biết.

Các giai đoạn 4, 5 Quá trình thủy phân, amit hóa



Các hợp chất theo sáng chế có công thức chung (**I-T46**) có thể được điều chế theo cách tương tự với các phương pháp ghép mạch peptit đã biết trong tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này từ các nguyên liệu khởi đầu (**F-4**) và (**B-7**) (ví dụ, WO 2010/051926 hoặc WO 2010/133312). Các hợp chất có công thức chung (**F-4**) có thể được điều chế tương tự theo các quy trình đã biết trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này bằng cách thủy phân este từ các hợp chất có công thức chung (**F-3**) (ví dụ, trong tài liệu WO 2010/051926 hoặc WO 2010/133312). Các gốc từ A_1 đến A_4, B_1 đến B_5, alkyl, Q, R^1 và R^{11} mỗi gốc là như được xác định trên đây.

Q

Theo một phương án được ưu tiên hơn, Q trong hợp chất có công thức (I) hoặc (Ia‘‘) hoặc (IT-2) hoặc (I-T3) hoặc (I-T4) hoặc (I-T22) hoặc (I-T23) hoặc (I-T46) là C_1-C_4-alkyl, 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetylamino)etyl, C_1-C_4-alkyl được thế flo hoặc 1-xyanopropyl- hoặc pyridin như 2,2,2-trifloetyl, 2,2-difloetyl, 3,3,3-triflopropyl, pyridin-2-ylmetyl hoặc (1-xyanoxyclopropyl)metyl; C_3-C_4-xycloalkyl như xyclopropyl hoặc xyclobutyl; C_3-C_4-xycloalkyl tùy ý được thế như xyclopropyl được thế C_1-C_4-alkyl tùy ý được thế flo (ví dụ, 1-triflometyl-xyclopropyl, 1-tert-butylxyclopropyl), 1-thiocarbamoylxyclopropyl, 1-carbamoylxyclopropyl, 1-xyanoxyclopropyl, trans-2-floxyclopropyl, cis-2-floxyclopropyl; C_4-C_6-heteroxycloalkyl như oxetan-3-yl, thietan-3-yl, 1-oxidothietan-3-yl, hoặc 1,1-dioxidothietan-3-yl; hoặc trong mỗi trường hợp tùy ý là benzyl được thế C_1-C_4-alkyl; pyrazol (như N-metylpyrazol-3-yl), pyridin; metylsulphonyl; hoặc 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetylamino)etyl.

Theo phương án được đặc biệt ưu tiên, Q trong hợp chất có công thức (I) hoặc (Ia‘‘) hoặc (IT-2) hoặc (I-T3) hoặc (I-T4) hoặc (I-T22) hoặc (I-T23) hoặc (I-T46) là C_1-C_3-alkyl được thế flo như 2,2,2-trifloetyl hoặc 3,3,3-triflopropyl; xyclopropyl; tùy ý xyano-, xyclopropyl được thế C_1-C_4-alkyl như 1-xyanoxyclopropyl hoặc 1-triflometylxyclopropyl; thietan-3-yl; hoặc 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetyl)aminoetyl.

Công thức (I)

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó T là T2, T3, T4, T22, T23 hoặc T46 và tất cả các thông số khác là như được xác định ở đoạn [9].

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó T là T2, T3, T4, T22, T23 hoặc T46 và tất cả các thông số khác là như được xác định ở đoạn [9].

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó T là T2 hoặc T4 và tất cả các thông số khác là như được xác định ở đoạn [9].

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó T là T3 hoặc T46 và tất cả các thông số khác là như được xác định ở đoạn [9].

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó T là T22 hoặc T23 và tất cả các thông số khác là như được xác định ở đoạn [9].

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó T là T2, T3, T4, T22, T23 hoặc T46, B3 là C-R8 và R8 là (C1-C6)-alkyl, (C1-C6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl, mỗi nhóm này được thế, trong đó các phần tử thế được chọn từ halogen và hydroxyl, trong đó ít nhất một phần tử thế là halogen và tất cả các thông số khác là như được xác định ở đoạn [9].

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó T là T2, T3, T4, T22, T23 hoặc T46, B3 là C-R8 và R8 là (C1-C6)-alkyl, (C1-C6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl, mỗi nhóm này được thế, trong đó các phần tử thế được chọn từ halogen và hydroxyl, trong đó ít nhất một phần tử thế là halogen và tất cả các thông số khác là như được xác định ở đoạn [9].

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó T là T2 hoặc T4, B3 là C-R8 và R8 là (C1-C6)-alkyl, (C1-C6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl, mỗi nhóm này được thế, trong đó các phần tử thế được chọn từ halogen và hydroxyl, trong đó ít nhất một phần tử thế là halogen và tất cả các thông số khác là như được xác định ở đoạn [9].

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó T là T3 hoặc T46, B3 là C-R8 và R8 là (C1-C6)-alkyl, (C1-C6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl, mỗi nhóm này được thế, trong đó các phần tử thế được chọn từ halogen và hydroxyl, trong đó ít nhất một phần tử thế là halogen và tất cả các thông số khác là như được xác định ở đoạn [9].

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó T là T22 hoặc T23, B3 là C-R8 và R8 là (C1-C6)-alkyl, (C1-

C6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl, mỗi nhóm này được thế, trong đó các phần tử thế được chọn từ halogen và hydroxyl, trong đó ít nhất một phần tử thế là halogen và tất cả các thông số khác là như được xác định ở đoạn [9]. Trong ngữ cảnh này, theo một phương án được đặc biệt ưu tiên, sáng chế đề cập đến các hợp chất trong đó R^8 là (C1-C6)-alkyl, (C1-C6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl perflo hóa, tốt nhất là (C1-C4)-alkyl, (C1-C4)-alkoxy perflo hóa.

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó T là T2, T3, T4, T22, T23 hoặc T46, B3 là C-R8 và R8 là (C1-C6)-alkyl, (C1-C6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl, mỗi nhóm này được thế, trong đó các phần tử thế được chọn từ halogen và hydroxyl, trong đó ít nhất một phần tử thế là halogen, tốt hơn nữa là trong đó R8 là (C1-C6)-alkyl, (C1-C6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl perflo hóa, tốt nhất là (C1-C4)-alkyl, (C1-C4)-alkoxy perflo hóa, trong đó B_1, B_2, B_4 và B_5 lần lượt là CR^6, CR^7, CR^9 và CR^{10} trong đó mỗi R^6, R^7, R^9 và R^{10} độc lập là H, halogen, xyano, nitro, hoặc C_1-C_4-alkyl, C_3-C_4-xycloalkyl, C_1-C_4-alkoxy, *N*-alkoxyiminoalkyl, C_1-C_4-alkylsulphanyl, C_1-C_4-alkylsulphinyl, C_1-C_4-alkylsulphonyl, *N*-C_1-C_4-alkylamino, *N,N*-di-C_1-C_4-alkylamino, mỗi nhóm này được thế bằng ít nhất một phần tử thế được chọn từ halogen và hydroxyl, trong đó ít nhất một phần tử thế là halogen, và tất cả các thông số khác là như được xác định ở đoạn [9]. Theo phương án được ưu tiên khác, mỗi R^6 và R^{10} là halogen (như Cl, Br hoặc F), mỗi C_1-C_3-alkyl, hoặc mỗi C_1-C_3-alkyl được thế halogen, ví dụ, C_1-C_3-alkyl perflo hóa (perflometyl, perfloetyl hoặc perflopropyl).

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó T là T2, T3, T4, T22, T23 hoặc T46, B3 là C-R8 và R8 là (C1-C6)-alkyl, (C1-C6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl, mỗi nhóm này được thế, trong đó các phần tử thế được chọn từ halogen và hydroxyl, trong đó ít nhất một phần tử thế là halogen, tốt hơn nữa là trong đó R8 là (C1-C6)-alkyl, (C1-C6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl perflo hóa, tốt nhất là (C1-C4)-alkyl, (C1-C4)-alkoxy perflo hóa, trong đó B_1, B_2 và B_4 lần lượt là CR^6, CR^7 và CR^9 và B^5 là N, trong đó mỗi R^6, R^7 và R^9 độc lập là H, halogen, xyano, nitro, hoặc C_1-C_4-alkyl, C_3-C_4-xycloalkyl, C_1-C_4-alkoxy, *N*-alkoxyiminoalkyl, C_1-C_4-alkylsulphanyl, C_1-C_4-alkylsulphinyl, C_1-C_4-alkylsulphonyl,

N-C_1-C_4-alkylamino, *N,N*-di-C_1-C_4-alkylamino, mỗi nhóm này được thế bằng ít nhất một phần tử thế được chọn từ halogen và hydroxyl, trong đó ít nhất một phần tử thế là halogen, và tất cả các thông số khác là như được xác định ở đoạn [9].

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó T là T2, T3, T4, T22, T23 hoặc T46, B3 là C-R8 và R8 là (C1-C6)-alkyl, (C1-C6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl, mỗi nhóm này được thế, trong đó các phần tử thế được chọn từ halogen và hydroxyl, trong đó ít nhất một phần tử thế là halogen, tốt hơn nữa là trong đó R8 là (C1-C6)-alkyl, (C1-C6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl perflo hóa, tốt nhất là (C1-C4)-alkyl, (C1-C4)-alkoxy perflo hóa, trong đó B_1, B_2, B_4 và B_5 lần lượt là CR^6, CR^7, CR^9 và CR^{10} trong đó mỗi R^6, R^7, R^9 và R^{10} độc lập là H, halogen, xyano, nitro, hoặc C_1-C_4-alkyl, C_3-C_4-xycloalkyl, C_1-C_4-alkoxy, *N*-alkoxyiminoalkyl, C_1-C_4-alkylsulphanyl, C_1-C_4-alkylsulphinyl, C_1-C_4-alkylsulphonyl, *N*-C_1-C_4-alkylamino, *N,N*-di-C_1-C_4-alkylamino, mỗi nhóm này được thế bằng ít nhất một phần tử thế được chọn từ halogen và hydroxyl, trong đó ít nhất một phần tử thế là halogen, mỗi R^{11} độc lập là H, amino (NH_2) hoặc xyano, tốt hơn là H, W là O, R^1 là H, metyl, etyl, n-propyl, isopropyl, n-butyl, isobutyl, s-butyl, t-butyl,tốt hơn là H hoặc metyl, và tất cả các thông số khác là như được xác định ở đoạn [9]. Theo phương án được ưu tiên khác, mỗi R^6 và R^{10} là halogen (như Cl, Br hoặc F), mỗi C_1-C_3-alkyl, hoặc mỗi C_1-C_3-alkyl được thế halogen, ví dụ, C_1-C_3-alkyl perflo hóa (perflometyl, perfloetyl hoặc perflopropyl).

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó T là T2, T3, T4, T22, T23 hoặc T46, B3 là C-R8 và R8 là (C1-C6)-alkyl, (C1-C6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl, mỗi nhóm này được thế, trong đó các phần tử thế được chọn từ halogen và hydroxyl, trong đó ít nhất một phần tử thế là halogen, tốt hơn nữa là trong đó R8 là (C1-C6)-alkyl, (C1-C6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl perflo hóa, tốt nhất là (C1-C4)-alkyl, (C1-C4)-alkoxy perflo hóa, trong đó B_1, B_2 và B_4 lần lượt là CR^6, CR^7 và CR^9 và B^5 là N, trong đó mỗi R^6, R^7 và R^9 độc lập là H, halogen, xyano, nitro, hoặc C_1-C_4-alkyl, C_3-C_4-xycloalkyl, C_1-C_4-alkoxy, *N*-alkoxyiminoalkyl, C_1-C_4-alkylsulphanyl, C_1-C_4-alkylsulphinyl, C_1-C_4-alkylsulphonyl, *N*-C_1-C_4-alkylamino, *N,N*-di-C_1-C_4-alkylamino, mỗi nhóm này được thế bằng ít nhất

một phần tử thế được chọn từ halogen và hydroxyl, trong đó ít nhất một phần tử thế là halogen, mỗi R^{11} độc lập là H, amino (NH_2) hoặc xyano,tốt hơn là H, W là O, R^1 là H, metyl, etyl, n-propyl, isopropyl, n-butyl, isobutyl, s-butyl, t-butyl,tốt hơn là H hoặc metyl, và tất cả các thông số khác là như được xác định ở đoạn [9].

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó T là T2, T3, T4, T22, T23 hoặc T46, B3 là C-R8 và R8 là (C1-C6)-alkyl, (C1-C6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl, mỗi nhóm này được thế, trong đó các phần tử thế được chọn từ halogen và hydroxyl, trong đó ít nhất một phần tử thế là halogen, tốt hơn nữa là trong đó R8 là (C1-C6)-alkyl, (C1-C6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl perflo hóa, tốt nhất là (C1-C4)-alkyl, (C1-C4)-alkoxy perflo hóa, trong đó B_1, B_2, B_4 và B_5 lần lượt là CR^6, CR^7, CR^9 và CR^{10} trong đó mỗi R^6, R^7, R^9 và R^{10} độc lập là H, halogen, xyano, nitro, hoặc C_1-C_4-alkyl, C_3-C_4-xycloalkyl, C_1-C_4-alkoxy, *N*-alkoxyiminoalkyl, C_1-C_4-alkylsulphanyl, C_1-C_4-alkylsulphinyl, C_1-C_4-alkylsulphonyl, *N*-C_1-C_4-alkylamino, *N,N*-di-C_1-C_4-alkylamino, mỗi nhóm này được thế bằng ít nhất một phần tử thế được chọn từ halogen và hydroxyl, trong đó ít nhất một phần tử thế là halogen, mỗi R^{11} độc lập là H, amino (NH_2) hoặc xyano,tốt hơn là H, W là O, R^1 là H, metyl, etyl, n-propyl, isopropyl, n-butyl, isobutyl, s-butyl, t-butyl,tốt hơn là H hoặc metyl, Q là C_1-C_4-alkyl, 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetylamino)etyl, C_1-C_4-alkyl được thế flo hoặc 1-xyanopropyl- hoặc pyridin như 2,2,2-trifloetyl, 2,2-difloetyl, 3,3,3-triflopropyl, pyridin-2-ylmetyl hoặc (1-xyanoxyclopropyl)metyl; C_3-C_4-xycloalkyl như xyclopropyl hoặc xyclobutyl; C_3-C_4-xycloalkyl tùy ý được thế như xyclopropyl được thế C_1-C_4-alkyl tùy ý được thế flo (ví dụ, 1-triflometylxyclopropyl, 1-tert-butylxyclopropyl), 1-thiocarbamoylxyclopropyl, 1-carbamoylxyclopropyl, 1-xyanoxyclopropyl, trans-2-floxyclopropyl, cis-2-floxyclopropyl; C_4-C_6-heteroxycloalkyl như oxetan-3-yl, thietan-3-yl, 1-oxidothietan-3-yl, hoặc 1,1-dioxidothietan-3-yl; hoặc trong mỗi trường hợp tùy ý là benzyl được thế C_1-C_4-alkyl; pyrazol (như N-metylpyrazol-3-yl), pyridin; metylsulphonyl; hoặc 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetylamino)etyl, tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được thế flo như 2,2,2-trifloetyl hoặc 3,3,3-triflopropyl; xyclopropyl; xyclopropyl tùy ý được thế như 1-xyanoxyclopropyl hoặc 1-triflometylxyclopropyl, thietan-3-yl; hoặc 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetyl)aminoetyl, và tất cả các thông số khác là như được xác định ở đoạn [9]. Theo phương án được ưu tiên

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

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó T là T2, T3, T4, T22, T23 hoặc T46, B3 là C-R8 và R8 là (C1-C6)-alkyl, (C1-C6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl, mỗi nhóm này được thế, trong đó các phần tử thế được chọn từ halogen và hydroxyl, trong đó ít nhất một phần tử thế là halogen, tốt hơn nữa là trong đó R8 là (C1-C6)-alkyl, (C1-C6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl perflo hóa, tốt nhất là (C1-C4)-alkyl, (C1-C4)-alkoxy perflo hóa, trong đó B_1, B_2 và B_4 lần lượt là CR^6, CR^7 và CR^9 và B^5 là N, trong đó mỗi R^6, R^7 và R^9 độc lập là H, halogen, xyano, nitro, hoặc C_1-C_4-alkyl, C_3-C_4-xycloalkyl, C_1-C_4-alkoxy, *N*-alkoxyiminoalkyl, C_1-C_4-alkylsulphanyl, C_1-C_4-alkylsulphinyl, C_1-C_4-alkylsulphonyl, *N*-C_1-C_4-alkylamino, *N,N*-di-C_1-C_4-alkylamino, mỗi nhóm này được thế bằng ít nhất một phần tử thế được chọn từ halogen và hydroxyl, trong đó ít nhất một phần tử thế là halogen, mỗi R^{11} độc lập là H, amino (NH_2) hoặc xyano,tốt hơn là H, W là O, R^1 là H, metyl, etyl, n-propyl, isopropyl, n-butyl, isobutyl, s-butyl, t-butyl,tốt hơn là H hoặc metyl, Q là C_1-C_4-alkyl, 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetylamino)etyl, C_1-C_4-alkyl được thế flo hoặc 1-xyanopropyl- hoặc pyridin như 2,2,2-trifloetyl, 2,2-difloetyl, 3,3,3-triflopropyl, pyridin-2-ylmetyl hoặc (1-xyanoxyclopropyl)metyl; C_3-C_4-xycloalkyl như xyclopropyl hoặc xyclobutyl; C_3-C_4-xycloalkyl tùy ý được thế như xyclopropyl được thế C_1-C_4-alkyl tùy ý được thế flo (ví dụ, 1-triflometylxyclopropyl, 1-tert-butylxyclopropyl), 1-thiocarbamoylxyclopropyl, 1-carbamoylxyclopropyl, 1-xyanoxyclopropyl, trans-2-floxyclopropyl, cis-2-floxyclopropyl; C_4-C_6-heteroxycloalkyl như oxetan-3-yl, thietan-3-yl, 1-oxidothietan-3-yl, hoặc 1,1-dioxidothietan-3-yl; hoặc trong mỗi trường hợp tùy ý là benzyl được thế C_1-C_4-alkyl; pyrazol (như N-metylpyrazol-3-yl), pyridin; metylsulphonyl; hoặc 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetylamino)etyl, tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được thế flo như 2,2,2-trifloetyl hoặc 3,3,3-triflopropyl; xyclopropyl; xyclopropyl tùy ý được thế như 1-xyanoxyclopropyl hoặc 1-triflometylxyclopropyl, thietan-3-yl; hoặc 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetyl)aminoetyl, và tất cả các thông số khác là như được xác định ở đoạn [9].

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó T là T2, T3, T4, T22, T23 hoặc T46, B3 là C-R8 và R8 là (C1-C6)-alkyl, (C1-C6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl, mỗi nhóm này được thế, trong đó các phần tử thế được chọn từ halogen và hydroxyl, trong đó ít nhất một phần tử thế là halogen, tốt hơn nữa là trong đó R8 là (C1-C6)-alkyl, (C1-C6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl perflo hóa, tốt nhất là (C1-C4)-alkyl, (C1-C4)-alkoxy perflo hóa, trong đó B_1, B_2, B_4 và B_5 lần lượt là CR^6, CR^7, CR^9 và CR^{10} trong đó mỗi R^6, R^7, R^9 và R^{10} độc lập là H, halogen, xyano, nitro, hoặc C_1-C_4-alkyl, C_3-C_4-xycloalkyl, C_1-C_4-alkoxy, *N*-alkoxy-iminoalkyl, C_1-C_4-alkylsulphanyl, C_1-C_4-alkylsulphinyl, C_1-C_4-alkylsulphonyl, *N*-C_1-C_4-alkylamino, *N,N*-di-C_1-C_4-alkylamino, mỗi nhóm này được thế bằng ít nhất một phần tử thế được chọn từ halogen và hydroxyl, trong đó ít nhất một phần tử thế là halogen, mỗi R^{11} độc lập là H, amino (NH_2) hoặc xyano,tốt hơn là H, W là O, R^1 là H, metyl, etyl, n-propyl, isopropyl, n-butyl, isobutyl, s-butyl, t-butyl,tốt hơn là H hoặc metyl, Q là C_1-C_4-alkyl, 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetyl-amino)etyl, C_1-C_4-alkyl được thế flo hoặc 1-xyanopropyl- hoặc pyridin như 2,2,2-trifloetyl, 2,2-diflo-etyl, 3,3,3-triflopropyl, pyridin-2-ylmetyl hoặc (1-xyanoxyclopropyl)metyl; C_3-C_4-xycloalkyl như xyclopropyl hoặc xyclobutyl; C_3-C_4-xycloalkyl tùy ý được thế như xyclopropyl được thế C_1-C_4-alkyl tùy ý được thế flo (ví dụ, 1-triflometylxyclopropyl, 1-tert-butylxyclo-propyl), 1-thiocarbamoylxyclopropyl, 1-carbamoylxyclopropyl, 1-xyanoxyclopropyl, trans-2-flo-xyclopropyl, cis-2-floxyclopropyl; C_4-C_6-heteroxycloalkyl như oxetan-3-yl, thietan-3-yl, 1-oxidothietan-3-yl, hoặc 1,1-dioxidothietan-3-yl; hoặc trong mỗi trường hợp tùy ý là benzyl được thế C_1-C_4-alkyl; pyrazol (như N-metylpyrazol-3-yl), pyridin; metylsulphonyl; hoặc 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetylamino)etyl, tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được thế flo như 2,2,2-trifloetyl hoặc 3,3,3-triflopropyl; xyclopropyl; xyclopropyl tùy ý được thế như 1-xyanoxyclopropyl hoặc 1-triflometylxyclopropyl, thietan-3-yl; hoặc 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetyl)-aminoetyl, A_1 là CR^2 hoặc N, A_2 là CR^3 hoặc N, A_3 là CR^4 và A_4 là CR^5 hoặc N, trong đó R^2 là H, C1-C4-alkyl hoặc halogen (như metyl, F, Cl hoặc H), R^3 là H hoặc C1-C4-alkyl halogen hóa (như H hoặc CF_3), R^4 là H, C1-C4-alkyl, C1-C4-alkylamin (như –NH-CH_3), xyclopropylamin, C1-C4-alkoxy (như –O-CH_3), C1-C4-alkoxy-C1-C4-alkylamin (như NH-CH_2-CH_2-O-CH_3) hoặc halogen (như F hoặc Cl). Theo phương án được ưu tiên

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

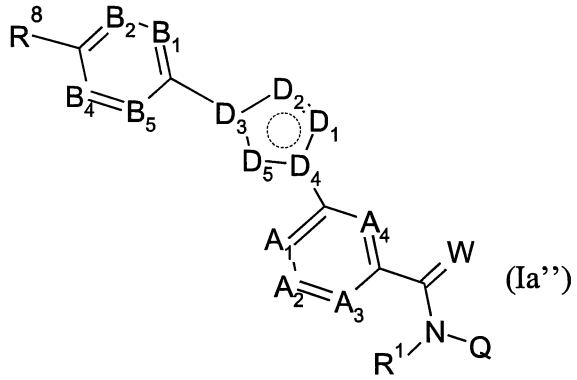
Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó T là T2, T3, T4, T22, T23 hoặc T46, B3 là C-R8 và R8 là (C1-C6)-alkyl, (C1-C6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl, mỗi nhóm này được thế, trong đó các phần tử thế được chọn từ halogen và hydroxyl, trong đó ít nhất một phần tử thế là halogen, tốt hơn nữa là trong đó R8 là (C1-C6)-alkyl, (C1-C6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl perflo hóa, tốt nhất là (C1-C4)-alkyl, (C1-C4)-alkoxy perflo hóa, trong đó B_1, B_2 và B_4 lần lượt là CR^6, CR^7 và CR^9 và B^5 là N, trong đó mỗi R^6, R^7 và R^9 độc lập là H, halogen, xyano, nitro, hoặc C_1-C_4-alkyl, C_3-C_4-xycloalkyl, C_1-C_4-alkoxy, *N*-alkoxyiminoalkyl, C_1-C_4-alkylsulphanyl, C_1-C_4-alkylsulphinyl, C_1-C_4-alkylsulphonyl, *N*-C_1-C_4-alkylamino, *N,N*-di-C_1-C_4-alkylamino, mỗi nhóm này được thế bằng ít nhất một phần tử thế được chọn từ halogen và hydroxyl, trong đó ít nhất một phần tử thế là halogen, mỗi R^{11} độc lập là H, amino (NH_2) hoặc xyano,tốt hơn là H, W là O, R^1 là H, metyl, etyl, n-propyl, isopropyl, n-butyl, isobutyl, s-butyl, t-butyl,tốt hơn là H hoặc metyl, Q là C_1-C_4-alkyl, 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetylamino)etyl, C_1-C_4-alkyl được thế flo hoặc 1-xyanopropyl- hoặc pyridin như 2,2,2-trifloetyl, 2,2-difloetyl, 3,3,3-triflopropyl, pyridin-2-ylmetyl hoặc (1-xyano-xyclopropyl)metyl; C_3-C_4-xycloalkyl như xyclopropyl hoặc xyclobutyl; C_3-C_4-xycloalkyl tùy ý được thế như xyclopropyl được thế C_1-C_4-alkyl tùy ý được thế flo (ví dụ, 1-triflometylxyclopropyl, 1-tert-butylxyclopropyl), 1-thiocarbamoylxyclopropyl, 1-carbamoyl-xyclopropyl, 1-xyanoxyclopropyl, trans-2-floxyclopropyl, cis-2-floxyclopropyl; C_4-C_6-hetero-xycloalkyl như oxetan-3-yl, thietan-3-yl, 1-oxidothietan-3-yl, hoặc 1,1-dioxidothietan-3-yl; hoặc trong mỗi trường hợp tùy ý là benzyl được thế C_1-C_4-alkyl; pyrazol (như N-metylpyrazol-3-yl), pyridin; metylsulphonyl; hoặc 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetylamino)etyl, tốt hơn là C_1-C_3-alkyl được thế flo như 2,2,2-trifloetyl hoặc 3,3,3-triflopropyl; xyclopropyl; xyclopropyl tùy ý được thế như 1-xyanoxyclopropyl hoặc 1-triflometylxyclopropyl, thietan-3-yl; hoặc 2-oxo-2-(2,2,2-trifloetyl)aminoetyl, A_1 là CR^2 hoặc N, A_2 là CR^3 hoặc N, A_3 là CR^4 và A_4 là CR^5 hoặc N, trong đó R^2 là H, C1-C4-alkyl hoặc halogen (như metyl, F, Cl hoặc H), R^3 là H hoặc C1-C4-alkyl halogen

hóa (như H hoặc $–CF_3$), R^4 là H, C1-C4-alkyl, C1-C4-alkylamin (như $–NH-CH_3$), xyclopropylamin, C1-C4-alkoxy (như $–O-CH_3$), C1-C4-alkoxy-C1-C4-alkylamin (như $NH-CH_2-CH_2-O-CH_3$) hoặc halogen (như F hoặc Cl).

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

Công thức (Ia'')

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



(Ia'')

trong đó một D được chọn từ D1 và D2 là N và D tương ứng khác được chọn từ D1 và D2 là O; hoặc D4 là N và một D được chọn từ D1 và D5 là N; hoặc D3 là N và mỗi D1, D2 và D5 là C-R11 và D4 là C, và tất cả các thông số khác là như được xác định ở đoạn [12].

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (Ia'') trong đó R8 là (C1-C6)-alkyl, (C1-C6)-alkoxy hoặc alkylsulphanyl, mỗi nhóm này được thế, trong đó các phần tử thế được chọn từ halogen và hydroxyl, trong đó ít nhất một phần tử thế là halogen, và một D được chọn từ D1 và D2 là N và D tương ứng khác được chọn từ D1 và D2 là O; hoặc D4 là N và một D được chọn từ D1 và D5 là N; hoặc D3 là N và mỗi D1, D2 và D5 là C-R11 và D4 là C, và tất cả các thông số khác là như được xác định ở đoạn [12].

Theo một phương án được ưu tiên không nhiều hơn một (1) gốc từ B_1 đến B_5 là N (nói cách khác: một (1) gốc từ B_1 đến B_5 là N); hoặc không (0) gốc nào từ B_1 đến B_5 là N (mỗi gốc từ B_1 đến B_5 là CR^6, CR^7, CR^8, CR^9 và CR^{10}).

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

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

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

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

Theo phương án được ưu tiên khác, mỗi R^6 và R^{10} là một phần tử thế được chọn từ halogen (tốt hơn là Cl, Br hoặc F), C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkyl được thế halogen, C_1-C_3-alkoxy hoặcC_1-C_3-alkoxy được thế halogen.

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

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

T46 – Metyl

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là metyl, T là T46, R^{11} trong T46 là H, W là O và tất cả các thông số khác là như được xác định ở đoạn [85] và đoạn [0113] ff.

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là metyl, T là T46, R^{11} trong T46 là H, W là O, A_1 là CR^2, A_2 là CR^3 hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CR^5, B_1 là CR^6, B_2 là CR^7, B_3 là CR^8, B_4 là CR^9, B_5 là CR^{10} và tất cả các thông số khác là như được xác định ở đoạn [85] và đoạn [0113] ff.

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là metyl, T là T46, R^{11} trong T46 là H, W là O, A_1 là CH, A_2 là CH hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CH, B_1 là CR^6, B_2 là CH, B_3 là CR^8, B_4 là CH, B_5 là CR^{10}, trong đó mỗi R^6 và R^{10} là một phần tử thế được chọn từ halogen (tốt hơn là clo, brom hoặc flo), C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkyl được thế halogen, C_1-C_3-alkoxy hoặc C_1-C_3-alkoxy được thế halogen và tất cả các thông số khác là như được xác định ở đoạn [85] và đoạn [0113] ff.

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là metyl, T là T46, R^{11} trong T46 là H, W là O, A_1 là CH, A_2 là CH hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CH, B_1 là CR^6, B_2 là CH, B_3 là CR^8, B_4 là CH, B_5 là CR^{10}, trong đó mỗi R^6 và R^{10} là một phần tử thế được chọn từ halogen (tốt hơn là clo, brom hoặc flo), C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkyl được thế halogen, C_1-C_3-alkoxy hoặc C_1-C_3-alkoxy được thế halogen và tất cả các thông số khác là như được xác định ở đoạn [85] và đoạn [0113] ff.

T46 - H

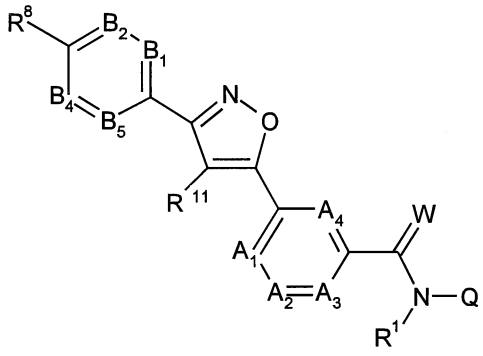
Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là H, T là T46, R^{11} trong T46 là H, W là O và tất cả các thông số khác là như được xác định ở đoạn [85] và đoạn [0112].

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là H, T là T46, R^{11} trong T46 là H, W là O, A_1 là CR^2, A_2 là CR^3 hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CR^5, B_1 là CR^6, B_2 là CR^7, B_3 là CR^8, B_4 là CR^9, B_5 là CR^{10} và tất cả các thông số khác là như được xác định ở đoạn [85] và đoạn [0113] ff.

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là H, T là T46, R^{11} trong T46 là H, W là O, A_1 là CH, A_2 là CH hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CH, B_1 là CR^6, B_2 là CH, B_3 là CR^8, B_4 là CH, B_5 là CR^{10}, trong đó mỗi R^6 và R^{10} là một phần tử thế được chọn từ halogen (tốt hơn là clo, brom hoặc flo), C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkyl được thế halogen, C_1-C_3-alkoxy hoặc C_1-C_3-alkoxy được thế halogen và tất cả các thông số khác là như được xác định ở đoạn [85] và đoạn [0113] ff.

Theo một phương án được ưu tiên khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) trong đó R^1 là H, T là T46, R^{11} trong T46 là H, W là O, A_1 là CH, A_2 là CH hoặc N, A_3 là CR^4, A_4 là CH, B_1 là CR^6, B_2 là CH, B_3 là CR^8, B_4 là CH, B_5 là CR^{10}, trong đó mỗi R^6 và R^{10} là một phần tử thế được chọn từ halogen (tốt hơn là clo, brom hoặc flo), C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkyl được thế halogen, C_1-C_3-alkoxy hoặc C_1-C_3-alkoxy được thế halogen và tất cả các thông số khác là như được xác định ở đoạn [85] và đoạn [0113] ff.

Một phương án khác đề cập đến các hợp chất có công thức (I-T46):



(I-T46)

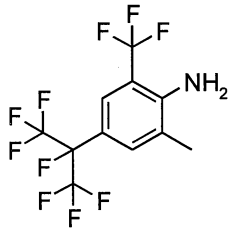
trong đó

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

Một phương án khác đề cập đến các hợp chất có công thức (I-T2), (I-T3), (I-T4), (I-T22), (I-T23) hoặc (I-T46) trong đó mỗi R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, Q và W như được mô tả tại đoạn [0120].

Một phương án khác đề cập đến các hợp chất có công thức (I-T2), (I-T3), (I-T4), (I-T22), (I-T23) hoặc (I-T46) trong đó mỗi R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, Q và W như được mô tả tại đoạn [0121].

Một phương án được ưu tiên khác đề cập đến hợp chất D-1a

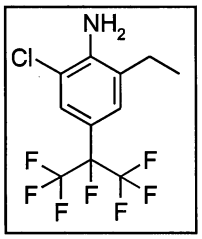


D-1a

Phần mô tả cũng mô tả việc sử dụng hợp chất D-1a để điều chế các hợp chất có công thức (I).

Một phương án khác đề cập đến quy trình điều chế hợp chất có công thức (I), tốt hơn là trong đó T = T4, bao gồm bước sử dụng hợp chất D-1a, tốt hơn là theo trình tự phản ứng theo sơ đồ phản ứng 4.

Một phương án khác đề cập đến hợp chất D-1b

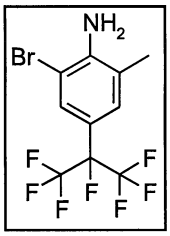


D-1b

Phần mô tả cũng mô tả việc sử dụng hợp chất D-1b để điều chế các hợp chất có công thức (I).

Một phương án khác đề cập đến quy trình điều chế hợp chất có công thức (I), tốt hơn là trong đó T = T4, bao gồm bước sử dụng hợp chất D-1b, tốt hơn là theo trình tự phản ứng theo sơ đồ phản ứng 4.

Một phương án khác đề cập đến hợp chất D-1c



D-1c

Phần mô tả cũng mô tả việc sử dụng hợp chất D-1c để điều chế các hợp chất có công thức (I).

Một phương án khác đề cập đến quy trình điều chế hợp chất có công thức (I), tốt hơn là trong đó T = T4, bao gồm bước sử dụng hợp chất D-1c, tốt hơn là theo trình tự phản ứng theo sơ đồ phản ứng 4.

Một phương án khác đề cập đến hợp chất 2-(3,5-diclo-4-hydrazinophenyl)-1,1,1,3,3,3-hexafluoropropan-2-ol.

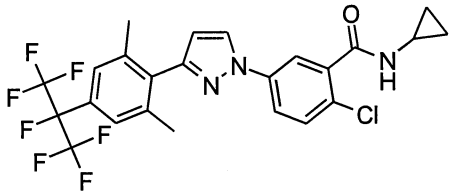
Phần mô tả cũng mô tả việc sử dụng hợp chất 2-(3,5-diclo-4-hydrazino-phenyl)-1,1,1,3,3,3-hexafluoropropan-2-ol để điều chế các hợp chất có công thức (I).

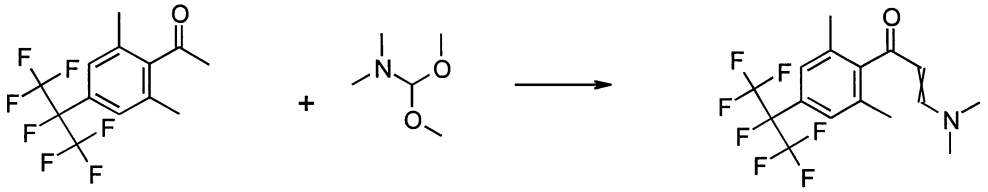
Một phương án khác đề cập đến quy trình điều chế hợp chất có công thức (I), tốt hơn là trong đó T = T4, bao gồm bước sử dụng hợp chất 2-(3,5-diclo-4-hydrazino-phenyl)-1,1,1,3,3,3-hexafluoropropan-2-ol, tốt hơn là theo trình tự phản ứng theo sơ đồ phản ứng 4.

Ví dụ thực hiện sáng chế

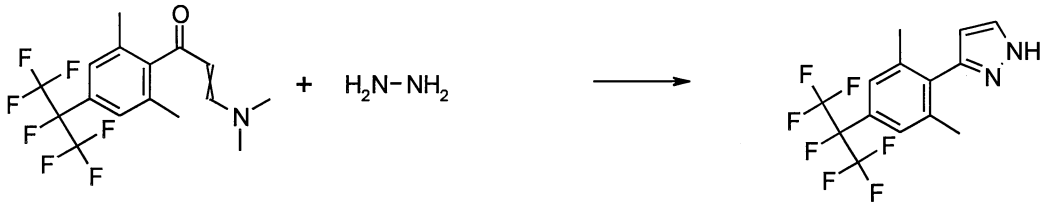
Quy trình điều chế I-T2

Ví dụ I-T2-1



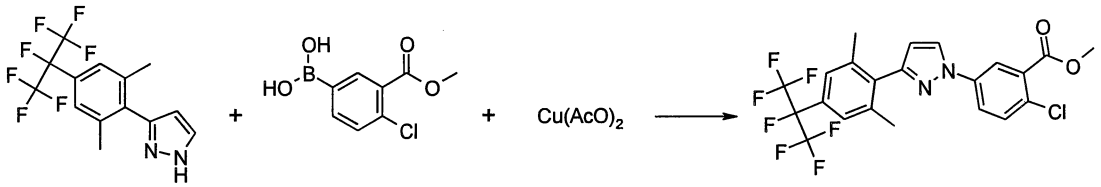


Bổ sung 710 mg (2,24 mmol) 1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]etanon vào 401 mg (3,36 mmol) N,N-dimetylformamit dimetyl axetal, và hỗn hợp này được gia nhiệt đến hồi lưu trong 5 giờ. Để hoàn tất phản ứng, hỗn hợp này được làm lạnh một chút và tất cả các cấu tử dễ bay hơi được làm bay hơi trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Cặn được tinh chế bằng phương pháp sắc ký sử dụng cột bao gồm 40 g silicagel với gradien trong xyclohexan/etyl axetat với tỷ lệ nằm trong khoảng từ 90:10 đến 50:50 (thể tích/thể tích). Thu được 675 mg 3-(dimetylamino)-1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]prop-2-en-1-on.

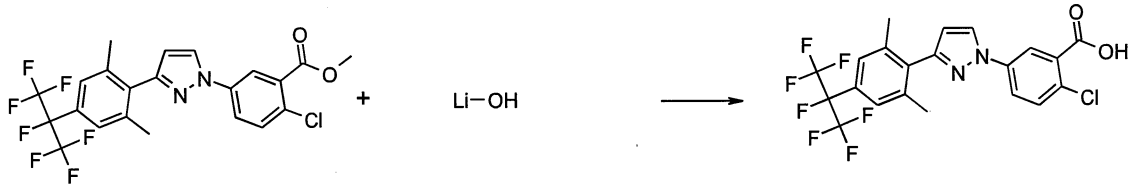


Bổ sung 1,2 g (3,23 mmol) 3-(dimetylamino)-1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]prop-2-en-1-on vào 15,5 ml etanol, và 170 mg (3,39 mmol) hydrazin hydrat và bổ sung 192 mg (3,2 mmol) axit axetic băng. Hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 7 giờ. Tiếp đó, bổ sung tiếp 170 mg (3,39 mmol)

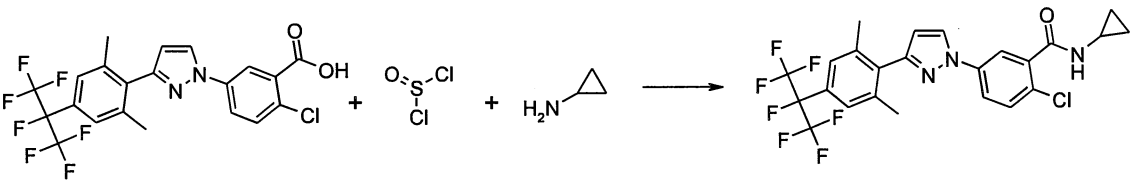
hydrazin hydrat và hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 4 giờ nữa. Khi sự chuyển hóa vẫn chưa hoàn toàn, bổ sung tiếp 190 mg (3,2 mmol) axit axetic băng và hỗn hợp này được khuấy ở 60°C trong 17 giờ. Để hoàn tất phản ứng, hỗn hợp này được cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm và cặn được phân bố giữa etyl axetat và nước. Pha hữu cơ được lấy ra, rửa bằng nước, làm khô bằng natri sulphat và cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Thu được 1,04 g (3-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]-1H-pyrazol dưới dạng cặn.



Ban đầu, nạp 23 ml diclometan, 353 mg (4,46 mmol) pyridin, 609 mg (3,35 mmol) đồng(II) axetat, 958 mg axit (4,46 mmol) 3-carboxymetyl-4-clophenylboric và 760 mg (2,23 mmol) (3-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]-1H-pyrazol và tiếp đó, bổ sung 1,1 g 3 Å rây phân tử mới nghiền. Tiếp đó, hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 20 giờ. Để hoàn tất phản ứng, hỗn hợp này được lọc qua một lớp kieselguhr và rửa bằng diclometan. Dịch lọc được cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Để tinh chế, đầu tiên dùng phương pháp sắc ký sử dụng cột bao gồm 40 g silicagel với gradien trong xyclohexan/etyl axetat với tỷ lệ nằm trong khoảng từ 95:5 đến 75:25 (thể tích/thể tích). Các phân đoạn chứa sản phẩm được cô và được tinh chế bằng phương pháp sắc ký sử dụng cột thứ hai bao gồm 40 g silicagel với dung môi rửa giải là toluen. Sau khi cô, thu được 628 mg metyl 2-clo-5-[3-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-1-yl]benzoat.



Ban đầu, nạp 609 mg (1,19 mmol) metyl 2-clo-5-[3-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-1-yl]benzoat trong hỗn hợp của 14 ml dioxan và 5 ml nước, bổ sung 53 mg (1,25 mmol) lithi hydroxit hydrat và hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng. Sau 2 giờ, bổ sung tiếp 25 mg (0,6 mmol) lithi hydroxit hydrat và hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong một giờ nữa. Sau đó, các cấu tử dễ bay hơi được lấy ra trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Cặn được phân bố giữa axit clohydric loãng và diclometan. Pha hữu cơ được lấy ra và pha nước được chiết hai lần bằng diclometan. Tiếp đó, các pha hữu cơ kết hợp được rửa bằng dung dịch natri clorua bão hòa trong nước, làm khô bằng natri sulphat và cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Thu được 554 mg axit 2-clo-5-[3-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-1-yl]benzoic dưới dạng cặn.

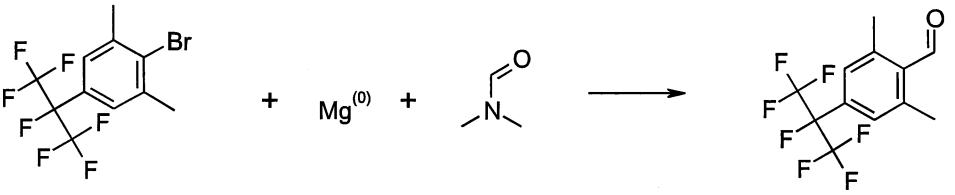


Ban đầu, nạp 100 mg (0,2 mmol) axit 2-clo-5-[3-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-1-yl]benzoic trong 2 ml toluen khô, tiếp đó, bổ sung 120 mg (1 mmol) thionyl clorua (SOCl2) và 1 giọt dimetylformamit (DMF), và hỗn hợp này được gia nhiệt đến hồi lưu. Sau khi khí đã thoát ra hết, hỗn hợp này được khuấy trong điều kiện hồi lưu trong 30 phút nữa và tiếp đó, cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Cặn được hòa tan trong 1 ml diclometan khô và bổ sung theo từng giọt nhỏ vào dung dịch của 29 mg (0,5 mmol) xyclopropylamin trong 1 ml diclometan ở 0°C. Tiếp đó, hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 2 giờ. Để hoàn tất phản ứng, hỗn hợp này được rót vào dung dịch natri hydrocacbonat trong nước 5%, và pha hữu cơ được lấy ra, rửa bằng dung dịch natri clorua bão hòa trong nước, làm khô bằng natri sulphat và cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Để tinh chế, dùng phương pháp sắc ký sử dụng cột bao gồm 40 g silicagel với gradien trong xyclohexan/etyl axetat với tỷ lệ nằm trong khoảng từ 90:10 đến 50:50 (thể tích/thể tích). Thu được 159,5 mg 2-clo-N-xyclopropyl-5-[3-

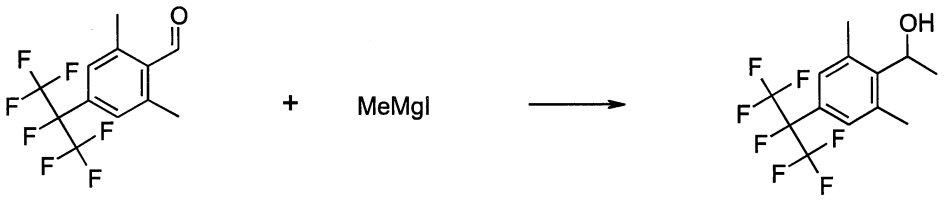
[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-1-yl]benzamit (hợp chất **I-T2-1**).

HPLC-MS[a)]: logP = 4,9, khối lượng (m/z) = 534 [M+H]+,
^{1}H NMR (400 MHz, d_3-axetonitril): δ (ppm) = 8,29 (d, J=2,5 Hz, 1 H), 7,82-7,85 (m, 2H), 7,52 (d, J=8,8 Hz, 1 H), 7,44 (s, 2 H), 6,97 (s (vạch rộng), 1 H (N-H)), 6,54 (d, J=2,5 Hz, 1 H), 2,82-2,86 (m, 1H), 0,74-0,79 (m, 2 H), 0,59-0,61 (m, 2 H).

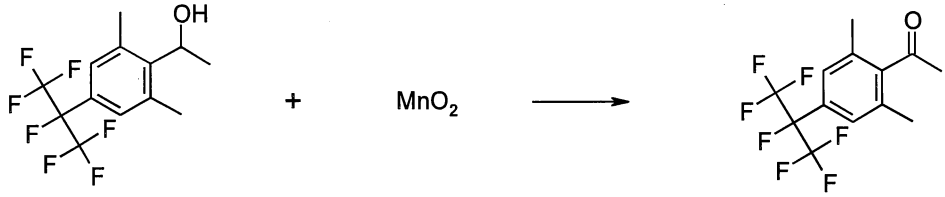
Điều chế các hợp chất khởi đầu:



Ban đầu, nạp 271 mg (11,1 mg nguyên tử) các phoi tiện magie, được phủ bằng một chút tetrahydrofuran khô và sau khi bổ sung một vài giọt dung dịch của 3 g (8,49 mmol) 2-bromo-1,3-dimetyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]benzen (được điều chế theo quy trình được mô tả trong tài liệu US2003/187233, p, 6, Example 2/4 [0080]) trong 10 ml tetrahydrofuran khô, bổ sung một mảnh vụn iot. Để bắt đầu phản ứng, hỗn hợp này được gia nhiệt đến 60°C. Sau khi phản ứng đã bắt đầu, bổ sung theo từng giọt nhỏ phần còn lại của dung dịch bao gồm 2-bromo-1,3-dimetyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]benzen ở 60°C. Sau khi bổ sung xong, hỗn hợp này được khuấy ở 60°C trong một giờ nữa. Sau đó, hỗn hợp này được làm nguội đến 0°C bằng bể nước đá, và bổ sung theo từng giọt nhỏ 1,86 g (25.4 mmol) N,N-dimetylformamit được hòa tan trong 5 ml tetrahydrofuran khô. Tiếp đó, hỗn hợp này được khuấy mà không làm nguội cho đến khi hỗn hợp này đạt đến nhiệt độ trong phòng. Để hoàn tất phản ứng, hỗn hợp này được rót vào dung dịch amoni clorua bão hòa trong nước. Các pha này được tách; pha nước được chiết bằng etyl axetat. Các pha hữu cơ kết hợp được rửa bằng dung dịch natri clorua bão hòa trong nước, làm khô bằng natri sulphat và cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Thu được 2,34 g 2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]benzaldehyt dưới dạng cặn được sử dụng luôn trong giai đoạn tiếp theo mà không cần tinh chế.



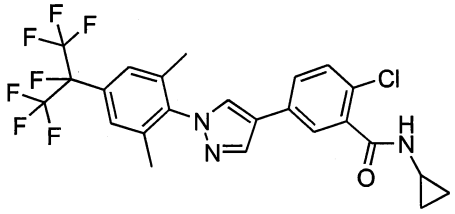
Ban đầu, nạp 2,34 g (7,74 mmol) 2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]benzaldehyt trong 15,5 ml tetrahydrofuran khô, và bổ sung theo từng giọt nhỏ 2,58 ml (7,74 mmol) dung dịch metylmagie iodua 3 M trong dietyl ete trong khi làm nguội bằng bể nước đá. Sau đó, hỗn hợp này được khuấy mà không làm nguội trong một giờ nữa. Để hoàn tất phản ứng, hỗn hợp này được rót vào 100 ml dung dịch amoni clorua bão hòa trong nước. Hỗn hợp này được chiết hai lần bằng etyl axetat. Các pha hữu cơ kết hợp được rửa bằng dung dịch natri clorua bão hòa trong nước, làm khô bằng natri sulphat và cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Cặn được tinh chế bằng phương pháp sắc ký using cột bao gồm 40 g silicagel với gradien trong xyclohexan/etyl axetat với tỷ lệ nằm trong khoảng từ 90:10 đến 70:30 (thể tích/thể tích), và tạo ra 1,0 g 1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]etanol.



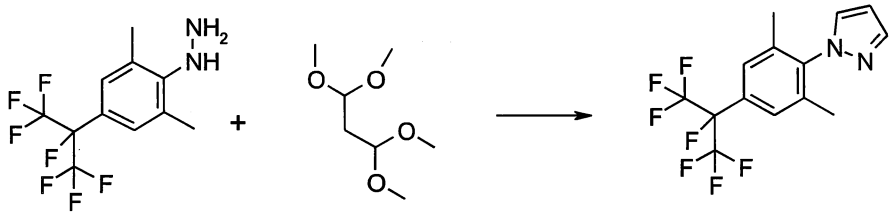
Ban đầu, nạp 1,49 g (4,68 mmol) 1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]etanol trong 84 ml toluen, và bổ sung 10,8 g (124 mmol) mangan(IV) oxit. Hỗn hợp này được gia nhiệt đến hồi lưu trong khi khuấy trong một giờ. Tiếp đó, làm nguội, lọc qua một lớp kieselguhr và rửa bằng etyl axetat. Dịch lọc được cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Cặn được tinh chế bằng phương pháp sắc ký sử dụng cột bao gồm 50 g silicagel với gradien trong xyclohexan/etyl axetat với tỷ lệ nằm trong khoảng từ 95:5 đến 70:30 (thể tích/thể tích). Thu được 1,03 g 1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]etanon.

Quy trình điều chế I-T3

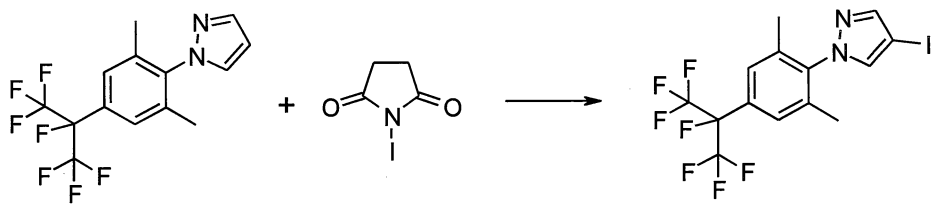
Ví dụ I-T3-1:



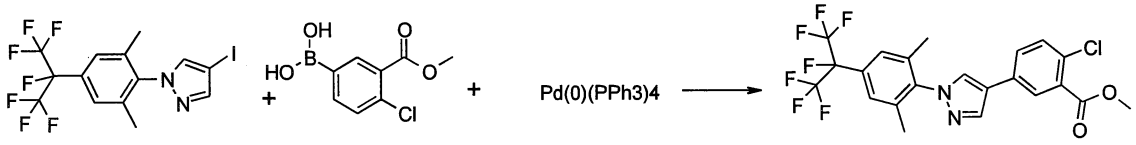
Việc điều chế tiền chất [2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]hydrazin được mô tả trong tài liệu (US 2003/187233).



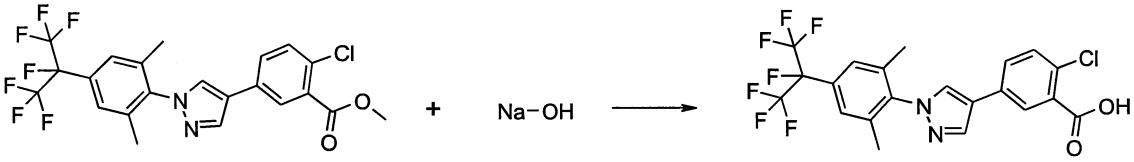
Ban đầu, nạp 3,41 g (11,2 mmol) [2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]hydrazin (bazơ tự do) trong 13 ml etanol vào bình có dung tích 25 ml. Tiếp đó, bổ sung 1,84 g (11,2 mmol) tetrametoxypropan và sau đó 0,55 g (5,6 mmol) axit sulphuric 96%. Hỗn hợp phản ứng được gia nhiệt đến hồi lưu trong 2 giờ. Làm bay hơi etanol trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Cặn được phân bố giữa etyl axetat và dung dịch natri hydrocacbonat bão hòa trong nước. Pha hữu cơ được lấy ra, làm khô bằng natri sulphat và cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Cặn được chưng cất trong thiết bị chưng cất Kugelrohr trong điều kiện áp suất giảm ở 1 mbar (100 Pa) và 150°C, và thu được 2,5 g 1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol.



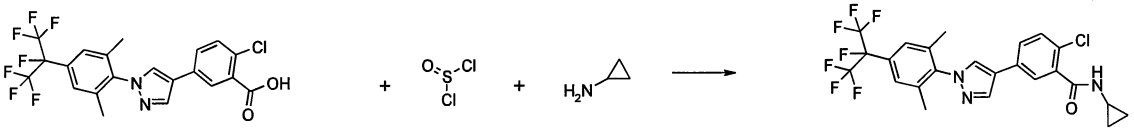
Ban đầu, nạp 2,5 g (7,34 mmol) 1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol trong 30 ml axetonitril vào bình có dung tích 250 ml, và bổ sung theo từng giọt nhỏ 8,3 g (36,9 mmol) N-iodosucxinimit trong 50 ml axetonitril. Sau đó, hỗn hợp này được gia nhiệt đến hồi lưu. Để hoàn tất phản ứng, hỗn hợp này được cô, và cặn được phân bố giữa nước và etyl axetat. Pha hữu cơ được lấy ra, rửa đầu tiên bằng dung dịch natri hydrosulphit bão hòa trong nước, tiếp đó, bằng dung dịch natri clorua bão hòa, làm khô bằng natri sulphat và cô. Cặn được tinh chế bằng phương pháp sắc ký với silicagel bằng gradien trong xyclohexan/etyl axetat với tỷ lệ nằm trong khoảng từ 90:10 đến 70:30 (thể tích/thể tích). Sau khi cô các phân đoạn chứa sản phẩm, thu được 2,5 g cặn chứa 1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]-4-iodopyrazol và một chút toluen.



Ban đầu, nạp 280 mg (0,6 mmol) 1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]-4-iodopyrazol và 0,129 g (0,60 mmol) axit [4-clo-3-(metoxycacbonyl)phenyl]boric trong 21 ml isopropanol vào bình có dung tích 100 ml, và cuối cùng, bổ sung 1,84 ml (1,84 mmol) dung dịch natri hydrocacbonat 1 M đã được loại bỏ khí. Bổ sung 0,035 g (0,03 mmol) tetrakis(triphenylphosphin)paladi(0). Tiếp đó, hỗn hợp này được gia nhiệt đến hồi lưu. Để hoàn tất phản ứng, hỗn hợp này được cô trên thiết bị bay hơi quay, và cặn được phân bố giữa nước và etyl axetat. Pha hữu cơ được lấy ra, rửa một lần bằng dung dịch natri clorua bão hòa và cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Cặn được tinh chế bằng phương pháp sắc ký với silicagel bằng gradien trong xyclohexan/etyl axetat có tỷ lệ nằm trong khoảng từ 90:10 đến 70:30 (thể tích/thể tích), và tạo ra 151 mg metyl 2-clo-5-[1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-4-yl]benzoat.



Ban đầu, nạp 0,151 g (0,29 mmol) metyl 2-clo-5-[1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-4-yl]benzoat trong 11 ml metanol, và bổ sung 0,3 ml (0,3 mmol) dung dịch natri hydroxit 1M. Sau đó, hỗn hợp này được gia nhiệt đến hồi lưu trong 6 giờ, làm bay hơi dung môi dư trong điều kiện áp suất giảm, và cặn được hòa với axit clohydric loãng và được chiết ba lần bằng etyl axetat. Các dịch chiết kết hợp được rửa bằng dung dịch natri clorua bão hòa, làm khô bằng natri sulphat và cô, và tạo ra 130 mg axit 2-clo-5-[1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-4-yl]benzoic.

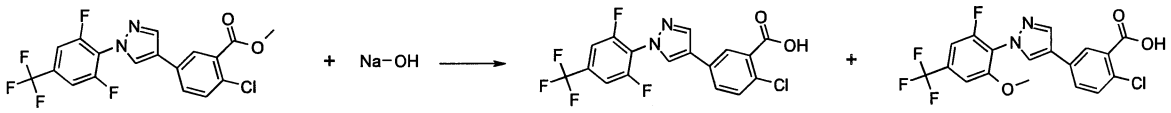


Hòa tan 0,134 g (0,27 mmol) axit 2-clo-5-[1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-4-yl]benzoic trong 1,26 ml toluen, và bổ sung 0,161 g (1,35 mmol) thionyl clorua. Hỗn hợp này được gia nhiệt đến 80°C trong 2 giờ. Tiếp đó, cô trong điều kiện áp suất giảm. Cặn được hòa tan trong 1,26 ml diclometan và bổ sung theo từng giọt nhỏ vào dung dịch của 39 mg (0,67 mmol) xyclopropylamin trong 0,63 ml diclometan ở 0°C trong khi làm nguội, và dung dịch được làm nguội. Để hoàn tất phản ứng, bổ sung dung dịch natri dihydrophosphat 5% trong nước, và pha hữu cơ được lấy ra, làm khô bằng natri sulphat và cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Cặn được tách bằng silicagel với gradien là xyclohexan/etyl axetat có tỷ lệ nằm trong khoảng từ 9:1 đến 7:3 (thể tích/thể tích), và tạo ra 46 mg 2-clo-N-xyclopropyl-5-[1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-4-yl]benzamit (hợp chất **I-T3-1**).

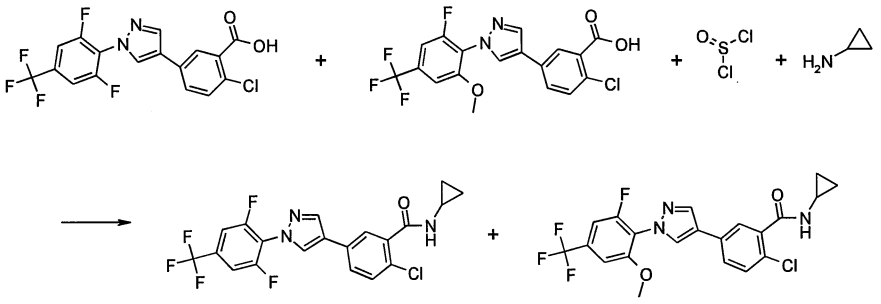
HPLC-MS[a)]: logP = 4,36, khối lượng (m/z) = 534 [M+H]+,

^{1}H NMR (400 MHz, d_3-axetonitril): δ = 8,11 (s, 1 H), 8,06 (s, 1 H), 7,68 (d, J1=2,2 Hz, 1 H), 7,62-7,65 (dd, J1=8,4 Hz, J2=2,2 Hz, 1H), 7,45 (d, J=8,4 Hz, 1 H), 6,9 (s (vạch rộng), 1 H (N-H)), 3,97 (s, 3 H), 2,82-2,88 (m, 1H), 0,76-0,8 (m, 2 H), 0,57-0,61 (m, 2 H).

Các ví dụ I-T3-48 và IT-T3-50



Ban đầu, nạp 2,46 g (5,9 mmol) metyl 2-clo-5-[1-[2,6-diflo-4-(triflometyl)phenyl]pyrazol-4-yl]benzoat trong 127 ml metanol, và bổ sung 5,9 mg (5,9 mmol) dung dịch natri hydroxit 1 M. Hỗn hợp này được gia nhiệt đến hồi lưu trong 2 giờ. Sau đó, hỗn hợp này được làm nguội, và phần lớn metanol được lấy ra trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Cặn trong pha nước được chiết bằng diclometan. Dịch chiết được bỏ đi. Pha nước được điều chỉnh đến độ pH 1 bằng axit clohydric 33% và được chiết hai lần bằng diclometan. Các dịch chiết kết hợp được rửa bằng dung dịch natri clorua bão hòa trong nước, làm khô bằng natri sulphat và cô. Thu được 1,41 g cặn dưới dạng hỗn hợp axit 2-clo-5-[1-[2,6-diflo-4-(triflometyl)phenyl]pyrazol-4-yl]benzoic và axit 2-clo-5-[1-[2-flo-6-metoxy-4-(triflometyl)phenyl]pyrazol-4-yl]benzoic có tỷ lệ 45:55 (diện tích LC-MS).



Hòa tan 700 mg (khoảng 1,7 mmol) hỗn hợp axit 2-clo-5-[1-[2,6-diflo-4-(triflometyl)phenyl]pyrazol-4-yl]benzoic và axit 2-clo-5-[1-[2-flo-6-metoxy-4-(triflometyl)phenyl]pyrazol-4-yl]benzoic có tỷ lệ 45:55 (diện tích LC-MS) trong 6,6

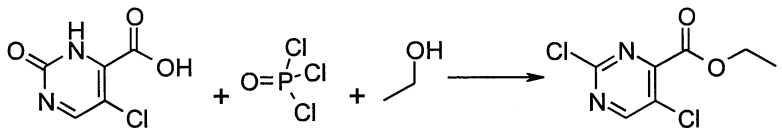
ml toluen, và bổ sung 1,34 g (8,7 mmol) thionyl clorua. Hỗn hợp này được gia nhiệt đến 80°C trong 2 giờ. Sau đó, tất cả các cấu tử dễ bay hơi được lấy ra trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Cặn được hòa tan trong 3,3 ml diclometan và bổ sung theo từng giọt nhỏ vào dung dịch của 248 mg (4,34 mmol) xyclopropylamin trong 3,3 ml diclometan ở 0°C. Tiếp đó, hỗn hợp này được khuấy mà không làm nguội trong 2 giờ. Sau đó, dung dịch này được rửa bằng dung dịch natri dihydrophosphat 5% trong nước, làm khô bằng natri sulphat và cô. Cặn được tinh chế bằng phương pháp sắc ký sử dụng cột bao gồm 40 g silicagel với gradien trong xyclohexan/etyl axetat với tỷ lệ nằm trong khoảng từ 90:10 đến 50:50 (thể tích/thể tích). Thu được 240 mg 2-clo-N-xyclopropyl-5-[1-[2,6-diflo-4-(triflometyl)phenyl]pyrazol-4-yl]benzamit (ví dụ **I-T3-48**)

HPLC-MS[a)]: logP = 3,2, khối lượng (m/z) = 442 [M+H]+,
^{1}H NMR (400 MHz, d_3-axetonitril): δ (ppm) = 8,26 (s, 1 H), 8,19 (s, 1H), 7,61-7,69 (m, 4H), 7,46 (d, J = 8,3 Hz, 1H), 6,94 (s, 1 H (vạch rộng)), 2,82-2,88 (m, 1H), 0,75-0,80 (m, 2 H), 0,58-0,62 (m, 2 H).

và 2-clo-N-xyclopropyl-5-[1-[2-flo-6-metoxy-4-(triflometyl)phenyl]pyrazol-4-yl]benzamit (ví dụ **I-T3-50**).

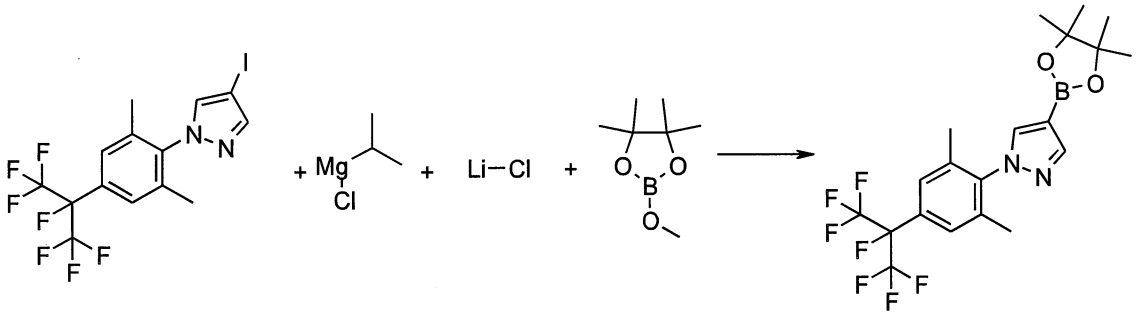
HPLC-MS[a)]: logP = 3,1, khối lượng (m/z) = 454 [M+H]+,
^{1}H NMR (400 MHz, d_3-axetonitril): δ (ppm) = 8,13 (s, 1 H), 8,11 (s, 1H), 7,67 (d, J = 2,2 Hz, 1 H), 7,62 (dd, J_1 = 8,3 Hz, J_2 = 2,2 Hz, 1 H), 7,45 (d, J = 8,3 Hz, 1H), 7,32 (s, 1 H), 7,30 (s, 1 H), 6,91 (s, 1 H (vạch rộng)), 3,90 (s, 3 H), 2,83-2,87 (m, 1H), 0,75-0,79 (m, 2 H), 0,57-0,61 (m, 2 H).

Ví dụ I-T3-121:



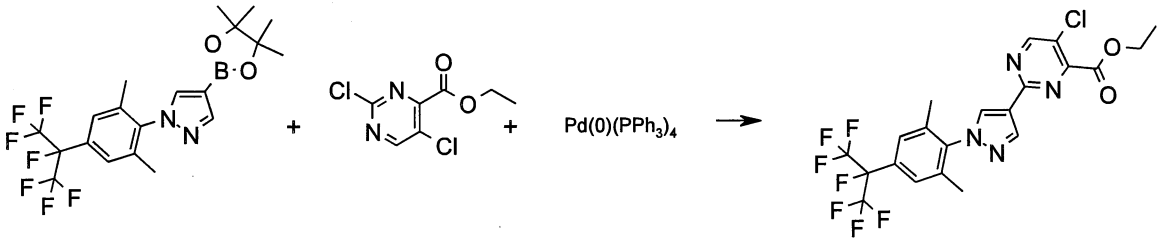
Ban đầu, nạp 4,6 ml (49,6 mmol) phospho oxyclorua và đưa vào 1,3 g (7,44 mmol) axit 5-clo-2-oxo-1H-pyrimidin-6-carboxylic (sẵn có trên thị trường, hoặc có thể

được điều chế bằng các phương pháp đã biết trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này (ví dụ, Gacek, Michel; Ongstad, Leif; Undheim, Kjell; Acta Chemica Scandinavica, Series B: Organic Chemistry and Biochemistry B33(2), (1979), p. 150-1)). Hỗn hợp này được gia nhiệt từ từ và được giữ trong điều kiện hồi lưu trong 2 giờ. Sau đó, hỗn hợp này được làm lạnh một chút và phospho oxyclorua dư được lấy ra trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Bổ sung 20 ml etanol khô vào cặn và tiếp đó, hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng qua đêm. Sau đó, etanol dư được lấy ra trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Cặn được hòa trong diclometan và rửa ba lần bằng dung dịch natri hydrocacbonat bão hòa trong nước. Các pha nước được chiết lại bằng diclometan, tiếp đó, các pha hữu cơ kết hợp được rửa bằng dung dịch natri clorua bão hòa trong nước, làm khô bằng natri sulphat và cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Cặn được tinh chế bằng phương pháp sắc ký sử dụng cột bao gồm 15 g silicagel với gradien là từ xyclohexan tinh khiết đến xyclohexan/etyl axetat với tỷ lệ 50:50 (thể tích/thể tích), và tạo ra 115 mg etyl 2,5-diclopyrimidin-4-carboxylat.

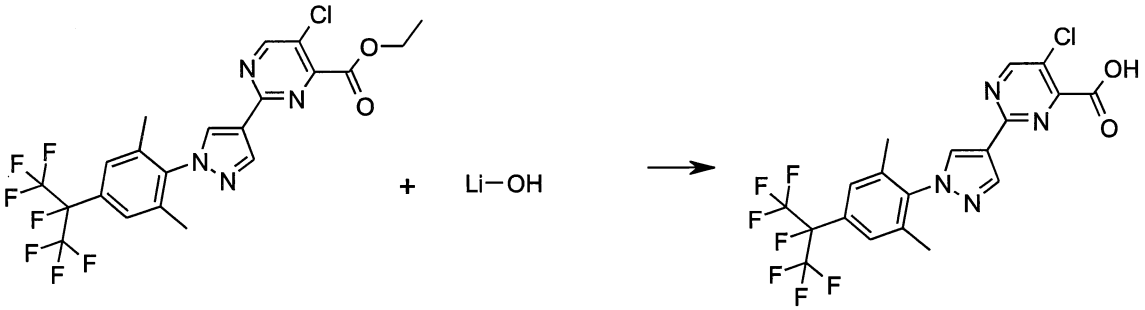


Ban đầu, nạp 5,94 ml (7,72 mmol) dung dịch 1,3 M của phức i-propylmagie clorua/lithi clorua vào bình ba cổ có dung tích 25 ml đã qua nung, và bổ sung theo từng giọt nhỏ dung dịch của 4-iodo-1-[2-metyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometyl)phenyl]pyrazol (về phần điều chế xem ví dụ **I-T3-1**) trong 3,4 ml tetrahydrofuran khô. Khuấy hỗn hợp này ở nhiệt độ trong phòng tiếp tục qua đêm và tiếp đó, hỗn hợp này được làm nguội đến -20°C và bổ sung theo từng giọt nhỏ 1,63 g (10,2 mmol) 2-metoxy-4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan. Hỗn hợp này được khuấy ở 0-10°C trong 1 giờ nữa. Để hoàn tất phản ứng, hỗn hợp này được rót vào 30 ml dung dịch amoni clorua bão hòa trong nước và được pha loãng bằng xyclohexan.

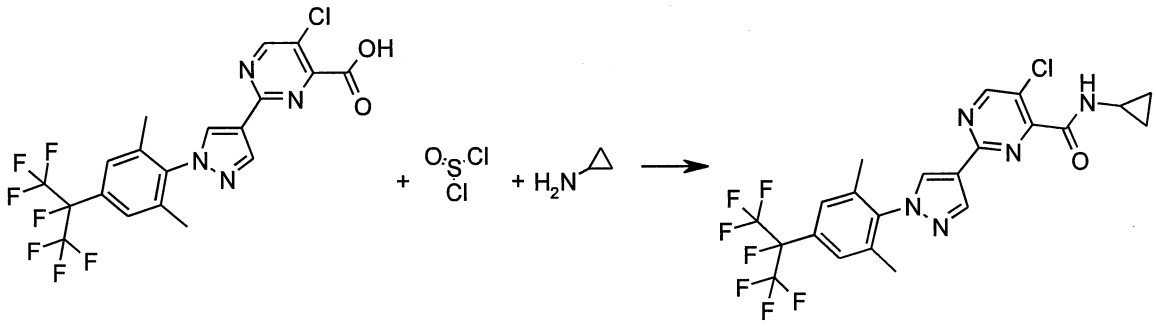
Các pha này được tách; pha nước được chiết lại bằng xyclohexan. Các pha hữu cơ kết hợp được rửa đầu tiên bằng dung dịch natri hydrocacbonat bão hòa trong nước và tiếp đó, bằng dung dịch natri clorua bão hòa trong nước, làm khô bằng natri sulphat và cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Sau quá trình sắc ký sử dụng cột bao gồm 40 g silicagel với gradien từ xyclohexan tinh khiết đến xyclohexan/etyl axetat với tỷ lệ 80:20 (thể tích/thể tích), thu được 0,6 g 1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]-4-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyrazol.



Ban đầu, nạp 155 mg (0,7 mmol) etyl 2,5-diclopyrimidin-4-carboxylat và 327 mg (0,7 mmol) 1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]-4-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyrazol trong 25 ml dioxan, và bổ sung 234 mg (2,2 mmol) natri cacbonat và 1,25 ml nước. Hỗn hợp này được loại bỏ khí bằng argon và tiếp đó, bổ sung 81 mg (0,07 mmol) tetrakis(triphenylphosphin)paladi(0). Hỗn hợp này được loại bỏ khí lại một lần bằng argon và được khuấy ở 100°C qua đêm. Sáng hôm sau, hỗn hợp này được làm nguội và dung môi được lấy ra trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Cặn được phân bố giữa nước và etyl axetat. Pha hữu cơ được lấy ra, rửa một lần bằng dung dịch natri clorua bão hòa trong nước và tiếp đó, cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Để tinh chế, dùng phương pháp sắc ký sử dụng cột bao gồm 15 g silicagel và gradien từ xyclohexan tinh khiết đến hỗn hợp của xyclohexan/etyl axetat với tỷ lệ 70:30 (thể tích/thể tích). Thu được 120 mg etyl 5-clo-2-[1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-4-yl]pyrimidin-4-carboxylat.



Ban đầu, nạp 0,120 g (0,23 mmol) etyl 5-clo-2-[1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-4-yl]pyrimidin-4-carboxylat trong hỗn hợp của 4,1 ml dioxan và 1,44 ml nước, và bổ sung 31 mg (0,74 mmol) lithi hydroxit monohydrat. Sau đó, hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 4 giờ, tiếp đó, làm bay hơi dung môi dư trong điều kiện áp suất giảm, và cặn được hòa với axit clohydric loãng và được chiết ba lần bằng diclometan. Các dịch chiết kết hợp được rửa bằng dung dịch natri clorua bão hòa trong nước, làm khô bằng natri sulphat và cô, và thu được 115 mg axit 5-clo-2-[1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-4-yl]pyrimidin-4-carboxylic thô.

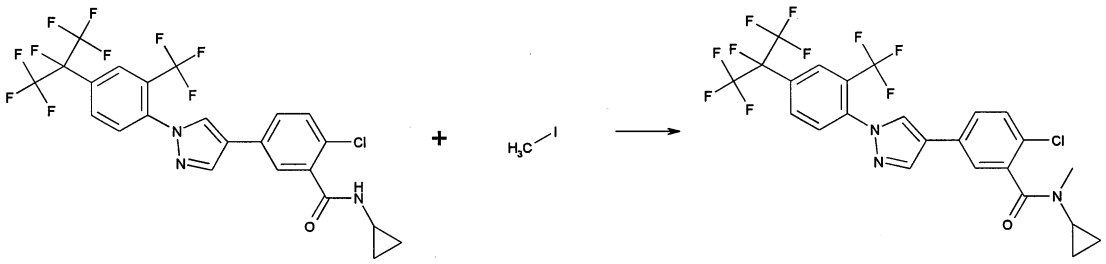


[595] Hòa tan 0,110 g (0,22 mmol) axit 5-clo-2-[1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-4-yl]pyrimidin-4-carboxylic thô trong 2 ml toluen, và bổ sung 0,132 g (1,1 mmol) thionyl clorua và một giọt dimetylformamit. Hỗn hợp này được gia nhiệt đến 80°C trong 2 giờ. Tiếp đó, cô trong điều kiện áp suất giảm. Cặn được hòa tan trong 1 ml diclometan và bổ sung theo từng giọt nhỏ vào dung dịch của 32 mg (0,55 mmol) xyclopropylamin trong 1 ml diclometan ở 0°C trong khi làm nguội và tiếp đó, hỗn hợp này được khuấy mà không làm nguội trong 2 giờ. Để hoàn tất phản ứng, bổ sung dung dịch natri dihydrophosphat 5% trong nước và pha hữu cơ được lấy

ra, làm khô bằng natri sulphat và cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Cặn được tách sử dụng cột bao gồm 15 g silicagel với gradien là xyclohexan/etyl axetat có tỷ lệ nằm trong khoảng từ 9:1 đến 7:3 (thể tích/thể tích), và thu được 49 mg 5-clo-N-xyclopropyl-2-[1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-4-yl]pyrimidin-4-carboxamit (hợp chất **I-T3-121)**.

HPLC-MS[a)]: logP = 4,5, khối lượng (m/z) = 536 [M+H]+,
^{1}H NMR (400 MHz, d_3-axetonitril): δ (ppm) = 8,84 (s, 1 H), 8,46 (s, 1 H), 8,44 (s, 1H), 7,87 (s, 1 H (vạch rộng)), 7,55 (s, 2 H), 2,84-2,91 (m, 1 H), 2,2 (s, 6 H), 0,79-0,83 (m, 2 H), 0,64-0,68 (m, 2 H).

Ví dụ I-T3-134:



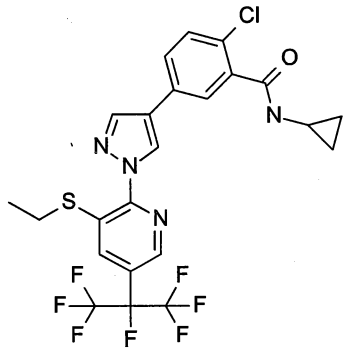
Bổ sung 49,3 mg (0,08 mmol) 2-clo-N-xyclopropyl-5-{1-[4-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)-2-(triflometyl)phenyl]-1H-pyrazol-4-yl}benzamit vào hỗn hợp của 6,5 mg (0,163 mmol) natri hydrua (60% trong dầu khoáng) trong 2 ml tetrahydrofuran khô được làm nguội đến 0°C. Sau 30 phút, bổ sung 35 mg (0,24 mmol) metyl iodua, và hỗn hợp này được khuấy ở 0°C và trong 1 giờ, tiếp đó, được làm ấm đến nhiệt độ trong phòng trong thời gian 1 giờ và được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 14 giờ nữa. Sau đó, bổ sung hỗn hợp này vào nước và chiết bằng etyl axetat, pha hữu cơ được làm khô trên natri sulphat và dung môi được lấy ra trong điều kiện áp suất giảm. Cặn được tinh chế bằng phương pháp sắc ký trên silicagel pha đảo (C18) với nước/axetonitril (gradien) làm dung môi rửa giải. Thu được 40,0 mg (0,068 mmol, 78%) 2-clo-N-xyclopropyl-5-[5-[2,6-diclo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]isoxazol-3-yl]benzamit (hợp chất **I-T3-134**).

HPLC-MS[a)]: logP = 4,88, khối lượng (m/z) = 588 [M+H]+,

^{1}H NMR (400 MHz, d_6-DMSO): δ (ppm) = 8,82 (s, 1 H), 8,43 (s, 1 H), 8,25 (d, 1H), 8,11 (d, 1 H), 8,06 (d, 1 H), 7,81 (d, 1 H), 7,75 (m, 1 H), 7,54 (d, 1 H), 3,02 (s, 3 H), 2,72 (m, 1 H), 0,55 (m, 2 H), 0,46 (m, 2 H).

Ví dụ I-T3-156:

2-clo-*N*-xyclopropyl-5-{1-[3-(etylsulphanyl)-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)pyridin-2-yl]-1H-pyrazol-4-yl}benzamit



2-(4-Bromo-1H-pyrazol-1-yl)-3-clo-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)pyridin

Bổ sung theo từng giọt nhỏ 1,0 g (3,16 mmol) 2,3-diclo-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)pyridin vào huyền phù của 0,51 g (3,48 mmol) 4-bromo-1H-pyrazol và 2,58 g (7,91 mmol) xesi cacbonat trong 10,0 ml dimetylformamit p.a. Phản ứng được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 3 giờ. Tiếp đó, hỗn hợp phản ứng được pha loãng bằng etyl axetat và tiếp đó, rửa bằng dung dịch amoni clorua bán bão hòa trong nước. Tiếp đó, pha nước được chiết nhiều lần bằng etyl axetat, và sau đó các pha hữu cơ kết hợp được rửa bằng nước cất và dung dịch natri clorua bão hòa. Pha hữu cơ được làm khô trên magie sulphat, lọc và cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Sản phẩm thô được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột trên silicagel.

Quy trình này tạo ra 1,34 g (3,14 mmol) 2-(4-bromo-1*H*-pyrazol-1-yl)-3-clo-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)pyridin dưới dạng dầu không màu.

HPLC-MS[a)]: logP = 4,74, khối lượng (m/z) = 428 $[M+H]^+$,
^{1}H NMR (400 MHz, D6-DMSO): 8,90 (s, 1H), 8,67 (s, 1H), 8,63 (d, 1H), 8,06 (s, 1H).

2-clo-5-{1-[3-clo-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)pyridin-2-yl]-1*H*-pyrazol-4-yl}-*N*-xyclopropylbenzamit

Hòa tan 150 mg (0,35 mmol) 2-(4-bromo-1*H*-pyrazol-1-yl)-3-clo-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)pyridin, 136 mg (0,42 mmol) 2-clo-*N*-xyclopropyl-5-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzamit, 59 mg (0,70 mmol) natri hydrocacbonat và 20 mg tetrakis(triphenylphosphin)paladi (0,01 mmol) trong hỗn hợp của 1,5 ml dioxan và 0,5 ml nước cất. Các dung môi này được làm bão hòa bằng argon trong khoảng 30 phút trước khi sử dụng, bằng cách cho argon đi qua các dung môi này. Hỗn hợp phản ứng được gia nhiệt trong bể dầu đến 100°C trong 16 giờ. After hỗn hợp phản ứng đã được làm nguội đến nhiệt độ trong phòng, hỗn hợp này được trộn với nước và sản phẩm thô được chiết nhiều lần bằng etyl axetat. Các pha hữu cơ kết hợp được làm khô trên magie sulphat và lọc qua silicagel. Các dung môi này được lấy ra trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Sản phẩm thô được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột trên silicagel.

Quy trình này tạo ra 25 mg (0,05 mmol) 2-clo-5-{1-[3-clo-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)pyridin-2-yl]-1*H*-pyrazol-4-yl}-*N*-xyclopropylbenzamit dưới dạng chất rắn không màu.

HPLC-MS[a)]: logP = 4,08, khối lượng (m/z) = 541 $[M+H]^+$,
1H NMR (400 MHz, D6-DMSO): 9,02(s,1H), 8,89(s,1H), 8,61(d,1H), 8,54-8,52(m,1H), 8,50(s,1H), 7,83-7,81(m,2H), 7,52(d,1H), 2,87-2,81(m,1H), 0,74-0,65(m,2H), 0,60-0,50(m,2H)

2-clo-*N*-xyclopropyl-5-{1-[3-(etylsulphanyl)-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)pyridin-2-yl]-1*H*-pyrazol-4-yl}benzamit

Hòa tan 300 mg (0,55 mmol) 2-clo-5-{1-[3-clo-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)pyridin-2-yl]-1*H*-pyrazol-4-yl}-*N*-xyclopropylbenzamit trong 5,0 ml DMF nguyên chất và làm lạnh bằng bể nước đá khô/axeton. Bổ sung theo từng giọt nhỏ dung dịch của 81,6 mg (0,97 mmol) natri etanthiolat trong 5 ml DMF nguyên chất vào hỗn hợp phản ứng đã được làm lạnh. Sau 3 giờ, hỗn hợp phản ứng được làm ấm đến nhiệt độ trong phòng và được rót cẩn thận vào nước. Sản phẩm thô được chiết nhiều

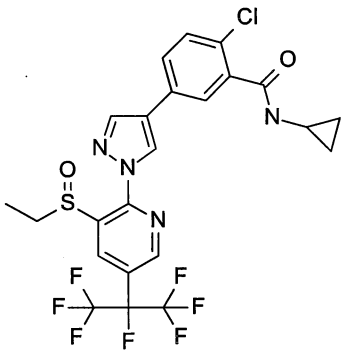
lần bằng etyl axetat. Các pha hữu cơ kết hợp được rửa bằng dung dịch natri clorua bão hòa trong nước, làm khô trên magie sulphat và lọc và cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Sản phẩm thô được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột trên silicagel.

Quy trình này tạo ra 226 mg (0.40 mmol) 2-clo-*N*-xyclopropyl-5-{1-[3-(etylsulphanyl)-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)pyridin-2-yl]-1*H*-pyrazol-4-yl}benzamit dưới dạng chất rắn không màu.

HPLC-MS[a)]: logP = 4,69, khối lượng (m/z) = 567 $[M+H]^+$,
1H NMR (400 MHz, D6-DMSO): 9,08 (d, 1H), 8,59 (d, 1H), 8,53 (d, 1H), 8,47 (s, 1H), 8,02 (d, 1H), 7,85-7,82 (m, 2H), 7,53-7,50 (m, 1H), 3,08 (q, 2H), 2,87-2,81 (m, 1H), 1,22 (t, 3H), 0,74-0,69 (m, 2H), 0,58-0,54 (m, 2H).

Ví dụ I-T3-157:

2-clo-*N*-xyclopropyl-5-{1-[3-(etylsulphinyl)-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)pyridin-2-yl]-1*H*-pyrazol-4-yl}benzamit



Hòa tan 100 mg (0,17 mmol) 2-clo-*N*-xyclopropyl-5-{1-[3-(etylsulphanyl)-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)pyridin-2-yl]-1*H*-pyrazol-4-yl}benzamit trong 10,0 ml diclometan và làm lạnh bằng bể nước đá. Bổ sung 43,5 mg axit 3-cloperbenzoic theo từng phần. Hỗn hợp phản ứng được khuấy trong khi làm nguội bằng nước đá trong 2 giờ. Hỗn hợp phản ứng được trộn với 5 ml dung dịch natri hydroxit 1N. Sau 5 phút, pha nước được lấy ra. Sau khi kiểm tra các peroxit, pha hữu cơ được cô trên thiết

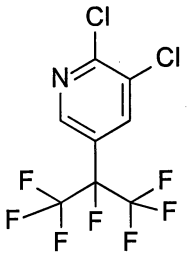
bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Sản phẩm thô được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột trên silicagel.

Quy trình này tạo ra 61 mg 2-clo-*N*-xyclopropyl-5-{1-[3-(etylsulphinyl)-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)pyridin-2-yl]-1*H*-pyrazol-4-yl}benzamit dưới dạng chất rắn không màu.

HPLC-MS[a)]: logP = 3,79, khối lượng (m/z) = 583 $[M+H]^+$,
1H NMR (400 MHz, D6-DMSO): 9,36 (s, 1H), 8,96 (d, 1H), 8,63 (s, 1H), 8,58 (s, 1H), 8,53 (d, 1H), 7,91 (s, 1H), 7,89 (d, 1H), 7,53 (d, 1H), 3,45-3,30 (m, 1H beneath water), 2,95-2,88 (m ,1H), 2,86-2,81 (m, 1H), 1,08 (t, 3H), 0,74-0,69 (m, 2H), 0,60-0,50 (m, 2H).

Điều chế các hợp chất khởi đầu

2,3-Diclo-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)pyridin



Giai đoạn thứ nhất: 3-clo-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)pyridin-2-amin

Bổ sung 130,6 g (750 mmol) natri dithionit vào hỗn hợp của 64,3 g (500 mmol) 3-clopyridin-2-amin, 222 g (750 mmol) 1,1,1,2,3,3,3-heptaflo-2-iodopropan và 126 g (1500 mmol) natri hydrocacbonat, được làm nguội đến 0-5°C, trong 2000 ml hỗn hợp axetonitril/nước với tỷ lệ 3:1 (thể tích/thể tích) trong điều kiện khí bảo vệ. Hỗn hợp phản ứng được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 48 giờ. Tiếp đó, axetonitril được lấy ra trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Cặn được pha loãng bằng 500 ml nước. Sản phẩm thô được chiết nhiều lần từ pha nước bằng etyl axetat. Các pha hữu cơ kết hợp được làm khô trên natri sulphat, lọc và tiếp đó, cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Sản phẩm thô được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột trên silicagel.

Giai đoạn thứ hai: 3-clo-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)pyridin-2(1H)-on

Hòa tan 5,8 g (19,5 mmol) 3-clo-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)pyridin-2-amin trong 150 ml axit sulphuric (20%, khối lượng/khối lượng) và được làm nguội đến 0-5°C. Dung dịch được trộn với 2,7 g (40 mmol) natri nitrit theo từng phần. Hỗn hợp phản ứng được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 16 giờ. Sản phẩm thô được chiết nhiều lần từ hỗn hợp phản ứng bằng diclometan (DCM). Các pha hữu cơ kết hợp được làm khô trên natri sulphat, lọc và tiếp đó, cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Sản phẩm thô được dùng trong giai đoạn tiếp theo mà không cần tinh chế.

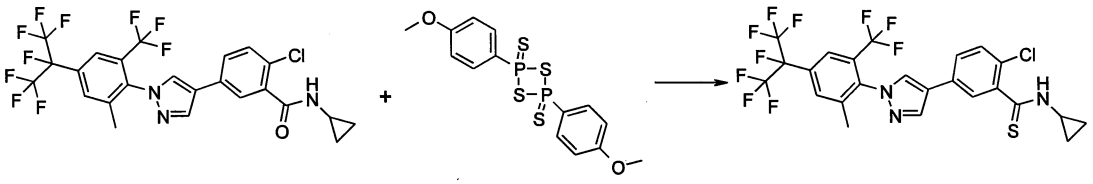
Giai đoạn thứ ba: 2,3-Diclo-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)pyridin

Gia nhiệt 15,4 g (51,7 mmol) 3-clo-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)pyridin-2(1H)-on và 150 ml phosphoryl clorua đến 105°C trong 5 giờ. Hỗn hợp phản ứng được trung hòa cẩn thận bằng dung dịch natri hydrocacbonat. Sản phẩm thô được chiết nhiều lần từ hỗn hợp phản ứng bằng DCM. Các pha hữu cơ kết hợp được rửa bằng dung dịch natri clorua bão hòa trong nước, làm khô trên natri sulphat và lọc, và tiếp đó, cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Tạo ra sản phẩm bằng cách chưng cất trong chân không (điểm sôi 40°C ở 1 mbar (100 Pa)).

Quy trình này tạo ra 14,8 g 2,3-diclo-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptaflopropan-2-yl)pyridin dưới dạng chất rắn không màu.

MS: khối lượng (m/z) = 315 $[M]^+$.
1H NMR (400 MHz, d1-cloform): 8,48 (s, 1H), 7,95 (s, 1H).

Ví dụ I-T3-161:



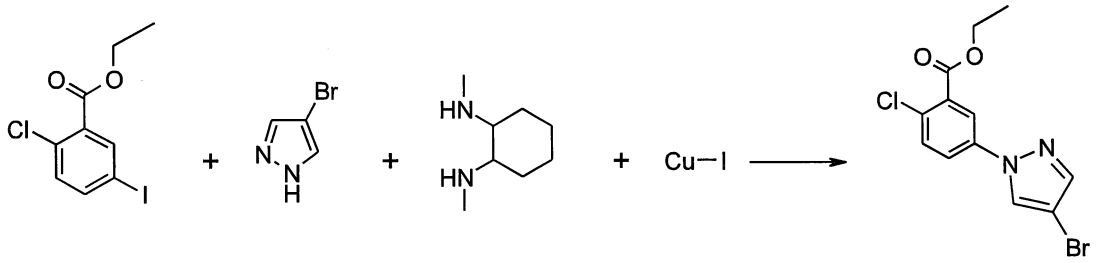
Ban đầu, nạp 294 mg (0,5 mmol) 2-clo-N-xyclopropyl-5-[1-[2-metyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometyl)phenyl]pyrazol-4-yl]benzamit trong hỗn hợp của 0,5 ml triclometan không chứa etanol và 1,5 ml 1,2-dimetoxyetan, và bổ sung 101 mg (0,25 mmol) thuốc thử Lawesson (2,4-bis(4-metoxyphenyl)-1,3,2,4-dithiadiphosphetan 2,4-disulphit). Hỗn hợp này được gia nhiệt đến 50°C trong 4 giờ. Sau đó, hỗn hợp này được làm nguội và dung môi được lấy ra trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Cặn được phân bố giữa etyl axetat và dung dịch natri hydrocacbonat bão hòa trong nước; pha nước được chiết lại một lần bằng etyl axetat. Các pha hữu cơ kết hợp được làm khô bằng natri sulphat và cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Để tinh chế, dùng phương pháp sắc ký sử dụng cột bao gồm 40 g silicagel với gradien trong xyclohexan/etyl axetat với tỷ lệ nằm trong khoảng từ 90:10 đến 50:50 (thể tích/thể tích). Thu được 248 mg 2-clo-N-xyclopropyl-5-[1-[2-metyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometyl)phenyl]pyrazol-4-yl]benzencarbothioamit (hợp chất **I-T3-161**).

HPLC-MS[a)]: logP = 5,0, khối lượng (m/z) = 604 [M+H]+,

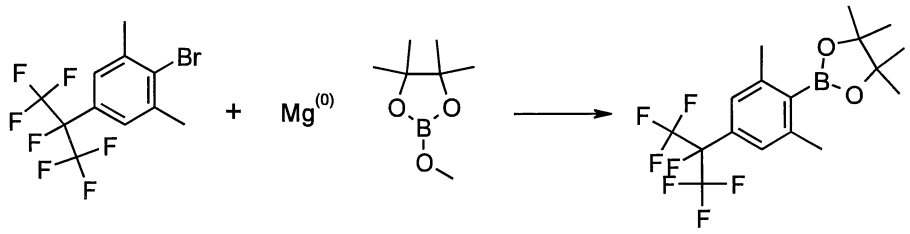
^{1}H-NMR (400 MHz, d_3-axetonitril): δ (ppm) = 8,62 (s, 1 H (vạch rộng)), 8,14 (s, 1 H), 8,10 (s, 1H), 8,0 (s, 1 H), 7,95 (s, 1 H), 7,63 (d, J=2,2 Hz, 1 H), 7,57-7,60 (m, 1 H), 7,42 (d, J=8,4 Hz, 1 H), 3,02 (s, 3 H), 3,37-3,44 (m, 1 H), 0,92-0,95 (m, 2 H), 0,74-0,78 (m, 2 H).

Quy trình điều chế I-T4

Ví dụ I-T4-1:

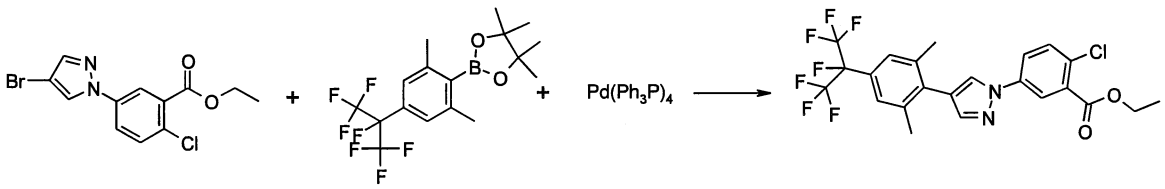


Ban đầu, nạp 3,81 g (12,2 mmol) etyl 2-clo-5-iodobenzoat trong 37 ml dimetylformamit, và bổ sung 2,885 g (19,6 mmol) 4-bromopyrazol, 5,09 g (36,8 mmol) kali cacbonat mới nghiền, 0,349 g (2,4 mmol) 1,2-bis(metylamino)xyclohexan (racemic, trans) và 0,234 g (1,22 mmol) đồng(I) iodua. Hỗn hợp này được loại bỏ khí bằng argon và tiếp đó, gia nhiệt đến hồi lưu trong một giờ. Để hoàn tất phản ứng, hỗn hợp này được làm nguội, rót vào 100 ml nước và được chiết hai lần mỗi lần bằng 100 ml etyl axetat. Các pha hữu cơ kết hợp được rửa hai lần bằng 100 ml nước và tiếp đó, bằng dung dịch natri clorua bão hòa, làm khô bằng natri sulphat và cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Để tinh chế, cặn được tinh chế bằng phương pháp sắc ký sử dụng cột bao gồm 120 g silicagel với gradien là xyclohexan/etyl axetat với tỷ lệ nằm trong khoảng từ 90:10 đến 70:30 (thể tích/thể tích). Thu được 1,41 g etyl 5-(4-bromopyrazol-1-yl)-2-clobenzoat.



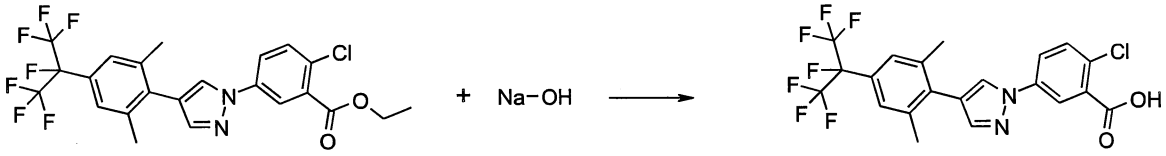
Phủ 0,158 g (6,49 mg) các phoi tiện magie bằng 1,5 ml tetrahydrofuran khô. Bổ sung một vài giọt dung dịch của 1,75 g (4,95 mmol) 2-bromo-1,3-dimetyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]benzen (được điều chế theo quy trình được mô tả trong tài liệu US2003/187233, p. 6) trong 2,5 ml tetrahydrofuran khô. Để bắt đầu phản ứng, bổ sung một mảnh vụn iot và hỗn hợp này được gia nhiệt đến khoảng 55°C. Sau khi phản ứng đã bắt đầu, bổ sung theo từng giọt nhỏ dung dịch 2-bromo-1,3-dimetyl-5-[1,2,2,2-

tetraflo-1-(triflometyl)etyl]benzen còn lại ở nhiệt độ 55°C. Sau khi bổ sung xong, khuấy tiếp ở 55°C trong 1 giờ nữa, tiếp đó, hỗn hợp này được làm nguội đến 0°C và bổ sung theo từng giọt nhỏ dung dịch của 2-metoxy-4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan trong 2,5 ml tetrahydrofuran khô. Tiếp đó, hỗn hợp này được để ở nhiệt độ trong phòng. Để hoàn tất phản ứng, hỗn hợp này được rót vào dung dịch amoni clorua bão hòa trong nước. Các pha này được tách, pha nước được chiết lại bằng etyl axetat, tiếp đó, các pha hữu cơ kết hợp được rửa bằng dung dịch natri clorua bão hòa trong nước, làm khô bằng natri sulphat và cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Cặn được chưng cất trong thiết bị chưng cất Kugelrohr ở áp suất chân không 1 mbar (100 Pa) và 220°C. Thu được 1,85 g 2-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]-4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan.

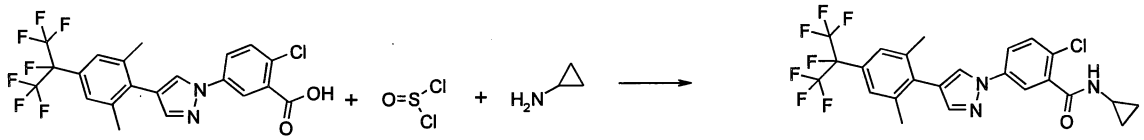


Ban đầu, nạp 0,947 g (2,87 mmol) etyl 5-(4-bromopyrazol-1-yl)-2-clobenzoat và 1,15 g (2,87 mmol) 2-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]-4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan trong 62 ml isopropanol, và bổ sung 8,7 ml (8,7 mmol) dung dịch natri hydrocacbonat 1 M trong nước đã được loại bỏ khí. Hỗn hợp này được loại bỏ khí bằng argon và bổ sung 0,166 g (0,14 mmol) tetrakis(triphenylphosphin)paladi(0) và hỗn hợp này được gia nhiệt đến hồi lưu qua đêm.

Để hoàn tất phản ứng, hỗn hợp này được cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm, và cặn được phân bố giữa nước và etyl axetat. Pha hữu cơ được lấy ra; pha nước được chiết lại bằng etyl axetat. Tiếp đó, các pha hữu cơ kết hợp được rửa một lần bằng dung dịch natri clorua bão hòa trong nước và cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Thu được 1,17 g etyl 2-clo-5-[4-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-1-yl]benzoat thô dưới dạng cặn.



Ban đầu, nạp 1,76 g (3,36 mmol) etyl 2-clo-5-[4-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-1-yl]benzoat trong 72 ml metanol, và bổ sung 4,03 ml (4,03 mmol) dung dịch natri hydroxit 1 M. Tiếp đó, hỗn hợp này được gia nhiệt đến hồi lưu trong 3 giờ. Để hoàn tất phản ứng, hỗn hợp này được cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm, và cặn được hòa với axit clohydric loãng và được chiết ba lần bằng etyl axetat. Các dịch chiết kết hợp được rửa bằng dung dịch natri clorua bão hòa, làm khô bằng natri sulphat và cô, và thu được 1,36 g axit 2-clo-5-[4-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-1-yl]benzoic thô.

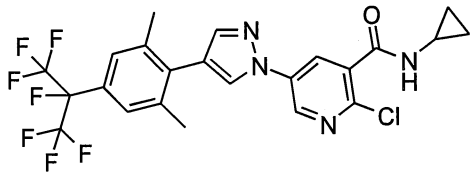


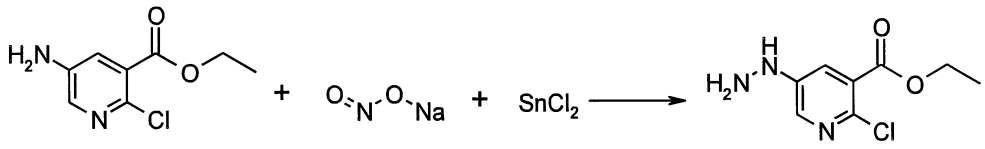
Hòa tan 1,36 g (2,76 mmol) axit 2-clo-5-[4-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-1-yl]benzoic thô trong 14 ml toluen khô, bổ sung 1 ml (13,8 mmol) thionyl clorua và tiếp đó, hỗn hợp này được gia nhiệt đến 80°C trong 2 giờ. Sau đó, hỗn hợp này được cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm, bổ sung 1 ml toluen khô và hỗn hợp này được cô lại. Thu được 1,4 g clorua axit thô dưới dạng cặn. Hòa tan 0,7 g cặn trong 5 ml diclometan và bổ sung theo từng giọt nhỏ vào dung dịch của 0,195 g (3,41 mmol) xyclopropylamin trong 2 ml diclometan ở nhiệt độ trong phòng. Hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 2 giờ nữa, tiếp đó, rót vào 20 ml dung dịch natri dihydrophosphat 5% trong nước. Pha hữu cơ được lấy ra và rửa bằng dung dịch natri clorua bão hòa, làm khô bằng natri sulphat và cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Cặn được tinh chế bằng hai lần sắc ký sử dụng cột bao gồm 15 g silicagel với gradien là xyclohexan/etyl axetat với tỷ lệ nằm trong khoảng từ 90:10 đến 50:50 (thể tích/thể tích). Thu được 91 mg (1,36 mmol) N-xyclopropyl-2-clo-5-[4-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-1-yl]benzamit (hợp chất **I-T4-1**).

HPLC-MSa): logP = 4.74, khối lượng (m/z) = 534 [M+H]+.

^{1}H NMR (400 MHz, d3-axetonitril): δ = (ppm) 8,17 (s, 1 H), 7,86 (s, 1 H), 7,84 (d, J1=2,7 Hz, 1 H), 7,69 (s, 1 H), 7,54(d, J1=8,8 Hz, 1H), 7,44 (s, 2 H), 6,97 (s (vạch rộng), 1 H (N-H)), 2,83-2,87 (m, 1H), 2,25 (s, 6 H), 0,76-0,8 (m, 2 H), 0,58-0,62 (m, 2 H).

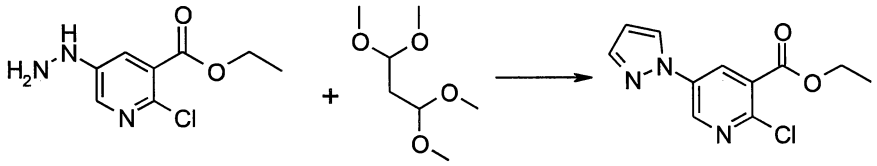
Ví dụ I-T4-3:



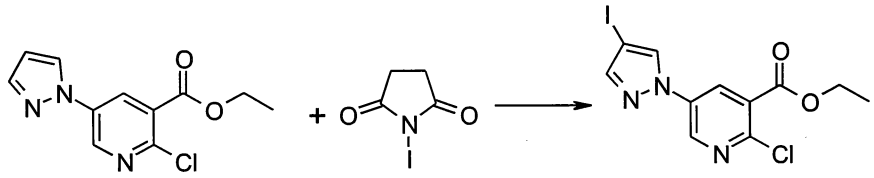


Ban đầu, nạp 2 g (9,96 mmol) etyl 5-amino-2-clonicotinat (sẵn có trên thị trường) trong 8,6 ml dung dịch axit clohydric trong nước 33%, và hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 30 phút. Sau đó, bổ sung 7 ml nước và hỗn hợp này được làm nguội đến 0°C bằng bể nước đá. Bổ sung theo từng giọt nhỏ dung dịch của 750 mg (10,8 mmol) natri nitrit trong 6,92 ml nước trong 30 phút vào hỗn hợp này. Nhiệt độ được giữ thấp hơn +5°C bằng bể nước đá. Khuấy tiếp ở 0°C trong 15 phút.

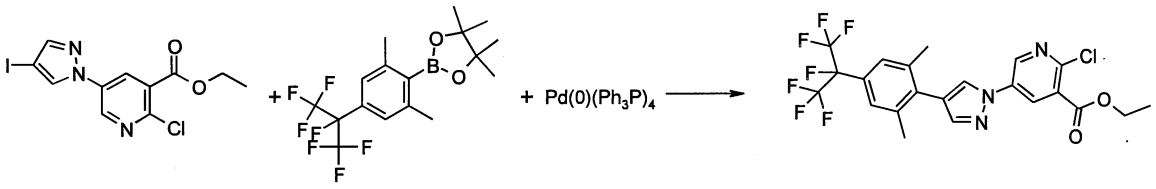
Ban đầu, nạp 5,77 g (25,5 mmol) thiếc(II) clorua dihydrat trong 24 ml dung dịch axit clohydric trong nước 16% vào bình thứ hai, và bổ sung từ từ theo từng giọt nhỏ huyền phù của muối diazoni được điều chế trên đây ở 0°C. Khuấy tiếp ở 0°C trong 1 giờ. Sau đó, bổ sung 50 ml axetonitril và 40 ml dung dịch natri clorua bão hòa trong nước. Các pha được tạo thành được tách. Pha nước được chiết hai lần mỗi lần bằng 50 ml axetonitril. Các pha hữu cơ kết hợp được làm khô bằng natri sulphat và cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Cặn thu được là 10,7 g etyl 2-clo-5-hydrazinonicotinat thô.



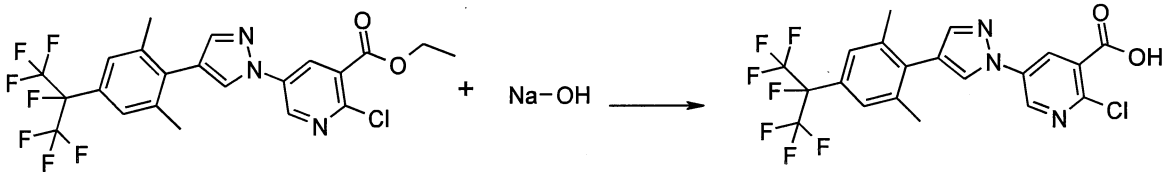
Ban đầu, nạp 10,7 g etyl 2-clo-5-hydrazinonicotinat thô trong 50 ml etanol, tiếp đó, bổ sung 1,63 g (9,92 mmol) 1,1,3,3-tetrametoxypropan và 487 mg axit sulphuric 96%. Sau đó, hỗn hợp này được gia nhiệt đến hồi lưu trong 2 giờ. Phần lớn etanol được lấy ra trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm, và cặn được phân bố giữa dung dịch natri hydrocacbonat bão hòa trong nước và etyl axetat. Pha hữu cơ được lấy ra, rửa bằng dung dịch natri clorua bão hòa trong nước, làm khô trên natri sulphat và cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Cặn được tinh chế bằng phương pháp sắc ký sử dụng cột bao gồm 15 g silicagel và gradien từ xyclohexan tinh khiết đến xyclohexan/etyl axetat với tỷ lệ 50:50 (thể tích/thể tích). Thu được 396 mg etyl 2-clo-5-(pyrazol-1-yl)nicotinat.



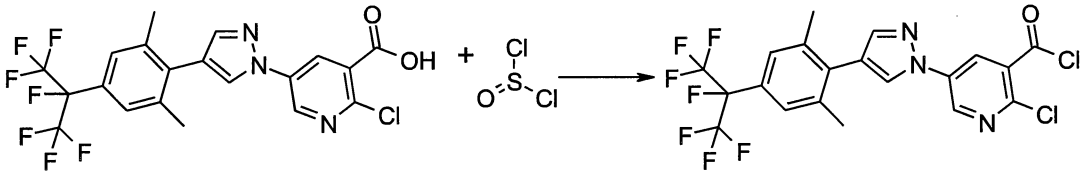
Ban đầu, nạp 396 mg (1,57 mmol) etyl 2-clo-5-(pyrazol-1-yl)-nicotinat trong 10 ml axetonitril, và bổ sung 1,062 g (4,72 mmol) N-iodosucxinimit. Sau đó, hỗn hợp này được gia nhiệt trong điều kiện hồi lưu trong điều kiện có argon trong 3 giờ. Hỗn hợp này được làm lạnh một chút và dung môi được lấy ra trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Cặn được phân bố giữa nước và etyl axetat. Pha hữu cơ được lấy ra, rửa đầu tiên bằng dung dịch natri hydrosulphit bão hòa trong nước tiếp đó, bằng dung dịch natri hydrocacbonat bão hòa trong nước và cuối cùng bằng dung dịch natri clorua bão hòa trong nước, làm khô bằng natri sulphat và cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Cặn được tinh chế bằng phương pháp sắc ký sử dụng cột bao gồm 15 g silicagel và gradien từ xyclohexan tinh khiết đến xyclohexan/etyl axetat với tỷ lệ 50:50 (thể tích/thể tích).



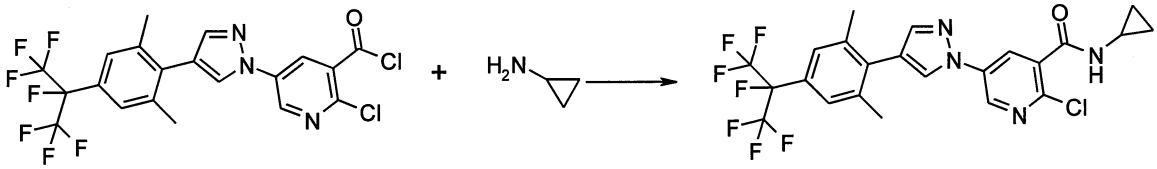
Ban đầu, nạp 401 mg (1,06 mmol) etyl 2-clo-5-(4-iodopyrazol-1-yl)pyridin-3-carboxylat và 425 mg (1,06 mmol) 2-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]-4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan trong 23 ml isopropanol, và bổ sung 3,24 ml (3,24 mmol) dung dịch natri hydrocacbonat 1 M trong nước đã được loại bỏ khí và 61 mg (0,05 mmol) tetrakis(triphenylphosphin)paladi(0). Hỗn hợp này được loại bỏ khí lại một lần bằng argon và gia nhiệt đến hồi lưu qua đêm. Sau đó, hỗn hợp này được làm nguội và các cấu tử dễ bay hơi được lấy ra trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Cặn được phân bố giữa nước và etyl axetat. Pha hữu cơ được lấy ra, rửa một lần bằng dung dịch natri clorua bão hòa trong nước và cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Thu được 415 mg etyl 2-clo-5-[4-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-1-yl]pyridin-3-carboxylat thô.



Hòa tan 416 mg (0,79 mmol) etyl 2-clo-5-[4-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-1-yl]pyridin-3-carboxylat thô trong 16,9 ml metanol, và bổ sung 0,952 ml (0,95 mmol) dung dịch natri hydroxit 1 M. Hỗn hợp này được gia nhiệt trong điều kiện hồi lưu trong 6 giờ tiếp đó, làm lạnh và cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Cặn được phân bố giữa etyl axetat và axit clohydric loãng. Pha nước được chiết lại hai lần bằng etyl axetat. Các pha hữu cơ kết hợp được rửa bằng dung dịch natri clorua bão hòa trong nước, làm khô bằng natri sulphat và cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Thu được 380 mg axit 2-clo-5-[4-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-1-yl]pyridin-3-carboxylic thô.



Hòa tan 380 mg (0,76 mmol) axit 2-clo-5-[4-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-1-yl]pyridin-3-carboxylic thô trong toluen, và bổ sung 456 mg (3,83 mmol) thionyl clorua. Hỗn hợp này được gia nhiệt đến 80°C trong 2 giờ và tiếp đó, cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Thu được 400 mg 2-clo-5-[4-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-1-yl]pyridin-3-cacbonyl clorua thô.



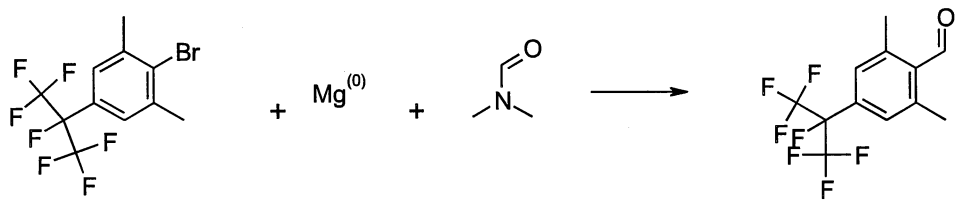
Hòa tan 138 mg (0,26 mmol) 2-clo-5-[4-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-1-yl]pyridin-3-cacbonyl clorua trong 1 ml diclometan và bổ sung theo từng giọt nhỏ vào dung dịch của 38 mg xyclopropylamin trong 1 ml diclometan ở nhiệt độ trong phòng. Hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 2 giờ nữa. Tiếp đó, hỗn hợp này được rửa bằng dung dịch natri dihydrophosphat 5% và tiếp đó, bằng dung dịch natri clorua bão hòa trong nước, làm khô bằng natri sulphat và cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Để tinh chế, dùng phương pháp sắc ký sử dụng cột bao gồm 15 g silicagel với gradien trong xyclohexan/etyl axetat với tỷ lệ nằm trong khoảng từ 90:10 đến 50:50 (thể tích/thể tích). Thu được 30 mg 2-clo-N-xyclopropyl-5-[4-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrazol-1-yl]pyridin-3-carboxamit.

HPLC-MSa): logP = 4.42, khối lượng (m/z) = 534 [M+H]+.

^{1}H NMR (400 MHz, d3-axetonitril): δ (ppm) = 8,92 (d, J = 2,8 Hz, 1 H), 8,22 (d, J1=2,8 Hz, 1 H), 8,20 (s, 1 H), 7,75(s, 1H), 7,44 (s, 2 H), 5,1 (s (vạch rộng), 1 H (N-H)), 2,84-2,88 (m, 1H), 2,25 (s, 6 H), 0,78-0,81 (m, 2 H), 0,59-0,63 (m, 2 H).

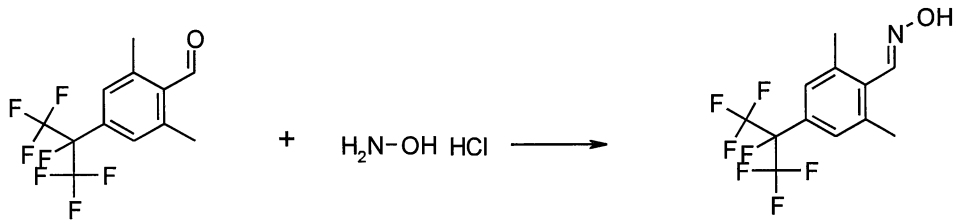
Quy trình điều chế I-T22

Ví dụ I-T22-1:

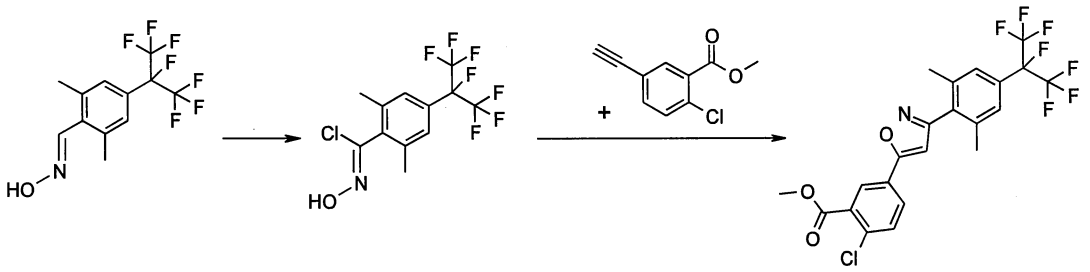


Việc điều chế 2,6-dimetyl-4-heptafloisopropylbromobenzen được mô tả trong tài liệu US2003/187233, p. 6 [0080].

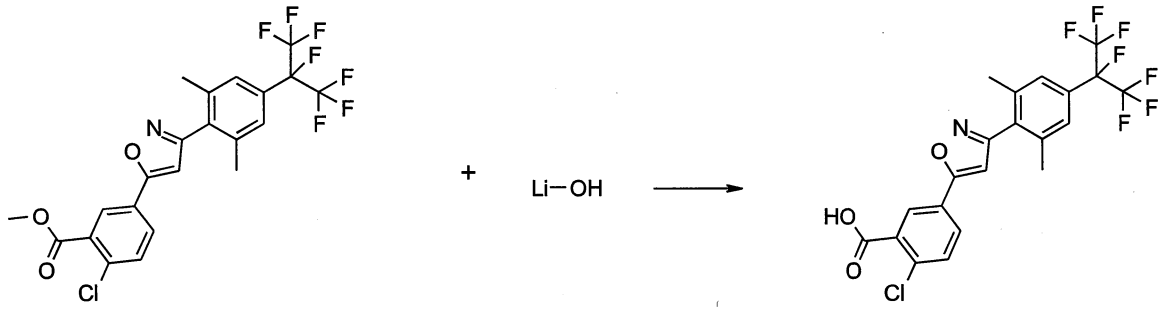
Trong bình ba cổ dung tích 25 ml, 158 mg (6.5 mg nguyên tử) các phoi tiện magie were được phủ bằng tetrahydrofuran khô (THF). Tiếp đó, bổ sung một vài giọt dung dịch của 1,75 g (4,95 mmol) 2,6-dimetyl-4-heptafloisopropylbromobenzen trong 2,5 ml of dry THF. Để bắt đầu phản ứng, bổ sung một mảnh vụn iot và hỗn hợp này được gia nhiệt đến khoảng 60°C. Sau khi phản ứng đã bắt đầu, bổ sung theo từng giọt nhỏ phần còn lại của dung dịch của 2,6-dimetyl-4-heptafloisopropylbromobenzen ở khoảng 60°C. Sau khi bổ sung xong, khuấy tiếp ở 60°C trong một giờ nữa, tiếp đó, hỗn hợp này được làm nguội đến 0°C và bổ sung theo từng giọt nhỏ dung dịch của 1,09 g (14,8 mmol) dimetylformamit trong 2,5 ml THF khô. Tiếp đó, hỗn hợp này được để ở nhiệt độ trong phòng. Để hoàn tất phản ứng, bổ sung lượng dư dung dịch amoni clorua bão hòa trong nước, các pha này được tách, và pha nước được chiết lại bằng etyl axetat. Các pha hữu cơ kết hợp được rửa bằng dung dịch natri clorua bão hòa, làm khô bằng natri sulphat và cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Thu được 1,3 g 2,6-dimetyl-4-heptafloisopropylbenzaldehyt thô (độ tinh khiết khoảng 80%) dưới dạng cặn, cặn này được dùng cho bước tiếp theo mà không cần tinh chế.



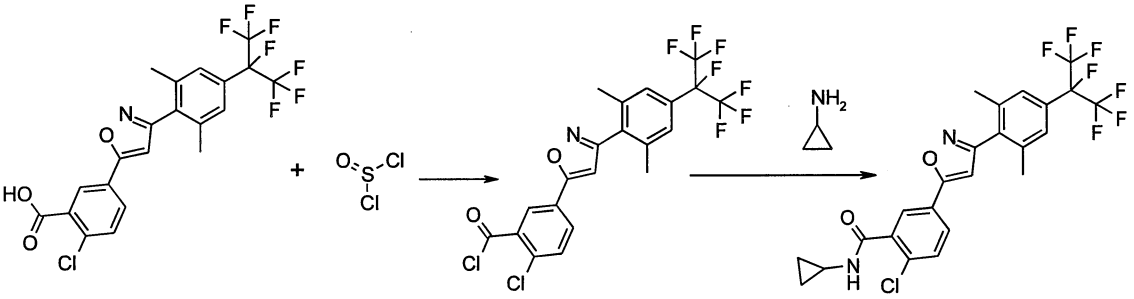
Hòa tan 1,3 g (khoảng 3,44 mmol) 2,6-dimetyl-4-heptafloisopropylbenzaldehyt thô trong 26 ml metanol, bổ sung 361 mg (4,3 mmol) natri hydrocacbonat và hỗn hợp này được làm nguội đến 0°C. Sau đó, bổ sung 1,2 g (17,2 mmol) hydroxylamoni clorua và hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng qua đêm. Để hoàn tất phản ứng, hỗn hợp này được cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm, và cặn được hòa trong 100 ml etyl axetat. Các cấu tử không tan được lọc và dịch lọc được cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Tiếp đó, cặn được tinh chế bằng phương pháp sắc ký sử dụng cột bao gồm bao gồm 40 g silic oxit và gradien từ xyclohexan tinh khiết đến xyclohexan/etyl axetat với tỷ lệ 70:30 (thể tích/thể tích). Thu được 0,5 g 2,6-dimetyl-4-heptafloisopropylbenzaldehyt oxim.



Ban đầu, nạp 505 mg (1,59 mmol) 2,6-dimetyl-4-heptafloisopropylbenzaldehyt oxim trong 3,5 ml dimetylformamit (DMF), và bổ sung 234 mg (1,75 mmol) N-closucxinimit. Hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 3,5 giờ. Tiếp đó, hỗn hợp này được làm nguội đến 0°C và bổ sung theo từng giọt nhỏ dung dịch của 310 mg (1,59 mmol) metyl 2-clo-5-ethynylbenzoat (được điều chế theo quy trình được mô tả trong tài liệu WO2012/107434, p. 103) trong 1,5 ml DMF, tiếp đó là 355 mg (3,5 mmol) trietylamin. Tiếp đó, hỗn hợp phản ứng được khuấy ở nhiệt độ trong phòng qua đêm. Để hoàn tất phản ứng, hỗn hợp này được rót vào nước và được chiết hai lần bằng diclometan, và các dịch chiết kết hợp được rửa bằng nước, làm khô bằng natri sulphat và cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Để tinh chế, việc tinh chế được thực hiện bằng cách sử dụng cột bao gồm 40 g silicagel và gradien từ xyclohexan tinh khiết đến xyclohexan/etyl axetat với tỷ lệ 80:20 (thể tích/thể tích). Thu được 488 mg metyl 2-clo-5-[3-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]isoxazol-5-yl]benzoat.



Ban đầu, nạp 0,8 g (1,56 mmol) metyl 2-clo-5-[3-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]isoxazol-5-yl]benzoat trong hỗn hợp của 18 ml dioxan và 6,5 ml nước, bổ sung 86 mg (2,04 mmol) lithi hydroxit monohydrat và hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng qua đêm. Để hoàn tất phản ứng, hỗn hợp này được cô trong điều kiện áp suất giảm và cặn được phân bố giữa hỗn hợp axit clohydric loãng và diclometan. Pha hữu cơ được lấy ra; pha nước được chiết đầu tiên bằng diclometan, tiếp đó, bằng etyl axetat. Các pha hữu cơ kết hợp được rửa bằng dung dịch natri clorua bão hòa trong nước, làm khô bằng natri sulphat và cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Thu được 680 mg axit 2-clo-5-[3-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]isoxazol-5-yl]benzoic.

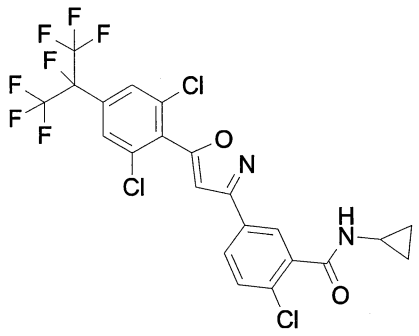


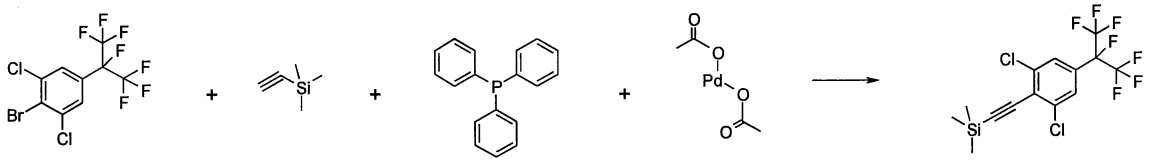
Hòa tan 680 mg (1,37 mmol) axit 2-clo-5-[3-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]isoxazol-5-yl]benzoic trong 7 ml toluen, và bổ sung 0,5 ml (6,89 mmol) thionyl clorua. Hỗn hợp này được gia nhiệt đến 80°C trong hai giờ và tiếp đó, cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Hòa tan 200 mg (0,38 mmol) clorua axit thô thu được theo cách này trong 1 ml diclometan và bổ sung theo từng giọt nhỏ vào dung dịch của 56 mg (0,97 mmol) xyclopropylamin trong 0,95 ml diclometan ở nhiệt độ trong phòng. Tiếp đó, hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng qua đêm. Để hoàn tất phản ứng, hỗn hợp này được rót vào dung dịch natri dihydrophosphat 5% trong nước, và pha hữu cơ được lấy ra, làm khô bằng natri

sulphat và cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Để tinh chế, cặn được tinh chế bằng phương pháp sắc ký sử dụng cột bao gồm 15 g silicagel và gradien từ xyclohexan tinh khiết đến xyclohexan/etyl axetat với tỷ lệ 80:20 (thể tích/thể tích). Thu được 165 mg 2-clo-N-xyclopropyl-5-[3-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]isoxazol-5-yl]benzamit (hợp chất **I-T22-1**).

HPLC-MS[a)]: logP = 4,75, khối lượng (m/z) = 535 [M+H]+.
^{1}H NMR (400 MHz, d_3-axetonitril): δ (ppm) = 7,93 (d, J=2,2 Hz, 1 H), 7,89 (dd, J1=8,4 Hz, J2=2,2 Hz, 1H), 7,6 (d, J=8,4 Hz, 1H), 7,49 (s, 2 H), 7,03 (s (vạch rộng), 1 H (N-H)), 6,86 (s, 1 H), 2,83-2,88 (m, 1H), 0,75-0,79 (m, 2 H), 0,59-0,62 (m, 2 H).

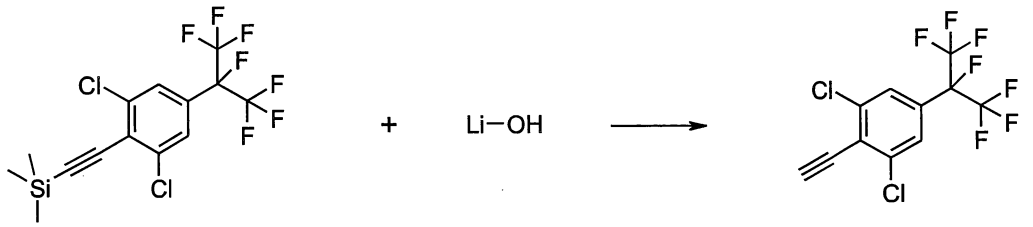
Quy trình điều chế I-T23
Ví dụ I-T23-1:





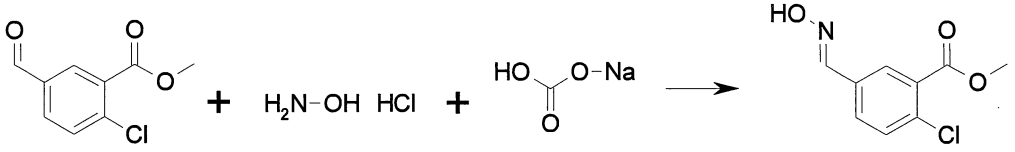
[631] Ban đầu, nạp 3 g (7,61 mmol) 2-bromo-1,3-diclo-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]benzen (đối với việc điều chế, xem tài liệu EP 1 253 128, page 10), 1,21 g (12,3 mmol) etynyltrimetylsilan, 86 mg (0,38 mmol) paladi(II) axetat và 260 mg (1,0 mmol) triphenylphosphin trong 20 ml trietylamin khô và gia nhiệt đến hồi lưu. Sau khi cô khối này trên thiết bị bay hơi quay ở 30°C, cặn được trộn với 20 ml dung dịch natri hydrocacbonat bão hòa và được chiết ba lần bằng diclometan. Các dịch chiết kết hợp được rửa bằng dung dịch NaH2PO4 trong nước 5% và tiếp đó, bằng dung dịch natri clorua bão hòa. Sau khi làm khô dung dịch bằng natri sulphat và cô khối này trên thiết bị bay hơi quay ở 30°C, tiến hành tinh chế bằng phương pháp sắc ký trên silicagel

bằng xyclohexan làm dung môi rửa giải. Thu được: 1,4 g 2-[2,6-diclo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]ethynyltrimetylsilan với độ tinh khiết khoảng 50% (diện tích LC-MS).



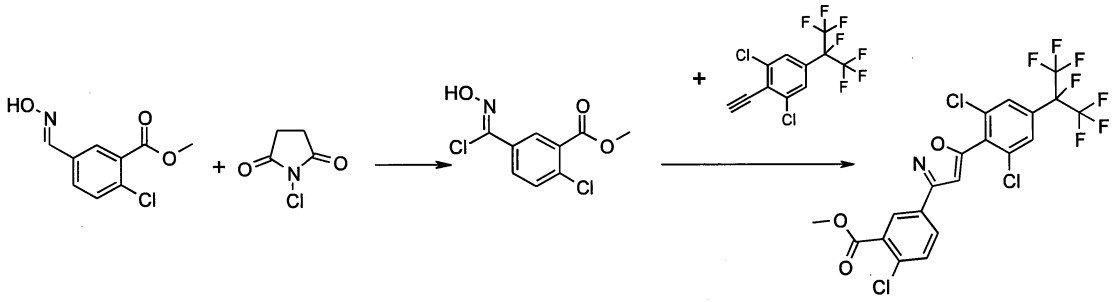
Hòa tan 1,4 g (3,4 mmol) 2-[2,6-diclo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]ethynyltrimetylsilan trong 7 ml tetrahydrofuran, và bổ sung hỗn hợp của 7 ml metanol và 214 mg (5,1 mmol) lithi hydroxit monohydrat ở nhiệt độ trong phòng. Dung dịch phản ứng được cô trên thiết bị bay hơi quay và cặn được hòa với hỗn hợp diclometan và nước. Pha hữu cơ được lấy ra, làm khô bằng natri sulphat và cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm, và thu được 880 mg khoảng 50% 1,3-diclo-2-ethynyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]benzen.

Việc điều chế 4-clo-3-carbometoxybenzaldehyt đã được mô tả trong tài liệu (tham khảo, ví dụ, tài liệu WO 2010/011584, p. 19-20).

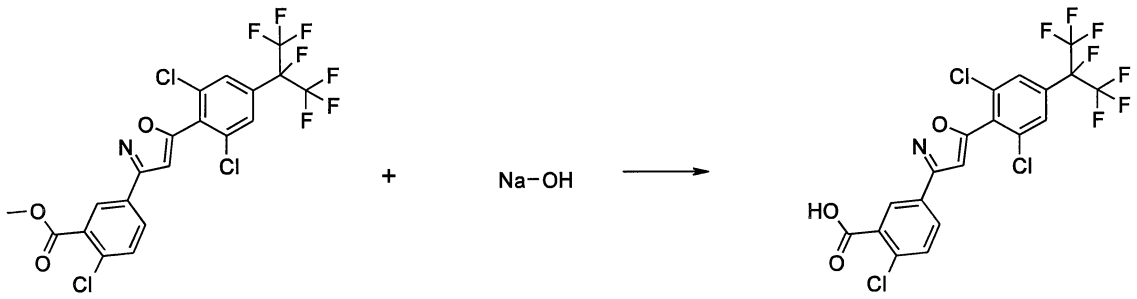


Hòa tan 4,1 g (20,6 mmol) 4-clo-3-carbometoxybenzaldehyt trong 82 ml metanol, bổ sung 1,734 mg (20,6 mmol) natri hydrocacbonat và hỗn hợp này được làm nguội đến 0°C. Tiếp đó, bổ sung 5,738 g (82,5 mmol) hydroxylamin hydroclorua và hỗn hợp này được khuấy. Để hoàn tất phản ứng, hỗn hợp này được cô trên thiết bị bay hơi quay, và cặn được hòa trong 100 ml etyl axetat. Các chất rắn được lọc và dịch lọc được cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Để tinh chế, cặn được tinh chế bằng phương pháp sắc ký với silicagel bằng gradien trong xyclohexan/etyl

axetat 9:1 đến 7:3 (thể tích/thể tích), và thu được 2,68 g etyl 2-clo-5-[(E)-hydroxyiminometyl]benzoat.

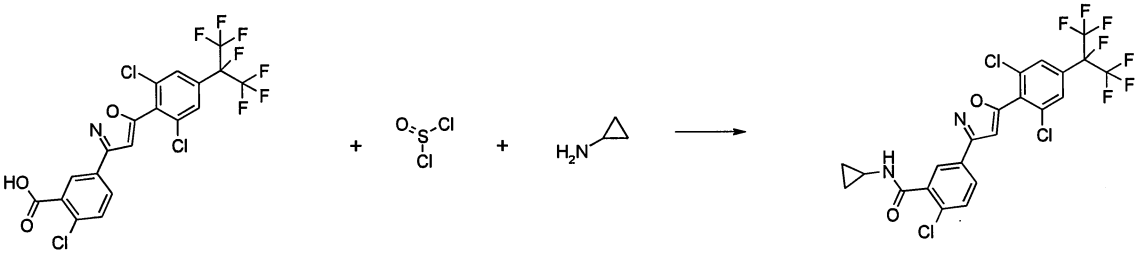


Ban đầu, nạp 277 mg (1,29 mmol) etyl 2-clo-5-[(E)-hydroxyiminometyl]benzoat trong 4,6 ml dimetylformamit, bổ sung 381 mg (2,84 mmol) N-closucxinimit, và hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng. Tiếp đó, hỗn hợp này được làm nguội đến 0°C bằng bể nước đá, và bổ sung theo từng giọt nhỏ dung dịch của 880 mg (độ mạnh khoảng 50%, 1,29 mmol) 1,3-diclo-2-ethynyl-5-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]benzen trong 1,5 ml dimetylformamit, tiếp đó là 289 mg (2.85 mmol) trietylamin. Hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng. Để hoàn tất phản ứng, phản ứng được pha loãng bằng nước và được chiết hai lần bằng diclometan. Các dịch chiết kết hợp được rửa bằng nước, làm khô bằng natri sulphat và cô trên thiết bị bay hơi quay. Cặn được tinh chế bằng hai lần sắc ký trên silic oxit với gradien từ xyclohexan tinh khiết đến xyclohexan/etyl axetat với tỷ lệ 80:20 (thể tích/thể tích) làm dung môi rửa giải, và thu được 410 mg metyl 2-clo-5-[5-[2,6-diclo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]isoxazol-3-yl]benzoat.



Ban đầu, nạp 410 mg (0,74 mmol) metyl 2-clo-5-[5-[2,6-diclo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]isoxazol-3-yl]benzoat trong 21 ml metanol, bổ sung 0,74 ml (0,74 mmol) dung dịch natri hydroxit 1M và hỗn hợp này được khuấy trong

điều kiện hồi lưu. Sau đó, metanol được lấy ra trên thiết bị bay hơi quay. Cặn được trộn với axit clohydric loãng và được chiết ba lần bằng etyl axetat. Các dịch chiết kết hợp được làm khô bằng natri sulphat và cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Thu được 405 mg axit 2-clo-5-[5-[2,6-diclo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]isoxazol-3-yl]benzoic dưới dạng cặn.

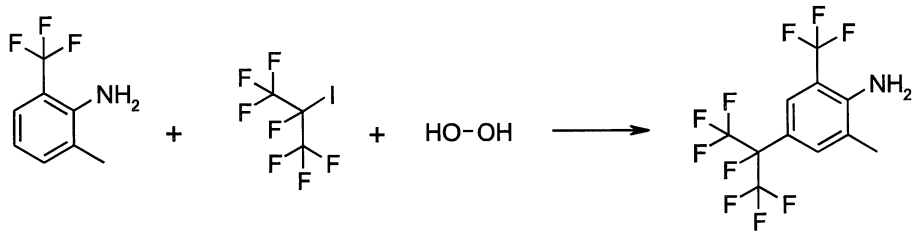


Hòa tan 125 mg (0,23 mmol) axit 2-clo-5-[5-[2,6-diclo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]isoxazol-3-yl]benzoic trong 1,1 ml toluen khô, và bổ sung 0,14 g (1,16 mmol) thionyl clorua. Hỗn hợp này được gia nhiệt đến 80°C và tiếp đó, cô trên thiết bị bay hơi quay. Cặn được hòa tan trong 0,25 ml diclometan và bổ sung theo từng giọt nhỏ vào dung dịch của 33 mg (0,58 mmol) xyclopropylamin trong 0,75 ml diclometan ở 0°C, và hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 2 giờ. Để hoàn tất phản ứng, bổ sung dung dịch natri dihydrophosphat 5% trong nước và tiếp đó, pha hữu cơ được lấy ra. Pha hữu cơ được làm khô bằng natri sulphat và cô trên thiết bị bay hơi quay. Cặn được tinh chế bằng phương pháp sắc ký với silicagel và xyclohexan/etyl axetat với tỷ lệ 70:30 (thể tích/thể tích) làm dung môi rửa giải. Thu được 49 mg 2-clo-N-xyclopropyl-5-[5-[2,6-diclo-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]isoxazol-3-yl]benzamit (hợp chất **I-T23-1**).

HPLC-MS[a)]: logP = 4,96, khối lượng (m/z) = 575 [M+H]+.

^{1}H NMR (400 MHz, d_3-axetonitril): δ = 7,96 (s, 1 H), 7,94-7,96 (dd, J1=8,4 Hz, J2=2,2 Hz, 1H), 7,86 (s, 2 H), 7,6 (d, J1=7,6 Hz, J2=1,2, 1 H), 7,15 (s, 1 H), 6,9 (s (vạch rộng), 1 H (N-H)), 3,97 (s, 3 H), 2,83-2,88 (m, 1H), 0,75-0,79 (m, 2 H), 0,58-0,62 (m, 2 H).

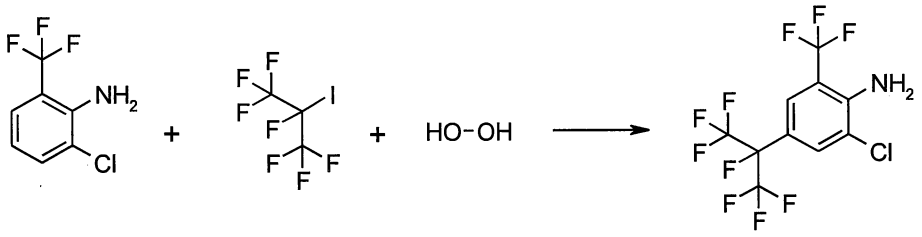
Quy trình 1 Ví dụ 4-heptafloisopropyl-2-metyl-6-triflometylanilin



D-1a

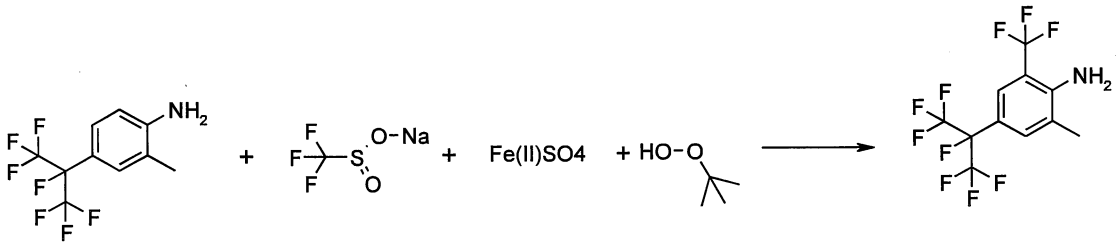
Ban đầu, nạp 17,48 g (100 mmol) 2-metyl-6-triflometylanilin trong 498 ml dimetyl sulphoxit vào bình ba cổ và tiếp đó, bổ sung 44,3 g (21,095 ml, 150 mmol) 2-iodoheptaflopropan, 29,9 ml (29,9 mmol) dung dịch sắt(II) sulphat trong nước 1 M và 5,43 ml (104 mmol) axit sulphuric 96%. Tiếp đó, hỗn hợp này được loại bỏ khí bằng argon và tiếp đó, sử dụng bơm xy lanh để bổ sung theo từng giọt nhỏ 20,4 ml dung dịch hydro peroxit trong nước 30% trong 15 phút. Tăng nhiệt độ lên đến 54°C. Cho đến khi kết thúc việc bổ sung theo từng giọt nhỏ, hỗn hợp này được gia nhiệt trong một thời gian ngắn đến 60°C. Hỗn hợp này được khuấy tiếp trong 20 phút mà không gia nhiệt, trong quá trình này nhiệt độ được giảm xuống 36°C. Để hoàn tất phản ứng, hỗn hợp này được rót vào dung dịch natri hydrocacbonat bão hòa trong nước và sản phẩm được chiết bằng etyl axetat. Các dịch chiết kết hợp được rửa đầu tiên bằng nước và tiếp đó, bằng dung dịch natri clorua bão hòa trong nước, làm khô bằng natri sulphat và cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Để tinh chế, dùng phương pháp sắc ký theo hai phần qua cột bao gồm 120 g silicagel và gradien từ xyclohexan tinh khiết đến xyclohexan/etyl axetat với tỷ lệ 95:5 (thể tích/thể tích). Thu được 18,9 g 4-heptafloisopropyl-2-metyl-6-triflometylanilin.

Theo cách tương tự, thu được 2-clo-4-heptafloisopropyl-6-triflometylanilin từ 2-clo-6-triflometylanilin và 2-iodoheptaflopropan:



Ban đầu, nạp 30 g (0,153 mol) 2-clo-6-triflometylanilin (sẵn có trên thị trường) trong 765 ml dimetyl sulphoxit (DMSO) vào bình ba cổ và tiếp đó, bổ sung 68,1 g (0,23 mol) 2-iodoheptaflopropan, 46 ml dung dịch sắt(II) sulphat trong nước 1 M và 15,4 g axit sulphuric 98%. Hỗn hợp này được loại bỏ khí bằng argon và tiếp đó, sử dụng bơm xy lanh để bổ sung 34,8 g dung dịch hydro peroxit trong nước 30% theo từng giọt nhỏ trong 30 phút. Trong quá trình này, tăng nhiệt độ lên đến 70°C. Hỗn hợp này được khuấy tiếp trong 20 phút, trong quá trình này nhiệt độ được giảm xuống 30°C. Tiếp đó, hỗn hợp phản ứng được rót vào dung dịch natri hydrocacbonat bão hòa trong nước và được chiết bằng etyl axetat. Các dịch chiết kết hợp được rửa đầu tiên bằng nước, tiếp đó, bằng dung dịch bisulphit bão hòa trong nước và dung dịch natri clorua bão hòa trong nước, làm khô bằng natri sulphat và cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Để tinh chế, dùng phương pháp sắc ký sử dụng cột bao gồm 330 g silicagel và gradien từ xyclohexan tinh khiết đến xyclohexan/etyl axetat với tỷ lệ 90:10 (thể tích/thể tích). Thu được 46,1 g 2-clo-4-heptafloisopropyl-6-triflometylanilin.

Quy trình 2 Ví dụ 4-heptafloisopropyl-2-metyl-6-triflometylanilin



D-1a

Bổ sung 25 g (91 mmol) 4-heptafloisopropyl-2-metylanilin vào hỗn hợp của 363,4 ml nước và 181,7 ml axetonitril vào bình ba cổ có dung tích 1000 ml. Tiếp đó, bổ sung 27,3 ml (27,3 mmol) dung dịch sắt(II) sulphat trong nước 1 M và 31,19 g (200 mmol) natri triflometylsulphinat. Hỗn hợp này được phủ khí argon và tiếp đó, 35,1 g (273 mmol) dung dịch tert-butyl hydroperoxit trong nước 70% được định lượng bằng bơm xy lanh trong 4,5 giờ mà không làm nguội. Tăng nhiệt độ lên đến 34°C. Sau khi bổ sung xong, khuấy tiếp trong 1 giờ nữa. Để hoàn tất phản ứng, hỗn hợp này được rót vào 425 ml dung dịch natri hydrosulphit bão hòa trong nước và được khuấy trong 15

phút. Tiếp đó, bổ sung 425 ml dung dịch natri hydro cacbonat bão hòa và hỗn hợp này được chiết ba lần bằng etyl axetat. Các pha hữu cơ kết hợp được rửa đầu tiên bằng nước và tiếp đó, bằng dung dịch natri clorua bão hòa trong nước, làm khô bằng natri sulphat và cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Sản phẩm thô được tinh chế bằng phương pháp sắc ký theo hai phần sử dụng cột bao gồm 120 g silicagel và gradien xyclohexan/etyl axetat với tỷ lệ nằm trong khoảng từ 95:5 đến 85:15 (thể tích/thể tích). Thu được 19,5 g 4-heptafloisopropyl-2-metyl-6-triflometylanilin.

HPLC-MS[a)]: logP = 4,67

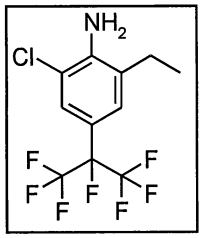
GC/MS: khối lượng (m/z) = 343, thời gian lưu: 2,98 phút, chỉ số lưu Kovats: 1089

(Agilent 6890 GC, HP5979 MSD, 10m DB-1, iD=0,18mm, FILM=0,4µm, Inj,:250°C, const, dòng: 1,6mm/phút He, Det,:MSD:280°C, FID: 320°C, Lò:50°C(1 phút) - 40°C/ phút - 320°C (3,25 phút))

^{1}H NMR (AV400, 400 MHz, d_3-axetonitril): δ (ppm) = 7,50 (s, 1 H), 7,48 (s, 1H), 5,03 (s, 2H, vạch rộng), 2,23 (s, 3 H).

Điều chế nguyên liệu khởi đầu 2-clo-6-etyl-4-heptafloisopropylanilin

Nguyên liệu khởi đầu 2-clo-6-etyl-4-heptafloisopropylanilin có công thức (**D-1b**) chưa được mô tả trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này. Nó có thể được điều chế bằng các phương pháp clo hóa đã biết từ 2-etyl-4-heptafloisopropylanilin, mà đã biết trong tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này (ví dụ, US2002/198399).



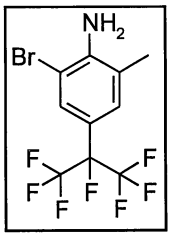
D-1b

Ban đầu, nạp 4,9 g (16,9 mmol) 2-etyl-4-heptafloisopropylanilin (được điều chế theo quy trình được mô tả trong tài liệu US2002/198399) trong 100 ml clorofom, hỗn hợp này được gia nhiệt đến 45-50°C và tiếp đó, bổ sung từ từ theo từng giọt nhỏ 2,18 ml (26,7 mmol) sulphuryl clorua, được hòa tan trong 400 ml clorofom. Hỗn hợp này được khuấy ở 50°C qua đêm, tiếp đó, bổ sung theo từng giọt nhỏ tiếp 0,34 ml (4,2 mmol) sulphuryl clorua được hòa tan trong 2 ml clorofom và hỗn hợp này được khuấy ở 50°C trong 3 giờ nữa. Sau đó, hỗn hợp này được làm nguội và dung môi được lấy ra trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Cặn được hòa trong diclometan, rửa đầu tiên bằng natri hydrosulphit và tiếp đó, bằng dung dịch natri hydroxit loãng, và làm khô bằng natri sulphat, và dung môi được chưng cất trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Để tinh chế, dùng phương pháp sắc ký sử dụng cột bao gồm 120 g silicagel với gradien từ xyclohexan tinh khiết đến xyclohexan/etyl axetat với tỷ lệ 90:10 (thể tích/thể tích). Thu được 4.25 g 2-clo-6-etyl-4-heptafloisopropylanilin.

HPLC-MS[a)]: logP = 4,67, khối lượng (m/z) = 324 [M+H]+.
^{1}H NMR (AV400, 400 MHz, d_3-axetonitril): δ (ppm) = 7,84 (s, 1 H), 7,82 (s, 1H), 7,53-7,56 (s, 2H, vạch rộng), 2,37 (q, J = 7,6 Hz, 2 H), 1,06 (t, J = 7,6 Hz, 3 H).

Điều chế nguyên liệu khởi đầu 2-bromo-6-metyl-4-heptafloisopropylanilin

Nguyên liệu khởi đầu 2-bromo-6-metyl-4-heptafloisopropylanilin có công thức (**D-1c**) chưa được mô tả trong các tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này. Nó có thể được điều chế bằng các phương pháp brom hóa đã biết (ví dụ, EP2319830, p. 327) từ 2-metyl-4-heptafloisopropylanilin mà đã biết trong tài liệu trong lĩnh vực kỹ thuật này (ví dụ, US2004/92762).

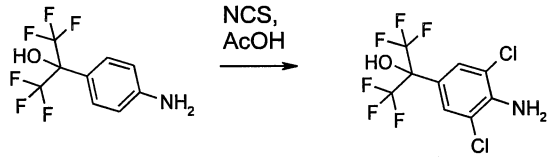


D-1c

Hòa tan 3,4 g (12,356 mmol) 2-metyl-4-heptafloisopropylanilin trong 27 ml dimetylformamit, tiếp đó, bổ sung 2,44 g (13,6 mmol) N-bromosucxinimit và hỗn hợp này được khuấy ở 60°C trong 1 giờ. Hỗn hợp này được làm nguội, được trộn với nước và được chiết ba lần mỗi lần bằng 15 ml n-hexan. Các pha hữu cơ kết hợp được rửa bằng nước, làm khô bằng natri sulphat và cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Phương pháp sắc ký sử dụng cột bao gồm 120 g silicagel với gradien từ xyclohexan tinh khiết đến xyclohexan/etyl axetat với tỷ lệ 90:10 (thể tích/thể tích) thu được 2.44 g 2-bromo-6-etyl-4-heptafloisopropylanilin.

HPLC-MS[a)]: logP = 4,38, khối lượng (m/z) = 354 [M+H]+.
^{1}H NMR (AV400, 400 MHz, d_3-axetonitril): δ (ppm) = 7,51 (s, 1 H), 7,23 (s, 1H), 4,86 (s, 2H, vạch rộng), 2,23 (s, 3 H).

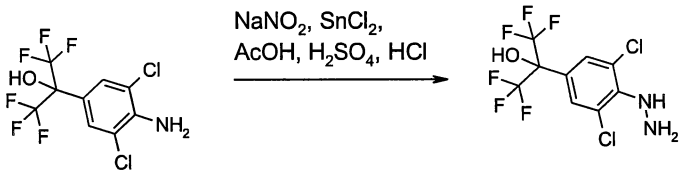
Điều chế hợp chất khởi đầu 2-(3,5-diclo-4-hydrazinophenyl)-1.1,1.3.3,3-hexafluoropropan-2-ol



Bổ sung *N*-closucxinimit (2,71 g, 20,2 mmol) vào dung dịch của 2-(4-aminophenyl)-1,1,1,3,3,3-hexafluoropropan-2-ol (2,50 g, 9,64 mmol) (việc điều chế, tham khảo, ví dụ,, W. A. Sheppard, *J. Am. Chem. Soc.* **1965**, *87*, 2410–2420) trong axit axetic băng (40 ml) ở nhiệt độ trong phòng. Hỗn hợp này được khuấy ở 75°C trong 3 giờ và tiếp đó, ở nhiệt độ trong phòng trong 14 giờ. Sau đó, bổ sung hỗn hợp này vào nước và chiết bằng EtOAc. Pha hữu cơ được rửa bằng nước và dung dịch $NaHCO_3$ bão hòa trong nước và làm khô trên magie sulphat. Sau khi loại bỏ dung môi, cặn được hòa trong MTBE và các chất rắn được lọc. Dịch lọc được cô trong điều kiện áp suất giảm và sản phẩm thô được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột trên SiO_2 (gradien *n*-hexan/EtOAc). Thu được 2,89 g (91%) of 2-(4-amino-3,5-dichlorphenyl)-1,1,1,3,3,3-hexafluoropropan-2-ol.

HPLC-MS[a)]: logP = 3,04, khối lượng (m/z) = 328 $[M+H]^+$.

^{1}H NMR (400 MHz, d_3-axetonitril): δ = 5,13 (br s, 2 H), 6,02 (br s, 1 H), 7,51 (s, 2 H).

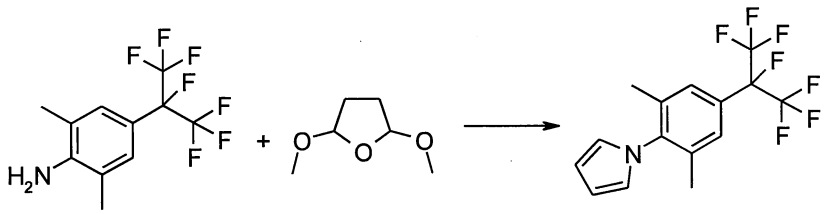


Bổ sung theo từng giọt nhỏ dung dịch của natri nitrit (455 mg, 6,59 mmol) trong 2,5 ml axit sulphuric vào dung dịch của 2-(4-amino-3,5-dichlorphenyl)-1,1,1,3,3,3-hexafluoro-propan-2-ol (1,88 g, 5,73 mmol) trong 5 ml axit axetic băng được gia nhiệt đến 55°C, và hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ này trong một giờ nữa. Sau đó, hỗn hợp này được làm nguội đến 0°C và bổ sung theo từng giọt nhỏ dung dịch của thiếc(II) clorua (3,37 g, 17,7 mmol) trong HCl đậm đặc (10 ml). Hỗn hợp này được khuấy ở 0°C trong một giờ nữa, tiếp đó, được bổ sung vào nước đá, được kiềm hóa bằng dung dịch natri hydroxit và được chiết bằng EtOAc. Pha hữu cơ được rửa bằng dung dịch natri clorua bão hòa và làm khô trên magie sulphat, và dung môi được lấy ra trong điều kiện áp suất giảm. Thu được 1,41 g (độ tinh khiết 90%, 64% theo lý thuyết) 2-(3,5-diclo-4-hydrazinophenyl)-1,1,1,3,3,3-hexafluoropropan-2-ol.

HPLC-MS[a)]: logP = 1,92, khối lượng (m/z) = 343 $[M+H]^+$.

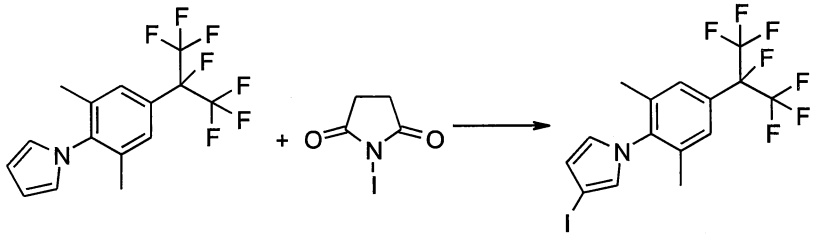
^{1}H NMR (600 MHz, d_3-axetonitril): δ = 4,14 (br s, 2 H), 5,90 (br s, 1 H), 6,50 (br s, 1 H), 7,58 (s, 2 H).

Các ví dụ I-T46-1

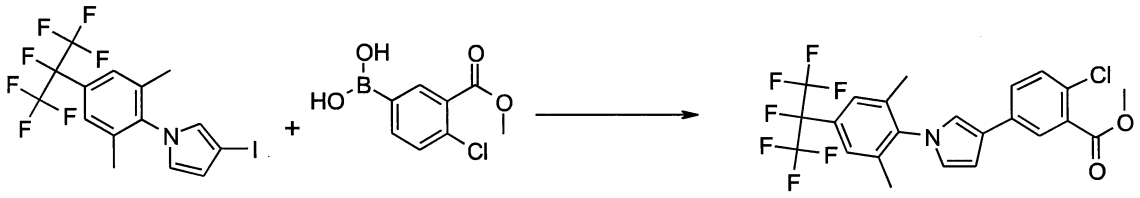


Ban đầu, nạp 10 g (34,6 mmol) 2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]anilin trong 60 ml axit axetic băng, và bổ sung 5,02 g (38,04 mmol)

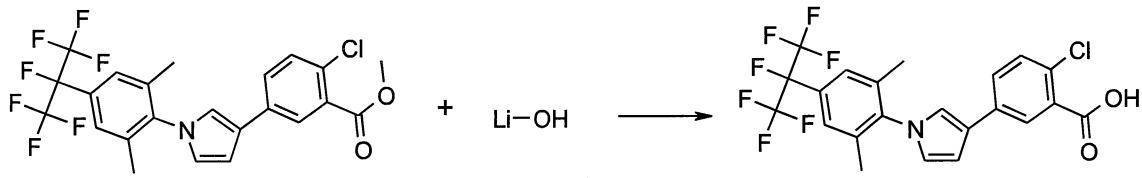
2,6-dimetoxy-tetrahydrofuran. Dung dịch thu được được gia nhiệt ở 120°C trong hai giờ. Sau đó, nó được làm nguội một chút và các cấu tử dễ bay hơi được làm bay hơi trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Cặn được khuấy với nước và các chất rắn được lọc kết hợp với hút. Tiếp đó, bánh lọc được hòa tan trong diclometan, và dung dịch được làm khô bằng natri sulphat và cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Thu được 10,38 g 1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrol.



Hòa tan 1,5 g (4,293 mmol) 1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]-pyrol trong 60 ml n-hexan, và bổ sung 966 mg (4,3 mmol) N-iodosucxinimit. Sau đó, hỗn hợp này được để ở nhiệt độ trong phòng và được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 6 ngày. Tiếp đó, bổ sung tiếp 242 mg (1,1 mmol) N-iodosucxinimit và hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng qua đêm. Sau đó, bổ sung lượng dư dung dịch natri hydro-sulphit trong nước và một chút etyl axetat. Pha hữu cơ được lấy ra và đầu tiên được rửa hai lần bằng dung dịch natri hydrosulphit trong nước, tiếp đó, bằng dung dịch natri clorua bão hòa, làm khô bằng natri sulphat và cô. Để tinh chế, dùng phương pháp sắc ký sử dụng cột bao gồm 120 g silicagel và gradien từ xyclohexan tinh khiết đến xyclohexan/etyl axetat với tỷ lệ 95:5 (thể tích/thể tích). Thu được 453 mg hỗn hợp của 1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]-3-iodopyrol 80% và 1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]-2-iodopyrol 16%.

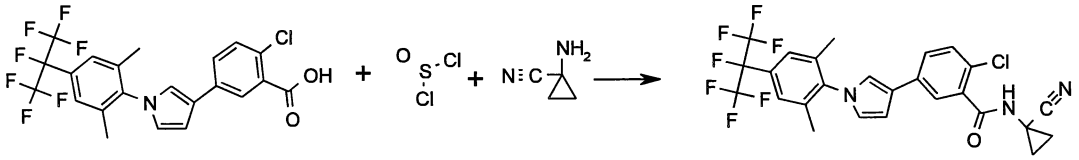


Ban đầu, nạp 998 mg (1,696 mmol) hỗn hợp của 1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]-3-iodopyrol 80% và 1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]-2-iodopyrol 16% và 364 mg (1,7 mmol) axit 4-clo-3-(metoxy-cacbonyl)phenylboric trong 10 ml 2-propanol. Sau đó, không khí được thay bằng argon, và bổ sung 5,2 ml dung dịch natri hydrocacbonat 1 M trong nước và 98 mg (0,085 mmol) tetrakis(triphenylphosphin)paladi(0) trong khí argon. Sau đó, hỗn hợp này được gia nhiệt đến hồi lưu trong 3 giờ. Để hoàn tất phản ứng, hỗn hợp này được làm lạnh một chút, tiếp đó, cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Cặn được phân bố giữa etyl axetat và nước. Pha hữu cơ được lấy ra, rửa bằng dung dịch natri clorua bão hòa và cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Thu được 1.57 g metyl 2-clo-5-[1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrol-3-yl]benzoat thô.



Ban đầu, nạp 416 mg (0,33 mmol, độ tinh khiết khoảng 40%) metyl 2-clo-5-[1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrol-3-yl]benzoat thô trong hỗn hợp của 18 ml dioxan và 6 ml nước, và bổ sung 61 mg (1,46 mmol) lithi hydroxit hydrat. Hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng cho đến khi kết thúc việc hòa tan, tiếp đó, gia nhiệt trong điều kiện hồi lưu trong 2 giờ. Tiếp đó, hỗn hợp này được cô trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm, và cặn được trộn với một chút nước và được điều chỉnh đến độ pH 1 bằng axit clohydric đậm đặc. Tiếp đó, hỗn hợp này được chiết hai lần bằng etyl axetat, và các dịch chiết kết hợp được rửa bằng dung dịch natri clorua bão hòa, làm khô bằng natri sulphat và cô. Thu được 207 mg

axit 2-clo-5-[1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrol-3-yl]-benzoic thô dưới dạng cặn.

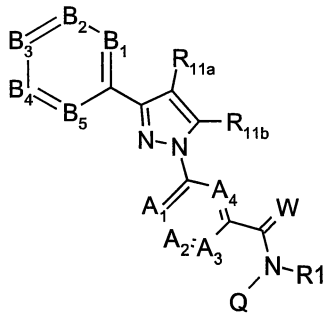


Hòa tan 137 mg (0,11 mmol, độ tinh khiết khoảng 38%) axit 2-clo-5-[1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrol-3-yl]benzoic thô trong 15 ml toluen, và bổ sung 230 mg (1,93 mmol) thionyl clorua. Hỗn hợp này được gia nhiệt đến hồi lưu trong 3 giờ. Sau đó, tất cả các cấu tử dễ bay hơi được lấy ra trên thiết bị bay hơi quay trong điều kiện áp suất giảm. Cặn được hòa trong 4 ml diclometan và bổ sung theo từng giọt nhỏ vào hỗn hợp của 82 mg (0,69 mmol) 1-xyanoxyclopropylamin hydroclorua và 98 mg (0,96 mmol) trietylamin trong 2 ml diclometan ở 0°C. Sau đó, hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng qua đêm. Để hoàn tất phản ứng, hỗn hợp này được rửa bằng dung dịch natri dihydrophosphat 5% trong nước, tiếp đó, bằng dung dịch natri clorua bão hòa, và pha hữu cơ được làm khô bằng natri sulphat và cô. Cặn được tinh chế bằng phương pháp sắc ký sử dụng cột bao gồm 15 g silicagel và xyclohexan/etyl axetat với tỷ lệ 85:15 (thể tích/thể tích). Các phân đoạn chứa sản phẩm được cô và được tinh chế bằng sắc ký lỏng hiệu năng cao (High performance liquid chromatography - HPLC) điều chế (Zorbax Eclipse Plus C18 1,8 µm, 50x4,6mm trong gradien trong axetonitril/H_3PO_4 0,1% trong nước. Thu được 13 mg 2-clo-N-xyclopropyl-5-[1-[2,6-dimetyl-4-[1,2,2,2-tetraflo-1-(triflometyl)etyl]phenyl]pyrol-3-yl]benzamit (hợp chất **I-T46-1**).

HPLC-MS[a)]: logP = 4,90, khối lượng (m/z) = 558 [M+H]+.

^{1}H NMR (400 MHz, d_3-axetonitril): δ = 7,63-7,67 (m, 2 H), 7,56 (s (vạch rộng), 1 H (N-H)), 7,51 (s, 2H), 7,41 (d, J=8,3 Hz, 1 H), 7,16-7,17 (m, 1 H), 6,75-6,77 (m, 1 H), 6,72-6,73 (m, 1 H), 2,14 (s, 6H), 1,55-1,59 (m, 2 H), 1,32-1,39 (m, 2 H).

Bảng I-T2



I-T2

B_2 và B_4 = C-H, W = O

Ví dụ số	B_1	B_3	B_5	R_1	R_{11a}	R_{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] [a)1)]
I-T2-1	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	xyclopropyl	4,9	534
I-T2-2	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	1-(xyano)xyclopropyl	4,8	559

Ví dụ số	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] a)1)
I-T3-1	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,4	534
I-T3-2	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4,7	577
I-T3-3	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,2	559
I-T3-4	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	thietan-3-yl	4,7	566
I-T3-5	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(triflometyl)xyclopropyl	4,6	602
I-T3-6	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	2-oxo-2-(2,2,2-trifloetylamino)-etyl	4,1	633
I-T3-7	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	xyclopropyl	3,4	501
I-T3-8	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	3,4	526
I-T3-9	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-H	CF	O	H	xyclopropyl	4,3	518
I-T3-10	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-H	CF	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,2	543
I-T3-11	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-Cl	C-H	C-F	C-H	O	H	xyclopropyl	4,9	552
I-T3-12	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-Cl	C-H	C-F	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,7	577
I-T3-13	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	CF	C-H	C-H	C-H	O	H	xyclopropyl	4,5	518
I-T3-14	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	CF	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,5	552

Ví dụ số	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] a)1)
I-T3-15	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-CF_3	C-H	C-H	O	H	xyclopropyl	4,9	568
I-T3-16	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-CH_3	C-H	C-H	C-H	O	H	xyclopropyl	4,4	514
I-T3-17	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	CF	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,4	577
I-T3-18	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-CF_3	C-H	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,7	593
I-T3-19	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	CF	C-H	C-H	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,3	543
I-T3-20	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,8	535
I-T3-21	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	3,7	560
I-T3-22	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-H	C-F	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,1	583
I-T3-23	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,2	599
I-T3-24	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,3	574
I-T3-25	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4,7	616
I-T3-26	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	$CH_2CH_2CF_3$	4,7	630
I-T3-27	C-CH_3	C-CF_3	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	3,4	499
I-T3-28	C-CH_3	C-CF_3	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	H	O	H	xyclopropyl	3,5	474
I-T3-29	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	xyclopropyl	3,3	541
I-T3-30	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	3,2	566
I-T3-31	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,3	540
I-T3-32	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4,7	582
I-T3-33	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	$CH_2CH_2CF_3$	4,7	596

Ví dụ số	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] a)1)
I-T3-34	C-OCF_3	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,6	615
I-T3-35	C-OCF_3	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,7	590
I-T3-36	C-OCF_3	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	5,0	632
I-T3-37	C-OCF_3	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	thietan-3-yl	4,9	622
I-T3-38	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,5	559
I-T3-39	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,6	534
I-T3-40	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4,9	576
I-T3-41	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	thietan-3-yl	4,9	566
I-T3-42	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,8	575
I-T3-43	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	3,8	600
I-T3-44	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,7	548
I-T3-45	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	5,0	590
I-T3-46	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,6	573
I-T3-47	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	thietan-3-yl	5,0	580
I-T3-48	C-F	C-CF_3	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,2	442
I-T3-49	C-F	C-CF_3	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	3,2	467
I-T3-50	C-F	C-CF_3	C-OCH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,1	454
I-T3-51	C-F	C-CF_3	C-OCH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	3,1	479
I-T3-52	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,3	574

Ví dụ số	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] a)1)
I-T3-53	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,3	599
I-T3-54	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,4	588
I-T3-55	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,3	613
I-T3-56	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,4	608
I-T3-57	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,3	633
I-T3-58	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4,7	650
I-T3-59	C-Cl	C-CF_3	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	3,1	466
I-T3-60	C-Cl	C-CF_3	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,2	441
I-T3-61	C-F	C-i-C_3F_7	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,0	542
I-T3-62	C-F	C-i-C_3F_7	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	3,9	567
I-T3-63	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,4	554
I-T3-64	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,2	579
I-T3-65	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-F	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,4	577
I-T3-66	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-F	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,6	591
I-T3-67	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-F	O	H	xyclopropyl	4,4	552
I-T3-68	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-F	O	H	xyclopropyl	4,6	566
I-T3-69	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-H	C-F	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,3	557
I-T3-70	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-H	C-F	O	H	xyclopropyl	4,3	532
I-T3-71	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,5	593
I-T3-72	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,6	568
I-T3-73	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-F	O	H	xyclopropyl	4,5	592
I-T3-74	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-H	C-F	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,1	543
I-T3-75	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-H	C-F	O	H	xyclopropyl	4,2	518
I-T3-76	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	3,4	540

Ví dụ số	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] a)1)
I-T3-77	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	xyclopropyl	3,4	515
I-T3-78	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	3,2	526
I-T3-79	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	xyclopropyl	3,3	501
I-T3-80	C-C_2H_5	C-C_2F_5	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,2	523
I-T3-81	C-C_2H_5	C-C_2F_5	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,3	498
I-T3-82	C-C_2H_5	C-C_2F_5	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4,0	540
I-T3-83	C-C_2H_5	C-C_2F_5	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	thietan-3-yl	4,6	530
I-T3-84	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4,7	630
I-T3-85	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	thietan-3-yl	4,7	620
I-T3-86	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-Br	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,5	598
I-T3-87	C-Cl	C-OCF_3	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	3,6	515
I-T3-88	C-Cl	C-OCF_3	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,6	490
I-T3-89	C-Cl	C-OCF_3	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	3,5	481
I-T3-90	C-Cl	C-OCF_3	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,6	456
I-T3-91	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	xyclopropyl	3,3	555
I-T3-92	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	3,4	580
I-T3-93	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(tert.butyl)xyclopropyl	4,7	588
I-T3-94	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(tert.butyl)xyclopropyl	4,7	602
I-T3-95	C-Cl	C-CF_3	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	3,1	500
I-T3-96	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	xyclopropyl	3,3	515
I-T3-97	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	3,4	540

Ví dụ số	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] a)1)
								CH_3						
I-T3-98	C-Cl	C-CF_3	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,1	475
I-T3-99	C-Cl	C-CF_3	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	3,5	489
I-T3-100	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	4,4	589
I-T3-101	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	4,4	549
I-T3-102	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	1-(xyano)xyclopropyl	4,3	614
I-T3-103	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	1-(xyano)xyclopropyl	4,3	574
I-T3-104	C-C_2H_5	C-i-C_3F_8	C-H	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,2	535
I-T3-105	C-C_2H_5	C-i-C_3F_8	C-H	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,1	560
I-T3-106	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,0	589
I-T3-107	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	4,5	603
I-T3-108	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,0	614
I-T3-109	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,2	549
I-T3-110	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,1	574
I-T3-111	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	1-(xyano)xyclopropyl	4,4	628
I-T3-112	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,0	609
I-T3-113	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	4,0	623
I-T3-114	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,0	634
I-T3-115	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	1-(xyano)xyclopropyl	3,8	554
I-T3-116	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	1-(xyano)xyclopropyl	4,3	648
I-T3-117	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	xyclopropyl	3,5	569
I-T3-118	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	3,8	583

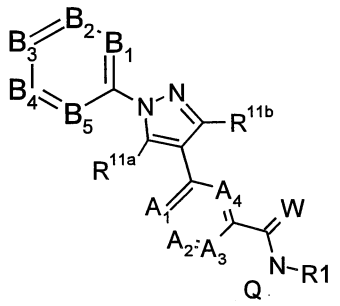
Ví dụ số	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] a)1)
I-T3-119	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	3,6	594
I-T3-120	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	3,6	529
I-T3-121	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	N	C-H	C-Cl	N	O	H	xyclopropyl	4,5	536
I-T3-122	C-Cl	C-CF_3	N	H	H	C-H	C-H	C-H	C-H	O	H	xyclopropyl	3,0	407
I-T3-123	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	1-(xyano)xyclopropyl	3,9	608
I-T3-124	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	xyclopropyl	3,5	589
I-T3-125	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	3,8	614
I-T3-126	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	CN	NH_2	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,1	639
I-T3-127	C-Cl	C-CF_3	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	xyclopropyl	2,5	455
I-T3-128	C-Cl	C-CF_3	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	2,8	469
I-T3-129	C-Cl	C-CF_3	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	2,6	480
I-T3-130	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	3,8	603
I-T3-131	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	1-(xyano)xyclopropyl	3,9	628
I-T3-132	C-Cl	C-CF_3	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	1-(xyano)xyclopropyl	2,9	494
I-T3-133	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	3,7	569
I-T3-134	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	4,9	588
I-T3-135	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-(1-pyroli	C-H	O	H	xyclopropyl	4,3	610

Ví dụ số	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] a)1)
								dinyl)						
I-T3-136	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-NHCH_3	C-H	O	H	xyclopropyl	3,5	570
I-T3-137	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-NH-xyclopropyl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,4	596
I-T3-138	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-NH-$CH_2CH_2OCH_3$	C-H	O	H	xyclopropyl	4,1	614
I-T3-139	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-xyclopropyl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,1	566
I-T3-140	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-xyclopropyl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,2	541
I-T3-141	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-OCH_3	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,4	556
I-T3-142	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-xyclopropyl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	4,6	555
I-T3-143	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-OCH_3	C-H	O	H	xyclopropyl	4,6	531
I-T3-144	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	4,4	545

Ví dụ số	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] a)1)
								OCH_3						
I-T3-145	C-Cl	C-CF_3	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	C_2H_5	xyclopropyl	3,8	503
I-T3-146	C-Cl	C-CF_3	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	N-metyl-pyrazol-3-yl	2,8	515
I-T3-147	C-Cl	C-CF_3	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	C_2H_5	4,0	443
I-T3-148	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Br	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,5	652
I-T3-149	C-CF_3	C-CF_3	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	3,5	500
I-T3-150	C-CF_3	C-CF_3	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,6	475
I-T3-151	C-Cl	C-i-C_3F_7	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,0	566
I-T3-152	C-Cl	C-i-C_3F_7	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,1	541
I-T3-153	C-$S(O)C_2H_5$	C-i-C_3F_7	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	3,7	608
I-T3-154	C-$S(O_2)C_2H_5$	C-i-C_3F_7	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	3,8	624
I-T3-155	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Br	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,4	677
I-T3-156	C-SC_2H_5	C-i-C_3F_7	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,7	567
I-T3-157	C-$S(O)C_2H_5$	C-i-C_3F_7	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,8	583
I-T3-158	C-$S(O_2)C_2H_5$	C-i-C_3F_7	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,9	599
I-T3-159	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(thiocarbamoyl)-xyclopropyl	3,8	668

Ví dụ số	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] a)1)
I-T3-160	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Br	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,0	653
I-T3-161	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	S	H	xyclopropyl	5,0	604
I-T3-162	C-OCF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,6	624
I-T3-163	C-OCF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,5	649

Bảng I-T3



I-T3

B_2 và B_4 = C-H

Ví dụ số	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] [a)1)]
I-T3-1	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,4	534
I-T3-2	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4,7	577
I-T3-3	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	4,2	559
I-T3-4	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	thietan-3-yl	4,7	566
I-T3-5	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(triflometyl)xyclo propyl	4,6	602
I-T3-6	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	2-oxo-2-(2,2,2-trifloetylamino)-etyl	4,1	633
I-T3-7	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	xyclopropyl	3,4	501
I-T3-8	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	3,4	526
I-T3-9	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-H	C-F	O	H	xyclopropyl	4,3	518
I-T3-10	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-H	C-F	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	4,2	543
I-T3-11	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-Cl	C-H	C-F	C-H	O	H	xyclopropyl	4,9	552
I-T3-12	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-Cl	C-H	C-F	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	4,7	577

Ví dụ số	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] [a)1)]
I-T3-13	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-F	C-H	C-H	C-H	O	H	xyclopropyl	4,5	518
I-T3-14	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-F	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,5	552
I-T3-15	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-CF3	C-H	C-H	O	H	xyclopropyl	4,9	568
I-T3-16	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-CH_3	C-H	C-H	C-H	O	H	xyclopropyl	4,4	514
I-T3-17	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-F	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	4,4	577
I-T3-18	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-CF_3	C-H	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	4,7	593
I-T3-19	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-F	C-H	C-H	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	4,3	543
I-T3-20	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,8	535
I-T3-21	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	3,7	560
I-T3-22	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-H	C-F	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	4,1	583
I-T3-23	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	4,2	599
I-T3-24	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,3	574
I-T3-25	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4,7	616

Ví dụ số	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] [a)1)]
I-T3-26	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	$CH_2CH_2CF_3$	4,7	630
I-T3-27	C-CH_3	C-H	C-CF_3	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	3,4	499
I-T3-28	C-CH_3	C-H	C-CF_3	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,5	474
I-T3-29	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	xyclopropyl	3,3	541
I-T3-30	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	3,2	566
I-T3-31	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,3	540
I-T3-32	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4,7	582
I-T3-33	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	$CH_2CH_2CF_3$	4,7	596
I-T3-34	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	4,6	615
I-T3-35	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,7	590
I-T3-36	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	5,0	632
I-T3-37	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	thietan-3-yl	4,9	622
I-T3-38	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	4,5	559
I-T3-39	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,6	534
I-T3-40	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4,9	576
I-T3-41	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	thietan-3-yl	4,9	566

Ví dụ số	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] [a)1)]
I-T3-42	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,8	575
I-T3-43	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	3,8	600
I-T3-44	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,7	548
I-T3-45	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	5,0	590
I-T3-46	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	4,6	573
I-T3-47	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	thietan-3-yl	5,0	580
I-T3-48	C-F	C-H	C-CF3	C-H	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,2	442
I-T3-49	C-F	C-H	C-CF3	C-H	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	3,2	467
I-T3-50	C-F	C-H	C-CF3	C-H	C-OCH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,1	454
I-T3-51	C-F	C-H	C-CF3	C-H	C-OCH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	3,1	479
I-T3-52	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,3	574
I-T3-53	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	4,3	599
I-T3-54	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,4	588
I-T3-55	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	4,3	613

Ví dụ số	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] [a)1)]
I-T3-56	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,4	608
I-T3-57	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	4,3	633
I-T3-58	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4,7	650
I-T3-59	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	3,1	466
I-T3-60	C-Cl	C-H	C-CF3	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,2	441
I-T3-61	C-F	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,0	542
I-T3-62	C-F	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	3,9	567
I-T3-63	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,4	554
I-T3-64	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	4,2	579
I-T3-65	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-F	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	4,3	577
I-T3-66	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-F	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	4,6	591
I-T3-67	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-F	O	H	xyclopropyl	4,4	552
I-T3-68	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-F	O	H	xyclopropyl	4,8	566
I-T3-69	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-H	C-F	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	4,5	557
I-T3-70	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-H	C-F	O	H	xyclopropyl	4,7	532

Ví dụ số	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] [a)1)]
I-T3-71	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	4,5	593
I-T3-72	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,6	568
I-T3-73	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-F	O	H	xyclopropyl	4,5	592
I-T3-74	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-H	C-F	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	4,5	543
I-T3-75	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-H	C-F	O	H	xyclopropyl	4,7	518
I-T3-76	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	3,4	540
I-T3-77	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	xyclopropyl	3,4	515
I-T3-78	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	3,8	526
I-T3-79	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	xyclopropyl	3,3	501
I-T3-80	C-C_2H_5	C-H	C-C_2F_5	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	4,2	523
I-T3-81	C-C_2H_5	C-H	C-C_2F_5	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,3	498
I-T3-82	C-C_2H_5	C-H	C-C_2F_5	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4,0	540
I-T3-83	C-C_2H_5	C-H	C-C_2F_5	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	thietan-3-yl	4,6	530
I-T3-84	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4,7	630
I-T3-85	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	thietan-3-yl	4,7	620
I-T3-86	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Br	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,5	598

Ví dụ số	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] [a)1)]
I-T3-87	C-Cl	C-H	C-OCF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	3,6	515
I-T3-88	C-Cl	C-H	C-OCF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,6	490
I-T3-89	C-Cl	C-H	C-OCF_3	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	3,5	481
I-T3-90	C-Cl	C-H	C-OCF_3	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,6	456
I-T3-91	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	xyclopropyl	3,3	555
I-T3-92	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	3,4	580
I-T3-93	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(tert.butyl)xyclopr opyl	4,7	588
I-T3-94	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(tert.butyl)xyclopr opyl	4,7	602
I-T3-95	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	3,1	500
I-T3-96	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	xyclopropyl	3,3	515
I-T3-97	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	3,4	540
I-T3-98	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,1	475
I-T3-99	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	3,5	489
I-T3-100	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	4,4	589
I-T3-101	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	4,4	549

Ví dụ số	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] [a)1)]
I-T3-102	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	1-(xyano)xycloprop yl	4,3	614
I-T3-103	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	1-(xyano)xycloprop yl	4,3	574
I-T3-104	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_8	C-H	C-H	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,2	535
I-T3-105	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_8	C-H	C-H	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	4,1	560
I-T3-106	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,0	589
I-T3-107	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	4,5	603
I-T3-108	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	4,0	614
I-T3-109	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,2	549
I-T3-110	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	4,1	574
I-T3-111	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	1-(xyano)xycloprop yl	4,4	628
I-T3-112	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,0	609
I-T3-113	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	4,0	623
I-T3-114	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	4,0	634

Ví dụ số	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] [a)1)]
I-T3-115	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	1-(xyano)xycloprop yl	3,8	554
I-T3-116	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	1-(xyano)xycloprop yl	4,3	648
I-T3-117	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	xyclopropyl	3,5	569
I-T3-118	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	3,8	583
I-T3-119	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	3,6	594
I-T3-120	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	3,6	529
I-T3-121	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	N	C-H	C-Cl	N	O	H	xyclopropyl	4,5	536
I-T3-122	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-H	C-H	O	H	xyclopropyl	3,0	407
I-T3-123	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	1-(xyano)xycloprop yl	3,9	608
I-T3-124	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	xyclopropyl	3,5	589
I-T3-125	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	3,8	614
I-T3-126	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	CN	NH_2	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	4,1	639
I-T3-127	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	xyclopropyl	2,5	455
I-T3-128	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	2,8	469
I-T3-129	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	2,6	480

Ví dụ số	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] [a)1)]
I-T3-130	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	3,8	603
I-T3-131	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	1-(xyano)xycloprop yl	3,9	628
I-T3-132	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	1-(xyano)xycloprop yl	2,9	494
I-T3-133	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	3,7	569
I-T3-134	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	4,9	588
I-T3-135	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-(1-pyrolidi nyl)	C-H	O	H	xyclopropyl	4,3	610
I-T3-136	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-$NHCH_3$	C-H	O	H	xyclopropyl	3,5	570
I-T3-137	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-NH-xyclopr opyl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,4	596
I-T3-138	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-NH-CH_2CH_2 OCH_3	C-H	O	H	xyclopropyl	4,1	614
I-T3-139	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-xyclopr opyl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	4,1	566
I-T3-140	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-xyclopr opyl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,2	541
I-T3-141	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-OCH_3	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	4,4	556

Ví dụ số	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] [a)1)]
I-T3-142	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-xyclopropyl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	4,6	555
I-T3-143	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-OCH_3	C-H	O	H	xyclopropyl	4,6	531
I-T3-144	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-OCH_3	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	4,4	545
I-T3-145	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	C_2H_5	xyclopropyl	3,8	503
I-T3-146	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	N-metyl-pyrazol-3-yl	2,8	515
I-T3-147	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	C_2H_5	4,0	443
I-T3-148	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Br	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,5	652
I-T3-149	C-CF_3	C-H	C-CF_3	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	3,5	500
I-T3-150	C-CF_3	C-H	C-CF_3	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,6	475
I-T3-151	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	4,0	566
I-T3-152	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,1	541
I-T3-153	C-$S(O)C_2H_5$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	3,7	608
I-T3-154	C-$S(O_2)C_2H_5$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	3,8	624
I-T3-155	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Br	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	4,4	677
I-T3-156	C-SC_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,7	567

Ví dụ số	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] [a)1)]
I-T3-157	C-$S(O)C_2H_5$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,8	583
I-T3-158	C-$S(O_2)C_2H_5$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,9	599
I-T3-159	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(thiocarbamoyl)-xyclopropyl	3,8	668
I-T3-160	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Br	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,0	653
I-T3-161	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	S	H	xyclopropyl	5,0	604
I-T3-162	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,6	624
I-T3-163	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	4,5	649
I-T3-164	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-CN	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	3,1	490
I-T3-165	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Br	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	3,9	678
I-T3-166	C-SCH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	4,3	578
I-T3-167	C-SC_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	4,6	592
I-T3-168	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-NO_2	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,3	485
I-T3-169	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-NO_2	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	3,2	510

Ví dụ số	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] [a)1)]
I-T3-170	C-SC_2H_5	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	3,7	525
I-T3-171	C-SCH_2CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	4,5	646
I-T3-172	C-SC_2H_5	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,9	500
I-T3-173	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-OCH_3	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	4,4	585
I-T3-174	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-CN	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,1	465
I-T3-175	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-I	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,5	646
I-T3-176	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-I	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	4,4	671
I-T3-177	C-SC_2H_5	C-H	C-CF_3	C-H	C-CN	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	3,4	516
I-T3-178	C-$S(O_2)C_2H_5$	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,2	532
I-T3-179	C-$S(O)C_2H_5$	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,0	516
I-T3-180	C-$S(O_2)C_2H_5$	C-H	C-CF_3	C-H	C-CN	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	2,8	523
I-T3-181	C-$S(O)C_2H_5$	C-H	C-CF_3	C-H	C-CN	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	2,7	507
I-T3-182	C-$S(O)C_2H_5$	C-H	C-CF_3	C-H	C-CN	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	3,0	541

Ví dụ số	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] [a)1)]
I-T3-183	C-$S(O_2)C_2H_5$	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	3,1	557
I-T3-184	C-Cl	C-F	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xycloprop yl	3,6	492
I-T3-185	C-Cl	C-F	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	3,6	517
I-T3-186	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xycloprop yl	3,6	458
I-T3-187	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	3,3	483
I-T3-188	C-F	C-F	C-CF_3	C-F	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	3,4	503
I-T3-189	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	xycloprop yl	4,3	625
I-T3-190	C-$S(O_2)C_2H_5$	C-H	C-CF_3	C-H	C-CN	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	2,9	548
I-T3-191	C-SC_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-SC_2H_5	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	4,7	651
I-T3-192	C-SC_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	4,5	625
I-T3-193	C-CHF_2	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xycloprop yl	4,4	590
I-T3-194	C-F	C-F	C-CF_3	C-F	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(carbamoyl)-xycloprop yl	2,8	521

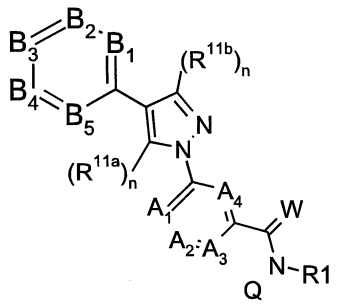
Ví dụ số	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] [a)1)]
I-T3-195	C-$S(O)C_2H_5$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	3,8	641
I-T3-196	C-$OCHF_2$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,9	607
I-T3-197	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	(1-xyano-xyclopropyl)metyl	4,0	628
I-T3-198	C-$S(O_2)C_2H_5$	C-H	C-i-C_3F_8	C-H	C-$S(O_2)C_2H_5$	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	3,7	715
I-T3-199	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	(1-xyano-xyclopropyl)metyl	1.17 min[b)]	648
I-T3-200	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	4,1	650
I-T3-201	C-$S(O_2)C_2H_5$	C-H	C-i-C_3F_8	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	4,0	657
I-T3-202	C-SC_2H_5	C-H	C-i-C_3F_8	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	4,5	605
I-T3-203	C-SC_2H_5	C-H	C-i-C_3F_8	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,6	580
I-T3-204	C-CN	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	3,9	580
I-T3-205	C-CN	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,5	566
I-T3-206	C-$S(O)C_2H_5$	C-H	C-i-C_3F_8	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	3,6	621
I-T3-207	C-CN	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	3,5	591

Ví dụ số	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] [a)1)]
I-T3-208	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	4,6	639
I-T3-209	C-$S(O_2)C_2H_5$	C-H	C-i-C_3F_8	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	3,8	637
I-T3-210	C-$S(O_2)C_2H_5$	C-H	C-i-C_3F_8	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,9	612
I-T3-211	C-OC_2H_5	C-H	C-i-C_3F_9	C-H	C-OC_2H_5	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	4,7	609
I-T3-212	C-I	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	4,3	691
I-T3-213	C-I	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,4	666
I-T3-214	C-$OCHF_2$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,3	606
I-T3-215	C-$OCHF_2$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	4,1	631
I-T3-216	C-$OCHF_2$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	4,7	620
I-T3-217	C-$OCHF_2$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	4,2	621
I-T3-218	C-$OCHF_2$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	3,7	632
I-T3-219	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	5,1	638
I-T3-220	C-Cl	C-H	C-$C(CF_3)_2OH$	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	3,4	587
I-T3-221	C-Cl	C-H	C-$C(CF_3)_2OH$	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	3,0	573

Ví dụ số	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] [a)1)]
I-T3-222	C-Cl	C-H	C-$C(CF_3)_2$OH	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	3,0	598
I-T3-223	C-Cl	C-H	C-$C(CF_3)_2$OH	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	1-(xyano)xycloprop yl	3,3	612
I-T3-224	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-I	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,7	716
I-T3-225	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-I	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	5,2	729
I-T3-226	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-I	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	4,6	740
I-T3-227	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-I	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,5	700
I-T3-228	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-I	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xycloprop yl	4,4	725
I-T3-229	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-I	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	5,1	714

* b) Thời gian lưu được tính bằng:
Thiết bị: hệ Waters ACQUITY SQD UPLC; Cột: Waters Acquity UPLC HSS T3 1,8 µ 50 x 1 mm; Dung môi rửa giải A: 1 l nước + 0,25 ml axit formic độ mạnh 99%; Dung môi rửa giải B: 1 l axetonitril + 0,25 ml axit formic độ mạnh 99%; Gradien: 0,0 phút A 90%→ 1,2 phút A 5%→ 2,0 phút A5%; Nhiệt độ lò: 50°C; Tốc độ dòng: 0,40 ml/phút; Phát hiện UV: 208-400 nm.

Bảng I-T4

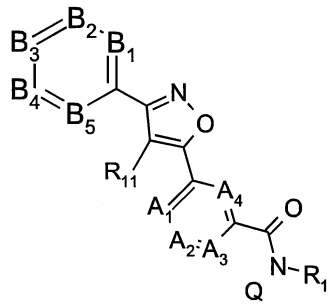


I-T4

B_2 và B_4 = C-H

Ví dụ số	B_1	B_3	B_5	R_1	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R_1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] [a)1)]
I-T4-1	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,7	534
I-T4-2	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,6	559
I-T4-3	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,4	535
I-T4-4	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,3	560

Bảng I-T22

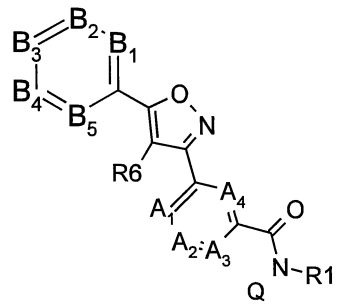


I-T22

B_2 và B_4 = C-H, W = O

Ví dụ số	B_1	B_3	B_5	R_1	R_{11}	A_1	A_2	A_3	A_4	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] [a)1)]
I-T22-1	C-CH3	C-i-C_3F_7	C-CH3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	xyclopropyl	4,8	535
I-T22-2	C-CH3	C-i-C_3F_7	C-CH3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	1-(xyano)xyclopropyl	4,6	560
I-T22-3	C-CH3	C-i-C_3F_7	C-CH3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	CH2CF3	5	577
I-T22-4	C-CF3	C-i-C_3F_7	C-CH3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	1-(xyano)xyclopropyl	4,4	615
I-T22-5	C-CF3	C-i-C_3F_7	C-CH3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	xyclopropyl	4,9	589
I-T22-6	C-CF3	C-i-C_3F_7	C-CH3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	xyclopropyl	4,5	590
I-T22-7	C-CF3	C-i-C_3F_7	C-CH3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	1-(xyano)xyclopropyl	4,7	614

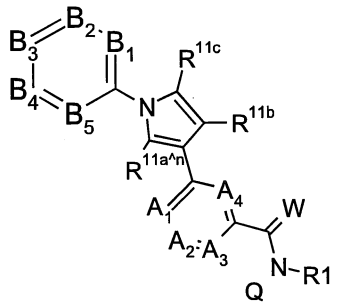
Bảng I-T23



B_2 và B_4 = C-H

Ví dụ số	**B_1**	**B_3**	**B_5**	**R^1**	**R^{11}**	**A_1**	**A_2**	**A_3**	**A_4**	**W**	**Q**	**logP[a)]**	**Khối lượng [m/z] [a)1)]**
I-T23-1	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	xyclopropyl	5,0	575
I-T23-2	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	1-(xyano)xyclopropyl	4,8	600

Bảng I-T46



I-T46

B_2 và B_4 = C-H

Ví dụ số	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	R^{11c}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R_1	Q	logP[a)]	Khối lượng [m/z] [a)1)]
I-T46-1	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,9	558
I-T46-2	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	5,0	533
I-T46-3	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	xyclopropyl	5,0	588
I-T46-4	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	xyclopropyl	4,5	574
I-T46-5	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(xyano)xyclopropyl	4,4	599
I-T46-6	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	1-(xyano)xyclopropyl	4,8	613

Dữ liệu NMR của các ví dụ lựa chọn

Dữ liệu ^{1}H NMR của các ví dụ lựa chọn được thông báo ở dạng danh sách liệt kê đỉnh ^{1}H NMR. Đối với mỗi một đỉnh tín hiệu, trước tiên, giá trị δ tính bằng ppm và sau đó, cường độ tín hiệu nằm trong dấu ngoặc đơn được liệt kê. Giá trị δ – các cặp số cường độ tín hiệu của các cặp tín hiệu khác nhau được liệt kê với việc phân cách nhau bằng dấu chấm phẩy.

Do đó, danh sách đỉnh của một ví dụ, có dạng:

δ_1 (cường độ$_1$); δ_2 (cường độ$_2$);……..; δ_i (cường độ$_i$);……; δ_n (cường độ$_n$)

Cường độ của các tín hiệu rõ nét tương ứng với độ cao của các tín hiệu trong ví dụ được in ra của phổ NMR tính bằng cm và thể hiện các tỷ lệ thực của các cường độ tín hiệu. Trong trường hợp tín hiệu rộng, một số đỉnh hoặc giá trị trung bình của cường độ tín hiệu và cường độ tương đối của nó có thể được thể hiện so sánh với tín hiệu cường độ mạnh nhất trong phổ.

Để hiệu chỉnh sự chuyển vị hóa học của các phổ ^{1}H NMR tác giả sáng chế sử dụng tetrametylsilan và/hoặc sự chuyển vị hóa học của dung môi, nhất là trong trường hợp các phổ được đo trong DMSO. Do đó, đỉnh tetrametylsilan có thể nhưng không nhất thiết xuất hiện trong các danh sách liệt kê đỉnh NMR.

Các danh sách liệt kê đỉnh ^{1}H NMR là tương tự như dữ liệu ^{1}H NMR in ra thông thường và do đó thường chứa tất cả các đỉnh được liệt kê trong các diễn giải NMR thông thường.

Ngoài ra, giống như dữ liệu ^{1}H NMR in ra thông thường, các danh sách nêu trên có thể thể hiện các tín hiệu về dung môi, các tín hiệu về chất đồng phân lập thể của các hợp chất đích, tương tự cấu thành một phần đối tượng của sáng chế, và/hoặc các đỉnh của tạp chất.

Khi thông báo về các tín hiệu của hợp chất nằm trong khoảng delta của dung môi và/hoặc nước, danh sách liệt kê các đỉnh 1H NMR ở đây thể hiện các đỉnh dung môi thông thường, ví dụ, các đỉnh của DMSO trong DMSO-D6 và đỉnh của nước, trung bình đỉnh này thông thường có cường độ cao.

Các đỉnh của các chất đồng phân lập thể của các hợp chất đích và/hoặc các đỉnh của tạp chất trung bình thường có cường độ thấp hơn so với đỉnh của các hợp chất đích (ví dụ, với độ tinh khiết > 90%).

Các chất đồng phân lập thể và/hoặc tạp chất như vậy có thể là điển hình trong quy trình điều chế cụ thể. Do đó, trong trường hợp này, các đỉnh có thể giúp để nhận diện sự mô phỏng sao chép quy trình điều chế của tác giả sáng chế bằng việc tham chiếu "các dấu ấn sản phẩm phụ".

Chuyên gia tính toán đỉnh của các hợp chất đích bằng các phương pháp đã biết (MestreC, mô phỏng ACD, và cũng bằng các giá trị kỳ vọng đánh giá theo kinh nghiệm) nếu cần thiết, có thể tách riêng đỉnh của các hợp chất đích, tùy ý sử dụng các bộ lọc cường độ bổ sung. Sự tách riêng này có thể sẽ tương tự như việc chọn đỉnh thích hợp trong cách diễn giải 1H NMR thông thường.

Các chi tiết khác về danh sách đỉnh 1H NMR có thể được tìm thấy trong tài liệu Research Disclosure Database Number 564025.

Beispiel IT21: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,297 (5,2); 8,291 (5,1); 7,846 (9,6); 7,825 (3,3); 7,818 (2,0); 7,545 (3,5); 7,525 (2,9); 7,523 (2,8); 7,443 (9,1); 6,977 (1,2); 6,544 (5,1); 6,538 (4,9); 4,085 (0,4); 4,068 (1,3); 4,050 (1,4); 4,032 (0,5); 3,440 (0,4); 3,374 (0,4); 2,862 (0,8); 2,853 (1,2); 2,844 (1,9); 2,834 (1,8); 2,826 (1,3); 2,816 (0,9); 2,240 (41,5); 2,150 (23,6); 2,086 (3,2); 1,972 (6,1); 1,965 (1,2); 1,958 (2,9); 1,953 (13,9); 1,947 (24,8); 1,941 (32,9); 1,934 (22,7); 1,928 (11,7); 1,436 (16,0); 1,269 (0,5); 1,221 (1,6); 1,204 (3,1); 1,186 (1,5); 0,790 (1,0); 0,778 (3,2); 0,773 (4,1); 0,760 (4,2); 0,755 (3,2); 0,743 (1,4); 0,614 (1,3); 0,604 (3,7); 0,597 (3,9); 0,593 (3,4); 0,588 (3,3); 0,575 (1,0); 0,000 (3,0)
Beispiel IT22: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,311 (4,9); 8,304 (5,0); 7,898 (10,0); 7,878 (3,3); 7,872 (2,0); 7,624 (2,0); 7,583 (3,2); 7,561 (2,8); 7,444 (9,7); 6,555 (4,9); 6,549 (4,9); 5,447 (0,7); 4,086 (0,5); 4,068 (1,6); 4,050 (1,6); 4,032 (0,6); 2,240 (45,7); 2,146 (80,1); 2,114 (0,7); 2,108 (0,7); 2,102 (0,5); 1,972 (7,1); 1,964 (3,1); 1,958 (8,0); 1,953 (36,5); 1,946 (65,9); 1,940 (87,5); 1,934 (62,1); 1,928 (33,1); 1,775 (0,4); 1,769 (0,6); 1,763 (0,4); 1,591 (2,0); 1,576 (5,7); 1,569 (5,7); 1,556 (2,8); 1,516 (0,4); 1,437 (16,0); 1,410 (0,4); 1,369 (2,8); 1,356 (5,7); 1,349 (6,0); 1,334 (2,1); 1,296 (0,3); 1,269 (1,9); 1,222 (1,9); 1,204 (3,6); 1,186 (1,8); 0,000 (4,5)
Beispiel IT31: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,118 (11,7); 8,061 (12,6); 7,689 (7,9); 7,683 (8,6); 7,667 (0,7); 7,652 (4,9); 7,646 (3,5); 7,631 (5,5); 7,625 (4,3); 7,535 (16,0); 7,463 (7,8); 7,442 (6,2); 6,895 (2,5); 4,068 (0,8); 4,050 (0,8); 3,912 (0,7); 2,881 (0,5); 2,871 (1,5); 2,862 (2,1); 2,853 (3,2); 2,844 (3,2); 2,835 (2,2); 2,826 (1,5); 2,816 (0,5); 2,270 (0,5); 2,261 (0,3); 2,143 (107,9); 2,138 (145,5); 2,111 (71,2); 1,972 (5,1); 1,964 (10,3); 1,958 (27,0); 1,952 (94,0); 1,946 (160,4); 1,940 (199,1); 1,934 (136,5); 1,928 (68,3); 1,780 (0,5); 1,774 (0,9); 1,768 (1,1); 1,762 (0,8); 1,756 (0,4); 1,437 (13,0); 1,271 (1,0); 1,222 (1,0); 1,204 (1,9); 1,186 (0,9); 0,794 (1,7); 0,782 (6,4); 0,777 (7,2); 0,764 (7,9); 0,759 (5,7); 0,747 (2,4); 0,725 (0,3); 0,610 (2,4); 0,600 (7,1); 0,592 (7,5); 0,588 (6,7); 0,584 (5,9); 0,571 (1,7); 0,146 (0,4); 0,000 (86,0); -0,008 (5,2); -0,150 (0,4)
Beispiel IT32: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,131 (12,6); 8,084 (13,3); 7,735 (7,6); 7,729 (9,9); 7,710 (5,2); 7,704 (3,5); 7,689 (5,8); 7,683 (4,6); 7,537 (16,0); 7,514 (8,9); 7,493

(7,4); 7,458 (1,9); 4,140 (1,8); 4,124 (2,1); 4,117 (5,8); 4,100 (5,9); 4,093 (6,2); 4,077 (5,9); 4,069 (2,6); 4,053 (2,1); 3,914 (0,6); 2,891 (0,7); 2,773 (0,6); 2,480 (0,7); 2,475 (1,3); 2,470 (1,8); 2,466 (1,3); 2,461 (0,7); 2,325 (0,4); 2,273 (1,9); 2,221 (979,0); 2,115 (79,7); 2,097 (1,4); 1,973 (3,4); 1,966 (10,4); 1,960 (22,6); 1,954 (102,7); 1,948 (182,7); 1,942 (241,3); 1,936 (167,3); 1,930 (87,0); 1,783 (0,7); 1,777 (1,1); 1,770 (1,5); 1,764 (1,1); 1,758 (0,6); 1,437 (15,2); 1,296 (0,5); 1,270 (1,7); 1,222 (0,7); 1,204 (1,3); 1,186 (0,6); 0,146 (0,3); 0,008 (2,7); 0,000 (69,9); -0,008 (3,3)
Beispiel IT33: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,129 (2,6); 8,075 (2,6); 7,738 (1,6); 7,732 (2,0); 7,701 (1,1); 7,696 (0,8); 7,681 (1,2); 7,675 (1,1); 7,572 (0,5); 7,536 (3,2); 7,496 (1,8); 7,475 (1,5); 2,146 (33,6); 2,113 (16,5); 1,972 (0,4); 1,964 (2,4); 1,958 (5,6); 1,953 (29,5); 1,946 (53,8); 1,940 (72,5); 1,934 (50,1); 1,928 (25,8); 1,769 (0,4); 1,599 (0,8); 1,585 (1,9); 1,578 (2,0); 1,564 (1,1); 1,437 (16,0); 1,359 (1,1); 1,345 (2,0); 1,338 (2,0); 1,324 (0,8); 1,269 (0,6); 0,008 (1,9); 0,000 (51,3); -0,009 (2,0)
Beispiel IT34: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,132 (5,7); 8,077 (6,1); 7,719 (3,4); 7,714 (4,3); 7,678 (2,2); 7,673 (1,8); 7,657 (2,6); 7,652 (2,3); 7,537 (7,8); 7,515 (1,0); 7,495 (1,0); 7,486 (4,3); 7,465 (3,3); 5,338 (0,9); 5,316 (1,8); 5,296 (1,8); 5,274 (1,0); 3,544 (2,3); 3,521 (4,7); 3,499 (3,1); 3,370 (3,0); 3,349 (4,6); 3,346 (4,3); 3,325 (2,4); 2,469 (0,4); 2,274 (0,4); 2,206 (300,4); 2,154 (0,5); 2,115 (36,2); 1,973 (1,3); 1,966 (3,0); 1,960 (6,3); 1,954 (30,3); 1,948 (55,1); 1,942 (73,7); 1,935 (52,5); 1,929 (28,5); 1,776 (0,4); 1,770 (0,5); 1,764 (0,4); 1,437 (16,0); 1,269 (1,6); 1,222 (0,3); 1,204 (0,6); 0,008 (0,7); 0,000 (20,8)
Beispiel IT35: ^{1}HNMR (601,6 MHz, CD3CN):
δ= 8,125 (8,3); 8,124 (8,5); 8,072 (9,3); 8,071 (9,2); 7,680 (16,0); 7,677 (5,7); 7,668 (5,3); 7,664 (3,0); 7,537 (9,4); 7,485 (4,7); 7,482 (2,1); 7,473 (1,9); 7,470 (4,3); 7,461 (2,3); 2,146 (139,0); 2,113 (53,4); 2,060 (0,5); 2,056 (0,9); 2,052 (1,3); 2,048 (0,9); 2,044 (0,4); 1,966 (5,4); 1,958 (14,4); 1,953 (16,2); 1,950 (93,5); 1,945 (166,6); 1,941 (244,5); 1,937 (162,8); 1,933 (81,9); 1,924 (1,3); 1,835 (0,5); 1,831 (0,9); 1,827 (1,4); 1,822 (0,9); 1,818 (0,5); 1,393 (2,4); 1,383 (5,5); 1,380 (5,9); 1,370 (3,2); 1,343 (0,4); 1,269 (0,6); 1,251 (1,3); 1,248 (1,4); 1,238 (4,5); 1,228 (1,0); 1,225 (1,0); 0,096 (0,4); 0,005 (3,0); 0,000 (105,8); -0,006 (3,3); -0,100 (0,4)
Beispiel IT36: ^{1}HNMR (601,6 MHz, CD3CN):
δ= 8,130 (11,9); 8,129 (12,8); 8,082 (13,1); 8,081 (13,4); 7,809 (8,6); 7,805 (9,0); 7,697 (5,1); 7,693 (4,8); 7,683 (5,9); 7,679 (5,7); 7,538 (13,6); 7,508 (9,3); 7,494 (8,0); 7,304 (1,1); 7,295 (1,9); 7,286 (1,1); 7,069 (1,2); 4,045 (16,0); 4,036 (15,9); 3,973 (1,6); 3,962 (1,8); 3,957 (5,2); 3,946 (5,2); 3,941 (5,5); 3,930 (5,3); 3,926 (2,0); 3,915 (1,8); 2,220 (0,4); 2,153 (19,3); 2,115 (73,8); 2,104 (1,0); 2,052 (0,4); 2,006 (0,4); 1,966 (1,4); 1,958 (3,8); 1,953 (4,5); 1,950 (25,7); 1,945 (45,5); 1,941 (67,9); 1,937 (46,1); 1,933 (22,7); 1,827 (0,4); 1,268 (1,1); 0,005 (0,8); 0,000 (28,7); -0,006 (0,9)
Beispiel IT37: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 9,043 (1,2); 9,038 (1,2); 8,803 (1,3); 8,798 (1,3); 8,672 (3,2); 8,648 (0,9); 8,638 (0,9); 8,405 (3,2); 8,390 (1,1); 8,384 (1,9); 8,379 (1,0); 8,316 (0,3); 7,602 (3,5); 3,902 (9,7); 3,330 (83,7); 3,243 (0,6); 3,169 (0,4); 2,903 (0,3); 2,893 (0,5); 2,885 (0,7); 2,875 (0,7); 2,867 (0,4); 2,857 (0,3); 2,676 (0,4); 2,672 (0,5); 2,667 (0,4); 2,525 (1,4); 2,512 (30,7); 2,507 (61,4); 2,503 (80,2); 2,498 (57,8); 2,494 (27,6); 2,334 (0,3); 2,329 (0,5); 2,325 (0,3); 2,131 (16,0); 1,909 (0,3); 0,763 (0,4); 0,750 (1,1); 0,745 (1,6); 0,733 (1,5); 0,727 (1,3); 0,716 (0,6); 0,619 (0,6); 0,608 (1,7); 0,602 (1,4); 0,598 (1,4); 0,593 (1,2); 0,580 (0,4); 0,000 (9,2)
Beispiel IT38: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 9,538 (2,0); 9,102 (1,4); 9,097 (1,4); 8,827 (1,4); 8,823 (1,5); 8,695 (3,2); 8,444 (1,1); 8,439 (1,9); 8,434 (1,2); 8,424 (3,3); 7,605 (3,8); 3,902 (6,0); 3,374 (0,4); 3,330 (90,4); 3,243 (0,4); 3,169 (2,1); 2,676 (0,4); 2,672 (0,6); 2,667 (0,5); 2,542 (0,5); 2,507 (75,8); 2,503 (97,5); 2,498 (74,7); 2,334 (0,4); 2,329 (0,6); 2,325 (0,5); 2,132 (16,0); 1,628 (0,7); 1,614 (2,0); 1,607 (2,1); 1,594 (0,9); 1,347 (0,9); 1,334 (2,1); 1,327 (2,1); 1,313 (0,7); 0,000 (8,2)
Beispiel IT39: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 8,508 (2,0); 8,506 (2,0); 8,473 (1,0); 8,463 (1,0); 8,276 (2,2); 7,895 (0,5); 7,876 (1,0); 7,861 (0,5); 7,592 (4,1); 7,399 (0,5); 7,383 (1,0); 7,368 (0,7); 7,305 (1,1); 7,286 (1,7); 7,266 (0,7); 3,902 (5,7); 3,330 (72,5); 3,243 (0,4); 3,175 (0,4); 3,162 (0,3); 2,875 (0,4); 2,865 (0,5); 2,857 (0,7); 2,847 (0,7); 2,838 (0,5); 2,828 (0,3); 2,672 (0,5); 2,507 (63,9); 2,503 (80,2); 2,329 (0,5); 2,114 (16,0); 0,725 (0,4); 0,707 (1,8); 0,695 (1,7); 0,689 (1,5); 0,678 (0,6); 0,556 (0,6); 0,545 (1,8); 0,539 (1,8); 0,530 (1,6); 0,518 (0,5); 0,000 (6,1)
Beispiel IT310: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 9,369 (2,0); 8,535 (1,8); 8,532 (1,9); 8,290 (2,0); 7,968 (0,4); 7,965 (0,5); 7,949 (0,9); 7,946 (0,9); 7,931 (0,5); 7,927 (0,5); 7,595 (3,9); 7,479 (0,4); 7,475 (0,4); 7,459 (0,9); 7,443 (0,6); 7,440 (0,5); 7,352 (1,0); 7,333 (1,7); 7,314 (0,8); 3,903 (8,2); 3,372 (0,4); 3,329 (104,6); 3,243 (0,6); 3,175 (0,3); 2,675 (0,4); 2,671 (0,5); 2,667 (0,4); 2,541 (0,5); 2,507 (70,8); 2,502 (89,6); 2,498 (66,7); 2,333 (0,4); 2,329 (0,5); 2,324 (0,4); 2,115 (16,0); 1,598 (0,8); 1,584 (2,0); 1,577 (2,1); 1,564 (0,9); 1,292 (0,9); 1,278 (2,1); 1,272 (2,2); 1,257 (0,8); 1,169 (0,3); 1,068 (0,4); 0,007 (0,4); 0,000 (7,5); -0,008 (0,4)
Beispiel IT311: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 8,522 (0,9); 8,512 (0,9); 8,500 (3,3); 8,211 (3,2); 7,818 (1,8); 7,799 (1,8); 7,646 (1,8); 7,621 (1,8); 7,590 (3,5); 3,902 (3,1); 3,330 (117,7); 3,304 (0,3); 2,861 (0,3); 2,851 (0,4); 2,842 (0,7); 2,832 (0,7); 2,824 (0,4); 2,676 (0,4); 2,671 (0,5); 2,667 (0,3); 2,525 (1,5); 2,511 (29,4); 2,507 (58,1); 2,502 (75,7); 2,498 (54,9); 2,493 (26,6); 2,334 (0,3); 2,329 (0,5); 2,324 (0,3); 2,127 (16,0); 0,733 (0,4); 0,720 (1,2); 0,715 (1,7); 0,703 (1,6); 0,697 (1,3); 0,685 (0,6); 0,575 (0,6); 0,564 (1,7); 0,558 (1,5); 0,554 (1,4); 0,548 (1,3); 0,536 (0,4); 0,000 (7,9)
Beispiel IT312: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 9,396 (1,8); 8,522 (3,2); 8,223 (3,2); 7,906 (1,6); 7,887 (1,6); 7,712 (1,6); 7,687 (1,6); 7,593 (3,7); 3,903 (2,7); 3,332 (98,2); 2,672 (0,5); 2,542 (0,4); 2,507 (67,0); 2,503 (83,7); 2,498 (62,0); 2,334 (0,4); 2,329 (0,5); 2,325 (0,4); 2,129 (16,0); 1,604 (0,8); 1,590 (2,0); 1,583 (2,1); 1,570 (0,9); 1,312 (0,9); 1,299 (2,0); 1,292 (2,0); 1,278 (0,8); 0,000 (7,1)
Beispiel IT313: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 8,514 (1,8); 8,510 (1,9); 8,480 (0,9); 8,470 (0,9); 8,285 (2,1); 8,226 (0,8); 8,220 (0,8); 8,207 (0,8); 8,202 (0,8); 7,767 (0,4); 7,762 (0,5); 7,755 (0,5); 7,749 (0,6); 7,746 (0,6); 7,740 (0,5); 7,734 (0,5); 7,728 (0,4); 7,595 (3,7); 7,402 (0,9); 7,380 (0,9); 7,375 (1,0); 7,354 (0,8); 3,902 (1,5); 3,444 (0,4); 3,425 (0,6); 3,405 (1,1); 3,353 (438,8); 3,292 (0,5); 3,273 (0,3); 2,864 (0,5); 2,855 (0,7); 2,846 (0,7); 2,837 (0,5); 2,827 (0,3); 2,678 (0,4); 2,673 (0,5); 2,669 (0,4); 2,509 (61,5); 2,504 (78,8); 2,500 (57,5); 2,335 (0,4); 2,331 (0,5); 2,327 (0,4); 2,121 (16,0);

0,746 (0,4); 0,733 (1,2); 0,728 (1,7); 0,716 (1,6); 0,710 (1,3); 0,699 (0,6); 0,602 (0,6); 0,592 (1,7); 0,585 (1,6); 0,576 (1,3); 0,564 (0,4)
Beispiel IT314: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO): δ= 8,600 (1,8); 8,596 (1,8); 8,536 (1,1); 8,525 (1,1); 8,352 (1,9); 7,977 (1,6); 7,960 (1,6); 7,594 (3,7); 7,437 (1,7); 7,411 (1,7); 3,902 (4,8); 3,332 (129,0); 2,826 (0,4); 2,817 (0,7); 2,807 (0,7); 2,799 (0,4); 2,789 (0,3); 2,676 (0,4); 2,672 (0,5); 2,667 (0,4); 2,511 (32,0); 2,507 (61,8); 2,503 (79,3); 2,498 (57,6); 2,494 (28,2); 2,334 (0,3); 2,329 (0,5); 2,325 (0,4); 2,115 (16,0); 0,733 (0,4); 0,720 (1,2); 0,715 (1,6); 0,703 (1,5); 0,697 (1,3); 0,685 (0,5); 0,567 (0,5); 0,557 (1,7); 0,551 (1,5); 0,547 (1,4); 0,541 (1,3); 0,529 (0,4); 0,000 (6,1)
Beispiel IT315: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO): δ= 8,711 (3,3); 8,694 (1,1); 8,684 (1,0); 8,450 (3,3); 8,369 (1,8); 8,174 (1,8); 7,971 (1,8); 7,601 (3,9); 3,903 (1,0); 3,331 (150,2); 2,910 (0,3); 2,901 (0,5); 2,892 (0,7); 2,882 (0,7); 2,874 (0,5); 2,865 (0,4); 2,672 (0,5); 2,507 (59,3); 2,503 (74,7); 2,499 (55,2); 2,334 (0,4); 2,330 (0,5); 2,133 (16,0); 0,769 (0,4); 0,755 (1,3); 0,751 (1,7); 0,738 (1,6); 0,733 (1,4); 0,721 (0,6); 0,630 (0,6); 0,620 (1,8); 0,613 (1,7); 0,604 (1,4); 0,592 (0,4)
Beispiel IT316: ^{1}HNMR (601,6 MHz, d_6DMSO): δ= 8,439 (0,8); 8,433 (0,9); 8,344 (3,1); 8,343 (3,2); 8,082 (3,2); 8,081 (3,3); 7,912 (1,7); 7,909 (1,7); 7,670 (0,9); 7,667 (0,9); 7,657 (1,0); 7,654 (1,0); 7,600 (3,4); 7,368 (1,3); 7,354 (1,2); 3,376 (0,5); 3,367 (1,1); 3,351 (401,9); 3,328 (0,5); 3,324 (0,5); 2,997 (3,2); 2,856 (0,4); 2,850 (0,7); 2,844 (0,7); 2,838 (0,4); 2,831 (0,3); 2,618 (0,4); 2,615 (0,6); 2,612 (0,4); 2,543 (5,5); 2,524 (1,0); 2,521 (1,3); 2,518 (1,2); 2,509 (30,4); 2,506 (67,4); 2,503 (93,3); 2,500 (68,5); 2,497 (31,5); 2,438 (7,5); 2,390 (0,4); 2,387 (0,6); 2,384 (0,4); 2,146 (16,0); 0,715 (0,4); 0,707 (1,2); 0,703 (1,6); 0,695 (1,5); 0,692 (1,3); 0,684 (0,5); 0,590 (0,6); 0,583 (1,6); 0,579 (1,4); 0,576 (1,3); 0,572 (1,3); 0,564 (0,4); 0,000 (2,6)
Beispiel IT317: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO): δ= 9,576 (0,4); 9,437 (2,3); 8,736 (0,7); 8,625 (1,7); 8,621 (1,8); 8,472 (0,7); 8,411 (0,4); 8,375 (1,8); 8,372 (1,9); 8,316 (0,5); 8,243 (0,4); 8,030 (1,7); 8,013 (1,6); 7,993 (0,3); 7,597 (3,8); 7,547 (1,7); 7,521 (1,9); 4,036 (1,1); 3,903 (6,7); 3,630 (0,4); 3,623 (0,4); 3,614 (0,4); 3,608 (0,3); 3,597 (0,3); 3,392 (0,7); 3,332 (259,6); 3,287 (0,3); 3,175 (0,4); 3,162 (0,5); 3,155 (0,4); 3,145 (0,5); 3,138 (0,4); 3,127 (0,5); 3,056 (0,4); 3,022 (4,3); 2,751 (0,4); 2,690 (1,7); 2,676 (0,8); 2,672 (1,1); 2,667 (0,9); 2,525 (3,7); 2,511 (72,5); 2,507 (143,5); 2,503 (187,7); 2,498 (136,4); 2,494 (66,3); 2,338 (0,4); 2,334 (0,8); 2,329 (1,1); 2,325 (0,8); 2,134 (3,5); 2,116 (16,0); 1,614 (0,5); 1,607 (1,1); 1,593 (1,9); 1,586 (2,0); 1,573 (0,8); 1,344 (0,5); 1,337 (0,5); 1,310 (0,9); 1,296 (1,9); 1,289 (2,1); 1,274 (3,8); 1,259 (6,5); 1,244 (6,0); 1,225 (1,2); 0,008 (0,5); 0,000 (16,5); -0,009 (0,5)
Beispiel IT318: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO): δ= 9,576 (2,0); 8,736 (3,2); 8,472 (3,3); 8,411 (1,7); 8,316 (0,3); 8,243 (1,6); 7,994 (1,6); 7,605 (3,6); 3,903 (10,2); 3,372 (0,7); 3,333 (152,4); 3,243 (1,3); 3,175 (0,4); 3,162 (0,4); 2,690 (0,4); 2,676 (0,4); 2,672 (0,6); 2,667 (0,4); 2,542 (0,6); 2,525 (1,9); 2,512 (39,2); 2,507 (77,8); 2,503 (101,6); 2,498 (73,7); 2,494 (35,7); 2,334 (0,4); 2,330 (0,6); 2,325 (0,4); 2,134 (16,0); 2,116 (0,5); 1,629 (0,7); 1,614 (1,8); 1,607 (2,0); 1,594 (0,9); 1,358 (0,9); 1,345 (1,9); 1,338 (2,0); 1,323 (0,7); 1,259 (0,5); 1,244 (0,4); 1,017 (0,6); 1,001 (0,6); 0,000 (9,1)
Beispiel IT319: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO): δ= 9,367 (1,9); 8,537 (1,8); 8,534 (1,9); 8,300 (2,2); 8,277 (0,8); 8,271 (0,9); 8,259 (0,9); 8,253 (0,8); 7,796 (0,4); 7,791 (0,5); 7,784 (0,5); 7,778 (0,6); 7,775 (0,6); 7,769 (0,6); 7,763 (0,5); 7,757 (0,5); 7,598 (3,8); 7,457 (0,8); 7,435 (0,8); 7,430 (1,0); 7,409 (0,7); 3,903 (4,8); 3,335 (104,3); 2,672 (0,4); 2,542 (0,3); 2,507 (54,0); 2,503 (69,3); 2,499 (52,7); 2,330 (0,4); 2,122 (16,0); 1,609 (0,8); 1,595 (2,0); 1,588 (2,1); 1,575 (0,9); 1,323 (0,9); 1,309 (2,0); 1,303 (2,1); 1,288 (0,8); 0,000 (5,6)
Beispiel IT320: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO): δ= 8,816 (2,3); 8,810 (2,3); 8,695 (3,4); 8,681 (1,1); 8,670 (1,1); 8,451 (3,4); 8,184 (2,3); 8,178 (2,2); 7,601 (3,8); 3,903 (7,0); 3,333 (173,9); 3,289 (0,4); 3,242 (0,9); 3,175 (0,6); 3,162 (0,5); 2,859 (0,4); 2,850 (0,7); 2,840 (0,7); 2,832 (0,4); 2,822 (0,3); 2,676 (0,4); 2,671 (0,5); 2,667 (0,4); 2,542 (0,4); 2,511 (34,1); 2,507 (66,3); 2,502 (85,9); 2,498 (63,0); 2,494 (31,0); 2,333 (0,4); 2,329 (0,5); 2,325 (0,4); 2,132 (0,7); 2,117 (16,0); 1,016 (0,4); 1,001 (0,4); 0,755 (0,5); 0,742 (1,3); 0,737 (1,7); 0,725 (1,6); 0,719 (1,4); 0,707 (0,5); 0,564 (0,6); 0,553 (1,7); 0,547 (1,6); 0,543 (1,5); 0,538 (1,4); 0,526 (0,4); 0,000 (7,1)
Beispiel IT321: ^{1}HNMR (600,1 MHz, d_6DMSO): δ= 9,593 (1,8); 8,868 (2,3); 8,864 (2,3); 8,709 (3,3); 8,456 (3,4); 8,262 (2,3); 8,258 (2,2); 7,603 (3,7); 3,388 (0,4); 3,383 (0,4); 3,381 (0,5); 3,369 (0,8); 3,340 (1164,0); 2,994 (0,7); 2,617 (0,6); 2,615 (0,8); 2,612 (0,6); 2,542 (39,9); 2,523 (1,4); 2,520 (1,7); 2,517 (1,8); 2,508 (48,7); 2,505 (103,1); 2,502 (140,8); 2,499 (100,9); 2,497 (46,2); 2,389 (0,6); 2,386 (0,8); 2,383 (0,6); 2,117 (16,0); 1,636 (0,8); 1,627 (2,0); 1,622 (2,1); 1,613 (0,8); 1,288 (0,9); 1,278 (1,9); 1,274 (2,1); 1,264 (0,8); 0,005 (0,8); 0,000 (21,9); -0,006 (0,7)
Beispiel IT322: ^{1}HNMR (400,1 MHz, d_6DMSO): δ= 9,397 (6,5); 8,682 (5,3); 8,677 (5,1); 8,405 (7,9); 8,366 (0,3); 8,087 (16,0); 8,060 (0,3); 8,041 (0,7); 7,981 (1,7); 7,966 (2,6); 7,963 (2,7); 7,948 (1,5); 7,944 (1,4); 7,763 (0,3); 7,505 (1,2); 7,501 (1,3); 7,486 (2,7); 7,470 (1,8); 7,466 (1,6); 7,384 (0,6); 7,374 (3,1); 7,365 (1,1); 7,355 (5,1); 7,345 (0,8); 7,336 (2,3); 5,761 (0,8); 3,348 (68,6); 3,028 (1,2); 2,875 (1,0); 2,712 (0,4); 2,671 (0,3); 2,542 (99,6); 2,507 (38,4); 2,502 (50,3); 2,498 (38,2); 2,368 (0,4); 2,087 (0,3); 1,601 (2,4); 1,587 (6,3); 1,580 (6,5); 1,567 (2,8); 1,288 (3,1); 1,275 (6,2); 1,268 (6,6); 1,254 (2,5); 1,234 (0,8); 1,169 (0,9); 0,146 (0,3); 0,000 (72,5); -0,008 (4,9); -0,150 (0,4)
Beispiel IT323: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,202 (5,5); 8,187 (0,5); 8,161 (5,9); 8,146 (0,5); 7,931 (0,4); 7,900 (9,0); 7,886 (0,8); 7,739 (3,5); 7,734 (4,4); 7,720 (0,5); 7,707 (2,6); 7,701 (1,9); 7,686 (3,0); 7,680 (2,5); 7,648 (1,5); 7,507 (4,1); 7,486 (3,4); 4,360 (0,5); 4,342 (0,5); 4,086 (1,0); 4,068 (2,9); 4,050 (3,0); 4,032 (1,1); 2,162 (61,1); 2,149 (10,3); 2,120 (0,4); 2,114 (0,4); 2,108 (0,5); 2,102 (0,4); 1,972 (13,4); 1,965 (4,8); 1,959 (8,2); 1,953 (30,5); 1,947 (52,3); 1,940 (68,1); 1,934 (48,2); 1,928 (27,3); 1,769 (0,4); 1,596 (1,8); 1,581 (4,5); 1,574 (4,4); 1,561 (2,8); 1,437 (16,0); 1,422 (1,2); 1,401 (0,5); 1,371 (0,6); 1,361 (2,6); 1,353 (1,9); 1,347 (4,6); 1,341 (4,6); 1,336 (1,5); 1,326 (2,3); 1,268 (1,6); 1,222 (3,7); 1,204 (7,2); 1,186 (3,8); 0,000 (2,2)
Beispiel IT324: ^{1}HNMR (600,1 MHz, CD3CN): δ= 8,189 (6,2); 8,144 (6,7); 7,897 (10,1); 7,690 (3,8); 7,687 (4,5); 7,652 (2,6); 7,648 (2,1); 7,638 (2,8); 7,634 (2,4); 7,471 (4,4); 7,457 (3,7); 6,891 (1,0); 5,446 (2,0); 4,077 (2,0); 4,065 (6,2); 4,053 (6,2); 4,041 (2,1); 2,864 (0,8); 2,857 (1,1); 2,852 (1,7); 2,845 (1,7); 2,839 (1,1); 2,833 (0,8); 2,129 (55,4); 2,054 (0,5); 2,050 (0,7); 2,046 (0,5); 1,971 (27,5); 1,963 (6,3); 1,955 (8,8); 1,951 (10,1); 1,947 (46,9); 1,943

(78,2); 1,939 (115,2); 1,935 (77,9); 1,931 (39,3); 1,922 (0,5); 1,828 (0,4); 1,824 (0,6); 1,820 (0,4); 1,437 (16,0); 1,270 (0,4); 1,216 (7,4); 1,204 (14,6); 1,192 (7,3); 0,786 (1,0); 0,777 (2,8); 0,774 (3,6); 0,765 (3,6); 0,762 (2,7); 0,754 (1,2); 0,606 (1,1); 0,599 (2,9); 0,598 (2,9); 0,595 (3,0); 0,591 (2,8); 0,588 (2,8); 0,580 (0,9); 0,005 (2,1); 0,000 (69,9); -0,006 (2,2)
Beispiel IT325: ^{1}HNMR (601,6 MHz, CD3CN):
δ= 8,201 (9,9); 8,163 (10,8); 7,899 (16,0); 7,738 (5,9); 7,734 (7,4); 7,710 (4,2); 7,706 (3,3); 7,696 (4,6); 7,693 (4,0); 7,522 (6,8); 7,508 (5,8); 7,328 (1,4); 7,265 (0,6); 7,251 (1,5); 7,239 (1,1); 7,195 (1,4); 7,183 (1,0); 7,162 (0,5); 7,150 (0,7); 5,446 (1,0); 4,127 (1,3); 4,116 (1,5); 4,111 (4,2); 4,100 (4,3); 4,095 (4,5); 4,085 (4,3); 4,080 (1,7); 4,069 (1,4); 2,328 (5,9); 2,134 (32,5); 2,132 (53,6); 2,058 (0,4); 2,054 (0,6); 2,050 (1,0); 2,046 (0,7); 1,971 (1,2); 1,964 (7,9); 1,955 (12,2); 1,951 (13,8); 1,947 (67,1); 1,943 (113,1); 1,939 (165,4); 1,935 (111,4); 1,931 (56,0); 1,833 (0,5); 1,829 (0,7); 1,825 (0,9); 1,821 (0,7); 1,437 (5,7); 1,269 (0,8); 1,204 (0,6); 1,192 (0,3); 0,000 (1,4)
Beispiel IT326: ^{1}HNMR (601,6 MHz, CD3CN):
δ= 8,222 (8,5); 8,184 (9,2); 8,183 (8,4); 7,933 (13,8); 7,743 (5,6); 7,739 (6,7); 7,712 (3,8); 7,709 (3,0); 7,699 (4,2); 7,695 (3,6); 7,530 (6,3); 7,516 (5,4); 7,228 (0,3); 7,216 (0,4); 7,172 (1,1); 5,481 (0,5); 4,022 (0,9); 3,653 (2,8); 3,641 (6,5); 3,631 (6,6); 3,620 (2,9); 2,605 (0,6); 2,594 (1,2); 2,586 (2,0); 2,582 (0,9); 2,575 (3,7); 2,568 (2,2); 2,564 (2,1); 2,556 (3,9); 2,549 (0,9); 2,545 (2,0); 2,538 (1,3); 2,527 (0,6); 2,505 (0,6); 2,502 (1,0); 2,499 (1,4); 2,496 (1,0); 2,361 (1,2); 2,216 (233,1); 2,214 (233,8); 2,213 (216,8); 2,211 (239,7); 2,210 (216,4); 2,206 (358,9); 2,092 (0,7); 2,088 (1,2); 2,084 (1,6); 2,080 (1,2); 2,076 (0,6); 2,005 (1,3); 1,998 (14,1); 1,990 (21,9); 1,985 (26,7); 1,982 (121,7); 1,978 (205,2); 1,973 (304,1); 1,969 (210,4); 1,965 (107,9); 1,867 (0,7); 1,863 (1,2); 1,859 (1,7); 1,855 (1,2); 1,850 (0,6); 1,470 (16,0); 1,303 (0,4); 1,237 (0,6); 0,033 (1,8)
Beispiel IT327: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 9,439 (6,6); 8,693 (9,5); 8,441 (9,4); 8,317 (0,9); 8,274 (16,0); 7,807 (2,2); 7,802 (3,8); 7,792 (5,8); 7,786 (9,9); 7,569 (5,1); 7,553 (1,2); 7,546 (4,2); 4,020 (0,3); 3,568 (10,9); 3,328 (401,1); 2,675 (2,2); 2,671 (2,9); 2,666 (2,2); 2,506 (372,0); 2,502 (465,0); 2,497 (338,4); 2,333 (2,3); 2,328 (2,9); 2,324 (2,1); 1,989 (1,3); 1,615 (2,4); 1,601 (6,2); 1,594 (6,2); 1,581 (2,5); 1,398 (5,4); 1,287 (2,8); 1,274 (6,1); 1,267 (6,2); 1,253 (2,2); 1,235 (0,4); 1,192 (0,4); 1,175 (0,7); 1,157 (0,4); 0,146 (0,7); 0,000 (164,4); -0,008 (7,8); -0,150 (0,8)
Beispiel IT328: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 8,684 (0,4); 8,672 (9,5); 8,535 (3,2); 8,524 (3,2); 8,453 (0,3); 8,427 (9,5); 8,271 (16,0); 7,749 (2,3); 7,744 (3,3); 7,723 (12,2); 7,519 (4,6); 7,498 (3,9); 4,056 (0,5); 4,038 (1,4); 4,020 (1,4); 4,002 (0,5); 3,568 (7,8); 3,329 (74,2); 2,857 (0,9); 2,848 (1,3); 2,839 (1,9); 2,829 (2,0); 2,820 (1,3); 2,811 (0,9); 2,801 (0,3); 2,676 (0,4); 2,671 (0,6); 2,667 (0,4); 2,524 (1,5); 2,511 (34,6); 2,507 (68,9); 2,502 (89,7); 2,498 (64,3); 2,493 (30,8); 2,333 (0,4); 2,329 (0,6); 2,324 (0,4); 1,989 (6,1); 1,397 (15,9); 1,193 (1,6); 1,175 (3,1); 1,157 (1,6); 0,728 (1,3); 0,716 (3,7); 0,711 (4,9); 0,698 (4,7); 0,693 (3,9); 0,681 (1,6); 0,561 (1,7); 0,551 (5,1); 0,544 (4,7); 0,535 (4,1); 0,523 (1,2); 0,008 (1,4); 0,000 (37,7); -0,008 (1,4)
Beispiel IT329: ^{1}HNMR (400,1 MHz, d_6DMSO):
δ= 9,042 (6,2); 9,036 (6,0); 8,962 (0,4); 8,831 (6,4); 8,826 (6,3); 8,807 (9,8); 8,678 (3,3); 8,668 (3,2); 8,507 (9,6); 8,478 (0,5); 8,385 (3,9); 8,379 (6,4); 8,374 (3,5); 8,111 (16,0); 3,368 (0,3); 3,367 (0,3); 3,365 (0,4); 3,362 (0,5); 3,361 (0,6); 3,360 (0,6); 3,357 (0,7); 3,356 (0,8); 3,350 (1,8); 3,330 (278,8); 3,313 (3,5); 3,309 (2,7); 3,308 (2,6); 3,306 (2,5); 3,297 (1,0); 3,295 (1,0); 3,294 (0,9); 3,287 (0,6); 3,284 (0,5); 3,281 (0,4); 3,279 (0,4); 3,277 (0,4); 2,915 (0,4); 2,905 (1,0); 2,896 (1,5); 2,887 (2,2); 2,877 (2,3); 2,869 (1,5); 2,859 (1,1); 2,849 (0,4); 2,711 (0,4); 2,671 (0,3); 2,565 (0,4); 2,564 (0,5); 2,563 (0,5); 2,562 (0,6); 2,560 (0,7); 2,559 (0,8); 2,558 (0,9); 2,557 (1,1); 2,555 (1,4); 2,542 (109,1); 2,533 (2,6); 2,532 (2,3); 2,530 (2,0); 2,529 (1,9); 2,528 (1,8); 2,527 (1,8); 2,525 (1,9); 2,524 (2,0); 2,523 (2,0); 2,511 (15,9); 2,507 (30,0); 2,502 (38,9); 2,498 (28,5); 2,494 (14,2); 2,368 (0,4); 2,130 (0,7); 1,234 (0,5); 0,765 (1,4); 0,752 (4,2); 0,747 (5,5); 0,735 (5,4); 0,729 (4,4); 0,717 (2,0); 0,696 (0,3); 0,618 (2,1); 0,608 (5,9); 0,602 (5,4); 0,592 (4,5); 0,580 (1,5); 0,146 (0,5); 0,022 (0,4); 0,021 (0,5); 0,020 (0,6); 0,019 (0,7); 0,017 (0,7); 0,016 (0,9); 0,008 (6,5); 0,000 (110,7); -0,009 (5,4); -0,013 (2,0); -0,014 (1,7); -0,015 (1,6); -0,016 (1,4); -0,018 (1,3); -0,019 (1,2); -0,020 (1,1); -0,021 (1,0); -0,023 (1,0); -0,024 (0,9); -0,025 (0,9); -0,026 (0,8); -0,027 (0,7); -0,029 (0,7); -0,031 (0,5); -0,034 (0,5); -0,035 (0,4); -0,036 (0,4); -0,150 (0,5)
Beispiel IT330: ^{1}HNMR (400,1 MHz, d_6DMSO):
δ= 9,562 (6,5); 9,101 (6,1); 9,095 (6,1); 8,989 (0,4); 8,855 (6,3); 8,850 (6,4); 8,829 (9,9); 8,5253 (9,7); 8,5245 (9,7); 8,496 (0,5); 8,438 (3,7); 8,432 (6,4); 8,427 (3,6); 8,115 (16,0); 5,759 (0,5); 3,361 (0,8); 3,329 (283,9); 2,712 (0,5); 2,671 (0,4); 2,568 (0,3); 2,567 (0,4); 2,565 (0,4); 2,564 (0,5); 2,563 (0,5); 2,562 (0,6); 2,560 (0,7); 2,559 (0,7); 2,558 (0,9); 2,557 (1,0); 2,555 (1,2); 2,554 (1,5); 2,542 (137,6); 2,533 (2,7); 2,532 (2,2); 2,530 (2,0); 2,529 (1,9); 2,528 (1,8); 2,527 (1,7); 2,525 (1,8); 2,524 (1,8); 2,523 (1,9); 2,511 (16,2); 2,507 (31,6); 2,502 (41,8); 2,498 (30,6); 2,493 (15,2); 2,368 (0,5); 1,631 (2,6); 1,617 (6,5); 1,610 (6,6); 1,597 (3,0); 1,348 (3,1); 1,334 (6,6); 1,328 (6,6); 1,313 (2,5); 1,234 (0,4); 0,146 (0,5); 0,026 (0,3); 0,025 (0,4); 0,024 (0,4); 0,022 (0,5); 0,021 (0,6); 0,020 (0,6); 0,019 (0,7); 0,016 (0,9); 0,008 (5,8); 0,000 (109,7); -0,008 (4,9); -0,014 (1,3); -0,015 (1,2); -0,016 (1,1); -0,018 (1,0); -0,019 (0,9); -0,020 (0,9); -0,023 (0,7); -0,024 (0,6); -0,025 (0,6); -0,027 (0,5); -0,029 (0,4); -0,030 (0,4); -0,031 (0,4); -0,150 (0,5)
Beispiel IT331: ^{1}HNMR (601,6 MHz, CD3CN):
δ= 19,953 (0,4); 8,476 (0,6); 8,461 (16,0); 8,193 (0,3); 8,170 (0,6); 8,156 (14,9); 8,148 (0,5); 8,052 (0,3); 7,934 (7,1); 7,931 (7,2); 7,901 (0,6); 7,866 (5,7); 7,852 (8,0); 7,779 (4,3); 7,765 (3,1); 7,707 (9,8); 7,703 (11,5); 7,689 (0,7); 7,669 (6,5); 7,665 (5,3); 7,655 (7,3); 7,651 (6,3); 7,609 (0,4); 7,477 (11,0); 7,463 (9,5); 6,905 (2,4); 3,912 (2,1); 2,873 (0,6); 2,866 (1,9); 2,860 (2,7); 2,854 (4,1); 2,848 (4,3); 2,842 (2,7); 2,836 (2,0); 2,830 (0,7); 2,145 (513,7); 2,068 (0,6); 2,064 (0,6); 2,060 (3,3); 2,056 (5,5); 2,052 (8,1); 2,048 (5,6); 2,044 (2,9); 1,966 (31,6); 1,958 (83,8); 1,953 (98,4); 1,950 (560,5); 1,945 (964,6); 1,941 (1429,4); 1,937 (989,8); 1,933 (503,8); 1,925 (8,1); 1,843 (0,3); 1,835 (3,0); 1,831 (5,4); 1,827 (7,9); 1,823 (5,4); 1,818 (2,7); 1,340 (0,3); 1,285 (0,7); 1,269 (2,9); 1,123 (0,4); 0,882 (0,7); 0,790 (2,5); 0,782 (6,8); 0,779 (9,4); 0,770 (9,0); 0,767 (7,4); 0,759 (3,0); 0,744 (0,4); 0,732 (0,4); 0,636 (0,4); 0,609 (2,9); 0,601 (7,4); 0,598 (7,8); 0,595 (7,3); 0,592 (7,5); 0,583 (2,4); 0,097 (2,5); 0,005 (17,5); 0,000 (598,4); -0,006 (20,1); -0,100 (2,5)
Beispiel IT332: ^{1}HNMR (601,6 MHz, CD3CN):
δ= 19,978 (0,8); 8,505 (16,0); 8,234 (0,7); 8,197 (15,1); 7,962 (7,3); 7,933 (1,0); 7,901 (6,0); 7,887 (8,2); 7,812 (4,3); 7,798 (3,2); 7,785 (9,1); 7,781 (11,3); 7,755 (6,0); 7,752 (4,8); 7,742 (6,5); 7,738 (5,8); 7,557 (10,5); 7,543 (9,3); 7,451 (1,9); 7,284 (1,2); 7,272 (0,9); 7,228 (1,1); 7,216 (0,9); 7,183 (0,6); 5,481 (0,6); 4,162 (2,0); 4,151 (2,3); 4,147 (6,6); 4,136 (6,5); 4,131 (7,2); 4,120 (6,5); 4,115 (3,0); 4,104 (2,2); 3,946 (0,8); 2,497 (1,3); 2,361 (4,7); 2,211 (114,1); 2,208 (135,0); 2,203 (158,6); 2,200 (140,9); 2,198 (164,0); 2,092 (0,8); 2,088 (1,1); 2,084 (1,6); 2,080 (1,1); 1,997 (12,7); 1,989 (19,6); 1,985 (22,3); 1,981 (108,3); 1,977 (181,4); 1,973 (268,0); 1,969 (184,4); 1,965

(94,6); 1,862 (1,0); 1,858 (1,5); 1,854 (1,1); 1,303 (1,1); 0,033 (2,1)
Beispiel IT333: ^{1}HNMR (601,6 MHz, CD3CN): δ= 8,489 (10,8); 8,221 (0,7); 8,184 (10,0); 7,966 (4,8); 7,932 (1,1); 7,902 (4,0); 7,888 (5,4); 7,813 (3,0); 7,799 (2,1); 7,759 (6,4); 7,755 (7,3); 7,725 (4,1); 7,722 (3,2); 7,712 (4,4); 7,708 (3,5); 7,533 (7,0); 7,519 (5,9); 7,111 (1,4); 3,659 (3,4); 3,648 (7,7); 3,637 (7,6); 3,626 (3,3); 2,609 (0,8); 2,598 (1,4); 2,591 (2,3); 2,579 (4,4); 2,572 (2,5); 2,568 (2,5); 2,561 (4,4); 2,549 (2,4); 2,542 (1,5); 2,531 (0,8); 2,184 (375,5); 2,182 (324,4); 2,181 (324,2); 2,177 (394,7); 2,173 (444,9); 2,092 (1,2); 2,088 (2,1); 2,084 (3,3); 2,080 (2,2); 2,076 (1,1); 1,998 (27,5); 1,990 (42,2); 1,985 (47,1); 1,981 (234,7); 1,977 (393,2); 1,973 (581,0); 1,969 (400,8); 1,965 (207,8); 1,867 (1,2); 1,863 (2,2); 1,859 (3,3); 1,855 (2,2); 1,850 (1,2); 1,471 (16,0); 1,303 (1,3); 0,033 (3,4)
Beispiel IT334: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,493 (16,0); 8,193 (15,4); 8,099 (0,4); 8,087 (6,7); 8,065 (8,0); 7,850 (4,4); 7,827 (4,3); 7,815 (7,2); 7,752 (9,3); 7,747 (11,6); 7,720 (6,3); 7,715 (4,4); 7,699 (7,2); 7,694 (5,8); 7,569 (4,2); 7,514 (10,8); 7,493 (8,8); 4,012 (0,8); 3,891 (0,5); 3,458 (0,5); 3,452 (0,5); 3,236 (1,8); 3,067 (0,5); 3,056 (0,5); 2,848 (0,4); 2,140 (115,1); 2,120 (1,0); 2,114 (1,4); 2,108 (1,6); 2,102 (1,2); 2,095 (0,6); 1,972 (1,7); 1,965 (8,4); 1,958 (21,0); 1,953 (103,8); 1,947 (185,9); 1,940 (245,9); 1,934 (166,9); 1,928 (84,5); 1,781 (0,6); 1,775 (1,1); 1,769 (1,5); 1,763 (1,0); 1,756 (0,6); 1,605 (4,6); 1,591 (11,9); 1,584 (11,8); 1,570 (6,0); 1,530 (0,8); 1,437 (6,2); 1,407 (0,7); 1,367 (6,3); 1,353 (11,8); 1,346 (12,0); 1,332 (4,7); 1,294 (0,6); 1,269 (5,1); 1,204 (0,6); 0,882 (0,6); 0,146 (1,2); 0,008 (11,5); 0,000 (282,0); -0,009 (9,7); -0,150 (1,3)
Beispiel IT335: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,496 (0,7); 8,480 (16,0); 8,182 (15,3); 8,181 (14,8); 8,087 (6,6); 8,065 (7,9); 7,848 (4,7); 7,825 (4,8); 7,812 (7,7); 7,702 (9,9); 7,697 (11,9); 7;670 (6,9); 7,664 (4,9); 7,649 (7,8); 7,643 (6,3); 7,481 (10,8); 7,460 (8,6); 6,929 (2,9); 2,887 (0,7); 2,877 (2,1); 2,868 (2,9); 2,859 (4,5); 2,849 (4,5); 2,841 (2,9); 2,831 (2,1); 2,822 (0,7); 2,467 (0,4); 2,463 (0,5); 2,458 (0,4); 2,153 (188,6); 2,120 (0,8); 2,114 (1,1); 2,108 (1,3); 2,102 (0,9); 2,096 (0,5); 1,972 (2,2); 1,965 (8,7); 1,959 (23,3); 1,953 (95,7); 1,947 (167,7); 1,941 (215,6); 1,934 (146,4); 1,928 (73,1); 1,781 (0,5); 1,775 (0,9); 1,769 (1,2); 1,763 (0,8); 1,757 (0,4); 1,437 (6,9); 1,269 (0,6); 1,204 (0,5); 0,800 (2,4); 0,788 (7,7); 0,783 (9,7); 0,770 (10,2); 0,765 (7,3); 0,753 (3,1); 0,731 (0,4); 0,713 (0,4); 0,656 (0,4); 0,646 (0,4); 0,617 (3,3); 0,605 (8,7); 0,599 (9,2); 0,595 (8,3); 0,590 (7,6); 0,577 (2,2); 0,522 (0,3); 0,146 (1,0); 0,000 (233,4); -0,009 (9,6); -0,150 (1,0)
Beispiel IT336: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,496 (16,0); 8,192 (15,3); 8,093 (6,4); 8,071 (7,7); 7,850 (4,3); 7,827 (4,3); 7,814 (7,1); 7,749 (9,1); 7,743 (11,5); 7,726 (6,8); 7,721 (4,1); 7,706 (7,6); 7,700 (5,6); 7,532 (10,3); 7,511 (8,3); 7,340 (2,4); 4,149 (2,3); 4,132 (2,8); 4,125 (7,1); 4,109 (7,4); 4,102 (7,4); 4,085 (7,2); 4,078 (2,6); 4,061 (2,3); 2,137 (51,6); 2,120 (0,6); 2,114 (0,9); 2,108 (1,0); 2,102 (0,7); 2,095 (0,4); 1,965 (6,7); 1,958 (18,2); 1,953 (74,7); 1,946 (129,6); 1,940 (165,9); 1,934 (111,8); 1,928 (55,4); 1,781 (0,4); 1,775 (0,7); 1,769 (1,0); 1,763 (0,6); 1,437 (3,7); 1,270 (0,3); 0,146 (0,8); 0,008 (11,2); 0,000 (188,1); -0,009 (6,3); -0,150 (0,8)
Beispiel IT337: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,518 (0,5); 8,490 (16,0); 8,238 (0,5); 8,193 (14,9); 8,090 (6,7); 8,069 (7,7); 7,850 (4,2); 7,827 (4,0); 7,814 (6,7); 7,735 (9,2); 7,729 (11,3); 7,717 (0,4); 7,696 (6,1); 7,690 (4,5); 7,675 (7,0); 7,669 (5,9); 7,587 (0,4); 7,536 (0,3); 7,514 (0,6); 7,504 (11,0); 7,494 (0,6); 7,483 (9,1); 7,459 (1,7); 7,445 (1,6); 6,694 (0,4); 6,666 (0,3); 5,364 (0,6); 5,343 (2,4); 5,322 (4,7); 5,301 (4,6); 5,280 (2,4); 5,259 (0,7); 4,006 (0,5); 3,589 (0,4); 3,567 (0,4); 3,549 (6,1); 3,545 (3,8); 3,525 (11,4); 3,507 (4,3); 3,503 (7,9); 3,379 (8,1); 3,375 (5,1); 3,358 (11,5); 3,355 (10,8); 3,338 (3,6); 3,334 (6,2); 3,067 (0,5); 2,848 (0,5); 2,472 (0,5); 2,468 (1,0); 2,463 (1,3); 2,458 (1,0); 2,453 (0,5); 2,264 (0,3); 2,245 (0,4); 2,151 (305,9); 2,120 (1,6); 2,114 (2,3); 2,107 (2,8); 2,101 (2,0); 2,095 (1,0); 2,022 (1,9); 2,003 (0,5); 1,964 (14,6); 1,958 (33,8); 1,952 (185,3); 1,946 (333,6); 1,940 (449,3); 1,934 (307,4); 1,928 (157,3); 1,915 (1,9); 1,781 (1,0); 1,775 (1,8); 1,768 (2,5); 1,762 (1,7); 1,756 (0,8); 1,269 (2,1); 0,146 (3,1); 0,025 (0,7); 0,008 (22,9); 0,000 (696,9); -0,009 (23,3); -0,150 (3,1)
Beispiel IT338: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,238 (7,9); 8,119 (7,5); 7,748 (4,6); 7,742 (5,7); 7,729 (4,0); 7,711 (3,1); 7,706 (2,3); 7,690 (3,5); 7,685 (2,8); 7,666 (1,4); 7,644 (2,6); 7,595 (5,4); 7,574 (4,0); 7,500 (5,1); 7,479 (4,2); 4,068 (1,0); 4,050 (1,0); 4,032 (0,3); 2,800 (1,9); 2,781 (5,9); 2,762 (6,0); 2,744 (2,0); 2,139 (27,7); 2,120 (0,5); 2,113 (0,5); 2,107 (0,6); 2,101 (0,4); 1,972 (4,6); 1,964 (2,9); 1,958 (7,5); 1,952 (33,5); 1,946 (58,9); 1,940 (77,3); 1,933 (53,2); 1,927 (27,2); 1,774 (0,4); 1,768 (0,5); 1,762 (0,3); 1,601 (2,2); 1,587 (6,0); 1,580 (6,0); 1,566 (3,0); 1,526 (0,4); 1,402 (0,3); 1,362 (3,0); 1,348 (6,0); 1,342 (6,1); 1,327 (2,3); 1,270 (1,6); 1,221 (1,2); 1,204 (2,3); 1,186 (1,1); 1,113 (7,7); 1,095 (16,0); 1,076 (7,4); 0,146 (1,1); 0,008 (13,7); 0,000 (231,5); -0,009 (10,7); -0,150 (1,1)
Beispiel IT339: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,226 (8,7); 8,120 (0,4); 8,108 (8,2); 7,726 (4,1); 7,700 (4,7); 7,694 (5,9); 7,680 (0,5); 7,663 (4,5); 7,657 (3,5); 7,642 (6,1); 7,637 (5,3); 7,593 (5,2); 7,572 (2,8); 7,467 (5,6); 7,447 (4,6); 6,927 (1,4); 3,874 (0,7); 3,051 (0,4); 2,938 (0,4); 2,875 (0,9); 2,865 (1,4); 2,857 (2,1); 2,847 (2,1); 2,838 (1,4); 2,829 (1,0); 2,819 (0,3); 2,798 (2,0); 2,780 (6,2); 2,761 (6,4); 2,742 (2,2); 2,463 (0,4); 2,160 (108,1); 2,120 (0,8); 2,114 (0,9); 2,108 (1,0); 2,101 (0,7); 2,095 (0,4); 1,972 (0,6); 1,964 (3,4); 1,958 (8,7); 1,952 (47,6); 1,946 (86,2); 1,940 (115,8); 1,934 (80,2); 1,928 (41,7); 1,781 (0,4); 1,775 (0,5); 1,768 (0,7); 1,762 (0,5); 1,437 (6,6); 1,270 (1,4); 1,112 (7,8); 1,102 (1,0); 1,093 (16,0); 1,074 (7,6); 0,797 (1,2); 0,784 (3,7); 0,779 (4,7); 0,766 (4,9); 0,761 (3,7); 0,749 (1,7); 0,614 (1,6); 0,602 (4,5); 0,596 (4,5); 0,592 (4,0); 0,587 (4,0); 0,574 (1,2); 0,146 (1,3); 0,008 (10,2); 0,007 (10,2); 0,000 (266,8); -0,008 (11,5); -0,150 (1,3)
Beispiel IT340: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,241 (8,2); 8,240 (8,8); 8,117 (8,2); 7,746 (4,6); 7,741 (6,2); 7,727 (4,2); 7,718 (3,5); 7,712 (2,4); 7,697 (3,6); 7,691 (3,1); 7,664 (1,4); 7,642 (2,6); 7,597 (5,2); 7,576 (2,7); 7,516 (5,5); 7,495 (4,5); 7,352 (0,9); 4,144 (1,2); 4,128 (1,3); 4,121 (3,6); 4,104 (3,6); 4,097 (3,8); 4,081 (3,6); 4,074 (1,4); 4,057 (1,2); 2,800 (2,0); 2,781 (6,2); 2,763 (6,3); 2,744 (2,1); 2,153 (11,7); 2,149 (14,3); 1,971 (0,5); 1,964 (1,3); 1,958 (3,1); 1,952 (16,8); 1,946 (30,8); 1,940 (41,6); 1,934 (28,7); 1,927 (14,8); 1,436 (10,4); 1,268 (0,4); 1,114 (7,8); 1,095 (16,0); 1,076 (7,6); 0,146 (0,6); 0,008 (4,4); 0,000 (116,7); -0,008 (5,1); -0,150 (0,6)
Beispiel IT341: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,239 (7,9); 8,122 (7,5); 7,732 (8,1); 7,727 (9,3); 7,689 (3,0); 7,684 (2,4); 7,668 (4,6); 7,663 (4,2); 7,644 (2,6); 7,598 (4,8); 7,577 (2,6); 7,491 (5,3); 7,470 (4,9); 5,342 (1,2); 5,320 (2,4); 5,300 (2,4); 5,279 (1,2); 3,548 (3,0); 3,524 (6,0); 3,502 (4,1); 3,374 (4,1); 3,371 (2,6); 3,354 (6,0); 3,351 (5,6); 3,330 (3,2); 2,803 (1,9); 2,784 (5,9); 2,765 (6,0); 2,746 (2,1); 2,468 (0,8); 2,464 (0,9); 2,459 (0,7); 2,156 (336,8); 2,120 (1,6); 2,114 (2,0); 2,107 (2,3); 2,101 (1,6); 2,095 (1,0); 1,964 (10,5); 1,958 (27,4); 1,952 (132,9); 1,946 (239,9); 1,940 (318,6); 1,934 (221,8); 1,928 (114,5); 1,781 (0,8); 1,775 (1,4); 1,769 (1,9); 1,762 (1,3); 1,756 (0,7); 1,437 (0,8); 1,269 (2,2); 1,115 (7,6); 1,096 (16,0);

1,078 (7,4); 0,146 (3,8); 0,008 (39,2); 0,000 (832,6); -0,008 (44,8); -0,150 (4,0)
Beispiel IT342: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO): δ= 8,830 (5,8); 8,821 (4,0); 8,815 (4,0); 8,694 (1,8); 8,683 (1,8); 8,548 (5,3); 8,547 (5,5); 8,315 (0,6); 8,192 (4,1); 8,186 (3,9); 8,107 (8,4); 3,902 (16,0); 3,333 (334,0); 3,243 (1,4); 3,175 (0,9); 3,162 (0,9); 2,870 (0,5); 2,861 (0,7); 2,852 (1,1); 2,842 (1,1); 2,833 (0,7); 2,824 (0,5); 2,680 (0,3); 2,676 (0,7); 2,672 (0,9); 2,667 (0,7); 2,662 (0,3); 2,542 (0,6); 2,525 (2,7); 2,511 (58,6); 2,507 (116,6); 2,502 (152,6); 2,498 (110,8); 2,493 (53,8); 2,338 (0,3); 2,334 (0,7); 2,329 (0,9); 2,325 (0,7); 1,909 (0,5); 1,016 (0,6); 1,001 (0,6); 0,757 (0,7); 0,744 (2,0); 0,739 (2,8); 0,727 (2,6); 0,721 (2,2); 0,709 (0,9); 0,566 (0,9); 0,555 (2,6); 0,549 (2,4); 0,545 (2,3); 0,540 (2,2); 0,528 (0,7); 0,008 (0,5); 0,000 (16,2); -0,009 (0,5)
Beispiel IT343: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO): δ= 9,603 (7,1); 8,876 (6,9); 8,870 (6,9); 8,843 (10,4); 8,833 (0,4); 8,554 (10,3); 8,315 (0,8); 8,280 (7,0); 8,274 (6,8); 8,110 (16,0); 3,903 (14,5); 3,434 (0,4); 3,333 (565,4); 3,045 (0,5); 2,869 (0,5); 2,676 (1,3); 2,671 (1,7); 2,667 (1,3); 2,662 (0,7); 2,542 (1,5); 2,524 (5,6); 2,511 (106,6); 2,507 (206,6); 2,502 (266,2); 2,498 (191,5); 2,493 (91,5); 2,338 (0,5); 2,334 (1,1); 2,329 (1,5); 2,325 (1,1); 1,643 (2,4); 1,629 (5,7); 1,622 (6,0); 1,609 (2,6); 1,298 (2,9); 1,284 (5,7); 1,277 (6,1); 1,263 (2,3); 1,249 (0,4); 1,236 (0,4); 0,008 (0,8); 0,000 (22,4); -0,009 (0,7)
Beispiel IT344: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,115 (9,4); 8,071 (10,0); 7,690 (6,4); 7,685 (6,3); 7,668 (1,1); 7,653 (3,9); 7,632 (4,2); 7,586 (0,3); 7,549 (8,1); 7,509 (0,4); 7,463 (5,6); 7,442 (4,5); 6,896 (2,5); 4,068 (0,5); 4,051 (0,5); 2,871 (1,3); 2,862 (1,9); 2,853 (2,6); 2,844 (2,5); 2,835 (1,9); 2,826 (1,2); 2,816 (0,5); 2,452 (2,7); 2,434 (7,4); 2,415 (7,5); 2,396 (2,8); 2,251 (0,5); 2,143 (127,4); 2,113 (3,7); 2,092 (29,0); 1,971 (7,1); 1,952 (73,0); 1,946 (111,8); 1,943 (112,2); 1,940 (130,1); 1,937 (90,9); 1,934 (90,5); 1,928 (48,4); 1,774 (0,6); 1,768 (0,7); 1,437 (3,1); 1,221 (0,7); 1,204 (1,2); 1,186 (0,6); 1,082 (8,3); 1,063 (16,0); 1,044 (7,9); 0,794 (1,7); 0,780 (6,1); 0,777 (6,2); 0,764 (6,6); 0,747 (2,1); 0,726 (0,4); 0,610 (2,4); 0,600 (6,7); 0,592 (7,0); 0,572 (1,7); 0,535 (0,4); 0,528 (0,3); 0,524 (0,3); 0,147 (1,4); 0,000 (240,4); -0,149 (1,3)
Beispiel IT345: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,126 (9,0); 8,092 (9,4); 7,735 (4,9); 7,730 (6,5); 7,710 (3,2); 7,705 (2,4); 7,689 (3,6); 7,684 (3,1); 7,549 (5,9); 7,542 (5,8); 7,513 (5,6); 7,492 (4,6); 7,422 (1,5); 4,140 (1,2); 4,123 (1,5); 4,116 (3,7); 4,100 (3,9); 4,093 (4,1); 4,076 (3,7); 4,069 (1,6); 4,052 (1,2); 3,545 (1,6); 2,464 (1,4); 2,455 (2,7); 2,436 (6,7); 2,417 (6,9); 2,398 (2,4); 2,378 (0,9); 2,253 (0,5); 2,221 (1,4); 2,176 (369,0); 2,126 (0,6); 2,120 (0,7); 2,114 (1,0); 2,108 (1,5); 2,094 (27,0); 1,953 (71,9); 1,947 (129,9); 1,941 (173,4); 1,935 (125,8); 1,928 (67,7); 1,781 (0,4); 1,775 (0,7); 1,769 (1,1); 1,763 (0,7); 1,757 (0,4); 1,436 (9,9); 1,269 (0,4); 1,102 (0,5); 1,084 (8,0); 1,065 (16,0); 1,046 (7,7); 1,025 (0,5); 0,146 (2,0); 0,000 (393,0); -0,150 (2,0)
Beispiel IT346: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,127 (4,1); 8,085 (4,4); 7,738 (2,5); 7,732 (3,1); 7,702 (1,6); 7,697 (1,2); 7,681 (1,8); 7,676 (1,5); 7,625 (0,9); 7,551 (2,4); 7,543 (2,3); 7,495 (2,9); 7,474 (2,3); 2,453 (1,1); 2,435 (3,1); 2,416 (3,2); 2,397 (1,1); 2,158 (61,0); 2,114 (0,4); 2,108 (0,5); 2,092 (12,6); 1,964 (2,0); 1,958 (4,9); 1,953 (25,4); 1,946 (45,6); 1,940 (61,1); 1,934 (42,3); 1,928 (21,8); 1,769 (0,4); 1,598 (1,2); 1,583 (3,1); 1,576 (3,1); 1,563 (1,6); 1,437 (16,0); 1,358 (1,6); 1,345 (3,1); 1,338 (3,2); 1,323 (1,3); 1,269 (1,8); 1,083 (4,2); 1,064 (8,8); 1,045 (4,0); 0,146 (0,7); 0,017 (0,4); 0,008 (5,9); 0,000 (150,8); -0,009 (6,1); -0,150 (0,7)
Beispiel IT347: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,128 (3,6); 8,084 (3,8); 7,721 (2,0); 7,715 (2,5); 7,678 (1,2); 7,673 (1,0); 7,657 (1,4); 7,652 (1,2); 7,551 (2,1); 7,544 (2,1); 7,485 (2,4); 7,464 (2,2); 5,338 (0,6); 5,316 (1,1); 5,296 (1,1); 5,275 (0,6); 3,544 (1,4); 3,520 (2,8); 3,498 (1,8); 3,370 (1,7); 3,349 (2,6); 3,346 (2,4); 3,325 (1,4); 2,456 (0,9); 2,437 (2,6); 2,418 (2,7); 2,399 (0,9); 2,166 (9,4); 2,153 (19,8); 2,107 (0,4); 2,095 (10,7); 1,964 (1,2); 1,958 (3,1); 1,952 (15,2); 1,946 (27,1); 1,940 (36,2); 1,934 (25,2); 1,928 (13,1); 1,437 (16,0); 1,085 (3,2); 1,066 (6,7); 1,047 (3,1); 0,146 (0,4); 0,008 (3,9); 0,000 (86,8); -0,008 (4,3); -0,150 (0,5)
Beispiel IT348: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,261 (10,8); 8,206 (0,8); 8,193 (16,0); 7,692 (9,7); 7,686 (12,3); 7,675 (1,0); 7,657 (6,5); 7,652 (4,9); 7,637 (9,5); 7,630 (13,3); 7,608 (11,0); 7,475 (11,5); 7,455 (9,1); 6,940 (2,5); 3,911 (0,6); 2,882 (0,7); 2,872 (2,0); 2,863 (2,8); 2,854 (4,4); 2,845 (4,3); 2,836 (2,9); 2,827 (2,0); 2,817 (0,7); 2,467 (0,3); 2,463 (0,4); 2,163 (117,4); 2,120 (0,3); 2,114 (0,5); 2,108 (0,7); 2,102 (0,5); 1,972 (1,7); 1,965 (3,3); 1,959 (8,5); 1,953 (43,3); 1,947 (77,6); 1,941 (103,6); 1,934 (71,4); 1,928 (36,7); 1,775 (0,4); 1,769 (0,6); 1,763 (0,4); 1,437 (2,0); 1,269 (0,7); 1,221 (0,4); 1,204 (0,7); 1,186 (0,3); 0,795 (2,4); 0,783 (7,5); 0,778 (9,7); 0,765 (10,2); 0,760 (7,3); 0,748 (3,3); 0,726 (0,4); 0,708 (0,4); 0,654 (0,4); 0,644 (0,4); 0,614 (3,3); 0,604 (8,6); 0,597 (9,0); 0,593 (7,8); 0,588 (7,7); 0,575 (2,3); 0,514 (0,4); 0,146 (1,3); 0,026 (0,4); 0,008 (10,5); 0,000 (259,4); -0,009 (10,3); -0,150 (1,2)
Beispiel IT349: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,277 (10,6); 8,206 (16,0); 7,740 (9,1); 7,735 (12,1); 7,709 (6,2); 7,704 (4,7); 7,688 (7,6); 7,683 (7,1); 7,669 (3,6); 7,645 (1,5); 7,631 (10,9); 7,611 (10,7); 7,574 (0,5); 7,510 (11,0); 7,500 (0,6); 7,489 (9,0); 7,475 (0,4); 7,221 (0,4); 5,448 (8,3); 4,034 (0,9); 3,914 (1,0); 3,906 (0,7); 3,897 (0,5); 2,469 (1,1); 2,464 (1,5); 2,460 (1,1); 2,243 (0,4); 2,175 (509,2); 2,120 (1,2); 2,114 (1,7); 2,108 (2,0); 2,102 (1,5); 2,096 (0,9); 1,965 (8,1); 1,959 (21,5); 1,953 (116,7); 1,947 (211,5); 1,941 (284,4); 1,934 (197,6); 1,928 (103,4); 1,781 (0,8); 1,775 (1,3); 1,769 (1,8); 1,763 (1,3); 1,757 (0,7); 1,635 (0,4); 1,598 (4,6); 1,584 (12,3); 1,577 (12,3); 1,563 (6,3); 1,523 (0,8); 1,437 (0,7); 1,403 (0,8); 1,363 (6,4); 1,349 (12,1); 1,342 (12,8); 1,328 (4,9); 1,290 (0,6); 1,270 (2,7); 1,206 (1,3); 1,190 (1,2); 0,882 (0,3); 0,146 (3,5); 0,008 (26,4); 0,000 (693,0); -0,008 (31,4); -0,048 (0,4); -0,150 (3,5)
Beispiel IT350: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,131 (3,8); 8,120 (0,3); 8,108 (3,8); 7,670 (2,4); 7,664 (2,9); 7,636 (1,7); 7,630 (1,2); 7,615 (1,9); 7,609 (1,6); 7,462 (2,8); 7,441 (2,1); 7,320 (3,0); 7,300 (1,2); 6,909 (0,6); 4,085 (0,5); 4,068 (1,4); 4,050 (1,4); 4,032 (0,5); 3,901 (16,0); 2,870 (0,5); 2,861 (0,7); 2,852 (1,1); 2,843 (1,1); 2,834 (0,7); 2,825 (0,5); 2,147 (64,0); 2,114 (0,3); 2,107 (0,4); 1,972 (6,8); 1,964 (3,1); 1,958 (6,8); 1,952 (27,1); 1,946 (46,5); 1,940 (60,6); 1,934 (41,2); 1,928 (20,8); 1,768 (0,3); 1,437 (1,1); 1,221 (1,7); 1,204 (3,2); 1,186 (1,6); 0,793 (0,6); 0,781 (1,8); 0,776 (2,3); 0,763 (2,4); 0,758 (1,7); 0,746 (0,8); 0,610 (0,9); 0,599 (2,1); 0,593 (2,1); 0,589 (1,9); 0,584 (1,8); 0,571 (0,5); 0,146 (0,7); 0,008 (9,0); 0,000 (144,6); -0,009 (5,4); -0,150 (0,7)
Beispiel IT351: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,206 (0,4); 8,147 (3,5); 8,120 (3,6); 7,717 (2,2); 7,712 (2,8); 7,686 (1,6); 7,680 (1,3); 7,675 (0,4); 7,665 (2,0); 7,659 (1,9); 7,654 (0,6); 7,644 (0,5); 7,630 (0,5); 7,610 (0,3); 7,503 (0,4); 7,495 (2,6); 7,482 (0,3); 7,474 (2,1); 7,321 (2,8); 7,302 (1,1); 4,068 (0,9); 4,050 (0,9);

3,902 (16,0); 2,170 (60,8); 2,114 (0,4); 2,108 (0,5); 2,102 (0,3); 1,972 (4,1); 1,965 (2,3); 1,959 (5,7); 1,953 (31,1); 1,947 (56,0); 1,940 (74,9); 1,934 (51,0); 1,928 (25,9); 1,775 (0,3); 1,769 (0,4); 1,595 (1,1); 1,581 (2,7); 1,574 (2,7); 1,560 (1,5); 1,437 (1,0); 1,359 (1,5); 1,346 (2,7); 1,339 (2,8); 1,324 (1,1); 1,222 (1,1); 1,204 (2,1); 1,186 (1,0); 1,140 (0,5); 1,132 (0,6); 0,928 (0,6); 0,921 (0,6); 0,146 (0,8); 0,008 (7,0); 0,000 (187,7); -0,009 (6,3); -0,150 (0,8)
Beispiel IT352: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,276 (6,4); 8,163 (0,3); 8,151 (6,6); 8,149 (7,0); 8,128 (3,5); 8,104 (1,6); 8,082 (1,8); 7,863 (2,9); 7,842 (2,4); 7,694 (4,0); 7,689 (5,1); 7,680 (0,5); 7,660 (3,0); 7,654 (2,2); 7,639 (3,3); 7,633 (2,8); 7,474 (4,9); 7,454 (3,9); 6,935 (1,1); 4,086 (0,7); 4,068 (2,0); 4,050 (2,1); 4,032 (0,7); 2,873 (0,8); 2,863 (1,2); 2,855 (1,8); 2,845 (1,9); 2,836 (1,2); 2,827 (0,9); 2,165 (66,0); 2,163 (75,8); 1,972 (9,5); 1,965 (1,3); 1,959 (3,0); 1,953 (16,9); 1,947 (30,5); 1,941 (41,0); 1,935 (28,3); 1,928 (14,5); 1,436 (16,0); 1,269 (0,5); 1,221 (2,5); 1,204 (4,8); 1,186 (2,4); 0,796 (1,0); 0,784 (2,9); 0,778 (3,9); 0,766 (4,1); 0,761 (3,0); 0,748 (1,4); 0,613 (1,4); 0,602 (3,5); 0,596 (3,5); 0,592 (3,2); 0,587 (3,2); 0,574 (1,0); 0,008 (2,1); 0,000 (62,9); -0,009 (2,3)
Beispiel IT353: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,291 (3,8); 8,162 (4,2); 8,130 (2,0); 8,108 (0,9); 8,086 (1,0); 7,866 (1,8); 7,844 (1,5); 7,742 (2,5); 7,736 (3,2); 7,709 (2,0); 7,703 (1,5); 7,688 (2,7); 7,682 (2,4); 7,506 (3,0); 7,485 (2,4); 2,196 (8,5); 2,183 (24,4); 1,972 (1,1); 1,965 (0,6); 1,959 (1,4); 1,954 (7,8); 1,947 (14,2); 1,941 (19,1); 1,935 (13,1); 1,929 (6,7); 1,599 (1,3); 1,585 (3,1); 1,578 (3,1); 1,564 (1,7); 1,436 (16,0); 1,362 (1,7); 1,349 (3,0); 1,342 (3,1); 1,327 (1,3); 1,204 (0,6); 0,008 (1,6); 0,000 (44,8); -0,009 (1,6)
Beispiel IT354: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,162 (0,9); 8,153 (15,7); 8,108 (12,4); 7,996 (6,8); 7,952 (7,0); 7,683 (9,7); 7,678 (12,2); 7,666 (0,8); 7,650 (6,7); 7,644 (4,9); 7,629 (7,9); 7,624 (6,4); 7,513 (0,4); 7,469 (11,7); 7,448 (9,3); 6,931 (2,4); 5,448 (0,6); 4,235 (0,4); 4,218 (0,4); 4,086 (0,6); 4,068 (1,8); 4,057 (0,4); 4,050 (1,8); 4,032 (0,6); 2,879 (0,8); 2,870 (2,2); 2,860 (2,8); 2,852 (4,7); 2,842 (4,7); 2,834 (2,9); 2,824 (2,2); 2,814 (0,7); 2,473 (0,6); 2,468 (1,0); 2,463 (1,4); 2,459 (1,0); 2,454 (0,5); 2,276 (0,4); 2,264 (0,4); 2,245 (0,6); 2,226 (0,8); 2,159 (388,9); 2,116 (47,5); 2,108 (3,9); 2,101 (1,9); 2,095 (1,0); 2,050 (0,8); 2,035 (0,7); 2,017 (1,1); 1,998 (1,0); 1,972 (9,4); 1,964 (12,6); 1,958 (30,5); 1,953 (165,9); 1,946 (298,2); 1,940 (398,5); 1,934 (272,4); 1,928 (139,0); 1,915 (1,9); 1,781 (0,9); 1,775 (1,6); 1,769 (2,3); 1,762 (1,6); 1,756 (0,8); 1,509 (0,3); 1,437 (13,5); 1,341 (0,4); 1,307 (1,0); 1,289 (1,9); 1,269 (16,0); 1,222 (2,4); 1,204 (4,5); 1,186 (2,2); 0,898 (0,7); 0,881 (2,2); 0,864 (1,0); 0,793 (2,4); 0,780 (7,3); 0,775 (9,5); 0,762 (10,1); 0,757 (6,9); 0,745 (3,2); 0,723 (0,5); 0,705 (0,5); 0,650 (0,4); 0,640 (0,5); 0,631 (0,5); 0,626 (0,6); 0,610 (3,5); 0,600 (7,9); 0,598 (7,8); 0,593 (8,2); 0,588 (7,1); 0,583 (7,2); 0,571 (2,4); 0,523 (0,3); 0,393 (0,5); 0,385 (0,5); 0,381 (0,5); 0,376 (0,5); 0,146 (3,4); 0,008 (28,7); 0,000 (825,5); -0,009 (28,8); -0,030 (0,5); -0,150 (3,4)
Beispiel IT355: ^{1}HNMR (601,6 MHz, CD3CN):
δ= 8,166 (3,1); 8,165 (3,2); 8,124 (2,4); 8,000 (1,2); 7,954 (1,2); 7,732 (2,0); 7,729 (2,3); 7,697 (1,3); 7,693 (1,1); 7,683 (1,5); 7,679 (1,3); 7,499 (2,3); 7,485 (2,0); 2,180 (8,0); 2,177 (8,1); 2,175 (8,7); 2,172 (9,0); 2,169 (10,1); 2,167 (8,6); 2,163 (12,2); 2,117 (8,6); 1,973 (0,6); 1,966 (0,7); 1,958 (1,9); 1,954 (2,1); 1,950 (12,7); 1,946 (22,2); 1,942 (32,1); 1,938 (21,1); 1,934 (10,5); 1,591 (1,0); 1,581 (2,2); 1,577 (2,2); 1,568 (1,1); 1,436 (16,0); 1,354 (1,2); 1,345 (2,2); 1,341 (2,3); 1,331 (1,0); 1,204 (0,4); 0,005 (1,3); 0,000 (42,8); -0,006 (1,2)
Beispiel IT356: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,210 (7,6); 8,194 (0,9); 8,186 (15,9); 8,185 (16,0); 8,161 (0,7); 8,149 (14,1); 8,059 (7,6); 7,686 (9,6); 7,681 (12,3); 7,653 (6,8); 7,647 (5,0); 7,632 (7,9); 7,626 (6,5); 7,517 (0,3); 7,473 (11,6); 7,452 (9,1); 6,900 (2,7); 2,878 (0,7); 2,869 (2,1); 2,859 (2,9); 2,851 (4,6); 2,841 (4,6); 2,832 (2,9); 2,823 (2,2); 2,813 (0,7); 2,136 (41,9); 2,120 (0,5); 2,113 (0,6); 2,107 (0,8); 2,101 (0,5); 2,086 (0,4); 1,964 (15,3); 1,958 (9,2); 1,952 (49,0); 1,946 (88,5); 1,940 (118,3); 1,934 (80,8); 1,927 (41,2); 1,915 (0,5); 1,774 (0,5); 1,768 (0,7); 1,762 (0,5); 1,270 (0,4); 0,792 (2,4); 0,780 (7,2); 0,775 (9,6); 0,762 (10,1); 0,757 (7,0); 0,745 (3,3); 0,723 (0,4); 0,705 (0,4); 0,650 (0,4); 0,640 (0,4); 0,610 (3,3); 0,600 (8,0); 0,599 (8,0); 0,593 (8,4); 0,589 (7,4); 0,584 (7,5); 0,571 (2,4); 0,520 (0,4); 0,146 (0,9); 0,008 (7,4); 0,000 (218,3); -0,009 (7,6); -0,150 (0,9)
Beispiel IT357: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,211 (2,2); 8,197 (4,2); 8,163 (3,5); 8,060 (2,1); 7,735 (2,4); 7,730 (3,0); 7,704 (1,6); 7,699 (1,1); 7,683 (1,8); 7,678 (1,5); 7,553 (1,2); 7,508 (2,8); 7,487 (2,3); 2,133 (61,2); 2,113 (0,8); 2,107 (0,9); 2,101 (0,7); 2,095 (0,4); 1,964 (4,3); 1,958 (11,3); 1,952 (55,5); 1,946 (99,8); 1,940 (134,0); 1,934 (93,4); 1,927 (48,7); 1,774 (0,6); 1,768 (0,8); 1,762 (0,5); 1,596 (1,1); 1,582 (3,0); 1,575 (3,1); 1,561 (1,6); 1,437 (16,0); 1,361 (1,6); 1,348 (3,0); 1,341 (3,1); 1,326 (1,2); 1,269 (0,3); 0,146 (1,1); 0,008 (9,0); 0,000 (233,2); -0,009 (12,0); -0,150 (1,0)
Beispiel IT358: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,212 (1,1); 8,196 (2,4); 8,168 (2,0); 8,062 (1,1); 7,732 (1,4); 7,727 (2,0); 7,710 (1,1); 7,704 (0,7); 7,689 (1,2); 7,683 (1,0); 7,523 (1,8); 7,502 (1,4); 4,139 (0,4); 4,123 (0,4); 4,116 (1,2); 4,099 (1,2); 4,092 (1,3); 4,076 (1,2); 4,068 (0,5); 4,052 (0,4); 2,154 (2,8); 2,152 (3,0); 1,958 (0,6); 1,952 (3,2); 1,946 (5,8); 1,940 (7,8); 1,934 (5,3); 1,928 (2,7); 1,436 (16,0); 0,008 (0,5); 0,000 (14,4); -0,009 (0,5)
Beispiel IT359: ^{1}HNMR (601,6 MHz, d_6DMSO):
δ= 19,976 (2,1); 9,451 (11,5); 9,045 (16,0); 8,978 (7,7); 8,792 (7,9); 8,789 (7,8); 8,502 (16,0); 8,320 (2,2); 7,918 (8,4); 7,914 (11,9); 7,904 (7,1); 7,900 (4,5); 7,890 (6,8); 7,886 (5,6); 7,573 (10,3); 7,560 (9,7); 4,034 (1,6); 4,022 (1,5); 3,338 (576,9); 2,615 (4,0); 2,524 (5,6); 2,521 (7,1); 2,518 (8,3); 2,509 (220,0); 2,506 (474,2); 2,503 (654,0); 2,500 (473,2); 2,497 (216,3); 2,387 (3,5); 1,990 (4,8); 1,615 (4,4); 1,606 (10,1); 1,602 (10,7); 1,593 (4,6); 1,398 (2,2); 1,300 (4,9); 1,291 (9,5); 1,286 (10,1); 1,277 (4,3); 1,175 (3,1); 0,096 (2,5); 0,005 (23,7); 0,000 (635,1); -0,006 (20,4); -0,100 (2,7)
Beispiel IT360: ^{1}HNMR (400,0 MHz, $CDCl_3$):
δ= 8,687 (8,6); 8,685 (8,5); 8,596 (15,9); 8,577 (0,6); 8,173 (8,6); 8,168 (8,5); 8,114 (16,0); 7,901 (10,7); 7,896 (11,0); 7,567 (5,3); 7,561 (5,3); 7,555 (1,2); 7,546 (7,0); 7,540 (6,9); 7,483 (0,4); 7,426 (11,9); 7,406 (8,9); 7,264 (25,7); 6,415 (3,4); 5,301 (12,8); 2,991 (0,6); 2,982 (1,7); 2,973 (3,0); 2,964 (4,1); 2,955 (4,1); 2,946 (3,1); 2,937 (1,8); 2,928 (0,7); 1,601 (5,6); 1,378 (1,1); 1,333 (0,6); 1,327 (0,4); 1,285 (1,1); 1,255 (5,4); 0,938 (2,5); 0,921 (10,0); 0,907 (9,8); 0,903 (8,2); 0,890 (3,5); 0,880 (1,2); 0,868 (0,9); 0,862 (0,7); 0,850 (0,9); 0,836 (0,6); 0,742 (0,4); 0,733 (0,4); 0,703 (3,0); 0,689 (8,1); 0,685 (8,5); 0,680 (8,2); 0,676 (7,9); 0,662 (2,4); 0,557 (0,5); 0,551 (0,5); 0,008 (0,6); 0,000 (19,7); -0,008 (1,0)
Beispiel IT361: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,266 (6,2); 8,208 (0,5); 8,195 (8,9); 7,692 (5,7); 7,687 (6,8); 7,678 (0,7); 7,658 (3,7); 7,652 (2,8); 7,637 (4,3); 7,632 (3,5); 7,593 (5,8); 7,572 (5,8); 7,475 (6,2); 7,454 (4,9); 6,962 (1,7); 5,449 (0,9); 4,086 (0,3); 4,068 (1,1); 4,050 (1,1); 4,032 (0,4); 2,882 (0,4); 2,873 (1,2);

2,863 (1,6); 2,855 (2,6); 2,845 (2,6); 2,837 (1,7); 2,827 (1,2); 2,817 (0,4); 2,181 (57,5); 1,972 (4,8); 1,965 (1,5); 1,959 (3,8); 1,953 (16,3); 1,947 (29,0); 1,941 (37,9); 1,935 (26,4); 1,929 (13,7); 1,436 (16,0); 1,268 (0,8); 1,221 (1,3); 1,204 (2,5); 1,186 (1,2); 0,795 (1,3); 0,783 (4,5); 0,777 (5,6); 0,765 (5,9); 0,760 (4,4); 0,747 (1,8); 0,615 (1,8); 0,605 (5,0); 0,603 (5,0); 0,598 (5,5); 0,593 (4,9); 0,588 (4,6); 0,576 (1,4); 0,000 (58,7); -0,009 (3,0)
Beispiel IT362: ^{1}HNMR (601,6 MHz, CD3CN):
δ= 8,282 (5,8); 8,209 (9,7); 7,742 (5,2); 7,738 (6,1); 7,705 (3,5); 7,702 (2,9); 7,692 (4,0); 7,688 (3,5); 7,644 (0,8); 7,594 (5,2); 7,580 (5,1); 7,506 (6,4); 7,493 (5,6); 2,197 (13,4); 2,194 (14,8); 2,191 (16,6); 2,188 (16,2); 2,186 (16,6); 2,184 (16,2); 2,181 (15,5); 2,179 (16,7); 1,973 (1,0); 1,967 (1,1); 1,959 (2,7); 1,954 (3,0); 1,951 (18,5); 1,947 (31,7); 1,942 (46,4); 1,938 (30,9); 1,934 (15,5); 1,594 (2,6); 1,584 (6,6); 1,580 (6,4); 1,571 (3,2); 1,544 (0,3); 1,436 (16,0); 1,359 (3,2); 1,350 (6,2); 1,345 (6,8); 1,336 (2,7); 1,266 (0,4); 1,204 (0,5); 0,005 (1,2); 0,000 (39,8); -0,006 (1,3)
Beispiel IT363: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 8,666 (5,1); 8,523 (1,9); 8,512 (2,0); 8,389 (5,2); 7,850 (2,9); 7,814 (2,7); 7,736 (1,2); 7,730 (1,9); 7,710 (7,1); 7,511 (2,5); 7,490 (2,1); 3,327 (42,2); 2,856 (0,5); 2,846 (0,8); 2,838 (1,2); 2,828 (1,2); 2,819 (0,8); 2,810 (0,5); 2,671 (0,4); 2,506 (46,0); 2,502 (59,6); 2,498 (46,8); 2,438 (0,6); 2,329 (0,4); 2,203 (0,6); 2,188 (12,9); 1,398 (16,0); 0,727 (0,7); 0,714 (2,3); 0,709 (3,0); 0,697 (2,8); 0,691 (2,5); 0,680 (0,9); 0,560 (0,9); 0,549 (3,0); 0,543 (3,1); 0,534 (2,7); 0,522 (0,7); 0,000 (42,2)
Beispiel IT364: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 9,432 (2,1); 8,689 (2,8); 8,404 (2,9); 7,853 (1,5); 7,816 (1,5); 7,795 (0,6); 7,789 (1,2); 7,780 (1,7); 7,775 (2,6); 7,560 (1,6); 7,552 (0,4); 7,538 (1,4); 3,327 (22,2); 2,507 (17,7); 2,502 (23,3); 2,498 (17,9); 2,436 (0,3); 2,189 (6,9); 1,989 (0,4); 1,615 (0,7); 1,600 (1,8); 1,594 (1,9); 1,581 (0,8); 1,398 (16,0); 1,284 (0,8); 1,270 (1,8); 1,264 (2,0); 1,249 (0,7); 0,008 (0,7); 0,000 (19,4)
Beispiel IT365: ^{1}HNMR (500,1 MHz, d_6DMSO):
δ= 9,726 (2,4); 8,559 (1,7); 8,556 (1,8); 8,306 (2,2); 7,930 (0,7); 7,914 (1,5); 7,897 (0,8); 7,588 (3,9); 7,467 (1,5); 7,450 (1,4); 3,305 (13,5); 2,508 (2,9); 2,504 (6,0); 2,501 (8,2); 2,497 (6,1); 2,494 (3,0); 2,106 (16,0); 1,645 (0,8); 1,634 (2,0); 1,628 (2,1); 1,617 (0,8); 1,239 (1,1); 1,228 (2,0); 1,222 (2,1); 1,211 (0,8); 0,000 (5,4)
Beispiel IT366: ^{1}HNMR (400,2 MHz, d_6DMSO):
δ= 9,726 (4,5); 8,587 (3,6); 8,583 (3,6); 8,305 (4,5); 7,934 (1,5); 7,913 (3,1); 7,892 (1,7); 7,597 (3,1); 7,562 (3,1); 7,468 (3,1); 7,447 (2,9); 5,753 (0,4); 3,427 (0,5); 3,307 (130,4); 3,283 (0,9); 3,236 (0,8); 2,669 (0,5); 2,504 (61,2); 2,500 (82,9); 2,496 (61,6); 2,431 (1,1); 2,412 (3,4); 2,394 (3,5); 2,375 (1,2); 2,327 (0,5); 2,322 (0,4); 2,087 (16,0); 1,987 (0,6); 1,648 (1,6); 1,634 (4,0); 1,628 (4,2); 1,614 (1,7); 1,463 (0,4); 1,240 (2,1); 1,227 (4,0); 1,220 (4,2); 1,206 (1,5); 1,174 (0,4); 1,031 (5,0); 1,012 (10,6); 0,993 (4,8); 0,146 (0,6); 0,008 (5,8); 0,000 (128,9); -0,150 (0,6)
Beispiel IT367: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 8,778 (1,2); 8,767 (1,2); 8,544 (1,7); 8,539 (1,8); 8,297 (2,1); 7,876 (0,8); 7,855 (1,5); 7,834 (0,8); 7,593 (3,9); 7,418 (1,5); 7,397 (1,4); 3,903 (3,9); 3,331 (120,3); 2,855 (0,5); 2,846 (0,7); 2,836 (0,7); 2,827 (0,5); 2,818 (0,3); 2,676 (0,5); 2,671 (0,7); 2,667 (0,6); 2,524 (2,0); 2,511 (45,1); 2,507 (87,8); 2,502 (113,1); 2,498 (83,2); 2,333 (0,5); 2,329 (0,7); 2,324 (0,5); 2,120 (0,9); 2,105 (16,0); 0,752 (0,4); 0,739 (1,3); 0,734 (1,7); 0,721 (1,7); 0,716 (1,4); 0,704 (0,5); 0,522 (0,6); 0,511 (1,6); 0,505 (1,6); 0,501 (1,5); 0,496 (1,5); 0,483 (0,5); 0,000 (6,3)
Beispiel IT368: ^{1}HNMR (500,1 MHz, d_6DMSO):
δ= 8,752 (2,4); 8,743 (2,4); 8,561 (3,4); 8,558 (3,7); 8,289 (4,4); 7,868 (1,5); 7,851 (3,0); 7,834 (1,6); 7,597 (3,0); 7,563 (3,0); 7,411 (3,0); 7,394 (2,9); 3,304 (38,0); 2,861 (0,6); 2,854 (0,9); 2,847 (1,4); 2,839 (1,4); 2,831 (0,9); 2,824 (0,7); 2,507 (6,9); 2,504 (14,1); 2,500 (19,4); 2,497 (14,5); 2,493 (7,2); 2,426 (1,2); 2,411 (3,5); 2,396 (3,6); 2,381 (1,2); 2,101 (1,1); 2,089 (16,0); 1,029 (5,5); 1,013 (11,1); 0,998 (5,0); 0,746 (0,9); 0,736 (2,7); 0,732 (3,5); 0,722 (3,4); 0,718 (2,8); 0,708 (1,0); 0,521 (1,1); 0,512 (3,3); 0,508 (3,3); 0,505 (3,1); 0,500 (3,1); 0,490 (0,9); 0,006 (0,7); 0,000 (14,7); -0,007 (0,6)
Beispiel IT369: ^{1}HNMR (400,2 MHz, d_6DMSO):
δ= 9,352 (4,3); 8,553 (4,2); 8,286 (4,4); 7,965 (1,0); 7,946 (2,0); 7,927 (1,1); 7,601 (3,3); 7,567 (3,5); 7,478 (0,9); 7,460 (2,0); 7,444 (1,3); 7,350 (2,0); 7,331 (3,4); 7,312 (1,5); 3,342 (0,4); 3,308 (118,1); 3,290 (0,6); 2,669 (0,3); 2,504 (47,2); 2,500 (55,9); 2,496 (39,1); 2,443 (1,2); 2,425 (3,6); 2,406 (3,6); 2,387 (1,2); 2,327 (0,3); 2,097 (16,0); 1,595 (1,7); 1,581 (4,8); 1,574 (4,3); 1,561 (1,8); 1,293 (2,0); 1,279 (4,8); 1,273 (4,3); 1,258 (1,6); 1,236 (0,8); 1,041 (4,9); 1,022 (10,0); 1,003 (4,6); 0,000 (32,0); -0,008 (1,3)
Beispiel IT370: ^{1}HNMR (400,2 MHz, d_6DMSO):
δ= 8,528 (3,4); 8,524 (3,6); 8,456 (1,7); 8,445 (1,7); 8,270 (4,0); 7,896 (0,9); 7,891 (0,9); 7,877 (1,7); 7,873 (1,8); 7,858 (1,0); 7,854 (0,9); 7,598 (2,8); 7,565 (2,8); 7,403 (0,8); 7,399 (0,8); 7,384 (1,7); 7,368 (1,2); 7,364 (1,1); 7,303 (2,5); 7,284 (3,9); 7,265 (1,7); 3,309 (77,4); 2,875 (0,6); 2,866 (0,8); 2,857 (1,3); 2,847 (1,4); 2,839 (0,8); 2,829 (0,6); 2,509 (11,1); 2,505 (23,7); 2,500 (33,3); 2,496 (24,3); 2,491 (11,5); 2,442 (1,1); 2,423 (3,4); 2,404 (3,5); 2,386 (1,2); 2,096 (16,0); 1,236 (0,6); 1,040 (5,1); 1,021 (11,2); 1,002 (5,0); 0,725 (0,9); 0,712 (2,5); 0,707 (3,5); 0,695 (3,3); 0,689 (2,7); 0,677 (1,2); 0,557 (1,2); 0,546 (3,4); 0,540 (3,0); 0,536 (2,8); 0,530 (2,8); 0,518 (0,9); 0,008 (0,7); 0,000 (21,2); -0,009 (0,8)
Beispiel IT371: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,160 (3,6); 8,139 (3,7); 7,764 (2,0); 7,739 (2,0); 7,733 (2,7); 7,704 (1,3); 7,699 (1,2); 7,683 (3,4); 7,678 (2,3); 7,553 (1,2); 7,502 (2,4); 7,481 (1,9); 3,060 (0,5); 2,851 (0,5); 2,520 (0,8); 2,501 (2,5); 2,482 (2,5); 2,463 (0,9); 2,134 (30,8); 2,114 (0,4); 2,107 (0,5); 2,101 (0,4); 1,964 (2,0); 1,958 (4,9); 1,952 (28,1); 1,946 (52,7); 1,940 (72,6); 1,934 (52,6); 1,928 (28,4); 1,768 (0,4); 1,762 (0,3); 1,598 (1,0); 1,583 (2,5); 1,577 (2,7); 1,563 (1,4); 1,437 (16,0); 1,361 (1,3); 1,347 (2,7); 1,340 (2,9); 1,326 (1,1); 1,102 (3,5); 1,083 (7,4); 1,064 (3,4); 0,146 (0,4); 0,008 (3,1); 0,000 (97,3); -0,150 (0,4)
Beispiel IT372: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,150 (5,4); 8,130 (5,6); 7,764 (2,7); 7,689 (4,2); 7,684 (6,5); 7,655 (1,9); 7,650 (1,5); 7,634 (2,2); 7,629 (1,9); 7,469 (3,6); 7,448 (2,9); 6,939 (0,9); 2,871 (0,6); 2,862 (0,9); 2,853 (1,4); 2,843 (1,4); 2,834 (1,0); 2,825 (0,6); 2,518 (1,2); 2,499 (3,7); 2,480 (3,8); 2,462 (1,4); 2,168 (77,5); 2,114 (0,3); 2,108 (0,4); 1,965 (1,9); 1,959 (4,8); 1,953 (25,8); 1,947 (47,0); 1,941 (63,4); 1,935 (44,6); 1,929 (23,7); 1,769 (0,4); 1,437 (16,0); 1,100 (5,0); 1,081 (10,2); 1,062 (4,8); 0,794 (0,8); 0,781 (2,3); 0,776 (3,1); 0,763 (3,2); 0,758 (2,4); 0,746 (1,1); 0,611

(1,0); 0,600 (2,8); 0,594 (2,9); 0,590 (2,6); 0,585 (2,6); 0,572 (0,8); 0,146 (0,3); 0,008 (2,6); 0,000 (69,9); -0,008 (4,3); -0,149 (0,3)
Beispiel IT373: ^{1}HNMR (400,1 MHz, d_6DMSO): δ= 8,77 (0,0325); 8,76 (0,0329); 8,67 (0,0447); 8,40 (0,0688); 8,07 (0,1396); 7,89 (0,0039); 7,88 (0,0202); 7,87 (0,0405); 7,43 (0,0406); 7,42 (0,0383); 3,78 (0,0029); 3,59 (0,0071); 3,30 (1,0000); 3,17 (0,0044); 3,16 (0,0042); 2,85 (0,0123); 2,84 (0,0187); 2,83 (0,0088); 2,64 (0,0025); 2,50 (0,4120); 2,37 (0,0016); 1,24 (0,0054); 0,73 (0,0482); 0,72 (0,0467); 0,71 (0,0149); 0,52 (0,0154); 0,50 (0,0420); 0,49 (0,0128); 0,12 (0,0012); 0,00 (0,2886); -0,12 (0,0012)
Beispiel IT374: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO): δ= 9,381 (5,5); 8,653 (5,5); 8,317 (0,7); 8,293 (5,6); 7,988 (1,2); 7,984 (1,3); 7,969 (2,4); 7,965 (2,4); 7,950 (1,4); 7,946 (1,3); 7,747 (4,4); 7,734 (1,5); 7,713 (7,2); 7,706 (4,3); 7,683 (0,7); 7,493 (1,1); 7,489 (1,2); 7,474 (2,5); 7,458 (1,6); 7,454 (1,5); 7,362 (3,0); 7,343 (5,1); 7,324 (2,2); 3,903 (11,7); 3,333 (264,8); 3,267 (0,3); 3,174 (0,6); 3,162 (0,6); 2,802 (1,7); 2,783 (5,4); 2,765 (5,5); 2,746 (1,8); 2,676 (1,4); 2,672 (1,9); 2,667 (1,4); 2,542 (1,1); 2,525 (5,6); 2,511 (121,2); 2,507 (238,9); 2,503 (309,3); 2,498 (228,5); 2,494 (115,5); 2,334 (1,3); 2,329 (1,8); 2,325 (1,4); 1,603 (2,2); 1,589 (5,6); 1,582 (6,0); 1,569 (2,6); 1,298 (2,8); 1,285 (5,7); 1,278 (6,1); 1,264 (2,3); 1,237 (0,5); 1,060 (7,3); 1,042 (16,0); 1,023 (7,2); 0,008 (0,6); 0,000 (17,6); -0,008 (0,7)
Beispiel IT375: ^{1}HNMR (400,2 MHz, d_6DMSO): δ= 8,621 (4,9); 8,618 (5,3); 8,463 (2,4); 8,452 (2,4); 8,277 (5,0); 8,274 (5,4); 7,913 (1,3); 7,909 (1,4); 7,894 (2,4); 7,890 (2,5); 7,875 (1,4); 7,871 (1,3); 7,742 (4,3); 7,730 (1,5); 7,709 (7,2); 7,702 (4,2); 7,679 (0,7); 7,416 (1,1); 7,412 (1,2); 7,397 (2,4); 7,381 (1,7); 7,377 (1,6); 7,313 (3,4); 7,294 (5,4); 7,275 (2,3); 3,333 (0,6); 3,324 (0,5); 3,307 (125,1); 3,285 (0,5); 2,879 (0,8); 2,870 (1,2); 2,861 (1,9); 2,851 (1,9); 2,842 (1,2); 2,833 (0,9); 2,822 (0,4); 2,798 (1,7); 2,780 (5,3); 2,761 (5,5); 2,742 (1,8); 2,509 (17,8); 2,505 (38,4); 2,500 (54,1); 2,496 (39,8); 2,491 (19,1); 2,327 (0,3); 1,235 (0,5); 1,061 (7,3); 1,042 (16,0); 1,023 (7,1); 0,729 (1,2); 0,716 (3,4); 0,711 (4,8); 0,699 (4,5); 0,693 (3,7); 0,682 (1,6); 0,562 (1,6); 0,552 (4,7); 0,546 (4,2); 0,542 (4,0); 0,536 (3,9); 0,524 (1,2); 0,008 (1,4); 0,000 (45,5); -0,009 (1,9)
Beispiel IT376: ^{1}HNMR (400,1 MHz, d_6DMSO): δ= 9,531 (3,2); 9,102 (3,2); 9,096 (3,3); 8,822 (3,2); 8,817 (3,3); 8,727 (5,1); 8,442 (1,9); 8,436 (3,4); 8,428 (5,4); 7,617 (2,1); 7,582 (2,1); 5,759 (16,0); 3,568 (2,8); 3,437 (0,3); 3,424 (0,4); 3,326 (355,3); 3,303 (1,2); 2,711 (0,5); 2,675 (0,6); 2,670 (0,7); 2,667 (0,5); 2,557 (0,4); 2,554 (0,7); 2,552 (0,9); 2,551 (1,1); 2,541 (159,1); 2,530 (1,2); 2,528 (1,0); 2,527 (1,0); 2,524 (1,3); 2,510 (33,8); 2,506 (67,9); 2,502 (90,5); 2,497 (63,3); 2,493 (29,5); 2,458 (0,9); 2,440 (2,5); 2,421 (2,5); 2,402 (0,9); 2,368 (0,6); 2,333 (0,6); 2,329 (0,7); 2,324 (0,6); 2,111 (12,0); 2,086 (1,1); 1,629 (1,2); 1,615 (2,9); 1,608 (3,2); 1,595 (1,5); 1,346 (1,4); 1,332 (2,9); 1,325 (3,2); 1,311 (1,1); 1,072 (0,6); 1,055 (1,3); 1,048 (4,1); 1,037 (0,9); 1,029 (8,8); 1,010 (3,8); 0,008 (2,0); 0,000 (66,6); -0,008 (2,4); -0,014 (0,4)
Beispiel IT377: ^{1}HNMR (400,1 MHz, d_6DMSO): δ= 9,043 (4,2); 9,038 (4,3); 8,798 (4,2); 8,793 (4,4); 8,705 (6,6); 8,645 (1,9); 8,635 (2,0); 8,409 (6,8); 8,389 (2,6); 8,384 (4,6); 8,379 (2,6); 7,613 (2,8); 7,580 (2,9); 5,759 (4,7); 3,327 (158,6); 2,902 (0,6); 2,892 (1,0); 2,884 (1,5); 2,874 (1,5); 2,866 (1,0); 2,856 (0,7); 2,671 (0,4); 2,541 (65,9); 2,511 (20,9); 2,506 (42,9); 2,502 (59,0); 2,498 (43,4); 2,493 (22,4); 2,458 (2,1); 2,438 (3,5); 2,419 (3,4); 2,401 (1,3); 2,367 (0,3); 2,329 (0,4); 2,110 (16,0); 2,086 (1,2); 1,989 (0,4); 1,072 (0,4); 1,055 (1,0); 1,048 (5,3); 1,029 (11,6); 1,010 (5,3); 0,763 (0,9); 0,750 (2,3); 0,745 (3,4); 0,733 (3,3); 0,727 (2,8); 0,716 (1,4); 0,617 (1,2); 0,607 (3,5); 0,600 (3,1); 0,591 (2,8); 0,579 (1,0); 0,008 (1,3); 0,000 (40,7); -0,008 (2,2)
Beispiel IT378: ^{1}HNMR (400,1 MHz, d_6DMSO): δ= 9,542 (5,5); 9,127 (5,7); 9,122 (5,9); 8,857 (8,8); 8,834 (5,6); 8,829 (5,9); 8,472 (3,3); 8,467 (5,7); 8,461 (3,2); 8,434 (8,9); 7,757 (4,0); 7,724 (7,7); 7,699 (0,6); 5,759 (5,9); 4,020 (0,4); 3,611 (0,6); 3,568 (1,5); 3,426 (0,9); 3,326 (364,4); 3,303 (1,4); 3,235 (1,3); 2,821 (1,6); 2,802 (5,1); 2,783 (5,1); 2,765 (1,7); 2,711 (0,6); 2,670 (0,9); 2,666 (0,7); 2,541 (164,7); 2,510 (48,8); 2,506 (100,5); 2,502 (137,3); 2,497 (98,8); 2,493 (47,9); 2,367 (0,6); 2,329 (0,8); 1,989 (1,5); 1,633 (2,1); 1,619 (5,2); 1,612 (5,6); 1,599 (2,4); 1,350 (2,6); 1,337 (5,3); 1,330 (5,5); 1,316 (2,0); 1,234 (0,4); 1,192 (0,4); 1,174 (0,8); 1,156 (0,5); 1,146 (0,5); 1,069 (7,2); 1,050 (16,0); 1,032 (7,1); 0,146 (0,4); 0,008 (2,9); 0,000 (90,5); -0,008 (3,5)
Beispiel IT379: ^{1}HNMR (500,1 MHz, d_6DMSO): δ= 9,064 (5,0); 9,059 (5,1); 8,821 (8,9); 8,811 (5,2); 8,807 (5,3); 8,630 (2,5); 8,622 (2,5); 8,413 (3,8); 8,408 (13,3); 7,748 (4,3); 7,738 (1,8); 7,721 (6,6); 7,712 (3,8); 7,695 (0,9); 5,752 (1,0); 3,305 (76,3); 3,281 (0,4); 2,910 (0,4); 2,902 (0,9); 2,895 (1,3); 2,888 (2,0); 2,880 (2,0); 2,873 (1,3); 2,865 (1,0); 2,858 (0,4); 2,813 (1,7); 2,798 (5,5); 2,783 (5,6); 2,768 (1,9); 2,508 (13,7); 2,504 (28,5); 2,501 (39,3); 2,497 (29,3); 2,494 (14,5); 1,908 (2,7); 1,236 (0,5); 1,068 (7,4); 1,053 (16,0); 1,038 (7,3); 0,761 (1,2); 0,751 (3,5); 0,747 (4,8); 0,737 (4,6); 0,733 (3,8); 0,723 (1,6); 0,620 (1,6); 0,612 (4,7); 0,607 (4,4); 0,604 (4,2); 0,599 (4,0); 0,589 (1,2); 0,006 (1,3); 0,000 (30,6); -0,007 (1,4)
Beispiel IT380: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,128 (2,6); 8,082 (2,8); 7,736 (1,6); 7,731 (2,1); 7,701 (1,1); 7,696 (0,8); 7,680 (1,2); 7,675 (1,1); 7,608 (0,4); 7,562 (1,4); 7,549 (1,4); 7,494 (1,9); 7,473 (1,5); 2,448 (0,6); 2,429 (1,9); 2,410 (2,0); 2,391 (0,7); 2,164 (9,8); 2,155 (20,2); 2,088 (7,6); 1,965 (1,0); 1,959 (2,5); 1,953 (13,9); 1,946 (25,4); 1,940 (34,2); 1,934 (24,1); 1,928 (12,6); 1,598 (0,8); 1,583 (2,0); 1,577 (2,0); 1,563 (1,1); 1,437 (16,0); 1,358 (1,0); 1,345 (2,0); 1,338 (2,1); 1,323 (0,8); 1,268 (0,7); 1,092 (2,7); 1,073 (5,7); 1,054 (2,6); 0,008 (1,1); 0,000 (34,6); -0,009 (1,5)
Beispiel IT381: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,115 (7,2); 8,067 (7,4); 7,688 (4,4); 7,683 (5,6); 7,667 (0,5); 7,652 (3,0); 7,646 (2,4); 7,631 (3,5); 7,625 (3,0); 7,560 (4,1); 7,546 (4,1); 7,462 (5,2); 7,441 (4,2); 6,903 (1,2); 2,880 (0,3); 2,871 (0,9); 2,861 (1,3); 2,853 (2,1); 2,843 (2,1); 2,835 (1,3); 2,825 (1,0); 2,815 (0,4); 2,447 (1,8); 2,428 (5,5); 2,409 (5,7); 2,390 (1,9); 2,141 (55,3); 2,120 (1,0); 2,113 (0,9); 2,107 (1,0); 2,101 (0,9); 2,086 (21,5); 1,964 (4,2); 1,958 (10,5); 1,952 (54,5); 1,946 (98,5); 1,940 (132,1); 1,934 (92,1); 1,927 (48,4); 1,774 (0,5); 1,768 (0,8); 1,762 (0,5); 1,437 (1,3); 1,270 (1,0); 1,090 (7,7); 1,071 (16,0); 1,052 (7,4); 0,794 (1,1); 0,781 (3,3); 0,776 (4,4); 0,763 (4,7); 0,758 (3,4); 0,746 (1,6); 0,610 (1,5); 0,598 (3,8); 0,592 (4,0); 0,588 (3,6); 0,583 (3,6); 0,571 (1,1); 0,146 (1,8); 0,031 (0,4); 0,030 (0,4); 0,0272 (0,4); 0,0265 (0,4); 0,026 (0,4); 0,022 (0,6); 0,008 (16,0); 0,000 (381,4); -0,009 (18,6); -0,150 (1,8)
Beispiel IT382: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,127 (7,5); 8,085 (7,7); 7,734 (4,3); 7,729 (5,7); 7,708 (3,2); 7,703 (2,2); 7,688 (3,6); 7,682 (2,9); 7,561 (3,9); 7,548 (3,8); 7,512 (5,3); 7,491 (4,4); 7,365 (0,9); 4,141 (1,1); 4,124 (1,2); 4,117 (3,5); 4,100 (3,5); 4,093 (3,7); 4,077 (3,5); 4,070 (1,3); 4,053 (1,2); 2,462 (0,4); 2,457 (0,4); 2,450 (1,8); 2,431 (5,5); 2,412 (5,7); 2,393 (1,9); 2,150 (76,9); 2,120 (0,5); 2,113 (0,7); 2,107 (0,8); 2,101 (0,8); 2,090 (21,3); 1,964 (3,5); 1,958 (8,4); 1,952 (45,7); 1,946 (82,9); 1,940 (111,8); 1,934 (77,5); 1,927 (40,4); 1,774 (0,4); 1,768 (0,6); 1,762 (0,4); 1,437

(1,0); 1,269 (1,0); 1,093 (7,7); 1,074 (16,0); 1,055 (7,4); 0,146 (1,4); 0,008 (11,1); 0,000 (291,0); -0,009 (12,7); -0,150 (1,4)
Beispiel IT383: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,128 (7,9); 8,079 (8,4); 7,719 (4,9); 7,713 (6,1); 7,677 (3,1); 7,671 (2,5); 7,656 (3,5); 7,650 (3,1); 7,562 (4,8); 7,548 (4,7); 7,484 (5,6); 7,463 (5,1); 7,436 (1,2); 5,447 (1,2); 5,337 (1,3); 5,316 (2,5); 5,295 (2,5); 5,274 (1,3); 4,068 (0,4); 4,050 (0,4); 3,543 (3,2); 3,540 (2,1); 3,520 (6,4); 3,498 (4,2); 3,370 (4,2); 3,367 (2,8); 3,350 (6,2); 3,346 (5,9); 3,326 (3,3); 2,462 (0,3); 2,451 (2,0); 2,432 (6,0); 2,413 (6,2); 2,394 (2,1); 2,150 (115,6); 2,120 (0,5); 2,114 (0,7); 2,107 (0,9); 2,091 (23,5); 1,972 (1,9); 1,964 (3,0); 1,958 (7,9); 1,952 (39,4); 1,946 (71,5); 1,940 (96,0); 1,934 (68,4); 1,928 (36,7); 1,774 (0,4); 1,768 (0,6); 1,762 (0,4); 1,437 (2,7); 1,268 (1,0); 1,221 (0,4); 1,204 (0,8); 1,186 (0,4); 1,094 (7,8); 1,075 (16,0); 1,056 (7,5); 0,146 (1,1); 0,008 (9,8); 0,000 (220,9); -0,150 (1,1)
Beispiel IT384: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,162 (9,4); 8,125 (7,5); 7,997 (4,3); 7,952 (4,4); 7,729 (4,8); 7,724 (6,8); 7,707 (3,5); 7,701 (2,3); 7,686 (3,9); 7,680 (3,2); 7,519 (6,1); 7,498 (4,9); 7,348 (1,3); 4,140 (1,3); 4,123 (1,4); 4,116 (3,9); 4,100 (3,9); 4,092 (4,2); 4,076 (3,9); 4,069 (1,7); 4,052 (1,4); 2,146 (92,5); 2,120 (27,2); 2,108 (1,6); 2,101 (0,9); 2,095 (0,5); 1,971 (0,9); 1,964 (3,5); 1,958 (9,1); 1,952 (47,9); 1,946 (87,4); 1,940 (118,0); 1,934 (83,5); 1,928 (44,7); 1,774 (0,5); 1,768 (0,7); 1,762 (0,5); 1,437 (16,0); 1,270 (0,6); 0,146 (0,9); 0,008 (6,8); 0,000 (179,6); -0,008 (10,9); -0,150 (0,9)
Beispiel IT385: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,163 (5,2); 8,118 (4,2); 7,998 (2,5); 7,953 (2,5); 7,716 (3,0); 7,710 (3,7); 7,675 (1,9); 7,669 (1,5); 7,654 (2,2); 7,648 (1,9); 7,490 (3,5); 7,469 (2,8); 7,418 (0,8); 7,400 (0,8); 5,335 (0,8); 5,314 (1,6); 5,293 (1,6); 5,272 (0,8); 3,542 (2,0); 3,538 (1,3); 3,518 (4,0); 3,496 (2,6); 3,370 (2,6); 3,367 (1,7); 3,349 (3,8); 3,346 (3,6); 3,326 (2,0); 2,133 (15,0); 2,120 (15,4); 2,101 (0,5); 1,971 (1,1); 1,964 (1,7); 1,958 (4,3); 1,952 (19,7); 1,946 (35,3); 1,940 (47,2); 1,934 (33,6); 1,927 (18,1); 1,437 (16,0); 1,204 (0,4); 0,146 (0,4); 0,008 (3,9); 0,000 (78,7); -0,150 (0,4)
Beispiel IT386: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,252 (0,3); 8,146 (2,7); 8,110 (0,4); 8,102 (2,9); 7,899 (1,3); 7,708 (1,4); 7,690 (1,7); 7,685 (2,2); 7,655 (1,2); 7,649 (0,9); 7,634 (1,5); 7,628 (1,4); 7,468 (2,2); 7,447 (1,8); 6,891 (0,5); 2,871 (0,4); 2,862 (0,5); 2,853 (0,8); 2,843 (0,8); 2,835 (0,5); 2,825 (0,4); 2,415 (1,0); 2,171 (8,3); 2,132 (10,6); 1,971 (0,5); 1,964 (1,1); 1,958 (2,6); 1,952 (13,9); 1,946 (25,2); 1,940 (34,0); 1,933 (23,7); 1,927 (12,5); 1,437 (16,0); 1,269 (0,4); 0,794 (0,4); 0,781 (1,3); 0,776 (1,7); 0,764 (1,8); 0,758 (1,3); 0,746 (0,6); 0,611 (0,6); 0,599 (1,5); 0,593 (1,6); 0,589 (1,4); 0,584 (1,4); 0,571 (0,5); 0,008 (2,3); 0,000 (63,9); -0,009 (3,1)
Beispiel IT387: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,171 (11,0); 8,170 (11,0); 8,122 (12,2); 8,120 (11,4); 7,729 (6,8); 7,724 (8,7); 7,697 (4,9); 7,691 (3,7); 7,676 (5,6); 7,670 (4,6); 7,606 (16,0); 7,604 (15,8); 7,551 (3,2); 7,500 (8,3); 7,479 (6,7); 5,446 (0,7); 4,085 (0,6); 4,068 (2,0); 4,050 (2,0); 4,032 (0,7); 3,240 (0,6); 2,132 (42,8); 2,119 (0,5); 2,113 (0,7); 2,107 (0,9); 2,101 (0,6); 2,095 (0,3); 1,971 (9,0); 1,964 (4,0); 1,958 (10,1); 1,952 (56,8); 1,946 (103,2); 1,940 (138,6); 1,933 (95,2); 1,927 (49,0); 1,914 (0,7); 1,780 (0,3); 1,774 (0,6); 1,768 (0,8); 1,762 (0,6); 1,595 (3,6); 1,581 (8,5); 1,574 (8,5); 1,560 (4,6); 1,520 (0,5); 1,437 (11,1); 1,400 (0,6); 1,360 (4,7); 1,346 (8,6); 1,340 (8,8); 1,325 (3,6); 1,317 (0,8); 1,287 (0,4); 1,269 (1,4); 1,221 (2,5); 1,204 (4,7); 1,186 (2,3); 0,146 (1,8); 0,008 (14,1); 0,000 (400,9); -0,009 (15,1); -0,150 (1,8)
Beispiel IT388: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,160 (10,6); 8,111 (11,3); 7,681 (6,2); 7,675 (7,9); 7,647 (3,9); 7,642 (3,1); 7,627 (4,5); 7,621 (4,0); 7,605 (16,0); 7,467 (7,2); 7,447 (5,7); 6,936 (2,0); 5,448 (0,4); 4,067 (0,5); 4,049 (0,5); 2,879 (0,4); 2,869 (1,3); 2,860 (2,0); 2,851 (2,8); 2,842 (2,9); 2,833 (2,0); 2,824 (1,4); 2,814 (0,5); 2,467 (1,2); 2,462 (1,7); 2,458 (1,3); 2,253 (0,6); 2,226 (0,4); 2,158 (239,6); 2,120 (1,0); 2,113 (1,3); 2,107 (1,6); 2,101 (1,2); 2,095 (0,7); 1,971 (3,4); 1,964 (8,0); 1,958 (20,3); 1,952 (98,7); 1,946 (178,8); 1,940 (240,6); 1,934 (170,9); 1,928 (91,2); 1,781 (0,5); 1,774 (1,0); 1,768 (1,3); 1,762 (1,0); 1,756 (0,5); 1,437 (3,0); 1,269 (0,9); 1,221 (0,5); 1,203 (1,0); 1,185 (0,5); 0,792 (1,7); 0,779 (4,8); 0,774 (6,6); 0,761 (6,5); 0,756 (5,1); 0,744 (2,2); 0,610 (2,2); 0,599 (6,0); 0,592 (6,3); 0,583 (5,4); 0,571 (1,6); 0,146 (3,3); 0,007 (29,1); 0,000 (640,2); -0,150 (3,3)
Beispiel IT389: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d$_6$DMSO): δ= 9,437 (11,1); 8,788 (15,9); 8,367 (16,0); 8,317 (0,8); 7,986 (0,4); 7,903 (6,6); 7,897 (6,7); 7,824 (9,1); 7,810 (13,0); 7,805 (11,4); 7,802 (13,2); 7,797 (8,0); 7,791 (3,7); 7,614 (3,7); 7,610 (3,5); 7,591 (2,9); 7,588 (2,9); 7,560 (9,0); 7,551 (1,7); 7,546 (1,5); 7,537 (7,7); 3,903 (8,5); 3,332 (418,5); 3,174 (0,7); 3,162 (0,6); 2,676 (2,0); 2,671 (2,7); 2,667 (2,1); 2,541 (1,6); 2,507 (359,7); 2,502 (464,1); 2,498 (346,7); 2,333 (2,1); 2,329 (2,9); 2,325 (2,2); 1,618 (3,7); 1,604 (9,3); 1,597 (9,9); 1,584 (4,2); 1,543 (0,4); 1,327 (0,4); 1,287 (4,3); 1,274 (9,4); 1,267 (9,9); 1,253 (3,8); 1,234 (1,5); 1,215 (0,5); 1,181 (0,4); 1,177 (0,4); 0,861 (0,4); 0,853 (0,4); 0,843 (0,4); 0,834 (0,4); 0,824 (0,4); 0,813 (0,3); 0,008 (0,9); 0,000 (24,6); -0,008 (1,1)
Beispiel IT390: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,565 (0,4); 8,349 (0,6); 8,333 (14,0); 8,123 (0,6); 8,109 (13,1); 8,096 (0,6); 7,904 (0,4); 7,881 (0,4); 7,712 (8,7); 7,689 (16,0); 7,683 (10,7); 7,672 (1,0); 7,654 (5,5); 7,648 (4,2); 7,633 (6,1); 7,627 (5,3); 7,617 (5,0); 7,611 (5,5); 7,475 (0,5); 7,467 (9,7); 7,454 (0,7); 7,446 (9,4); 7,438 (3,3); 7,422 (2,4); 7,419 (2,6); 7,416 (2,5); 6,891 (2,1); 5,446 (0,4); 3,899 (0,6); 2,881 (0,6); 2,872 (1,7); 2,862 (2,4); 2,854 (3,8); 2,844 (3,9); 2,835 (2,5); 2,826 (1,8); 2,816 (0,6); 2,132 (62,2); 2,113 (1,1); 2,107 (1,3); 2,101 (0,9); 2,095 (0,5); 1,996 (0,3); 1,971 (0,9); 1,964 (5,7); 1,958 (14,2); 1,952 (81,0); 1,946 (147,9); 1,940 (200,1); 1,933 (139,4); 1,927 (72,6); 1,780 (0,5); 1,774 (0,8); 1,768 (1,1); 1,762 (0,8); 1,756 (0,4); 1,268 (2,3); 0,881 (0,3); 0,796 (2,0); 0,783 (5,8); 0,778 (7,9); 0,765 (8,2); 0,760 (6,0); 0,748 (2,8); 0,726 (0,4); 0,709 (0,4); 0,653 (0,3); 0,643 (0,3); 0,613 (2,8); 0,601 (6,7); 0,595 (7,1); 0,591 (6,3); 0,586 (6,3); 0,574 (2,0); 0,146 (2,4); 0,008 (17,6); 0,000 (508,1); -0,009 (24,9); -0,150 (2,4)
Beispiel IT391: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d$_6$DMSO): δ= 8,837 (3,4); 8,831 (3,6); 8,747 (6,3); 8,532 (1,9); 8,521 (2,0); 8,474 (6,2); 8,100 (9,7); 7,954 (3,3); 7,949 (3,5); 4,109 (0,4); 4,095 (0,4); 3,904 (16,0); 3,335 (287,0); 3,267 (0,5); 3,243 (0,4); 3,174 (2,4); 3,162 (2,5); 2,877 (0,6); 2,868 (0,9); 2,859 (1,3); 2,849 (1,3); 2,840 (0,9); 2,831 (0,6); 2,676 (1,0); 2,671 (1,3); 2,667 (1,0); 2,507 (156,9); 2,502 (206,2); 2,498 (158,4); 2,334 (0,9); 2,329 (1,2); 2,325 (0,9); 1,258 (0,4); 1,002 (1,3); 0,986 (1,2); 0,740 (0,8); 0,727 (2,3); 0,722 (3,1); 0,710 (2,9); 0,704 (2,4); 0,693 (1,0); 0,568 (1,0); 0,558 (3,1); 0,552 (2,9); 0,548 (2,7); 0,542 (2,5); 0,530 (0,7); 0,000 (1,8)
Beispiel IT392: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d$_6$DMSO): δ= 9,415 (4,9); 8,892 (4,2); 8,886 (4,4); 8,765 (7,6); 8,488 (7,3); 8,104 (11,7); 8,044 (4,2); 8,039 (4,3); 3,904 (16,0); 3,593 (0,4); 3,336

(427,9); 3,173 (1,6); 3,163 (1,6); 2,676 (1,4); 2,672 (1,7); 2,667 (1,3); 2,518 (32,9); 2,511 (114,6); 2,507 (211,5); 2,503 (266,6); 2,498 (196,7); 2,334 (1,1); 2,329 (1,5); 2,325 (1,1); 1,613 (1,8); 1,599 (4,5); 1,592 (4,8); 1,579 (2,0); 1,315 (2,1); 1,301 (4,6); 1,295 (4,7); 1,280 (1,7); 1,235 (0,3); 0,000 (2,1)
Beispiel IT393: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,187 (3,1); 8,146 (3,3); 7,899 (4,8); 7,653 (1,3); 7,648 (2,7); 7,639 (0,5); 7,624 (1,5); 7,618 (1,0); 7,462 (1,9); 7,441 (1,5); 7,115 (0,7); 5,449 (1,2); 4,068 (0,5); 4,050 (0,5); 2,174 (33,4); 1,972 (2,4); 1,965 (0,8); 1,959 (1,9); 1,953 (10,3); 1,947 (18,6); 1,941 (24,9); 1,934 (16,9); 1,928 (8,7); 1,448 (9,5); 1,437 (16,0); 1,270 (0,5); 1,221 (0,6); 1,204 (1,2); 1,186 (0,6); 0,837 (0,7); 0,824 (2,1); 0,820 (2,2); 0,808 (0,9); 0,673 (1,1); 0,661 (2,4); 0,656 (2,5); 0,644 (0,8); 0,008 (0,4); 0,000 (10,3); -0,009 (0,3)
Beispiel IT394: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,149 (5,3); 8,106 (4,3); 7,996 (2,3); 7,951 (2,4); 7,645 (2,3); 7,639 (5,5); 7,632 (0,8); 7,618 (2,7); 7,612 (1,8); 7,457 (3,0); 7,436 (2,4); 7,098 (1,2); 2,468 (0,4); 2,464 (0,5); 2,459 (0,4); 2,165 (184,2); 2,116 (15,3); 2,102 (0,5); 1,972 (1,1); 1,965 (3,0); 1,959 (7,6); 1,953 (41,5); 1,947 (74,8); 1,940 (100,0); 1,934 (68,4); 1,928 (35,0); 1,775 (0,4); 1,769 (0,6); 1,763 (0,4); 1,447 (16,0); 1,437 (3,0); 1,270 (2,2); 1,204 (0,3); 0,835 (1,1); 0,822 (3,7); 0,818 (3,8); 0,807 (1,5); 0,673 (1,8); 0,662 (4,3); 0,656 (4,3); 0,644 (1,3); 0,008 (1,2); 0,000 (38,1); -0,009 (1,4)
Beispiel IT395: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 9,596 (2,3); 8,893 (2,0); 8,887 (2,0); 8,791 (3,3); 8,545 (3,3); 8,315 (0,5); 8,300 (2,2); 8,294 (2,3); 8,283 (5,7); 4,038 (0,4); 4,020 (0,4); 3,322 (38,3); 2,671 (0,6); 2,502 (83,6); 2,328 (0,6); 1,989 (1,8); 1,643 (0,8); 1,628 (2,2); 1,621 (2,3); 1,609 (0,9); 1,398 (16,0); 1,298 (1,0); 1,285 (2,2); 1,278 (2,3); 1,264 (0,8); 1,193 (0,5); 1,175 (0,9); 1,157 (0,5); 0,146 (0,4); 0,000 (75,9); -0,150 (0,4)
Beispiel IT396: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 8,838 (2,0); 8,833 (2,0); 8,618 (3,2); 8,513 (1,0); 8,502 (1,0); 8,377 (3,3); 7,954 (1,9); 7,949 (1,9); 7,596 (3,6); 4,104 (0,3); 3,903 (10,1); 3,409 (0,5); 3,350 (346,6); 3,302 (0,5); 3,175 (1,8); 3,162 (1,8); 2,865 (0,4); 2,857 (0,7); 2,847 (0,7); 2,838 (0,4); 2,677 (0,4); 2,672 (0,6); 2,668 (0,4); 2,526 (1,8); 2,512 (37,4); 2,508 (74,7); 2,503 (97,3); 2,499 (71,2); 2,494 (35,6); 2,489 (12,6); 2,335 (0,4); 2,330 (0,6); 2,325 (0,5); 2,117 (16,0); 1,003 (0,6); 0,987 (0,6); 0,739 (0,5); 0,726 (1,2); 0,721 (1,7); 0,709 (1,6); 0,703 (1,3); 0,692 (0,6); 0,568 (0,6); 0,557 (1,7); 0,551 (1,5); 0,547 (1,4); 0,542 (1,4); 0,529 (0,4); 0,000 (0,7)
Beispiel IT397: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 9,395 (2,2); 8,892 (2,0); 8,886 (2,0); 8,640 (3,3); 8,391 (3,4); 8,040 (1,9); 8,035 (1,9); 7,599 (3,7); 4,108 (0,5); 4,095 (0,5); 3,904 (10,2); 3,333 (130,8); 3,174 (2,4); 3,161 (2,4); 2,676 (0,4); 2,671 (0,6); 2,667 (0,5); 2,541 (0,4); 2,525 (1,8); 2,511 (39,6); 2,507 (81,0); 2,502 (95,3); 2,498 (69,0); 2,493 (34,2); 2,334 (0,4); 2,329 (0,6); 2,324 (0,4); 2,118 (16,0); 1,613 (0,8); 1,599 (1,9); 1,592 (2,1); 1,579 (0,9); 1,311 (0,9); 1,297 (2,0); 1,291 (2,1); 1,276 (0,8); 1,002 (0,5); 0,987 (0,5); 0,000 (1,2)
Beispiel IT398: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 8,839 (6,0); 8,833 (6,2); 8,791 (0,5); 8,781 (9,8); 8,692 (3,1); 8,681 (3,2); 8,549 (0,5); 8,540 (9,8); 8,282 (16,0); 8,217 (6,2); 8,210 (6,1); 5,756 (1,1); 3,326 (37,2); 2,871 (0,8); 2,861 (1,2); 2,852 (1,8); 2,842 (1,9); 2,833 (1,2); 2,824 (0,9); 2,814 (0,3); 2,671 (0,4); 2,525 (0,9); 2,511 (20,9); 2,507 (43,3); 2,502 (58,6); 2,498 (44,1); 2,494 (22,5); 2,329 (0,4); 1,989 (0,4); 1,397 (0,4); 0,757 (1,2); 0,744 (3,4); 0,739 (4,7); 0,726 (4,5); 0,721 (3,8); 0,709 (1,5); 0,568 (1,5); 0,557 (4,5); 0,551 (4,2); 0,548 (4,1); 0,542 (3,9); 0,530 (1,2); 0,146 (0,5); 0,008 (3,4); 0,000 (97,0); -0,008 (4,2); -0,150 (0,5)
Beispiel IT399: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 8,851 (0,6); 8,845 (0,8); 8,840 (3,5); 8,834 (3,6); 8,770 (6,0); 8,525 (5,8); 8,337 (3,6); 8,331 (3,5); 8,283 (11,0); 8,226 (0,6); 8,220 (0,6); 3,328 (25,7); 3,030 (16,0); 2,798 (0,7); 2,790 (0,8); 2,781 (1,3); 2,771 (0,9); 2,758 (2,9); 2,543 (55,4); 2,525 (0,6); 2,508 (28,1); 2,503 (37,2); 2,499 (27,6); 0,814 (0,3); 0,773 (0,4); 0,604 (0,5); 0,585 (2,1); 0,576 (2,8); 0,566 (1,0); 0,543 (1,2); 0,532 (2,2); 0,514 (2,0); 0,501 (0,4); 0,495 (0,4); 0,008 (1,0); 0,000 (28,2); -0,008 (1,0)
Beispiel IT3100: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 8,826 (5,3); 8,817 (2,9); 8,811 (2,8); 8,531 (4,2); 8,320 (2,7); 8,314 (2,7); 8,206 (0,4); 8,200 (0,4); 8,111 (7,7); 3,904 (16,0); 3,395 (0,6); 3,337 (288,8); 3,257 (0,4); 3,243 (0,4); 3,175 (0,9); 3,162 (1,0); 3,029 (12,3); 2,795 (0,5); 2,788 (0,6); 2,778 (1,0); 2,768 (0,8); 2,757 (2,2); 2,676 (0,8); 2,672 (1,1); 2,668 (0,8); 2,512 (73,1); 2,507 (138,1); 2,503 (175,3); 2,499 (129,8); 2,334 (0,7); 2,330 (1,0); 2,325 (0,7); 1,002 (1,0); 0,987 (1,0); 0,833 (0,4); 0,815 (0,3); 0,603 (0,4); 0,584 (1,7); 0,574 (2,2); 0,565 (0,8); 0,542 (0,9); 0,531 (1,7); 0,513 (1,5); 0,000 (1,8)
Beispiel IT3101: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 8,828 (0,4); 8,823 (0,4); 8,815 (2,1); 8,809 (2,2); 8,690 (3,8); 8,442 (0,7); 8,435 (3,3); 8,293 (2,2); 8,287 (2,1); 8,190 (0,4); 8,184 (0,3); 7,603 (4,3); 3,904 (8,8); 3,339 (233,4); 3,175 (0,6); 3,162 (0,6); 3,027 (9,9); 2,795 (0,4); 2,787 (0,5); 2,778 (0,8); 2,768 (0,6); 2,756 (1,8); 2,676 (0,6); 2,672 (0,8); 2,667 (0,6); 2,512 (51,7); 2,507 (99,0); 2,503 (126,8); 2,498 (93,4); 2,494 (47,1); 2,334 (0,6); 2,330 (0,8); 2,325 (0,6); 2,130 (16,0); 2,122 (3,6); 1,002 (0,4); 0,987 (0,4); 0,583 (1,3); 0,574 (1,7); 0,565 (0,6); 0,543 (0,7); 0,531 (1,3); 0,514 (1,1); 0,000 (0,9)
Beispiel IT3102: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 8,908 (0,7); 8,879 (2,4); 8,874 (2,4); 8,833 (4,2); 8,820 (1,2); 8,538 (3,8); 8,496 (1,0); 8,431 (0,7); 8,427 (0,7); 8,288 (2,4); 8,283 (2,4); 8,111 (9,5); 3,904 (16,0); 3,591 (0,4); 3,341 (514,4); 3,175 (1,0); 3,162 (1,0); 3,136 (2,9); 2,914 (11,4); 2,676 (1,1); 2,672 (1,5); 2,668 (1,1); 2,507 (189,0); 2,503 (242,9); 2,499 (186,3); 2,334 (1,1); 2,330 (1,5); 2,326 (1,1); 1,713 (2,7); 1,489 (2,0); 0,000 (2,0)
Beispiel IT3103: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 8,907 (0,4); 8,878 (1,3); 8,872 (1,3); 8,702 (2,2); 8,685 (0,6); 8,443 (2,1); 8,406 (0,9); 8,270 (1,3); 8,264 (1,3); 7,604 (4,3); 3,904 (12,6); 3,395 (0,4); 3,338 (210,6); 3,270 (0,4); 3,256 (0,3); 3,175 (0,8); 3,162 (0,9); 3,133 (1,6); 2,915 (6,3); 2,676 (0,6); 2,672 (0,8); 2,668 (0,6); 2,525 (2,1); 2,507 (102,9); 2,503 (131,5); 2,498 (97,6); 2,334 (0,7); 2,330 (0,9); 2,325 (0,6); 2,122 (16,0); 1,718 (1,3); 1,713 (1,4); 1,484 (1,0); 1,002 (0,8); 0,987 (0,8); 0,000 (1,9)
Beispiel IT3104: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 8,865 (9,2); 8,857 (0,5); 8,845 (6,3); 8,839 (6,4); 8,694 (3,1); 8,683 (3,1); 8,470 (0,5); 8,459 (9,4); 8,229 (6,5); 8,223 (6,4); 7,751 (4,6); 7,728 (0,3); 7,710 (11,3); 4,457 (0,4); 4,403 (0,4); 4,392 (0,4); 4,121 (0,3); 4,108 (1,0); 4,095 (1,0); 4,082 (0,4); 3,904 (15,4); 3,395 (0,4);

3,334 (355,6); 3,243 (0,4); 3,175 (4,8); 3,161 (4,8); 2,883 (0,3); 2,873 (0,9); 2,864 (1,2); 2,855 (1,9); 2,845 (1,9); 2,836 (1,2); 2,827 (0,9); 2,816 (0,5); 2,807 (1,7); 2,788 (5,3); 2,769 (5,4); 2,751 (1,8); 2,680 (0,6); 2,676 (1,1); 2,671 (1,4); 2,667 (1,1); 2,542 (1,0); 2,525 (4,5); 2,511 (90,6); 2,507 (178,4); 2,502 (231,0); 2,498 (168,2); 2,494 (82,9); 2,334 (1,0); 2,329 (1,4); 2,325 (1,0); 1,056 (7,2); 1,038 (16,0); 1,019 (7,1); 1,002 (1,6); 0,987 (1,5); 0,759 (1,2); 0,746 (3,5); 0,741 (4,8); 0,729 (4,5); 0,723 (3,7); 0,711 (1,5); 0,568 (1,5); 0,557 (4,5); 0,551 (4,3); 0,547 (4,0); 0,542 (3,9); 0,529 (1,2); 0,000 (3,5)
Beispiel IT3105: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 9,606 (5,9); 8,899 (6,1); 8,893 (6,2); 8,882 (8,7); 8,466 (9,0); 8,308 (6,0); 8,302 (5,8); 7,753 (4,6); 7,730 (0,3); 7,712 (11,2); 3,904 (12,3); 3,332 (328,2); 3,175 (1,4); 3,161 (1,4); 3,047 (0,5); 2,866 (0,5); 2,807 (1,7); 2,789 (5,3); 2,770 (5,4); 2,751 (1,8); 2,676 (1,1); 2,671 (1,5); 2,667 (1,1); 2,524 (4,8); 2,511 (97,8); 2,507 (190,1); 2,502 (244,3); 2,498 (178,1); 2,493 (87,7); 2,333 (1,1); 2,329 (1,5); 2,324 (1,1); 1,650 (2,1); 1,636 (5,3); 1,629 (5,6); 1,616 (2,3); 1,295 (2,5); 1,281 (5,3); 1,275 (5,7); 1,260 (2,1); 1,055 (7,3); 1,037 (16,0); 1,018 (7,1); 0,000 (3,2)
Beispiel IT3106: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 8,824 (4,0); 8,818 (4,1); 8,781 (4,7); 8,694 (1,9); 8,683 (1,9); 8,515 (6,0); 8,223 (2,4); 8,196 (4,1); 8,190 (4,0); 7,937 (2,5); 4,456 (0,3); 4,402 (0,4); 4,391 (0,4); 4,107 (0,7); 4,094 (0,8); 3,904 (16,0); 3,332 (223,1); 3,243 (0,4); 3,174 (4,3); 3,161 (4,4); 2,868 (0,5); 2,859 (0,8); 2,850 (1,2); 2,840 (1,2); 2,831 (0,8); 2,822 (0,6); 2,676 (0,9); 2,671 (1,2); 2,667 (0,9); 2,541 (0,7); 2,525 (3,7); 2,511 (78,4); 2,507 (154,9); 2,502 (201,4); 2,498 (148,3); 2,493 (74,4); 2,334 (0,9); 2,329 (1,2); 2,325 (0,9); 2,147 (13,7); 1,002 (1,6); 0,987 (1,6); 0,755 (0,8); 0,742 (2,2); 0,737 (3,1); 0,725 (2,9); 0,719 (2,4); 0,708 (1,0); 0,563 (1,0); 0,552 (2,9); 0,546 (2,7); 0,542 (2,6); 0,536 (2,5); 0,524 (0,8); 0,000 (2,7)
Beispiel IT3107: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 8,833 (0,5); 8,826 (0,6); 8,819 (2,8); 8,813 (2,8); 8,770 (3,5); 8,503 (0,9); 8,495 (4,3); 8,312 (2,8); 8,306 (2,6); 8,223 (2,0); 8,207 (0,5); 8,201 (0,4); 7,939 (2,1); 3,904 (16,0); 3,332 (177,8); 3,175 (1,5); 3,162 (1,6); 3,027 (12,7); 2,794 (0,5); 2,787 (0,6); 2,778 (1,0); 2,767 (0,8); 2,760 (2,8); 2,751 (0,4); 2,676 (0,8); 2,672 (1,0); 2,667 (0,7); 2,525 (3,3); 2,511 (67,3); 2,507 (128,5); 2,503 (163,4); 2,498 (118,9); 2,494 (59,0); 2,334 (0,7); 2,329 (1,0); 2,325 (0,7); 2,158 (9,9); 1,002 (1,1); 0,987 (1,1); 0,830 (0,3); 0,813 (0,3); 0,606 (0,4); 0,586 (1,6); 0,577 (2,2); 0,568 (0,8); 0,545 (1,0); 0,534 (1,7); 0,516 (1,5); 0,000 (2,1)
Beispiel IT3108: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 9,604 (5,0); 8,878 (4,1); 8,872 (4,2); 8,793 (5,7); 8,519 (7,0); 8,277 (4,3); 8,271 (4,2); 8,225 (3,2); 7,938 (3,2); 4,458 (0,3); 4,404 (0,4); 4,393 (0,4); 4,123 (0,4); 4,110 (1,1); 4,097 (1,1); 4,083 (0,4); 3,904 (16,0); 3,433 (0,4); 3,337 (510,1); 3,270 (0,6); 3,256 (0,4); 3,242 (0,4); 3,175 (4,2); 3,162 (4,3); 3,043 (0,4); 2,872 (0,4); 2,672 (1,4); 2,506 (184,9); 2,503 (232,7); 2,499 (181,4); 2,329 (1,4); 2,148 (15,6); 1,643 (1,6); 1,629 (4,1); 1,622 (4,4); 1,609 (1,8); 1,293 (1,8); 1,280 (4,1); 1,273 (4,3); 1,259 (1,6); 1,002 (1,2); 0,987 (1,2); 0,000 (0,9)
Beispiel IT3109: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 8,821 (4,5); 8,815 (4,5); 8,727 (6,7); 8,683 (2,3); 8,672 (2,3); 8,456 (6,9); 8,191 (4,6); 8,185 (4,4); 7,611 (3,0); 7,577 (3,0); 4,112 (0,4); 4,099 (0,5); 3,904 (16,0); 3,433 (0,3); 3,422 (0,4); 3,341 (478,8); 3,283 (0,5); 3,272 (0,4); 3,269 (0,4); 3,257 (0,4); 3,243 (0,3); 3,175 (2,2); 3,162 (2,3); 2,868 (0,6); 2,858 (0,9); 2,850 (1,4); 2,840 (1,4); 2,831 (0,9); 2,821 (0,7); 2,676 (0,9); 2,672 (1,2); 2,667 (0,9); 2,542 (0,7); 2,525 (3,9); 2,511 (83,9); 2,507 (159,5); 2,503 (202,9); 2,498 (149,6); 2,443 (1,3); 2,424 (3,5); 2,405 (3,5); 2,387 (1,2); 2,334 (0,9); 2,330 (1,2); 2,325 (0,9); 2,096 (16,0); 1,169 (1,4); 1,035 (5,1); 1,016 (10,9); 1,002 (2,2); 0,997 (5,0); 0,987 (1,4); 0,755 (0,9); 0,742 (2,7); 0,737 (3,5); 0,725 (3,4); 0,719 (2,8); 0,708 (1,1); 0,563 (1,1); 0,553 (3,4); 0,547 (3,3); 0,543 (3,1); 0,537 (3,0); 0,525 (0,9); 0,000 (2,0)
Beispiel IT3110: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 9,594 (4,6); 8,875 (3,8); 8,869 (3,9); 8,742 (6,3); 8,462 (6,5); 8,272 (3,9); 8,266 (3,9); 7,613 (3,3); 7,578 (3,3); 4,108 (0,5); 4,095 (0,5); 3,904 (12,4); 3,405 (0,3); 3,334 (307,0); 3,269 (0,5); 3,256 (0,4); 3,242 (0,4); 3,175 (2,2); 3,161 (2,3); 3,043 (0,4); 2,871 (0,4); 2,671 (1,3); 2,502 (210,6); 2,445 (1,6); 2,426 (3,6); 2,407 (3,7); 2,388 (1,4); 2,329 (1,3); 2,097 (16,0); 1,645 (1,5); 1,630 (4,1); 1,624 (4,4); 1,610 (1,8); 1,291 (1,8); 1,277 (4,2); 1,271 (4,6); 1,256 (1,7); 1,235 (0,5); 1,169 (1,0); 1,036 (4,8); 1,018 (10,0); 0,999 (5,0); 0,987 (1,2); 0,000 (2,4)
Beispiel IT3111: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 8,917 (0,5); 8,913 (0,5); 8,882 (1,9); 8,876 (1,9); 8,782 (2,6); 8,753 (0,7); 8,503 (3,1); 8,461 (0,8); 8,419 (0,5); 8,414 (0,5); 8,284 (1,9); 8,279 (1,8); 8,223 (2,2); 7,938 (2,3); 3,904 (16,0); 3,334 (271,2); 3,175 (0,9); 3,162 (1,0); 3,131 (2,1); 2,919 (9,2); 2,676 (0,8); 2,672 (1,0); 2,667 (0,8); 2,525 (3,1); 2,511 (66,1); 2,507 (129,1); 2,503 (166,9); 2,498 (121,9); 2,494 (60,4); 2,334 (0,8); 2,329 (1,0); 2,325 (0,8); 2,149 (11,9); 1,718 (1,7); 1,712 (1,9); 1,487 (1,3); 0,000 (2,6)
Beispiel IT3112: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 8,843 (5,5); 8,825 (4,0); 8,819 (4,0); 8,701 (2,1); 8,690 (2,0); 8,561 (6,3); 8,513 (3,0); 8,198 (3,9); 8,192 (3,8); 8,094 (2,9); 4,109 (0,4); 4,096 (0,5); 3,904 (16,0); 3,333 (218,4); 3,267 (0,4); 3,174 (2,5); 3,162 (2,6); 2,870 (0,6); 2,860 (0,9); 2,851 (1,3); 2,841 (1,3); 2,833 (0,9); 2,823 (0,6); 2,676 (0,9); 2,671 (1,2); 2,667 (0,9); 2,524 (3,8); 2,507 (149,9); 2,502 (194,0); 2,498 (144,0); 2,333 (0,9); 2,329 (1,2); 2,325 (0,9); 1,002 (1,2); 0,987 (1,2); 0,756 (0,8); 0,743 (2,5); 0,738 (3,3); 0,726 (3,1); 0,720 (2,6); 0,709 (1,0); 0,564 (1,0); 0,553 (3,2); 0,547 (3,1); 0,544 (2,9); 0,538 (2,8); 0,526 (0,8); 0,000 (2,3)
Beispiel IT3113: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 8,831 (3,5); 8,818 (2,5); 8,812 (2,5); 8,547 (0,8); 8,540 (3,7); 8,512 (1,9); 8,325 (2,4); 8,319 (2,4); 8,213 (0,4); 8,207 (0,4); 8,096 (1,8); 3,904 (16,0); 3,381 (0,4); 3,332 (195,5); 3,175 (1,3); 3,161 (1,4); 3,028 (11,1); 2,794 (0,5); 2,787 (0,5); 2,777 (0,9); 2,767 (0,7); 2,760 (2,4); 2,676 (0,7); 2,672 (0,9); 2,667 (0,7); 2,525 (2,8); 2,511 (58,6); 2,507 (114,3); 2,502 (147,1); 2,498 (107,3); 2,494 (52,8); 2,334 (0,6); 2,329 (0,9); 2,325 (0,6); 1,002 (1,0); 0,987 (0,9); 0,585 (1,4); 0,577 (1,9); 0,568 (0,7); 0,545 (0,8); 0,534 (1,4); 0,516 (1,3); 0,000 (2,0)
Beispiel IT3114: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 9,607 (2,4); 8,880 (2,4); 8,874 (2,4); 8,854 (3,1); 8,566 (3,7); 8,515 (1,6); 8,282 (2,4); 8,276 (2,4); 8,095 (1,6); 4,108 (0,4); 4,095 (0,4); 3,904 (16,0); 3,334 (175,5); 3,175 (2,1); 3,161 (2,1); 3,044 (0,5); 2,872 (0,5); 2,676 (0,6); 2,672 (0,8); 2,667 (0,6); 2,541 (0,5); 2,525 (2,4); 2,511 (50,8); 2,507 (99,8); 2,502 (129,1); 2,498 (94,9); 2,494 (47,4); 2,334 (0,6); 2,329 (0,7); 2,325 (0,6); 1,643 (0,8); 1,629 (2,0); 1,622 (2,2); 1,608 (0,9); 1,298 (1,0); 1,284 (2,0); 1,278 (2,2); 1,263 (0,8); 1,002 (0,9); 0,987 (0,8); 0,000 (1,0)
Beispiel IT3115: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 8,898 (1,1); 8,630 (1,1); 8,376 (0,7); 7,972 (0,4); 7,595 (4,0); 3,903 (4,3); 3,328 (177,7); 2,876 (1,2); 2,675 (0,9); 2,671 (1,2); 2,667 (0,9); 2,541 (0,9); 2,506 (159,0); 2,502 (205,8); 2,498 (157,5); 2,385 (2,8); 2,333 (1,0); 2,329 (1,3); 2,324 (1,0); 2,122 (16,0); 1,686 (0,6);

1,487 (0,8); 0,000 (1,2)
Beispiel IT3116: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO): δ= 8,911 (1,0); 8,880 (3,4); 8,874 (3,4); 8,842 (5,1); 8,810 (1,3); 8,548 (5,6); 8,512 (4,5); 8,423 (0,9); 8,292 (3,4); 8,286 (3,4); 8,093 (4,3); 3,904 (4,9); 3,327 (229,2); 3,133 (3,9); 2,918 (16,0); 2,675 (1,2); 2,671 (1,6); 2,667 (1,3); 2,541 (1,5); 2,506 (202,4); 2,502 (261,5); 2,498 (200,6); 2,333 (1,1); 2,329 (1,5); 2,325 (1,2); 1,711 (3,8); 1,488 (2,6); -0,001 (1,3)
Beispiel IT3117: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO): δ= 8,837 (3,9); 8,832 (3,9); 8,696 (5,5); 8,528 (2,3); 8,517 (2,3); 8,440 (6,7); 8,213 (3,3); 7,955 (3,9); 7,949 (3,9); 7,929 (3,4); 3,904 (3,8); 3,328 (223,0); 2,875 (0,7); 2,865 (1,0); 2,857 (1,5); 2,847 (1,5); 2,838 (1,1); 2,828 (0,7); 2,671 (1,5); 2,502 (230,7); 2,329 (1,4); 2,145 (16,0); 0,738 (0,9); 0,720 (3,6); 0,708 (3,4); 0,702 (3,0); 0,691 (1,1); 0,566 (1,2); 0,555 (3,7); 0,549 (3,6); 0,540 (3,2); 0,527 (0,9); 0,000 (1,2)
Beispiel IT3118: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO): δ= 8,825 (3,2); 8,820 (3,1); 8,700 (5,9); 8,438 (7,3); 8,213 (3,4); 8,037 (3,0); 8,031 (3,0); 7,930 (3,5); 7,908 (0,5); 3,904 (11,1); 3,330 (239,1); 3,022 (14,7); 2,779 (0,4); 2,764 (0,9); 2,753 (1,3); 2,743 (1,0); 2,737 (1,0); 2,723 (2,0); 2,676 (1,0); 2,671 (1,3); 2,667 (1,0); 2,542 (1,0); 2,524 (4,1); 2,511 (78,7); 2,507 (153,6); 2,502 (199,9); 2,498 (148,4); 2,392 (13,3); 2,364 (1,8); 2,333 (0,9); 2,329 (1,2); 2,325 (0,9); 2,154 (16,0); 0,817 (0,5); 0,802 (0,5); 0,755 (0,6); 0,484 (4,8); 0,466 (2,5); 0,000 (1,4)
Beispiel IT3119: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO): δ= 9,408 (4,7); 8,892 (3,9); 8,886 (3,9); 8,716 (5,6); 8,452 (7,3); 8,217 (2,9); 8,041 (3,8); 8,035 (3,8); 7,932 (3,0); 3,904 (9,3); 3,330 (168,1); 3,175 (1,1); 3,162 (1,1); 2,676 (0,7); 2,671 (1,0); 2,667 (0,8); 2,541 (0,9); 2,511 (82,5); 2,507 (129,7); 2,502 (165,2); 2,498 (122,9); 2,333 (0,7); 2,329 (1,0); 2,325 (0,7); 2,147 (16,0); 1,612 (1,5); 1,598 (4,0); 1,591 (4,3); 1,578 (1,8); 1,312 (1,8); 1,299 (4,1); 1,292 (4,2); 1,278 (1,5); 0,000 (1,1)
Beispiel IT3120: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO): δ= 8,826 (1,6); 8,821 (1,6); 8,621 (4,1); 8,375 (3,7); 8,025 (1,5); 8,020 (1,6); 7,593 (4,8); 3,903 (7,6); 3,331 (235,6); 3,022 (7,6); 2,756 (0,7); 2,743 (0,5); 2,720 (1,0); 2,671 (1,1); 2,541 (0,9); 2,507 (130,2); 2,502 (168,8); 2,498 (127,0); 2,386 (6,8); 2,359 (0,9); 2,329 (1,0); 2,129 (16,0); 0,482 (2,7); 0,465 (1,4); 0,000 (1,0)
Beispiel IT3121: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,836 (16,0); 8,460 (13,4); 8,441 (12,5); 7,871 (1,5); 7,554 (14,8); 2,909 (0,5); 2,899 (1,4); 2,890 (2,1); 2,881 (3,1); 2,871 (3,2); 2,862 (2,1); 2,853 (1,6); 2,843 (0,5); 2,469 (0,5); 2,464 (0,6); 2,460 (0,5); 2,287 (0,5); 2,263 (0,4); 2,245 (0,8); 2,226 (0,6); 2,164 (134,4); 2,128 (74,2); 2,108 (1,2); 2,102 (0,8); 2,096 (0,5); 1,976 (0,8); 1,965 (34,9); 1,959 (10,4); 1,953 (53,7); 1,947 (97,8); 1,941 (132,8); 1,935 (92,8); 1,928 (48,6); 1,829 (0,7); 1,781 (0,4); 1,775 (0,6); 1,769 (0,8); 1,763 (0,5); 1,540 (0,4); 1,470 (0,3); 1,429 (0,3); 1,320 (1,0); 1,269 (9,8); 1,135 (0,4); 0,897 (0,4); 0,881 (1,1); 0,864 (0,5); 0,834 (1,8); 0,821 (4,8); 0,816 (6,9); 0,803 (6,8); 0,798 (5,3); 0,786 (2,4); 0,764 (0,4); 0,746 (0,4); 0,721 (0,4); 0,710 (0,4); 0,681 (2,4); 0,669 (6,3); 0,663 (6,5); 0,659 (5,7); 0,653 (5,3); 0,641 (1,6); 0,000 (1,3)
Beispiel IT3122: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,795 (7,1); 8,792 (7,1); 8,712 (16,0); 8,398 (7,3); 8,393 (7,2); 8,249 (14,8); 8,230 (0,4); 8,035 (5,4); 8,031 (10,0); 8,027 (5,8); 7,832 (3,6); 7,830 (4,9); 7,826 (3,7); 7,821 (2,0); 7,814 (5,0); 7,810 (5,4); 7,716 (5,3); 7,700 (3,9); 7,697 (5,2); 7,585 (0,4); 7,519 (5,8); 7,500 (9,9); 7,480 (4,3); 7,146 (1,9); 4,086 (0,4); 4,068 (1,3); 4,050 (1,3); 4,033 (0,5); 2,907 (0,6); 2,897 (1,9); 2,888 (2,8); 2,879 (4,2); 2,869 (4,1); 2,861 (2,8); 2,851 (2,0); 2,842 (0,7); 2,468 (0,7); 2,463 (0,9); 2,459 (0,7); 2,266 (0,3); 2,250 (0,4); 2,144 (668,5); 2,120 (3,2); 2,114 (4,0); 2,108 (5,1); 2,101 (3,3); 2,095 (1,7); 2,016 (0,5); 2,014 (0,5); 1,972 (7,8); 1,964 (22,3); 1,958 (55,1); 1,952 (312,9); 1,946 (568,6); 1,940 (766,2); 1,934 (526,3); 1,928 (270,3); 1,787 (0,4); 1,781 (1,7); 1,775 (3,2); 1,769 (4,4); 1,762 (3,0); 1,756 (1,5); 1,437 (5,8); 1,356 (0,3); 1,338 (0,6); 1,319 (0,4); 1,285 (0,5); 1,270 (2,2); 1,222 (1,6); 1,204 (3,0); 1,186 (1,6); 1,089 (0,9); 0,881 (0,4); 0,793 (2,2); 0,781 (6,2); 0,775 (8,7); 0,763 (8,9); 0,757 (6,5); 0,746 (3,2); 0,724 (0,5); 0,707 (0,5); 0,687 (0,5); 0,677 (0,4); 0,647 (3,3); 0,637 (8,3); 0,630 (8,0); 0,626 (7,0); 0,620 (6,8); 0,608 (2,2); 0,008 (1,7); 0,000 (60,4); -0,009 (2,1)
Beispiel IT3123: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO): δ= 8,894 (2,1); 8,708 (1,4); 8,439 (1,2); 8,213 (2,9); 7,984 (0,8); 7,930 (3,0); 3,904 (15,2); 3,331 (445,1); 3,174 (0,5); 3,161 (0,5); 3,121 (0,5); 2,877 (2,5); 2,675 (1,3); 2,671 (1,8); 2,667 (1,4); 2,542 (1,7); 2,506 (224,4); 2,502 (292,1); 2,498 (219,8); 2,389 (5,1); 2,333 (1,3); 2,329 (1,8); 2,325 (1,4); 2,148 (16,0); 1,687 (1,2); 1,492 (1,5); 1,416 (0,6); 1,249 (0,4); 1,235 (0,4); 0,000 (1,8)
Beispiel IT3124: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO): δ= 8,836 (5,2); 8,831 (5,2); 8,756 (7,5); 8,544 (2,8); 8,534 (2,9); 8,502 (4,3); 8,488 (8,8); 8,087 (4,0); 7,952 (5,0); 7,946 (5,0); 4,467 (0,8); 4,454 (2,0); 4,440 (0,8); 4,113 (0,5); 4,100 (0,5); 3,904 (16,0); 3,507 (0,4); 3,482 (0,5); 3,468 (0,5); 3,456 (0,5); 3,395 (5,7); 3,388 (4,9); 3,381 (6,3); 3,340 (838,4); 3,174 (2,4); 3,161 (2,3); 2,886 (0,3); 2,876 (0,9); 2,867 (1,2); 2,858 (1,9); 2,848 (1,9); 2,840 (1,3); 2,830 (0,9); 2,820 (0,4); 2,676 (1,6); 2,672 (2,1); 2,667 (1,7); 2,507 (264,8); 2,503 (344,8); 2,498 (274,4); 2,334 (1,5); 2,329 (2,0); 2,325 (1,5); 1,273 (0,4); 1,258 (0,8); 1,242 (0,8); 0,873 (0,4); 0,739 (1,2); 0,726 (3,4); 0,721 (4,6); 0,709 (4,3); 0,703 (3,7); 0,692 (1,5); 0,567 (1,5); 0,556 (4,6); 0,550 (4,3); 0,546 (4,1); 0,540 (3,8); 0,528 (1,1); 0,008 (2,2); 0,000 (60,2); -0,008 (2,5)
Beispiel IT3125: ^{1}HNMR (400,1 MHz, d_6DMSO): δ= 9,41 (0,0144); 8,89 (0,0123); 8,83 (0,0014); 8,77 (0,0184); 8,49 (0,0301); 8,23 (0,0012); 8,09 (0,0103); 8,03 (0,0119); 3,31 (1,0000); 2,54 (0,6709); 2,50 (0,2387); 1,59 (0,0138); 1,30 (0,0136); 0,15 (0,0007); 0,00 (0,1822); -0,16 (0,0004)
Beispiel IT3126: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO): δ= 9,406 (0,9); 8,069 (2,0); 7,667 (0,4); 7,646 (1,1); 7,621 (0,6); 7,616 (0,6); 7,538 (0,8); 7,533 (0,7); 6,479 (0,9); 3,322 (20,1); 2,524 (0,4); 2,519 (0,7); 2,511 (11,8); 2,506 (24,6); 2,502 (33,4); 2,497 (24,8); 2,493 (12,4); 1,989 (0,8); 1,608 (0,4); 1,594 (0,8); 1,587 (0,9); 1,574 (0,4); 1,398 (16,0); 1,291 (0,4); 1,278 (0,7); 1,271 (0,8); 1,257 (0,3); 1,175 (0,5); 0,008 (0,6); 0,000 (18,6); -0,009 (0,7)
Beispiel IT3127: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO): δ= 8,850 (5,1); 8,845 (5,4); 8,692 (9,2); 8,530 (3,1); 8,520 (3,2); 8,464 (9,2); 8,273 (16,0); 7,973 (5,1); 7,967 (5,3); 4,105 (0,5); 4,091 (0,5); 3,903 (5,0); 3,329 (87,9); 3,175 (1,9); 3,162 (1,8); 2,877 (0,8); 2,868 (1,2); 2,859 (1,9); 2,849 (1,9); 2,840 (1,3); 2,831 (0,9); 2,820 (0,3); 2,672 (0,6); 2,667 (0,5); 2,507 (79,2); 2,502 (111,9); 2,463 (0,7); 2,334 (0,5); 2,329 (0,6); 0,740 (1,1); 0,727 (3,5); 0,722 (4,8); 0,710 (4,4); 0,704 (4,0); 0,693 (1,5); 0,571 (1,5); 0,561 (4,6); 0,555 (4,7); 0,551 (4,6); 0,545 (4,2); 0,533 (1,1); 0,000 (0,4)

Beispiel IT3128: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 8,840 (3,6); 8,835 (3,5); 8,698 (8,9); 8,465 (8,7); 8,272 (15,4); 8,058 (3,3); 8,053 (3,4); 7,922 (0,5); 3,903 (5,1); 3,328 (66,8); 3,175 (1,0); 3,162 (1,0); 3,026 (16,0); 2,891 (0,3); 2,784 (0,4); 2,767 (0,9); 2,756 (1,4); 2,746 (1,0); 2,721 (1,9); 2,676 (0,5); 2,672 (0,6); 2,667 (0,5); 2,542 (0,7); 2,511 (37,1); 2,507 (71,3); 2,503 (93,3); 2,498 (71,7); 2,395 (14,5); 2,369 (1,9); 2,334 (0,4); 2,329 (0,6); 2,325 (0,4); 0,819 (0,5); 0,803 (0,5); 0,758 (0,6); 0,481 (5,4); 0,463 (2,8); 0,000 (0,4)
Beispiel IT3129: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 9,412 (6,2); 8,906 (4,7); 8,900 (5,0); 8,710 (9,0); 8,478 (8,5); 8,276 (16,0); 8,063 (4,7); 8,058 (4,9); 3,903 (5,3); 3,434 (0,4); 3,334 (71,6); 3,169 (3,4); 2,672 (0,8); 2,520 (27,6); 2,507 (94,6); 2,503 (122,2); 2,499 (100,6); 2,329 (0,7); 1,612 (1,9); 1,598 (5,2); 1,591 (5,7); 1,578 (2,3); 1,317 (2,3); 1,304 (5,3); 1,297 (5,6); 1,283 (1,9); 0,000 (0,4)
Beispiel IT3130: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 8,821 (3,6); 8,815 (3,5); 8,760 (6,9); 8,499 (4,1); 8,484 (8,5); 8,085 (3,9); 8,046 (3,3); 8,040 (3,3); 7,911 (0,5); 3,904 (10,2); 3,327 (87,7); 3,176 (0,7); 3,163 (0,7); 3,025 (16,0); 2,779 (0,4); 2,768 (0,8); 2,762 (0,9); 2,753 (1,5); 2,742 (1,1); 2,736 (1,1); 2,724 (2,2); 2,676 (0,5); 2,672 (0,7); 2,667 (0,5); 2,525 (2,4); 2,512 (41,2); 2,507 (81,2); 2,503 (106,8); 2,498 (80,2); 2,494 (41,1); 2,398 (14,3); 2,369 (1,8); 2,334 (0,5); 2,330 (0,7); 2,325 (0,5); 0,820 (0,5); 0,803 (0,5); 0,757 (0,6); 0,485 (4,9); 0,467 (2,7); 0,000 (0,5)
Beispiel IT3131: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 8,891 (3,3); 8,768 (2,3); 8,499 (5,4); 8,485 (2,0); 8,085 (4,9); 7,990 (1,3); 3,903 (16,0); 3,327 (119,4); 3,175 (0,8); 3,162 (0,9); 3,122 (0,7); 2,879 (3,8); 2,676 (0,7); 2,672 (1,0); 2,667 (0,8); 2,542 (0,7); 2,525 (3,3); 2,511 (61,8); 2,507 (121,8); 2,503 (160,9); 2,498 (122,6); 2,494 (64,2); 2,396 (8,3); 2,334 (0,8); 2,329 (1,0); 2,325 (0,8); 1,686 (1,8); 1,497 (2,2); 1,420 (0,8); 0,000 (0,7)
Beispiel IT3132: ^{1}HNMR (400,1 MHz, d_6DMSO):
δ= 8,907 (3,3); 8,699 (3,2); 8,461 (1,9); 8,269 (16,0); 8,002 (1,1); 4,088 (0,5); 4,075 (0,5); 3,311 (245,5); 3,269 (0,3); 3,175 (2,1); 3,162 (2,1); 3,123 (0,6); 2,875 (3,1); 2,710 (0,5); 2,674 (0,4); 2,670 (0,5); 2,540 (120,2); 2,505 (48,9); 2,501 (64,0); 2,497 (45,6); 2,464 (0,3); 2,396 (8,6); 2,367 (0,8); 2,328 (0,5); 2,323 (0,4); 1,686 (1,6); 1,495 (2,0); 1,431 (0,8); 1,423 (0,8); 0,146 (0,4); 0,008 (3,2); 0,000 (89,8); -0,008 (4,5); -0,150 (0,4)
Beispiel IT3133: ^{1}HNMR (400,1 MHz, d_6DMSO):
δ= 8,822 (3,7); 8,817 (3,4); 8,750 (9,7); 8,470 (9,1); 8,094 (15,1); 8,040 (3,3); 8,035 (3,3); 7,903 (0,4); 3,311 (86,3); 3,287 (0,3); 3,026 (16,0); 2,781 (0,4); 2,765 (1,0); 2,754 (1,5); 2,743 (1,1); 2,738 (1,1); 2,721 (1,6); 2,711 (0,7); 2,555 (0,4); 2,554 (0,5); 2,553 (0,6); 2,552 (0,7); 2,550 (0,8); 2,549 (1,0); 2,540 (89,5); 2,529 (0,7); 2,528 (0,6); 2,527 (0,6); 2,525 (0,6); 2,524 (0,6); 2,523 (0,6); 2,522 (0,6); 2,510 (12,1); 2,505 (23,8); 2,501 (31,3); 2,497 (21,3); 2,492 (9,9); 2,395 (14,5); 2,371 (1,7); 0,819 (0,4); 0,804 (0,5); 0,755 (0,6); 0,482 (5,8); 0,464 (3,0); 0,013 (0,3); 0,011 (0,4); 0,008 (2,1); 0,007 (1,4); 0,000 (61,4); -0,006 (1,7); -0,009 (2,2); -0,013 (0,4); -0,014 (0,3)
Beispiel IT3134: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 8,823 (4,4); 8,427 (4,3); 8,403 (0,4); 8,263 (1,3); 8,242 (1,6); 8,112 (2,9); 8,071 (2,1); 8,050 (1,8); 7,818 (2,7); 7,813 (2,7); 7,760 (1,6); 7,755 (1,5); 7,747 (1,0); 7,739 (1,8); 7,734 (1,5); 7,724 (0,9); 7,560 (1,0); 7,553 (2,6); 7,540 (1,0); 7,532 (2,1); 3,327 (28,9); 3,321 (6,8); 3,015 (11,5); 2,766 (0,4); 2,756 (0,8); 2,748 (1,0); 2,740 (1,3); 2,730 (1,2); 2,716 (2,7); 2,676 (0,4); 2,673 (0,4); 2,507 (45,7); 2,503 (53,0); 2,499 (41,0); 2,330 (0,4); 2,076 (16,0); 2,068 (2,0); 1,170 (0,4); 0,820 (0,4); 0,812 (0,4); 0,804 (0,4); 0,757 (0,5); 0,748 (0,5); 0,559 (2,6); 0,551 (2,5); 0,503 (0,4); 0,472 (2,1); 0,455 (2,2); 0,000 (51,7); -0,009 (7,9)
Beispiel IT3135: ^{1}HNMR (400,1 MHz, d_6DMSO):
δ= 8,547 (0,5); 8,505 (10,0); 8,454 (9,8); 8,448 (8,1); 8,442 (4,1); 8,281 (10,0); 8,068 (16,0); 7,686 (6,9); 7,680 (6,8); 3,568 (0,4); 3,410 (4,1); 3,394 (11,2); 3,378 (4,3); 3,309 (165,8); 3,286 (0,7); 2,832 (0,3); 2,822 (0,9); 2,812 (1,3); 2,804 (2,0); 2,794 (2,0); 2,785 (1,3); 2,776 (0,9); 2,765 (0,4); 2,710 (0,9); 2,674 (0,5); 2,669 (0,6); 2,665 (0,5); 2,560 (0,6); 2,540 (226,8); 2,523 (1,6); 2,509 (31,4); 2,505 (60,7); 2,500 (78,7); 2,496 (53,0); 2,492 (24,2); 2,366 (0,8); 2,332 (0,4); 2,327 (0,6); 2,323 (0,4); 1,887 (4,2); 1,871 (11,1); 1,854 (3,9); 1,235 (0,4); 0,704 (1,4); 0,691 (3,7); 0,686 (5,2); 0,674 (4,8); 0,668 (4,0); 0,657 (1,7); 0,547 (1,8); 0,536 (5,3); 0,530 (4,6); 0,526 (4,3); 0,520 (4,2); 0,508 (1,3); 0,146 (0,5); 0,008 (4,2); 0,000 (120,8); -0,008 (4,5); -0,150 (0,5)
Beispiel IT3136: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 8,510 (2,6); 8,502 (7,1); 8,497 (6,4); 8,441 (8,5); 8,259 (8,4); 8,129 (2,2); 8,117 (2,5); 8,106 (1,0); 8,088 (5,7); 8,080 (16,0); 4,467 (1,4); 4,453 (4,0); 4,439 (1,5); 4,111 (0,4); 4,099 (0,4); 3,904 (15,8); 3,804 (0,4); 3,483 (0,4); 3,470 (0,5); 3,455 (0,4); 3,395 (8,9); 3,388 (7,6); 3,381 (9,5); 3,338 (810,3); 3,174 (1,7); 3,161 (1,6); 2,953 (0,4); 2,932 (11,5); 2,920 (11,5); 2,847 (0,4); 2,837 (0,9); 2,828 (1,3); 2,819 (1,9); 2,810 (1,9); 2,801 (1,3); 2,792 (0,9); 2,783 (0,4); 2,671 (2,2); 2,616 (0,3); 2,506 (280,8); 2,502 (354,5); 2,498 (275,8); 2,329 (2,2); 1,234 (0,6); 0,873 (0,6); 0,854 (0,5); 0,742 (1,0); 0,724 (4,4); 0,711 (4,1); 0,706 (3,6); 0,694 (1,4); 0,587 (1,5); 0,576 (4,6); 0,570 (4,4); 0,561 (3,8); 0,548 (1,1); 0,000 (48,0)
Beispiel IT3137: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 8,543 (6,9); 8,537 (7,0); 8,455 (8,0); 8,364 (2,9); 8,356 (3,0); 8,268 (8,1); 8,118 (4,5); 8,113 (4,5); 8,083 (13,0); 4,467 (0,5); 4,453 (1,5); 4,439 (0,6); 4,112 (0,4); 4,099 (0,4); 3,904 (16,0); 3,483 (0,3); 3,469 (0,4); 3,433 (0,5); 3,407 (0,8); 3,395 (4,1); 3,388 (3,4); 3,381 (4,6); 3,338 (731,2); 3,174 (1,7); 3,161 (1,6); 2,955 (0,8); 2,852 (0,8); 2,844 (1,2); 2,835 (1,8); 2,826 (2,0); 2,818 (2,0); 2,809 (2,0); 2,800 (2,0); 2,791 (1,8); 2,782 (1,2); 2,772 (0,8); 2,676 (1,4); 2,672 (1,9); 2,667 (1,5); 2,507 (235,5); 2,502 (302,0); 2,498 (229,6); 2,333 (1,4); 2,329 (1,8); 2,325 (1,4); 1,237 (0,4); 0,873 (0,4); 0,854 (0,3); 0,765 (1,1); 0,753 (3,5); 0,748 (4,4); 0,736 (5,1); 0,731 (4,0); 0,718 (5,1); 0,706 (3,9); 0,700 (3,5); 0,689 (1,4); 0,582 (1,4); 0,571 (4,3); 0,565 (4,0); 0,556 (3,5); 0,544 (1,0); 0,466 (1,3); 0,455 (4,0); 0,450 (4,1); 0,445 (4,0); 0,440 (3,9); 0,428 (1,1); 0,000 (39,5)
Beispiel IT3138: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 8,524 (1,8); 8,515 (1,9); 8,487 (3,8); 8,482 (3,9); 8,443 (6,4); 8,432 (1,1); 8,419 (1,9); 8,405 (1,0); 8,274 (0,4); 8,262 (6,3); 8,120 (4,0); 8,114 (3,6); 8,081 (10,3); 4,453 (0,7); 3,904 (16,0); 3,606 (1,0); 3,592 (3,0); 3,579 (3,7); 3,566 (1,8); 3,523 (3,7); 3,511 (4,9); 3,498 (1,9); 3,473 (0,5); 3,449 (0,3); 3,395 (2,5); 3,387 (2,3); 3,381 (2,9); 3,338 (556,7); 3,299 (28,1); 3,286 (1,6); 3,262 (0,8); 3,256 (0,7); 3,174 (0,9); 3,161 (0,9); 2,840 (0,6); 2,831 (0,9); 2,822 (1,3); 2,812 (1,4); 2,804 (0,9); 2,795 (0,6); 2,676 (1,4); 2,672 (2,0); 2,667 (1,4); 2,507 (219,1); 2,503 (282,2); 2,498 (210,9); 2,334 (1,2); 2,329 (1,7); 2,325 (1,3); 1,235 (0,5); 0,747 (0,8); 0,734 (2,3); 0,729 (3,2); 0,717 (2,9); 0,711 (2,6); 0,700 (1,0); 0,589 (1,1); 0,579 (3,3); 0,573 (3,0); 0,569 (3,0); 0,563 (2,7); 0,551 (0,9); 0,008 (1,7); 0,000 (45,2); -0,008 (1,8)

Beispiel IT3139: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO): δ= 9,474 (2,4); 8,837 (1,9); 8,831 (2,1); 8,602 (3,2); 8,355 (3,4); 7,970 (2,0); 7,965 (2,2); 7,596 (4,3); 4,467 (0,4); 4,453 (1,0); 4,440 (0,4); 3,904 (6,3); 3,423 (0,3); 3,395 (2,3); 3,387 (2,3); 3,381 (2,8); 3,340 (340,7); 3,174 (0,4); 3,161 (0,4); 3,063 (0,6); 2,880 (0,6); 2,672 (0,9); 2,668 (0,7); 2,507 (107,5); 2,503 (142,8); 2,498 (119,4); 2,329 (1,2); 2,325 (1,2); 2,312 (0,8); 2,299 (0,6); 2,292 (0,5); 2,110 (16,0); 1,615 (0,8); 1,601 (2,0); 1,594 (2,3); 1,581 (1,0); 1,324 (0,9); 1,310 (2,1); 1,304 (2,3); 1,289 (0,8); 1,257 (0,4); 1,243 (0,4); 1,168 (0,4); 0,993 (2,1); 0,982 (3,3); 0,962 (1,9); 0,000 (10,4)
Beispiel IT3140: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO): δ= 8,785 (2,0); 8,780 (1,9); 8,595 (1,3); 8,584 (4,5); 8,345 (3,4); 7,890 (2,0); 7,885 (1,9); 7,594 (4,2); 4,455 (0,3); 3,904 (3,2); 3,408 (0,5); 3,394 (1,3); 3,382 (1,7); 3,342 (322,7); 3,174 (0,4); 3,162 (0,4); 2,892 (0,5); 2,883 (0,7); 2,873 (0,7); 2,865 (0,5); 2,855 (0,4); 2,672 (0,7); 2,503 (110,1); 2,352 (0,4); 2,345 (0,5); 2,334 (1,3); 2,314 (0,5); 2,111 (16,0); 0,973 (1,9); 0,961 (1,8); 0,951 (1,9); 0,931 (1,6); 0,740 (0,4); 0,723 (1,7); 0,710 (1,7); 0,705 (1,4); 0,694 (0,6); 0,582 (0,6); 0,571 (1,8); 0,564 (1,8); 0,555 (1,5); 0,543 (0,4); 0,000 (8,3)
Beispiel IT3141: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO): δ= 9,093 (2,2); 8,668 (2,1); 8,662 (2,2); 8,577 (3,2); 8,327 (3,3); 8,314 (2,3); 8,308 (2,2); 7,593 (3,8); 3,969 (10,4); 3,904 (3,5); 3,409 (0,5); 3,343 (332,3); 3,285 (0,3); 2,676 (0,5); 2,672 (0,7); 2,668 (0,6); 2,525 (2,4); 2,512 (45,6); 2,507 (89,1); 2,503 (116,0); 2,498 (87,1); 2,334 (0,5); 2,330 (0,7); 2,325 (0,5); 2,121 (16,0); 1,602 (0,8); 1,587 (2,0); 1,581 (2,2); 1,567 (0,9); 1,305 (1,0); 1,292 (2,1); 1,285 (2,2); 1,271 (0,8); 0,008 (0,4); 0,000 (11,6); -0,008 (0,5)
Beispiel IT3142: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO): δ= 8,767 (2,0); 8,582 (3,2); 8,343 (3,2); 7,948 (2,0); 7,851 (0,3); 7,591 (5,1); 4,454 (0,8); 3,904 (4,5); 3,381 (3,9); 3,341 (346,8); 3,218 (0,4); 3,175 (0,5); 3,162 (0,4); 3,043 (7,9); 2,791 (1,0); 2,781 (0,9); 2,766 (1,5); 2,672 (1,0); 2,503 (159,1); 2,330 (1,0); 2,122 (16,0); 1,926 (0,6); 1,915 (0,9); 1,901 (0,7); 1,882 (0,4); 0,992 (1,5); 0,961 (2,3); 0,943 (2,0); 0,824 (0,4); 0,809 (0,4); 0,764 (0,5); 0,540 (2,1); 0,482 (1,7); 0,467 (1,6); 0,000 (14,1)
Beispiel IT3143: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO): δ= 8,608 (2,1); 8,602 (2,1); 8,556 (3,2); 8,308 (3,3); 8,266 (1,0); 8,256 (1,0); 8,227 (2,2); 8,221 (2,1); 7,590 (3,9); 3,948 (10,3); 3,904 (3,5); 3,395 (0,9); 3,343 (295,8); 3,175 (0,3); 2,873 (0,3); 2,863 (0,5); 2,855 (0,7); 2,845 (0,7); 2,837 (0,5); 2,827 (0,3); 2,676 (0,5); 2,672 (0,7); 2,668 (0,5); 2,507 (88,5); 2,503 (112,5); 2,498 (84,8); 2,334 (0,5); 2,329 (0,7); 2,325 (0,5); 2,120 (16,0); 0,740 (0,4); 0,727 (1,3); 0,722 (1,8); 0,709 (1,6); 0,704 (1,4); 0,692 (0,6); 0,580 (0,6); 0,570 (1,8); 0,564 (1,7); 0,554 (1,4); 0,542 (0,4); 0,008 (0,7); 0,000 (14,6)
Beispiel IT3144: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO): δ= 8,563 (2,0); 8,558 (2,0); 8,526 (3,6); 8,302 (3,3); 8,005 (1,9); 7,999 (2,0); 7,590 (4,6); 4,468 (0,3); 4,454 (0,8); 4,440 (0,3); 3,915 (9,8); 3,904 (7,4); 3,425 (0,4); 3,395 (2,6); 3,388 (2,3); 3,381 (3,0); 3,341 (345,9); 3,282 (0,4); 2,981 (8,7); 2,748 (0,5); 2,738 (0,8); 2,724 (0,6); 2,711 (0,3); 2,700 (0,9); 2,676 (0,7); 2,672 (0,9); 2,668 (0,8); 2,507 (111,1); 2,503 (144,6); 2,499 (113,9); 2,334 (0,6); 2,329 (0,8); 2,127 (16,0); 0,466 (3,1); 0,449 (1,7); 0,000 (11,6)
Beispiel IT3145: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO): δ= 8,848 (0,6); 8,841 (0,8); 8,835 (4,1); 8,829 (4,2); 8,781 (6,9); 8,537 (7,1); 8,316 (0,4); 8,283 (13,4); 8,274 (4,6); 8,257 (0,6); 8,251 (0,5); 3,424 (0,3); 3,409 (0,3); 3,398 (0,4); 3,387 (0,3); 3,371 (0,4); 3,324 (185,3); 2,776 (0,4); 2,764 (0,8); 2,759 (0,9); 2,750 (1,6); 2,739 (1,0); 2,733 (0,9); 2,722 (0,5); 2,675 (1,1); 2,671 (1,5); 2,667 (1,1); 2,524 (4,5); 2,506 (173,0); 2,502 (225,3); 2,497 (167,2); 2,333 (1,1); 2,329 (1,5); 2,324 (1,1); 1,398 (16,0); 1,238 (4,1); 1,220 (8,5); 1,202 (3,9); 1,120 (0,5); 1,102 (1,0); 1,085 (0,5); 0,951 (0,4); 0,935 (0,5); 0,577 (2,8); 0,549 (2,5); 0,532 (2,1); 0,146 (0,9); 0,008 (7,2); 0,000 (188,0); -0,008 (8,4); -0,150 (0,9)
Beispiel IT3146: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO): δ= 10,752 (3,5); 8,900 (3,6); 8,894 (3,7); 8,806 (5,3); 8,571 (5,2); 8,570 (5,2); 8,393 (3,7); 8,387 (3,6); 8,284 (8,3); 8,283 (8,3); 8,028 (4,8); 7,502 (4,8); 7,501 (5,0); 5,756 (5,9); 4,056 (0,5); 4,038 (1,6); 4,020 (1,6); 4,002 (0,5); 3,837 (16,0); 3,324 (33,1); 2,671 (0,4); 2,524 (1,0); 2,520 (1,4); 2,511 (20,1); 2,507 (41,3); 2,502 (54,9); 2,497 (40,1); 2,493 (19,7); 2,329 (0,4); 1,989 (6,9); 1,193 (1,9); 1,175 (3,8); 1,157 (1,9); 0,008 (1,9); 0,000 (58,8); -0,009 (2,2)
Beispiel IT3147: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO): δ= 8,999 (3,5); 8,993 (3,6); 8,778 (6,5); 8,499 (6,5); 8,384 (3,5); 8,378 (3,5); 8,279 (10,7); 5,757 (1,1); 4,384 (1,6); 4,366 (5,0); 4,348 (5,1); 4,331 (1,7); 3,894 (0,5); 3,324 (128,6); 2,714 (16,0); 2,675 (0,9); 2,671 (1,3); 2,666 (1,0); 2,524 (3,3); 2,511 (69,0); 2,506 (138,7); 2,502 (184,5); 2,498 (139,2); 2,333 (0,8); 2,329 (1,1); 2,325 (0,9); 1,989 (0,7); 1,377 (5,4); 1,360 (11,3); 1,342 (5,4); 1,234 (0,5); 1,175 (0,4); 0,146 (0,9); 0,008 (6,9); 0,000 (189,8); -0,150 (0,9)
Beispiel IT3148: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,344 (1,0); 8,180 (2,1); 8,179 (2,0); 8,138 (1,8); 8,094 (1,0); 7,688 (1,2); 7,683 (1,6); 7,655 (0,9); 7,650 (0,6); 7,634 (1,0); 7,629 (0,8); 7,474 (1,5); 7,454 (1,2); 6,895 (0,4); 6,892 (0,4); 2,860 (0,4); 2,851 (0,6); 2,842 (0,6); 2,833 (0,4); 2,132 (17,4); 2,107 (0,3); 1,964 (1,5); 1,958 (3,8); 1,952 (20,1); 1,946 (36,2); 1,940 (48,4); 1,933 (33,3); 1,927 (17,3); 1,437 (16,0); 0,781 (1,0); 0,776 (1,2); 0,763 (1,3); 0,758 (0,9); 0,746 (0,4); 0,611 (0,4); 0,601 (1,1); 0,594 (1,2); 0,590 (1,0); 0,584 (1,0); 0,000 (2,5)
Beispiel IT3149: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO): δ= 18,228 (0,3); 18,070 (0,4); 11,873 (0,3); 9,464 (0,4); 9,435 (13,6); 9,407 (0,4); 9,265 (9,2); 9,168 (16,0); 8,869 (9,9); 8,544 (15,8); 8,514 (0,4); 8,316 (1,1); 8,148 (0,4); 8,012 (0,4); 7,945 (12,0); 7,931 (6,4); 7,910 (6,2); 7,905 (5,4); 7,850 (0,4); 7,843 (0,4); 7,839 (0,4); 7,702 (0,4); 7,639 (0,4); 7,582 (9,8); 7,561 (9,0); 7,543 (0,4); 3,637 (0,4); 3,591 (0,4); 3,572 (0,4); 3,547 (0,4); 3,535 (0,6); 3,512 (0,5); 3,469 (0,6); 3,434 (0,9); 3,392 (2,8); 3,344 (1316,4); 3,339 (765,9); 3,331 (992,7); 3,218 (1,0); 3,211 (0,9); 3,178 (0,5); 3,121 (0,3); 3,058 (0,3); 2,731 (0,4); 2,671 (5,7); 2,638 (0,4); 2,584 (0,4); 2,506 (689,3); 2,502 (847,8); 2,417 (1,1); 2,381 (0,8); 2,333 (4,7); 2,328 (5,7); 2,288 (0,4); 2,283 (0,4); 1,658 (0,3); 1,620 (4,0); 1,606 (11,5); 1,599 (12,3); 1,586 (5,4); 1,546 (0,6); 1,489 (0,4); 1,370 (0,3); 1,350 (0,7); 1,310 (5,0); 1,296 (11,9); 1,290 (12,3); 1,275 (4,4); 1,237 (0,5); 0,146 (2,0); 0,000 (404,8); -0,150 (2,2); -3,146 (0,3)
Beispiel IT3150: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO): δ= 9,265 (5,5); 9,179 (0,4); 9,144 (12,1); 9,086 (0,6); 8,868 (5,9); 8,863 (6,0); 8,554 (0,6); 8,536 (16,0); 8,525 (4,5); 8,504 (0,7); 8,316 (0,8); 8,292 (0,4); 7,872 (14,1); 7,866 (7,0); 7,855 (6,0); 7,850 (3,3); 7,569 (0,3); 7,534 (7,4); 7,527 (1,7); 7,518 (1,6); 7,511 (6,7); 3,568 (0,6); 3,468 (0,4); 3,455 (0,4); 3,444 (0,5); 3,341 (576,1); 3,339 (590,5); 3,331 (552,2); 2,875 (0,5); 2,864 (1,2); 2,855 (1,6); 2,846 (2,6);

2,836 (2,6); 2,828 (1,7); 2,818 (1,3); 2,807 (0,5); 2,676 (2,6); 2,672 (3,7); 2,667 (2,8); 2,662 (1,4); 2,580 (0,4); 2,525 (9,0); 2,520 (13,1); 2,511 (197,7); 2,507 (411,4); 2,502 (559,2); 2,498 (423,2); 2,493 (212,6); 2,458 (0,5); 2,334 (2,7); 2,329 (3,7); 2,325 (2,7); 0,736 (1,7); 0,724 (4,5); 0,718 (6,6); 0,706 (6,1); 0,700 (5,1); 0,689 (2,3); 0,650 (0,3); 0,608 (0,4); 0,578 (2,2); 0,568 (6,4); 0,562 (5,7); 0,558 (5,5); 0,552 (5,2); 0,540 (1,7); 0,146 (1,7); 0,030 (0,4); 0,024 (0,4); 0,017 (0,6); 0,008 (12,6); 0,000 (401,4); -0,009 (15,0); -0,150 (1,7)
Beispiel IT3151: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 9,444 (12,0); 9,048 (16,0); 8,890 (7,0); 8,886 (7,3); 8,610 (8,1); 8,605 (7,8); 8,506 (15,9); 8,495 (0,3); 8,317 (4,4); 7,899 (6,5); 7,894 (13,4); 7,885 (2,6); 7,870 (6,7); 7,865 (4,8); 7,579 (9,1); 7,559 (8,2); 3,410 (0,4); 3,383 (0,7); 3,364 (1,2); 3,327 (1576,2); 3,293 (1,2); 2,694 (0,5); 2,676 (8,0); 2,671 (11,2); 2,667 (8,3); 2,643 (0,4); 2,630 (0,4); 2,623 (0,5); 2,599 (0,7); 2,524 (28,8); 2,520 (43,4); 2,511 (594,8); 2,507 (1217,9); 2,502 (1623,1); 2,498 (1195,4); 2,493 (589,7); 2,419 (0,6); 2,338 (3,7); 2,333 (7,9); 2,329 (11,1); 2,324 (8,1); 2,320 (4,0); 1,620 (3,9); 1,606 (9,5); 1,599 (10,3); 1,586 (4,4); 1,546 (0,4); 1,342 (0,4); 1,303 (4,6); 1,289 (9,5); 1,282 (10,2); 1,268 (3,8); 1,234 (0,6); 1,148 (0,9); 0,146 (8,7); 0,049 (0,4); 0,039 (0,7); 0,008 (63,6); 0,000 (1893,8); -0,009 (67,7); -0,035 (1,3); -0,045 (0,8); -0,088 (0,3); -0,150 (8,7)
Beispiel IT3152: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 9,046 (0,6); 9,022 (16,0); 8,893 (8,5); 8,608 (9,0); 8,604 (8,5); 8,543 (6,0); 8,532 (6,0); 8,515 (0,9); 8,496 (15,9); 8,453 (0,3); 8,317 (2,0); 7,901 (0,4); 7,896 (0,4); 7,828 (8,6); 7,823 (11,4); 7,818 (11,0); 7,812 (8,2); 7,682 (0,3); 7,532 (8,5); 7,521 (2,4); 7,510 (7,5); 3,508 (0,4); 3,327 (1034,9); 3,230 (0,5); 3,210 (0,4); 2,874 (0,7); 2,864 (1,6); 2,854 (2,4); 2,846 (3,5); 2,836 (3,5); 2,827 (2,5); 2,817 (1,7); 2,807 (0,8); 2,671 (8,3); 2,622 (0,7); 2,608 (0,8); 2,506 (980,0); 2,502 (1179,0); 2,329 (8,1); 2,297 (0,4); 2,281 (0,3); 1,236 (0,7); 1,149 (0,6); 0,735 (2,2); 0,717 (8,7); 0,705 (8,5); 0,699 (7,0); 0,688 (2,9); 0,666 (0,5); 0,648 (0,4); 0,615 (0,3); 0,603 (0,4); 0,574 (3,0); 0,563 (9,1); 0,556 (9,0); 0,548 (7,5); 0,535 (2,1); 0,525 (0,5); 0,488 (0,3); 0,146 (5,2); 0,000 (1050,7); -0,150 (5,5)
Beispiel IT3153: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 9,441 (7,1); 9,380 (9,1); 8,960 (4,8); 8,954 (5,0); 8,641 (9,2); 8,581 (3,9); 8,577 (3,9); 8,317 (0,9); 8,166 (1,1); 8,002 (5,1); 7,997 (6,5); 7,969 (3,3); 7,963 (2,5); 7,948 (3,5); 7,942 (3,0); 7,589 (6,2); 7,568 (5,7); 3,430 (0,6); 3,411 (1,9); 3,393 (2,3); 3,378 (2,6); 3,359 (2,8); 3,328 (240,7); 2,950 (0,6); 2,932 (2,1); 2,913 (2,4); 2,898 (2,1); 2,880 (1,9); 2,862 (0,5); 2,676 (1,9); 2,671 (2,7); 2,667 (2,0); 2,542 (1,0); 2,525 (6,6); 2,520 (10,2); 2,511 (145,4); 2,507 (298,6); 2,502 (396,9); 2,498 (292,6); 2,493 (144,6); 2,334 (1,9); 2,329 (2,6); 2,325 (1,9); 2,320 (1,0); 2,075 (0,6); 1,908 (0,5); 1,627 (2,3); 1,613 (5,6); 1,606 (6,0); 1,593 (2,7); 1,314 (2,6); 1,301 (5,6); 1,294 (5,9); 1,279 (2,3); 1,106 (7,4); 1,088 (16,0); 1,069 (7,2); 0,146 (2,3); 0,008 (17,1); 0,000 (509,3); -0,009 (19,8); -0,031 (0,4); -0,034 (0,4); -0,150 (2,3)
Beispiel IT3154: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 9,448 (6,4); 9,231 (4,3); 9,226 (4,3); 9,186 (8,2); 8,634 (4,2); 8,629 (4,2); 8,596 (8,2); 8,317 (3,6); 7,954 (4,3); 7,949 (6,0); 7,934 (3,1); 7,929 (2,0); 7,913 (3,2); 7,908 (2,5); 7,595 (5,2); 7,574 (4,7); 4,152 (1,7); 4,133 (5,6); 4,115 (5,6); 4,096 (1,8); 3,459 (0,4); 3,445 (0,3); 3,436 (0,3); 3,328 (1346,5); 2,694 (0,4); 2,676 (6,7); 2,671 (9,0); 2,667 (6,9); 2,629 (0,5); 2,620 (0,5); 2,524 (24,4); 2,506 (1009,7); 2,502 (1305,6); 2,498 (988,2); 2,405 (0,6); 2,389 (0,6); 2,333 (6,4); 2,329 (8,7); 2,325 (6,5); 1,623 (2,1); 1,608 (5,2); 1,602 (5,6); 1,589 (2,4); 1,575 (0,5); 1,326 (6,4); 1,308 (16,0); 1,289 (11,7); 1,274 (2,1); 1,258 (0,6); 1,247 (0,5); 1,236 (0,7); 1,158 (0,5); 1,147 (0,4); 1,068 (0,8); 0,146 (6,9); 0,008 (62,7); 0,000 (1428,7); -0,059 (0,5); -0,080 (0,4); -0,101 (0,4); -0,150 (7,0)
Beispiel IT3155: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,345 (0,9); 8,192 (1,8); 8,153 (1,5); 8,094 (0,9); 7,738 (1,0); 7,732 (1,3); 7,706 (0,6); 7,700 (0,5); 7,685 (0,7); 7,680 (0,6); 7,563 (0,4); 7,507 (1,1); 7,486 (0,9); 2,144 (6,2); 2,114 (0,5); 2,108 (0,4); 1,972 (1,1); 1,964 (1,1); 1,958 (2,8); 1,952 (14,4); 1,946 (26,2); 1,940 (35,3); 1,934 (25,1); 1,928 (13,6); 1,596 (0,5); 1,582 (1,3); 1,575 (1,3); 1,561 (0,7); 1,437 (16,0); 1,362 (0,6); 1,349 (1,3); 1,342 (1,4); 1,327 (0,5); 1,204 (0,5); 0,146 (0,8); 0,008 (7,0); 0,000 (147,1); -0,008 (10,2); -0,150 (0,7)
Beispiel IT3156: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 9,077 (8,4); 9,076 (8,4); 8,593 (4,1); 8,589 (4,2); 8,540 (3,1); 8,529 (3,2); 8,471 (8,5); 8,469 (8,4); 8,317 (0,7); 8,019 (4,1); 8,015 (4,0); 7,848 (1,5); 7,843 (5,5); 7,839 (7,4); 7,834 (5,9); 7,826 (4,6); 7,820 (2,2); 7,526 (5,7); 7,517 (1,0); 7,513 (0,9); 7,504 (5,1); 3,328 (238,4); 3,109 (1,9); 3,091 (6,4); 3,072 (6,5); 3,054 (2,0); 2,874 (0,4); 2,864 (0,9); 2,854 (1,2); 2,846 (1,9); 2,836 (2,0); 2,827 (1,2); 2,818 (1,0); 2,808 (0,4); 2,676 (1,5); 2,671 (2,2); 2,667 (1,6); 2,662 (0,8); 2,525 (5,6); 2,520 (8,4); 2,511 (110,7); 2,507 (227,2); 2,502 (302,7); 2,498 (222,3); 2,493 (109,6); 2,338 (0,6); 2,334 (1,4); 2,329 (1,9); 2,324 (1,4); 2,320 (0,7); 1,398 (1,0); 1,235 (8,0); 1,217 (16,0); 1,198 (7,0); 0,736 (1,2); 0,723 (3,4); 0,718 (4,9); 0,706 (4,5); 0,700 (3,8); 0,688 (1,6); 0,577 (1,6); 0,566 (4,8); 0,560 (4,3); 0,556 (4,1); 0,550 (3,9); 0,538 (1,2); 0,146 (0,6); 0,008 (4,5); 0,000 (140,4); -0,009 (5,1); -0,150 (0,6)
Beispiel IT3157: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 9,389 (0,4); 9,355 (9,8); 8,964 (5,4); 8,959 (5,4); 8,642 (0,5); 8,627 (9,7); 8,577 (4,7); 8,540 (3,8); 8,529 (3,8); 8,317 (1,2); 7,913 (12,3); 7,893 (4,1); 7,887 (2,8); 7,541 (4,9); 7,520 (4,4); 4,038 (0,9); 4,020 (0,8); 4,002 (0,4); 3,454 (0,4); 3,425 (0,9); 3,406 (2,4); 3,387 (2,9); 3,372 (3,7); 3,353 (5,7); 3,329 (694,0); 2,952 (0,7); 2,934 (2,2); 2,915 (2,5); 2,900 (2,2); 2,882 (2,0); 2,864 (1,6); 2,855 (1,6); 2,846 (2,3); 2,836 (2,3); 2,827 (1,6); 2,818 (1,1); 2,807 (0,5); 2,676 (3,2); 2,671 (4,1); 2,667 (3,2); 2,507 (462,3); 2,502 (589,8); 2,498 (442,8); 2,333 (2,8); 2,329 (3,8); 2,325 (2,8); 1,989 (3,4); 1,398 (1,9); 1,234 (0,7); 1,193 (1,0); 1,175 (1,8); 1,157 (0,9); 1,099 (7,6); 1,081 (16,0); 1,063 (7,3); 0,741 (1,3); 0,728 (4,0); 0,723 (5,4); 0,711 (5,1); 0,705 (4,3); 0,694 (1,7); 0,583 (1,8); 0,573 (5,5); 0,566 (5,3); 0,557 (4,5); 0,545 (1,3); 0,146 (0,3); 0,008 (3,2); 0,000 (63,6)
Beispiel IT3158: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 9,234 (1,6); 9,229 (1,6); 9,165 (3,1); 8,632 (1,6); 8,627 (1,6); 8,584 (3,2); 8,547 (1,2); 8,536 (1,2); 7,875 (4,5); 7,871 (1,9); 7,857 (1,5); 7,852 (0,9); 7,548 (1,5); 7,543 (0,7); 7,529 (0,6); 7,525 (1,4); 4,151 (0,7); 4,132 (2,2); 4,114 (2,2); 4,095 (0,7); 3,329 (71,4); 2,867 (0,3); 2,857 (0,4); 2,849 (0,7); 2,839 (0,7); 2,830 (0,5); 2,821 (0,3); 2,676 (0,4); 2,672 (0,6); 2,667 (0,4); 2,525 (1,6); 2,511 (33,5); 2,507 (66,9); 2,502 (87,7); 2,498 (64,8); 2,494 (32,5); 2,334 (0,4); 2,329 (0,6); 2,325 (0,4); 1,398 (16,0); 1,324 (2,6); 1,306 (5,7); 1,287 (2,6); 1,236 (0,3); 0,738 (0,4); 0,725 (1,3); 0,720 (1,8); 0,708 (1,6); 0,702 (1,4); 0,691 (0,6); 0,580 (0,6); 0,569 (1,8); 0,563 (1,6); 0,554 (1,4); 0,541 (0,4); 0,008 (0,4); 0,000 (10,6); -0,008 (0,4)
Beispiel IT3159: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 9,812 (2,8); 9,173 (7,1); 8,904 (2,9); 8,880 (0,5); 8,874 (0,4); 8,852 (1,7); 8,845 (2,6); 8,822 (6,9); 8,816 (7,2); 8,765 (9,2); 8,566 (0,7); 8,554 (1,9); 8,512 (5,8); 8,484 (11,2); 8,455 (6,7); 8,449 (6,6); 8,318 (0,7); 8,263 (1,1); 8,257 (1,1); 8,237 (0,4); 8,093 (5,7); 3,903 (16,0); 3,680 (2,8); 3,593 (0,6); 3,582 (0,9); 3,570 (0,7); 3,388 (0,9); 3,333 (306,9); 3,276 (1,0); 3,267 (1,3); 3,168 (13,0); 3,044 (0,4); 2,980 (0,9);

2,891 (2,0); 2,732 (1,7); 2,676 (1,9); 2,672 (2,6); 2,667 (1,9); 2,542 (0,9); 2,525 (6,2); 2,511 (158,8); 2,507 (322,0); 2,503 (423,2); 2,498 (311,3); 2,494 (156,1); 2,334 (2,0); 2,329 (2,7); 2,325 (2,1); 2,083 (0,4); 2,065 (0,3); 1,877 (2,4); 1,867 (5,7); 1,857 (6,2); 1,848 (2,6); 1,718 (0,4); 1,709 (0,4); 1,435 (0,4); 1,355 (0,6); 1,298 (0,6); 1,284 (0,5); 1,276 (0,6); 1,259 (3,3); 1,249 (6,9); 1,239 (9,7); 1,236 (9,6); 1,001 (0,6); 0,991 (0,5); 0,986 (0,5); 0,871 (0,5); 0,862 (0,6); 0,854 (1,3); 0,843 (0,5); 0,837 (0,7); 0,827 (0,3); 0,008 (0,7); 0,000 (25,7); -0,008 (1,0)
Beispiel IT3160: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,728 (0,3); 8,722 (0,5); 8,704 (9,5); 8,698 (9,6); 8,524 (0,3); 8,353 (7,7); 8,234 (15,1); 8,219 (12,8); 8,100 (7,8); 8,052 (10,3); 8,046 (10,1); 7,603 (0,4); 7,592 (0,6); 7,560 (0,5); 7,537 (0,5); 7,495 (0,5); 7,490 (0,5); 7,342 (0,5); 7,067 (2,6); 5,449 (0,7); 4,054 (1,4); 3,893 (0,3); 3,441 (0,7); 3,375 (0,6); 3,241 (1,1); 3,154 (3,0); 3,070 (0,6); 2,886 (0,9); 2,876 (1,9); 2,867 (2,7); 2,858 (3,9); 2,849 (3,9); 2,840 (2,7); 2,831 (1,9); 2,821 (0,7); 2,600 (0,3); 2,590 (0,4); 2,531 (0,4); 2,470 (3,6); 2,465 (5,0); 2,460 (3,7); 2,432 (0,3); 2,425 (0,4); 2,394 (0,4); 2,368 (0,5); 2,359 (0,5); 2,329 (0,6); 2,316 (0,6); 2,289 (0,8); 2,261 (1,3); 2,257 (1,3); 2,255 (1,3); 2,243 (1,9); 2,178 (1072,5); 2,127 (0,9); 2,121 (1,9); 2,114 (3,1); 2,108 (4,0); 2,102 (2,8); 2,096 (1,6); 2,087 (0,7); 2,057 (0,4); 2,036 (0,7); 2,017 (1,1); 1,998 (1,2); 1,965 (20,6); 1,959 (52,5); 1,953 (270,7); 1,947 (487,5); 1,941 (651,6); 1,935 (450,7); 1,929 (234,0); 1,782 (1,4); 1,775 (2,7); 1,769 (3,6); 1,763 (2,5); 1,757 (1,3); 1,711 (2,4); 1,384 (0,4); 1,380 (0,8); 1,269 (16,0); 0,897 (0,7); 0,881 (1,8); 0,864 (0,9); 0,808 (2,2); 0,795 (6,8); 0,790 (8,9); 0,778 (9,1); 0,772 (6,9); 0,760 (3,0); 0,738 (0,4); 0,721 (0,4); 0,661 (0,4); 0,651 (0,4); 0,621 (3,0); 0,609 (8,1); 0,603 (8,3); 0,599 (7,4); 0,594 (7,1); 0,581 (2,1); 0,543 (0,5); 0,390 (0,4); 0,385 (0,5); 0,146 (8,5); 0,085 (0,4); 0,078 (0,5); 0,065 (0,5); 0,008 (68,5); 0,000 (1708,3); -0,009 (75,1); -0,049 (0,5); -0,058 (0,4); -0,150 (8,4)
Beispiel IT3161: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,626 (2,2); 8,153 (1,1); 8,140 (16,0); 8,100 (13,1); 7,994 (7,6); 7,949 (7,7); 7,629 (9,3); 7,624 (11,5); 7,596 (6,2); 7,591 (4,8); 7,585 (2,3); 7,575 (7,4); 7,570 (6,0); 7,488 (0,5); 7,467 (0,4); 7,436 (11,0); 7,415 (8,4); 4,085 (1,8); 4,068 (5,5); 4,050 (5,6); 4,032 (1,9); 3,435 (0,7); 3,425 (1,5); 3,416 (1,9); 3,407 (3,0); 3,394 (2,9); 3,383 (1,8); 3,376 (1,3); 3,365 (0,6); 3,033 (0,5); 2,905 (0,4); 2,683 (0,6); 2,665 (0,6); 2,467 (0,8); 2,143 (2313,8); 2,117 (49,9); 2,108 (11,0); 2,101 (6,8); 2,095 (3,7); 1,972 (32,2); 1,964 (49,2); 1,958 (118,9); 1,953 (611,9); 1,946 (1099,9); 1,940 (1474,5); 1,934 (1019,6); 1,928 (525,2); 1,781 (2,8); 1,775 (5,7); 1,769 (7,9); 1,762 (5,4); 1,756 (2,4); 1,437 (7,6); 1,270 (1,1); 1,222 (6,5); 1,204 (13,0); 1,186 (6,4); 0,951 (2,0); 0,939 (6,4); 0,934 (8,6); 0,921 (8,9); 0,915 (6,5); 0,902 (2,8); 0,881 (0,8); 0,863 (0,6); 0,821 (0,5); 0,811 (0,4); 0,782 (2,8); 0,770 (7,8); 0,764 (8,1); 0,760 (6,9); 0,754 (6,8); 0,741 (1,9); 0,192 (0,4); 0,146 (19,2); 0,087 (1,0); 0,063 (1,5); 0,008 (155,4); 0,000 (3971,4); -0,009 (173,7); -0,068 (0,4); -0,150 (18,8)
Beispiel IT3162: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,194 (6,9); 8,179 (6,7); 7,972 (3,4); 7,759 (3,0); 7,688 (3,5); 7,682 (4,6); 7,655 (2,4); 7,650 (1,8); 7,635 (2,7); 7,629 (2,4); 7,477 (4,3); 7,456 (3,4); 6,951 (1,1); 2,872 (0,7); 2,862 (1,1); 2,854 (1,6); 2,844 (1,6); 2,835 (1,1); 2,826 (0,8); 2,471 (0,3); 2,466 (0,5); 2,461 (0,3); 2,180 (199,2); 2,134 (0,5); 2,115 (0,5); 2,109 (0,6); 2,102 (0,4); 1,965 (2,7); 1,959 (6,7); 1,953 (37,6); 1,947 (69,0); 1,941 (93,6); 1,935 (65,6); 1,929 (34,4); 1,776 (0,4); 1,770 (0,5); 1,763 (0,4); 1,437 (16,0); 1,269 (0,4); 0,795 (0,9); 0,782 (2,6); 0,777 (3,6); 0,765 (3,7); 0,759 (2,8); 0,747 (1,2); 0,612 (1,2); 0,601 (3,3); 0,595 (3,4); 0,591 (3,1); 0,586 (3,0); 0,573 (0,9); 0,146 (1,5); 0,008 (10,7); 0,000 (294,5); -0,150 (1,5)
Beispiel IT3163: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,205 (4,0); 8,190 (4,1); 7,973 (2,2); 7,760 (2,0); 7,736 (2,0); 7,731 (2,6); 7,704 (1,2); 7,700 (1,0); 7,684 (1,4); 7,679 (1,2); 7,600 (0,8); 7,509 (2,3); 7,488 (1,9); 2,161 (116,4); 2,121 (0,5); 2,114 (0,5); 2,108 (0,6); 2,102 (0,4); 1,963 (2,5); 1,952 (29,4); 1,946 (52,9); 1,941 (70,8); 1,934 (50,0); 1,928 (26,6); 1,769 (0,4); 1,598 (1,0); 1,583 (2,9); 1,576 (2,8); 1,563 (1,3); 1,436 (16,0); 1,362 (1,3); 1,348 (2,9); 1,341 (3,0); 1,327 (1,0); 1,269 (0,5); 0,145 (1,2); 0,000 (226,5); -0,150 (1,2)
Beispiel IT3164: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 9,460 (5,0); 8,854 (7,4); 8,671 (4,0); 8,651 (4,0); 8,535 (7,4); 7,846 (1,3); 7,840 (3,0); 7,833 (4,3); 7,827 (5,4); 7,824 (4,4); 7,818 (1,5); 7,594 (4,1); 7,584 (0,8); 7,582 (0,8); 7,572 (3,6); 4,056 (1,2); 4,038 (3,7); 4,020 (3,7); 4,002 (1,3); 3,934 (1,6); 3,329 (39,1); 2,671 (0,4); 2,525 (1,1); 2,507 (42,6); 2,502 (56,3); 2,498 (42,6); 2,329 (0,4); 1,989 (16,0); 1,619 (1,7); 1,605 (4,3); 1,598 (4,6); 1,585 (1,9); 1,397 (5,6); 1,295 (2,0); 1,281 (4,2); 1,275 (4,5); 1,260 (1,6); 1,193 (4,2); 1,175 (8,4); 1,157 (4,1); 1,069 (10,8); 0,008 (1,8); 0,000 (48,4); -0,008 (2,3)
Beispiel IT3165: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,748 (1,7); 8,742 (1,8); 8,353 (1,5); 8,243 (2,8); 8,228 (2,4); 8,116 (1,9); 8,110 (2,1); 8,101 (1,5); 7,706 (0,5); 3,236 (0,9); 3,070 (0,4); 2,883 (0,4); 2,284 (0,3); 2,154 (118,3); 2,120 (0,8); 2,114 (0,9); 2,108 (0,9); 2,102 (0,7); 2,095 (0,4); 1,972 (0,7); 1,965 (3,4); 1,958 (8,8); 1,953 (47,0); 1,946 (85,3); 1,940 (114,8); 1,934 (80,1); 1,928 (41,8); 1,775 (0,5); 1,769 (0,7); 1,763 (0,5); 1,612 (0,8); 1,597 (2,0); 1,591 (2,0); 1,577 (1,0); 1,437 (16,0); 1,370 (1,0); 1,356 (2,0); 1,349 (2,1); 1,334 (0,8); 1,269 (0,9); 0,146 (1,9); 0,008 (15,7); 0,000 (390,9); -0,009 (19,9); -0,150 (2,0)
Beispiel IT3166: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 9,440 (11,8); 9,127 (15,9); 8,569 (7,7); 8,491 (16,0); 8,318 (2,5); 7,965 (7,6); 7,961 (7,7); 7,926 (7,5); 7,921 (12,0); 7,912 (6,7); 7,906 (3,4); 7,891 (6,2); 7,885 (4,8); 7,573 (10,1); 7,553 (9,2); 3,459 (0,4); 3,399 (0,7); 3,365 (1,8); 3,331 (1516,7); 3,298 (1,6); 2,701 (0,4); 2,694 (0,3); 2,676 (6,5); 2,671 (9,1); 2,667 (6,9); 2,638 (0,4); 2,576 (1,1); 2,529 (53,9); 2,520 (35,9); 2,511 (509,9); 2,507 (1041,8); 2,502 (1375,8); 2,498 (1016,8); 2,417 (0,5); 2,351 (0,6); 2,334 (6,6); 2,329 (9,1); 2,325 (6,8); 2,302 (0,3); 1,621 (3,9); 1,607 (9,8); 1,600 (10,6); 1,587 (4,4); 1,547 (0,4); 1,348 (0,4); 1,307 (4,5); 1,294 (9,7); 1,287 (10,6); 1,273 (3,7); 1,237 (0,4); 0,146 (3,4); 0,024 (0,3); 0,008 (24,7); 0,000 (766,8); -0,008 (29,5); -0,032 (0,8); -0,150 (3,5)
Beispiel IT3167: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 9,440 (6,2); 9,103 (8,3); 9,094 (0,8); 8,587 (4,2); 8,479 (8,5); 8,317 (1,1); 8,021 (4,5); 7,917 (3,9); 7,911 (6,2); 7,903 (3,6); 7,898 (1,8); 7,882 (3,2); 7,877 (2,5); 7,597 (0,4); 7,574 (5,4); 7,554 (4,7); 3,329 (494,7); 3,110 (1,9); 3,092 (6,3); 3,074 (6,4); 3,056 (2,0); 2,871 (0,3); 2,676 (3,0); 2,671 (4,2); 2,667 (3,1); 2,524 (9,6); 2,507 (478,6); 2,502 (637,0); 2,498 (477,3); 2,408 (0,8); 2,333 (2,9); 2,329 (4,1); 2,325 (3,1); 1,621 (2,0); 1,607 (5,2); 1,600 (5,6); 1,587 (2,3); 1,306 (2,4); 1,293 (5,3); 1,286 (5,7); 1,272 (2,1); 1,261 (0,6); 1,235 (7,6); 1,217 (16,0); 1,199 (7,1); 0,146 (1,6); 0,008 (11,5); 0,000 (362,6); -0,008 (14,5); -0,026 (0,6); -0,150 (1,6)
Beispiel IT3168: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 8,917 (4,0); 8,676 (2,2); 8,612 (2,2); 8,554 (1,4); 8,543 (1,4); 8,439 (4,1); 7,783 (0,8); 7,777 (1,6); 7,770 (2,3); 7,764 (3,0); 7,539 (2,1); 7,527 (0,4); 7,517 (1,8); 4,038 (0,4); 4,020 (0,4); 3,936 (2,3); 3,333 (40,9); 2,864 (0,4); 2,854 (0,6); 2,846 (0,8); 2,836 (0,8); 2,827 (0,6);

2,818 (0,4); 2,507 (26,6); 2,503 (34,6); 2,498 (26,4); 1,989 (1,7); 1,296 (0,7); 1,193 (0,5); 1,175 (0,9); 1,157 (0,5); 1,069 (16,0); 0,733 (0,5); 0,720 (1,6); 0,716 (2,1); 0,703 (2,0); 0,698 (1,8); 0,686 (0,7); 0,566 (0,7); 0,555 (2,1); 0,549 (2,0); 0,540 (1,8); 0,527 (0,6); 0,000 (11,0)
Beispiel IT3169: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO): δ= 9,461 (11,1); 9,416 (0,4); 8,936 (15,7); 8,681 (8,8); 8,616 (8,7); 8,450 (16,0); 7,833 (11,0); 7,827 (9,7); 7,820 (7,2); 7,652 (0,3); 7,589 (8,1); 7,578 (1,9); 7,567 (7,0); 7,556 (0,5); 4,038 (0,8); 4,020 (0,8); 3,937 (0,6); 3,333 (133,2); 2,672 (0,7); 2,503 (110,4); 2,330 (0,7); 1,989 (3,2); 1,622 (3,6); 1,607 (9,7); 1,601 (10,5); 1,587 (4,3); 1,563 (0,4); 1,556 (0,4); 1,547 (0,5); 1,334 (0,4); 1,314 (0,5); 1,300 (4,8); 1,294 (5,2); 1,281 (9,9); 1,274 (10,4); 1,259 (3,7); 1,235 (0,6); 1,193 (0,9); 1,175 (1,7); 1,157 (0,9); 1,069 (3,7); 0,000 (35,7)
Beispiel IT3170: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO): δ= 9,441 (1,5); 9,436 (2,4); 8,694 (1,7); 8,619 (3,2); 8,443 (1,7); 8,398 (3,2); 8,274 (2,8); 7,960 (1,6); 7,956 (1,6); 7,810 (0,9); 7,804 (2,1); 7,797 (2,3); 7,792 (2,9); 7,787 (3,1); 7,782 (0,9); 7,742 (1,6); 7,739 (1,6); 7,569 (1,0); 7,557 (2,1); 7,546 (1,3); 7,535 (1,8); 4,056 (1,2); 4,038 (3,6); 4,020 (3,7); 4,002 (1,2); 3,332 (35,6); 3,116 (0,7); 3,097 (2,3); 3,079 (2,4); 3,061 (0,7); 2,525 (0,5); 2,512 (10,5); 2,507 (21,4); 2,503 (28,1); 2,498 (20,5); 2,494 (9,9); 1,990 (16,0); 1,615 (1,1); 1,601 (2,8); 1,594 (2,9); 1,581 (1,3); 1,289 (1,3); 1,276 (2,8); 1,269 (3,0); 1,255 (1,1); 1,208 (2,7); 1,193 (5,6); 1,190 (6,2); 1,175 (9,2); 1,157 (4,2); 0,000 (3,5)
Beispiel IT3171: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO): δ= 9,443 (12,6); 9,162 (16,0); 8,676 (8,2); 8,530 (16,0); 8,412 (7,8); 8,317 (4,0); 7,937 (8,0); 7,932 (12,0); 7,921 (6,8); 7,915 (3,8); 7,900 (6,4); 7,895 (5,0); 7,716 (0,4); 7,584 (10,3); 7,563 (9,1); 4,358 (2,5); 4,332 (7,5); 4,306 (7,8); 4,280 (2,7); 4,104 (0,5); 4,079 (0,4); 3,496 (0,5); 3,480 (0,4); 3,466 (0,5); 3,452 (0,4); 3,396 (0,8); 3,329 (1554,1); 3,287 (1,0); 2,676 (8,0); 2,671 (11,1); 2,667 (8,6); 2,645 (0,6); 2,525 (28,7); 2,511 (614,7); 2,507 (1266,3); 2,502 (1687,1); 2,498 (1264,4); 2,389 (0,6); 2,380 (0,6); 2,333 (7,8); 2,329 (11,0); 2,325 (8,3); 2,256 (0,4); 2,075 (1,4); 1,623 (4,0); 1,608 (10,0); 1,601 (10,8); 1,588 (4,6); 1,548 (0,5); 1,347 (0,4); 1,306 (4,7); 1,293 (10,0); 1,286 (10,8); 1,272 (3,9); 1,234 (0,7); 0,146 (0,5); 0,017 (0,4); 0,008 (3,6); 0,000 (115,1); -0,008 (5,1); -0,150 (0,6)
Beispiel IT3172: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO): δ= 8,613 (0,3); 8,596 (8,4); 8,529 (2,9); 8,518 (3,0); 8,492 (0,7); 8,381 (8,5); 8,333 (0,6); 7,956 (4,4); 7,953 (4,4); 7,749 (2,3); 7,743 (4,8); 7,739 (5,0); 7,725 (13,2); 7,507 (4,3); 7,488 (2,3); 7,485 (3,1); 4,055 (1,2); 4,038 (3,6); 4,020 (3,7); 4,002 (1,2); 3,329 (51,5); 3,112 (1,9); 3,094 (6,1); 3,076 (6,1); 3,057 (2,0); 3,048 (0,4); 3,029 (0,9); 3,011 (0,9); 2,856 (0,8); 2,847 (1,1); 2,838 (1,8); 2,828 (1,8); 2,819 (1,1); 2,809 (0,9); 2,676 (0,4); 2,671 (0,5); 2,667 (0,4); 2,524 (1,3); 2,511 (30,4); 2,507 (60,9); 2,502 (79,7); 2,498 (58,7); 2,494 (29,4); 2,333 (0,4); 2,329 (0,5); 2,324 (0,4); 1,989 (16,0); 1,235 (0,4); 1,207 (6,8); 1,192 (7,1); 1,189 (14,7); 1,175 (10,4); 1,170 (7,2); 1,157 (4,7); 1,068 (0,4); 0,727 (1,1); 0,714 (3,3); 0,709 (4,6); 0,697 (4,3); 0,691 (3,7); 0,680 (1,5); 0,563 (1,5); 0,552 (4,6); 0,546 (4,3); 0,536 (3,8); 0,524 (1,1); 0,008 (2,2); 0,000 (61,3); -0,008 (2,4)
Beispiel IT3173: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO): δ= 8,653 (6,0); 8,567 (3,1); 8,561 (3,2); 8,401 (5,7); 8,091 (10,1); 8,013 (3,1); 8,007 (3,2); 7,957 (0,4); 6,579 (0,7); 5,409 (0,3); 3,923 (16,0); 3,592 (0,3); 3,367 (923,7); 2,985 (14,3); 2,767 (0,4); 2,740 (1,3); 2,725 (0,9); 2,704 (1,4); 2,674 (0,9); 2,509 (96,0); 2,505 (123,6); 2,501 (91,6); 2,332 (0,8); 2,074 (1,6); 1,271 (0,8); 1,169 (5,1); 0,467 (4,6); 0,450 (2,4); 0,008 (1,4); 0,000 (28,9)
Beispiel IT3174: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO): δ= 8,835 (7,5); 8,672 (3,0); 8,669 (4,0); 8,650 (3,9); 8,649 (3,9); 8,645 (2,9); 8,556 (2,5); 8,545 (2,5); 8,525 (7,6); 7,787 (1,7); 7,781 (2,9); 7,766 (4,0); 7,763 (11,3); 7,546 (3,2); 7,542 (1,7); 7,527 (1,5); 7,524 (2,8); 4,056 (1,2); 4,038 (3,6); 4,020 (3,7); 4,002 (1,2); 3,329 (59,6); 2,865 (0,7); 2,856 (0,9); 2,847 (1,4); 2,836 (1,5); 2,828 (0,9); 2,818 (0,7); 2,671 (0,4); 2,525 (1,0); 2,520 (1,6); 2,511 (21,0); 2,507 (42,8); 2,502 (56,7); 2,498 (41,2); 2,493 (19,8); 2,329 (0,4); 1,989 (16,0); 1,193 (4,3); 1,175 (8,7); 1,157 (4,2); 0,733 (1,0); 0,720 (2,7); 0,715 (3,8); 0,703 (3,5); 0,697 (2,9); 0,686 (1,3); 0,566 (1,3); 0,555 (3,7); 0,549 (3,3); 0,545 (3,1); 0,540 (3,0); 0,527 (0,9); 0,008 (1,4); 0,000 (40,4); -0,009 (1,3)
Beispiel IT3175: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,146 (3,1); 8,082 (4,8); 7,714 (1,6); 7,697 (2,0); 7,692 (2,5); 7,663 (1,3); 7,658 (1,0); 7,642 (1,5); 7,637 (1,3); 7,472 (2,3); 7,451 (1,8); 6,931 (0,6); 2,873 (0,4); 2,864 (0,6); 2,855 (0,9); 2,845 (0,9); 2,837 (0,6); 2,827 (0,4); 2,165 (79,0); 2,115 (0,4); 2,108 (0,5); 2,102 (0,3); 1,965 (1,5); 1,959 (4,0); 1,953 (28,1); 1,947 (52,6); 1,941 (72,5); 1,935 (50,5); 1,929 (26,2); 1,769 (0,4); 1,437 (16,0); 0,796 (0,5); 0,783 (1,5); 0,778 (2,0); 0,765 (2,0); 0,760 (1,5); 0,748 (0,7); 0,613 (0,6); 0,601 (1,7); 0,595 (1,8); 0,591 (1,6); 0,586 (1,6); 0,574 (0,5); 0,000 (0,6)
Beispiel IT3176: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 19,983 (0,4); 8,920 (0,7); 8,270 (0,3); 8,158 (11,0); 8,124 (0,4); 8,095 (11,8); 8,083 (6,1); 8,035 (0,7); 7,746 (6,2); 7,741 (7,8); 7,713 (9,2); 7,692 (4,8); 7,686 (4,4); 7,669 (3,3); 7,590 (0,6); 7,505 (6,9); 7,484 (5,7); 3,901 (3,1); 2,470 (2,5); 2,466 (3,4); 2,461 (2,6); 2,417 (1,0); 2,179 (1701,9); 2,153 (39,9); 2,121 (2,8); 2,115 (3,6); 2,109 (4,3); 2,103 (3,2); 2,096 (1,9); 2,034 (0,5); 1,965 (12,0); 1,954 (216,5); 1,947 (401,4); 1,941 (546,5); 1,935 (384,1); 1,929 (201,2); 1,782 (1,6); 1,776 (2,6); 1,770 (3,4); 1,764 (2,5); 1,599 (3,1); 1,584 (8,5); 1,577 (8,4); 1,564 (4,1); 1,524 (0,7); 1,437 (16,0); 1,401 (0,7); 1,362 (3,9); 1,349 (8,6); 1,342 (8,8); 1,327 (3,1); 1,268 (2,7); 0,882 (0,4); 0,000 (4,2)
Beispiel IT3177: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO): δ= 9,462 (7,5); 8,855 (1,9); 8,790 (8,8); 8,673 (1,1); 8,653 (1,1); 8,536 (1,9); 8,483 (8,9); 8,391 (4,5); 8,388 (4,6); 8,105 (4,5); 8,102 (4,5); 7,846 (0,5); 7,840 (1,0); 7,833 (2,8); 7,827 (5,2); 7,820 (5,9); 7,814 (7,0); 7,810 (5,4); 7,804 (1,9); 7,595 (1,3); 7,586 (5,5); 7,573 (1,8); 7,564 (4,6); 4,055 (0,5); 4,038 (1,4); 4,020 (1,4); 4,002 (0,5); 3,331 (91,4); 3,168 (2,0); 3,150 (6,5); 3,131 (6,6); 3,113 (2,0); 2,676 (0,5); 2,672 (0,7); 2,667 (0,5); 2,525 (1,8); 2,511 (39,2); 2,507 (78,6); 2,502 (103,0); 2,498 (76,1); 2,494 (38,1); 2,334 (0,5); 2,329 (0,7); 2,325 (0,5); 1,989 (6,1); 1,619 (2,5); 1,604 (6,3); 1,598 (6,8); 1,585 (2,8); 1,397 (5,9); 1,293 (2,9); 1,279 (6,3); 1,273 (6,7); 1,258 (2,4); 1,203 (7,5); 1,193 (2,5); 1,184 (16,0); 1,175 (4,1); 1,166 (7,2); 1,157 (2,0); 1,069 (0,5); 0,008 (2,2); 0,000 (62,2); -0,008 (2,5)
Beispiel IT3178: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO): δ= 8,730 (5,4); 8,726 (5,4); 8,701 (10,4); 8,556 (3,7); 8,545 (3,7); 8,483 (0,5); 8,463 (10,3); 8,318 (0,6); 8,268 (5,5); 8,264 (5,4); 7,760 (2,4); 7,754 (3,8); 7,736 (14,8); 7,524 (4,5); 7,505 (2,3); 7,502 (3,8); 4,055 (1,2); 4,037 (3,6); 4,020 (3,7); 4,002 (1,2); 3,460 (1,7); 3,442 (5,0); 3,424 (5,0); 3,405 (1,7); 3,329 (124,3); 2,868 (0,4); 2,858 (1,0); 2,848 (1,4); 2,840 (2,2); 2,830 (2,2); 2,821 (1,4); 2,811 (1,0); 2,802 (0,4); 2,675 (1,1); 2,671 (1,5); 2,667 (1,2); 2,541 (6,3); 2,506 (175,4); 2,502 (223,8); 2,498 (167,1); 2,333 (1,1); 2,329 (1,4); 2,324 (1,1); 1,989 (15,7); 1,235 (0,4); 1,193 (4,2); 1,175 (8,3); 1,157 (5,1); 1,150 (7,5); 1,132 (16,0); 1,113 (7,2); 0,728 (1,4); 0,715 (4,2); 0,710 (5,5);

0,698 (5,2); 0,692 (4,4); 0,681 (1,7); 0,561 (1,8); 0,551 (5,6); 0,545 (5,4); 0,535 (4,6); 0,523 (1,3); 0,146 (0,4); 0,000 (94,7); -0,008 (4,3); -0,150 (0,4)
Beispiel IT3179: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO): δ= 8,862 (9,5); 8,701 (0,4); 8,548 (3,2); 8,537 (3,2); 8,504 (0,4); 8,487 (10,0); 8,482 (5,1); 8,477 (4,7); 8,463 (0,4); 8,317 (1,4); 8,095 (4,8); 8,091 (4,8); 7,769 (2,1); 7,764 (3,9); 7,753 (5,3); 7,748 (11,5); 7,736 (0,7); 7,540 (5,3); 7,533 (1,3); 7,524 (1,3); 7,517 (4,5); 4,055 (1,0); 4,037 (3,2); 4,020 (3,2); 4,002 (1,1); 3,507 (0,3); 3,443 (0,4); 3,424 (0,4); 3,396 (0,5); 3,373 (0,8); 3,332 (779,0); 3,293 (0,7); 3,061 (0,5); 3,042 (1,8); 3,024 (2,1); 3,008 (2,2); 2,995 (0,5); 2,990 (2,0); 2,971 (0,6); 2,870 (0,4); 2,860 (0,9); 2,850 (1,3); 2,842 (2,0); 2,831 (2,1); 2,822 (1,3); 2,813 (1,0); 2,803 (0,4); 2,680 (1,3); 2,676 (2,7); 2,671 (3,7); 2,667 (2,8); 2,584 (1,0); 2,565 (2,6); 2,547 (3,3); 2,542 (5,6); 2,525 (10,0); 2,520 (15,4); 2,511 (205,0); 2,507 (417,5); 2,502 (550,6); 2,498 (403,5); 2,493 (198,2); 2,333 (2,6); 2,329 (3,6); 2,325 (2,7); 1,989 (13,8); 1,298 (0,3); 1,259 (0,5); 1,235 (0,9); 1,193 (3,9); 1,175 (7,6); 1,157 (3,8); 1,132 (0,6); 1,047 (7,2); 1,029 (16,0); 1,010 (6,9); 0,733 (1,3); 0,720 (3,5); 0,715 (5,2); 0,703 (4,7); 0,697 (4,1); 0,685 (1,7); 0,563 (1,7); 0,552 (5,0); 0,546 (4,7); 0,542 (4,4); 0,536 (4,2); 0,524 (1,3); 0,146 (1,1); 0,008 (8,8); 0,000 (281,7); -0,009 (10,6); -0,150 (1,1)
Beispiel IT3180: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO): δ= 9,105 (5,5); 9,100 (4,5); 8,889 (0,7); 8,871 (9,2); 8,581 (4,6); 8,570 (6,0); 8,564 (6,8); 8,559 (5,5); 8,545 (9,1); 8,317 (0,9); 7,817 (0,3); 7,812 (0,3); 7,774 (3,3); 7,768 (4,2); 7,755 (7,5); 7,751 (13,2); 7,553 (4,7); 7,548 (2,1); 7,535 (2,4); 7,530 (3,5); 4,055 (0,8); 4,037 (2,1); 4,020 (2,1); 4,002 (0,7); 3,559 (2,3); 3,541 (6,5); 3,523 (6,4); 3,504 (2,1); 3,334 (39,2); 3,328 (131,0); 2,866 (1,3); 2,856 (1,8); 2,847 (2,5); 2,837 (2,3); 2,829 (1,5); 2,819 (1,0); 2,809 (0,4); 2,676 (2,3); 2,671 (2,5); 2,667 (1,8); 2,621 (0,4); 2,507 (343,0); 2,502 (380,1); 2,498 (256,9); 2,333 (2,1); 2,329 (2,4); 2,324 (1,6); 1,995 (2,3); 1,989 (8,7); 1,298 (0,4); 1,258 (0,6); 1,249 (0,7); 1,236 (1,2); 1,193 (3,8); 1,181 (8,8); 1,175 (7,3); 1,163 (16,0); 1,157 (4,7); 1,144 (6,8); 1,114 (0,6); 0,731 (1,9); 0,719 (5,2); 0,714 (5,7); 0,702 (5,8); 0,696 (4,2); 0,684 (1,6); 0,593 (0,3); 0,563 (2,7); 0,553 (6,7); 0,547 (6,1); 0,538 (4,5); 0,525 (1,3); 0,006 (15,8); 0,000 (61,8); -0,008 (2,7)
Beispiel IT3181: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO): δ= 9,108 (0,4); 9,087 (10,3); 8,892 (5,1); 8,888 (5,2); 8,613 (0,4); 8,591 (10,7); 8,579 (3,8); 8,568 (3,7); 8,407 (5,3); 8,403 (5,3); 7,787 (2,0); 7,781 (4,5); 7,775 (6,6); 7,769 (7,7); 7,765 (6,0); 7,759 (2,3); 7,575 (6,0); 7,564 (1,5); 7,552 (5,0); 4,056 (1,1); 4,038 (3,4); 4,020 (3,4); 4,002 (1,2); 3,330 (39,4); 3,101 (0,5); 3,083 (1,8); 3,065 (2,2); 3,049 (2,3); 3,031 (2,1); 3,012 (0,6); 2,879 (0,4); 2,869 (1,0); 2,860 (1,4); 2,851 (2,1); 2,841 (2,1); 2,833 (1,4); 2,823 (1,0); 2,813 (0,4); 2,676 (0,5); 2,672 (0,6); 2,667 (0,5); 2,601 (0,7); 2,583 (2,1); 2,564 (2,5); 2,549 (2,3); 2,530 (2,5); 2,525 (2,1); 2,507 (69,4); 2,503 (90,4); 2,498 (68,1); 2,334 (0,4); 2,329 (0,6); 2,325 (0,4); 1,989 (14,7); 1,193 (3,9); 1,175 (7,7); 1,158 (3,8); 1,081 (0,4); 1,067 (7,5); 1,048 (16,0); 1,030 (7,2); 0,738 (1,3); 0,725 (4,0); 0,720 (5,5); 0,708 (5,1); 0,702 (4,4); 0,691 (1,8); 0,566 (1,8); 0,555 (5,4); 0,549 (5,2); 0,539 (4,6); 0,527 (1,3); 0,008 (0,6); 0,000 (16,1)
Beispiel IT3182: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO): δ= 9,454 (7,2); 8,884 (10,2); 8,500 (10,2); 8,482 (4,9); 8,478 (5,0); 8,317 (0,4); 8,098 (5,0); 8,093 (5,0); 7,829 (1,5); 7,823 (5,9); 7,821 (7,8); 7,815 (6,3); 7,807 (4,8); 7,801 (2,4); 7,588 (5,9); 7,579 (1,0); 7,574 (1,0); 7,566 (5,1); 4,056 (1,2); 4,038 (3,6); 4,020 (3,6); 4,002 (1,2); 3,329 (62,1); 3,069 (0,5); 3,051 (1,8); 3,032 (2,1); 3,017 (2,3); 2,998 (2,1); 2,980 (0,6); 2,676 (0,6); 2,672 (0,8); 2,667 (0,6); 2,594 (0,6); 2,575 (2,1); 2,557 (2,5); 2,541 (2,4); 2,523 (3,8); 2,520 (3,9); 2,511 (46,1); 2,507 (93,1); 2,503 (122,1); 2,498 (89,1); 2,494 (44,0); 2,334 (0,6); 2,329 (0,8); 2,325 (0,6); 1,989 (15,8); 1,622 (2,4); 1,607 (5,9); 1,601 (6,4); 1,588 (2,7); 1,290 (2,8); 1,276 (5,9); 1,270 (6,4); 1,255 (2,4); 1,235 (0,5); 1,193 (4,2); 1,175 (8,3); 1,157 (4,1); 1,134 (0,3); 1,051 (7,3); 1,033 (16,0); 1,014 (7,1); 0,008 (0,8); 0,000 (23,6); -0,008 (0,9)
Beispiel IT3183: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO): δ= 9,464 (4,6); 8,733 (3,3); 8,729 (3,6); 8,723 (6,9); 8,477 (6,6); 8,270 (3,3); 8,266 (3,3); 7,820 (1,3); 7,814 (3,0); 7,808 (4,3); 7,803 (4,8); 7,798 (3,7); 7,792 (1,4); 7,573 (4,0); 7,562 (0,9); 7,551 (3,4); 4,055 (1,2); 4,038 (3,6); 4,020 (3,7); 4,002 (1,2); 3,465 (0,9); 3,447 (2,9); 3,429 (3,0); 3,410 (1,0); 3,329 (48,5); 2,676 (0,4); 2,671 (0,6); 2,667 (0,5); 2,525 (1,6); 2,511 (35,4); 2,507 (71,4); 2,502 (93,1); 2,498 (68,1); 2,494 (33,4); 2,333 (0,4); 2,329 (0,6); 2,325 (0,4); 1,989 (16,0); 1,614 (1,6); 1,600 (3,9); 1,593 (4,1); 1,580 (1,7); 1,290 (1,9); 1,277 (4,0); 1,270 (4,3); 1,256 (1,6); 1,235 (0,5); 1,193 (4,4); 1,175 (8,8); 1,157 (4,9); 1,152 (5,1); 1,134 (10,7); 1,115 (4,8); 0,008 (0,6); 0,000 (19,6); -0,009 (0,7)
Beispiel IT3184: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,222 (1,1); 8,212 (14,6); 8,193 (0,9); 8,163 (0,7); 8,151 (14,2); 8,150 (13,6); 7,984 (5,6); 7,968 (5,6); 7,937 (0,6); 7,860 (0,5); 7,837 (0,5); 7,699 (8,7); 7,694 (11,4); 7,666 (5,9); 7,660 (4,9); 7,645 (6,7); 7,639 (6,1); 7,588 (0,8); 7,523 (0,3); 7,480 (10,7); 7,459 (8,5); 6,928 (2,6); 5,448 (5,4); 2,881 (0,7); 2,871 (1,9); 2,862 (2,7); 2,853 (4,3); 2,844 (4,3); 2,835 (2,8); 2,825 (2,1); 2,816 (0,7); 2,474 (0,9); 2,469 (1,8); 2,464 (2,4); 2,460 (1,9); 2,455 (1,0); 2,293 (0,4); 2,270 (0,7); 2,266 (0,7); 2,246 (1,0); 2,227 (1,0); 2,160 (875,2); 2,121 (3,1); 2,114 (4,2); 2,108 (5,3); 2,102 (3,8); 2,096 (2,1); 2,036 (0,6); 2,018 (0,8); 1,998 (0,9); 1,965 (19,7); 1,959 (49,7); 1,953 (311,9); 1,947 (575,9); 1,941 (786,4); 1,935 (548,9); 1,929 (287,9); 1,883 (0,6); 1,782 (1,8); 1,775 (3,4); 1,769 (4,7); 1,763 (3,2); 1,757 (1,8); 1,525 (0,4); 1,385 (0,3); 1,372 (0,5); 1,359 (0,4); 1,340 (1,4); 1,335 (0,8); 1,285 (2,9); 1,270 (16,0); 1,204 (0,3); 0,918 (0,4); 0,899 (0,9); 0,882 (2,1); 0,864 (1,1); 0,832 (0,4); 0,795 (2,4); 0,783 (7,1); 0,777 (9,7); 0,765 (9,8); 0,760 (7,5); 0,747 (3,3); 0,726 (0,5); 0,708 (0,5); 0,652 (0,5); 0,643 (0,5); 0,627 (0,4); 0,613 (3,3); 0,601 (8,2); 0,595 (8,8); 0,591 (7,8); 0,586 (7,8); 0,573 (2,3); 0,536 (0,3); 0,520 (0,4); 0,478 (0,3); 0,392 (0,4); 0,387 (0,4); 0,008 (0,7); 0,000 (20,9); -0,009 (1,0)
Beispiel IT3185: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 17,517 (0,4); 15,219 (0,3); 14,973 (0,3); 13,920 (0,3); 8,404 (0,4); 8,394 (0,4); 8,224 (16,0); 8,208 (0,8); 8,165 (12,9); 7,986 (5,2); 7,970 (5,1); 7,938 (1,2); 7,864 (0,5); 7,840 (0,4); 7,747 (7,8); 7,741 (10,5); 7,715 (5,2); 7,710 (4,3); 7,694 (6,0); 7,689 (5,7); 7,654 (3,5); 7,624 (1,2); 7,601 (2,1); 7,594 (1,3); 7,590 (2,0); 7,564 (1,9); 7,541 (1,1); 7,513 (9,5); 7,492 (7,5); 7,292 (0,7); 7,282 (0,4); 7,270 (0,7); 7,201 (0,4); 7,176 (1,6); 7,168 (0,4); 7,151 (0,4); 7,064 (0,5); 7,045 (0,4); 6,914 (0,4); 6,892 (0,4); 6,881 (0,8); 6,859 (0,6); 6,178 (0,3); 6,160 (0,4); 6,111 (0,4); 6,099 (0,4); 6,067 (0,4); 6,042 (0,4); 6,038 (0,4); 6,017 (0,4); 5,640 (0,4); 5,594 (0,3); 5,540 (0,3); 5,516 (0,4); 5,485 (0,4); 5,427 (0,3); 5,373 (0,3); 4,507 (0,6); 4,491 (0,6); 4,068 (1,3); 4,050 (1,1); 4,032 (0,5); 3,789 (0,5); 3,776 (1,0); 3,758 (2,9); 3,656 (0,4); 3,149 (0,4); 3,128 (0,4); 2,720 (13,7); 2,656 (0,5); 2,492 (0,9); 2,475 (2,8); 2,470 (6,1); 2,465 (9,0); 2,461 (6,7); 2,456 (3,4); 2,285 (0,4); 2,264 (0,7); 2,247 (1,5); 2,237 (1,1); 2,171 (2483,4); 2,121 (7,1); 2,114 (9,5); 2,108 (11,9); 2,102 (8,8); 2,096 (5,2); 2,075 (1,8); 2,032 (0,9); 2,020 (0,7); 2,011 (0,6); 1,972 (8,4); 1,965 (39,5); 1,959 (102,1); 1,953 (642,3); 1,947 (1199,8); 1,941 (1645,9); 1,935 (1167,9); 1,929 (619,1); 1,818 (1,3); 1,782 (4,2); 1,775 (7,5); 1,769 (10,3); 1,763 (7,4); 1,757 (4,5); 1,722 (0,9); 1,708 (0,9); 1,696 (0,9); 1,688 (0,9);

1,674 (0,7); 1,638 (0,8); 1,597 (4,8); 1,583 (11,6); 1,576 (12,0); 1,562 (6,3); 1,543 (0,8); 1,522 (1,2); 1,501 (0,6); 1,472 (0,6); 1,437 (9,0); 1,402 (1,2); 1,361 (6,2); 1,348 (11,9); 1,341 (12,8); 1,327 (7,6); 1,311 (3,5); 1,269 (8,7); 1,222 (1,9); 1,204 (3,2); 1,186 (1,7); 1,164 (0,6); 1,154 (0,6); 1,145 (0,5); 1,131 (0,6); 1,109 (0,6); 1,095 (0,6); 1,091 (0,6); 1,047 (0,5); 1,040 (0,4); 1,031 (0,4); 1,009 (0,4); 0,987 (0,4); 0,976 (0,4); 0,952 (0,4); 0,945 (0,5); 0,897 (0,8); 0,881 (1,6); 0,855 (1,3); 0,838 (0,9); 0,824 (0,5); 0,806 (0,5); 0,797 (0,4); 0,776 (0,4); 0,766 (0,5); 0,739 (0,4); 0,636 (0,3); 0,526 (0,3); 0,147 (0,4); 0,008 (2,5); 0,000 (80,2); -0,020 (0,5); -0,121 (0,3); -0,149 (0,4); -0,213 (0,4); -2,478 (0,3); -3,017 (0,3)
Beispiel IT3186: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,202 (8,0); 8,190 (8,4); 7,927 (0,7); 7,858 (4,8); 7,731 (2,7); 7,708 (2,9); 7,690 (4,8); 7,685 (6,1); 7,657 (2,8); 7,652 (2,5); 7,637 (3,4); 7,632 (3,2); 7,590 (0,8); 7,477 (5,0); 7,456 (4,0); 6,984 (0,3); 6,951 (1,9); 6,041 (0,3); 5,521 (0,4); 5,491 (0,4); 5,466 (0,3); 3,874 (0,9); 3,056 (0,3); 2,890 (4,6); 2,872 (1,0); 2,863 (1,5); 2,853 (2,1); 2,844 (2,2); 2,835 (1,7); 2,825 (1,1); 2,799 (0,4); 2,772 (4,2); 2,711 (0,4); 2,684 (0,4); 2,671 (0,4); 2,662 (0,4); 2,619 (0,4); 2,601 (1,1); 2,583 (0,4); 2,543 (0,5); 2,522 (0,5); 2,505 (0,6); 2,466 (6,3); 2,351 (0,9); 2,310 (1,3); 2,298 (1,3); 2,179 (2377,2); 2,121 (5,6); 2,115 (6,3); 2,108 (7,1); 2,102 (5,6); 2,043 (0,8); 2,018 (1,0); 1,953 (344,9); 1,947 (623,4); 1,941 (840,7); 1,935 (641,3); 1,929 (374,2); 1,827 (0,6); 1,781 (2,1); 1,776 (3,6); 1,770 (4,8); 1,763 (3,6); 1,758 (2,2); 1,437 (16,0); 1,311 (0,4); 1,283 (0,5); 1,268 (0,9); 0,794 (1,2); 0,777 (5,1); 0,764 (5,1); 0,747 (1,8); 0,738 (0,4); 0,612 (1,5); 0,600 (4,9); 0,594 (5,3); 0,586 (4,9); 0,573 (1,5); 0,000 (28,5)
Beispiel IT3187: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 19,987 (0,6); 8,214 (12,6); 8,200 (13,9); 7,859 (6,8); 7,738 (9,0); 7,733 (14,7); 7,707 (9,2); 7,701 (5,6); 7,686 (6,6); 7,680 (5,9); 7,610 (3,2); 7,587 (1,7); 7,510 (9,9); 7,489 (8,2); 7,448 (0,5); 2,469 (1,8); 2,464 (2,6); 2,459 (2,0); 2,157 (1156,2); 2,120 (5,2); 2,114 (6,3); 2,108 (7,5); 2,102 (5,6); 2,096 (3,3); 1,965 (26,5); 1,959 (71,5); 1,953 (401,8); 1,947 (750,3); 1,941 (1019,6); 1,935 (723,9); 1,928 (383,2); 1,781 (2,7); 1,775 (4,6); 1,769 (6,2); 1,763 (4,5); 1,757 (2,6); 1,634 (0,6); 1,597 (4,4); 1,583 (11,2); 1,576 (11,2); 1,563 (6,0); 1,523 (1,0); 1,437 (16,0); 1,401 (1,1); 1,361 (6,0); 1,347 (11,3); 1,341 (12,0); 1,326 (4,9); 1,270 (8,5); 0,882 (2,0); 0,857 (2,2); 0,000 (34,6)
Beispiel IT3188: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,340 (9,9); 8,272 (16,0); 8,192 (0,3); 7,761 (9,7); 7,755 (12,3); 7,742 (0,4); 7,737 (0,3); 7,727 (6,7); 7,721 (5,0); 7,706 (7,8); 7,700 (6,5); 7,569 (4,5); 7,524 (11,5); 7,503 (9,3); 5,447 (0,8); 2,576 (0,8); 2,572 (0,8); 2,250 (0,4); 2,139 (89,4); 2,120 (0,7); 2,114 (0,7); 2,108 (0,9); 2,102 (0,6); 2,095 (0,3); 1,965 (3,2); 1,959 (8,4); 1,953 (52,4); 1,947 (96,8); 1,940 (132,2); 1,934 (91,5); 1,928 (47,5); 1,781 (0,3); 1,775 (0,6); 1,769 (0,8); 1,763 (0,6); 1,604 (5,0); 1,590 (12,7); 1,583 (12,8); 1,569 (6,7); 1,529 (0,9); 1,406 (0,8); 1,366 (6,8); 1,352 (12,5); 1,346 (13,2); 1,331 (5,3); 1,309 (0,5); 1,293 (0,9); 1,285 (1,5); 1,269 (7,2); 0,898 (0,3); 0,881 (0,9); 0,864 (0,4); 0,000 (3,9)
Beispiel IT3189: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,726 (0,3); 8,720 (0,4); 8,701 (10,1); 8,694 (10,3); 8,265 (0,8); 8,253 (16,0); 8,246 (15,9); 8,062 (0,6); 8,051 (11,3); 8,045 (11,1); 7,978 (7,4); 7,766 (6,5); 7,051 (2,2); 5,449 (0,6); 4,068 (0,4); 4,050 (0,4); 3,024 (0,4); 2,888 (0,6); 2,878 (1,7); 2,869 (2,5); 2,860 (3,8); 2,851 (3,8); 2,842 (2,5); 2,833 (1,8); 2,823 (0,6); 2,729 (0,6); 2,473 (0,5); 2,468 (0,9); 2,464 (1,2); 2,459 (0,9); 2,454 (0,5); 2,166 (234,9); 2,121 (0,8); 2,114 (1,2); 2,108 (1,5); 2,102 (1,1); 2,096 (0,6); 2,087 (0,5); 2,035 (0,4); 2,017 (0,7); 1,998 (0,6); 1,972 (2,6); 1,965 (5,7); 1,959 (13,8); 1,953 (85,4); 1,947 (157,6); 1,941 (215,5); 1,935 (150,1); 1,928 (78,1); 1,782 (0,5); 1,775 (0,9); 1,769 (1,3); 1,763 (0,9); 1,757 (0,5); 1,437 (3,4); 1,308 (0,3); 1,268 (8,7); 1,222 (0,6); 1,204 (1,0); 1,186 (0,5); 0,898 (0,4); 0,881 (1,1); 0,864 (0,5); 0,810 (2,1); 0,797 (6,2); 0,792 (8,4); 0,779 (8,6); 0,774 (6,4); 0,762 (2,8); 0,740 (0,4); 0,722 (0,4); 0,662 (0,3); 0,652 (0,4); 0,622 (2,8); 0,610 (7,3); 0,604 (7,7); 0,600 (6,9); 0,595 (6,8); 0,582 (2,1); 0,543 (0,4); 0,391 (0,3); 0,386 (0,3); 0,008 (1,2); 0,000 (38,3); -0,009 (1,6)
Beispiel IT3190: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 9,487 (7,1); 9,105 (5,1); 9,102 (5,1); 8,887 (9,5); 8,557 (11,6); 8,317 (0,4); 7,826 (4,4); 7,820 (6,3); 7,815 (6,9); 7,810 (5,3); 7,602 (5,1); 7,591 (1,5); 7,580 (4,2); 4,055 (1,3); 4,038 (3,8); 4,020 (3,8); 4,002 (1,3); 3,560 (1,9); 3,542 (6,2); 3,523 (6,3); 3,505 (2,1); 3,328 (157,1); 2,671 (1,6); 2,506 (190,5); 2,502 (243,8); 2,329 (1,7); 1,989 (16,0); 1,617 (2,3); 1,602 (6,1); 1,596 (6,6); 1,583 (2,7); 1,296 (2,7); 1,282 (6,2); 1,276 (6,6); 1,261 (2,3); 1,193 (4,5); 1,181 (7,3); 1,175 (10,1); 1,163 (14,9); 1,158 (7,2); 1,145 (6,8); 0,000 (25,1)
Beispiel IT3191: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 9,426 (3,3); 8,594 (4,6); 8,359 (4,8); 8,317 (0,5); 7,785 (4,0); 7,779 (2,8); 7,770 (2,1); 7,765 (1,1); 7,545 (2,7); 7,537 (0,6); 7,530 (0,5); 7,522 (2,3); 7,351 (6,5); 3,331 (366,6); 3,015 (2,0); 2,997 (6,6); 2,979 (6,7); 2,960 (2,1); 2,676 (1,1); 2,671 (1,6); 2,667 (1,2); 2,524 (4,4); 2,511 (86,9); 2,507 (177,3); 2,502 (236,3); 2,498 (176,3); 2,493 (90,0); 2,333 (1,1); 2,329 (1,5); 2,324 (1,2); 1,611 (1,1); 1,597 (2,7); 1,590 (2,9); 1,577 (1,2); 1,398 (15,1); 1,285 (1,3); 1,271 (2,7); 1,264 (2,9); 1,250 (1,1); 1,195 (7,5); 1,177 (16,0); 1,158 (7,3); 0,146 (1,7); 0,008 (13,5); 0,000 (371,8); -0,008 (16,5); -0,150 (1,7)
Beispiel IT3192: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 9,435 (6,5); 8,687 (9,2); 8,408 (9,3); 8,317 (1,5); 7,796 (4,7); 7,787 (4,3); 7,780 (6,0); 7,775 (6,7); 7,770 (5,2); 7,764 (2,0); 7,559 (5,8); 7,548 (5,4); 7,537 (5,3); 3,330 (735,7); 3,123 (0,7); 3,082 (1,9); 3,063 (6,4); 3,045 (6,6); 3,027 (2,0); 2,838 (0,6); 2,676 (2,8); 2,671 (4,1); 2,667 (3,1); 2,525 (10,0); 2,520 (15,7); 2,511 (220,9); 2,507 (459,4); 2,502 (612,6); 2,498 (450,6); 2,493 (223,7); 2,333 (2,9); 2,329 (4,0); 2,324 (3,0); 1,614 (2,1); 1,600 (5,3); 1,593 (5,7); 1,580 (2,4); 1,284 (2,5); 1,271 (5,3); 1,264 (5,7); 1,250 (2,1); 1,205 (7,5); 1,187 (16,0); 1,168 (7,5); 0,146 (1,8); 0,008 (13,1); 0,000 (404,0); -0,009 (15,5); -0,150 (1,8)
Beispiel IT3193: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 9,458 (0,3); 8,777 (8,3); 8,542 (3,2); 8,531 (3,0); 8,504 (0,3); 8,462 (8,6); 8,337 (3,7); 8,317 (1,8); 7,962 (3,6); 7,750 (2,0); 7,745 (3,2); 7,738 (1,0); 7,726 (12,9); 7,717 (1,1); 7,710 (1,7); 7,692 (1,1); 7,659 (1,1); 7,653 (0,9); 7,569 (1,2); 7,548 (1,0); 7,529 (3,7); 7,526 (2,4); 7,510 (2,0); 7,507 (3,2); 7,484 (1,3); 7,465 (0,8); 7,420 (0,5); 7,402 (0,6); 7,058 (1,6); 6,924 (3,7); 6,789 (1,9); 4,055 (1,2); 4,037 (3,6); 4,020 (3,6); 4,002 (1,2); 3,328 (98,6); 3,305 (0,8); 2,858 (0,9); 2,849 (1,2); 2,840 (1,9); 2,830 (1,9); 2,821 (1,3); 2,812 (0,9); 2,801 (0,4); 2,676 (1,1); 2,671 (1,6); 2,667 (1,2); 2,662 (0,6); 2,524 (3,6); 2,511 (83,9); 2,507 (175,0); 2,502 (233,7); 2,498 (171,2); 2,493 (84,1); 2,338 (0,5); 2,333 (1,1); 2,329 (1,5); 2,324 (1,1); 1,989 (16,0); 1,234 (0,8); 1,193 (4,2); 1,175 (8,4); 1,157 (4,2); 0,729 (1,2); 0,716 (3,5); 0,711 (4,9); 0,699 (4,5); 0,693 (4,0); 0,682 (1,6); 0,568 (0,4); 0,559 (1,8); 0,549 (5,1); 0,543 (4,5); 0,534 (3,7); 0,522 (1,2); 0,146 (0,4); 0,008 (2,5); 0,000 (83,8); -0,009 (3,2); -0,150 (0,4)
Beispiel IT3194: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,349 (9,1); 8,304 (0,4); 8,286 (14,8); 8,241 (0,3); 7,801 (9,7); 7,795 (11,3); 7,718 (6,0); 7,712 (5,6); 7,697 (7,3); 7,692 (6,9); 7,665 (0,5); 7,647 (0,7); 7,643 (0,7); 7,635 (0,5); 7,617 (0,6); 7,614 (0,7); 7,584 (1,1); 7,541 (0,6); 7,522 (11,4); 7,501 (9,2); 7,484 (0,5); 7,453

(4,1); 7,422 (0,4); 7,236 (0,4); 7,215 (0,3); 6,837 (0,5); 6,673 (0,4); 6,617 (1,3); 6,575 (0,4); 5,973 (0,3); 5,954 (0,3); 5,896 (1,4); 5,447 (5,8); 3,817 (0,8); 3,769 (0,4); 3,550 (1,0); 3,545 (0,9); 2,579 (0,4); 2,575 (0,5); 2,269 (0,4); 2,253 (0,5); 2,140 (512,8); 2,120 (7,2); 2,114 (6,9); 2,108 (7,9); 2,102 (5,5); 2,095 (3,1); 1,965 (25,3); 1,959 (63,5); 1,953 (411,4); 1,947 (768,8); 1,940 (1065,1); 1,934 (761,0); 1,928 (406,5); 1,849 (1,2); 1,799 (0,7); 1,781 (2,8); 1,775 (4,8); 1,769 (6,7); 1,763 (4,7); 1,756 (2,7); 1,728 (0,5); 1,714 (0,5); 1,699 (0,5); 1,677 (0,4); 1,666 (0,5); 1,649 (0,4); 1,628 (0,4); 1,580 (0,4); 1,570 (0,4); 1,556 (0,4); 1,515 (0,6); 1,477 (5,4); 1,466 (14,4); 1,457 (16,0); 1,447 (6,5); 1,407 (0,7); 1,398 (0,5); 1,386 (0,8); 1,366 (0,5); 1,340 (6,0); 1,305 (1,0); 1,285 (8,1); 1,270 (5,0); 1,247 (0,7); 1,230 (0,5); 1,217 (0,6); 1,199 (0,5); 1,190 (0,6); 1,185 (0,7); 1,145 (6,1); 1,135 (15,7); 1,126 (14,8); 1,115 (5,4); 1,076 (0,6); 1,063 (0,4); 0,994 (0,4); 0,976 (0,8); 0,958 (0,5); 0,951 (0,4); 0,930 (0,4); 0,923 (0,4); 0,882 (1,1); 0,856 (0,9); 0,842 (0,7); 0,783 (0,4); 0,771 (0,4); 0,764 (0,5); 0,735 (0,4); 0,597 (0,3); 0,564 (0,4); 0,008 (1,0); 0,000 (32,8)
Beispiel IT3195: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 9,457 (8,1); 8,920 (11,3); 8,511 (11,3); 8,325 (5,6); 8,319 (6,1); 8,030 (5,3); 7,802 (8,5); 7,797 (7,4); 7,789 (5,4); 7,784 (3,0); 7,591 (6,0); 7,582 (1,3); 7,569 (5,0); 4,037 (0,6); 4,019 (0,6); 3,329 (278,3); 3,090 (0,5); 3,071 (1,9); 3,053 (2,4); 3,037 (2,5); 3,019 (2,1); 3,000 (0,7); 2,675 (3,1); 2,671 (4,3); 2,667 (3,5); 2,597 (0,4); 2,506 (494,1); 2,502 (653,4); 2,498 (511,0); 2,470 (6,8); 2,452 (3,7); 2,434 (2,4); 2,416 (1,0); 2,333 (3,0); 2,329 (4,1); 2,325 (3,3); 1,989 (2,4); 1,621 (2,6); 1,607 (6,7); 1,600 (7,6); 1,587 (3,1); 1,397 (1,3); 1,335 (0,4); 1,327 (0,3); 1,297 (0,8); 1,286 (3,2); 1,273 (7,0); 1,266 (7,6); 1,252 (3,2); 1,235 (5,1); 1,193 (0,7); 1,175 (1,3); 1,157 (0,7); 1,107 (0,4); 0,982 (7,4); 0,964 (16,0); 0,945 (7,3); 0,854 (0,5); 0,835 (0,3); 0,000 (20,8)
Beispiel IT3196: ^{1}HNMR (601,6 MHz, CD3CN):
δ= 8,223 (0,5); 8,218 (0,5); 8,045 (0,3); 8,041 (0,3); 2,621 (0,7); 2,150 (4,8); 1,948 (1,3); 1,944 (2,2); 1,940 (3,2); 1,936 (2,2); 1,932 (1,1); 1,135 (16,0); 0,000 (0,9)
Beispiel IT3197: ^{1}HNMR (601,6 MHz, CD3CN):
δ= 8,765 (7,5); 8,761 (7,5); 8,2493 (9,5); 8,2486 (9,9); 8,230 (8,0); 8,115 (8,0); 8,111 (8,0); 8,038 (4,4); 7,992 (4,5); 7,394 (1,5); 3,844 (16,0); 3,552 (11,2); 3,542 (11,1); 3,312 (0,7); 3,303 (0,7); 2,172 (78,0); 2,155 (28,3); 2,088 (0,6); 2,084 (0,8); 2,080 (0,6); 1,998 (2,0); 1,989 (5,4); 1,985 (7,5); 1,982 (52,9); 1,977 (98,7); 1,973 (145,4); 1,969 (98,4); 1,965 (48,4); 1,956 (0,7); 1,863 (0,5); 1,859 (0,8); 1,854 (0,6); 1,312 (2,7); 1,303 (8,1); 1,299 (8,0); 1,291 (3,5); 1,266 (0,4); 1,192 (0,4); 1,166 (3,5); 1,158 (7,9); 1,154 (7,9); 1,146 (2,6)
Beispiel IT3198: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 9,484 (3,8); 9,467 (0,6); 8,776 (0,9); 8,753 (5,3); 8,574 (0,6); 8,561 (8,6); 8,509 (5,3); 8,491 (0,8); 8,317 (1,8); 8,178 (0,4); 7,782 (7,1); 7,778 (3,2); 7,765 (2,2); 7,759 (1,3); 7,579 (2,8); 7,557 (2,4); 4,049 (0,4); 3,497 (0,3); 3,479 (0,7); 3,461 (0,7); 3,413 (1,0); 3,395 (1,5); 3,377 (1,6); 3,329 (582,9); 3,287 (1,0); 2,676 (4,0); 2,671 (5,5); 2,667 (4,1); 2,524 (14,3); 2,507 (629,0); 2,502 (826,7); 2,498 (606,0); 2,333 (3,8); 2,329 (5,2); 2,324 (3,9); 1,614 (1,3); 1,600 (3,4); 1,593 (3,7); 1,580 (1,5); 1,289 (1,5); 1,276 (3,3); 1,269 (3,6); 1,255 (1,3); 1,237 (0,4); 1,150 (0,4); 1,126 (0,7); 1,108 (8,3); 1,089 (16,0); 1,071 (7,0); 0,008 (0,5); 0,000 (18,9); -0,008 (0,7)
Beispiel IT3199: ^{1}HNMR (400,1 MHz, d_6DMSO):
d= 8,86 (0,0328); 8,85 (0,0664); 8,56 (0,0471);8,51 (0,0250);8,18 (0,0290);8,17 (0,0298);8,09 (0,0245);3,47 (0,0401);3,45 (0,0407);3,31 (0,7767);2,54 (0,3233);2,50 (0,3250);2,50 (0,4400);2,50 (0,3578);1,25 (0,0306);1,25 (0,0369);1,15 (0,0210);1,14 (0,0347);1,13 (0,0321);0,00 (1,0000)
Beispiel IT3200: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,745 (8,9); 8,739 (8,9); 8,566 (1,6); 8,560 (1,6); 8,264 (13,9); 8,256 (14,3); 8,244 (0,7); 8,115 (9,6); 8,109 (9,4); 8,056 (1,8); 8,050 (1,7); 7,998 (0,4); 7,983 (7,2); 7,980 (7,2); 7,767 (6,3); 7,690 (2,3); 7,666 (0,6); 7,587 (0,3); 5,448 (3,1); 3,724 (0,8); 3,071 (0,5); 2,882 (0,5); 2,626 (0,7); 2,603 (0,5); 2,468 (0,4); 2,463 (0,5); 2,458 (0,4); 2,152 (189,2); 2,120 (1,4); 2,114 (1,8); 2,108 (2,1); 2,102 (1,5); 2,096 (0,8); 1,965 (8,9); 1,959 (23,8); 1,953 (126,4); 1,947 (227,5); 1,941 (305,0); 1,935 (212,6); 1,928 (110,8); 1,868 (0,3); 1,781 (0,8); 1,775 (1,4); 1,769 (1,9); 1,763 (1,3); 1,757 (0,7); 1,615 (3,9); 1,600 (10,0); 1,593 (10,8); 1,580 (6,7); 1,571 (2,5); 1,557 (1,3); 1,540 (0,7); 1,410 (0,6); 1,386 (0,4); 1,370 (5,3); 1,356 (10,0); 1,350 (10,4); 1,335 (5,3); 1,325 (2,3); 1,310 (1,1); 1,297 (0,5); 1,285 (0,7); 1,270 (2,4); 1,202 (0,6); 1,134 (16,0); 0,882 (0,4); 0,008 (0,5); 0,000 (15,0); -0,008 (0,8)
Beispiel IT3201: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 9,467 (2,2); 8,775 (3,1); 8,578 (1,5); 8,573 (1,5); 8,490 (3,1); 8,177 (1,4); 7,800 (0,6); 7,795 (1,2); 7,787 (1,8); 7,782 (2,4); 7,778 (1,9); 7,578 (1,7); 7,555 (1,5); 3,498 (0,6); 3,479 (1,9); 3,461 (1,9); 3,443 (0,6); 3,330 (198,5); 2,676 (0,7); 2,671 (1,0); 2,667 (0,7); 2,524 (2,5); 2,507 (107,2); 2,502 (141,8); 2,498 (106,1); 2,333 (0,7); 2,329 (0,9); 2,325 (0,7); 1,989 (0,4); 1,614 (0,7); 1,600 (1,8); 1,593 (1,9); 1,580 (0,8); 1,398 (16,0); 1,287 (0,8); 1,274 (1,8); 1,267 (2,0); 1,253 (0,7); 1,235 (0,3); 1,126 (2,1); 1,108 (4,7); 1,089 (2,1); 0,146 (0,9); 0,008 (7,4); 0,000 (188,9); -0,008 (8,7); -0,150 (0,9)
Beispiel IT3202: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 9,428 (4,8); 8,626 (0,4); 8,603 (6,6); 8,357 (6,9); 8,316 (0,6); 7,790 (1,3); 7,785 (2,8); 7,777 (4,1); 7,772 (5,1); 7,768 (4,0); 7,562 (3,3); 7,548 (3,9); 7,537 (0,8); 7,525 (3,2); 7,428 (3,2); 3,343 (390,5); 2,991 (1,5); 2,973 (4,8); 2,955 (5,1); 2,937 (1,8); 2,676 (1,0); 2,672 (1,3); 2,668 (1,0); 2,507 (163,2); 2,503 (208,0); 2,499 (152,2); 2,334 (1,0); 2,330 (1,3); 2,325 (0,9); 2,188 (1,0); 2,100 (16,0); 2,075 (0,5); 1,613 (1,6); 1,598 (4,1); 1,592 (4,5); 1,579 (2,0); 1,284 (2,0); 1,270 (4,3); 1,263 (4,5); 1,249 (1,6); 1,232 (0,4); 1,214 (0,7); 1,192 (5,5); 1,173 (11,4); 1,155 (5,2); 0,146 (0,5); 0,008 (4,9); 0,000 (117,1); -0,008 (4,9); -0,150 (0,5)
Beispiel IT3203: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 8,601 (0,6); 8,581 (6,8); 8,520 (2,4); 8,509 (2,4); 8,343 (7,1); 8,137 (0,8); 7,732 (1,5); 7,726 (2,4); 7,707 (9,8); 7,561 (3,2); 7,499 (2,9); 7,477 (2,5); 7,427 (3,2); 3,329 (31,4); 2,989 (1,5); 2,971 (5,0); 2,952 (5,1); 2,940 (0,7); 2,934 (1,6); 2,922 (0,4); 2,854 (0,6); 2,844 (0,9); 2,836 (1,4); 2,826 (1,4); 2,818 (1,0); 2,808 (0,7); 2,676 (0,5); 2,671 (0,7); 2,667 (0,5); 2,524 (1,7); 2,511 (39,4); 2,507 (80,4); 2,502 (106,1); 2,498 (78,2); 2,333 (0,5); 2,329 (0,7); 2,324 (0,5); 2,187 (1,2); 2,116 (0,8); 2,101 (16,0); 2,075 (1,0); 1,909 (0,5); 1,230 (0,4); 1,212 (0,9); 1,190 (5,7); 1,172 (11,9); 1,154 (5,4); 0,726 (0,9); 0,713 (2,6); 0,708 (3,6); 0,696 (3,5); 0,690 (3,0); 0,679 (1,3); 0,560 (1,2); 0,550 (3,7); 0,544 (3,5); 0,534 (3,0); 0,522 (0,9); 0,008 (2,2); 0,000 (67,6); -0,008 (2,8)
Beispiel IT3204: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 8,968 (6,3); 8,871 (0,8); 8,864 (4,0); 8,858 (3,7); 8,617 (5,8); 8,558 (2,8); 8,554 (2,9); 8,469 (3,0); 8,464 (2,8); 8,379 (3,8); 8,373 (3,6); 8,318 (1,3); 8,261 (0,5); 8,255 (0,6); 4,155 (1,4); 3,332 (210,2); 3,309 (0,8); 3,036 (16,0); 3,014 (1,0); 2,886 (0,9); 2,809 (0,3); 2,798 (0,7); 2,791 (0,8); 2,782 (1,3); 2,772 (1,0); 2,762 (3,0); 2,727 (0,4); 2,676 (0,8); 2,672 (1,1); 2,667 (0,9); 2,541 (0,4); 2,525 (2,7); 2,511 (61,5);

2,507 (127,7); 2,503 (170,1); 2,498 (126,6); 2,494 (64,4); 2,334 (0,8); 2,329 (1,1); 2,325 (0,9); 2,075 (2,2); 1,169 (0,5); 0,836 (0,3); 0,817 (0,4); 0,775 (0,4); 0,608 (0,4); 0,587 (2,1); 0,579 (2,6); 0,570 (1,1); 0,562 (0,6); 0,544 (1,0); 0,532 (2,1); 0,515 (2,1); 0,496 (0,5); 0,146 (0,4); 0,008 (2,9); 0,000 (95,4); -0,008 (4,6); -0,150 (0,4)
Beispiel IT3205: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 8,991 (0,5); 8,972 (14,8); 8,876 (0,4); 8,861 (9,9); 8,855 (10,1); 8,716 (4,8); 8,706 (5,3); 8,672 (0,4); 8,661 (0,4); 8,642 (0,8); 8,631 (14,8); 8,562 (7,0); 8,557 (7,2); 8,471 (7,3); 8,467 (6,8); 8,318 (8,7); 8,264 (0,7); 8,258 (0,8); 8,247 (9,6); 8,240 (9,4); 7,948 (0,4); 7,942 (0,4); 7,795 (0,4); 4,156 (4,3); 3,329 (163,2); 3,306 (4,7); 2,887 (0,6); 2,877 (1,4); 2,867 (2,0); 2,859 (3,0); 2,849 (3,2); 2,840 (2,2); 2,830 (1,7); 2,821 (0,8); 2,676 (1,6); 2,671 (2,1); 2,667 (1,6); 2,525 (5,4); 2,507 (239,7); 2,502 (316,6); 2,498 (235,7); 2,333 (1,4); 2,329 (2,0); 2,325 (1,5); 2,076 (16,0); 0,760 (1,9); 0,747 (5,6); 0,743 (7,6); 0,730 (7,4); 0,725 (6,3); 0,713 (2,8); 0,570 (2,3); 0,559 (7,1); 0,553 (7,0); 0,550 (6,7); 0,544 (6,4); 0,532 (2,3); 0,495 (0,4); 0,146 (0,8); 0,008 (5,8); 0,000 (177,1); -0,008 (8,0); -0,150 (0,8)
Beispiel IT3206: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 9,449 (4,9); 8,859 (6,6); 8,459 (6,7); 8,318 (4,2); 8,038 (3,0); 7,936 (3,0); 7,803 (3,4); 7,799 (4,7); 7,793 (4,8); 7,787 (3,7); 7,781 (1,6); 7,581 (4,2); 7,570 (0,9); 7,558 (3,6); 3,733 (0,3); 3,690 (0,4); 3,329 (896,7); 3,282 (0,7); 2,981 (1,3); 2,963 (1,5); 2,947 (1,5); 2,929 (1,4); 2,910 (0,5); 2,676 (7,6); 2,671 (10,3); 2,667 (7,7); 2,525 (28,4); 2,511 (589,6); 2,507 (1188,5); 2,502 (1555,2); 2,498 (1146,1); 2,493 (578,6); 2,389 (1,6); 2,370 (1,8); 2,354 (1,8); 2,333 (8,0); 2,329 (10,4); 2,324 (7,7); 2,296 (16,0); 1,909 (0,6); 1,621 (1,6); 1,607 (4,0); 1,600 (4,3); 1,587 (2,0); 1,282 (2,1); 1,269 (3,9); 1,262 (4,2); 1,248 (1,6); 1,147 (0,8); 0,945 (4,8); 0,927 (10,5); 0,908 (4,6); 0,146 (3,6); 0,008 (30,4); 0,000 (880,4); -0,008 (42,5); -0,150 (3,7)
Beispiel IT3207: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 9,624 (6,5); 9,586 (0,7); 8,984 (9,3); 8,916 (5,7); 8,910 (5,5); 8,728 (0,7); 8,636 (9,3); 8,571 (1,5); 8,560 (4,6); 8,473 (4,6); 8,469 (4,3); 8,330 (6,1); 8,324 (6,0); 7,943 (0,4); 7,798 (0,4); 7,793 (0,4); 4,156 (3,5); 3,332 (174,7); 3,051 (0,6); 2,875 (0,6); 2,672 (1,1); 2,667 (0,9); 2,507 (117,6); 2,503 (153,3); 2,499 (115,3); 2,330 (1,0); 2,325 (0,7); 2,076 (16,0); 1,648 (2,1); 1,634 (5,4); 1,627 (6,2); 1,614 (2,5); 1,304 (2,4); 1,291 (5,2); 1,284 (5,7); 1,269 (2,1); 1,262 (0,8); 1,254 (0,7); 1,240 (0,3); 0,146 (0,4); 0,008 (2,8); 0,000 (78,1); -0,150 (0,4)
Beispiel IT3208: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,696 (3,0); 8,690 (3,1); 8,249 (4,2); 8,240 (4,6); 8,003 (3,2); 7,997 (3,1); 7,982 (2,3); 7,978 (2,3); 7,946 (0,5); 7,940 (0,5); 7,766 (2,1); 3,068 (16,0); 2,800 (2,7); 2,783 (0,6); 2,776 (0,6); 2,767 (1,1); 2,756 (0,7); 2,748 (0,6); 2,465 (0,4); 2,170 (94,3); 2,115 (0,5); 2,109 (0,6); 2,102 (0,4); 1,965 (2,7); 1,959 (7,1); 1,954 (39,1); 1,947 (71,0); 1,941 (94,9); 1,935 (64,8); 1,929 (33,1); 1,776 (0,4); 1,770 (0,5); 1,763 (0,4); 0,855 (0,3); 0,789 (0,4); 0,579 (1,4); 0,535 (1,7); 0,525 (1,1); 0,518 (1,6); 0,000 (0,5)
Beispiel IT3209: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 9,461 (4,8); 8,713 (6,6); 8,448 (6,8); 8,317 (1,4); 8,281 (3,0); 8,094 (3,1); 7,800 (1,3); 7,794 (2,8); 7,787 (4,1); 7,782 (5,1); 7,778 (4,1); 7,569 (3,8); 7,557 (0,8); 7,546 (3,2); 3,393 (0,4); 3,331 (347,0); 2,676 (2,0); 2,672 (2,7); 2,667 (2,1); 2,524 (7,4); 2,507 (323,5); 2,503 (427,2); 2,498 (324,8); 2,426 (0,4); 2,334 (1,9); 2,329 (2,7); 2,325 (2,1); 2,197 (0,8); 2,160 (16,0); 1,614 (1,5); 1,600 (4,0); 1,593 (4,4); 1,580 (1,8); 1,284 (1,8); 1,270 (4,0); 1,264 (4,4); 1,249 (1,5); 1,147 (0,6); 1,079 (4,6); 1,061 (10,1); 1,042 (4,5); 0,146 (0,9); 0,008 (6,6); 0,000 (197,0); -0,150 (1,0)
Beispiel IT3210: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 8,835 (0,4); 8,692 (6,8); 8,552 (2,5); 8,540 (2,5); 8,513 (0,5); 8,435 (7,0); 8,318 (0,5); 8,278 (3,0); 8,094 (3,0); 7,873 (0,4); 7,742 (1,5); 7,736 (2,5); 7,718 (10,2); 7,520 (3,0); 7,502 (1,5); 7,498 (2,5); 3,357 (1,0); 3,329 (76,1); 3,304 (1,0); 2,857 (0,6); 2,847 (0,9); 2,839 (1,4); 2,829 (1,4); 2,820 (0,9); 2,811 (0,7); 2,676 (0,8); 2,671 (1,1); 2,667 (0,9); 2,524 (3,0); 2,511 (66,6); 2,507 (135,2); 2,502 (178,3); 2,498 (130,4); 2,493 (64,6); 2,333 (0,9); 2,329 (1,2); 2,324 (0,9); 2,193 (1,1); 2,159 (16,0); 2,075 (0,6); 1,153 (0,3); 1,135 (0,7); 1,078 (4,8); 1,060 (10,5); 1,041 (4,6); 0,727 (0,9); 0,714 (2,6); 0,709 (3,6); 0,697 (3,5); 0,691 (3,0); 0,680 (1,3); 0,559 (1,2); 0,548 (3,6); 0,542 (3,3); 0,539 (3,1); 0,533 (3,0); 0,521 (0,9); 0,146 (0,4); 0,008 (3,0); 0,000 (92,3); -0,008 (3,7); -0,150 (0,4)
Beispiel IT3211: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 8,641 (0,5); 8,541 (0,8); 8,530 (3,2); 8,524 (3,1); 8,504 (5,0); 8,495 (0,7); 8,385 (0,5); 8,318 (1,5); 8,288 (5,2); 8,280 (0,8); 7,971 (3,1); 7,965 (3,0); 7,943 (0,5); 7,803 (0,8); 7,532 (2,9); 7,375 (2,7); 7,322 (0,3); 7,209 (0,3); 4,421 (0,8); 4,404 (2,1); 4,386 (2,3); 4,369 (1,0); 4,240 (1,1); 4,224 (3,6); 4,206 (3,6); 4,189 (1,2); 4,179 (0,5); 4,162 (0,4); 3,741 (0,4); 3,727 (0,4); 3,328 (176,8); 3,027 (0,8); 2,985 (16,0); 2,886 (0,8); 2,775 (0,5); 2,762 (1,0); 2,748 (1,4); 2,734 (1,2); 2,717 (2,0); 2,676 (2,7); 2,671 (3,8); 2,667 (2,8); 2,524 (10,0); 2,510 (212,4); 2,507 (426,0); 2,502 (559,5); 2,498 (412,6); 2,456 (0,7); 2,333 (2,6); 2,329 (3,5); 2,324 (2,7); 2,075 (1,5); 1,361 (0,8); 1,344 (1,7); 1,329 (5,1); 1,312 (10,0); 1,294 (5,0); 1,282 (0,6); 1,229 (0,6); 1,213 (4,5); 1,196 (8,4); 1,178 (4,2); 1,160 (0,4); 1,147 (0,4); 0,788 (0,3); 0,779 (0,4); 0,704 (0,4); 0,469 (4,1); 0,454 (2,9); 0,146 (1,0); 0,008 (7,5); 0,000 (219,5); -0,008 (9,3); -0,150 (1,0)
Beispiel IT3212: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 9,450 (2,0); 8,714 (2,7); 8,433 (2,7); 8,220 (1,3); 8,083 (1,3); 7,802 (0,5); 7,796 (1,2); 7,790 (1,7); 7,785 (1,8); 7,780 (1,4); 7,774 (0,6); 7,567 (1,5); 7,556 (0,4); 7,545 (1,3); 3,329 (62,0); 2,675 (0,5); 2,671 (0,7); 2,667 (0,5); 2,506 (78,1); 2,502 (103,1); 2,498 (77,2); 2,329 (0,7); 1,615 (0,6); 1,601 (1,6); 1,594 (1,7); 1,581 (0,7); 1,398 (16,0); 1,287 (0,7); 1,274 (1,6); 1,267 (1,7); 1,253 (0,6); 0,008 (1,3); 0,000 (41,2); -0,008 (1,8)
Beispiel IT3213: ^{1}HNMR (400,0 MHz, d_6DMSO):
δ= 8,692 (2,3); 8,542 (0,8); 8,531 (0,8); 8,417 (2,3); 8,220 (1,0); 8,216 (1,1); 8,079 (1,1); 8,075 (1,0); 7,742 (0,5); 7,737 (0,8); 7,717 (3,3); 7,517 (1,0); 7,496 (0,9); 3,348 (0,4); 3,330 (73,9); 2,839 (0,5); 2,829 (0,5); 2,676 (0,3); 2,671 (0,5); 2,667 (0,4); 2,525 (1,2); 2,520 (1,9); 2,511 (26,1); 2,507 (54,6); 2,502 (72,8); 2,498 (52,8); 2,493 (25,6); 2,333 (0,3); 2,329 (0,5); 2,324 (0,3); 1,398 (16,0); 0,716 (0,8); 0,710 (1,2); 0,698 (1,1); 0,692 (0,9); 0,681 (0,4); 0,562 (0,4); 0,552 (1,2); 0,545 (1,1); 0,536 (0,9); 0,008 (1,1); 0,000 (33,4); -0,009 (1,1)
Beispiel IT3214: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 20,020 (0,4); 8,203 (15,1); 8,187 (0,8); 8,173 (15,3); 7,865 (8,4); 7,716 (8,3); 7,711 (10,7); 7,683 (5,4); 7,677 (4,2); 7,662 (6,4); 7,656 (5,5); 7,608 (8,3); 7,528 (0,3); 7,504 (10,0); 7,484 (7,9); 7,016 (4,8); 6,931 (3,0); 6,835 (9,8); 6,653 (5,0); 2,910 (0,6); 2,901 (1,7); 2,891 (2,6); 2,883 (3,9); 2,873 (4,0); 2,865 (2,6); 2,855 (1,8); 2,846 (0,6); 2,174 (590,6); 2,150 (3,3); 2,144 (3,9); 2,138 (4,9); 2,132 (3,3); 2,125 (2,0); 1,995 (20,3); 1,988 (51,7); 1,983 (284,0); 1,977 (520,7); 1,970 (703,8); 1,964 (488,9); 1,958 (254,0); 1,811 (1,6); 1,805 (2,8); 1,799 (4,0); 1,793 (2,8); 1,786 (1,4); 1,467 (16,0); 1,299 (0,7); 0,824 (2,1); 0,811 (6,5); 0,807 (8,8); 0,794 (8,9); 0,789 (6,8); 0,777 (2,9); 0,755 (0,4); 0,737 (0,4); 0,670 (0,4); 0,641 (2,8); 0,629 (8,1); 0,623 (8,3); 0,614 (7,3); 0,602 (2,1); 0,030 (2,9)

Beispiel IT3215: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,215 (15,4); 8,189 (16,0); 7,866 (9,4); 7,763 (8,8); 7,758 (11,3); 7,732 (5,7); 7,726 (4,7); 7,711 (6,6); 7,705 (5,9); 7,672 (4,3); 7,609 (9,4); 7,536 (9,6); 7,515 (7,8); 7,022 (4,7); 6,840 (9,6); 6,659 (4,7); 4,096 (0,8); 4,079 (0,8); 2,495 (1,5); 2,491 (1,3); 2,206 (651,9); 2,150 (2,6); 2,144 (2,8); 2,138 (3,0); 2,131 (2,4); 2,001 (6,5); 1,994 (14,1); 1,983 (141,8); 1,976 (255,1); 1,970 (340,8); 1,964 (252,4); 1,958 (142,1); 1,811 (1,0); 1,805 (1,6); 1,799 (2,1); 1,793 (1,6); 1,787 (1,0); 1,664 (0,3); 1,626 (4,3); 1,611 (12,2); 1,605 (12,9); 1,591 (6,2); 1,551 (0,7); 1,466 (4,4); 1,431 (0,8); 1,390 (5,7); 1,376 (12,2); 1,370 (13,2); 1,355 (4,7); 1,318 (0,5); 1,297 (1,2); 1,251 (1,0); 1,233 (1,9); 1,215 (1,0); 0,029 (1,1)
Beispiel IT3216: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,197 (4,6); 8,169 (4,8); 7,865 (3,0); 7,669 (1,3); 7,664 (1,9); 7,644 (6,9); 7,609 (3,0); 7,584 (0,6); 7,579 (0,6); 7,516 (2,2); 7,495 (1,7); 7,023 (1,3); 7,016 (0,4); 6,841 (2,7); 6,835 (0,7); 6,660 (1,3); 3,086 (16,0); 2,794 (3,5); 2,778 (0,8); 2,769 (1,2); 2,759 (0,9); 2,751 (0,7); 2,741 (0,3); 2,184 (18,2); 2,175 (42,1); 2,144 (0,3); 2,138 (0,4); 2,002 (1,1); 1,994 (1,5); 1,988 (3,9); 1,983 (19,8); 1,976 (36,2); 1,970 (48,7); 1,964 (34,4); 1,958 (18,2); 1,466 (8,2); 1,233 (0,5); 0,869 (0,5); 0,852 (0,5); 0,806 (0,6); 0,795 (0,5); 0,598 (1,8); 0,512 (1,7); 0,504 (1,6); 0,495 (1,8)
Beispiel IT3217: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,724 (2,9); 8,717 (3,2); 8,247 (7,4); 8,240 (1,1); 8,028 (3,1); 8,022 (3,1); 7,971 (0,5); 7,965 (0,5); 7,869 (2,3); 7,615 (2,4); 7,034 (1,5); 6,852 (2,9); 6,846 (0,6); 6,671 (1,5); 3,097 (16,0); 2,828 (2,6); 2,812 (0,6); 2,805 (0,6); 2,797 (1,1); 2,786 (0,7); 2,778 (0,6); 2,179 (56,3); 2,150 (0,4); 2,144 (0,5); 2,138 (0,6); 2,131 (0,4); 1,994 (4,3); 1,988 (6,2); 1,982 (37,6); 1,976 (69,1); 1,970 (93,5); 1,964 (64,7); 1,958 (33,4); 1,805 (0,4); 1,799 (0,6); 1,792 (0,4); 0,817 (0,4); 0,608 (1,4); 0,573 (1,0); 0,565 (1,7); 0,556 (1,1); 0,548 (1,5)
Beispiel IT3218: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 20,011 (0,4); 8,773 (8,6); 8,766 (9,0); 8,741 (1,2); 8,735 (1,2); 8,265 (14,9); 8,261 (16,0); 8,253 (3,2); 8,250 (2,9); 8,143 (9,4); 8,137 (9,5); 8,009 (1,3); 8,002 (1,3); 7,870 (7,3); 7,689 (3,7); 7,614 (8,2); 7,029 (4,5); 6,847 (9,1); 6,666 (4,5); 5,477 (0,5); 3,753 (3,4); 3,653 (0,4); 3,636 (0,6); 3,628 (0,6); 3,611 (0,4); 3,327 (0,4); 3,315 (0,8); 3,304 (0,7); 3,098 (0,7); 3,087 (0,6); 2,911 (0,4); 2,168 (284,6); 2,150 (2,8); 2,144 (3,6); 2,138 (4,5); 2,131 (3,1); 2,125 (1,7); 1,994 (21,0); 1,988 (48,8); 1,982 (280,0); 1,976 (513,9); 1,970 (694,8); 1,964 (480,4); 1,958 (247,2); 1,811 (1,5); 1,805 (2,9); 1,799 (4,1); 1,792 (2,9); 1,786 (1,4); 1,644 (3,6); 1,629 (9,1); 1,623 (9,3); 1,609 (4,8); 1,568 (0,6); 1,440 (0,5); 1,399 (4,9); 1,386 (9,0); 1,379 (9,4); 1,364 (3,7); 1,327 (0,4); 1,299 (0,5); 1,164 (0,7); 0,029 (2,4)
Beispiel IT3219: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,186 (4,3); 8,170 (4,3); 7,971 (2,5); 7,758 (2,2); 7,641 (1,2); 7,636 (1,8); 7,616 (6,7); 7,558 (0,6); 7,552 (0,5); 7,490 (2,0); 7,488 (1,7); 7,483 (0,7); 7,470 (1,3); 7,468 (1,5); 7,462 (0,6); 3,057 (16,0); 2,765 (3,5); 2,755 (0,7); 2,747 (0,7); 2,738 (1,1); 2,728 (0,7); 2,720 (0,6); 2,139 (32,4); 2,114 (0,4); 2,108 (0,5); 2,102 (0,4); 1,965 (2,1); 1,959 (5,3); 1,953 (31,9); 1,947 (58,9); 1,941 (79,9); 1,934 (55,2); 1,928 (28,6); 1,775 (0,3); 1,769 (0,5); 1,437 (6,1); 0,840 (0,4); 0,822 (0,4); 0,777 (0,5); 0,766 (0,4); 0,568 (1,4); 0,482 (1,4); 0,474 (1,3); 0,464 (1,5)
Beispiel IT3220: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,695 (3,0); 8,689 (3,2); 8,219 (7,0); 8,000 (3,0); 7,994 (3,0); 7,937 (8,6); 7,897 (0,6); 5,449 (12,1); 3,067 (16,0); 2,891 (0,7); 2,869 (0,3); 2,798 (2,8); 2,785 (0,6); 2,778 (0,7); 2,769 (1,2); 2,758 (0,8); 2,750 (0,7); 2,741 (0,4); 2,474 (0,3); 2,469 (0,5); 2,464 (0,4); 2,189 (56,5); 2,121 (0,4); 2,115 (0,4); 2,109 (0,5); 2,103 (0,4); 2,087 (3,4); 1,965 (1,9); 1,959 (4,3); 1,954 (23,2); 1,947 (42,6); 1,941 (57,3); 1,935 (40,0); 1,929 (20,9); 1,770 (0,3); 1,316 (1,1); 1,300 (0,9); 1,285 (0,3); 1,269 (1,0); 0,853 (0,4); 0,834 (0,4); 0,787 (0,4); 0,776 (0,4); 0,578 (1,6); 0,535 (1,9); 0,525 (1,3); 0,518 (1,7); 0,146 (0,6); 0,008 (4,9); 0,000 (131,9); -0,008 (6,9); -0,150 (0,6)
Beispiel IT3221: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,693 (6,2); 8,687 (6,2); 8,234 (0,7); 8,225 (9,9); 8,212 (10,1); 8,053 (0,4); 8,042 (6,8); 8,036 (6,6); 7,932 (16,0); 7,011 (1,9); 5,447 (15,9); 2,886 (0,5); 2,876 (1,3); 2,867 (1,8); 2,858 (2,8); 2,848 (2,8); 2,840 (1,8); 2,830 (1,3); 2,821 (0,4); 2,149 (16,6); 2,121 (1,4); 2,114 (1,2); 2,108 (1,2); 2,102 (0,9); 2,096 (0,6); 1,965 (6,2); 1,959 (9,3); 1,953 (46,1); 1,947 (83,1); 1,941 (110,8); 1,934 (76,5); 1,928 (39,4); 1,775 (0,5); 1,769 (0,7); 1,763 (0,4); 1,269 (1,0); 1,259 (0,5); 0,809 (1,5); 0,796 (4,5); 0,791 (5,9); 0,778 (6,1); 0,773 (4,5); 0,761 (2,0); 0,620 (2,0); 0,608 (5,1); 0,603 (5,5); 0,599 (4,9); 0,593 (4,7); 0,581 (1,4); 0,146 (1,3); 0,008 (11,5); 0,000 (286,0); -0,009 (12,3); -0,150 (1,3)
Beispiel IT3222: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,742 (7,6); 8,736 (7,9); 8,237 (11,7); 8,230 (10,9); 8,112 (8,3); 8,106 (8,3); 7,935 (16,0); 7,717 (1,6); 6,777 (0,5); 5,448 (3,1); 2,170 (68,6); 2,121 (0,4); 2,115 (0,6); 2,108 (0,7); 2,102 (0,5); 1,965 (4,0); 1,959 (7,7); 1,953 (42,0); 1,947 (76,9); 1,941 (104,1); 1,935 (72,7); 1,929 (37,9); 1,776 (0,5); 1,769 (0,6); 1,763 (0,5); 1,697 (0,5); 1,612 (3,1); 1,598 (7,6); 1,591 (7,8); 1,577 (4,2); 1,537 (0,5); 1,523 (1,3); 1,505 (1,2); 1,408 (0,5); 1,368 (4,3); 1,355 (7,7); 1,348 (8,0); 1,333 (3,2); 1,277 (0,4); 1,269 (0,9); 1,259 (1,1); 1,193 (0,9); 1,187 (0,6); 1,183 (0,4); 1,177 (1,0); 1,171 (0,6); 1,166 (0,4); 0,146 (1,1); 0,008 (9,5); 0,000 (259,4); -0,009 (11,5); -0,150 (1,1)
Beispiel IT3223: ^{1}HNMR (600,1 MHz, CD3CN): δ= 8,772 (0,8); 8,732 (3,1); 8,728 (3,0); 8,222 (7,7); 8,215 (5,8); 8,200 (0,8); 8,021 (3,2); 8,017 (3,1); 7,943 (13,2); 6,642 (0,5); 4,077 (1,3); 4,065 (3,9); 4,053 (3,9); 4,042 (1,3); 3,752 (0,8); 3,165 (3,1); 3,069 (0,4); 2,934 (16,0); 2,880 (0,4); 2,245 (0,5); 2,240 (0,6); 2,222 (0,8); 2,146 (25,4); 2,078 (1,0); 2,059 (0,8); 2,055 (1,1); 2,050 (1,3); 2,046 (1,0); 2,042 (0,7); 1,972 (17,2); 1,964 (2,0); 1,956 (5,4); 1,952 (7,4); 1,948 (55,6); 1,944 (100,9); 1,940 (146,1); 1,936 (99,1); 1,931 (49,9); 1,833 (0,4); 1,829 (0,7); 1,825 (0,9); 1,821 (0,7); 1,816 (0,4); 1,664 (3,8); 1,661 (4,0); 1,505 (0,4); 1,473 (3,0); 1,443 (0,6); 1,425 (0,6); 1,422 (0,6); 1,409 (0,8); 1,406 (0,8); 1,390 (2,1); 1,388 (1,6); 1,372 (1,4); 1,363 (0,5); 1,358 (0,7); 1,341 (1,7); 1,316 (0,9); 1,303 (0,9); 1,285 (3,5); 1,277 (3,9); 1,271 (6,9); 1,221 (1,2); 1,216 (6,4); 1,214 (5,7); 1,204 (9,5); 1,201 (2,5); 1,192 (4,8); 1,180 (0,6); 1,175 (0,3); 0,948 (0,4); 0,893 (0,9); 0,882 (1,8); 0,870 (1,5); 0,863 (0,9); 0,860 (0,9); 0,856 (0,9); 0,846 (0,9); 0,000 (7,9)
Beispiel IT3224: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,271 (7,9); 8,267 (7,8); 8,184 (15,8); 8,183 (15,9); 8,152 (0,7); 8,141 (16,0); 7,791 (6,9); 7,693 (9,4); 7,688 (12,0); 7,678 (0,8); 7,662 (6,6); 7,656 (4,7); 7,641 (7,7); 7,635 (6,2); 7,591 (0,7); 7,479 (11,5); 7,458 (9,1); 6,959 (2,7); 4,086 (0,9); 4,068 (2,7); 4,050 (2,8); 4,032 (0,9); 2,986 (0,4); 2,883 (0,8); 2,873 (2,2); 2,864 (3,0); 2,855 (4,6); 2,846 (4,6); 2,837 (2,9); 2,828 (2,2); 2,818 (0,9); 2,567 (0,7); 2,536 (0,3); 2,503 (0,4); 2,477 (1,2); 2,472 (1,9); 2,467 (2,6); 2,462 (1,9); 2,458 (1,1); 2,411 (0,5); 2,398 (0,5); 2,373 (0,6); 2,310 (0,9); 2,281 (1,2); 2,187 (1104,6); 2,121 (0,9); 2,115 (2,0); 2,109 (2,7); 2,103 (1,9); 2,096 (0,9); 1,993 (0,6); 1,973 (14,2); 1,966 (15,1); 1,960 (36,7);

1,954 (209,3); 1,948 (380,7); 1,941 (511,0); 1,935 (347,0); 1,929 (175,8); 1,916 (1,4); 1,782 (1,0); 1,776 (1,9); 1,770 (2,8); 1,764 (1,8); 1,757 (0,8); 1,437 (14,7); 1,340 (0,4); 1,285 (0,8); 1,270 (2,8); 1,222 (3,4); 1,204 (6,6); 1,186 (3,2); 0,882 (0,5); 0,857 (0,5); 0,841 (0,4); 0,796 (2,4); 0,784 (7,0); 0,779 (9,4); 0,766 (9,7); 0,761 (6,9); 0,749 (3,1); 0,727 (0,5); 0,709 (0,4); 0,654 (0,4); 0,644 (0,4); 0,614 (3,2); 0,602 (7,9); 0,597 (8,2); 0,593 (7,3); 0,587 (7,3); 0,575 (2,2); 0,526 (0,3); 0,146 (7,1); 0,138 (0,4); 0,079 (0,4); 0,069 (0,4); 0,066 (0,3); 0,058 (0,5); 0,054 (0,5); 0,049 (0,5); 0,045 (0,6); 0,037 (0,8); 0,023 (2,0); 0,008 (59,7); 0,000 (1582,5); -0,009 (57,5); -0,033 (0,5); -0,036 (0,5); -0,150 (7,0)
Beispiel IT3225: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,269 (2,4); 8,266 (2,4); 8,170 (4,4); 8,126 (4,2); 7,787 (2,2); 7,644 (1,2); 7,639 (1,7); 7,624 (1,0); 7,618 (5,4); 7,613 (1,7); 7,561 (0,6); 7,556 (0,5); 7,490 (2,1); 7,489 (2,0); 7,482 (0,7); 7,470 (1,6); 7,468 (1,6); 7,462 (0,6); 3,058 (14,9); 3,006 (0,4); 2,778 (0,6); 2,771 (3,2); 2,761 (0,6); 2,753 (0,7); 2,744 (1,1); 2,734 (0,7); 2,726 (0,8); 2,127 (33,1); 2,113 (0,8); 2,106 (0,7); 2,100 (0,5); 1,971 (0,8); 1,963 (2,6); 1,957 (6,7); 1,951 (37,7); 1,945 (68,8); 1,939 (92,9); 1,933 (64,3); 1,927 (33,3); 1,774 (0,4); 1,767 (0,5); 1,761 (0,4); 1,437 (16,0); 1,270 (0,8); 1,204 (0,4); 0,841 (0,5); 0,823 (0,4); 0,780 (0,5); 0,769 (0,4); 0,581 (1,4); 0,575 (1,4); 0,487 (1,5); 0,479 (1,3); 0,470 (1,5); 0,146 (1,1); 0,008 (9,5); 0,000 (262,4); -0,009 (11,4); -0,150 (1,2)
Beispiel IT3226: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,269 (7,2); 8,266 (7,5); 8,191 (16,0); 8,147 (15,3); 8,056 (0,9); 7,789 (6,5); 7,741 (8,2); 7,735 (10,5); 7,708 (5,2); 7,703 (4,0); 7,687 (6,0); 7,682 (5,1); 7,582 (0,8); 7,554 (4,5); 7,509 (10,0); 7,488 (8,2); 4,084 (0,6); 4,067 (1,9); 4,049 (1,9); 4,032 (0,6); 3,063 (0,7); 3,040 (5,6); 2,902 (4,9); 2,854 (0,6); 2,568 (0,4); 2,126 (170,0); 2,112 (2,8); 2,106 (2,7); 2,100 (1,9); 2,093 (1,0); 2,035 (0,4); 1,970 (10,0); 1,962 (11,5); 1,956 (26,7); 1,951 (152,2); 1,944 (278,1); 1,938 (376,5); 1,932 (259,9); 1,926 (134,2); 1,913 (1,4); 1,779 (0,8); 1,773 (1,5); 1,767 (2,1); 1,761 (1,4); 1,754 (0,7); 1,597 (4,0); 1,583 (10,7); 1,576 (10,4); 1,563 (5,3); 1,523 (0,7); 1,436 (8,2); 1,404 (0,7); 1,364 (5,4); 1,350 (10,4); 1,344 (11,2); 1,329 (4,1); 1,318 (0,3); 1,292 (0,5); 1,269 (2,7); 1,221 (2,2); 1,203 (4,2); 1,185 (2,1); 0,881 (0,4); 0,858 (0,3); 0,145 (5,2); 0,031 (0,9); 0,0071 (35,1); 0,0066 (35,1); -0,001 (985,7); -0,009 (44,0); -0,026 (0,9); -0,040 (0,4); -0,151 (5,1)
Beispiel IT3227: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,511 (7,8); 8,508 (7,8); 8,174 (16,0); 8,118 (13,4); 8,099 (7,8); 7,694 (9,8); 7,688 (12,4); 7,662 (6,6); 7,656 (5,0); 7,641 (7,7); 7,635 (6,4); 7,499 (0,3); 7,476 (11,6); 7,455 (9,2); 6,938 (2,9); 3,062 (0,6); 2,880 (0,7); 2,870 (2,1); 2,861 (3,0); 2,852 (4,7); 2,843 (4,7); 2,834 (3,0); 2,825 (2,2); 2,815 (0,7); 2,543 (0,4); 2,468 (0,4); 2,463 (0,6); 2,459 (0,4); 2,163 (162,8); 2,120 (1,0); 2,114 (1,0); 2,108 (1,1); 2,102 (0,9); 2,087 (20,5); 1,972 (1,6); 1,965 (5,0); 1,959 (13,4); 1,953 (69,2); 1,947 (125,1); 1,941 (166,4); 1,935 (115,7); 1,928 (59,8); 1,781 (0,4); 1,775 (0,7); 1,769 (1,0); 1,763 (0,6); 1,757 (0,3); 1,285 (0,4); 1,269 (1,7); 1,204 (0,6); 1,186 (0,3); 1,179 (0,8); 0,794 (2,5); 0,781 (7,3); 0,776 (9,8); 0,763 (10,2); 0,758 (7,4); 0,746 (3,4); 0,724 (0,4); 0,707 (0,4); 0,652 (0,4); 0,642 (0,4); 0,612 (3,3); 0,601 (8,5); 0,595 (8,9); 0,591 (8,1); 0,586 (7,9); 0,573 (2,5); 0,536 (0,4); 0,528 (0,3); 0,146 (2,7); 0,029 (0,4); 0,008 (25,1); 0,000 (580,3); -0,009 (29,4); -0,028 (0,7); -0,150 (2,7)
Beispiel IT3228: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,508 (2,3); 8,184 (4,7); 8,130 (3,9); 8,099 (2,3); 7,741 (2,6); 7,735 (3,4); 7,711 (1,8); 7,705 (1,3); 7,690 (2,1); 7,684 (1,7); 7,644 (1,3); 7,509 (3,2); 7,488 (2,6); 2,545 (0,6); 2,468 (0,5); 2,463 (0,7); 2,459 (0,5); 2,159 (239,3); 2,119 (0,6); 2,113 (0,8); 2,107 (0,9); 2,101 (0,7); 2,095 (0,4); 1,971 (1,0); 1,964 (3,7); 1,958 (9,3); 1,952 (53,0); 1,946 (96,2); 1,940 (130,0); 1,933 (90,1); 1,927 (46,8); 1,780 (0,3); 1,774 (0,6); 1,768 (0,8); 1,762 (0,6); 1,595 (1,3); 1,581 (3,4); 1,574 (3,5); 1,560 (1,8); 1,437 (16,0); 1,363 (1,8); 1,349 (3,4); 1,343 (3,5); 1,328 (1,4); 1,270 (0,7); 1,204 (0,4); 0,146 (1,3); 0,008 (10,5); 0,000 (282,8); -0,009 (11,9); -0,150 (1,3)
Beispiel IT3229: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,507 (1,6); 8,161 (3,4); 8,104 (3,1); 7,644 (0,8); 7,639 (1,1); 7,619 (3,9); 7,562 (0,4); 7,557 (0,4); 7,488 (1,4); 7,481 (0,5); 7,466 (1,1); 7,460 (0,4); 3,056 (10,5); 2,855 (0,4); 2,771 (2,3); 2,763 (0,5); 2,755 (0,5); 2,745 (0,8); 2,736 (0,5); 2,728 (0,4); 2,544 (0,4); 2,131 (16,7); 1,971 (0,5); 1,963 (1,1); 1,957 (2,7); 1,951 (15,4); 1,945 (28,4); 1,939 (38,5); 1,933 (26,5); 1,927 (13,7); 1,437 (16,0); 0,779 (0,4); 0,576 (1,0); 0,488 (1,0); 0,480 (0,9); 0,471 (1,0); 0,146 (0,4); 0,008 (3,0); 0,000 (85,2); -0,009 (3,4); -0,150 (0,4)
Beispiel IT41: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,170 (4,8); 7,860 (5,7); 7,840 (2,0); 7,833 (1,3); 7,687 (4,2); 7,561 (1,9); 7,539 (1,6); 7,436 (5,5); 6,972 (0,9); 2,871 (0,5); 2,862 (0,8); 2,853 (1,1); 2,843 (1,1); 2,835 (0,8); 2,825 (0,5); 2,251 (24,5); 2,140 (6,0); 1,971 (0,5); 1,964 (0,6); 1,958 (1,4); 1,952 (6,2); 1,946 (11,2); 1,940 (15,0); 1,934 (10,9); 1,928 (5,9); 1,436 (16,0); 0,796 (0,6); 0,784 (1,9); 0,779 (2,5); 0,766 (2,6); 0,761 (2,0); 0,749 (0,9); 0,619 (0,8); 0,608 (2,3); 0,601 (2,5); 0,592 (2,1); 0,580 (0,6); 0,000 (15,7)
Beispiel IT42: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,184 (6,7); 8,183 (6,5); 7,920 (2,5); 7,915 (8,6); 7,894 (3,0); 7,887 (1,9); 7,699 (6,2); 7,680 (1,6); 7,602 (3,0); 7,600 (2,8); 7,582 (2,4); 7,580 (2,6); 7,438 (7,8); 2,463 (0,3); 2,253 (39,2); 2,151 (134,8); 2,120 (0,5); 2,114 (0,7); 2,108 (0,9); 2,102 (0,6); 2,095 (0,4); 1,972 (1,2); 1,965 (4,2); 1,959 (10,5); 1,953 (54,2); 1,947 (98,7); 1,940 (132,9); 1,934 (93,2); 1,928 (48,4); 1,775 (0,6); 1,769 (0,8); 1,763 (0,6); 1,599 (1,8); 1,585 (4,6); 1,578 (4,7); 1,564 (2,4); 1,437 (16,0); 1,415 (0,4); 1,375 (2,4); 1,361 (4,7); 1,354 (4,9); 1,340 (1,8); 1,269 (1,5); 1,204 (0,4); 0,146 (0,7); 0,008 (5,3); 0,000 (150,3); -0,008 (7,3); -0,149 (0,7)
Beispiel IT43: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,929 (2,4); 8,922 (2,4); 8,231 (2,7); 8,224 (2,6); 8,205 (4,3); 7,754 (3,8); 7,444 (5,0); 7,072 (0,7); 2,881 (0,4); 2,872 (0,7); 2,863 (1,0); 2,853 (1,0); 2,845 (0,7); 2,835 (0,4); 2,252 (22,9); 2,140 (16,7); 1,964 (1,1); 1,952 (13,4); 1,946 (23,9); 1,940 (31,3); 1,934 (21,8); 1,928 (11,3); 1,436 (16,0); 0,814 (0,5); 0,800 (1,8); 0,796 (2,2); 0,783 (2,3); 0,778 (1,7); 0,766 (0,7); 0,633 (0,7); 0,622 (2,1); 0,616 (2,2); 0,612 (2,0); 0,607 (1,8); 0,594 (0,5); 0,146 (0,6); 0,000 (113,1); -0,150 (0,6)
Beispiel IT44: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,974 (3,9); 8,967 (3,9); 8,300 (4,1); 8,294 (4,0); 8,216 (6,7); 7,764 (6,3); 7,753 (0,6); 7,735 (1,8); 7,446 (7,8); 4,067 (0,9); 4,050 (0,9); 3,076 (1,0); 2,898 (1,0); 2,254 (38,8); 2,144 (39,1); 2,114 (0,6); 2,107 (0,6); 2,101 (0,4); 2,095 (0,4); 2,086 (0,4); 2,063 (0,4); 1,972 (4,1); 1,964 (2,3); 1,958 (6,0); 1,952 (30,2); 1,946 (53,9); 1,940 (71,6); 1,934 (48,9); 1,928 (25,1); 1,768 (0,4); 1,617 (1,7); 1,602 (4,5); 1,595 (4,4); 1,581 (2,2); 1,437 (16,0); 1,388 (2,3); 1,375 (4,5); 1,368 (4,5); 1,353 (1,7); 1,269 (0,9); 1,221 (1,0); 1,204 (2,0); 1,186 (1,0); 0,146 (1,1); 0,008 (8,7); 0,000 (211,3); -0,009 (8,7); -0,150 (1,1)
Beispiel IT221: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 7,934 (2,4); 7,928 (3,4); 7,908 (1,9); 7,902 (1,3); 7,887 (2,0); 7,882 (1,6); 7,615 (3,0); 7,594 (2,6); 7,486 (5,3); 7,037 (0,7); 6,864 (0,4);

6,858 (6,5); 2,877 (0,5); 2,867 (0,8); 2,858 (1,2); 2,849 (1,2); 2,840 (0,8); 2,831 (0,6); 2,258 (25,0); 2,168 (12,6); 1,965 (0,4); 1,959 (1,0); 1,953 (5,8); 1,947 (10,6); 1,941 (14,3); 1,935 (10,0); 1,928 (5,3); 1,436 (16,0); 0,800 (0,6); 0,788 (1,8); 0,783 (2,5); 0,770 (2,6); 0,765 (1,9); 0,753 (0,9); 0,624 (0,9); 0,613 (2,2); 0,606 (2,3); 0,602 (2,0); 0,597 (2,0); 0,585 (0,7); 0,008 (0,7); 0,000 (20,3); -0,009 (0,9)
Beispiel IT222: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 7,992 (6,1); 7,986 (8,0); 7,960 (4,3); 7,954 (3,3); 7,939 (4,6); 7,933 (4,0); 7,709 (2,2); 7,654 (7,3); 7,633 (6,4); 7,487 (13,6); 6,877 (16,0); 5,448 (2,4); 2,418 (0,4); 2,260 (66,3); 2,153 (49,7); 2,120 (0,4); 2,114 (0,4); 2,108 (0,5); 2,098 (0,5); 2,086 (1,9); 1,972 (0,6); 1,964 (1,9); 1,958 (4,9); 1,953 (28,0); 1,946 (51,5); 1,940 (70,2); 1,934 (49,9); 1,928 (27,0); 1,775 (0,3); 1,769 (0,4); 1,603 (3,1); 1,588 (8,0); 1,581 (8,3); 1,568 (4,3); 1,528 (0,5); 1,436 (0,9); 1,419 (0,5); 1,379 (4,2); 1,365 (8,0); 1,359 (8,7); 1,344 (3,3); 1,268 (0,4); 0,146 (0,5); 0,008 (3,8); 0,000 (117,9); -0,008 (7,0); -0,150 (0,6)
Beispiel IT223: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 7,982 (3,5); 7,977 (5,3); 7,966 (3,0); 7,960 (1,9); 7,945 (2,9); 7,939 (2,5); 7,669 (4,3); 7,648 (3,7); 7,487 (9,9); 6,883 (8,4); 4,152 (1,0); 4,136 (1,1); 4,129 (3,0); 4,112 (3,1); 4,105 (3,3); 4,089 (3,1); 4,082 (1,4); 4,065 (1,1); 2,262 (40,4); 2,156 (20,4); 2,101 (0,4); 1,972 (0,5); 1,964 (1,0); 1,958 (2,4); 1,953 (12,4); 1,946 (23,1); 1,940 (31,5); 1,934 (23,1); 1,928 (12,8); 1,436 (16,0); 0,008 (2,0); 0,000 (53,5)
Beispiel IT224: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,983 (1,2); 8,977 (1,3); 8,360 (1,3); 8,355 (1,3); 7,953 (1,3); 7,944 (1,4); 7,036 (2,1); 2,306 (6,0); 2,160 (8,1); 1,953 (4,2); 1,947 (7,8); 1,941 (10,6); 1,935 (7,9); 1,929 (4,3); 1,619 (0,6); 1,604 (1,6); 1,597 (1,6); 1,584 (0,8); 1,437 (16,0); 1,390 (0,8); 1,376 (1,6); 1,369 (1,7); 1,354 (0,6)
Beispiel IT225: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 7,942 (4,2); 7,936 (5,2); 7,918 (1,6); 7,912 (1,1); 7,897 (1,6); 7,892 (1,3); 7,619 (2,4); 7,598 (2,1); 7,045 (0,8); 6,922 (4,2); 2,874 (0,4); 2,865 (0,7); 2,856 (1,0); 2,847 (1,0); 2,838 (0,7); 2,828 (0,4); 2,305 (10,8); 2,183 (27,7); 1,960 (0,8); 1,954 (3,8); 1,948 (6,9); 1,942 (9,3); 1,936 (6,5); 1,930 (3,4); 1,436 (16,0); 0,799 (0,5); 0,786 (1,7); 0,781 (2,2); 0,769 (2,2); 0,764 (1,7); 0,751 (0,7); 0,624 (0,7); 0,613 (2,1); 0,607 (2,1); 0,603 (2,0); 0,597 (1,8); 0,585 (0,5); 0,000 (23,8)
Beispiel IT226: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,939 (1,4); 8,933 (1,4); 8,292 (1,5); 8,286 (1,4); 7,952 (1,1); 7,942 (1,1); 7,150 (0,3); 7,022 (2,3); 2,874 (0,4); 2,865 (0,5); 2,855 (0,5); 2,847 (0,4); 2,305 (5,7); 2,187 (7,7); 1,973 (0,7); 1,960 (0,4); 1,954 (2,8); 1,948 (5,1); 1,942 (7,0); 1,936 (4,8); 1,930 (2,5); 1,436 (16,0); 1,204 (0,3); 0,803 (0,9); 0,798 (1,1); 0,785 (1,2); 0,780 (0,9); 0,767 (0,4); 0,636 (0,4); 0,624 (1,0); 0,619 (1,1); 0,615 (0,9); 0,609 (0,9); 0,000 (5,3)
Beispiel IT227: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 7,999 (1,6); 7,994 (2,1); 7,970 (1,1); 7,965 (0,8); 7,949 (2,6); 7,944 (2,6); 7,937 (1,8); 7,659 (2,2); 7,638 (1,6); 6,939 (3,3); 2,306 (8,4); 2,155 (9,0); 1,972 (0,6); 1,965 (0,3); 1,953 (5,6); 1,947 (10,3); 1,941 (14,0); 1,935 (9,7); 1,929 (5,0); 1,602 (0,8); 1,587 (2,1); 1,581 (2,1); 1,567 (1,1); 1,436 (16,0); 1,380 (1,1); 1,366 (2,1); 1,360 (2,2); 1,345 (0,8)
Beispiel IT231: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 7,961 (5,3); 7,958 (2,0); 7,942 (1,7); 7,937 (1,0); 7,864 (5,1); 7,609 (1,6); 7,606 (1,0); 7,590 (1,0); 7,587 (1,4); 7,148 (5,1); 6,968 (0,5); 2,876 (0,4); 2,867 (0,6); 2,858 (0,9); 2,849 (0,9); 2,840 (0,6); 2,831 (0,4); 2,134 (6,5); 1,964 (1,6); 1,958 (2,5); 1,952 (11,3); 1,946 (20,0); 1,940 (26,1); 1,934 (17,8); 1,928 (9,0); 1,437 (16,0); 0,800 (0,5); 0,787 (1,5); 0,782 (1,9); 0,770 (2,0); 0,764 (1,4); 0,752 (0,7); 0,624 (0,7); 0,614 (1,6); 0,606 (1,7); 0,602 (1,5); 0,597 (1,5); 0,584 (0,5); 0,000 (0,7)
Beispiel IT232: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,014 (3,3); 8,010 (1,3); 7,997 (1,1); 7,991 (0,6); 7,866 (3,6); 7,648 (1,5); 7,642 (0,8); 7,630 (0,6); 7,625 (1,2); 7,162 (3,0); 5,447 (16,0); 2,140 (12,0); 1,972 (0,4); 1,964 (2,4); 1,958 (4,0); 1,952 (17,2); 1,946 (30,2); 1,940 (39,3); 1,934 (26,8); 1,928 (13,7); 1,600 (0,6); 1,586 (1,7); 1,579 (1,7); 1,565 (0,9); 1,437 (0,9); 1,380 (0,9); 1,367 (1,6); 1,360 (1,7); 1,345 (0,7); 0,000 (0,9)
Beispiel IT461: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 7,669 (6,3); 7,664 (9,6); 7,654 (5,5); 7,648 (2,9); 7,633 (5,5); 7,627 (4,3); 7,582 (3,1); 7,509 (16,0); 7,426 (8,2); 7,405 (6,8); 7,166 (4,7); 7,161 (8,3); 7,156 (5,0); 6,767 (3,7); 6,760 (7,3); 6,754 (5,5); 6,735 (5,6); 6,730 (6,3); 6,723 (3,8); 2,468 (0,7); 2,463 (1,0); 2,459 (0,7); 2,298 (0,5); 2,161 (388,0); 2,139 (78,8); 2,121 (1,2); 2,114 (1,5); 2,108 (1,7); 2,102 (1,2); 2,096 (0,7); 1,993 (0,7); 1,977 (0,9); 1,965 (8,8); 1,959 (16,3); 1,953 (98,1); 1,947 (179,6); 1,941 (243,9); 1,935 (167,4); 1,928 (86,0); 1,856 (0,9); 1,842 (0,6); 1,782 (0,6); 1,775 (1,1); 1,769 (1,5); 1,763 (1,0); 1,757 (0,5); 1,585 (3,5); 1,570 (9,4); 1,563 (9,3); 1,550 (4,6); 1,510 (0,5); 1,394 (0,5); 1,354 (4,7); 1,340 (9,4); 1,333 (9,8); 1,319 (3,5); 0,146 (0,4); 0,008 (2,9); 0,000 (87,8); -0,008 (3,4); -0,150 (0,4)
Beispiel IT462: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 7,682 (3,3); 7,677 (6,3); 7,676 (6,2); 7,673 (6,2); 7,668 (4,7); 7,665 (5,9); 7,653 (5,1); 7,647 (7,8); 7,628 (1,3); 7,623 (1,7); 7,606 (1,1); 7,600 (0,7); 7,585 (1,1); 7,579 (1,0); 7,518 (4,3); 7,517 (4,5); 7,507 (3,5); 7,496 (6,1); 7,478 (6,1); 7,475 (3,5); 7,459 (3,7); 7,422 (2,5); 7,419 (1,8); 7,409 (1,0); 7,403 (2,8); 7,394 (1,8); 7,385 (1,0); 7,373 (1,2); 7,153 (0,9); 7,148 (1,6); 7,143 (1,1); 6,961 (0,8); 6,900 (0,5); 6,760 (0,8); 6,753 (1,5); 6,747 (1,1); 6,724 (1,1); 6,720 (1,3); 6,717 (1,2); 6,713 (0,9); 3,855 (0,7); 3,051 (1,3); 2,881 (0,4); 2,871 (1,1); 2,862 (1,6); 2,853 (2,4); 2,843 (3,0); 2,834 (1,8); 2,826 (1,3); 2,816 (0,6); 2,476 (0,8); 2,472 (1,3); 2,467 (1,8); 2,462 (1,4); 2,427 (0,5); 2,391 (0,4); 2,383 (0,3); 2,359 (0,4); 2,327 (0,5); 2,182 (852,2); 2,138 (15,6); 2,121 (1,5); 2,115 (2,2); 2,109 (2,8); 2,102 (2,4); 2,096 (1,2); 1,992 (0,9); 1,966 (9,9); 1,959 (26,3); 1,954 (166,7); 1,947 (309,9); 1,941 (423,2); 1,935 (291,5); 1,929 (148,5); 1,782 (0,9); 1,776 (1,7); 1,770 (2,4); 1,764 (1,7); 1,757 (0,9); 1,437 (16,0); 1,270 (1,6); 0,790 (1,1); 0,778 (3,3); 0,773 (4,8); 0,766 (2,0); 0,760 (4,8); 0,755 (4,0); 0,743 (1,7); 0,736 (0,5); 0,614 (1,5); 0,602 (4,2); 0,593 (4,9); 0,587 (4,7); 0,575 (1,8); 0,000 (1,7)
Beispiel IT463: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,649 (2,9); 8,643 (3,2); 7,935 (2,9); 7,929 (2,9); 7,873 (7,9); 7,322 (1,5); 7,318 (2,7); 7,313 (1,9); 6,923 (1,5); 6,917 (2,0); 6,916 (2,3); 6,910 (1,9); 6,802 (1,7); 6,798 (2,2); 6,795 (2,0); 6,790 (1,9); 3,058 (16,0); 2,790 (2,7); 2,783 (0,4); 2,772 (0,6); 2,765 (0,6); 2,757 (1,2); 2,745 (0,7); 2,738 (0,6); 2,170 (18,1); 1,966 (1,0); 1,960 (2,0); 1,954 (11,8); 1,948 (21,8); 1,941 (29,7); 1,935 (20,7); 1,929 (10,7); 1,269 (0,6); 0,844 (0,3); 0,826 (0,4); 0,783 (0,4); 0,573 (1,4); 0,528 (1,7); 0,518 (1,1); 0,511 (1,6); 0,000 (7,0); -0,008 (0,3)
Beispiel IT464: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,649 (6,8); 8,643 (7,0); 7,990 (0,3); 7,976 (7,4); 7,970 (7,3); 7,871 (16,0); 7,320 (4,1); 7,315 (6,6); 7,310 (4,1); 6,976 (1,8); 6,920 (3,8);

6,914 (4,9); 6,912 (5,2); 6,907 (4,0); 6,805 (4,5); 6,801 (4,8); 6,798 (4,5); 6,794 (3,8); 5,448 (0,6); 2,876 (0,4); 2,867 (1,2); 2,857 (1,7); 2,849 (2,7); 2,839 (2,8); 2,831 (1,8); 2,821 (1,3); 2,811 (0,4); 2,143 (54,7); 2,114 (0,4); 2,108 (0,4); 1,965 (2,0); 1,959 (5,3); 1,953 (26,5); 1,947 (48,2); 1,941 (64,2); 1,934 (44,7); 1,928 (23,1); 1,769 (0,4); 1,269 (0,9); 1,200 (0,4); 0,799 (1,4); 0,786 (4,5); 0,781 (5,9); 0,769 (6,1); 0,763 (4,5); 0,751 (1,9); 0,614 (1,9); 0,602 (5,1); 0,597 (5,6); 0,593 (5,0); 0,587 (4,8); 0,575 (1,4); 0,008 (0,5); 0,000 (15,3)
Beispiel IT465: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,693 (7,0); 8,687 (7,3); 8,034 (7,5); 8,028 (7,5); 7,873 (16,0); 7,693 (1,3); 7,335 (3,9); 7,330 (6,8); 7,325 (4,4); 6,927 (3,7); 6,922 (4,7); 6,920 (5,0); 6,914 (4,3); 6,816 (4,3); 6,812 (4,8); 6,808 (4,4); 6,804 (3,9); 5,449 (14,1); 2,173 (58,5); 2,115 (0,4); 2,109 (0,5); 2,103 (0,4); 1,966 (2,9); 1,960 (5,1); 1,954 (29,3); 1,948 (53,8); 1,941 (72,9); 1,935 (50,8); 1,929 (26,4); 1,776 (0,3); 1,770 (0,4); 1,764 (0,3); 1,602 (2,9); 1,588 (7,3); 1,581 (7,4); 1,567 (3,9); 1,551 (0,4); 1,523 (0,7); 1,505 (0,6); 1,405 (0,5); 1,365 (4,1); 1,351 (7,2); 1,345 (7,6); 1,330 (3,0); 1,269 (0,9); 1,259 (0,5); 1,200 (0,6); 1,193 (0,4); 1,187 (0,4); 1,177 (0,5); 1,171 (0,4); 0,008 (0,4); 0,000 (13,0)
Beispiel IT466: ^{1}HNMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,729 (1,0); 8,692 (3,0); 8,687 (3,0); 8,145 (1,0); 7,954 (3,0); 7,949 (3,0); 7,871 (14,1); 7,325 (3,5); 7,071 (0,6); 6,926 (2,7); 6,920 (3,2); 6,914 (2,1); 6,808 (2,6); 6,803 (2,8); 6,643 (1,1); 6,496 (1,1); 3,751 (1,8); 3,659 (0,8); 3,649 (0,9); 3,643 (2,1); 3,624 (1,8); 3,159 (4,2); 3,076 (1,9); 3,062 (0,3); 2,927 (16,0); 2,905 (0,3); 2,887 (0,3); 2,874 (0,3); 2,240 (1,1); 2,176 (137,5); 2,121 (0,6); 2,115 (0,7); 2,109 (0,7); 2,103 (0,6); 2,097 (0,4); 1,966 (2,5); 1,960 (6,5); 1,954 (35,6); 1,948 (65,4); 1,942 (88,3); 1,935 (62,6); 1,929 (33,5); 1,819 (1,0); 1,811 (1,1); 1,803 (2,6); 1,794 (1,2); 1,786 (1,1); 1,776 (0,6); 1,770 (0,8); 1,764 (0,6); 1,758 (0,4); 1,698 (0,4); 1,653 (4,1); 1,599 (0,4); 1,586 (0,3); 1,548 (0,4); 1,541 (0,4); 1,523 (0,9); 1,505 (1,0); 1,468 (3,4); 1,453 (1,6); 1,415 (1,4); 1,405 (1,4); 1,389 (9,5); 1,358 (1,0); 1,340 (1,1); 1,315 (1,4); 1,303 (3,2); 1,285 (4,6); 1,270 (11,8); 1,221 (12,0); 1,214 (12,0); 1,200 (3,3); 1,193 (1,3); 1,190 (1,5); 1,177 (1,0); 1,172 (1,1); 1,161 (0,7); 1,121 (0,6); 1,107 (0,6); 1,093 (0,9); 1,057 (0,7); 0,974 (0,4); 0,957 (0,5); 0,947 (0,6); 0,934 (0,5); 0,923 (0,7); 0,898 (1,3); 0,882 (3,1); 0,876 (2,5); 0,858 (2,8); 0,840 (1,7); 0,815 (0,6); 0,000 (3,4)

[1)] Khối lượng thông báo là đỉnh của biểu đồ đồng vị của ion $[M+H]^+$ có cường độ cao nhất; nếu như ion $[M-H]^-$ được phát hiện, thì khối lượng thông báo được nhận diện bằng [2].

[2] Khối lượng thông báo là đỉnh của biểu đồ đồng vị của ion $[M-H]^-$ có cường độ cao nhất.

[a)] Lưu ý về việc xác định các giá trị logP và phát hiện khối: Các giá trị logP được xác định theo tiêu chuẩn EEC Directive 79/831 Annex V.A8 bằng phương pháp sắc ký lỏng hiệu năng cao (high-performance liquid chromatography - HPLC) trên cột pha đảo (C18) của hệ Agilent 1100 LC; 50*4.6 Zorbax Eclipse Plus C18 1,8 micron; dung môi rửa giải A: axetonitril (axit formic 0,1%); dung môi rửa giải B: nước (axit formic 0,09%); gradien tuyến tính từ axetonitril 10% đến axetonitril 95% trong thời gian 4,25 phút, sau đó là axetonitril 95% trong thời gian 1,25 phút nữa; nhiệt độ lò 55°C; tốc độ dòng: 2,0 ml/phút. Việc dò khối được thực hiện nhờ hệ thống Agilent MSD.

Ví du sinh học

Thử nghiệm tiếp xúc Rhipicephalus sanguineus in vitro với tích chó nâu trưởng thành

Đối với lớp phủ của ống thử nghiệm, 9mg hoạt chất trước tiên được hòa tan trong 1ml axeton p.a. và sau đó được pha loãng tới nồng độ mong muốn bằng axeton p.a. Lượng 250µl dung dịch được phân bố đồng đều lên các thành bên trong và đáy của ống thử nghiệm thể tích 25ml bằng cách xoay và lắc trên máy lắc tròn (quay lắc với tốc độ 30 vòng/phút trong thời gian 2 giờ). Với 900 ppm dung dịch hoạt chất và diện tích bề mặt bên trong 44,7cm², có thể đạt được sự phân bố đồng đều xác định, liều lượng dựa vào diện tích 5µg/cm².

Sau khi dung môi đã bay hơi hết, các ống nghiệm được nạp 5 đến 10 tích chó trưởng thành (*Rhipicephalus sanguineus*), đậy kín bằng nắp nhựa đục lỗ và được ủ ở vị trí nằm ngang trong bóng tối ở nhiệt độ trong phòng và độ ẩm môi trường xung quanh. Hiệu quả được xác định sau thời gian 48 giờ. Về điểm này, những con tích bị hạ gục xuống đáy ống và được ủ trên tấm hâm nóng ở nhiệt độ 45-50°C trong thời gian không lâu hơn 5 phút. Những con tích mà nằm bất động trên đáy hoặc di chuyển theo kiểu không điều phối khiến cho chúng không có khả năng chủ động tránh nhiệt nóng bằng cách leo lên phía trên được coi là bị chết hoặc hấp hối.

Một chất thể hiện hiệu quả chống lại *Rhipicephalus sanguineus* tốt nếu như ít nhất đạt được hiệu quả 80% trong thử nghiệm này với tỷ lệ áp dụng 5µg/cm². Hiệu quả 100% có nghĩa là, toàn bộ tích bị chết hoặc hấp hối. Hiệu quả 0% có nghĩa là, không có tích nào bị tổn thương.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 100% với tỷ lệ áp dụng 5 µg/cm²: I-T3-1, I-T3-3, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-23, I-T3-24, I-T3-42, I-T3-44, I-T3-46, I-T3-47, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-61, I-T3-63, I-T3-71, I-T3-72, I-T3-81, I-T3-90, I-T3-91, I-T3-96, I-T3-97, I-T3-98, I-T3-104, I-T3-106, I-T3-109, I-T3-110, I-T3-112, I-T3-117, I-T3-119, I-T3-148, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-161, I-T3-162, I-T3-163, I-T3-165, I-T3-175, I-T3-176, I-T3-189, I-T3-196, I-T4-1, I-T4-2, I-T4-3, I-T4-4, I-T22-2, I-T22-1, I-T22-4, I-T22-5, I-T22-6, I-T22-7

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 80% với tỷ lệ áp dụng 5 µg/cm²: I-T3-38, I-T3-43, I-T3-80, I-T3-88, I-T3-92, I-T3-143

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 100% với tỷ lệ áp dụng 1 µg/cm²: I-T3-108, I-T3-114, I-T3-141

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 80% với tỷ lệ áp dụng 1 µg/cm²: I-T3-94, I-T3-123

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 100% với tỷ lệ áp dụng 0,2 µg/cm²: I-T3-105

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 80% với tỷ lệ áp dụng 0,2 µg/cm²: I-T3-64

Thử nghiệm tiếp xúc Ctenocephalides felis in vitro với bọ chét mèo trưởng thành

Đối với lớp phủ của ống thử nghiệm, 9mg hoạt chất trước tiên được hòa tan trong 1ml axeton p.a. và sau đó được pha loãng tới nồng độ mong muốn bằng axeton p.a. Lượng 250µl dung dịch được phân bố đồng đều lên các thành bên trong và đáy của ống thử nghiệm thể tích 25ml bằng cách xoay và lắc trên máy lắc tròn (quay lắc với tốc độ 30 vòng/phút trong thời gian 2 giờ). Với 900 ppm dung dịch hoạt chất và diện tích bề mặt bên trong 44,7cm², có thể đạt được sự phân bố đồng đều xác định, liều lượng dựa vào diện tích 5 µg/cm².

Sau khi dung môi đã bay hơi hết, các ống được nạp 5 đến 10 bọ chét mèo trưởng thành (*Ctenocephalides felis*), đậy kín bằng nắp nhựa đục lỗ và được ủ ở vị trí nằm ngang ở nhiệt độ trong phòng và độ ẩm môi trường xung quanh. Hiệu quả được xác định sau thời gian 48 giờ. Về điểm này, các ống thử nghiệm được để thẳng đứng và bọ chét được hạ gục xuống đáy ống. Những bọ chét mà nằm bất động ở đáy hoặc di chuyển theo kiểu không điều phối được coi là bị chết hoặc hấp hối.

Một chất thể hiện hiệu quả chống lại *Ctenocephalides felis* tốt nếu như ít nhất đạt được hiệu quả 80% trong thử nghiệm này với tỷ lệ áp dụng 5 µg/cm². Hiệu quả

100% có nghĩa là, toàn bộ bọ chét bị chết hoặc hấp hối. Hiệu quả 0% có nghĩa là, không có bọ chét nào bị tổn thương.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 100% với tỷ lệ áp dụng 5 µg/cm² (= 500 g/ha): I-T3-1, I-T3-3, I-T3-7, I-T3-9, I-T3-17, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-23, I-T3-24, I-T3-25, I-T3-27, I-T3-28, I-T3-29, I-T3-30, I-T3-31, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-44, I-T3-46, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-61, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-71, I-T3-72, I-T3-80, I-T3-81, I-T3-84, I-T3-85, I-T3-86, I-T3-87, I-T3-88, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-93, I-T3-94, I-T3-95, I-T3-96, I-T3-97, I-T3-98, I-T3-99, I-T3-100, I-T3-101, I-T3-102, I-T3-103, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-109, I-T3-110, I-T3-111, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-114, I-T3-115, I-T3-116, I-T3-117, I-T3-118, I-T3-119, I-T3-120, I-T3-123, I-T3-124, I-T3-125, I-T3-127, I-T3-128, I-T3-129, I-T3-130, I-T3-131, I-T3-132, I-T3-133, I-T3-136, I-T3-137, I-T3-138, I-T3-143, I-T3-145, I-T3-147, I-T3-148, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-162, I-T3-163, I-T3-165, I-T3-175, I-T3-176, I-T3-189, I-T3-196, I-T3-199, I-T4-2, I-T4-3, I-T4-4, I-T22-1, I-T22-2, I-T22-3, I-T22-5, I-T22-7, I-T23-1, I-T23-2, I-T46-2

Thử nghiệm với Amblyomma hebaraeum

Dung môi: dimetyl sulphoxit

Để tạo ra chế phẩm chứa hoạt chất, 10mg hoạt chất được trộn kết hợp với 0,5ml dimetyl sulphoxit, và sản phẩm cô được pha loãng bằng nước tới nồng độ mong muốn.

Nhộng tích (*Amblyomma hebraeum*) được đặt vào trong cốc nhựa đục lỗ và được ngâm ở nồng độ mong muốn trong thời gian một phút. Tích được được chuyển qua giấy lọc để vào đĩa Petri và được bảo quản trong ngăn được kiểm soát môi trường.

Sau thời gian 42 ngày, tỷ lệ tiêu diệt tính bằng % được xác định. 100% có nghĩa là, toàn bộ tích đã bị tiêu diệt; 0% có nghĩa là, không có con tích nào bị tiêu diệt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 100% với tỷ lệ áp dụng 100 ppm: I-T3-1, I-T3-3, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-24, I-T3-28, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-44, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-71, I-T3-72, I-T3-81, I-T3-86, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-95, I-T3-96, I-T3-97, I-

T3-98, I-T3-100, I-T3-104, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-109, I-T3-110, I-T3-112, I-T3-114, I-T3-116, I-T3-117, I-T3-119, I-T3-124, I-T3-125, I-T3-131, I-T3-148, I-T3-155, I-T3-162, I-T3-163, I-T22-1, I-T22-2, I-T23-1, I-T4-3, I-T4-4

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 95% với tỷ lệ áp dụng 100 ppm: I-T3-101

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 90% với tỷ lệ áp dụng 100 ppm: I-T3-102, I-T3-103

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 85% với tỷ lệ áp dụng 100 ppm: I-T3-105

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 80% với tỷ lệ áp dụng 100 ppm: I-T3-53, I-T3-61, I-T3-111, I-T3-123

Boophilus microplus – thử nghiệm tiêm

Dung môi: dimetyl sulphoxit

Để tạo ra chế phẩm chứa hoạt chất, 10mg hoạt chất được trộn kết hợp với 0,5ml dung môi và sản phẩm cô được pha loãng bằng dung môi tới nồng độ mong muốn.

1 µl dung dịch hoạt chất được tiêm vào trong bụng của 5 con tích gia súc cái trưởng thành hút căng máu *(Boophilus microplus)*. Các con vật này được chuyển vào trong các đĩa và được duy trì trong phòng được kiểm soát môi trường.

Hiệu quả được đánh giá sau thời gian 7 ngày bằng cách cho đẻ trứng hữu thụ. Các trứng mà hiển nhiên không hữu thụ được bảo quản trong ngăn được kiểm soát môi trường cho tới khi ấu trùng nở sau thời gian khoảng 42 ngày. Hiệu quả 100% có nghĩa là, không có con tích nào đẻ bất kỳ trứng hữu thụ nào; 0% có nghĩa là, tất cả các trứng đều là hữu thụ.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 100% với tỷ lệ áp dụng 20 µg/động vật: I-T2-1, I-T2-2, I-T3-1, I-T3-2, I-T3-3, I-T3-4, I-T3-5, I-T3-6, I-T3-7, I-T3-8, I-T3-9, I-T3-10, I-T3-11, I-T3-12, I-T3-13, I-

T3-15, I-T3-17, I-T3-18, I-T3-19, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-23, I-T3-24, I-T3-25, I-T3-26, I-T3-27, I-T3-28, I-T3-29, I-T3-30, I-T3-31, I-T3-32, I-T3-33, I-T3-34, I-T3-35, I-T3-36, I-T3-37, I-T3-38, I-T3-39, I-T3-40, I-T3-41, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-44, I-T3-45, I-T3-46, I-T3-47, I-T3-48, I-T3-49, I-T3-50, I-T3-51, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-58, I-T3-59, I-T3-60, I-T3-61, I-T3-62, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-65, I-T3-66, I-T3-67, I-T3-68, I-T3-69, I-T3-70, I-T3-71, I-T3-72, I-T3-73, I-T3-74, I-T3-76, I-T3-77, I-T3-78, I-T3-79, I-T3-80, I-T3-81, I-T3-82, I-T3-83, I-T3-84, I-T3-85, I-T3-86, I-T3-87, I-T3-88, I-T3-89, I-T3-90, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-93, I-T3-94, I-T3-95, I-T3-96, I-T3-97, I-T3-98, I-T3-99, I-T3-100, I-T3-101, I-T3-102, I-T3-103, I-T3-104, I-T3-105, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-109, I-T3-110, I-T3-111, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-114, I-T3-115, I-T3-116, I-T3-117, I-T3-118, I-T3-119, I-T3-120, I-T3-123, I-T3-124, I-T3-125, I-T3-126, I-T3-127, I-T3-128, I-T3-129, I-T3-130, I-T3-131, I-T3-132, I-T3-133, I-T3-136, I-T3-137, I-T3-145, I-T3-139, I-T3-140, I-T3-141, I-T3-142, I-T3-143, I-T3-144, I-T3-146, I-T3-148, I-T3-149, I-T3-150, I-T3-151, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-161, I-T3-162, I-T3-163, I-23-165, I-T3-168, I-T3-175, I-T3-176, I-T3-89, I-T4-1, I-T4-2, I-T4-3, I-T4-4, I-T22-1, I-T22-2, I-T22-3, I-T22-4, I-T22-5, I-T22-6, I-T22-7, I-T23-1, I-T23-2, I-T46-2

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 90% với tỷ lệ áp dụng 20 µg/động vật: I-T3-75

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 80% với tỷ lệ áp dụng 20 µg/động vật: I-T3-121

Thử nghiệm ngâm nhúng Boophilus microplus

Động vật thử nghiệm: tích gia súc (*Boophilus microplus)* chủng Parkhurst, kháng SP

Dung môi: dimetyl sulphoxit

10mg hoạt chất được hòa tan trong 0,5ml dimetyl sulphoxit. Đối với mục đích tạo ra chế phẩm thích hợp, dung dịch hoạt chất được pha loãng bằng nước tới nồng độ mong muốn trong mỗi trường hợp.

Chế phẩm chứa hoạt chất này được chuẩn độ bằng pipet vào trong ống nghiệm. 8 đến 10 tích gia súc cái trưởng thành hút căng máu (*Boophilus microplus*) được chuyển vào trong một ống khác có lỗ. Các ống được nhúng vào trong chế phẩm chứa hoạt chất và toàn bộ tích được làm ướt hoàn toàn. Sau khi chất lỏng đã khô hết, tích được chuyển qua các đĩa lọc vào trong đĩa nhựa và được bảo quản trong phòng được kiểm soát môi trường.

Hiệu quả được đánh giá sau thời gian 7 ngày bằng cách cho đẻ trứng hữu thụ. Các trứng mà hiển nhiên không hữu thụ được bảo quản trong ngăn được kiểm soát môi trường cho tới khi ấu trùng nở sau thời gian khoảng 42 ngày. Hiệu quả 100% có nghĩa là, không có con tích nào đẻ bất kỳ trứng hữu thụ nào; 0% có nghĩa là, tất cả các trứng đều là hữu thụ.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 100% với tỷ lệ áp dụng 100 ppm: I-T3-1, I-T3-3, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-24, I-T3-28, I-T3-39, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-44, I-T3-48, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-61, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-71, I-T3-72, I-T3-81, I-T3-86, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-95, I-T3-96, I-T3-97, I-T3-98, I-T3-100, I-T3-101, I-T3-102, I-T3-103, I-T3-104, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-109, I-T3-110, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-114, I-T3-115, I-T3-116, I-T3-117, I-T3-118, I-T3-119, I-T3-120, I-T3-123, I-T3-124, I-T3-125, I-T3-130, I-T3-131, I-T3-133, I-T3-148, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-162, I-T3-163, I-T3-165, I-T3-175, I-T3-176, I-T4-3, I-T4-4, I-T22-1, I-T22-2, I-T22-4, I-T22-5, I-T22-6, I-T22-7, I-T23-1

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 98% với tỷ lệ áp dụng 100 ppm: I-T3-111

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 90% với tỷ lệ áp dụng 100 ppm: I-T3-99

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 80% với tỷ lệ áp dụng 100 ppm: I-T3-27, I-T3-80

Ctenocephalides felis - thử nghiệm uống

Dung môi: dimetyl sulphoxit

Nhằm mục đích tạo ra chế phẩm chứa hoạt chất thích hợp, 10mg hoạt chất được trộn kết hợp với 0,5ml dimetyl sulphoxit. Tiến hành pha loãng bằng máu gia súc được xitrat hóa thu được nồng độ mong muốn.

Khoảng 20 bọ chét mèo không được cho ăn (*Ctenocephalides felis*) được đặt vào trong một khoang nhỏ mà khoang này được đậy kín ở đỉnh và đáy bằng gạc. Một cột hình trụ bằng kim loại mà đáy của nó được đậy kín bằng màng parafilm được đặt lên trên khoang nêu trên. Cột trụ này chứa máu/chế phẩm hoạt tính, có thể được hấp thụ bởi bọ chét thông qua màng parafilm.

Sau thời gian 2 ngày, tỷ lệ tiêu diệt tính bằng % được xác định. 100% có nghĩa là, tất cả số bọ chét đã bị tiêu diệt; 0% có nghĩa là, không có bọ chét nào bị tiêu diệt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ, bào chế thể hiện hiệu quả là 100% với tỷ lệ áp dụng là 100 ppm: I-T3-1, I-T3-2, I-T3-3, I-T3-4, I-T3-5, I-T3-7, I-T3-8, I-T3-9, I-T3-10, I-T3-12, I-T3-18, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-23, I-T3-24, I-T3-25, I-T3-26, I-T3-27, I-T3-28, I-T3-29, I-T3-30, I-T3-31, I-T3-32, I-T3-33, I-T3-34, I-T3-35, I-T3-38, I-T3-39, I-T3-40, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-44, I-T3-46, I-T3-47, I-T3-48, I-T3-49, I-T3-50, I-T3-51, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-58, I-T3-59, I-T3-61, I-T3-62, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-65, I-T3-66, I-T3-67, I-T3-68, I-T3-69, I-T3-71, I-T3-72, I-T3-73, I-T3-76, I-T3-77, I-T3-78, I-T3-80, I-T3-81, I-T3-84, I-T3-85, I-T3-86, I-T3-87, I-T3-88, I-T3-89, I-T3-90, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-93, I-T3-94, I-T3-95, I-T3-96, I-T3-97, I-T3-98, I-T3-99, I-T3-100, I-T3-101, I-T3-102, I-T3-103, I-T3-104, I-T3-105, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-109, I-T3-110, I-T3-111, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-114, I-T3-115, I-T3-116, I-T3-117, I-T3-118, I-T3-119, I-T3-120, I-T3-123, I-T3-124, I-T3-125, I-T3-127, I-T3-128, I-T3-129, I-T3-130, I-T3-131, I-T3-132, I-T3-133, I-T3-135, I-T3-136, I-T3-137, I-T3-139, I-T3-140, I-T3-141, I-T3-143, I-T3-145, I-T3-146, I-T3-148, I-T3-149, I-T3-150, I-T3-151, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-161, I-T3-162, I-T3-163, I-T3-165, I-T3-168, I-T3-175, I-

T3-176, I-T3-189, I-T4-1, I-T4-2, I-T4-3, I-T4-4, I-T22-1, I-T22-2, I-T22-3, I-T22-4, I-T22-5, I-T22-7, I-T23-1, I-T23-2, I-T46-2

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ, bào chế thể hiện hiệu quả là 95% với tỷ lệ áp dụng là 100 ppm: I-T3-11, I-T3-17, I-T3-19, I-T3-41, I-T3-45, I-T3-70, I-T3-79, I-T3-82, I-T3-83, I-T22-6

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ, bào chế thể hiện hiệu quả là 90% với tỷ lệ áp dụng là 100 ppm: I-T3-15, I-T3-37, I-T3-60, I-T3-126, I-T3-144

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ, bào chế thể hiện hiệu quả là 80% với tỷ lệ áp dụng là 100 ppm: I-T3-13, I-T3-16, I-T3-36

Thử nghiệm với Lucilia cuprina

Dung môi: dimetyl sulphoxit

Để tạo ra chế phẩm chứa hoạt chất, 10mg hoạt chất được trộn kết hợp với 0,5ml dimetyl sulphoxit, và sản phẩm cô được pha loãng bằng nước tới nồng độ mong muốn.

Khoảng 20 ấu trùng L1 của ruồi hút máu cừu châu Úc (*Lucilia cuprina*) được chuyển vào trong bình thử nghiệm chứa thịt ngựa thái nhỏ và chế phẩm chứa hoạt chất ở nồng độ mong muốn.

Sau thời gian 2 ngày, tỷ lệ tiêu diệt tính bằng % được xác định. 100% có nghĩa là, toàn bộ ấu trùng đã bị tiêu diệt; 0% có nghĩa là, không có ấu trùng nào bị tiêu diệt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 100% với tỷ lệ áp dụng 100 ppm: I-T3-1, I-T3-2, I-T3-3, I-T3-4, I-T3-5, I-T3-6, I-T3-7, I-T3-8, I-T3-9, I-T3-10, I-T3-15, I-T3-17, I-T3-18, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-23, I-T3-24, I-T3-25, I-T3-26, I-T3-27, I-T3-28, I-T3-29, I-T3-30, I-T3-31, I-T3-32, I-T3-33, I-T3-34, I-T3-35, I-T3-36, I-T3-37, I-T3-38, I-T3-39, I-T3-40, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-44, I-T3-45, I-T3-46, I-T3-47, I-T3-48, I-T3-49, I-T3-50, I-T3-51, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-58, I-T3-59, I-T3-61, I-T3-62, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-65, I-T3-66, I-T3-67, I-T3-68, I-T3-70, I-T3-71, I-T3-72, I-T3-

73, I-T3-77, I-T3-78, I-T3-80, I-T3-81, I-T3-82, I-T3-83, I-T3-84, I-T3-85, I-T3-86, I-T3-87, I-T3-88, I-T3-89, I-T3-90, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-93, I-T3-94, I-T3-96, I-T3-97, I-T3-98, I-T3-99, I-T3-100, I-T3-101, I-T3-102, I-T3-103, I-T3-104, I-T3-105, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-109, I-T3-110, I-T3-111, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-114, I-T3-115, I-T3-116, I-T3-117, I-T3-118, I-T3-119, I-T3-120, I-T3-123, I-T3-124, I-T3-125, I-T3-130, I-T3-131, I-T3-133, I-T3-136, I-T3-139, I-T3-140, I-T3-141, I-T3-143, I-T3-144, I-T3-145, I-T3-148, I-T3-149, I-T3-150, I-T3-151, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-161, I-T3-162, I-T3-163, I-T3-165, I-T3-168, I-T3-175, I-T3-176, I-T3-189, I-T4-1, I-T4-2, I-T4-3, I-T4-4, I-T22-1, I-T22-2, I-T22-3, I-T22-5, I-T22-6, I-T22-7, I-T23-1, I-T23-2, I-T46-2

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 95% với tỷ lệ áp dụng 100 ppm: I-T3-69

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 90% với tỷ lệ áp dụng 100 ppm: I-T3-41, I-T3-60, I-T3-74, I-T3-76, I-T3-127, I-T3-146

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 80% với tỷ lệ áp dụng 100 ppm: I-T3-12, I-T3-75, I-T3-79, I-T3-121, I-T3-137

Thử nghiệm với ruồi nhà Musca domestica

Dung môi: dimetyl sulphoxit

Để tạo ra chế phẩm chứa hoạt chất, 10mg hoạt chất được trộn kết hợp với 0,5ml dimetyl sulphoxit, và sản phẩm cô được pha loãng bằng nước tới nồng độ mong muốn.

Các bình chứa bọt biển được xử lý bằng dung dịch đường và chế phẩm chứa hoạt chất ở nồng độ mong muốn được nạp 10 ruồi hút máu ngựa trưởng thành *(Musca domestica)*.

Sau thời gian 2 ngày, tỷ lệ tiêu diệt tính bằng % được xác định. 100% có nghĩa là, toàn bộ ruồi đã bị tiêu diệt; 0% có nghĩa là, không có ruồi nào bị tiêu diệt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 100% với tỷ lệ áp dụng 100 ppm: I-T3-1, I-T3-2, I-T3-3, I-T3-4, I-T3-5, I-T3-8, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-23, I-T3-24, I-T3-25, I-T3-26, I-T3-27, I-T3-29, I-T3-31, I-T3-34, I-T3-38, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-46, I-T3-48, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-58, I-T3-61, I-T3-62, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-65, I-T3-71, I-T3-72, I-T3-73, I-T3-77, I-T3-80, I-T3-84, I-T3-85, I-T3-86, I-T3-87, I-T3-89, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-93, I-T3-94, I-T3-96, I-T3-97, I-T3-100, I-T3-101, I-T3-102, I-T3-103, I-T3-104, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-109, I-T3-110, I-T3-111, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-114, I-T3-115, I-T3-116, I-T3-117, I-T3-118, I-T3-119, I-T3-120, I-T3-123, I-T3-124, I-T3-125, I-T3-130, I-T3-131, I-T3-133, I-T3-136, I-T3-137, I-T3-141, I-T3-143, I-T3-144, I-T3-148, I-T3-149, I-T3-150, I-T3-151, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-161, I-T3-162, I-T3-163, I-T3-165, I-T3-175, I-T3-176, I-T3-189, I-T4-2, I-T22-1, I-T22-2, I-T22-3, I-T22-5, I-T22-7, I-T23-1, I-T23-2

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 95% với tỷ lệ áp dụng 100 ppm: I-T3-51

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 90% với tỷ lệ áp dụng 100 ppm: I-T3-30, I-T3-67, I-T3-76, I-T3-81, I-T3-90, I-T3-98, I-T3-99, I-T3-139, I-T3-145, I-T22-6

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 80% với tỷ lệ áp dụng 100 ppm: I-T3-7, I-T3-66, I-T3-68, I-T3-79, I-T3-88, I-T3-105, I-T3-121, I-T3-129

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 80% với tỷ lệ áp dụng 20 ppm: I-T3-28

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 80% với tỷ lệ áp dụng 4 ppm: I-T3-35

Thử nghiệm với tuyến trùng nốt sưng (Meloidogyne incognita)

Dung môi: 125,0 phần theo khối lượng của axeton

Để sản xuất chế phẩm chứa hoạt chất phù hợp, 1 phần khối lượng hoạt chất được trộn với lượng dung môi đã định và sản phẩm cô này được pha loãng bằng nước tới nồng độ mong muốn.

Các bình được đổ cát, dung dịch hoạt chất, huyền phù chứa trứng/ấu trùng của tuyến trùng nốt sưng (*Meloidogyne incognita*) và hạt rau diếp. Hạt rau diếp nảy mầm và các cây phát triển. Các nốt mụn phát triển ở rễ.

Sau 14 ngày, xác định hiệu quả diệt tuyến trùng do việc hình thành các nốt mụn tính theo %. 100% có nghĩa là không phát hiện được nốt mụn nào; 0% có nghĩa là số nốt mụn ở thực vật được xử lý tương ứng với mẫu đối chứng không được xử lý.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 90% với tỷ lệ áp dụng 20 ppm: I-T3-27, I-T3-28, I-T3-184, I-T3-185

Myzus persicae – thử nghiệm phun

Dung môi: 78 phần theo khối lượng của axeton và 1,5 phần theo khối lượng của dimetylformamit

Chất nhũ hóa: alkylaryl polyglycol ete

Để tạo ra chế phẩm chứa hoạt chất, 1 phần theo khối lượng của hoạt chất được hòa tan sử dụng các phần riêng biệt theo khối lượng của dung môi và được đưa vào nước chứa chất nhũ hóa nồng độ 1000 ppm cho tới khi đạt được nồng độ mong muốn. Để sản xuất các nồng độ thử nghiệm khác, chế phẩm được pha loãng với nước chứa chất nhũ hóa.

Các đĩa lá cải bắp Trung Quốc (*Brassica pekinensis*) gây nhiễm bởi rệp đào (*Myzus persicae*) ở tất cả các giai đoạn được phun bằng chế phẩm chứa hoạt chất ở nồng độ mong muốn.

Sau thời gian 6 ngày, xác định hiệu quả tính theo %. 100% có nghĩa là, toàn bộ rệp đã bị tiêu diệt; 0% có nghĩa là, không có rệp nào bị tiêu diệt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 100% với tỷ lệ áp dụng 500 g/ha: I-T3-7, I-T3-20, I-T3-43, I-T3-44, I-T3-46, I-T3-92, I-T3-100, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-110, I-T3-122, I-T3-185, I-T3-187

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 90% với tỷ lệ áp dụng 500 g/ha: I-T3-8, I-T3-21, I-T3-29, I-T3-30, I-T3-42, I-T3-91, I-T3-97, I-T3-103, I-T3-105, I-T3-109, I-T3-114, I-T3-117, I-T3-119, I-T3-120, I-T3-186

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 100% với tỷ lệ áp dụng 100 g/ha: I-T3-1, I-T3-3, I-T3-27, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-77, I-T3-88, I-T3-99, I-T3-101, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-115, I-T3-116, I-T3-118, I-T3-120, I-T3-123, I-T3-124, I-T3-125, I-T3-127, I-T3-128, I-T3-129, I-T3-130, I-T3-162, I-T3-165, I-T3-170, I-T3-174, I-T3-175, I-T3-176, I-T3-179, I-T3-184, I-T3-189, I-T22-1, I-T22-2, I-T22-5, I-T22-7

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 90% với tỷ lệ áp dụng 100 g/ha: I-T3-28, I-T3-38, I-T3-39, I-T3-53, I-T3-64, I-T3-72, I-T3-76, I-T3-80, I-T3-81, I-T3-85, I-T3-87, I-T3-95, I-T3-96, I-T3-98, I-T3-131, I-T3-132, I-T3-145, I-T3-160, I-T3-164, I-T3-163, I-T4-3

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 90% với tỷ lệ áp dụng 20 g/ha: I-T3-182, I-T4-2

Phaedon cochleariae –thử nghiệm phun

Dung môi: 78,0 phần theo khối lượng của axeton và 1,5 phần theo khối lượng của dimetylformamit

Chất nhũ hóa: alkylaryl polyglycol ete

Để tạo ra chế phẩm chứa hoạt chất, 1 phần theo khối lượng của hoạt chất được hòa tan sử dụng các phần riêng biệt theo khối lượng của dung môi và được đưa vào nước chứa chất nhũ hóa nồng độ 1000 ppm cho tới khi đạt được nồng độ mong muốn.

Để sản xuất các nồng độ thử nghiệm khác, chế phẩm được pha loãng với nước chứa chất nhũ hóa.

Các đĩa lá cải bắp Trung Quốc (*Brassica pekinensis*) được phun bằng chế phẩm chứa hoạt chất ở nồng độ mong muốn và sau khi làm khô, các ấu trùng của bọ cánh cứng mù tạc (*Phaedon cochleariae*) được đưa vào.

Sau thời gian 7 ngày, xác định hiệu quả tính theo %. 100% có nghĩa là, toàn bộ ấu trùng bọ cánh cứng đã bị tiêu diệt; 0% có nghĩa là, không có ấu trùng bọ cánh cứng nào bị tiêu diệt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 100% với tỷ lệ áp dụng 500 g/ha: I-T3-7, I-T3-8, I-T3-9, I-T3-10, I-T3-12, I-T3-15, I-T3-17, I-T3-18, I-T3-19, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-22, I-T3-23, I-T3-24, I-T3-25, I-T3-26, I-T3-29, I-T3-30, I-T3-31, I-T3-34, I-T3-35, I-T3-36, I-T3-37, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-44, I-T3-45, I-T3-46, I-T3-47, I-T3-65, I-T3-66, I-T3-67, I-T3-68, I-T3-69, I-T3-70, I-T3-73, I-T3-74, I-T3-75, I-T3-76, I-T3-77, I-T3-78, I-T3-79, I-T3-89, I-T3-90, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-96, I-T3-97, I-T3-98, I-T3-100, I-T3-101, I-T3-102, I-T3-103, I-T3-104, I-T3-105, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-109, I-T3-110, I-T3-111, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-114, I-T3-115, I-T3-116, I-T3-117, I-T3-118, I-T3-119, I-T3-120, I-T3-126, I-T3-184, I-T3-185, I-T3-186, I-T3-187, I-T3-188, I-T23-1, I-T23-2

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 100% với tỷ lệ áp dụng 100 g/ha: I-T2-1, I-T2-2, I-T3-1, I-T3-2, I-T3-3, I-T3-4, I-T3-5, I-T3-6, I-T3-27, I-T3-28, I-T3-38, I-T3-39, I-T3-40, I-T3-41, I-T3-48, I-T3-49, I-T3-50, I-T3-51, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-58, I-T3-59, I-T3-61, I-T3-62, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-71, I-T3-72, I-T3-80, I-T3-81, I-T3-82, I-T3-83, I-T3-84, I-T3-85, I-T3-86, I-T3-87, I-T3-88, I-T3-93, I-T3-94, I-T3-95, I-T3-99, I-T3-123, I-T3-124, I-T3-125, I-T3-127, I-T3-128, I-T3-129, I-T3-130, I-T3-131, I-T3-132, I-T3-133, I-T3-136, I-T3-137, I-T3-139, I-T3-140, I-T3-141, I-T3-143, I-T3-144, I-T3-145, I-T3-148, I-T3-149, I-T3-151, I-T3-152, I-T3-153, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-161, I-T3-162, I-T3-163, I-T3-164, I-T3-165, I-T3-168, I-T3-169, I-

T3-170, I-T3-171, I-T3-172, I-T3-174, I-T3-175, I-T3-176, I-T3-177, I-T3-178, I-T3-179, I-T3-180, I-T3-181, I-T3-182, I-T3-183, I-T3-189, I-T3-190, I-T3-191, I-T3-192, I-T3-195, I-T3-197, I-T3-198, I-T3-220, I-T3-221, I-T3-222, I-T3-223, I-T4-1, I-T4-2, I-T4-3, I-T4-4, I-T22-1, I-T22-2, I-T22-3, I-T22-4, I-T22-5, I-T22-6, I-T22-7, I-T46-2, I-T46-3, I-T46-4, I-T46-5, I-T46-6

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 83% với tỷ lệ áp dụng 100 g/ha: I-T3-138

Spodoptera frugiperda – thử nghiệm phun

Dung môi: 78,0 phần theo khối lượng của axeton và 1,5 phần theo khối lượng của dimetylformamit

Chất nhũ hóa: alkylaryl polyglycol ete

Để tạo ra chế phẩm chứa hoạt chất, 1 phần theo khối lượng của hoạt chất được hòa tan sử dụng các phần riêng biệt theo khối lượng của dung môi và được đưa vào nước chứa chất nhũ hóa nồng độ 1000 ppm cho tới khi đạt được nồng độ mong muốn. Để sản xuất các nồng độ thử nghiệm khác, chế phẩm được pha loãng với nước chứa chất nhũ hóa.

Các đĩa lá ngô (*Zea mays*) được phun bằng chế phẩm chứa hoạt chất ở nồng độ mong muốn và sau khi làm khô, ngài sâu xanh (*Spodoptera frugiperda*) được đưa vào.

Sau thời gian 7 ngày, xác định hiệu quả tính theo %. 100% có nghĩa là, toàn bộ ngài đã bị tiêu diệt; 0% có nghĩa là, không có ngài nào bị tiêu diệt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 100% với tỷ lệ áp dụng 500 g/ha: I-T3-7, I-T3-8, I-T3-9, I-T3-10, I-T3-12, I-T3-17, I-T3-18, I-T3-19, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-22, I-T3-23, I-T3-24, I-T3-25, I-T3-26, I-T3-29, I-T3-30, I-T3-31, I-T3-34, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-44, I-T3-45, I-T3-46, I-T3-47, I-T3-65, I-T3-66, I-T3-67, I-T3-68, I-T3-69, I-T3-70, I-T3-73, I-T3-74, I-T3-75, I-T3-76, I-T3-77, I-T3-78, I-T3-79, I-T3-89, I-T3-90, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-96, I-T3-97, I-T3-98, I-T3-100, I-T3-102, I-T3-103, I-T3-104, I-T3-105, I-T3-106, I-T3-

107, I-T3-108, I-T3-109, I-T3-110, I-T3-111, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-114, I-T3-115, I-T3-116, I-T3-117, I-T3-118, I-T3-119, I-T3-120, I-T3-126, I-T3-184, I-T3-185, I-T3-186, I-T3-187, I-T23-1, I-T23-2

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 83% với tỷ lệ áp dụng 500 g/ha: I-T3-101

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 100% với tỷ lệ áp dụng 100 g/ha: I-T2-2, I-T3-1, I-T3-2, I-T3-3, I-T3-4, I-T3-27, I-T3-28, I-T3-38, I-T3-39, I-T3-40, I-T3-41, I-T3-48, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-58, I-T3-61, I-T3-62, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-71, I-T3-72, I-T3-80, I-T3-81, I-T3-82, I-T3-83, I-T3-84, I-T3-85, I-T3-86, I-T3-87, I-T3-88, I-T3-93, I-T3-94, I-T3-95, I-T3-99, I-T3-123, I-T3-124, I-T3-125, I-T3-130, I-T3-131, I-T3-133, I-T3-136, I-T3-137, I-T3-138, I-T3-139, I-T3-140, I-T3-141, I-T3-143, I-T3-145, I-T3-148, I-T3-151, I-T3-152, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-161, I-T3-162, I-T3-163, I-T3-164, I-T3-165, I-T3-170, I-T3-174, I-T3-175, I-T3-176, I-T3-189, I-T3-191, I-T3-192, I-T3-197, I-T3-198, I-T4-1, I-T4-2, I-T4-3, I-T4-4, I-T22-1, I-T22-2, I-T22-3, I-T22-5, I-T22-7, I-T46-2, I-T46-3, I-T46-4, I-T46-5, I-T46-6

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 83% với tỷ lệ áp dụng 100 g/ha: I-T3-35, I-T3-50, I-T3-169, I-T3-177

Tetranychus urticae – thử nghiệm phun, kháng OP

Dung môi: 78,0 phần theo khối lượng của axeton và 1,5 phần theo khối lượng của dimetylformamit

Chất nhũ hóa: alkylaryl polyglycol ete

Để tạo ra chế phẩm chứa hoạt chất, 1 phần theo khối lượng của hoạt chất được hòa tan sử dụng các phần riêng biệt theo khối lượng của dung môi và được đưa vào nước chứa chất nhũ hóa nồng độ 1000 ppm cho tới khi đạt được nồng độ mong muốn. Để sản xuất các nồng độ thử nghiệm khác, chế phẩm được pha loãng với nước chứa chất nhũ hóa.

Các đĩa lá đậu (*Phaseolus vulgaris*) được gây nhiễm bằng mạt nhện đỏ nhà kính (*Tetranychus urticae*) ở tất cả mọi giai đoạn được phun bằng chế phẩm chứa hoạt chất ở nồng độ mong muốn.

Sau thời gian 6 ngày, xác định hiệu quả tính theo %. 100% có nghĩa là, toàn bộ mạt mạt nhện đã bị tiêu diệt; 0% có nghĩa là, không có mạt nhện nào bị tiêu diệt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 100% với tỷ lệ áp dụng 500 g/ha: I-T3-7, I-T3-8, I-T3-9, I-T3-10, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-22, I-T3-23, I-T3-24, I-T3-26, I-T3-29, I-T3-30, I-T3-31, I-T3-34, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-44, I-T3-45, I-T3-46, I-T3-47, I-T3-69, I-T3-75, I-T3-76, I-T3-77, I-T3-78, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-96, I-T3-97, I-T3-98, I-T3-100, I-T3-101, I-T3-103, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-109, I-T3-110, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-114, I-T3-115, I-T3-119, I-T3-120, I-T3-184, I-T3-185, I-T3-186, I-T3-187, I-T23-1, I-T23-2

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 90% với tỷ lệ áp dụng 500 g/ha: I-T3-25, I-T3-65, I-T3-70, I-T3-89, I-T3-90, I-T3-102, I-T3-104, I-T3-105, I-T3-116, I-T3-117, I-T3-118

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 100% với tỷ lệ áp dụng 100 g/ha: I-T3-1, I-T3-2, I-T3-3, I-T3-4, I-T3-27, I-T3-28, I-T3-38, I-T3-39, I-T3-41, I-T3-51, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-58, I-T3-61, I-T3-62, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-72, I-T3-73, I-T3-80, I-T3-81, I-T3-82, I-T3-83, I-T3-84, I-T3-85, I-T3-86, I-T3-87, I-T3-88, I-T3-93, I-T3-94, I-T3-95, I-T3-99, I-T3-124, I-T3-125, I-T3-127, I-T3-129, I-T3-130, I-T3-131, I-T3-132, I-T3-133, I-T3-139, I-T3-145, I-T3-146, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-161, I-T3-162, I-T3-163, I-T3-164, I-T3-165, I-T3-168, I-T3-169, I-T3-170, I-T3-174, I-T3-175, I-T3-176, I-T3-177, I-T3-178, I-T3-179, I-T3-180, I-T3-181, I-T3-182, I-T3-183, I-T3-189, I-T3-190, I-T3-192, I-T3-197, I-T3-221, I-T3-222, I-T3-223, I-T4-1, I-T4-2, I-T4-3, I-T4-4, I-T22-4, I-T22-5, I-T22-7, I-T46-4, I-T46-5, I-T46-6

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 90% với tỷ lệ áp dụng 100 g/ha: I-T3-50, I-T3-52, I-T3-71, I-T3-74, I-T3-

111, I-T3-123, I-T3-137, I-T3-138, I-T3-147, I-T3-148, I-T3-151, I-T3-172, I-T3-195, I-T22-1, I-T22-2, I-T22-3

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả 100% với tỷ lệ áp dụng 20 g/ha: I-T3-49

Thử nghiệm với muỗi anopheles (xử lý bề mặt ANPHGB)

Dung môi: axeton + 2000 ppm metyl este dầu cải dầu (RME)

Để tạo ra chế phẩm chứa hoạt chất, hoạt chất được hòa tan trong dung môi (2 mg/ml). Chế phẩm chứa hoạt chất được hút bằng pipet lên gạch men và sau khi đã làm khô, các muỗi trưởng thành thuộc loài Anopheles gambiae chủng RSPH (homozygot kdr) được đặt lên gạch đã xử lý. Thời gian tiếp xúc là 30 phút.

24 giờ sau khi tiếp xúc với bề mặt đã xử lý, xác định tỷ lệ chết tính theo %. 100% có nghĩa là, toàn bộ muỗi đã bị tiêu diệt; 0% có nghĩa là, không có muỗi nào bị tiêu diệt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả từ 90 đến 100% với tỷ lệ áp dụng 100 mg/m^2: I-T3-20, I-T3-24, I-T3-27, I-T3-28, I-T3-43, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-61, I-T3-100, I-T3-102, I-T3-112, I-T3-123, I-T3-130, I-T3-133, I-T3-134, I-T3-136, I-T3-145, I-T3-148, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-162, I-T3-173, I-T3-189, I-T22-1

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả từ 90 đến 100% với tỷ lệ áp dụng 20 mg/m^2: I-T3-23, I-T3-24, I-T3-26, I-T3-27, I-T3-28, I-T3-43, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-57, I-T3-58, I-T3-61, I-T3-87, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-100, I-T3-102, I-T3-106, I-T3-112, I-T3-116, I-T3-130; I-T3-133, I-T3-134, I-T3-136, I-T3-137, I-T3-145, I-T3-148, I-T3-155, I-T3-159, I-T3-160, I-T3-162, I-T3-189, I-T22-2

Thử nghiệm với muỗi anopheles (xử lý bề mặt ANPHFU)

Dung môi: axeton + 2000 ppm metyl este dầu cải dầu (RME)

Để tạo ra chế phẩm chứa hoạt chất thích hợp, hoạt chất được hòa tan trong dung môi (2 mg/ml). Chế phẩm chứa hoạt chất được hút bằng pipet lên gạch men và sau khi đã làm khô, muỗi trưởng thành thuộc loài Anopheles funestus chủng FUMOZ-R (Hunt et al., Med Vet Entomol. 2005 Sep; 19(3):271-5) được đặt lên gạch đã xử lý. Thời gian tiếp xúc là 30 phút.

24 giờ sau khi tiếp xúc với bề mặt đã xử lý, xác định tỷ lệ chết tính theo %. 100% có nghĩa là, toàn bộ muỗi đã bị tiêu diệt; 0% có nghĩa là, không có muỗi nào bị tiêu diệt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả từ 90 đến 100% với tỷ lệ áp dụng 100 mg/m^2: I-T3-24, I-T3-25, I-T3-38, I-T3-43, I-T3-46, I-T3-54, I-T3-56, I-T3-58, I-T3-63, I-T3-86, I-T3-92, I-T3-99, I-T3-100, I-T3-102, I-T3-107, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-115, I-T3-123, I-T3-133, I-T3-134, I-T3-136, I-T3-145, I-T3-148, I-T3-155, I-T3-159, I-T3-160, I-T3-162, I-T3-189, I-T22-1, I-T22-2

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả từ 90 đến 100% với tỷ lệ áp dụng 20 mg/m^2: I-T3-3, I-T3-24, I-T3-25, I-3-26, I-T3-38, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-46, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-57, I-T3-61, I-T3-63, I-T3-92, I-T3-93, I-T3-99, I-T3-100, I-T3-102, I-T3-107, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-116, I-T3-123, I-T3-134, I-T3-136, I-T3-145, I-T3-148, I-T3-155, I-T3-159, I-T3-160, I-T3-162, I-T3-189, I-T22-1, I-T22-2, I-T23-1, I-T23-2

Thử nghiệm trên muỗi Aedes (xử lý bệ mặt AEDSAE)

Dung môi: axeton + 2000 ppm metyl este dầu cải dầu (RME)

Để tạo ra chế phẩm chứa hoạt chất, hoạt chất được hòa tan trong dung môi (2 mg/ml). Chế phẩm chứa hoạt chất được hút bằng pipet lên gạch men và sau khi đã làm khô, các muỗi trưởng thành thuộc loài Aedes aegypti chủng MONHEIM được đặt lên gạch đã xử lý. Thời gian tiếp xúc là 30 phút.

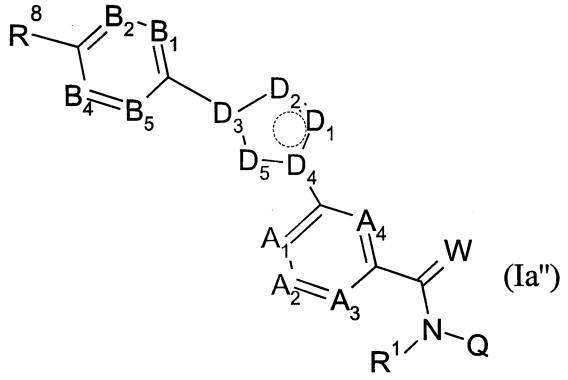
24 giờ sau khi tiếp xúc với bề mặt đã xử lý, xác định tỷ lệ chết tính theo %. 100% có nghĩa là, toàn bộ muỗi đã bị tiêu diệt; 0% có nghĩa là, không có muỗi nào bị tiêu diệt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả từ 90 đến 100% với tỷ lệ áp dụng 100 mg/m^2: I-T3-1, I-T3-3, I-T3-8, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-23, I-T3-24, I-T3-25, I-T3-27, I-T3-28, I-T3-38, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-46, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-58, I-T3-61, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-86, I-T3-87, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-93, I-T3-96, I-T3-98, I-T3-99, I-T3-100, I-T3-101, I-T3-102, I-T3-103, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-115, I-T3-117, I-T3-118, I-T3-120, I-T3-123, I-T3-130, I-T3-133, I-T3-134, I-T3-136, I-T3-145, I-T3-148, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-162, I-T3-163, I-T3-173, I-T3-189, I-T22-1, I-T22-2, I-T23-1, I-T23-2

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ phần ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả từ 90 đến 100% với tỷ lệ áp dụng 20 mg/m^2: I-T3-1, I-T3-3, I-T3-8, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-23, I-T3-24, I-T3-25, I-T3-27, I-T3-28, I-T3-38, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-46, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-58, I-T3-61, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-86, I-T3-87, I-T3-91, I-T3-92, I-T-93, I-T3-95, I-T3-96, I-T3-98, I-T3-99, I-T3-100, I-T3-101, I-T3-102, I-T3-103, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-115, I-T3-116, I-T3-117, I-T3-118, I-T3-123, I-T3-130, I-T3-133, I-T3-134, I-T3-136, I-T3-145, I-T3-148, I-T3-155, I-T3-159, I-T3-160, I-T3-162, I-T3-163, I-T3-173, I-T3-189, I-T22-1, I-T22-2, I-T23-1, I-T23-2

YÊU CẦU BẢO HỘ

1. Hợp chất có công thức (Ia"):



(Ia")

trong đó:

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

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

D_3 là C hoặc N;

D_4 là C hoặc N;

D_5 là C-R^{11} hoặc N;

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

◌ là hệ thơm; và

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

các gốc sau đây là như sau:

A_1 là C-N,

A_2 là CR^3 hoặc N,

A_3 là CR^4,

A_4 là C-H,

B_1 là CR^6 hoặc N,

B_2 là C-H,

B_4 là C-H, và

B_5 là CR^{10} hoặc N,

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

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

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

R^8 là C_1-C_4-alkoxyl được thế flo hoặc C_1-C_4-alkyl được thế flo;

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

W là O hoặc S;

Q là H, formyl, hydroxyl, amino hoặc trong mỗi trường hợp là C_1-C_6-alkyl, C_2-C_6-alkenyl, C_2-C_6-alkynyl, C_3-C_6-xycloalkyl, C_1-C_5-heteroxycloalkyl, C_1-C_4-alkoxy, C_1-C_6-alkyl-C_3-C_6-xycloalkyl, C_3-C_6-xycloalkyl-C_1-C_6-alkyl, C_6-,C_{10}-C_{14}-aryl, C_1-C_5-heteroaryl, C_6-,C_{10}-,C_{14}-aryl-(C_1-C_3)-alkyl,

C_1-C_5-heteroaryl-(C_1-C_3)-alkyl, *N*-C_1-C_4-alkylamino, *N*-C_1-C_4-alkylcacbonylamino, hoặc *N,N*-di-C_1-C_4-alkylamino tùy ý được thế; hoặc

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

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

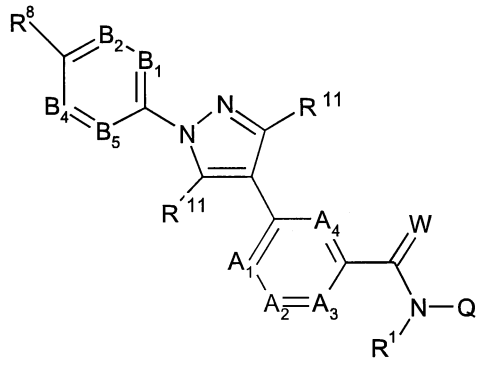
V độc lập là halogen, xyano, nitro, trong mỗi trường hợp là C_1-C_6-alkyl, C_1-C_4-alkenyl, C_1-C_4-alkynyl, C_3-C_6-xycloalkyl, C_1-C_6-alkoxy, *N*-C_1-C_6-alkoxyimino-C_1-C_3-alkyl, C_1-C_6-alkylsulphanyl, C_1-C_6-alkylsulphinyl, C_1-C_6-alkylsulphonyl, hoặc *N,N*-di-(C_1-C_6-alkyl)amino tùy ý được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

trong đó, nếu mỗi nhóm trong số các nhóm R^3, R^4, R^6 và R^{10}, R^{11}, Q và V được thế độc lập với nhau, các phần tử thế là một (1) phần tử thế hoặc nhiều phần tử thế được chọn từ nhóm bao gồm amino, hydroxyl, halogen, nitro, xyano, isoxyano, mercapto, isothioxyanato, C_1-C_4-carboxyl, cacbonamit, SF_5, aminosulphonyl, C_1-C_4-alkyl, C_3-C_4-xycloalkyl, C_2-C_4-alkenyl, C_3-C_4-xycloalkenyl, C_2-C_4-alkynyl, *N*-mono-C_1-C_4-alkylamino, *N,N*-di-C_1-C_4-alkylamino, *N*-C_1-C_4-alkanoylamino, C_1-C_4-alkoxy, C_2-C_4-alkenyloxy, C_2-C_4-alkynyloxy, C_3-C_4-xycloalkoxy, C_3-C_4-xycloalkenyloxy, C_1-C_4-alkoxycacbonyl, C_2-C_4-alkenyloxycacbonyl, C_2-C_4-alkynyloxycacbonyl, C_6-,C_{10}-,C_{14}-aryloxycacbonyl, C_1-C_4-alkanoyl, C_2-C_4-alkenylcacbonyl, C_2-C_4-alkynylcacbonyl, C_6-,C_{10}-,C_{14}-arylcacbonyl, C_1-C_4-alkylsulphanyl, C_3-C_4-xycloalkylsulphanyl, C_1-C_4-alkylthio, C_2-C_4-alkenylthio, C_3-C_4-xycloalkenylthio, C_2-C_4-alkynylthio, C_1-C_4-alkylsulphenyl và C_1-C_4-alkylsulphinyl, bao gồm cả các chất đồng phân đối ảnh của nhóm C_1-C_4-alkylsulphinyl, C_1-C_4-alkylsulphonyl, *N*-mono-C_1-C_4-alkylaminosulphonyl, *N,N*-di-C_1-C_4-alkylaminosulphonyl, C_1-C_4-alkylphosphinyl, C_1-C_4-alkylphosphonyl, bao gồm cả các chất đồng phân đối ảnh của C_1-C_4-alkylphosphinyl và C_1-C_4-alkylphosphonyl, *N*-C_1-C_4-alkylaminocacbonyl, *N,N*-di-C_1-C_4-alkylaminocacbonyl, N-C_1-C_4-alkanoylaminocacbonyl, N-C_1-C_4-alkanoyl-N-C_1-C_4-alkylaminocacbonyl, C_6-,C_{10}-,C_{14}-aryl, C_6-,C_{10}-,C_{14}-aryloxy, benzyl, benzyloxy, benzylthio, C_6-,C_{10}-,C_{14}-arylthio, C_6-,C_{10}-,C_{14}-arylamino, benzylamino, heteroxyclyl và trialkylsilyl, các phần tử thế được liên kết thông qua liên kết đôi như

C_1-C_4-alkyliden (ví dụ, metyliden hoặc etyliden), nhóm oxo, nhóm thioxo, nhóm imino và nhóm imino được thế,

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

2. Hợp chất theo điểm 1, trong đó các hợp chất có công thức (Ia") là các hợp chất có công thức (I-T3):

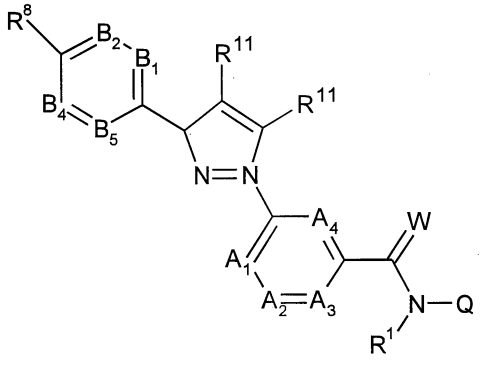


(I-T3)

trong đó:

mỗi R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, Q và W là như được xác định trong điểm 1.

3. Hợp chất theo điểm 1, trong đó các hợp chất có công thức (Ia") là các hợp chất có công thức (I-T2):

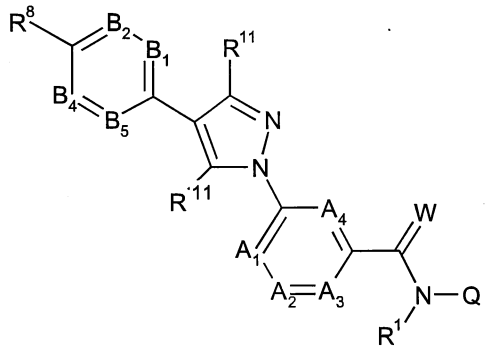


(I-T2)

trong đó:

mỗi R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, Q và W là như được xác định trong điểm 1.

4. Hợp chất theo điểm 1, trong đó các hợp chất có công thức (Ia") là các hợp chất có công thức (I-T4):

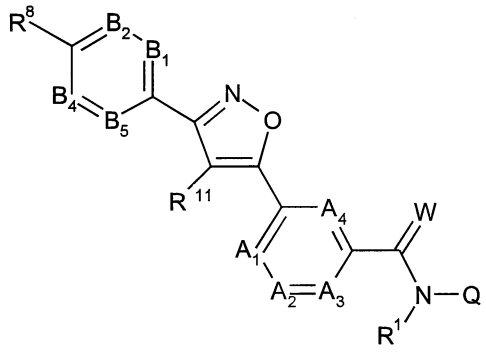


(I-T4)

trong đó:

mỗi R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, Q và W là như được xác định trong điểm 1.

5. Hợp chất theo điểm 1, trong đó các hợp chất có công thức (Ia") là các hợp chất có công thức (I-T22):

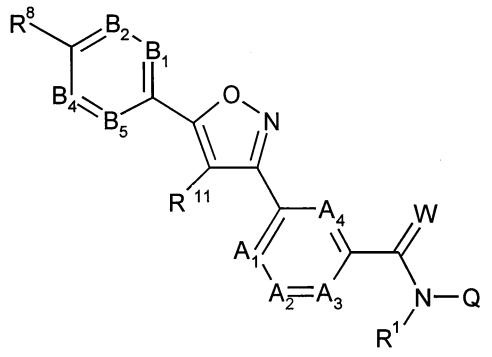


(T-22)

trong đó:

mỗi R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, Q và W là như được xác định trong điểm 1.

6. Hợp chất theo điểm 1, trong đó các hợp chất có công thức (Ia") là các hợp chất có công thức (I-T23):

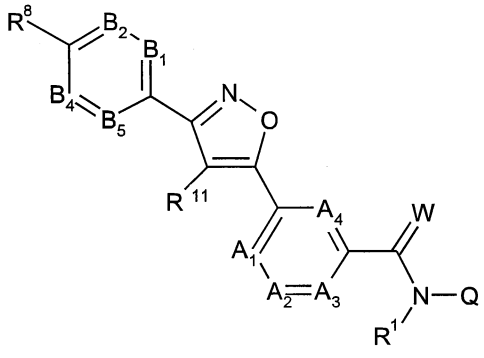


(I-T23)

trong đó:

mỗi R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, Q và W là như được xác định trong điểm 1.

7. Hợp chất theo điểm 1, trong đó các hợp chất có công thức (Ia'') là các hợp chất có công thức (I-T46):



(I-T46)

trong đó:

mỗi R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, Q và W là như được xác định trong điểm 1.

8. Hợp chất theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 7, trong đó R^{11} độc lập là H và W là O.

9. Hợp chất theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 8, trong đó R^1 là H.

10. Hợp chất theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 9, trong đó Q là C_1-C_3-alkyl, xyclopropyl, 1-(xyano)xyclopropyl, 1-(C_1-C_3-alkyl perflo hóa)xyclopropyl, 1-(C_1-C_4-alkyl)xyclopropyl, 1-(thiocarbamoyl)xyclopropyl, C_1-C_3-alkyl được thế

halogen, thietan-3-yl, N-metylpyrazol-3-yl hoặc 2-oxo-2(2,2,2-trifloetylamino)-etyl.

11. Chế phẩm diệt côn trùng, khác biệt ở chỗ chế phẩm này chứa ít nhất một hợp chất có công thức (I) theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 10 và một chất độn và/hoặc một chất có hoạt tính bề mặt.