



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

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

(11)



1-0038967

(51)^{2020.01} C07D 401/14; A01P 13/00; C07D 221/20; C07D 401/04; C07D 401/06; C07D 401/12; A01N 43/42; C07D 405/06; C07D 409/06; C07D 413/04; C07D 413/06; C07D 413/12; C07D 417/06 (13) B

(21) 1-2020-05679

(22) 06/03/2019

(86) PCT/EP2019/055570 06/03/2019

(87) WO 2019/170745 12/09/2019

(30) 1803736.6 08/03/2018 GB

(45) 26/02/2024 431

(43) 26/04/2021 397

(73) SYNGENTA PARTICIPATIONS AG (CH)

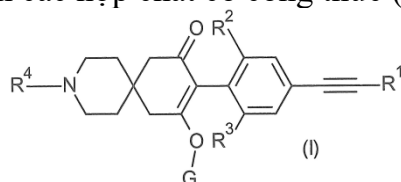
Rosentalstrasse 67, 4058 Basel (CH)

(72) HENNESSY, Alan, Joseph (IE); JONES, Elizabeth, Pearl (GB); HACHISU, Shuji (GB); WILLETTS, Nigel, James (GB); DALE, Suzanna (GB); GREGORY, Alexander, William (GB); HOULSBY, Ian, Thomas, Timmouth (GB); BHONOA, Yunas (MU); COMAS-BARCELO, Julia (ES).

(74) Công ty TNHH Ban Ca (BANCA)

(54) HỢP CHẤT DIỆT CỎ, CHẾ PHẨM DIỆT CỎ CHỨA HỢP CHẤT NÀY VÀ PHƯƠNG PHÁP KIỂM SOÁT CỎ DẠI

(57) Sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I),



trong đó R¹, R², R³, R⁴ và G là như được xác định ở đây. Sáng chế còn đề cập đến các chế phẩm mà chứa hợp chất có công thức (I), chế phẩm này để sử dụng để kiểm soát cỏ dại, cụ thể là ở mùa vụ của các cây hữu dụng và phương pháp kiểm soát cỏ dại.

Lĩnh vực kỹ thuật được đề cập

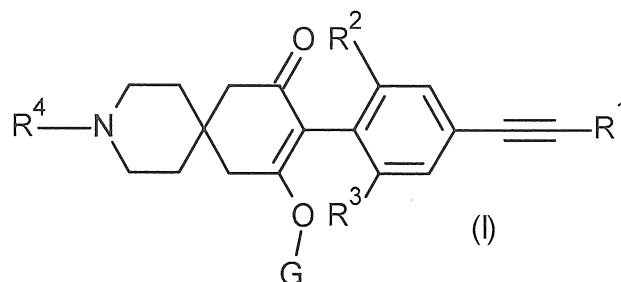
Sáng chế đề cập đến các hợp chất diệt cỏ xyclohexandion, quy trình điều chế chúng, các chế phẩm diệt cỏ mà chứa các hợp chất này, hợp chất này để kiểm soát cỏ dại và phương pháp kiểm soát cỏ dại.

Tình trạng kỹ thuật của sáng chế

Các hợp chất dion vòng diệt cỏ được thế bởi phenyl mà có nhóm thế chứa alkynyl được bộc lộ, ví dụ, trong Công bố đơn quốc tế số WO2014/096289, WO2014/191534 và WO2015/197468. Sáng chế đề cập đến các dẫn xuất xyclohexandion diệt cỏ mới có các tính chất được cải thiện.

Bản chất kỹ thuật của sáng chế

Do đó, sáng chế đề xuất hợp chất có công thức (I)



trong đó

R^1 là metyl;

R^2 là metyl hoặc metoxy;

R^3 là metyl hoặc metoxy;

R^4 được chọn từ nhóm bao gồm $-S(O)_n C_1-C_6\text{alkyl}$, $-S(O)_n C_1-C_6\text{haloalkyl}$, $-S(O)_n-(CH_2)_n-C_3-C_6\text{xycloalkyl}$, $-S(O)_n C(R^{11})R^{12}R^{13}$, $-C(O)H$, $-C(O)-(CH_2)_n-C_3-C_6\text{xycloalkyl}$, $-C(O)C(R^{11})R^{12}R^{13}$, $-C(O)C_2-C_4\text{alkenyl}$, $-C(O)(CR^9R^{10})CN$, $-C(O)(CR^9R^{10})(CR^9R^{10})CN$, $-C(O)CH_2C(O)-C_1-C_6\text{alkyl}$, $-C(O)CH_2OC(O)-C_1-C_6\text{alkyl}$, $C(O)OC_1-C_6\text{alkyl}$, $-C(O)OC_1-C_6\text{haloalkyl}$, $-C(O)(R^9R^{10})_n S(O)_n C_1-C_6\text{alkyl}$, $-C(O)C_1-$

C₃alkoxyC₁-C₆alkyl, -C(O)C₁-C₃alkoxyC₂-C₆alkenyl, -C(O)C₁-C₃alkoxyC₂-C₆alkynyl, -C(O)C₁-C₃alkoxyC₁-C₆haloalkyl, -C(O)C₁-C₃alkoxyC₃-C₆xycloalkyl, -C(O)OC₁-C₃alkoxyC₁-C₆alkyl, -C(O)C₁-C₃alkoxyC₁-C₃alkoxyC₁-C₆alkyl, -C(O)(CH₂)_nNR⁵R⁶, -C(O)-(CH₂)_n-NR⁷C(O)R⁸, -C(O)-(CH₂)_n-O-N=CR⁵R⁵, -CN, -(CH₂)_n-phenyl, -C(O)-(CH₂)_n-phenyl, -S(O)_n-(CH₂)_n-phenyl, -heteroxyclyl, -C(O)-(CH₂)_n-heteroxyclyl, -C(O)(CH₂)_nO-(CH₂)_n-heteroxyclyl, -S(O)_n-(CH₂)_n-heteroxyclyl, trong đó mỗi heteroxyclyl là heteroxyclyl có 5 hoặc 6 cạnh mà có thể là thơm, no hoặc no một phần và có thể chứa từ 1 đến 4 nguyên tử khác loại, mỗi nguyên tử độc lập được chọn từ nhóm bao gồm oxy, nitơ và lưu huỳnh, và trong đó các nhóm heteroxyclyl hoặc phenyl này tùy ý được thế bằng một, hai hoặc ba nhóm thế độc lập được chọn từ nhóm bao gồm C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₂-C₃alkenyl, C₂-C₃alkynyl, halogen, xyano và nitro;

R⁵ được chọn từ nhóm bao gồm hydro và C₁-C₆ alkyl;

R⁶ được chọn từ nhóm bao gồm hydro, C₁-C₆alkyl, C₂-C₆alkenyl, C₂-C₆alkynyl, C₁-C₆haloalkyl, hydroxyl-, C₁-C₆alkoxy, C₃-C₆xycloalkyl, -C₁-C₄alkoxyC₁-C₆alkyl, -C₁-C₃alkoxyC₁-C₆haloalkyl, -(CR⁹R¹⁰)C₁-C₆haloalkyl, -(CR⁹R¹⁰)C(O)NR⁵R⁵, phenyl, -pyridyl, trong đó phenyl và pyridyl tùy ý được thế bằng một, hai hoặc ba nhóm thế độc lập được chọn từ nhóm bao gồm C₁-C₃ alkyl, C₁-C₃ haloalkyl, C₁-C₃ alkoxy, C₂-C₃ alkenyl, C₂-C₃ alkynyl, halogen, xyano và nitro; hoặc

R⁵ và R⁶ cùng nhau tạo thành -CH₂CH₂OCH₂CH₂-; và

R⁷ được chọn từ nhóm bao gồm hydro và C₁-C₆ alkyl;

R⁸ được chọn từ nhóm bao gồm hydro, C₁-C₆ alkyl, C₁-C₆ alkoxy, C₃-C₆ xycloalkyl, phenyl, -pyridyl, trong đó phenyl và pyridyl tùy ý được thế bằng một, hai hoặc ba nhóm thế độc lập được chọn từ nhóm bao gồm C₁-C₃ alkyl, C₁-C₃ haloalkyl, C₁-C₃ alkoxy, C₂-C₃ alkenyl, C₂-C₃ alkynyl, halogen, xyano và nitro;

R⁹ là hydro hoặc metyl;

R¹⁰ là hydro hoặc metyl; hoặc

R⁹ và R¹⁰ cùng nhau tạo thành -CH₂CH₂-; và

R¹¹ là hydro hoặc metyl;

R¹² được chọn từ nhóm bao gồm hydro, C₁-C₆ alkyl, hydroxyl và C₁-C₆ alkoxy-;

R^{13} được chọn từ nhóm bao gồm hydro, C_1 - C_6 alkyl, hydroxyl và C_1 - C_6 alkoxy; hoặc

R^{12} và R^{13} cùng nhau tạo thành $-\text{CH}_2\text{-X-CH}_2-$; và

X được chọn từ nhóm bao gồm O, S và N- R^{14} ;

R^{14} được chọn từ nhóm bao gồm hydro, C_1 - C_3 alkyl và C_1 - C_3 alkoxy-;

n là 0, 1 hoặc 2;

G được chọn từ nhóm bao gồm hydro, $-(\text{CH}_2)_n\text{-R}^a$, $-\text{C}(\text{O})\text{-R}^a$, $-\text{C}(\text{O})\text{-(CR}^c\text{R}^d)_n\text{-O-R}^b$, $-\text{C}(\text{O})\text{-(CR}^c\text{R}^d)_n\text{-S-R}^b$, $-\text{C}(\text{O})\text{NR}^a\text{R}^a$, $-\text{S}(\text{O})_2\text{-R}^a$ và C_1 - C_8 alkoxy- C_1 - C_3 alkyl-;

R^a độc lập được chọn từ nhóm bao gồm hydro, C_1 - C_8 alkyl, C_1 - C_3 haloalkyl, C_2 - C_8 alkenyl, C_2 - C_8 alkynyl, C_3 - C_6 xycloalkyl, heteroxyclyl và phenyl, trong đó các nhóm heteroxyclyl và phenyl này tùy ý được thế bằng một, hai hoặc ba nhóm thế độc lập được chọn từ nhóm bao gồm C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 haloalkyl, C_1 - C_3 alkoxy, C_2 - C_3 alkenyl, C_2 - C_3 alkynyl, halogen, xyano và nitro;

R^b được chọn từ nhóm bao gồm C_1 - C_8 alkyl, C_1 - C_3 haloalkyl, C_2 - C_8 alkenyl, C_2 - C_8 alkynyl, C_3 - C_6 xycloalkyl, heteroxyclyl và phenyl trong đó các nhóm heteroxyclyl và phenyl này tùy ý được thế bằng một, hai hoặc ba nhóm thế độc lập được chọn từ nhóm bao gồm C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 haloalkyl, C_1 - C_3 alkoxy, C_2 - C_3 alkenyl, C_2 - C_3 alkynyl, halogen, xyano và nitro;

R^c là hydro hoặc C_1 - C_3 alkyl; và

R^d là hydro hoặc C_1 - C_3 alkyl;

hoặc muối nông dụng của chúng.

Mô tả chi tiết sáng chế

Các nhóm alkyl (ví dụ, C_1 - C_6 alkyl) bao gồm, ví dụ, methyl (Me, CH_3), ethyl (Et, C_2H_5), *n*-propyl (*n*-Pr), isopropyl (*i*-Pr), *n*-butyl (*n*-Bu), isobutyl (*i*-Bu), *sec*-butyl (*s*-Bu) và *tert*-butyl (*t*-Bu).

Các gốc alkenyl và alkynyl có thể ở dạng mạch thẳng hoặc mạch nhánh, và các gốc alkenyl, khi thích hợp, có thể là thuộc cấu hình (*E*) hoặc (*Z*). Ví dụ là vinyl, alyl và propargyl. Các gốc alkenyl và alkynyl có thể có một hoặc nhiều liên kết đôi và/hoặc liên kết ba ở dạng kết hợp bất kỳ.

Halogen (hoặc halo) bao hàm flo, clo, brom hoặc iot. Các thuật ngữ này cũng áp dụng tương ứng cho halogen trong ngữ cảnh của các định nghĩa khác, chẳng hạn như haloalkyl.

Các nhóm haloalkyl (ví dụ, C₁-C₆haloalkyl) là, ví dụ, flometyl, diflometyl, triflometyl, clometyl, diclometyl, triclometyl, 2,2,2-trifloetyl, 2-floetyl, 2-cloetyl, pentaflloetyl, 1,1-diflo-2,2,2-tricloetyl, 2,2,3,3-tetraflloetyl và 2,2,2-tricloetyl, heptafllo-n-propyl và perflo-n-hexyl.

Các nhóm alkoxy (ví dụ, C₁-C₄alkoxy-) là, ví dụ, metoxy, etoxy, propoxy, isopropoxy, n-butoxy, isobutoxy, sec-butoxy hoặc tert-butoxy, tốt hơn là metoxy và etoxy.

Các nhóm alkoxyalkyl (ví dụ, C₁-C₈alkoxy-C₁-C₃alkyl-) bao gồm, ví dụ, metoxymetyl, metoxyetyl, etoxymetyl, etoxyetyl, n-propoxymetyl, n-propoxyetyl, isopropoxymetyl hoặc isopropoxyetyl.

Các nhóm xycloalkyl (ví dụ, C₃-C₆xycloalkyl-) bao gồm, ví dụ xyclopropyl(*c*-propyl, *c*-Pr), xyclobutyl(*c*-butyl, *c*-Bu), xyclopentyl (*c*-pentyl) và xyclohexyl(*c*-hexyl) và có thể được thể hoặc không được thể như được chỉ ra.

C₁-C₆alkyl-S- (alkylthio) là, ví dụ như, metylthio, etylthio, propylthio, isopropylthio, *n*-butylthio, isobutylthio, sec-butylthio hoặc tert-butylthio, tốt hơn là metylthio hoặc etylthio.

C₁-C₆alkyl-S(O)- (alkylsulfinyl) là, ví dụ như, metylsulfinyl, etylsulfinyl, propylsulfinyl, isopropylsulfinyl, *n*-butylsulfinyl, isobutylsulfinyl, sec-butylsulfinyl hoặc tert-butylsulfinyl, tốt hơn là metylsulfinyl hoặc etylsulfinyl.

C₁-C₆alkyl-S(O)₂- (alkylsulfonyl) là, ví dụ như, metylsulfonyl, etylsulfonyl, propylsulfonyl, isopropylsulfonyl, *n*-butylsulfonyl, isobutylsulfonyl, sec-butylsulfonyl hoặc tert-butylsulfonyl, tốt hơn là metylsulfonyl hoặc etylsulfonyl.

Heteroxyclyl là heteroxyclyl có 5 hoặc 6 cạnh mà có thể là thơm, no hoặc no một phần và có thể chứa từ 1 đến 4 nguyên tử khác loại, mỗi nguyên tử độc lập được chọn từ nhóm bao gồm oxy, nitơ và lưu huỳnh.

Sáng chế cũng đề cập đến các muối nông dụng của các hợp chất có công thức (I). Các muối này bao gồm các muối là có thể tạo thành với amin, các bazơ kim loại kiềm

và kim loại kiềm thổ hoặc các bazơ amoni bậc bốn. Trong số các hydroxit kim loại kiềm và kim loại kiềm thổ ở các dạng muối, đặc biệt lưu ý là các hydroxit của lithi, natri, kali, magie và canxi, nhưng đặc biệt là các hydroxit của natri và kali. Các Hợp chất có công thức (I) theo sáng chế cũng bao gồm các hydrat mà có thể được tạo thành trong quá trình tạo thành muối.

Các ví dụ về các amin thích hợp để tạo thành muối amoni bao gồm amoniac cũng như các C₁-C₁₈alkylamin, các C₁-C₄hydroxyalkylamin và các C₂-C₄alkoxyalkylamin bậc một, bậc hai và bậc ba, ví dụ metylamin, etylamin, *n*-propylamin, isopropylamin, bốn đồng phân butylamin, *n*-amylamin, isoamylamin, hexylamin, heptylamin, octylamin, nonylamin, dexylamin, pentadexylamin, hexadexylamin, heptadexylamin, octadexylamin, metyletylamin, metylisopropylamin, metylhexylamin, metylnonylamin, metylpentadexylamin, metyloctadexylamin, etylbutylamin, etylheptylamin, etyloctylamin, hexylheptylamin, hexyloctylamin, dimetylamin, dietylamin, di-*n*-propylamin, diisopropylamin, di-*n*-butylamin, di-*n*-amylamin, diisoamylamin, dihexylamin, diheptylamin, dioctylamin, etanolamin, *n*-propanolamin, isopropanolamin, *N,N*-dietanolamin, *N*-etylpropanolamin, *N*-butyletanolamin, allylamin, *n*-but-2-enylamin, *n*-pent-2-enylamin, 2,3-dimetylbut-2-enylamin, dibut-2-enylamin, *n*-hex-2-enylamin, propylendiamin, trimetylamin, trietylamin, tri-*n*-propylamin, triisopropylamin, tri-*n*-butylamin, triisobutylamin, tri-*sec*-butylamin, tri-*n*-amylamin, metoxyetylamin và etoxyetylamin; các amin dị vòng, ví dụ pyridin, quinolin, isoquinolin, morpholin, piperidin, pyrrolidin, indolin, quinuclidin và azepin; các arylamin bậc một, ví dụ anilin, metoxyanilin, etoxyanilin, *o*-, *m*- và *p*-toluidin, phenylendiamin, benzidin, naphthylamin và *o*-, *m*- và *p*-cloanilin; nhưng đặc biệt là trietylamin, isopropylamin và diisopropylamin.

Theo một phương án, sáng chế đề xuất hợp chất có công thức (I) trong đó:

R¹ là metyl;

R² là metyl hoặc metoxy;

R³ là metyl hoặc metoxy;

R^4 được chọn từ nhóm bao gồm $-S(O)_n C_1-C_6 alkyl$, $-S(O)_n C_1-C_6 haloalkyl$, $-S(O)_n (CH_2)_n-C_3-C_6 xycloalkyl$, $-S(O)_n C(R^{11})R^{12}R^{13}$, $-C(O)H$, $-C(O)-(CH_2)_n-C_3-C_6 xycloalkyl$, $-C(O)C(R^{11})R^{12}R^{13}$, $-C(O)C_2-C_4 alkenyl$, $-C(O)(CR^9R^{10})CN$, $-C(O)OC_1-C_6 alkyl$, $-C(O)OC_1-C_6 haloalkyl$, $-C(O)(CH_2)_n S(O)_n C_1-C_6 alkyl$, $-C(O)C_1-C_3 alkoxy C_1-C_6 alkyl$, $-C(O)NR^5R^6$, $-C(O)-(CH_2)_n-NR^7C(O)R^8$, $-CN$, $-(CH_2)_n-phenyl$, $-C(O)-(CH_2)_n-phenyl$, $-S(O)_n-(CH_2)_n-phenyl$, $-heteroxyclyl$, $-C(O)-(CH_2)_n-heteroxyclyl$, $-S(O)_n-(CH_2)_n-heteroxyclyl$, trong đó mỗi heteroxyclyl là heteroxyclyl có 5 hoặc 6 cạnh mà có thể là thiom, no hoặc no một phần và có thể chứa từ 1 đến 4 nguyên tử khác loại, mỗi nguyên tử độc lập được chọn từ nhóm bao gồm oxy, nitơ và lưu huỳnh, và trong đó các nhóm heteroxyclyl hoặc phenyl này tùy ý được thế bằng một, hai hoặc ba nhóm thế độc lập được chọn từ nhóm bao gồm $C_1-C_3 alkyl$, $C_1-C_3 haloalkyl$, $C_1-C_3 alkoxy$, $C_2-C_3 alkenyl$, $C_2-C_3 alkynyl$, halogen, xyano và nitro;

R^5 được chọn từ nhóm bao gồm hydro và $C_1-C_6 alkyl$;

R^6 được chọn từ nhóm bao gồm hydro, $C_1-C_6 alkyl$, $C_1-C_6 alkoxy$, $C_3-C_6 xycloalkyl$, phenyl, -pyridyl, trong đó phenyl và pyridyl tùy ý được thế bằng một, hai hoặc ba nhóm thế độc lập được chọn từ nhóm bao gồm $C_1-C_3 alkyl$, $C_1-C_3 haloalkyl$, $C_1-C_3 alkoxy$, $C_2-C_3 alkenyl$, $C_2-C_3 alkynyl$, halogen, xyano và nitro; hoặc

R^5 và R^6 cùng nhau tạo thành $-CH_2CH_2OCH_2CH_2-$; và

R^7 được chọn từ nhóm bao gồm hydro và $C_1-C_6 alkyl$;

R^8 được chọn từ nhóm bao gồm hydro, $C_1-C_6 alkyl$, $C_1-C_6 alkoxy$, $C_3-C_6 xycloalkyl$, phenyl, -pyridyl, trong đó phenyl và pyridyl tùy ý được thế bằng một, hai hoặc ba nhóm thế độc lập được chọn từ nhóm bao gồm $C_1-C_3 alkyl$, $C_1-C_3 haloalkyl$, $C_1-C_3 alkoxy$, $C_2-C_3 alkenyl$, $C_2-C_3 alkynyl$, halogen, xyano và nitro;

R^9 là hydro hoặc metyl;

R^{10} là hydro hoặc metyl; hoặc

R^9 và R^{10} cùng nhau tạo thành $-CH_2CH_2-$; và

R^{11} là hydro hoặc metyl;

R^{12} và R^{13} cùng nhau tạo thành $-CH_2-X-CH_2-$;

X được chọn từ nhóm bao gồm O, S và $N-R^{14}$;

R^{14} được chọn từ nhóm bao gồm hydro, C_1 - C_3 alkyl và C_1 - C_3 alkoxy-;

n là 0, 1 hoặc 2;

G được chọn từ nhóm bao gồm hydro, $-(CH_2)_n-R^a$, $-C(O)-R^a$, $-C(O)-(CR^cR^d)_n-O-R^b$, $-C(O)NR^aR^a$, $-S(O)_2-R^a$ và C_1 - C_8 alkoxy- C_1 - C_3 alkyl-;

R^a độc lập được chọn từ nhóm bao gồm hydro, C_1 - C_8 alkyl, C_1 - C_3 haloalkyl, C_2 - C_8 alkenyl, C_2 - C_8 alkynyl, C_3 - C_6 cycloalkyl, heterocyclyl và phenyl, trong đó các nhóm heterocyclyl và phenyl này tùy ý được thế bằng một, hai hoặc ba nhóm thế độc lập được chọn từ nhóm bao gồm C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 haloalkyl, C_1 - C_3 alkoxy, C_2 - C_3 alkenyl, C_2 - C_3 alkynyl, halogen, xyano và nitro;

R^b được chọn từ nhóm bao gồm C_1 - C_8 alkyl, C_1 - C_3 haloalkyl, C_2 - C_8 alkenyl, C_2 - C_8 alkynyl, C_3 - C_6 cycloalkyl, heterocyclyl và phenyl trong đó các nhóm heterocyclyl và phenyl này tùy ý được thế bằng một, hai hoặc ba nhóm thế độc lập được chọn từ nhóm bao gồm C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 haloalkyl, C_1 - C_3 alkoxy, C_2 - C_3 alkenyl, C_2 - C_3 alkynyl, halogen, xyano và nitro;

R^c là hydro hoặc C_1 - C_3 alkyl; và

R^d là hydro hoặc C_1 - C_3 alkyl;

hoặc muối nông dụng của chúng.

Theo một phương án của sáng chế, R^2 là methyl.

Theo một phương án của sáng chế, R^3 là methyl.

Theo phương án khác của sáng chế, R^3 là metoxy.

Theo một phương án của sáng chế, R^2 là methyl và R^3 là methyl.

Theo một phương án của sáng chế, R^2 là methyl và R^3 là metoxy.

Theo một phương án của sáng chế, R^2 là metoxy và R^3 là metoxy.

Theo một phương án của sáng chế, R^4 là $-S(O)_nC_1$ - C_6 alkyl, đặc biệt là $-S(O)_2$ methyl hoặc $-S(O)_2$ ethyl

Theo phương án khác, R^4 là $-S(O)_nC_1$ - C_6 haloalkyl, ví dụ $-S(O)_2$ clomethyl.

Theo phương án khác, R^4 là $-S(O)_n-(CH_2)_n-C_3$ - C_6 cycloalkyl, ví dụ $-S(O)_2-(CH_2)-c$ -propyl.

Theo phương án khác của sáng chế, R^4 là $-C(O)OC_1-C_6alkyl$, đặc biệt là $-C(O)-O-methyl$.

Theo phương án khác của sáng chế, R^4 là $-S(O)_nC(R^{11})R^{12}R^{13}$ hoặc $-C(O)C(R^{11})R^{12}R^{13}$ trong đó R^{11} là hydro hoặc methyl và $R^{12}R^{13}$ cùng nhau là $-CH_2OCH_2-$ (oxetan-3-yl).

Theo phương án khác của sáng chế, R^4 là $-C(O)-(CH_2)_n-C_3-C_6xycloalkyl$, ví dụ $-C(O)-c-propyl$ hoặc $-C(O)-(CH_2)-c-propyl$.

Theo phương án khác của sáng chế, R^4 là $-C(O)(CR^9R^{10})CN$, ví dụ $-C(O)CH_2CN$, $-C(O)CH(CH_3)CN$ hoặc $-C(O)C(CH_3)_2CN$.

Theo phương án khác của sáng chế, R^4 là $-C(O)(CH_2)_nS(O)_nC_1-C_6alkyl$, ví dụ $-C(O)CH_2S(O)_2methyl$.

Theo phương án khác của sáng chế, R^4 là $-C(O)C_1-C_3alkoxyC_1-C_6alkyl$, ví dụ $-C(O)CH_2CH_2-O-CH_3$ hoặc $-C(O)CH(CH_3)-O-CH_3$.

Theo phương án khác của sáng chế, R^4 là $-C(O)C_1-C_3alkoxyC_1-C_6haloalkyl$, ví dụ $-C(O)CH_2-O-CHF_2$ hoặc $-C(O)CH_2-O-CF_3$.

Theo phương án khác của sáng chế, R^4 là $-C(O)NR^5R^6$, đặc biệt là trong đó R^5 là hydro và R^6 là $C_1-C_6 alkyl$, ví dụ *t*-butyl.

Theo phương án khác của sáng chế, R^4 là $-C(O)-(CH_2)_n-NR^7C(O)R^8$, ví dụ $-C(O)-(CH_2)-NR^7C(O)R^8$ hoặc $-C(O)NR^7C(O)R^8$, ví dụ $-C(O)NHC(O)-t-butyl$.

Theo phương án khác của sáng chế, R^4 được chọn từ nhóm bao gồm $-phenyl$, $-C(O)-phenyl$, $-S(O)_nphenyl$ trong đó mỗi phenyl tùy ý được thế như được xác định trước đó.

Theo phương án khác của sáng chế, R^4 là heteroxyclyl, $-C(O)-heteroxyclyl$ hoặc $-S(O)_n-heteroxyclyl$. Theo phương án khác, mỗi heteroxyclyl nêu trên là heteroxyclyl thơm (tức là heteroaryl), tốt hơn nữa là được chọn từ nhóm bao gồm furanyl, pyrrolyl, thiophenyl, imidazolyl, pyrazolyl, oxazolyl, isoxazolyl, thiazolyl, pyranlyl, pyridyl, pyrazinyl, pyrimidinyl, pyridazinyl, và triazolyl, tốt hơn nữa là được chọn từ nhóm bao gồm pyridyl, pyridazinyl, pyrimidinyl và pyrazinyl, mỗi loại trong số chúng tùy ý được thế như được xác định trước đó. Theo phương án khác, mỗi heteroxyclyl đã nêu là heteroxyclyl no một phần, tốt hơn nữa là được chọn từ nhóm bao gồm imidazolinyl,

isoxazolinyll và thiazolinyll, mỗi loại trong số chúng tùy ý được thế như được xác định trước đó. Theo phương án khác, mỗi heterocyclyl nêu trên là heterocyclyl no, tốt hơn nữa là được chọn từ nhóm bao gồm morpholinyll, tetrahydrofuryll và tetrahydropyranyll, mỗi loại trong số chúng tùy ý được thế như được xác định trước đó.

Theo một phương án của sáng chế, G được chọn từ nhóm bao gồm hydro, C₁-C₈alkyl (ví dụ, metyl, etyl, *n*-propyl, *i*-propyl, *n*-butyl, *t*-butyl, -C₂-C₈alkenyl (ví dụ, vinyl), C₂-C₈alkynyl (ví dụ, propargyl), -C(O)C₁-C₈alkyl (tốt hơn nữa là -C(O)C₁-C₆alkyl, ví dụ, -C(O)*i*-propyl và -C(O)*t*-butyl) và -C(O)-O-C₁-C₈alkyl (tốt hơn nữa là -C(O)-O-C₁-C₆alkyl, ví dụ, -C(O)-O-metyl). Theo phương án được ưu tiên, G là hydro.

Tùy thuộc vào bản chất của các nhóm thế, các hợp chất có công thức (I) có thể ở các dạng đồng phân khác nhau. Khi G là hydro, ví dụ, các hợp chất có công thức (I) có thể tồn tại ở các dạng đồng phân hồ biến khác nhau.

Sáng chế bao gồm tất cả các chất đồng phân và chất hồ biến và hỗn hợp của chúng ở tất cả các tỉ lệ. Tương tự, khi các nhóm thế chứa liên kết đôi, các đồng phân *cis* và *trans* có thể tồn tại. Các đồng phân này, cũng vậy, là nằm trong phạm vi các hợp chất có công thức (I) được yêu cầu bảo hộ. Các hợp chất có công thức (I) có thể chứa các tâm bất đối xứng và có thể có mặt ở dạng đồng phân đối quang đơn lẻ, các cặp đồng phân đối quang ở tỉ lệ bất kỳ hoặc, trong đó nhiều hơn một tâm bất đối xứng có mặt, chứa các đồng phân không đối quang ở tất cả các tỉ lệ có thể có. Thông thường, một trong số các chất đồng phân đối quang có hoạt tính sinh học được tăng cường so với các khả năng khác.

Các hợp chất có công thức (I) theo sáng chế có thể được sử dụng chính chúng làm thuốc diệt cỏ, nhưng chúng thường được bào chế thành các hợp chất diệt cỏ bằng cách sử dụng chất phụ trợ bào chế, như chất mang, dung môi và chất hoạt động bề mặt (SFA). Do đó, sáng chế còn đề xuất chế phẩm diệt cỏ chứa hợp chất diệt cỏ theo điểm bất kỳ một trong số các điểm nêu trên và chất phụ trợ bào chế nông dụng. Chế phẩm này có thể ở dạng chất cô đặc mà được pha loãng trước khi sử dụng, mặc dù chế phẩm sẵn dùng cũng có thể được tạo ra. Dịch pha loãng cuối cùng thường được tạo ra với nước, nhưng có thể được tạo ra với, ví dụ, phân bón lỏng, vi chất dinh dưỡng, sinh vật, dầu hoặc dung môi thay thế cho nước, hoặc bổ sung thêm cùng với nước.

Chế phẩm diệt cỏ thường chứa từ 0,1 đến 99 % theo khối lượng, cụ thể là từ 0,1 đến 95 % theo khối lượng, hợp chất có công thức (I) và từ 1 đến 99,9 % theo khối lượng của chất phụ trợ bào chế mà tốt hơn là bao gồm từ 0 đến 25 % theo khối lượng chất có hoạt tính bề mặt.

Các chế phẩm có thể được chọn từ nhiều loại bào chế, nhiều loại trong số đó đã biết từ tài liệu Manual on Development and Use of FAO Specifications for Plant Protection Products, Ấn bản lần thứ 5, 1999. Các chế phẩm này bao gồm bột rắc được (DP), bột hòa tan được (SP), hạt hòa tan trong nước (SG), hạt phân tán được trong nước (WG), bột thấm ướt được (WP), hạt (GR) (giải phóng chậm hoặc nhanh), chất cô tan được (SL), chất lỏng trộn lẫn được trong dầu (OL), chất lỏng thể tích cực thấp (UL), chất cô nhũ hóa được (EC), chất cô phân tán được (DC), nhũ tương (cả dầu trong nước (EW) và nước trong dầu (EO)), vi nhũ tương (ME), huyền phù đặc (SC), sol khí, huyền phù viên nang (CS) và chế phẩm xử lý hạt. Loại chế phẩm được chọn trong ví dụ bất kỳ tùy thuộc vào mục đích cụ thể được dự tính và các tính chất vật lý, hóa học và sinh học của hợp chất có công thức (I).

Bột rắc được (DP) có thể được điều chế bằng cách trộn hợp chất có công thức (I) với một hoặc nhiều chất pha loãng dạng rắn (ví dụ, đất sét tự nhiên, cao lanh, pyrophyllit, bentonit, nhôm oxit, montmorillonit, đất tảo cát, đá phấn, đất diatomit, canxi photphat, canxi và magie cacbonat, lưu huỳnh, đá vôi, bột nghiền, bột talc và các chất mang rắn vô cơ và hữu cơ khác) và nghiền cơ học hỗn hợp này thành bột mịn.

Bột tan được (SP) có thể được điều chế bằng cách trộn lẫn hợp chất có công thức (I) với một hoặc nhiều muối vô cơ tan được trong nước (như natri bicacbonat, natri cacbonat hoặc magie sulphat) hoặc một hoặc nhiều chất rắn hữu cơ tan trong nước (như polysacarit) và, tùy ý, một hoặc nhiều tác nhân làm ướt, một hoặc nhiều chất phân tán hoặc hỗn hợp các chất này để cải thiện tính phân tán/tính tan trong nước. Sau đó, hỗn hợp này được nghiền thành bột mịn. Các chế phẩm tương tự cũng có thể được tạo hạt để tạo thành các hạt tan được trong nước (SG).

Bột hút ẩm được (WP) có thể được điều chế bằng cách trộn hợp chất có công thức (I) với một hoặc nhiều chất pha loãng hoặc chất mang rắn, một hoặc nhiều chất làm ẩm và, tốt hơn là, một hoặc nhiều chất phân tán và, một cách tùy ý, một hoặc nhiều chất tạo huyền phù để tạo thuận lợi cho việc phân tán trong dịch lỏng. Sau đó, hỗn hợp này

được nghiền thành bột mịn. Các chế phẩm tương tự cũng có thể được tạo hạt để tạo thành các hạt phân tán được trong nước (WG).

Hạt (GR) có thể được tạo ra bằng cách tạo hạt hỗn hợp của hợp chất có công thức (I) và một hoặc nhiều chất pha loãng hoặc chất mang dạng rắn được nghiền bột, hoặc từ các hạt rỗng đã tạo hình trước bằng cách cho hấp thụ hợp chất có công thức (I) (hoặc dung dịch của nó, trong chất thích hợp) trong vật liệu hạt xốp (như đá bọt, sét atapulgít, đất tảo màu, đất tảo cát, diatomit hoặc lõi ngô nghiền) hoặc bằng cách cho hợp chất có công thức (I) (hoặc dung dịch của nó, trong chất thích hợp) hấp phụ lên vật liệu lõi rắn (như cát, silic oxit, cacbonat khoáng, sulfat hoặc phosphat) và làm khô nếu cần. Các chất thường được sử dụng để hỗ trợ sự hấp thụ hoặc sự hấp phụ bao gồm dung môi (như dung môi dầu mỏ béo và thơm, rượu, ete, xeton và este) và chất dính (như polyvinyl axetat, rượu polyvinyl, dextrin, đường và dầu thực vật). Một hoặc nhiều chất phụ gia khác cũng có thể được bao gồm trong hạt (ví dụ chất nhũ hóa, chất làm ẩm hoặc chất phân tán).

Chất cô phân tán được (DC) có thể được điều chế bằng cách hòa tan hợp chất có công thức (I) trong nước hoặc dung môi hữu cơ, như xeton, rượu hoặc glycol ete. Các dung dịch này có thể chứa chất hoạt động bề mặt (ví dụ để cải thiện sự pha loãng bằng nước hoặc ngăn chặn sự kết tinh trong bình phun).

Chất cô có thể nhũ hóa được (EC) hoặc nhũ tương dầu trong nước (EW) có thể được điều chế bằng cách hòa tan hợp chất có công thức (I) trong dung môi hữu cơ (tùy ý chứa một hoặc nhiều chất làm ẩm, một hoặc nhiều chất nhũ tương hóa hoặc hỗn hợp của các chất này). Dung môi hữu cơ thích hợp để sử dụng trong các EC bao gồm các hydrocacbon thơm (như alkylbenzen hoặc alkylnaphtalen, ví dụ như SOLVESSO 100, SOLVESSO 150 và SOLVESSO 200; SOLVESSO là các Nhãn hiệu đã được đăng ký), xeton (như xyclohexanon hoặc metylxyclohexanon) và các rượu (như rượu benzylic, rượu furfurylic hoặc butanol), N-alkylpyrrolidon (như N-metylpyrrolidon hoặc N-octylpyrrolidon), các dimetyl amit của axit béo (như C₈-C₁₀ dimetyl amit axit béo) và các hydrocacbon được clo hóa. Sản phẩm EC có thể nhũ hóa tự động khi bổ sung vào nước, để tạo ra nhũ tương với độ ổn định đủ để cho phép phun qua thiết bị thích hợp.

Quá trình điều chế EW bao gồm bước thu được hợp chất có công thức (I) dưới dạng chất lỏng (nếu không phải là chất lỏng ở nhiệt độ phòng, nó có thể được làm nóng

chảy ở nhiệt độ thích hợp, thường là dưới 70 °C) hoặc trong dung dịch (bằng cách hòa tan nó trong dung môi thích hợp) và sau đó nhũ hóa chất lỏng hoặc dung dịch thu được trong nước chứa một hoặc nhiều SFA, dưới lực cắt cao, để sản xuất nhũ tương. Dung môi thích hợp để sử dụng trong EW bao gồm dầu thực vật, hydrocarbon đã clo hóa (như chlorobenzen), dung môi thơm (như alkylbenzen hoặc alkylnaphtalen) và các dung môi hữu cơ thích hợp khác mà có độ hòa tan trong nước thấp.

Vi nhũ tương (ME) có thể được điều chế bằng cách trộn nước với hỗn hợp của một hoặc nhiều dung môi với một hoặc nhiều SFA, để tạo ra một cách tự phát chế phẩm lỏng đẳng hướng ổn định nhiệt động. Hợp chất có công thức (I) ban đầu có mặt trong nước hoặc hỗn hợp dung môi/SFA. Dung môi thích hợp để sử dụng trong ME bao gồm các dung môi được mô tả trên đây để sử dụng trong EC hoặc trong EW. ME có thể là hệ dầu trong nước hoặc nước trong dầu (hệ có mặt được xác định bằng các phép đo suất dẫn) và có thể thích hợp để trộn chất diệt vật gây hại tan trong nước và tan trong dầu trong cùng chế phẩm. ME là thích hợp để pha loãng vào nước, vẫn ở dạng vi nhũ tương hoặc tạo thành nhũ tương dầu trong nước thông thường.

Huyền phù đặc (SC) có thể bao gồm huyền phù có nước hoặc không có nước của các hạt rắn không tan, được phân chia mịn của hợp chất có công thức (I). SC có thể được điều chế bằng cách nghiền bi hoặc nghiền hạt hợp chất rắn có công thức (I) trong môi trường thích hợp, tùy ý với một hoặc nhiều chất phân tán, để sản xuất ra huyền phù hạt mịn của hợp chất. Một hoặc nhiều chất làm ẩm có thể được bao gồm trong chế phẩm và chất tạo huyền phù có thể được bao gồm để làm giảm tỉ lệ mà tại đó hạt lắng xuống. Theo cách khác, hợp chất có công thức (I) có thể được nghiền khô và được bổ sung vào nước, chứa các chất được mô tả trên đây, để sản xuất ra sản phẩm cuối cùng mong muốn.

Chế phẩm sol khí chứa hợp chất có công thức (I) và chất đẩy thích hợp (ví dụ *n*-butan). Hợp chất có công thức (I) cũng có thể được hòa tan hoặc được phân tán trong môi trường thích hợp (ví dụ nước hoặc chất lỏng có thể trộn lẫn với nước, như *n*-propanol) để tạo thành chế phẩm để sử dụng trong các bơm phun vận hành bằng tay, không tạo áp.

Viên nang huyền phù (CS) có thể được điều chế theo cách tương tự như cách điều chế chế phẩm EW nhưng có giai đoạn polyme hóa bổ sung sao cho thu được thể phân tán có nước của các giọt dầu, trong đó mỗi giọt dầu được bao nang bởi vỏ polyme

và chứa hợp chất có công thức (I) và, tùy ý, chất mang hoặc chất pha loãng cho nó. Vỏ polyme có thể được sản xuất bằng phản ứng đa trùng ngưng mặt phân cách hoặc bằng quy trình tự giọt. Các chế phẩm này có thể tạo ra sự giải phóng có kiểm soát hợp chất có công thức (I) và chúng có thể được sử dụng để xử lý hạt. Hợp chất có công thức (I) cũng có thể được bào chế trong chất nền polyme có thể phân hủy sinh học để tạo ra sự giải phóng chậm, có kiểm soát của hợp chất.

Chế phẩm này có thể chứa một hoặc nhiều chất phụ gia để cải thiện tính năng sinh học của chế phẩm, ví dụ bằng việc cải thiện tính làm ướt, thời gian lưu hoặc sự phân bố trên bề mặt; khả năng chịu mưa trên các bề mặt được xử lý; hoặc khả năng hấp thu hoặc biến đổi hợp chất có công thức (I). Các chất phụ gia này bao gồm các chất hoạt động bề mặt (SFA), chất phụ gia phun sương dựa vào dầu, ví dụ một số dầu khoáng hoặc các dầu thực vật tự nhiên (như dầu đậu tương và dầu hạt cải dầu), và các hỗn hợp của các chất này với các chất bổ trợ cải thiện tính năng sinh học khác (các thành phần mà có thể hỗ trợ hoặc làm thay đổi hoạt động của hợp chất có công thức (I)).

Chất làm ẩm, chất phân tán và chất nhũ hóa có thể là SFA thuộc loại cation, anion, loại lưỡng tính hoặc không ion.

SFA thích hợp thuộc loại cation bao gồm hợp chất amoni bậc bốn (ví dụ xetyltrimetyl amoni bromua), imidazolin và muối amin.

SFA anion thích hợp bao gồm muối kim loại kiềm của axit béo, muối của monoeste béo của axit sulphuric (ví dụ natri lauryl sulphat), muối của các hợp chất thơm đã sulphonat hóa (ví dụ natri dodecylbenzensulphonat, canxi dodecylbenzensulphonat, butylnaphtalen sulphonat và hỗn hợp của natri di-*isopropyl*- và tri-*isopropyl*-naphtalen sulphonat), ete sulphat, rượu ete sulphat (ví dụ natri laureth-3-sulphat), ete carboxylat (ví dụ natri laureth-3-carboxylat), este phosphat (sản phẩm từ phản ứng giữa một hoặc nhiều rượu béo và axit phosphoric (chiếm ưu thế là mono-este) hoặc photpho pentoxit (chiếm ưu thế là di-este), ví dụ, phản ứng giữa rượu laurylic và axit tetraphosphoric; ngoài ra các sản phẩm này có thể được etoxyl hóa), sulphosuccinamat, parafin hoặc olefin sulphonat, taurat và lignosulphonat.

SFA thích hợp thuộc loại lưỡng tính bao gồm betain, propionat và glyxinat.

SFA thích hợp thuộc loại không ion bao gồm sản phẩm ngưng tụ của alkylen oxit, như etylen oxit, propylen oxit, butylen oxit hoặc hỗn hợp của chúng, với rượu béo (như

rượu oleylic hoặc rượu xetylic) hoặc với alkylphenol (như octylphenol, nonylphenol hoặc octylcresol); este một phần có nguồn gốc từ axit béo mạch dài hoặc hexitol anhydra; sản phẩm ngưng tụ của este một phần này với etylen oxit; polyme khối (có chứa etylen oxit và propylen oxit); alkanolamit; este đơn giản (ví dụ polyetylen glycol este của axit béo); amin oxit (ví dụ lauryl dimetyl amin oxit); và lexithin.

Các chất tạo huyền phù thích hợp bao gồm keo ưa nước (như polysacarit, polyvinylpyrrolidon hoặc natri carboxymetylxenluloza) và đất sét trương nở (như bentonit hoặc attapulgit).

Chế phẩm theo sáng chế có thể còn bao gồm ít nhất một chất diệt loài gây hại bổ sung. Ví dụ, các hợp chất theo sáng chế cũng có thể được sử dụng kết hợp với thuốc diệt cỏ hoặc chất điều hòa sinh trưởng thực vật khác. Theo phương án được ưu tiên, chất diệt loài gây hại bổ sung là thuốc diệt cỏ và/hoặc chất an toàn thuốc diệt cỏ. Các ví dụ về các hỗn hợp này là (trong đó 'I' là hợp chất có công thức (I)). I + axetochlor, I + axifluorfen, I + axifluorfen-natri, I + aclonifen, I + acrolein, I + alachlor, I + alloxydim, I + ametryn, I + amicarbazon, I + amidosulfuron, I + aminopyralid, I + amitrol, I + anilofos, I + asulam, I + atrazin, I + azafenidin, I + azimsulfuron, I + BCPC, I + beflubutamid, I + benazolin, I + bencarbazon, I + benfluralin, I + benfuresat, I + bensulfuron, I + bensulfuron-metyl, I + bensulit, I + bentazon, I + benzfendizon, I + benzobixyclon, I + benzofenap, I + bixyclopyron, I + bifenox, I + bilanafos, I + bispyribac, I + bispyribac-natri, I + borax, I + bromaxil, I + bromobutit, I + bromoxynil, I + butachlor, I + butamifos, I + butralin, I + butroxydim, I + butylat, I + axit cacodylic, I + canxi chlorat, I + cafenstrol, I + carbetamit, I + carfentrazon, I + carfentrazon-etyl, I + chlorflurenol, I + chlorflurenol-metyl, I + chloridazon, I + chlorimuron, I + chlorimuron-etyl, I + axit cloaxetic, I + clotoluron, I + chlorpropham, I + chlorsulfuron, I + chlorthal, I + chlorthal-dimetyl, I + xinidon-etyl, I + xinmetylin, I + xinosulfuron, I + xisanilit, I + clethodim, I + clodinafop, I + clodinafop-propargyl, I + clomazon, I + clomeprop, I + clopyralid, I + cloransulam, I + cloransulam-metyl, I + xyanazin, I + xycloat, I + xyclopyranil, I + xyclosulfamuron, I + xycloxydim, I + xyhalofop, I + xyhalofop-butyl, I + 2,4-D, I + daimuron, I + dalapon, I + dazomet, I + 2,4-DB, I + I + desmedipham, I + dicamba, I + dichlobenil, I + dicloprop, I + dicloprop-P, I + diclofop, I + diclofop-metyl, I + diclosulam, I + difenzoquat, I + difenzoquat metilsulfat, I + diflufenican, I + diflufenzopyr, I + dimefuron, I + dimepiperat, I + dimethaclo, I + dimethametryn, I +

dimethenamid, I + dimethenamid-P, I + dimethipin, I + axit dimetylarsinic, I + dinitramin, I + dinoterb, I + diphenamid, I + dipropetryn, I + diquat, I + diquat dibromua, I + dithiopyr, I + diuron, I + endothal, I + EPTC, I + esprocarb, I + etalfluralin, I + etametsulfuron, I + etametsulfuron-metyl, I + etephon, I + etofumesat, I + etoxyfen, I + etoxysulfuron, I + etobenzanid, I + fenoxaprop-P, I + fenoxaprop-P-etyl, I + fenquintrion, I + fentrazamit, I + s  t (II) sulfat, I + flamprop-M, I + flazasulfuron, I + florpyrauxifen, I + florasulam, I + fluazifop, I + fluazifop-butyl, I + fluazifop-P, I + fluazifop-P-butyl, I + fluazolat, I + flucarbazon, I + flucarbazon-natri, I + fluxetosulfuron, I + fluchloralin, I + flufenaxet, I + flufenpyr, I + flufenpyr-etyl, I + flumetralin, I + flumetsulam, I + flumiclorac, I + flumiclorac-pentyl, I + flumioxazin, I + flumipropin, I + fluometuron, I + floglycofen, I + floglycofen-etyl, I + fluoxaprop, I + flupoxam, I + flupropaxil, I + flupropanat, I + flupyrsulfuron, I + flupyrsulfuron-metyl-natri, I + flurenol, I + fluridon, I + flurochloridon, I + fluroxypyr, I + flurtamon, I + fluthiaxet, I + fluthiaxet-metyl, I + fomesafen, I + foramsulfuron, I + fosamin, I + glufosinat, I + glufosinat-amoni, I + glyphosat, I + halauxifen, I + halosulfuron, I + halosulfuron-metyl, I + haloxyfop, I + haloxyfop-P, I + hexazinon, I + imazametabenz, I + imazametabenz-metyl, I + imazamox, I + imazapic, I + imazapyr, I + imazaquin, I + imazethapyr, I + imazosulfuron, I + indanofan, I + indaziflam, I + iodometan, I + iodosulfuron, I + iodosulfuron-metyl-natri, I + ioxynil, I + isoproturon, I + isouron, I + isoxaben, I + isoxachlortol, I + isoxaflutol, I + isoxapyrifop, I + karbutilat, I + lactofen, I + lenaxil, I + linuron, I + mecoprop, I + mecoprop-P, I + mefenaxet, I + mefluidit, I + mesosulfuron, I + mesosulfuron-metyl, I + mesotrion, I + metam, I + metamifop, I + metamitron, I + metazachlor, I + metabenzthiazuron, I + metazol, I + metylarsonic axit, I + metyldymron, I + metyl isothioxyanat, I + metolachlor, I + S-metolachlor, I + metosulam, I + metoxuron, I + metribuzin, I + metsulfuron, I + metsulfuron-metyl, I + molinat, I + monolinuron, I + naproanilit, I + napropamit, I + napropamit-M, I + naptalam, I + neburon, I + nicosulfuron, I + n-metyl glyphosat, I + axit nonanoic, I + norflurazon, I + axit oleic (axit b  o), I + orbencarb, I + orthosulfamuron, I + oryzalin, I + oxadiargyl, I + oxadiazon, I + oxasulfuron, I + oxaziclomefon, I + oxyfluorfen, I + paraquat, I + paraquat diclorua, I + pebulat, I + pendimetalin, I + penoxsulam, I + pentaclophenol, I + pentanochlor, I + pentoxazon, I + pethoxamid, I + phenmedipham, I + picloram, I + picolinafen, I + pinoxaden, I + piperophos, I + pretilachlor, I +

primisulfuron, I + primisulfuron-metyl, I + prodiamin, I + profoxydim, I + prohexadion-canxi, I + prometon, I + prometryn, I + propachlor, I + propanil, I + propaquizafop, I + propazin, I + propham, I + propisochlor, I + propoxycarbazon, I + propoxycarbazon-natri, I + propyzamit, I + prosulfocarb, I + prosulfuron, I + pyraclonil, I + pyraflufen, I + pyraflufen-etyl, I + pyrasulfotol, I + pyrazolynat, I + pyrazosulfuron, I + pyrazosulfuron-etyl, I + pyrazoxyfen, I + pyribenzoxim, I + pyributicarb, I + pyridafol, I + pyridat, I + pyriftalid, I + pyriminobac, I + pyriminobac-metyl, I + pyrimisulfan, I + pyrithiobac, I + pyrithiobac-natri, I + pyroxasulfon, I + pyroxsulam, I + quinclorac, I + quinmerac, I + quinoclamín, I + quizalofop, I + quizalofop-P, I + rimsulfuron, I + saflufenaxil, I + setoxydim, I + siduron, I + simazin, I + simetryn, I + natri clorat, I + sulcotrion, I + sulfentrazon, I + sulfometuron, I + sulfometuron-metyl, I + sulfosat, I + sulfosulfuron, I + axít sulfuric, I + tebuthiuron, I + tefuryltrion, I + tembotrion, I + tepraloxýdim, I + terbaxil, I + terbumeton, I + terbuthylazin, I + terbutryn, I + thenylchlor, I + thiazopyr, I + thifensulfuron, I + thiencarbazon, I + thifensulfuron-metyl, I + thiobencarb, I + tolpyralat, I + topramezon, I + tralkoxydim, I + tri-allat, I + triasulfuron, I + triaziflam, I + tribenuron, I + tribenuron-metyl, I + triclopyr, I + trietazin, I + trifloxysulfuron, I + trifloxysulfuron-natri, I + trifludimoxazin, I + trifluralin, I + triflusulfuron, I + triflusulfuron-metyl, I + trihydroxytriazin, I + trinexapac-etyl, I + tritosulfuron, I + etyl este của axít [3-[2-clo-4-flo-5-(1-metyl-6-triflometyl-2,4-dioxo-1,2,3,4-tetrahydropyrimidin-3-yl)phenoxy]-2-pyridyloxy]axetic (CAS RN 353292-31-6). Các hợp chất theo sáng chế có thể còn được kết hợp với các hợp chất diệt cỏ được bộc lộ trong WO06/024820 và/hoặc WO07/096576.

Các đối tác trộn của hợp chất có công thức (I) cũng có thể ở dạng các este hoặc các muối, như được đề cập trong tài liệu, ví dụ, The Pesticide Manual, Tái bản lần thứ 16, British Crop Protection Council, 2012.

Hợp chất có công thức (I) có thể còn được sử dụng trong hỗn hợp với các chất hóa nông khác như chất diệt nấm, chất diệt giun tròn hoặc chất diệt côn trùng, các ví dụ trong đó được đưa ra trong tài liệu The Pesticide Manual.

Tỉ lệ trộn của hợp chất có công thức (I) với đối tác trộn tốt hơn là nằm trong khoảng từ 1: 100 đến 1000:1.

Hỗn hợp này có thể có lợi là được sử dụng trong các chế phẩm nêu trên (trong trường hợp đó "thành phần hoạt tính" dùng để chỉ hỗn hợp tương ứng của hợp chất có công thức (I) với đối tác trộn).

Các hợp chất có công thức (I) theo sáng chế có thể còn được sử dụng kết hợp với một hoặc nhiều chất an toàn. Tương tự, hỗn hợp của hợp chất có công thức (I) theo sáng chế với một hoặc nhiều thuốc diệt cỏ khác có thể còn được sử dụng kết hợp với một hoặc nhiều chất an toàn. Chất an toàn có thể là AD 67 (MON 4660), benoxacor, cloquintoxet-mexyl, xyprosulfamid (CAS RN 221667-31-8), dichlormid, fenchlorazol-ethyl, fenclorim, fluxofenim, furilazol và chất đồng phân R tương ứng, isoxadifen-ethyl, mefenpyr-diethyl, oxabetrinil, N-isopropyl-4-(2-metoxi-benzoylsulfamoyl)-benzamid (CAS RN 221668-34-4). Các khả năng khác bao gồm chất an toàn được bộc lộ trong, ví dụ, EP0365484, ví dụ N-(2-metoxibenzoyl)-4-[(metylaminocarbonyl)amino]benzensulfonamid. Được đặc biệt ưu tiên là hỗn hợp của hợp chất có công thức (I) với xyprosulfamid, isoxadifen-ethyl, cloquintocet-mexyl và/hoặc N-(2-metoxibenzoyl)-4-[(metylaminocarbonyl)amino]benzensulfonamid.

Chất an toàn của hợp chất có công thức (I) cũng có thể ở dạng este hoặc muối, như đề cập ví dụ như trong tài liệu The Pesticide Manual, Tái bản lần thứ 16 (BCPC), 2012. Việc đề cập đến cloquintoxet-mexyl cũng áp dụng cho muối lithi, natri, kali, canxi, magie, nhôm, sắt, amoni, amoni bậc bốn, sulfoni hoặc phosphoni của chúng như bộc lộ trong công bố đơn quốc tế số WO 02/34048, và việc đề cập đến fenchlorazol-ethyl cũng áp dụng cho fenchlorazol, v.v.

Tốt hơn là, tỉ lệ trộn của hợp chất có công thức (I) với chất an toàn là từ 100:1 đến 1:10, đặc biệt là từ 20:1 đến 1:1.

Hỗn hợp này có thể được sử dụng một cách có lợi trong chế phẩm nêu trên (trong đó trường hợp "thành phần hoạt tính" đề cập đến hỗn hợp tương ứng của hợp chất có công thức (I) với chất an toàn).

Sáng chế còn đề xuất phương pháp kiểm soát cỏ dại tại địa điểm có cây trồng và cỏ dại, trong đó phương pháp này bao gồm bước sử dụng cho địa điểm đó lượng kiểm soát cỏ dại của chế phẩm theo sáng chế. 'Kiểm soát' có nghĩa là giết chết, làm giảm hoặc làm chậm sự sinh trưởng hoặc ngăn ngừa hoặc làm giảm sự nảy mầm. Thông thường,

thực vật cần được kiểm soát là thực vật không mong muốn (cỏ dại). ‘Địa điểm’ nghĩa là khu vực trong đó thực vật đang sinh trưởng hoặc sẽ sinh trưởng.

Tỉ lệ sử dụng của các hợp chất có công thức (I) có thể thay đổi trong giới hạn rộng và phụ thuộc vào bản chất của đất, phương pháp sử dụng (trước hoặc sau nảy mầm; bao hạt; sử dụng cho luống hạt; sử dụng đất không canh tác v.v.), cây trồng, (các) cỏ dại cần được kiểm soát, các điều kiện khí hậu hiện có, và các yếu tố khác được điều chỉnh bởi phương pháp áp dụng, thời gian áp dụng và cây trồng đích. Các hợp chất có công thức (I) theo sáng chế thường được sử dụng ở tỉ lệ là từ 10 đến 2000 g/ha, đặc biệt là từ 50 đến 1000g/ha.

Việc dùng thường được thực hiện bằng cách phun chế phẩm, thường là bằng máy phun được lắp với máy kéo cho các diện tích lớn, nhưng các phương pháp khác như phun bụi (đối với bột), nhúng hoặc tắm ướt cũng có thể được sử dụng.

Cây trồng hữu dụng trong đó chế phẩm theo sáng chế có thể được sử dụng bao gồm cây trồng mùa vụ như ngũ cốc, ví dụ lúa mạch và lúa mì, bông, cây cải dầu, hướng dương, ngô, lúa nước, đậu tương, củ cải đường, mía và đồng cỏ.

Cây trồng có thể còn bao gồm cây, như cây ăn quả, cây cọ, cây dừa hoặc cây quả hạch khác. Cây họ nho như cây nho, cây bụi có quả, cây ăn quả và rau cũng được bao gồm.

Cây trồng được hiểu là cũng bao gồm các cây mà đã được làm cho dung nạp với thuốc diệt cỏ hoặc các loại thuốc diệt cỏ (ví dụ, các chất ức chế ALS, GS, EPSPS, PPO, ACCase và HPPD) bằng cách phương pháp tạo giống thông thường hoặc bằng kỹ thuật thiết kế di truyền. Ví dụ về cây trồng mùa vụ mà đã được làm cho dung nạp với imidazolinon, ví dụ imazamox, bằng phương pháp tạo giống thông thường là cây cải dầu mùa hè Clearfield® (cải canola). Các ví dụ về cây trồng được làm cho có khả năng dung nạp các thuốc diệt cỏ bằng các phương pháp thiết kế di truyền bao gồm ví dụ, các giống ngô kháng glyphosat và glufosinat được bán trên thị trường với tên thương mại là RoundupReady® và LibertyLink®.

Cây trồng mùa vụ cũng được hiểu là các cây mà được làm cho kháng côn trùng gây hại bằng phương pháp thiết kế di truyền, ví dụ ngô Bt (kháng sâu đục thân ngô châu Âu), bông Bt (kháng bọ vòi voi hại quả bông) và cũng như khoai tây Bt (kháng bọ khoai tây). Các ví dụ về ngô Bt là các giống ngô lai Bt 176 của NK® (Syngenta Seeds). Độc

tổ Bt là protein mà được tạo thành tự nhiên bởi vi khuẩn đất *Bacillus thuringiensis*. Các ví dụ về các độc tố, hoặc các cây trồng chuyển gen có thể tổng hợp các độc tố này, được mô tả trong EP-A-451 878, EP-A-374 753, WO 93/07278, WO 95/34656, WO 03/052073 và EP-A-427 529. Ví dụ về các cây trồng chuyển gen chứa một hoặc nhiều gen mã hóa tính kháng thuốc diệt côn trùng và biểu hiện một hoặc nhiều độc tố là KnockOut® (ngô), Yield Gard® (ngô), NuCOTIN33B® (bông), Bollgard® (bông), NewLeaf® (khoai tây), NatureGard® và Protexcta®. Cây trồng mùa vụ hoặc vật liệu hạt của chúng có thể vừa kháng thuốc diệt cỏ và, đồng thời, kháng việc cho côn trùng ăn (các sự kiện chuyển gen "xếp chồng"). Ví dụ, hạt có thể có khả năng biểu hiện protein Cry3 diệt côn trùng trong khi đồng thời dung nạp glyphosat.

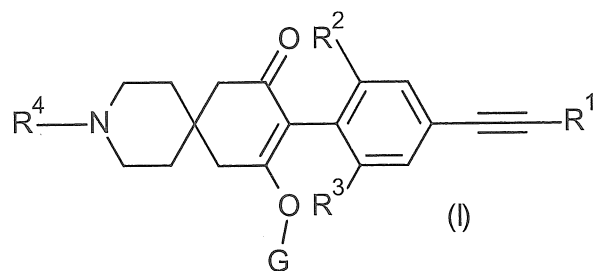
Cây trồng mùa vụ cũng được hiểu là bao gồm cây trồng mà thu được bằng phương pháp tạo giống hoặc phương pháp thiết kế di truyền thông thường và chứa các tính trạng sản phẩm (ví dụ, độ ổn định bảo quản được cải thiện, giá trị dinh dưỡng cao hơn và hương vị được cải thiện).

Các cây trồng hữu dụng khác bao gồm thảm cỏ, ví dụ như trong bãi chơi golf, bãi cỏ, công viên và lề đường, hoặc mảng cỏ phát triển thương mại, và cây cảnh như cây hoa hoặc cây bụi.

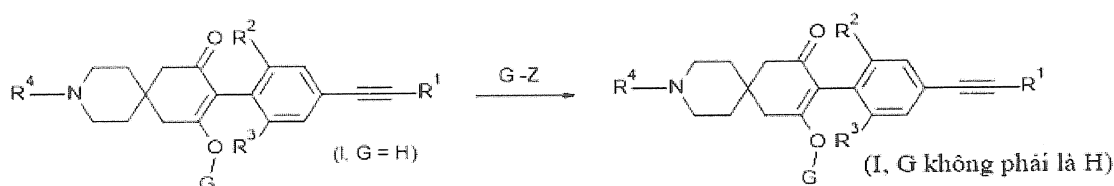
Các chế phẩm này có thể được sử dụng để kiểm soát các thực vật không mong muốn (gọi chung là, 'cỏ dại'). Cỏ dại cần được kiểm soát có thể là cả các loài một lá mầm, ví dụ như *Agrostis*, *Alopecurus*, *Avena*, *Brachiaria*, *Bromus*, *Cenchrus*, *Cyperus*, *Digitaria*, *Echinochloa*, *Eleusine*, *Lolium*, *Monochoria*, *Rottboellia*, *Sagittaria*, *Scirpus*, *Setaria* và *Sorghum*, và các loài hai lá mầm, ví dụ như *Abutilon*, *Amaranthus*, *Ambrosia*, *Chenopodium*, *Chrysanthemum*, *Conyza*, *Galium*, *Ipomoea*, *Nasturtium*, *Sida*, *Sinapis*, *Solanum*, *Stellaria*, *Veronica*, *Viola* và *Xanthium*. Các hợp chất theo sáng chế đã được thể hiện là biểu hiện hoạt tính đặc biệt tốt chống lại các loài cỏ dại, đặc biệt là *Lolium Perenne*. Cỏ dại cũng có thể bao gồm cây mà có thể được coi là cây trồng mùa vụ nhưng mà sinh trưởng bên ngoài khu vực trồng ('cây trồng mọc dại'), hoặc sinh trưởng từ hạt rơi vãi từ việc trồng cây trước đó của cây trồng mùa vụ khác ('cây trồng mọc tự nhiên'). Các cây trồng mọc tự nhiên hoặc cây trồng mọc dại có thể dung nạp với thuốc diệt cỏ khác nhất định.

Các hợp chất theo sáng chế có thể được điều chế theo các sơ đồ sau đây.

Các hợp chất theo sáng chế có thể được điều chế theo các sơ đồ sau đây.

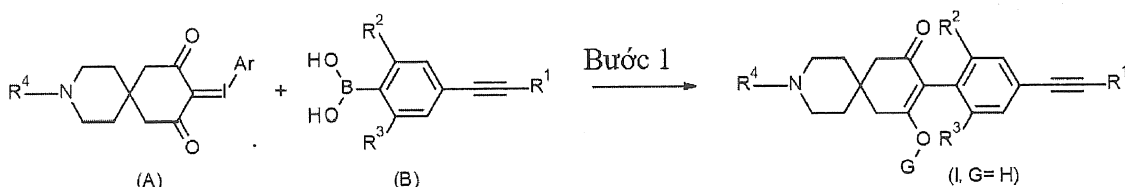


Các hợp chất có công thức (I) trong đó G không phải là hydro có thể được điều chế bằng cách cho hợp chất có công thức (I) trong đó G là hydro, phản ứng với chất phản ứng G-Z, trong đó G-Z là chất alkyl hóa như alkyl halogenua, chất axyl hóa như clorua axit hoặc anhydrit, chất sulfonyl hóa như sulfonyl clorua, chất carbamyl hóa như carbamoyl clorua, hoặc chất cacbon hóa như cloformat, sử dụng các phương pháp đã biết.



Sơ đồ 1

Các hợp chất có công thức (I) có thể được điều chế bằng cách cho iodonium ylit có công thức (A), trong đó Ar là nhóm phenyl được thế tùy ý, phản ứng với axit aryl boronic có công thức (B), trong sự có mặt của chất xúc tác paladi thích hợp, bazơ và trong dung môi thích hợp.



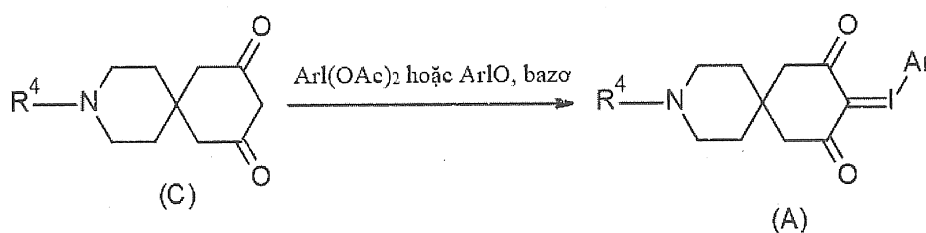
Sơ đồ 2

Các chất xúc tác paladi thích hợp thường là các phức paladi(II) hoặc paladi(0), ví dụ paladi(II) dihalogenua, paladi(II) axetat, paladi(II) sulfat, bis(triphenylphosphin)-paladi(II) diclorua, bis(trixyclopentylphosphin)paladi(II) diclorua, bis(trixyclohexyl-

phosphin)paladi(II) diclorua, bis(dibenzylidenaxeton)paladi(0) hoặc tetrakis-(triphenylphosphin)paladi(0). Chất xúc tác paladi này cũng có thể được điều chế "*tại chỗ*" từ các hợp chất paladi(II) hoặc paladi(0) bằng cách tạo phức với các phối tử mong muốn, bằng cách, ví dụ, kết hợp muối paladi(II) cần được tạo phức, ví dụ paladi(II) diclorua (PdCl_2) hoặc paladi(II) axetat ($\text{Pd}(\text{OAc})_2$), cùng với phối tử mong muốn, ví dụ triphenylphosphin (PPh_3), trixyclopentylphosphin, trixyclohexylphosphin, 2-dixyclohexylphosphino-2',6'-dimetoxybiphenyl hoặc 2-dixyclohexylphosphino-2',4',6'-triisopropylbiphenyl và dung môi được chọn, với hợp chất có công thức (N), axit arylboronic có công thức (O), và bazơ. Các phối tử bidendat cũng thích hợp, ví dụ 1,1'-bis(diphenylphosphino)ferroxen hoặc 1,2-bis(diphenylphosphino)etan. Bằng cách gia nhiệt môi trường phản ứng, phức hợp paladi(II) hoặc phức hợp paladi(0) được mong muốn cho phản ứng ghép cặp C-C do đó được tạo thành "*tại chỗ*", và sau đó bắt đầu phản ứng ghép cặp C-C.

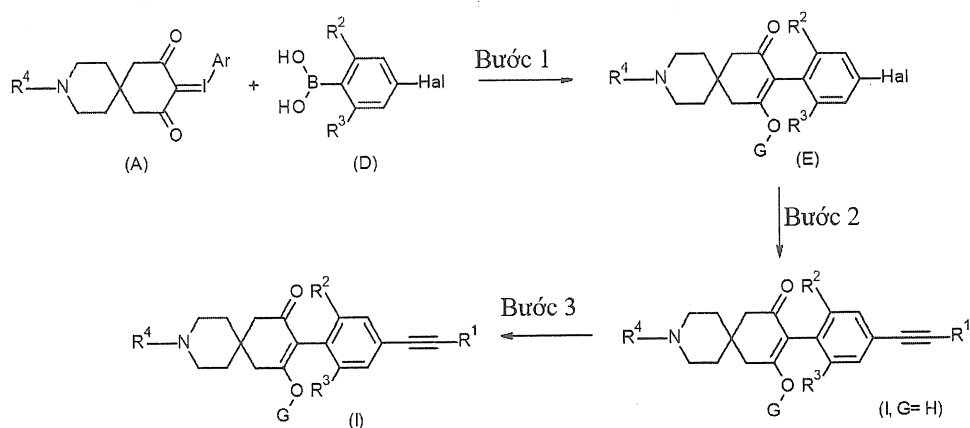
Các chất xúc tác paladi được sử dụng ở lượng từ 0,001 đến 50 mol %, tốt hơn là ở lượng từ 0,1 đến 15 mol %, tính theo hợp chất có công thức (N). Phản ứng này cũng có thể được tiến hành với sự có mặt của các chất phụ gia khác, như muối tetralkylamoni, ví dụ, tetrabutylamoni bromua. Tốt hơn là, chất xúc tác paladi là paladi axetat, bazơ là lithi hydroxit và dung môi là 1,2-dimetoxietan nước.

Hợp chất có công thức (A) có thể được điều chế từ hợp chất 1,3 dion có công thức (C) bằng cách xử lý bằng chất phản ứng iodin hóa trị cao như (di)axetoxylodobenzen hoặc iodosylbenzen và bazơ như natri cacbonat nước, lithi hydroxit hoặc natri hydroxit trong dung môi như nước hoặc rượu có nước như etanol có nước bằng cách sử dụng các quy trình đã biết.



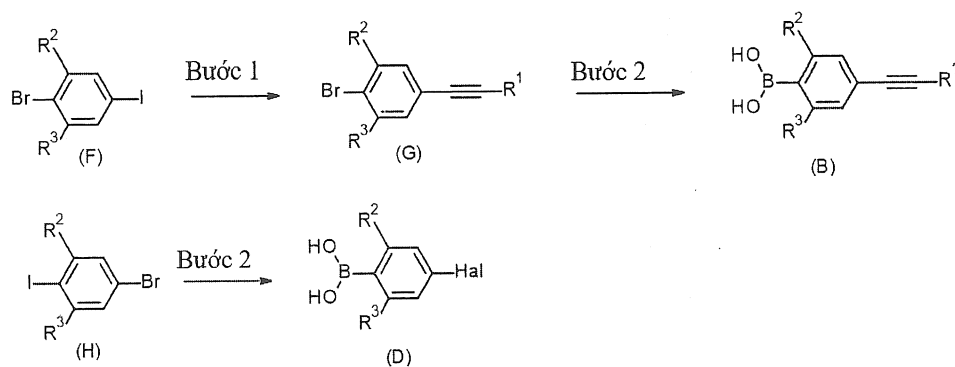
Sơ đồ 3

Theo cách khác, nhóm propyn có thể được sử dụng sau đó trong trình tự tổng hợp bởi quá trình propynyl hóa có tính decarboxyl hóa như trong bước 2 dưới đây.



Sơ đồ 4

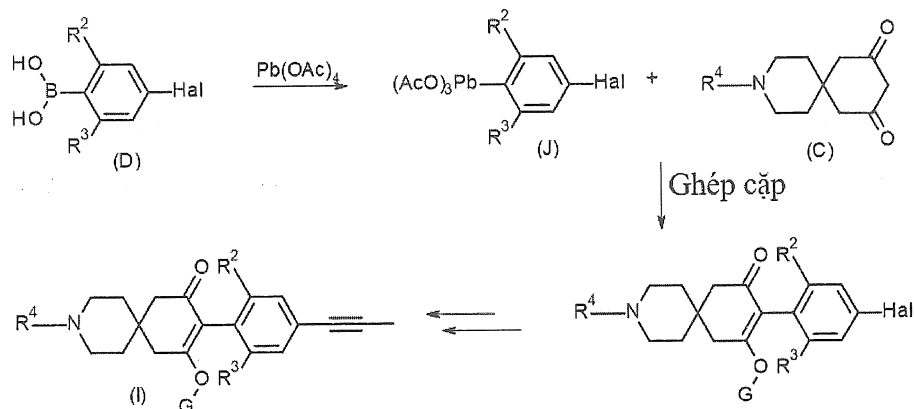
Axit boronic có thể được điều chế bằng cách phương pháp như trong Sơ đồ 5 dưới đây. Ví dụ, hợp chất có công thức (B) hoặc (D) có thể được điều chế từ aryl halogenua có công thức (F) hoặc (H) bằng các phương pháp đã biết. Ví dụ, aryl halogenua có công thức (F hoặc H) có thể được xử lý bằng alkyl lithi hoặc alkyl magie halogenua trong dung môi thích hợp, tốt hơn là diethyl ete hoặc tetrahydrofuran, ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ $-80\text{ }^{\circ}\text{C}$ đến $30\text{ }^{\circ}\text{C}$, và chất phản ứng aryl magie hoặc aryl lithi thu được sau đó có thể được phản ứng với trialkyl borat (tốt hơn là trimetylborat) để thu được aryl dialkylboronat mà có thể được thủy phân để tạo thành axit boronic có công thức (B) hoặc (D) trong các điều kiện axit.



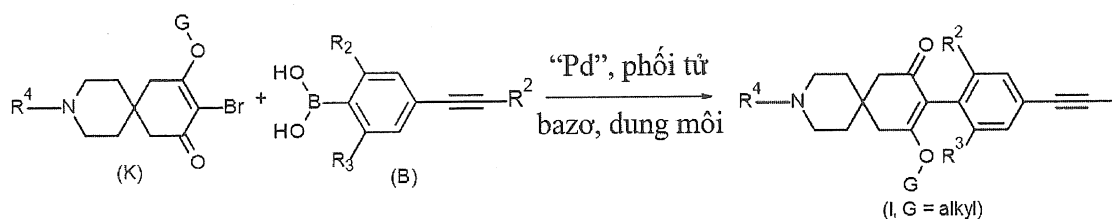
Sơ đồ 5

Hợp chất có công thức (I) cũng có thể được điều chế qua việc ghép cặp Pb như được thể hiện trong sơ đồ dưới đây bằng cách cho hợp chất có công thức (D) phản ứng, để tạo thành chất phản ứng organolead có công thức (J) và phản ứng tiếp theo với 1,3 dion (C) trong các điều kiện được mô tả, ví dụ, bởi J. Pinhey, Pure and Appl. Chem.,

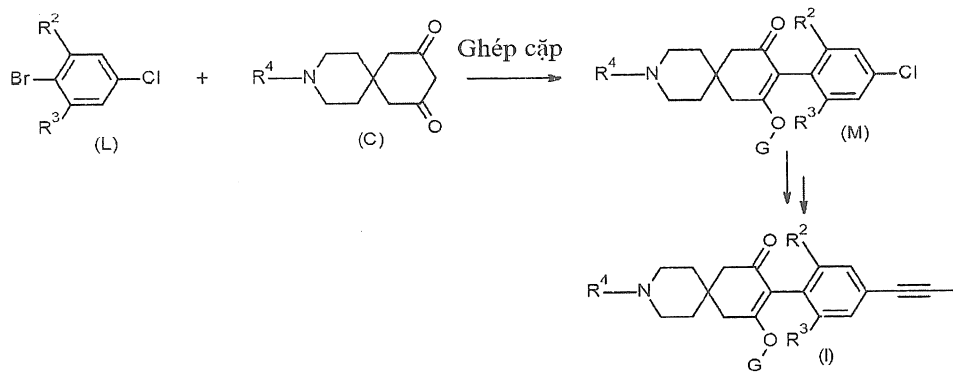
(1996), 68 (4), 819 và bởi M. Moloney et al., *Tetrahedron Lett.*, (2002), 43, 3407. Hợp chất triarylbismut thích hợp trong các điều kiện được mô tả, ví dụ, bởi A. Yu. Fedorov *et al.*, *Russ. Chem. Bull. Int. Ed.*, (2005), 54 (11), 2602, và bởi P. Koech and M. Krische, *J. Am. Chem. Soc.*, (2004), 126 (17), 5350 và các tài liệu tham khảo ở đây có thể được sử dụng làm quy trình liên quan.



Các hợp chất thuộc loại (I) cũng có thể được điều chế qua việc tạo cặp paladi như được thể hiện trong sơ đồ dưới đây, trong đó axit boronic thuộc loại (B) được kết cặp với halo-alken được bảo vệ thích hợp thuộc loại (K) trong kết cặp loại Suzuki.

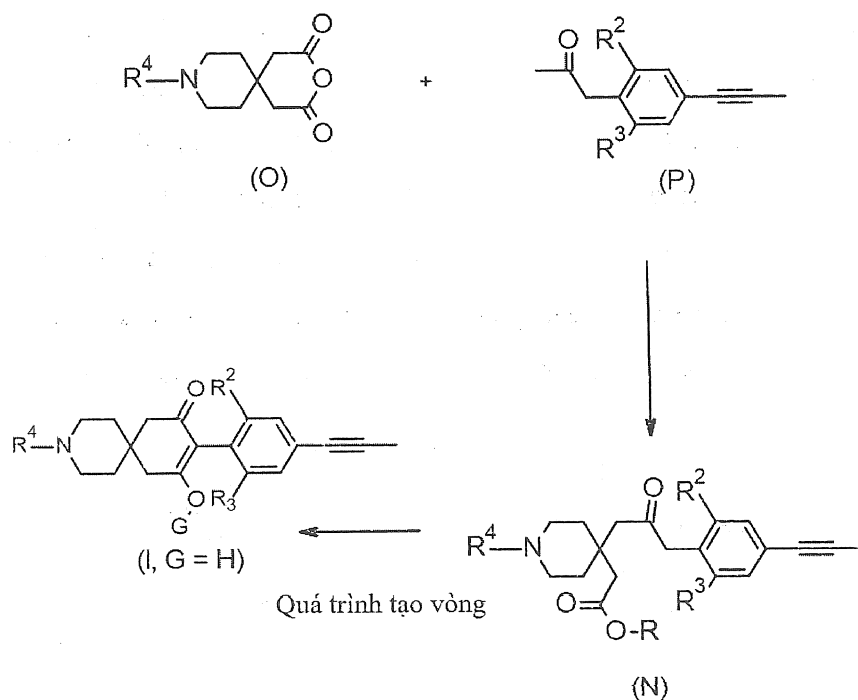


Với các điều kiện thích hợp, 1,3 dion thích hợp cũng có thể được kết cặp trực tiếp với hợp chất Halo (ví dụ có công thức (L)) với chất xúc tác paladi. Quá trình propynyl hóa chất trung gian (M) như được mô tả trên đây tạo ra các hợp chất thuộc loại (I).



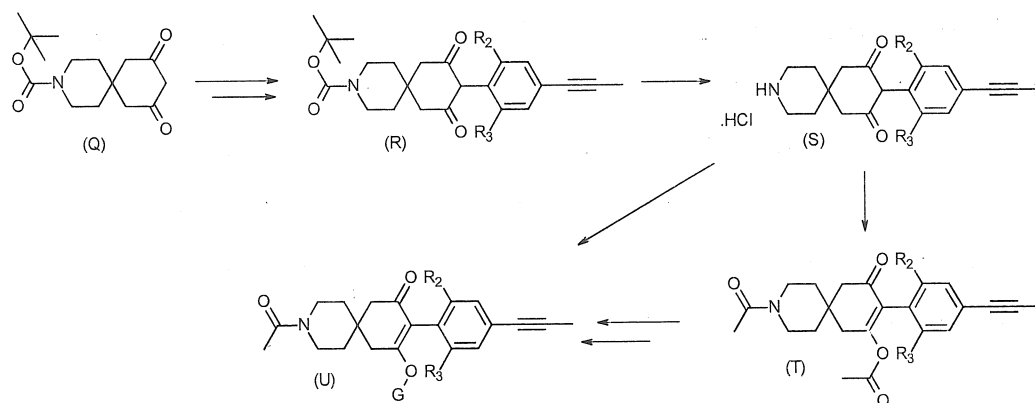
Sơ đồ 8

Hợp chất có công thức (I, G=H) có thể được điều chế bằng cách hóa vòng hợp chất có công thức (N), trong đó R là hydro hoặc nhóm alkyl, tốt hơn là trong sự có mặt của axit hoặc bazơ, và tùy ý trong sự có mặt của dung môi thích hợp, bằng các phương pháp tương tự như các phương pháp được mô tả bởi T. Wheeler, US 4,209,532. Các hợp chất có công thức (N) đã được thiết kế đặc biệt làm các chất trung gian trong quá trình tổng hợp các hợp chất có công thức (I). Hợp chất có công thức (N) trong đó R là hydro có thể được hóa vòng trong các điều kiện axit, tốt hơn là trong sự có mặt của axit mạnh như axit sulfuric, axit polyphosphoric hoặc chất phản ứng Eaton, tùy ý trong sự có mặt của dung môi thích hợp như axit axetic, toluen hoặc diclometan.



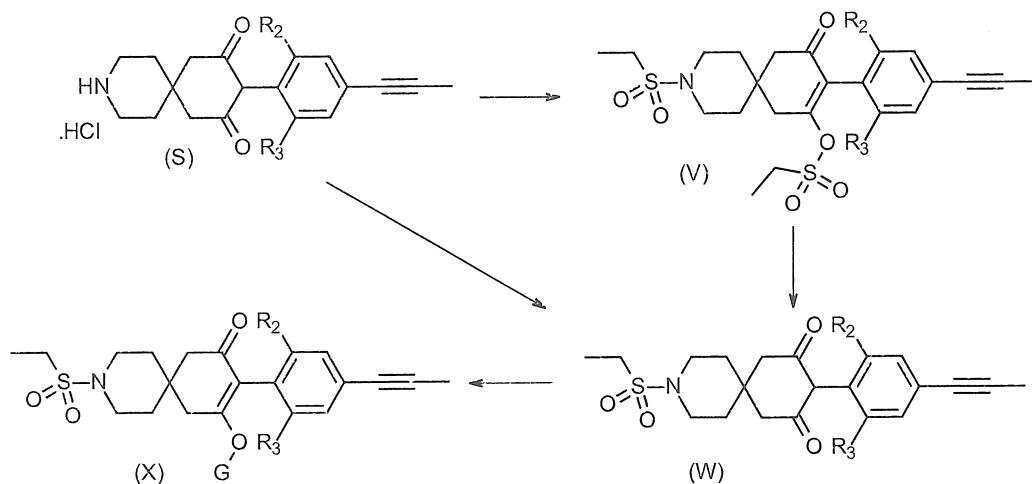
Sơ đồ 9

Các hợp chất thuộc loại (I) cũng có thể được điều chế bằng quá trình tạo chức giai đoạn sau với việc sử dụng nhóm bảo vệ thích hợp như được thể hiện trong sơ đồ dưới đây. Hợp chất (Q) có thể được chuyển hóa thành chất trung gian (R) bằng các phương pháp đã được mô tả và sau đó nhóm bảo vệ (như nhóm BOC đã được thể hiện) có thể được loại bỏ (trong các điều kiện axit ở ví dụ này). Chất trung gian (S) sau đó có thể được chuyển hóa trực tiếp thành các hợp chất (ví dụ (U) hoặc được phản ứng kép trên cả nguyên tử oxy và nitơ để tạo ra hợp chất thuộc loại (T). Các hợp chất thuộc loại (T) có thể dễ dàng được chuyển hóa thành hợp chất bất kỳ thuộc loại (I) – ví dụ enol-este thuộc loại (T) có thể được thủy phân chọn lọc để thu được (U, G=H), mà sau đó có thể được chuyển hóa thành (U, G là khác với H) bằng cách phương pháp đã được mô tả trước đó.

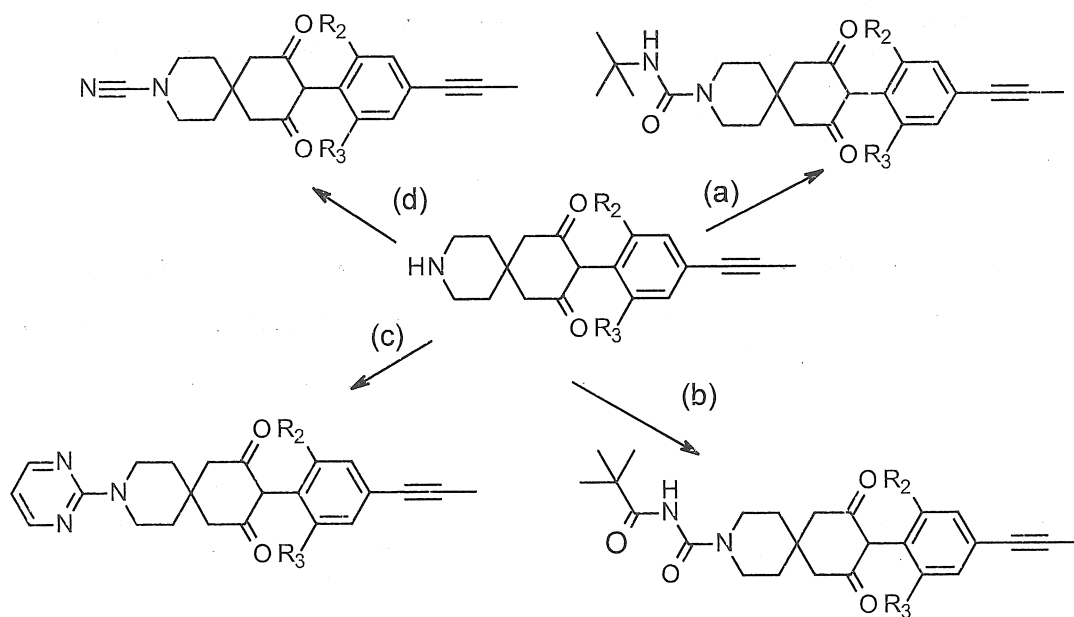


Sơ đồ 10

Theo cách khác, tuần tự này có thể được thực hiện với quá trình sulfonyl hóa thay vì axyl hóa.



Ure, axyl ure, các hợp chất N-heteroaryl và N-xyano có thể được tạo ra từ các chất trung gian (S), cũng bằng các phương pháp chuẩn trong tài liệu như đã biết đối với người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực kỹ thuật, như trong sơ đồ 12.

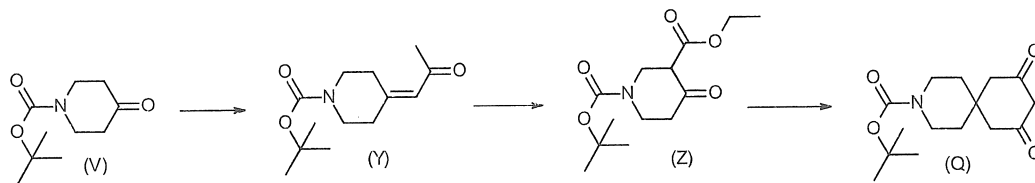


(a) 2-isoxyanato-2-metyl-propan, NEt_3 , DCM; (b) 2,2-dimetylpropanoyl isoxyanat, NEt_3 , DCM; (c) 2-flopyrimidin, NEt_3 , DMSO, 180°C , vi sóng; (d) Xyanogen bromua, DIPEA, DCM.

Sơ đồ 12

Các 1,3 dion như này có thể được điều chế bằng cách sử dụng các phương pháp như các phương pháp được thể hiện dưới đây. Vì các xeton có bán sẵn (ví dụ thuộc loại

(V)) có thể được chuyển hóa thành chất trung gian (W) và sau đó được chuyển hóa thành chất trung gian (X) và cuối cùng được decarboxyl hóa thu được chất trung gian (Q) (các phương pháp này được mô tả trong WO2008/110308).

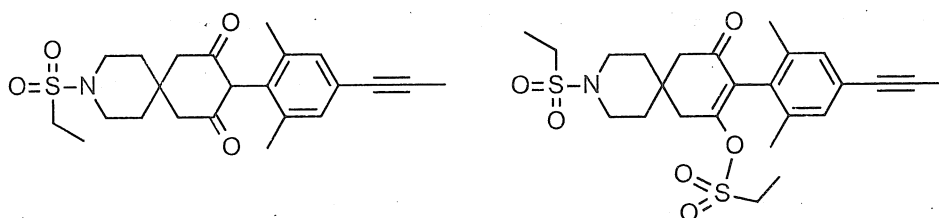


Sơ đồ 13

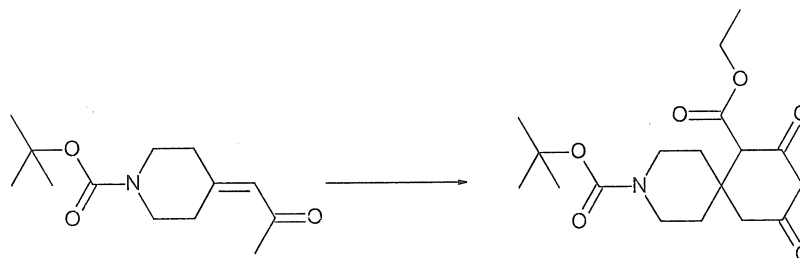
Ví dụ thực hiện sáng chế

Các ví dụ không giới hạn sau đây đưa ra các phương pháp tổng hợp cụ thể đối với các hợp chất đại diện theo sáng chế, như được đề cập đến trong Bảng 1 & 2 dưới đây.

Ví dụ 1: Tổng hợp 9-(2,6-dimetyl-4-prop-1-ynyl-phenyl)-3-ethylsulfonyl-3-azaspiro[5.5]undecan-8,10-dion (Hợp chất A3) và [9-(2,6-dimetyl-4-prop-1-ynyl-phenyl)-3-ethylsulfonyl-10-oxo-3-azaspiro[5.5]undec-8-en-8-yl] etansulfonat (Hợp chất P8).



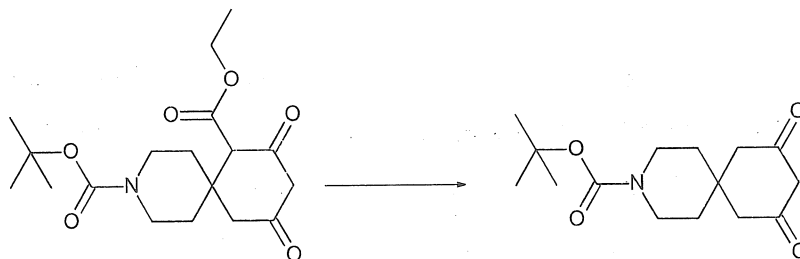
Bước 1: Tổng hợp O3-tert-butyl O11-etyl 8,10-dioxo-3-azaspiro[5.5]undecan-3,11-dicarboxylat



Tert-Butyl 4-axetonylidenepiperidin-1-carboxylat (12,9 g, 54,0 mmol) được hòa tan trong etanol (100 mL) và dietyl propandioat (54,12 mmol) được bổ sung. Hỗn hợp phản ứng được xử lý bằng dung dịch của natri etoxit mà đã được điều chế bằng cách bổ

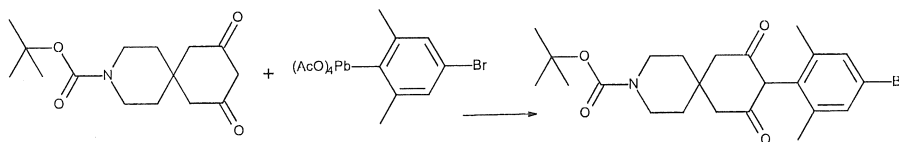
sung natri (54,1 mmol) vào ethanol (30ml) tại nhiệt độ phòng. Hỗn hợp phản ứng được khuấy tại nhiệt độ phòng trong 3 giờ sau đó được gia nhiệt đến hồi lưu trong 1 giờ. Khi làm nguội, hỗn hợp phản ứng được cô *trong chân không* để thu được O3-*tert*-butyl O11-ethyl 8,10-dioxo-3-azaspiro[5.5]undecan-3,11-dicarboxylat dưới dạng dầu, được sử dụng ở bước tiếp theo mà không cần tinh chế thêm.

Bước 2: Tổng hợp *tert*-butyl 8,10-dioxo-3-azaspiro[5.5]undecan-3-carboxylat



O3-*tert*-butyl O11-ethyl 8,10-dioxo-3-azaspiro[5.5]undecan-3,11-dicarboxylat thô từ bước 1 được hòa tan trong NaOH nước (12M, 5 mL) và được khuấy trong 5 giờ. Hỗn hợp phản ứng này được axit hóa đến độ pH 6 bằng cách bổ sung HCl đặc tại 0°C, và được chiết bằng EtOAc. Các chất hữu cơ được làm khô và được cô *trong chân không* để để lại chất rắn màu vàng mà được tán nhỏ để thu được bột màu hồng nhạt của *tert*-butyl 8,10-dioxo-3-azaspiro[5.5]undecan-3-carboxylat. Lốp nước được axit hóa thêm đến độ pH 2 bằng cách bổ sung HCl đặc và được chiết bằng EtOAc. Các chất hữu cơ được làm khô và được cô *trong chân không* để để lại chất rắn màu vàng nhạt mà được tán nhỏ bằng ete để thu được mẻ bột màu vàng nhạt khác của *tert*-butyl 8,10-dioxo-3-azaspiro[5.5]undecan-3-carboxylat (3,914 g, 13,91 mmol). ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) 3,51 - 3,25 (m, 6H), 2,69 - 2,54 (m, 4H), 1,47 - 1,43 (m, 9H), 1,44 - 1,39 (m, 4H).

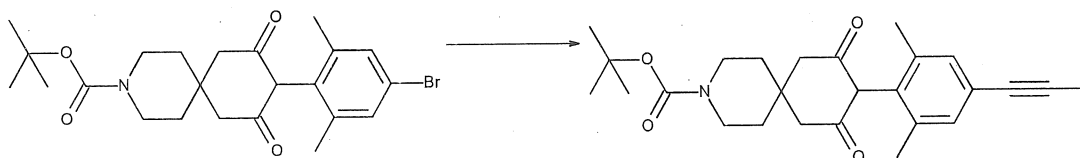
Bước 3: Tổng hợp *tert*-butyl 9-(4-bromo-2,6-dimetyl-phenyl)-8,10-dioxo-3-azaspiro[5.5]undecan-3-carboxylat



Tert-Butyl 8,10-dioxo-3-azaspiro[5.5]undecan-3-carboxylat (0,5 g, 1,8 mmol) và DMAP (1,1 g, 8,9 mmol) được hòa tan trong cloroform (20 mL). Hỗn hợp phản ứng được khuấy trong môi trường nitơ trong 10 phút và toluen (5 mL) được bổ sung, sau đó

là [diacetoxyl-(4-bromo-2,6-dimethyl-phenyl)plumbyl] axetat (1,2 g, 2,1 mmol). Huyền phù tạo thành được gia nhiệt trong môi trường nitơ tại 75°C trong 3 giờ và sau đó được cho phép làm mát đến nhiệt độ phòng. Hỗn hợp phản ứng được xử lý bằng 2 M HCl (50 mL) và chất kết tủa màu trắng được tạo thành trong quá trình khuấy. Hỗn hợp phản ứng được lọc và pha hữu cơ được tách và lớp nước được chiết bằng DCM. Các chất hữu cơ kết hợp được làm khô (MgSO₄), được bay hơi và được tinh chế bằng sắc ký cột nhanh (sự rửa giải gradien: 5 - 100% EtOAc:iso-hexan) để thu được *tert*-butyl 9-(4-bromo-2,6-dimethyl-phenyl)-8,10-dioxo-3-azaspiro[5.5]undecan-3-carboxylat (0,51 g, 1,1 mmol). ¹H NMR (400 MHz, CD₃OD) 7,25 - 7,10 (m, 2H), 3,54 - 3,43 (m, 4H), 2,61 - 2,52 (m, 4H), 2,05 - 1,98 (m, 6H), 1,72 - 1,56 (m, 4H), 1,48 - 1,39 (m, 9H).

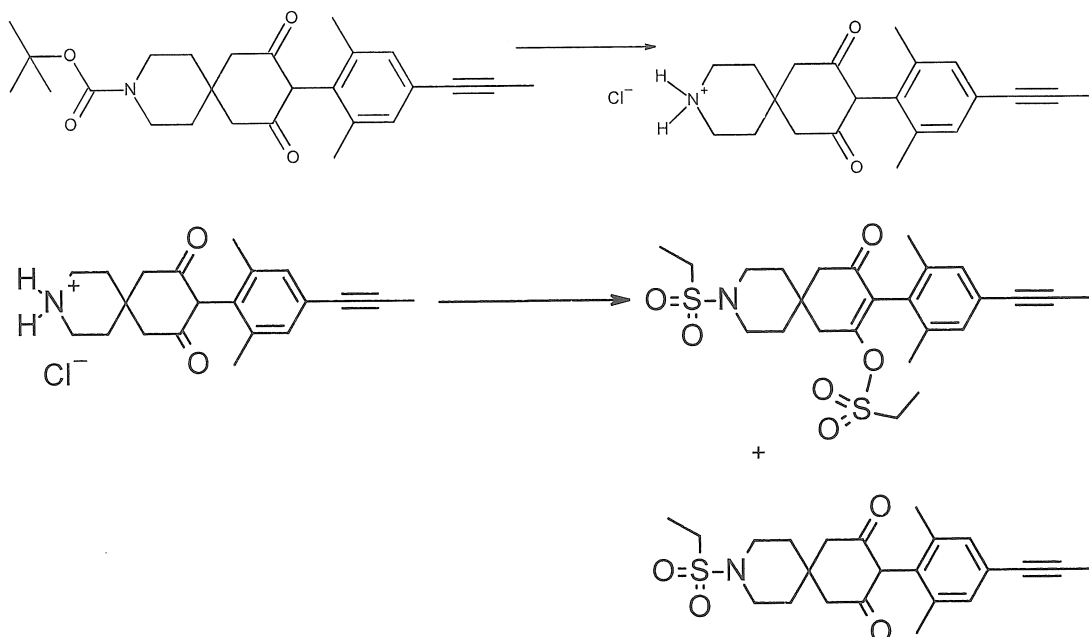
Bước 4: Tổng hợp *tert*-butyl 9-(2,6-dimethyl-4-prop-1-ynyl-phenyl)-8,10-dioxo-3-azaspiro[5.5]undecan-3-carboxylat (Hợp chất A12).



4-diphenylphosphanylbutyl(diphenyl)phosphan (32 mg, 0,075 mmol), diclobis(triphenylphosphin)paladi(II) (26 mg, 0,0373 mmol) và axit but-2-ynoic (346 mg, 0,894 mmol) được đặt vào lọ vi sóng. Dung dịch của *tert*-butyl 9-(4-bromo-2,6-dimethyl-phenyl)-8,10-dioxo-3-azaspiro[5.5]undecan-3-carboxylat (0,346 g, 0,745 mmol) trong DMSO (6 mL/mmol) được bổ sung, sau đó là DBU (0,34 g, 2,24 mmol) và hỗn hợp phản ứng được gia nhiệt trong điều kiện chiếu xạ vi sóng tại 110°C trong 45 phút. Phản ứng được pha loãng với 2M HCl và được chiết bằng DCM. Các chất hữu cơ được làm khô và được cô trong chân không để để lại gôm màu cam mà được tinh chế bằng sắc ký nhanh để thu được (sự rửa giải gradien: 10 - 100% EtOAc trong iso-hexan) *tert*-butyl 9-(2,6-dimethyl-4-prop-1-ynyl-phenyl)-8,10-dioxo-3-azaspiro[5.5]undecan-3-carboxylat (0,193 g, 0,456 mmol). ¹H NMR (400 MHz, CD₃OD) 7,07 - 6,93 (m, 2H), 3,52 - 3,45 (m, 4H), 2,62 - 2,53 (m, 4H), 2,02 - 1,98 (m, 9H), 1,70 - 1,60 (m, 4H), 1,51 - 1,42 (m, 9H).

Bước 5: Tổng hợp 9-(2,6-dimethyl-4-prop-1-ynyl-phenyl)-3-ethylsulfonyl-3-azaspiro[5.5]undecan-8,10-dion (Hợp chất A3) và [9-(2,6-dimethyl-4-prop-1-ynyl-

phenyl)-3-ethylsulfonyl-10-oxo-3-azaspiro[5.5]undec-8-en-8-yl] etansulfonat (Hợp chất P8).

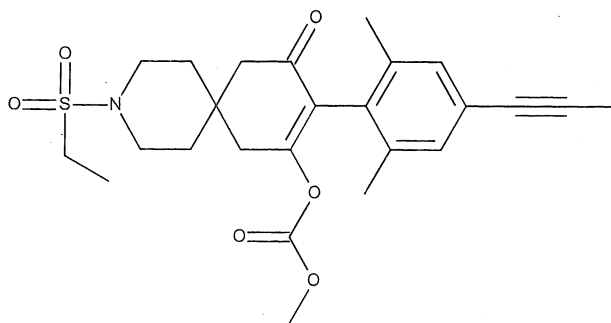


tert-Butyl 9-(2,6-dimethyl-4-prop-1-ynyl-phenyl)-8,10-dioxo-3-azaspiro[5.5]undecan-3-carboxylat (0,193 g, 0,456 mmol) được khuấy trong 1 giờ tại nhiệt độ phòng trong 4 M HCl trong 1,4-dioxan (4 mL, 16 mmol). Hỗn hợp phản ứng được cô *trong chân không* để để lại 9-(2,6-dimethyl-4-prop-1-ynyl-phenyl)-3-azaspiro[5.5]undecan-8,10-dion hydroclorua dưới dạng chất rắn màu trắng.

9-(2,6-dimethyl-4-prop-1-ynyl-phenyl)-3-azaspiro[5.5]undecan-8,10-dion hydroclorua (0,250 g, 0,695 mmol) được hấp thu vào trong DCM. Triethylamin (2,84 đương lượng, 1,97 mmol) được bổ sung và hỗn hợp phản ứng được khuấy trong vài phút trước khi etansulfonyl clorua (1,02 đương lượng, 0,709 mmol) được bổ sung. Hỗn hợp phản ứng này được khuấy tại nhiệt độ phòng trong 2 giờ, trong thời gian đó một số chất rắn rơi ra khỏi dung dịch. Sau một giờ nữa, etansulfonyl clorua bổ sung (1,02 đương lượng, 0,709 mmol) được bổ sung. Hỗn hợp phản ứng này được khuấy trong 1 giờ sau đó được để lắng qua đêm. Triethylamin (2,84 đương lượng, 1,97 mmol) được bổ sung, sau đó một lượng chất rắn đáng kể rơi ra khỏi dung dịch. Sau khi khuấy trong 1 giờ, hỗn hợp phản ứng được rót vào 2M HCl, sau đó tất cả các chất rắn sẽ đi vào dung dịch. Hỗn hợp phản ứng này được chiết hai lần bằng DCM và các chất hữu cơ được làm khô và được bay hơi để để lại chất rắn dạng gôm màu nâu nhạt mà được hấp thụ sơ bộ lên trên silic dioxid và được tinh chế bằng sắc ký nhanh sử dụng gradien từ 5- 100% EtOAc trong

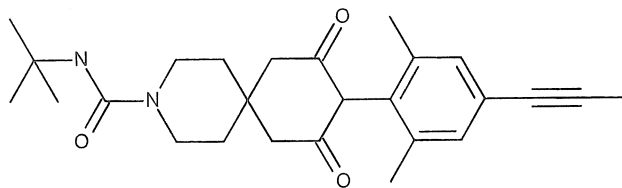
iHex để thu được 9-(2,6-dimetyl-4-prop-1-ynyl-phenyl)-3-ethylsulfonyl-3-azaspiro[5.5]undecan-8,10-dion (Hợp chất A3) (0,026 g, 0,063 mmol). ^1H NMR (400MHz, Metanol- d_4) δ = 7,06 - 6,99 (m, 2H), 3,38 - 3,32 (m, 4H), 3,12 - 3,01 (m, 2H), 2,64 - 2,48 (m, 4H), 2,03 - 1,97 (m, 9H), 1,82 - 1,70 (m, 4H), 1,37 - 1,30 (m, 3H) và [9-(2,6-dimetyl-4-prop-1-ynyl-phenyl)-3-ethylsulfonyl-10-oxo-3-azaspiro[5.5]undec-8-en-8-yl] etansulfonat (Hợp chất P8) (0,061 g, 0,14 mmol). ^1H NMR (400MHz, CDCl_3) δ = 7,12 - 7,07 (m, 2H), 3,47 - 3,28 (m, 4H), 3,02 - 2,93 (m, 4H), 2,71 - 2,63 (m, 2H), 2,62 - 2,54 (m, 2H), 2,10 - 1,98 (m, 9H), 1,90 - 1,74 (m, 4H), 1,44 - 1,33 (m, 3H), 1,00 - 0,88 (m, 3H).

Ví dụ 2: Tổng hợp [9-(2,6-dimetyl-4-prop-1-ynyl-phenyl)-3-ethylsulfonyl-10-oxo-3-azaspiro[5.5]undec-8-en-8-yl] metyl cacbonat (Hợp chất P7)



9-(2,6-dimetyl-4-prop-1-ynyl-phenyl)-3-ethylsulfonyl-3-azaspiro[5.5]undecan-8,10-dion (Hợp chất A3) (0,1350 g, 0,3249 mmol) được hòa tan trong DCM, sau đó N,N-dietyletanamin (1,5 đương lượng, 0,4874 mmol) được bổ sung sau đó là metyl cacbonocloridat (1,200 đương lượng, 0,390 mmol). Sau khi khuấy tại nhiệt độ phòng trong 2,5 giờ, hỗn hợp phản ứng được bay hơi để để lại chất rắn màu nâu mà được hấp thụ sơ bộ lên trên silic dioxit và được tinh chế bằng sắc ký nhanh sử dụng gradien từ 10-100% EtOAc trong iHex để thu được [9-(2,6-dimetyl-4-prop-1-ynyl-phenyl)-3-ethylsulfonyl-10-oxo-3-azaspiro[5.5]undec-8-en-8-yl] metyl cacbonat (Hợp chất P7) (0,139 g, 0,293 mmol). ^1H NMR (400MHz, CDCl_3) δ = 7,12 - 7,00 (m, 2H), 3,72 - 3,59 (m, 3H), 3,42 - 3,29 (m, 4H), 3,02 - 2,92 (m, 2H), 2,79 - 2,74 (m, 2H), 2,66 - 2,52 (m, 2H), 2,02 (m, 9H), 1,91 - 1,74 (m, 4H), 1,41 - 1,30 (m, 3H).

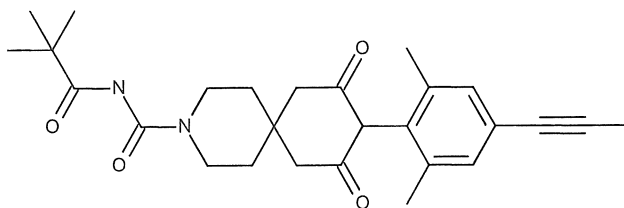
Ví dụ 3: Tổng hợp N-*tert*-butyl-9-(2,6-dimetyl-4-prop-1-ynyl-phenyl)-8,10-dioxo-3-azaspiro[5.5]undecan-3-carboxamit (Hợp chất A5)



9-(2,6-dimethyl-4-prop-1-ynyl-phenyl)-8-hydroxy-3-azaspiro[5.5]undec-8-en-10-on (0,131 g, 0,405 mmol) được hấp thụ trong diclometan (5 mL) và 2-isoxyanato-2-methyl-propan (0,154 g, 1,56 mmol) được bổ sung tại 0°C sau đó là trietylamin (0,282 mL, 2,03 mmol), sau đó tất cả các chất rắn ngay lập tức đi vào trong dung dịch. Sau khi khuấy trong 16 giờ, sau đó hỗn hợp phản ứng được pha loãng bằng nước và được axit hóa bằng 10% axit xitric, sau đó được chiết bằng DCM (2 x 15 mL). Các chất hữu cơ được rửa bằng nước muối và được làm khô qua Na₂SO₄, được lọc, được bay hơi và cặn thô được tinh chế bằng sắc ký HPLC điều chế để thu được N-*tert*-butyl-9-(2,6-dimethyl-4-prop-1-ynyl-phenyl)-8,10-dioxo-3-azaspiro[5.5]undecan-3-carboxamid (Hợp chất A5) dưới dạng chất rắn màu trắng (29 mg, 0,069 mmol).

¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 7,02 (s, 2H), 3,39 (t, J = 5,5Hz, 4H), 2,56 (s, 4H), 1,98-2,00 (9H), 1,65 (t, J = 5,5Hz, 4H), 1,32 (s, 9H).

Ví dụ 4: Tổng hợp N-*tert*-butyl-9-(2,6-dimethyl-4-prop-1-ynyl-phenyl)-8,10-dioxo-3-azaspiro[5.5]undecan-3-carboxamid (Hợp chất A6)

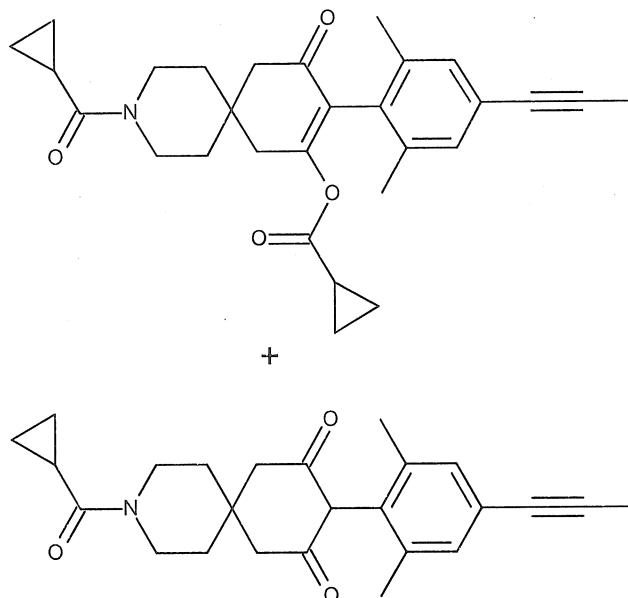


9-(2,6-dimethyl-4-prop-1-ynyl-phenyl)-3-azaspiro[5.5]undecan-8,10-dione hydroclorua (0,200 g, 0,556 mmol) được hấp thụ vào trong DCM (8 mL). Trietylamin (2,84 đương lượng, 1,58 mmol) được bổ sung và hỗn hợp phản ứng được khuấy trong vài phút trước khi 2,2-dimethylpropanoyl isoxyanat (2,200 đương lượng, 1,22 mmol) được bổ sung. Hỗn hợp phản ứng này được khuấy trong 2 giờ và sau đó được pha loãng bằng 2M HCl và được chiết hai lần bằng DCM. Các chất hữu cơ được làm khô và được bay hơi để để lại gôm màu vàng mà được hấp thụ sơ bộ lên trên silic dioxit và được tinh chế bằng sắc ký nhanh sử dụng gradien từ 5- 100% EtOAc trong iHex để thu được N-

tert-butyl-9-(2,6-dimethyl-4-prop-1-ynyl-phenyl)-8,10-dioxo-3-azaspiro[5.5]undecan-3-carboxamit (Hợp chất A6) dưới dạng chất rắn màu trắng (0,061 g, 0,14 mmol).

^1H NMR (400MHz, Metanol- d_4) δ = 7,07 - 6,97 (m, 2H), 3,61 - 3,49 (m, 4H), 2,62 - 2,51 (m, 4H), 2,02 - 2,00 (m, 6H), 2,00 - 1,98 (m, 3H), 1,79 - 1,70 (m, 4H), 1,26 - 1,22 (m, 9H).

Ví dụ 5: Tổng hợp [3-(xyclopropancarbonyl)-9-(2,6-dimethyl-4-prop-1-ynyl-phenyl)-10-oxo-3-azaspiro[5.5]undec-8-en-8-yl] xyclopropancarboxylat (Hợp chất P1) và 3-(xyclopropancarbonyl)-9-(2,6-dimethyl-4-prop-1-ynyl-phenyl)-3-azaspiro[5.5]undecan-8,10-dion (Hợp chất A8)



9-(2,6-dimethyl-4-prop-1-ynyl-phenyl)-3-azaspiro[5.5]undecan-8,10-dion hydroclorua được hấp thụ trong diclometan (5 mL) và xyclopropancarbonyl clorua (2,5 đương lượng, 2,30 mmol) được bổ sung sau đó là N,N-dietyletanamin (2 đương lượng, 1,84 mmol) sau đó tất cả các chất rắn ngay lập tức đi vào trong dung dịch. Sau khi khuấy tại nhiệt độ phòng trong 1,5 giờ, phần N,N-dietyletanamin khác (2 đương lượng, 1,84 mmol) và xyclopropancarbonyl clorua (2,5 đương lượng, 2,30 mmol) được bổ sung và hỗn hợp phản ứng được khuấy trong thêm 3 giờ, sau đó được pha loãng bằng 2M HCl và được chiết hai lần bằng DCM. Các chất hữu cơ được làm khô và được bay hơi để để lại gôm màu cam mà được hấp thụ sơ bộ lên trên silic dioxit và được tinh chế bằng sắc ký nhanh sử dụng gradien từ 5% EtOAc trong iHex đến 100% EtOAc để thu được [3-(xyclopropancarbonyl)-9-(2,6-dimethyl-4-prop-1-ynyl-phenyl)-10-oxo-3-

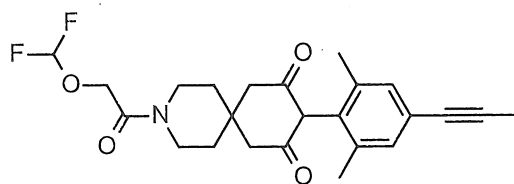
azaspiro[5.5]undec-8-en-8-yl] xyclopropanecarboxylat (Hợp chất P1) dưới dạng bột màu trắng nhờ (0,279 g, 0,607 mmol).

^1H NMR (400MHz, CDCl_3) δ = 7,12 - 6,95 (m, 2H), 3,81 - 3,52 (m, 4H), 2,79 - 2,57 (m, 4H), 2,07 - 1,98 (m, 9H), 1,90 - 1,66 (m, 5H), 1,44 - 1,37 (m, 1H), 1,01 - 0,93 (m, 2H), 0,81 - 0,67 (m, 6H)

[3-(xyclopropanecarbonyl)-9-(2,6-dimetyl-4-prop-1-ynyl-phenyl)-10-oxo-3-azaspiro[5.5]undec-8-en-8-yl] xyclopropanecarboxylat (Hợp chất P1) (0,202 g, 0,440 mmol) được hòa tan trong metanol (8 mL) và hỗn hợp này được bổ sung K_2CO_3 (2 đương lượng, 0,879 mmol). Hỗn hợp phản ứng này được khuấy tại nhiệt độ phòng trong 1 giờ 30 phút, sau đó được rót vào trong 2M HCl (sủi bọt), sau đó được chiết hai lần bằng EtOAc. Các chất hữu cơ được làm khô và được bay hơi để để lại chất rắn màu trắng, mà được hấp thụ sơ bộ lên trên silic dioxit và được tinh chế bằng sắc ký nhanh sử dụng DCM đến 20% MeOH trong DCM để thu được 3-(xyclopropanecarbonyl)-9-(2,6-dimetyl-4-prop-1-ynyl-phenyl)-3-azaspiro[5.5]undecan-8,10-dion (Hợp chất A8) dưới dạng chất rắn màu trắng (0,142 g, 0,363 mmol).

^1H NMR (400MHz, Metanol- d_4) δ = 7,06 - 6,95 (m, 2H), 3,87 - 3,74 (m, 2H), 3,69 - 3,59 (m, 2H), 2,67 - 2,58 (m, 4H), 2,02 - 1,96 (m, 10H), 1,83 - 1,74 (m, 2H), 1,70 - 1,62 (m, 2H), 0,91 - 0,75 (m, 4H).

Ví dụ 6: Tổng hợp 3-[2-(diflometoxy)axetyl]-9-(2,6-dimetyl-4-prop-1-ynyl-phenyl)-3-azaspiro[5.5]undecan-8,10-dion (Hợp chất A197)

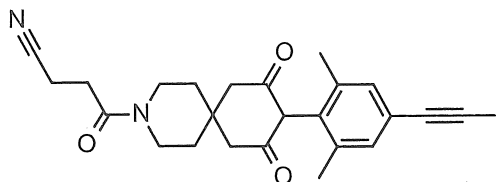


Dung dịch có khuấy của axit 2-(diflometoxy)axetic (0,7321 g) trong DCM (26,40 mL), được bổ sung 1-(3-dimetylaminopropyl)-3-etylcarbodiimide hydroclorua (1,136 g), 1-hydroxy-7-azabenzotriazol (0,807 g) và 9-(2,6-dimetyl-4-prop-1-ynyl-phenyl)-3-azaspiro[5.5]undecan-8,10-dion hydroclorua (2 g) tại 0°C . Sau đó trietylamin (2,94 mL) được bổ sung theo giọt và phản ứng này được tiếp tục khuấy để làm ấm từ từ đến nhiệt độ phòng. Sau 4 giờ, phản ứng được ngừng bằng 2M HCl, được chiết bằng diclometan (x2), được rửa bằng HCl 2M (x1) và được làm khô qua MgSO_4 . Sản phẩm

thô được nạp khô trực tiếp lên trên silica gel và được tinh chế bằng sắc ký cột (30-80% EtOAc trong diclometan) và được tán nhỏ bằng diethyl ete để thu được 3-[2-(diflometoxy)axetyl]-9-(2,6-dimetyl-4-prop-1-ynyl-phenyl)-3-azaspiro[5.5]undecan-8,10-dion dưới dạng chất rắn màu trắng (1,412 g).

^1H NMR (400MHz, Metanol- d_4) δ = 7,03 (s, 2H), 6,50 (t, J = 74,9Hz, 1H), 4,63 (s, 2H), 3,69 - 3,62 (m, 2H), 3,53 - 3,46 (m, 2H), 2,67 - 2,59 (m, 4H), 2,01 (s, 6H), 2,00 - 1,98 (m, 3H), 1,81 - 1,73 (m, 2H), 1,72 - 1,65 (m, 2H)

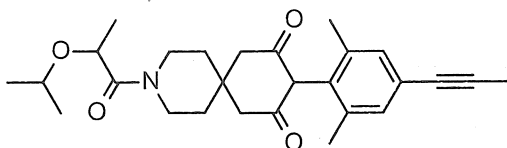
Ví dụ 7: Tổng hợp 4-[9-(2,6-dimetyl-4-prop-1-ynyl-phenyl)-8,10-dioxo-3-azaspiro[5.5]undecan-3-yl]-4-oxo-butanenitril (Hợp chất A198)



Dung dịch có khuấy của axit 3-xyanopropanoic (0,02753 g) trong DCM (1,4 mL) được bổ sung HATU (0,117 g) tại nhiệt độ phòng và hỗn hợp này được để khuấy trong 1 giờ. Sau đó 9-(2,6-dimetyl-4-prop-1-ynyl-phenyl)-3-azaspiro[5.5]undecan-8,10-dion hydroclorua (100 mg) được bổ sung sau đó là trietylamin (0,116 mL) và hỗn hợp này được để khuấy tại nhiệt độ phòng qua đêm. HCl nước loãng được bổ sung và hỗn hợp phản ứng được chiết bằng DCM. Các chất chiết hữu cơ kết hợp được làm khô và được cô trong chân không. Quá trình tinh chế qua sắc ký cột nhanh (EtOAc trong Hexan 50-100%) thu được 4-[9-(2,6-dimetyl-4-prop-1-ynyl-phenyl)-8,10-dioxo-3-azaspiro[5.5]undecan-3-yl]-4-oxo-butanenitril (72 mg) dưới dạng chất rắn màu trắng.

^1H NMR (400MHz, Metanol- d_4) δ = 7,03 (s, 2H), 3,68 - 3,63 (m, 2H), 3,58 - 3,53 (m, 2H), 2,83 - 2,78 (m, 2H), 2,70 - 2,65 (m, 2H), 2,59 (s, 4H), 2,02 (s, 6H), 1,99 (s, 3H), 1,78 - 1,73 (m, 2H), 1,70 - 1,66 (m, 2H)

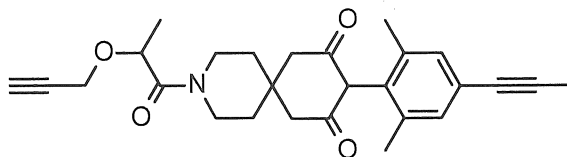
Ví dụ 8: Tổng hợp 9-(2,6-dimetyl-4-prop-1-ynyl-phenyl)-3-(2-isopropoxypropanoyl)-3-azaspiro[5.5]undecan-8,10-dion (Hợp chất A211)



9-(2,6-dimetyl-4-prop-1-ynyl-phenyl)-3-azaspiro[5.5]undecan-8,10-dion hydroclorua (206 mg) và axit 2-isopropoxypropanoic (79,4 mg) được hòa tan trong DMF (1,1 mL), được làm mát trong đá/nước và sau đó triethylamin (194 μ L) được bổ sung có khuấy, sau đó là HATU (229 mg) trong một phần. Hỗn hợp phản ứng này được khuấy mà không làm mát trong 60 phút. Phản ứng được làm ngừng bằng 2M HCl (118,4 μ l) và được tinh chế bằng sắc ký nhanh pha đảo để thu được 9-(2,6-dimetyl-4-prop-1-ynyl-phenyl)-3-(2-isopropoxypropanoyl)-3-azaspiro[5.5]undecan-8,10-dion dưới dạng chất rắn mượt màu be nhạt.

^1H NMR (400MHz, Metanol- d_4) δ = 1,35 (d, $J=6,72\text{Hz}$, 3H) 1,71 (dt, $J=18,13$, 5,73Hz, 4H) 2,00 (d, $J=8,07\text{Hz}$, 9H) 2,61 (d, $J=4,89\text{Hz}$, 4H) 3,55 - 3,76 (m, 4H) 3,86 - 3,96 (m, 1H) 3,98 - 4,08 (m, 1H) 4,41 (d, $J=6,72\text{Hz}$, 1H) 5,17 (dq, $J=10,39$, 1,39Hz, 1H) 5,29 (dq, $J=17,25$, 1,67Hz, 1H) 5,93 (dd, $J=17,24$, 10,39Hz, 1H) 7,04 (s, 2H).

Ví dụ 9: Tổng hợp 9-(2,6-dimetyl-4-prop-1-ynyl-phenyl)-3-(2-prop-2-ynoxypropanoyl)-3-azaspiro[5.5]undecan-8,10-dion (Hợp chất A215)

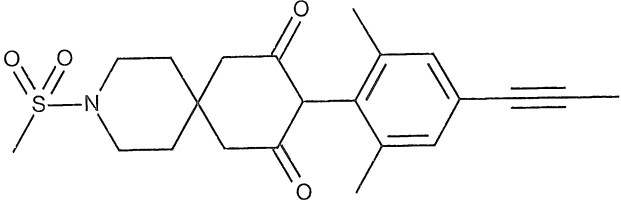
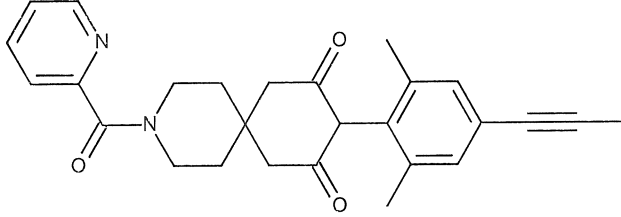


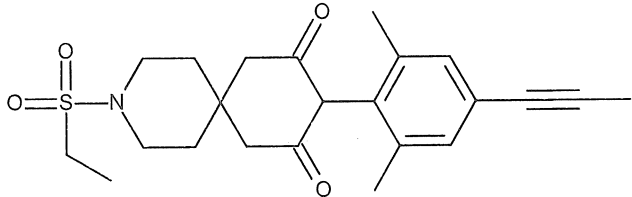
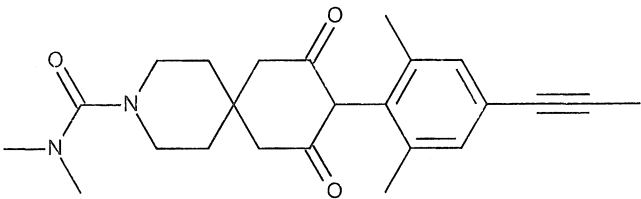
9-(2,6-dimetyl-4-prop-1-ynyl-phenyl)-3-azaspiro[5.5]undecan-8,10-dion hydroclorua (206 mg, 0,5552 mmol) và axit 2-prop-2-ynoxypropanoic (77,0 mg, 0,583 mmol) được hòa tan trong DMF (1,1 mL), được làm mát trong đá/nước và sau đó triethylamin (194 μ L) được bổ sung có khuấy, sau đó là HATU (229 mg) trong một phần. Hỗn hợp phản ứng này được khuấy mà không làm mát trong 50 phút và sau đó được làm ngừng bằng 2M HCl (118,4 μ l) và được tinh chế bằng sắc ký nhanh pha đảo để thu được 9-(2,6-dimetyl-4-prop-1-ynyl-phenyl)-3-(2-prop-2-ynoxypropanoyl)-3-azaspiro[5.5]undecan-8,10-dion là chất rắn màu be sáng mượt (105 mg)

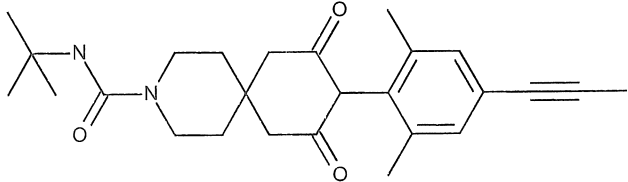
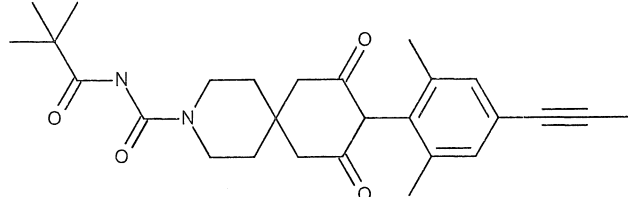
^1H NMR (400MHz, Metanol- d_4) δ = 1,35 (d, $J=6,72\text{Hz}$, 3H) 1,64 - 1,81 (m, 4H) 2,00 (d, $J=8,44\text{Hz}$, 9H) 2,62 (d, $J=9,17\text{Hz}$, 4H) 3,54 - 3,80 (m, 4H) 4,07 - 4,28 (m, 2H) 4,63 (d, $J=6,72\text{Hz}$, 1H) 7,04 (s, 2H).

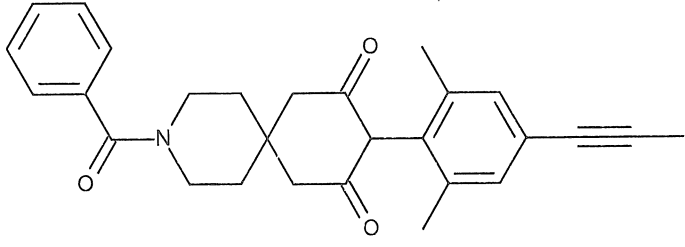
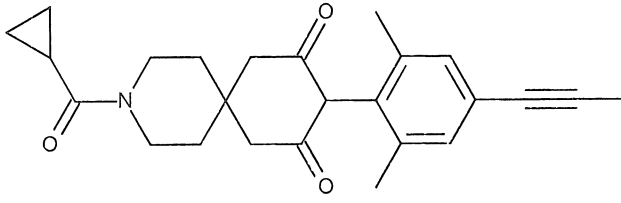
Các ví dụ về các hợp chất diệt cỏ theo sáng chế.

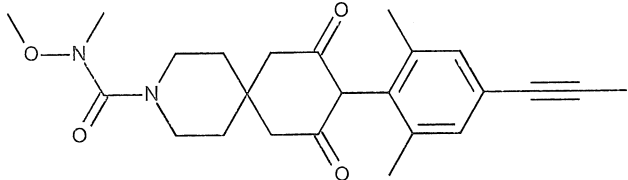
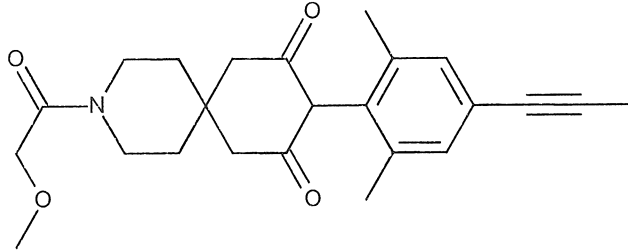
Bảng 1

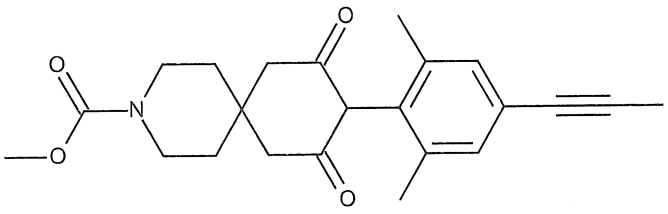
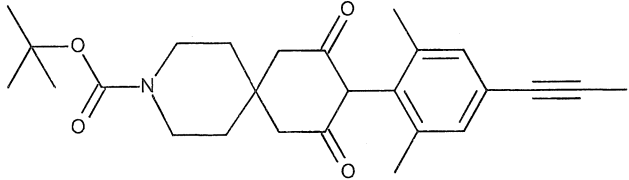
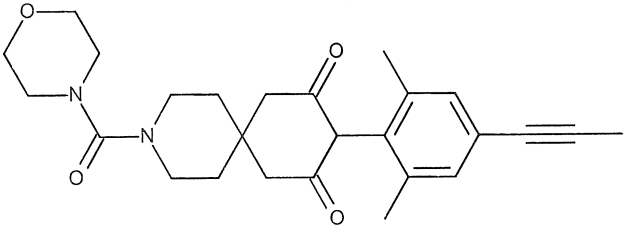
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A1		1H NMR (400 MHz, Metanol-d₄) δ = 7,03(s, 2H), 3,27(4H, được ghép với đỉnh dư MeOD), 2,85(s, 3H), 2,59(s, 4H), 2,00(s, 6H), 1,98(s, 3H), 1,80(t, J = 5,5Hz, 4H)
A2		1H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 8,59(d, J = 4,36Hz, 1H), 7,93-7,95(m, 1H), 7,58(d, J = 7,4Hz, 1H), 7,48-7,51(m, 1H), 7,02(d, J = 5,36Hz, 2H), 3,83(brs, 2H), 3,46 (brs, 2H), 2,63(s, 4H),

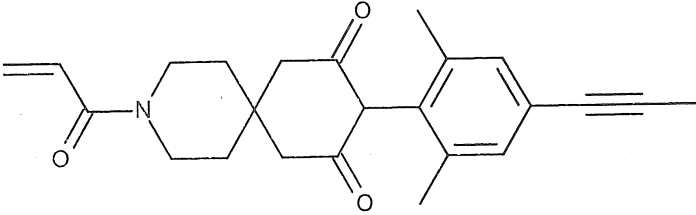
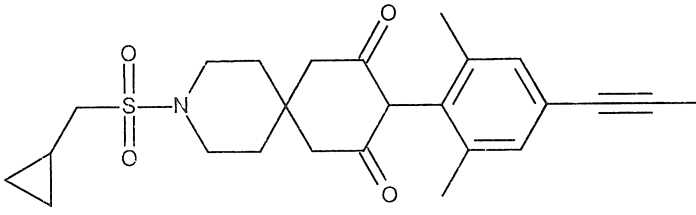
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		1,97-2,02((9H), 1,82 (brs, 2H), 1,72 (brs, 2H)
A3		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 7,06 - 6,99 (m, 2H), 3,38 - 3,32 (m, 4H), 3,12 - 3,01 (m, 2H), 2,64 - 2,48 (m, 4H), 2,03 - 1,97 (m, 9H), 1,82 - 1,70 (m, 4H), 1,37 - 1,30 (m, 3H)
A4		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 6,96(s, 2H), 3,11(brs 4H), 2,71(s, 6H), 2,40(s, 4H), 1,93-2,01(9H), 1,54(brs, 4H)

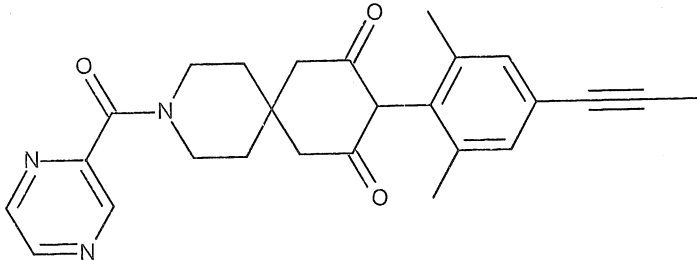
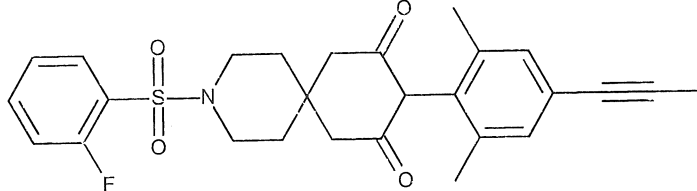
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A5		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 7,02 (s, 2H), 3,39 (t, J = 5,5Hz, 4H), 2,56 (s, 4H), 1,98-2,00 (9H), 1,65 (t, J = 5,5Hz, 4H), 1,32 (s, 9H)
A6		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 7,07 - 6,97 (m, 2H), 3,61 - 3,49 (m, 4H), 2,62 - 2,51 (m, 4H), 2,02 - 2,00 (m, 6H), 2,00 - 1,98 (m, 3H), 1,79 - 1,70 (m, 4H), 1,26 - 1,22 (m, 9H)

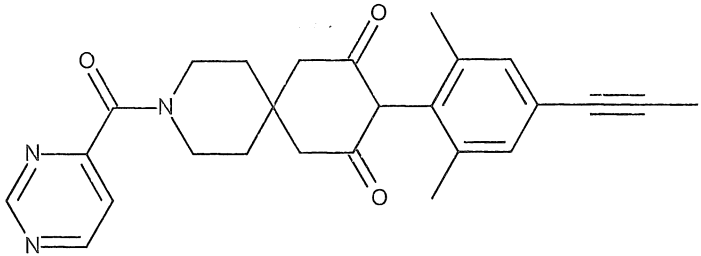
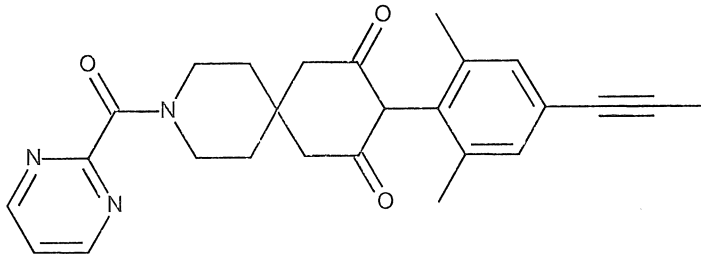
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A7		¹H NMR (400MHz, DMSO-d₆) δ = 7,49 - 7,42 (m, 3H), 7,41 - 7,33 (m, 2H), 7,04 - 6,89 (m, 2H), 3,93 - 3,84 (m, 4H), 3,52 - 3,28 (m, 4H), 2,06 - 1,97 (m, 3H), 1,96 - 1,89 (m, 6H), 1,70 - 1,49 (m, 4H)
A8		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 7,06 - 6,95 (m, 2H), 3,87 - 3,74 (m, 2H), 3,69 - 3,59 (m, 2H), 2,67 - 2,58 (m, 4H), 2,02 - 1,96 (m, 10H), 1,83 - 1,74 (m, 2H), 1,70 - 1,62 (m, 2H), 0,91 - 0,75 (m, 4H)

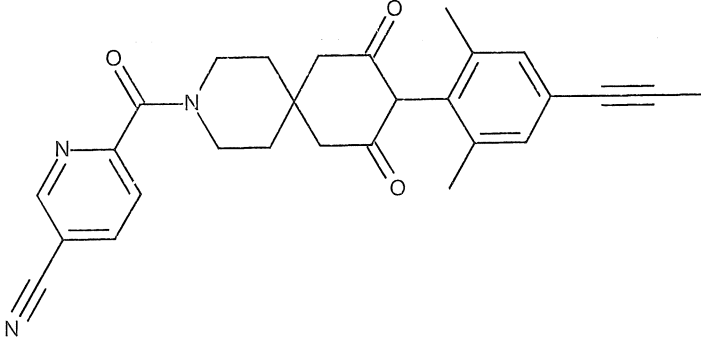
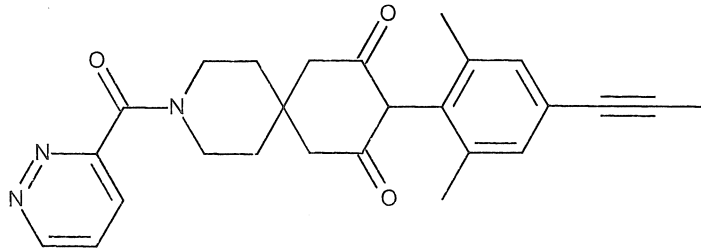
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A9		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 7,06 - 6,94 (m, 2H), 3,62 - 3,57 (m, 3H), 3,55 - 3,46 (m, 4H), 2,97 - 2,89 (m, 3H), 2,65 - 2,59 (m, 4H), 2,04 - 1,92 (m, 9H), 1,77 - 1,49 (m, 4H)
A10		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 7,03(s, 2H), 4,15(s, 2H), 3,63-3,64(ill, res, t, 2H), 3,50(t, J= 5,2Hz, 2H), 3,39(s,3H), 2,60(s, 4H), 1,98-2,00(9H), 1,73(t, J = 5,3Hz, 2H), 1,68(t, J = 5,7Hz, 2H)

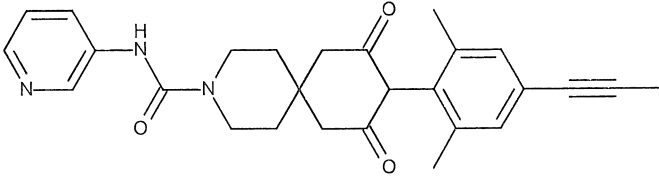
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A11		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 7,02(s, 2H), 3,68(s, 3H), 3,52(br.s, 4H), 2,58(s, 4H), 2,00(s, 9H), 1,66(brs. 4H)
A12		1H NMR (400 MHz, CD3OD) 7,07 - 6,93 (m, 2H), 3,52 - 3,45 (m, 4H), 2,62 - 2,53 (m, 4H), 2,02 - 1,98 (m, 9H), 1,70 - 1,60 (m, 4H), 1,51 - 1,42 (m, 9H).
A13		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 7,06 - 6,93 (m, 2H), 3,68 - 3,59 (m, 4H), 3,36 - 3,33 (m, 4H), 3,27 - 3,21 (m, 4H), 2,61 - 2,50

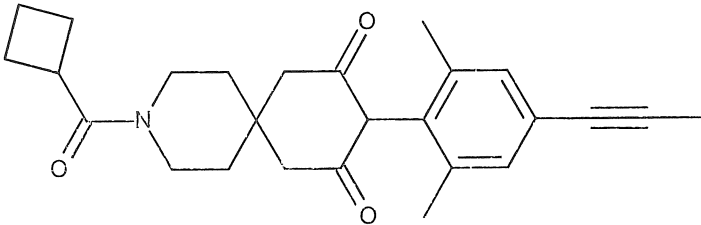
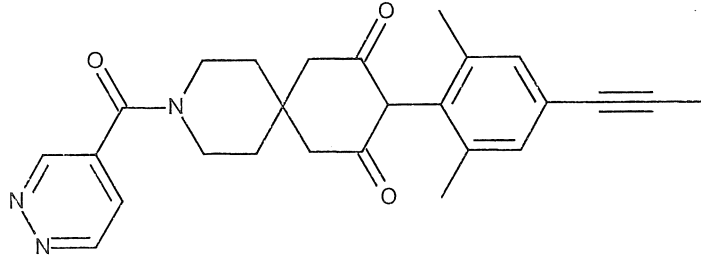
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		(m, 5H), 2,02 - 1,99 (m, 9H), 1,74 - 1,60 (m, 4H)
A14		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 7,07 - 6,98 (m, 2H), 6,83 - 6,72 (m, 1H), 6,23 - 6,13 (m, 1H), 5,79 - 5,66 (m, 1H), 3,75 - 3,62 (m, 4H), 2,67 - 2,59 (m, 4H), 2,03 - 1,98 (m, 9H), 1,77 - 1,68 (m, 4H)
A15		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 7,03 (s, 2H), 3,42 - 3,34 (m, 4H), 2,99 (d, J=7,1Hz, 2H), 2,59 (s, 4H), 2,01 (s, 6H), 1,99 (s, 3H),

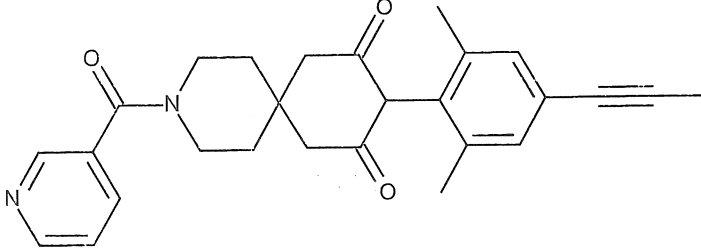
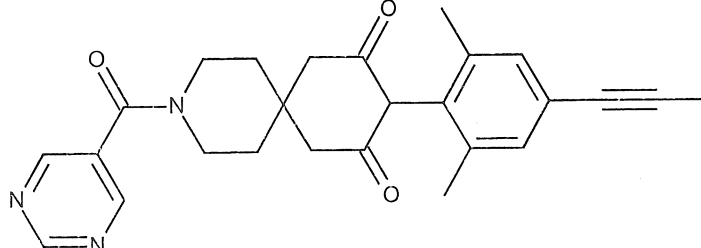
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		1,82 - 1,74 (m, 4H), 0,73 - 0,64 (m, 2H), 0,43 - 0,36 (m, 2H)
A16		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 8,86 - 8,80 (m, 1H), 8,72 - 8,68 (m, 1H), 8,66 - 8,60 (m, 1H), 7,05 - 6,99 (m, 2H), 3,88 - 3,81 (m, 2H), 3,63 - 3,53 (m, 2H), 2,72 - 2,60 (m, 4H), 2,04 - 1,94 (m, 9H), 1,86 - 1,72 (m, 4H)
A17		¹ H NMR (400MHz, Metanol) δ = 7,89 - 7,81 (m, 1H), 7,75 - 7,66 (m, 1H), 7,42 - 7,32 (m, 2H), 7,01 (s, 2H), 3,28 - 3,21 (m,

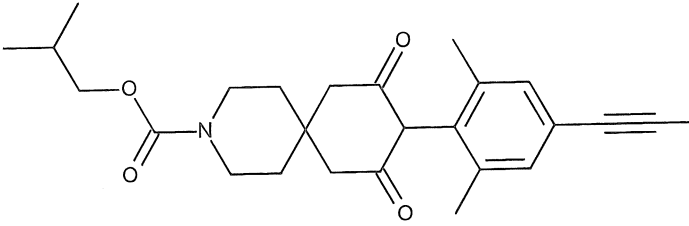
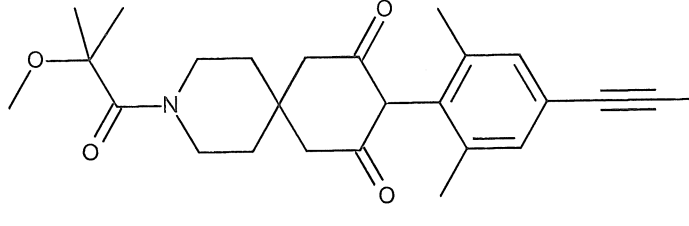
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		4H), 2,49 (s, 4H), 1,98 (s, 3H), 1,98 (s, 6H), 1,81 - 1,73 (m, 4H)
A18		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 9,25 - 9,21 (m, 1H), 8,96 - 8,88 (m, 1H), 7,71 - 7,58 (m, 1H), 7,06 - 6,86 (m, 2H), 3,87 - 3,73 (m, 2H), 3,53 - 3,41 (m, 2H), 2,71 - 2,54 (m, 4H), 2,04 - 1,96 (m, 9H), 1,85 - 1,70 (m, 4H)
A19		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 8,94 - 8,78 (m, 2H), 7,60 - 7,53 (m, 1H), 7,07 - 6,97 (m, 2H), 3,92 - 3,69 (m,

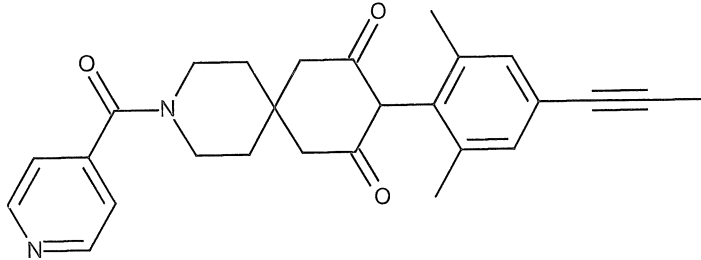
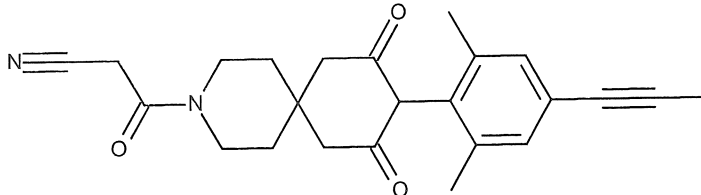
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		2H), 3,39 - 3,35 (m, 2H), 2,72 - 2,47 (m, 4H), 2,05 - 1,96 (m, 9H), 1,87 - 1,72 (m, 4H)
A20		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 8,97 - 8,89 (m, 1H), 8,35 - 8,28 (m, 1H), 7,83 - 7,69 (m, 1H), 7,07 - 6,93 (m, 2H), 3,89 - 3,73 (m, 2H), 3,55 - 3,40 (m, 2H), 2,73 - 2,59 (m, 4H), 2,06 - 1,94 (m, 9H), 1,88 - 1,69 (m, 4H)
A21		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 9,31 - 9,14 (m, 1H), 7,94 - 7,83 (m, 2H), 7,07 - 6,96 (m, 2H),

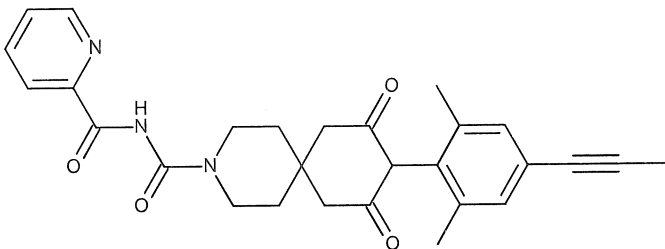
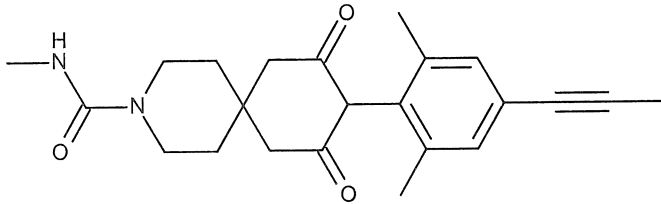
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		3,92 - 3,78 (m, 2H), 3,58 - 3,47 (m, 2H), 2,73 - 2,56 (m, 4H), 2,04 - 1,95 (m, 9H), 1,91 - 1,73 (m, 4H)
A22		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 8,58 (d, J=2,2Hz, 1H), 8,17 (dd, J=1,3, 4,8Hz, 1H), 7,91 (br ddd, J=1,5, 2,6, 8,4Hz, 1H), 7,35 (br ddd, J=0,6, 4,8, 8,4Hz, 1H), 7,04 (s, 2H), 3,68 - 3,56 (m, 4H), 2,63 (s, 4H), 2,02 (s, 6H), 1,99 (s, 3H), 1,82 - 1,70 (m, 4H)

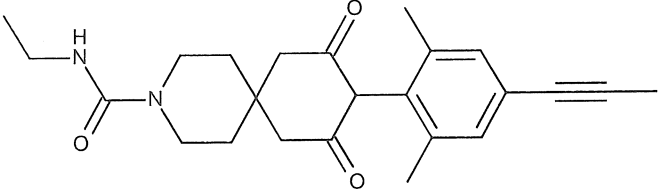
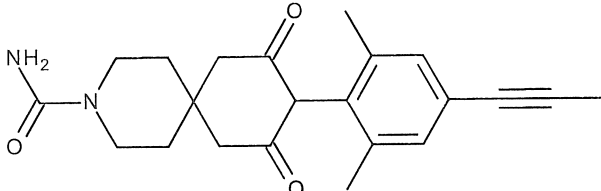
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A23		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 7,06 - 6,99 (m, 2H), 3,64 - 3,56 (m, 2H), 3,49 - 3,42 (m, 3H), 2,63 - 2,56 (m, 4H), 2,33 - 2,17 (m, 4H), 2,04 - 1,94 (m, 9H), 1,74 - 1,55 (m, 4H)
A24		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 9,35 - 9,29 (m, 1H), 9,29 - 9,19 (m, 1H), 7,79 - 7,65 (m, 1H), 7,07 - 6,98 (m, 2H), 3,88 - 3,79 (m, 2H), 3,50 - 3,40 (m, 2H), 2,74 - 2,56 (m, 4H), 2,04 - 2,02 (m, 3H), 2,00 - 1,94 (m, 6H), 1,86 - 1,80 (m,

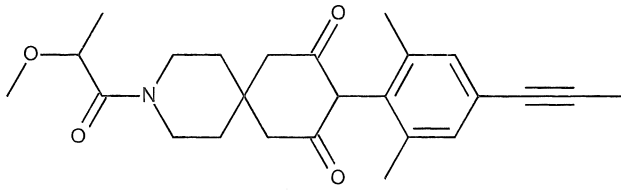
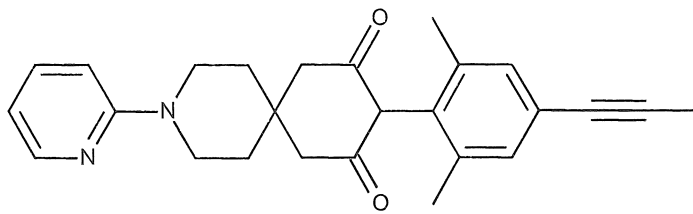
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		2H), 1,76 - 1,66 (m, 2H)
A25		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 8,75 - 8,57 (m, 2H), 8,11 - 8,02 (m, 1H), 7,69 - 7,59 (m, 1H), 7,07 - 6,97 (m, 2H), 3,90 - 3,75 (m, 2H), 3,54 - 3,39 (m, 2H), 2,71 - 2,52 (m, 4H), 2,05 - 1,96 (m, 9H), 1,87 - 1,68 (m, 4H)
A26		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 9,25 - 9,20 (m, 1H), 8,95 - 8,84 (m, 2H), 7,07 - 6,94 (m, 2H), 3,92 - 3,79 (m, 2H), 3,60 - 3,47 (m, 2H), 2,69 - 2,58 (m, 4H),

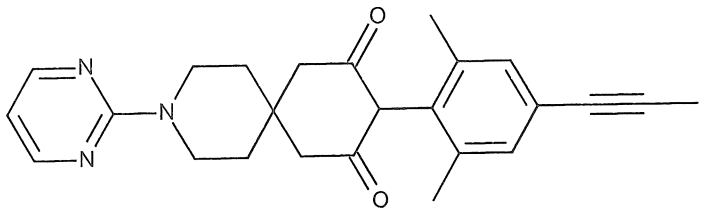
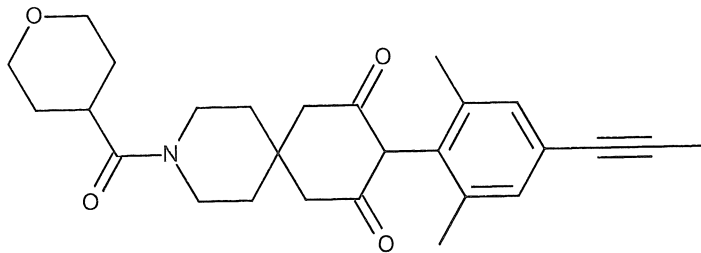
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		2,07 - 1,95 (m, 9H), 1,87 - 1,69 (m, 4H)
A27		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = δ ppm 0,95 (d, J=6,72Hz, 6H) 1,62 - 1,73 (m, 4H) 1,87 - 1,98 (m, 1H) 1,98 - 2,00 (m, 3H) 2,00 - 2,02 (m, 7 H) 2,58 (s, 4H) 3,53 (br s, 4H) 3,85 (d, J=6,60Hz, 2H) 7,03 (s, 2H)
A28		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 1,41 (s, 6H) 1,72 (br s, 4H) 1,99 (s, 3H) 2,01 (s, 6H) 2,61 (s, 4H) 3,24 (s, 3H) 3,59 - 3,74 (m, 2H)

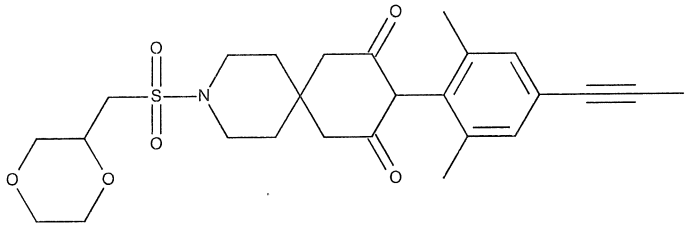
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		4,01 - 4,10 (m, 2H) 7,04 (s, 2H)
A29		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 8,71 - 8,58 (m, 2H), 7,50 - 7,37 (m, 2H), 7,05 - 6,98 (m, 2H), 3,85 - 3,79 (m, 2H), 3,47 - 3,39 (m, 2H), 2,71 - 2,57 (m, 4H), 2,05 - 2,00 (m, 3H), 2,00 - 1,94 (m, 6H), 1,86 - 1,67 (m, 4H)
A30		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 7,10 - 6,97 (m, 2H), 3,92 - 3,86 (m, 2H), 3,69 - 3,61 (m, 2H), 3,53 - 3,46 (m, 2H), 2,65 - 2,56 (m, 4H), 2,02 -

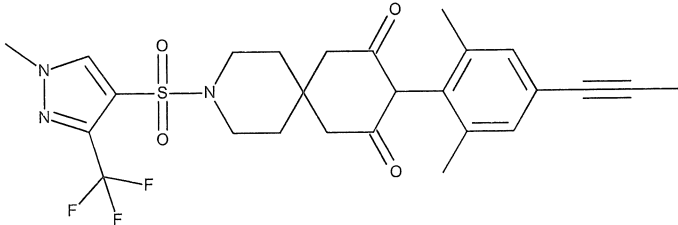
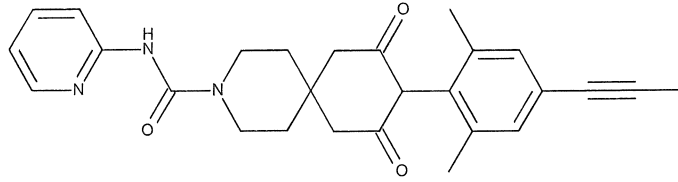
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		2,00 (m, 6H), 2,00 - 1,98 (m, 3H), 1,81 - 1,74 (m, 2H), 1,73 - 1,67 (m, 2H)
A31		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 8,71 - 8,65 (m, 1H), 8,19 (td, J=1,0, 7,9Hz, 1H), 8,02 (br dt, J=1,7, 7,7Hz, 1H), 7,63 (ddd, J=1,2, 4,8, 7,6Hz, 1H), 7,04 (s, 2H), 3,72 - 3,60 (m, 4H), 2,64 (s, 4H), 2,02 (s, 6H), 1,99 (s, 3H), 1,85 - 1,76 (m, 4H)
A32		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 7,03 (s, 2H), 3,48 - 3,38 (m,

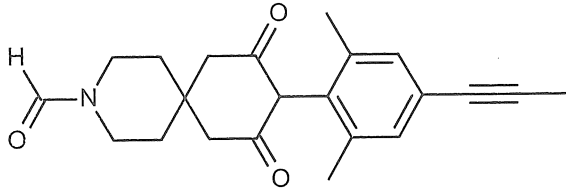
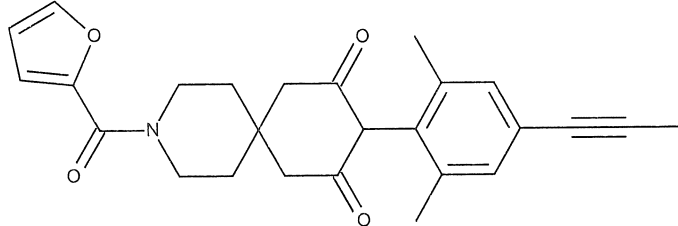
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		4H), 2,72 (s, 3H), 2,58 (s, 4H), 2,01 (s, 6H), 1,99 (s, 3H), 1,72 - 1,61 (m, 4H)
A33		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 7,08 - 6,98 (m, 2H), 3,47 - 3,40 (m, 4H), 3,18 (q, J=7,1Hz, 2H), 2,58 (s, 4H), 2,01 (s, 6H), 1,99 (s, 3H), 1,70 - 1,64 (m, 4H), 1,11 (t, J=7,2Hz, 3H)
A34		¹ H NMR (400 MHz, DMSO-d ₆) δ = 1,51 (br s, 4H) 1,86 - 1,98 (m, 6H) 1,98 - 2,08 (m, 3H) 3,34 (br s, 12H) 5,91 (br s, 2H) 7,01 (s, 2H)

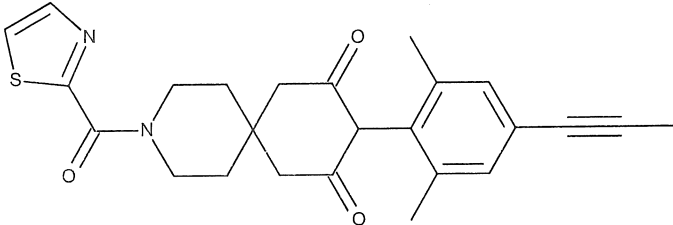
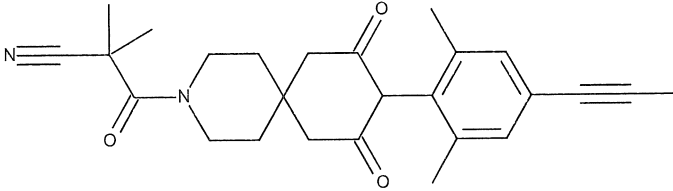
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		10,34 - 10,65 (m, 1H)
A35		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 1,32 (d, J=6,72Hz, 3H) 1,63 - 1,82 (m, 4H) 1,99 (s, 3H) 2,01 (s, 6H) 2,62 (d, J=4,65Hz, 4H) 3,55 - 3,82 (m, 4H) 4,28 (d, J=6,72Hz, 1H) 7,04 (s, 2H)
A36		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 8,08 - 8,03 (m, 1H), 7,60 - 7,53 (m, 1H), 7,05 - 7,01 (m, 2H), 6,90 - 6,84 (m, 1H), 6,69 - 6,63 (m, 1H), 3,63 - 3,53 (m, 4H), 2,64 - 2,57 (m, 4H), 2,03 (s,

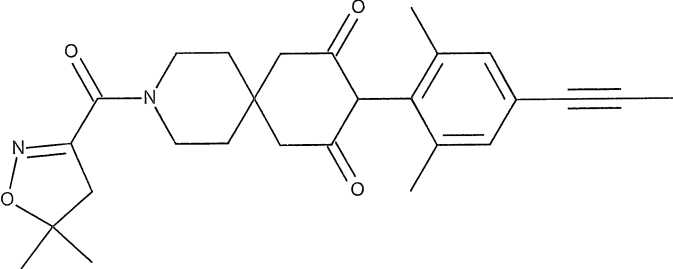
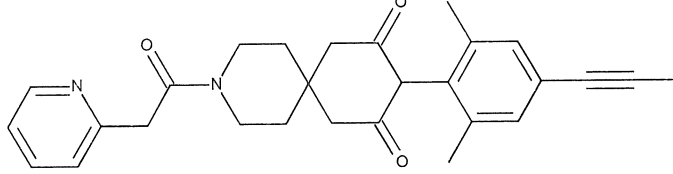
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		6H), 1,99 (s, 3H), 1,83 - 1,75 (m, 4H)
A37		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 8,32 - 8,30 (m, 2H), 7,06 - 7,00 (m, 2H), 6,59 - 6,54 (m, 1H), 3,98 - 3,80 (m, 4H), 2,65 - 2,55 (m, 4H), 2,04 - 2,01 (m, 6H), 2,00 - 1,98 (m, 3H), 1,78 - 1,71 (m, 4H)
A38		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 1,54 - 1,69 (m, 4H) 1,69 - 1,87 (m, 4H) 1,98 - 2,00 (m, 3H) 2,00 - 2,03 (m, 6H) 2,60 (s, 4H) 2,88 - 3,02 (m,

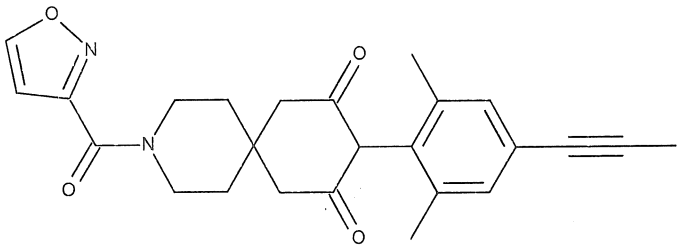
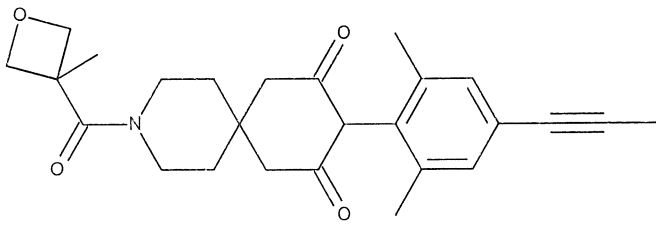
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		1H) 3,49 (td, J=11,80, 1,96Hz, 2H) 3,58 - 3,69 (m, 4H) 3,90 - 4,00 (m, 2H) 7,04 (s, 2H)
A39		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 7,03 (s, 2H), 4,06 - 3,96 (m, 1H), 3,90 - 3,82 (m, 1H), 3,82 - 3,76 (m, 1H), 3,76 - 3,67 (m, 2H), 3,64 - 3,56 (m, 1H), 3,40 - 3,32 (m, 5H), 3,25 - 3,18 (m, 1H), 3,12 - 3,05 (m, 1H), 2,58 (s, 4H), 2,03 - 1,96 (m, 9H), 1,81 - 1,74 (m, 4H)

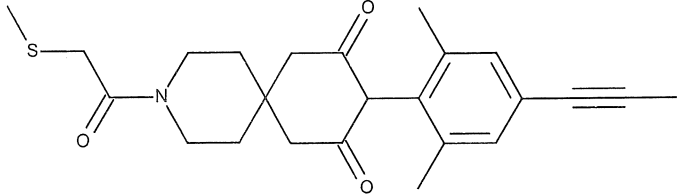
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A40		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 8,31 (s, 1H), 7,02 (s, 2H), 3,99 (s, 3H), 3,23 - 3,13 (m, 4H), 2,51 (s, 4H), 1,99 (s, 9H), 1,85 - 1,76 (m, 4H)
A41		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 8,33 - 8,22 (m, 2H), 7,60 - 7,49 (m, 1H), 7,45 - 7,37 (m, 1H), 7,03 (s, 2H), 3,79 - 3,61 (m, 4H), 2,65 (s, 4H), 2,02 (s, 6H), 2,00 (s, 3H), 1,85 - 1,73 (m, 4H)

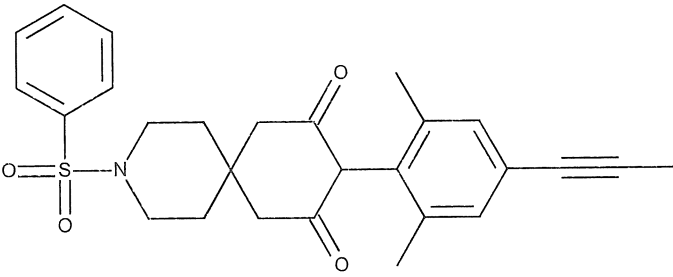
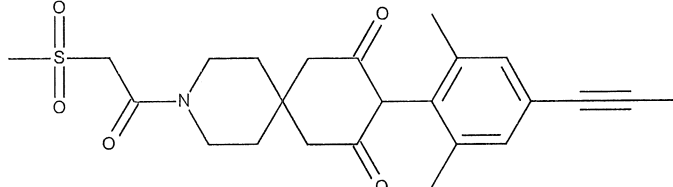
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A42		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 1,64 - 1,82 (m, 4H) 2,00 - 2,03 (m, 3H) 2,03 - 2,06 (m, 6H) 2,64 (s, 4H) 3,47 - 3,63 (m, 4H) 7,06 (s, 2H) 8,04 (s, 1H)
A43		¹H NMR (400MHz, Axetonitril-d₃) δ = 7,64 - 7,62 (m, 1H), 7,09 - 7,05 (m, 2H), 6,96 - 6,92 (m, 1H), 6,58 - 6,54 (m, 1H), 3,86 - 3,69 (m, 4H), 2,67 - 2,48 (m, 4H), 2,01 - 2,01 (m, 6H), 1,99 - 1,98 (m, 3H), 1,77 - 1,70 (m, 4H)

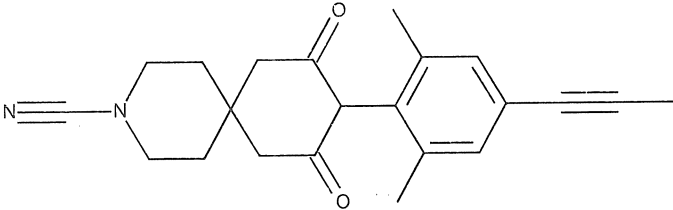
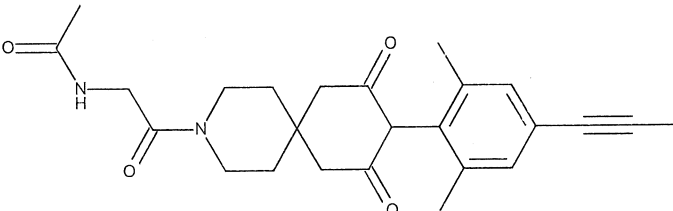
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A44		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 7,97 - 7,94 (m, 1H), 7,83 - 7,80 (m, 1H), 7,06 - 7,01 (m, 2H), 4,41 - 4,31 (m, 2H), 3,88 - 3,78 (m, 2H), 2,68 - 2,62 (s, 4H), 2,16 - 2,15 (m, 6H), 1,99 (s, 3H), 1,84 - 1,78 (m, 4H)
A45		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 1,59 (s, 6H) 1,77 (br d, J=6,85Hz, 4H) 1,98 - 2,01 (m, 3H) 2,02 (s, 6H) 2,64 (s, 4H) 3,54 - 4,00 (m, 4H) 7,04 (s, 2H)

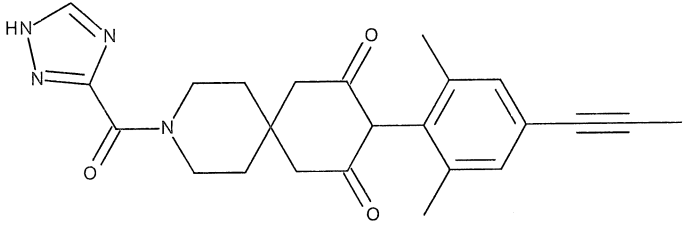
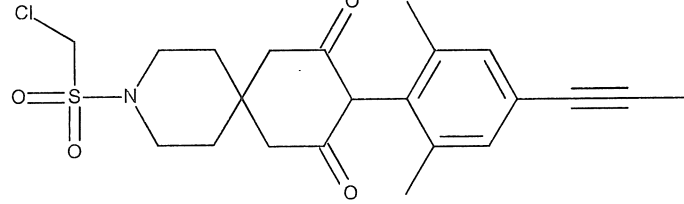
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A46		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 7,06 - 6,92 (m, 2H), 3,86 - 3,78 (m, 2H), 3,77 - 3,69 (m, 2H), 3,09 - 3,00 (m, 2H), 2,65 - 2,61 (m, 4H), 2,04 - 1,98 (m, 9H), 1,80 - 1,72 (m, 4H), 1,44 - 1,39 (m, 6H)
A47		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 8,56 - 8,50 (m, 1H), 7,98 - 7,85 (m, 1H), 7,49 - 7,45 (m, 1H), 7,46 - 7,37 (m, 1H), 7,08 - 6,95 (m, 2H), 4,06 - 4,00 (m, 2H), 3,71 - 3,60 (m, 4H), 2,65 - 2,55 (m, 4H), 2,03 - 1,96 (m, 9H),

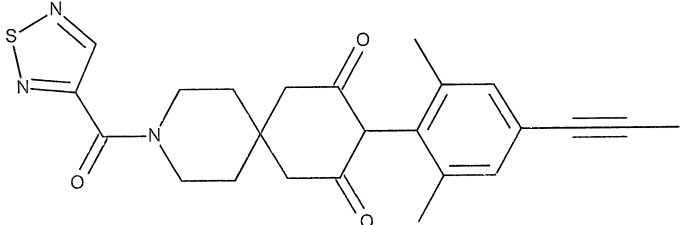
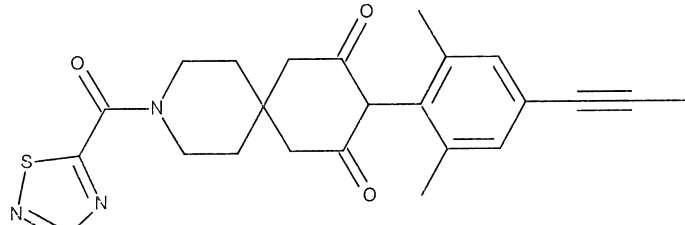
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		1,72 - 1,63 (m, 4H)
A48		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 8,82 - 8,77 (m, 1H), 7,07 - 6,99 (m, 2H), 6,75 - 6,67 (m, 1H), 3,88 - 3,79 (m, 2H), 3,78 - 3,69 (m, 2H), 2,69 - 2,56 (m, 4H), 2,04 - 2,01 (m, 3H), 2,01 - 2,00 (m, 3H), 1,99 - 1,98 (m, 3H), 1,85 - 1,73 (m, 4H)
A49		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 7,08 - 6,99 (m, 2H), 4,97 - 4,92 (m, 2H), 4,40 - 4,26 (m, 2H), 3,69 - 3,59 (m, 2H), 3,16 - 3,08 (m, 2H)

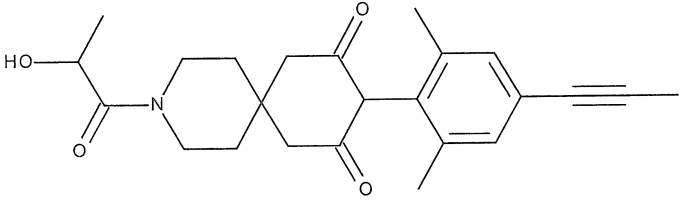
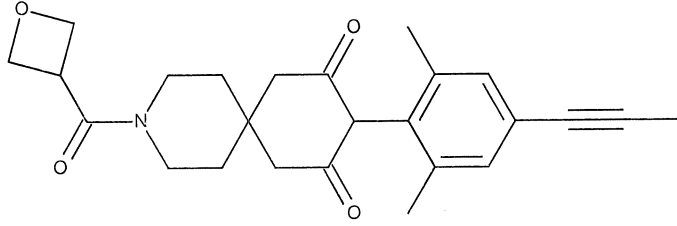
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		(m, 2H), 2,68 - 2,53 (m, 4H), 2,02 - 2,00 (m, 6H), 2,00 - 1,98 (m, 3H), 1,76 - 1,67 (m, 4H), 1,67 - 1,63 (m, 3H)
A50		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 7,06 - 7,02 (m, 2H), 3,67 - 3,58 (m, 4H), 3,42 - 3,37 (m, 2H), 2,64 - 2,57 (m, 4H), 2,18 - 2,15 (m, 3H), 2,04 - 2,00 (m, 6H), 2,00 - 1,98 (m, 3H), 1,83 - 1,76 (m, 2H), 1,71 - 1,64 (m, 2H)

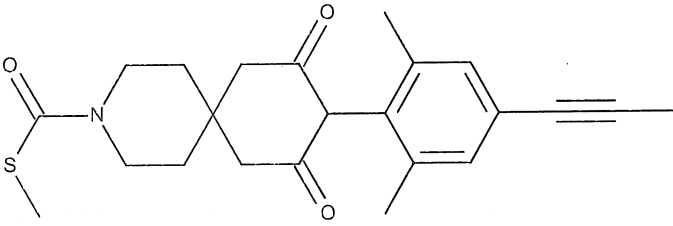
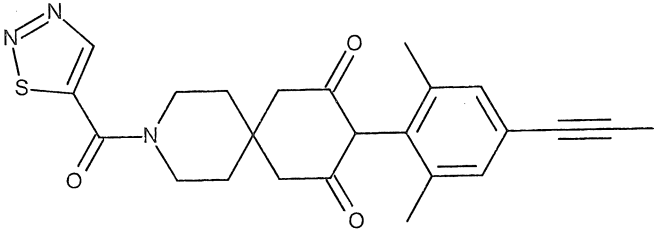
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A51		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 7,93 - 7,78 (m, 2H), 7,72 - 7,59 (m, 3H), 7,03 - 6,99 (m, 2H), 3,12 - 3,03 (m, 4H), 2,45 - 2,40 (m, 4H), 1,99 - 1,97 (m, 3H), 1,96 (s, 6H), 1,81 - 1,74 (m, 4H)
A52		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 7,07 - 7,00 (m, 2H), 4,44 - 4,36 (m, 2H), 3,72 - 3,64 (m, 4H), 3,16 - 3,09 (m, 3H), 2,65 - 2,58 (m, 4H), 2,03 - 2,00 (m, 6H), 2,00 - 1,97 (m, 3H), 1,85 - 1,76

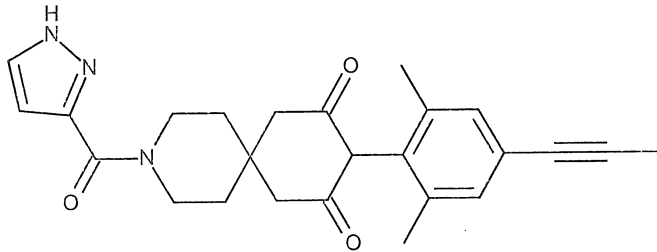
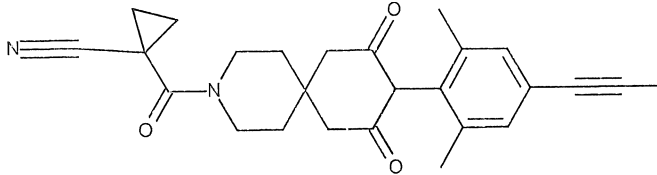
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		(m, 2H), 1,76 - 1,67 (m, 2H)
A53		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 1,76 - 1,82 (m, 4H) 1,98 - 2,01 (m, 9H) 2,59 (s, 4H) 3,31 - 3,35 (m, 5 H) 7,03 (s, 2H)
A54		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 1,64 - 1,72 (m, 2H) 1,73 - 1,80 (m, 2H) 1,99 (s, 3H) 2,01 (s, 9H) 2,61 (s, 4H) 3,50 - 3,57 (m, 2H) 3,60 - 3,69 (m, 2H) 3,86 - 3,96 (m, 1H) 4,05 - 4,09 (m, 2H) 7,03 (s, 2H)

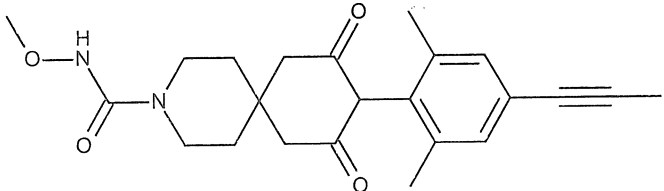
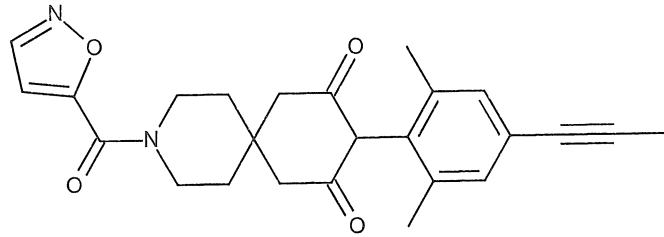
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A55		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 8,51 - 8,41 (m, 1H), 7,06 - 6,97 (m, 2H), 3,94 - 3,78 (m, 4H), 2,69 - 2,58 (m, 4H), 2,05 - 1,96 (m, 9H), 1,84 - 1,73 (m, 4H)
A56		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 7,07 - 6,99 (m, 2H), 4,83 - 4,81 (m, 2H), 3,57 - 3,43 (m, 4H), 3,05 - 2,98 (m, 1H), 2,71 - 2,65 (m, 1H), 2,63 - 2,52 (m, 2H), 2,01 - 1,95 (m, 8H), 1,83 - 1,73 (m, 4H)

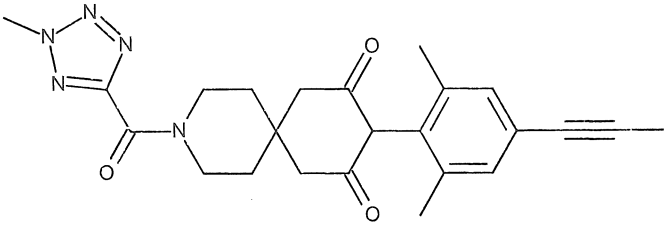
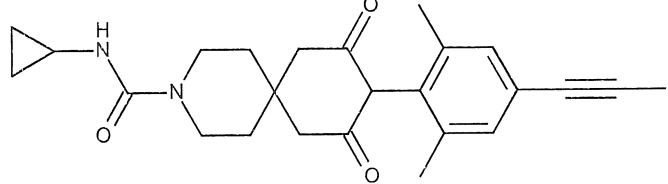
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A57		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 8,99 - 8,88 (m, 1H), 7,06 - 6,96 (s, 2H), 3,87 - 3,74 (m, 4H), 2,70 - 2,60 (s, 4H), 2,04 - 2,02 (s, 3H), 2,00 - 2,00 (s, 3H), 1,99 - 1,99 (s, 3H), 1,86 - 1,76 (m, 4H)
A58		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 8,92 - 8,70 (m, 1H), 7,08 - 6,95 (m, 2H), 4,26 - 4,19 (m, 2H), 3,90 - 3,75 (m, 2H), 2,71 - 2,58 (m, 4H), 2,02 - 1,97 (m, 9H), 1,88 - 1,78 (m, 4H)

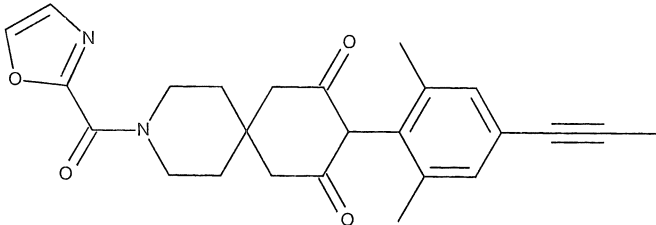
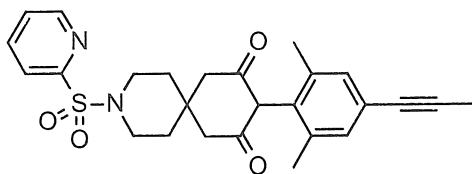
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A59		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 1,31 (d, J=6,60Hz, 3H) 1,63 - 1,82 (m, 4H) 1,98 - 2,00 (m, 3H) 2,00 - 2,03 (m, 6H) 2,61 (d, J=10,39Hz, 4H) 3,61 (br dd, J=11,74, 6,11Hz, 4H) 4,58 (q, J=6,60Hz, 1H) 7,03 (s, 2H)
A60		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 7,05 - 7,00 (m, 2H) 4,84 - 4,81 (m, 4H) 4,22 - 4,16 (m, 1H) 3,76 - 3,69 (m, 2H) 3,68 - 3,63 (m, 2H) 2,62 - 2,55 (m, 4H) 2,02 - 2,00 (m,

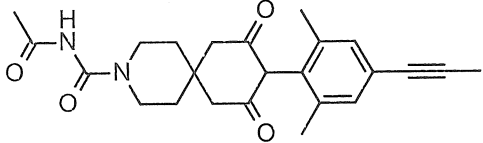
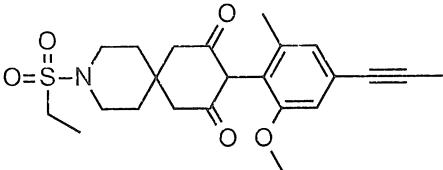
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		6H), 2,00 - 1,97 (m, 3H), 1,72 - 1,65 (m, 4H)
A61		¹ H NMR (400MHz, CDCl ₃) δ = 7,16 (s, 2H), 3,79 - 3,47 (m, 4H), 2,57 (br s, 4H), 2,35 (s, 3H), 2,07 - 2,02 (m, 9H), 1,76 - 1,65 (m, 4H)
A62		¹ H NMR (400 MHz, DMSO-d ₆) δ ppm 1,71 (br t, J=5,44Hz, 4H) 1,91 - 1,98 (m, 1H) 1,95 (d, J=7,09Hz, 5 H) 2,02 (s, 3H) 2,57 (br s, 4H) 3,67 - 3,79 (m, 2H) 3,97 (br s, 2H) 7,01 (s, 2H) 9,78 (s, 1H)

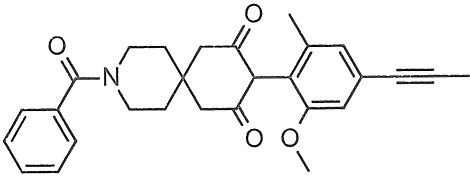
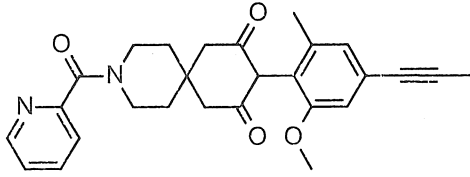
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A63		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ ppm 1,68 - 1,83 (m, 4H) 1,97 - 2,05 (m, 9H) 3,73 - 3,98 (m, 4H) 6,61 (d, J=2,32Hz, 1H) 7,03 (s, 2H) 7,69 (d, J=2,08Hz, 1H)
A64		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 8,99 - 8,88 (m, 1H), 7,06 - 6,96 (s, 2H), 3,87 - 3,74 (m, 4H), 2,70 - 2,60 (s, 4H), 2,04 - 2,02 (s, 3H), 2,00 - 2,00 (s, 3H), 1,99 - 1,99 (s, 3H), 1,86 - 1,76 (m, 4H)

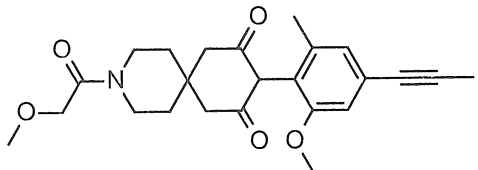
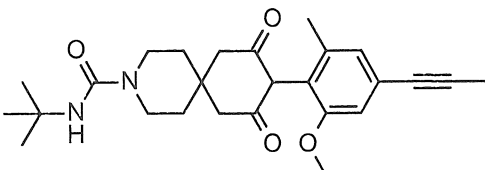
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A65		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 7,03 (s, 2H), 3,63 (s, 3H), 3,45 - 3,37 (m, 4H), 2,58 (s, 4H), 2,04 - 1,96 (m, 9H), 1,73 - 1,62 (m, 4H)
A66		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 8,53 - 8,46 (m, 1H), 7,09 - 6,95 (m, 2H), 6,86 - 6,74 (m, 1H), 3,86 - 3,78 (m, 2H), 3,72 - 3,57 (m, 2H), 2,67 - 2,59 (m, 4H), 2,03 - 1,98 (m, 9H), 1,86 - 1,71 (m, 4H)

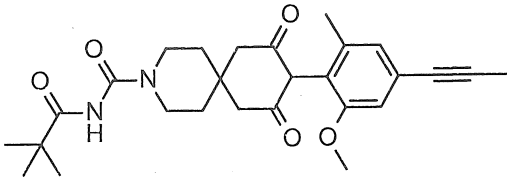
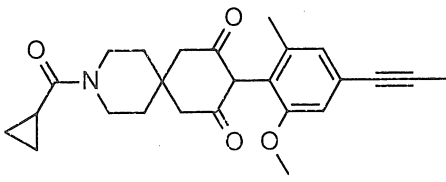
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A67		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 7,10 - 6,95 (m, 2H), 4,43 (s, 3H), 3,90 - 3,83 (m, 2H), 3,81 - 3,73 (m, 2H), 2,65 (d, J=1,3Hz, 4H), 2,01 - 1,96 (m, 9H), 1,86 - 1,73 (m, 4H)
A68		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 7,04 - 6,98 (m, 2H), 3,46 - 3,36 (m, 4H), 2,61 - 2,55 (m, 3H), 2,57 - 2,49 (m, 1H), 2,03 - 1,92 (m, 9H), 1,71 - 1,60 (m, 4H), 0,71 - 0,60 (m, 2H), 0,50 - 0,34 (m, 2H)

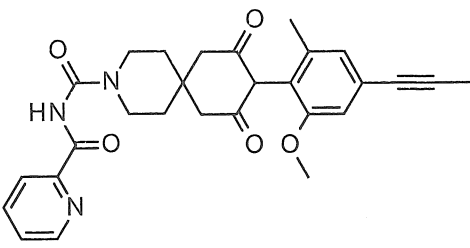
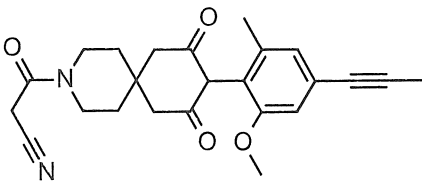
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A69		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 8,07 - 8,04 (m, 1H), 7,38 - 7,34 (m, 1H), 7,06 - 7,01 (m, 2H), 4,11 - 4,05 (m, 2H), 3,85 - 3,78 (m, 2H), 2,66 - 2,61 (m, 4H), 2,04 - 2,00 (m, 6H), 2,00 - 1,96 (m, 3H), 1,84 - 1,77 (m, 4H)
A70		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 8,77 - 8,70 (m, 1H), 8,12 - 8,04 (m, 1H), 8,00 - 7,95 (m, 1H), 7,69 - 7,62 (m, 1H), 7,04 - 6,96 (m, 2H), 3,40 - 3,34 (m, 4H), 2,53 - 2,43 (m, 4H), 1,99 - 1,98 (m, 3H), 1,98 (s,

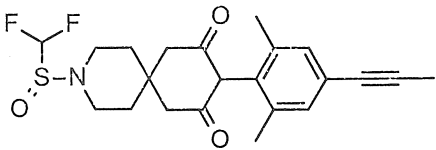
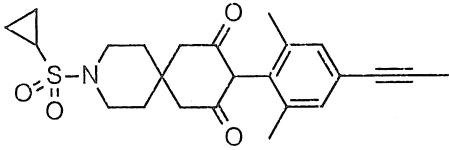
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		6H), 1,80 - 1,70 (m, 4H)
A71		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 1,68 - 1,78 (m, 4H) 1,96 - 2,04 (m, 9H) 2,15 (s, 3H) 2,60 (s, 4H) 3,30 (dt, J=3,27, 1,60Hz, 2H) 3,49 - 3,58 (m, 4H) 7,03 (s, 2H)
A72		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 6,83 (s, 1H), 6,74 (s, 1H), 3,65 (s, 3H), 3,34-3,29 (m, 4H), 3,07-3,02 (q, 2H), 2,51 (m, 4H), 2,00-1,99 (m, 6H), 1,81 (t, 2H), 1,73 (t, 2H), 1,32 (t, 3H).

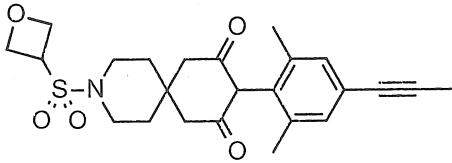
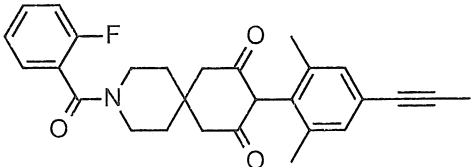
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A73		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 7,47-7,41 (m, 5H), 6,83 (s, 1H), 6,75 (s, 1H), 3,79-3,47 (7H), 2,59 (s, 4H), 1,99 (s, 6H), 1,83-1,64 (m, 4H)
A74		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = (8,59 (d, 1H), 7,94 (d, 1H), 7,58 (d, 1H), 7,50 (d, 1H), 6,82 (d, 1H), 6,73 (d, 1H), 3,82 (t, 2H), 3,67-3,60 (3H), 3,44 (t, 2H), 2,55 (s, 4H), 2,02-1,99 (6H), 1,86-1,68 (m, 4H),

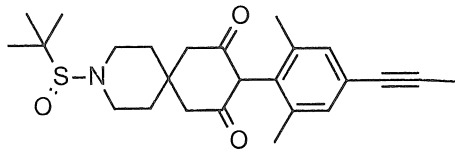
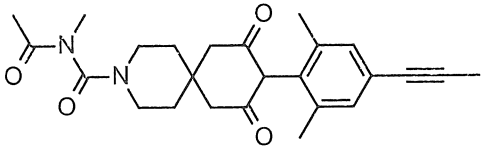
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A75		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 6,84 (s, 1H), 6,76 (s, 1H), 4,16 (d, 2H), 3,66 (s, 3H), 3,62 (t, 2H), 3,49 (t, 2H), 3,39 (s, 3H), 2,56 (s, 4H), 2,01-1,99 (6H), 1,77-1,63 (m, 4H).
A76		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 6,84 (s, 1H), 6,76(s, 1H), 3,66 (s, 3H), 3,43-3,38 (m, 4H), 2,53 (m, 4H), 1,99 (s, 6H), 1,69 (t, 2H), 1,62 (t, 2H), 1,32(s, 9H)

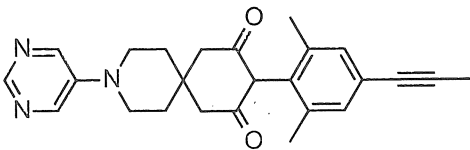
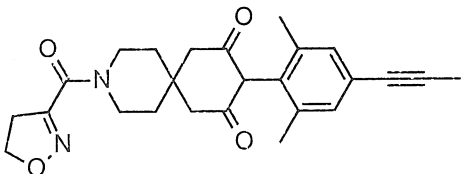
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A77		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 6,84 (s, 1H), 6,76(s, 1H), 3,66 (s, 3H), 3,52 (m, 4H), 2,57 (m, 4H), 2,00 (s, 6H), 1,77 (t, 2H), 1,71 (t, 2H), 1,22 (s, 9H)
A78		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 6,84 (s, 1H), 6,76 (s, 1H), 3,79 (t, 2H), 3,66 (s, 3H), 3,63 (t, 2H), 2,57 (s, 4H), 2,01-1,98 (7H), 1,81-1,63 (m, 4H), 0,86-0,79 (m, 4H).

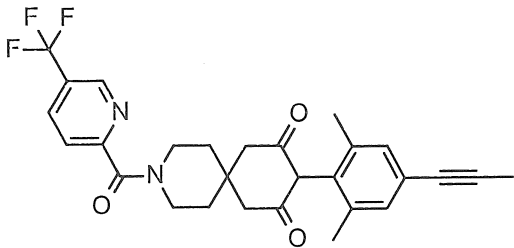
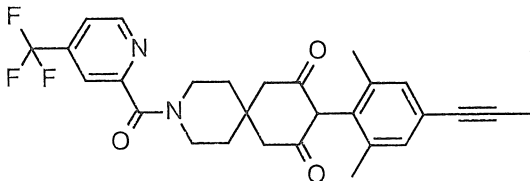
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A79		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 8,68-8,67 (d, 1H), 8,20-8,18(d, 1H), 8,04-7,99 (m, 1H), 7,64-7,61(m, 1H), 6,84(s, 1H), 6,76(s, 1H), 3,66-3,64 (6H), 2,59 (m, 4H), 2,14 (1H), 2,01-1,99 (6H), 1,83 (t, 2H), 1,77 (t, 2H)
A80		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 6,84 (s, 1H), 6,76 (s, 1H), 3,89-3,88 (2H), 3,66 (s, 3H), 3,64 (t, 2H), 3,48 (t, 2H), 2,56 (s, 4H),

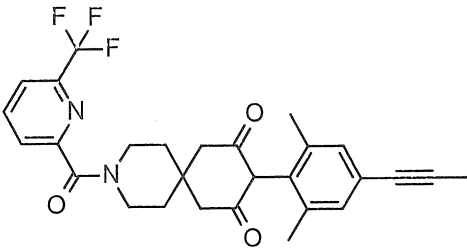
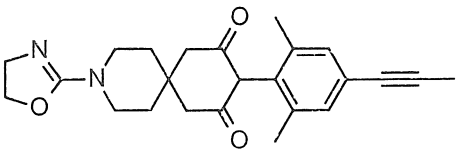
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		2,01-1,99 (6H), 1,73 (m, 4H)
A81		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 7,06 - 6,91 (m, 2H), 6,63 - 6,30 (m, 1H), 3,44 - 3,37 (m, 4H), 2,64 - 2,46 (m, 4H), 2,01 - 1,95 (m, 9H), 1,84 - 1,75 (m, 4H)
A82		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 0,96 - 1,04 (m, 2H) 1,14 - 1,21 (m, 2H) 1,80 (br t, J=5,56Hz, 4H) 2,04 (s, 9H) 2,22 - 2,31 (m, 1H) 2,55 (s, 4H) 3,36 (br s, 4H) 7,15 (s, 2H).

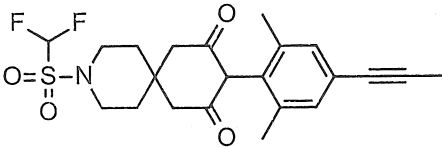
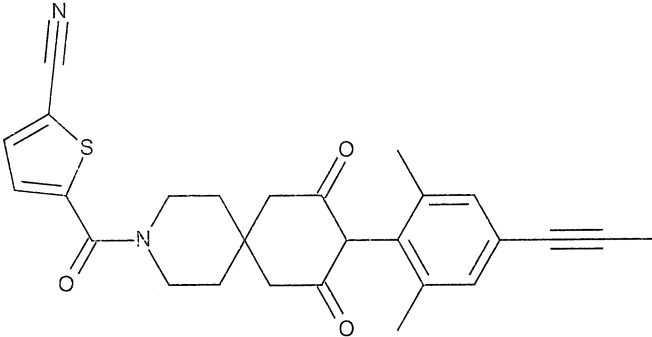
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A83		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 7,05 - 7,02 (m, 2H), 4,93 - 4,89 (m, 2H), 4,86 - 4,82 (m, 2H), 4,70 - 4,62 (m, 1H), 3,36 - 3,31 (m, 4H), 2,61 - 2,55 (m, 4H), 2,01 - 2,00 (m, 6H), 1,99 - 1,98 (m, 3H), 1,78 - 1,72 (m, 4H)
A84		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 7,54 - 7,47 (m, 1H), 7,42 - 7,36 (m, 1H), 7,34 - 7,27 (m, 1H), 7,25 - 7,16 (m, 1H), 7,05 - 6,97 (m, 2H), 3,89 - 3,78 (m, 2H), 3,44 - 3,36 (m, 2H), 2,68 - 2,54 (m, 4H), 2,03 -

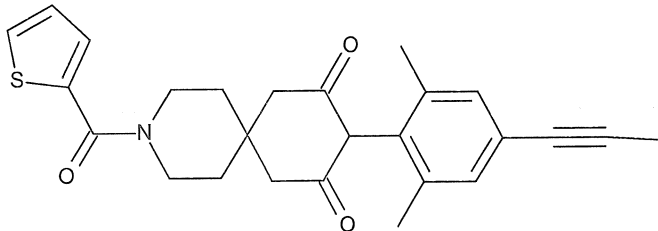
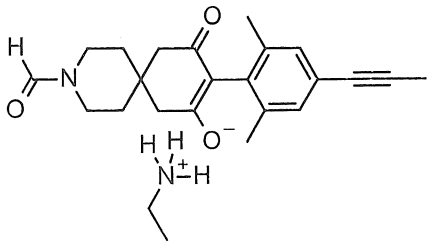
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		2,01 (m, 3H), 1,99 - 1,94 (m, 6H), 1,83 - 1,77 (m, 2H), 1,72 - 1,63 (m, 2H)
A85		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 7,04 - 6,91 (m, 2H), 3,26 - 3,16 (m, 4H), 2,58 - 2,49 (m, 4H), 2,03 - 1,96 (m, 9H), 1,77 - 1,68 (m, 4H), 1,22 - 1,15 (m, 9H)
A86		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 1,74 (br t, J=5,14Hz, 4H) 2,04 (s, 9H) 2,12 (s, 3H) 2,59 (br s, 4H) 3,55 (br s, 4H) 7,14 (s, 2H)

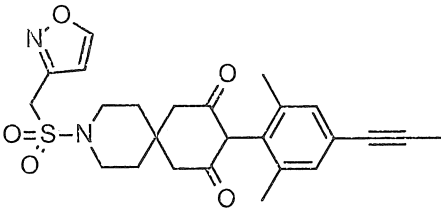
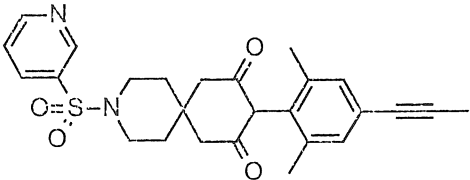
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A87		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 1,84 - 1,91 (m, 4H) 1,98 - 2,00 (m, 3H) 2,03 (s, 6H) 2,58 (s, 4H) 3,40 (br s, 4H) 7,02 (s, 2H) 8,46 - 8,50 (m, 2H) 8,52 (s, 1H).
A88		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 7,04 (s, 2H), 4,39 (t, J = 10,5Hz, 2H), 3,84 - 3,79 (m, 2H), 3,78 - 3,72 (m, 2H), 3,27 - 3,22 (m, 3H), 2,64 (s, 4H), 2,02 (s, 3H), 2,01 (s, 3H), 1,99 (s, 3H), 1,79 - 1,73 (m, 4H)

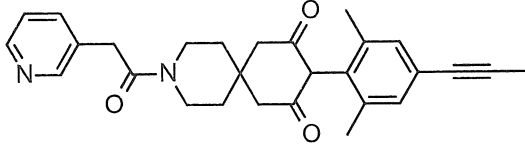
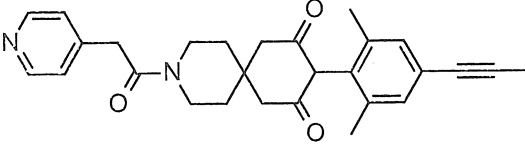
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A89		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 8,98 - 8,89 (m, 1H), 8,31 - 8,23 (m, 1H), 7,82 - 7,76 (m, 1H), 7,11 - 6,97 (m, 2H), 3,88 - 3,80 (m, 2H), 3,52 - 3,43 (m, 2H), 2,70 - 2,56 (m, 4H), 2,04 - 2,01 (m, 3H), 2,01 - 1,96 (m, 6H), 1,87 - 1,70 (m, 4H)
A90		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 8,88 - 8,81 (m, 1H), 7,96 - 7,88 (m, 1H), 7,82 - 7,74 (m, 1H), 7,06 - 6,98 (m, 2H), 3,90 - 3,78 (m, 2H), 3,59 - 3,46 (m, 2H), 2,72 - 2,56 (m,

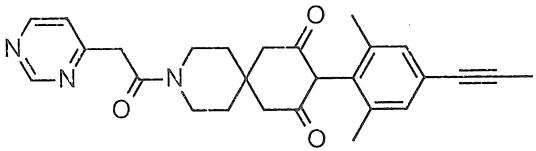
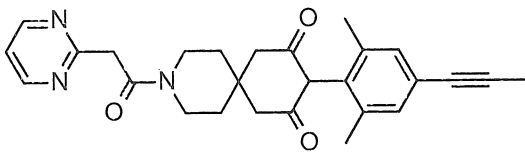
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		4H), 2,04 - 2,01 (m, 3H), 2,00 - 1,96 (m, 6H), 1,88 - 1,71 (m, 4H)
A91		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 8,21 - 8,14 (m, 1H), 7,93 - 7,84 (m, 2H), 7,06 - 6,99 (m, 2H), 3,89 - 3,81 (m, 2H), 3,56 - 3,49 (m, 2H), 2,73 - 2,58 (m, 4H), 2,05 - 2,01 (m, 3H), 2,00 - 1,96 (m, 6H), 1,86 - 1,71 (m, 4H)
A92		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 1,77 - 1,88 (m, 4H) 1,97 - 1,99 (m, 3H) 2,02 (s, 6H) 2,52 (s, 4H) 3,54 - 3,67 (m,

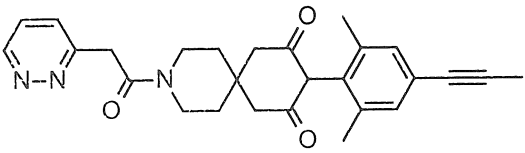
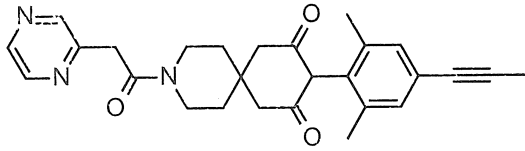
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		4H) 3,92 (t, J=8,50Hz, 2H) 6,98 - 7,02 (m, 2H)
A93		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 7,08 - 7,03 (m, 2H), 6,62 - 6,32 (m, 1H), 3,28 - 3,22 (m, 4H), 3,09 - 3,03 (m, 2H), 2,82 - 2,76 (m, 2H), 2,06 - 1,99 (m, 10H), 2,00 - 1,89 (m, 4H)
A94		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 7,75 - 7,72 (m, 1H), 7,46 - 7,42 (m, 1H), 7,06 - 7,01 (m, 2H), 3,83 - 3,71 (m, 4H), 2,67 - 2,63 (m, 4H), 2,03 - 2,00 (m, 6H),

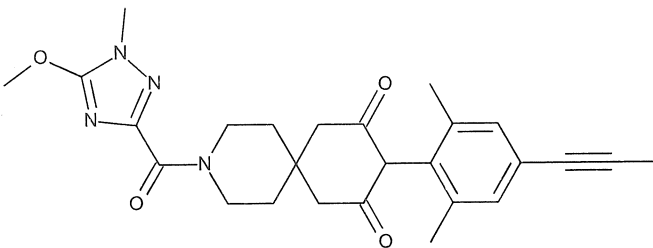
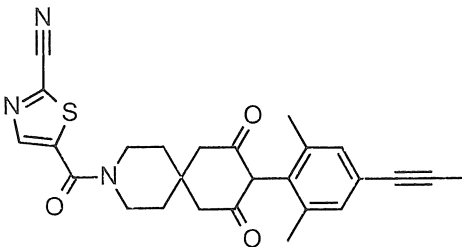
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		2,00 - 1,98 (m, 3H), 1,83 - 1,75 (m, 4H)
A95		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 7,65 - 7,62 (m, 1H), 7,42 - 7,39 (m, 1H), 7,14 - 7,10 (m, 1H), 7,05 - 7,00 (m, 2H), 3,83 - 3,75 (m, 4H), 2,68 - 2,62 (m, 6H), 2,04 - 2,00 (m, 6H), 2,00 - 1,98 (m, 3H), 1,81 - 1,75 (m, 4H)
A96		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 1,24 (t, J=7,34Hz, 3H) 1,61 - 1,77 (m, 4H) 1,98 (s, 3H) 2,01 - 2,06 (m, 6H) 2,39 - 2,49 (m, 4H) 2,86 -

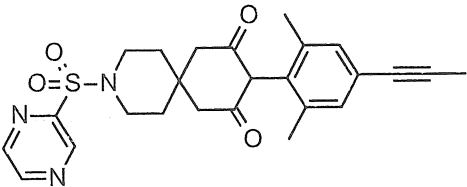
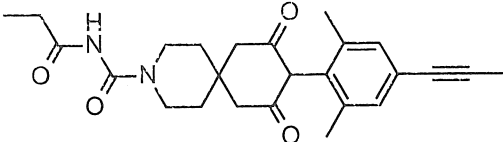
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		2,94 (m, 2H) 3,48 (br s, 2H) 3,53 - 3,59 (m, 2H) 6,99 (s, 2H) 8,00 (s, 1H).
A97		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 8,72 (d, J=1,7Hz, 1H), 7,02 (s, 2H), 6,66 (d, J=1,6Hz, 1H), 4,56 (s, 2H), 2,54 (s, 4H), 2,00 (s, 6H), 1,99 (s, 3H), 1,72 - 1,68 (m, 4H)
A98		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 8,95 (d, J=1,6Hz, 1H), 8,83 (dd, J=1,5, 5,0Hz, 1H), 8,23 (ddd, J=1,6, 2,2, 8,1Hz, 1H), 7,68

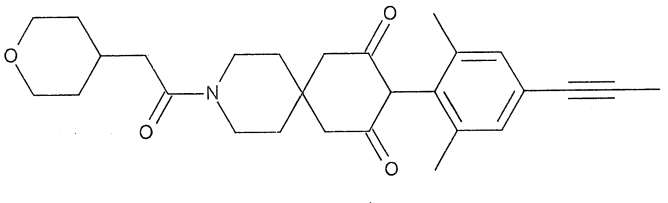
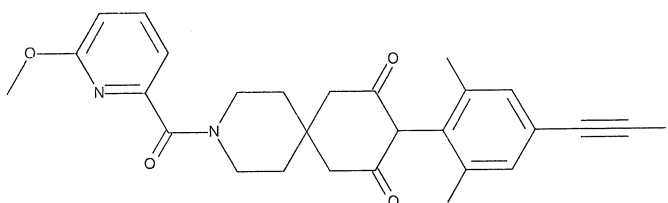
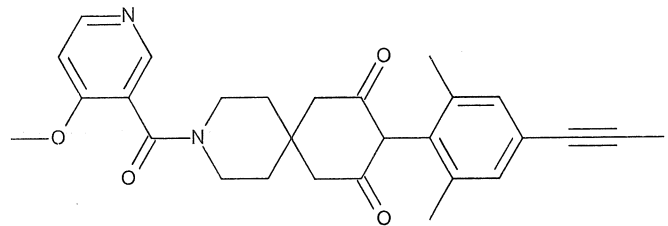
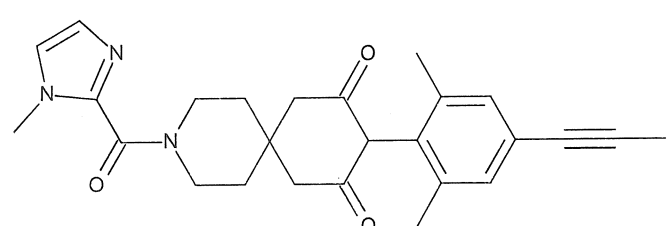
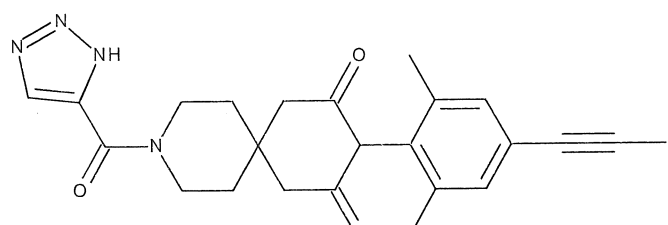
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		(ddd, J=0,7, 4,9, 8,0Hz, 1H), 7,01 (s, 2H), 3,19 - 3,12 (m, 4H), 2,45 (s, 4H), 1,98 (s, 3H), 1,98 - 1,96 (m, 6H), 1,83 - 1,77 (m, 4H)
A99		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 8,42 (d, 2H), 7,74 (d, 1H), 7,42-7,39 (d, 1H), 7,02 (s, 2H), 3,85 (s, 2H), 3,65 (4H), 2,59 (s, 4H), 2,00-1,98 (9H), 1,68-1,66 (4H)
A100		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 7,04 (s, 2H), 3,32-3,24(s, 4H), 2,65(s, 4H), 2,00-

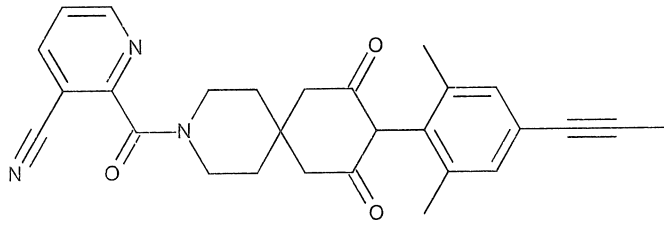
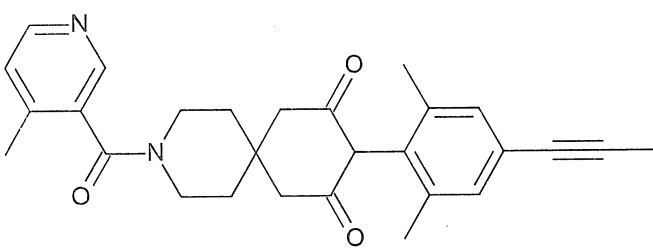
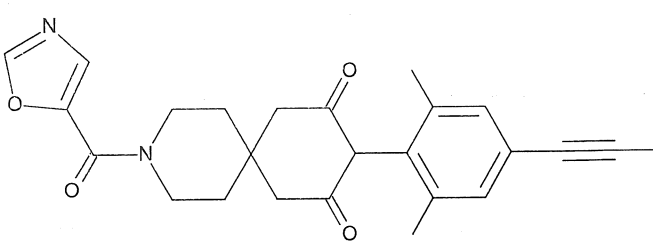
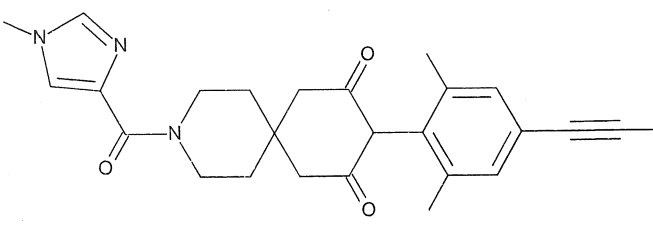
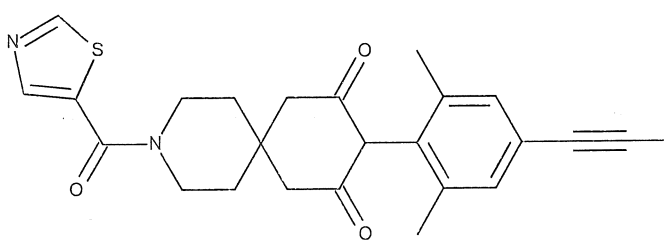
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		1,98(9H), 1,84(m, 4H)
A101		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 9,07 (s, 1H), 8,70 (d, 1H), 7,49 (s, 1H), 7,02 (s, 2H), 4,00 (s, 2H), 3,66 (4H), 2,59 (s, 4H), 2,00- 1,98 (9H), 1,74- 1,68 (4H)
A102		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 8,74(d, 2H), 7,37(1H), 7,02 (s, 2H), 4,12 (s, 2H), 3,69-3,62 (m, 4H), 2,59(s, 4H), 2,00-1,98 (9H), 1,73-1,68 (4H)

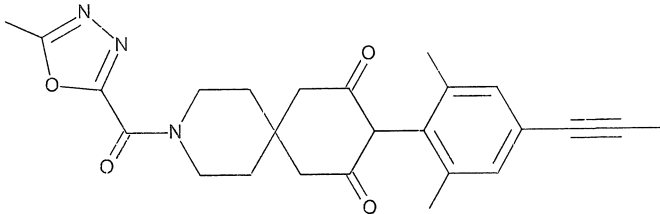
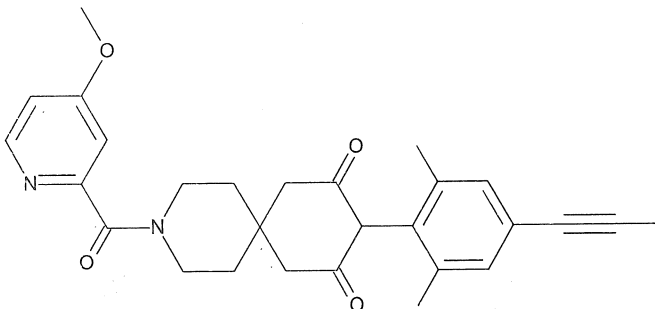
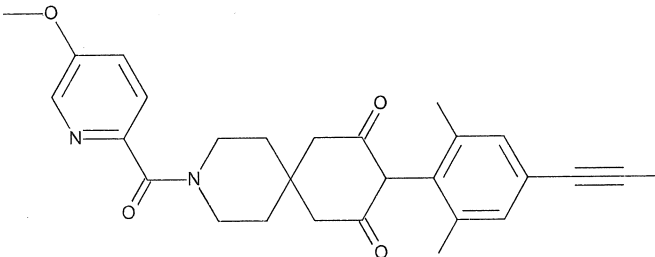
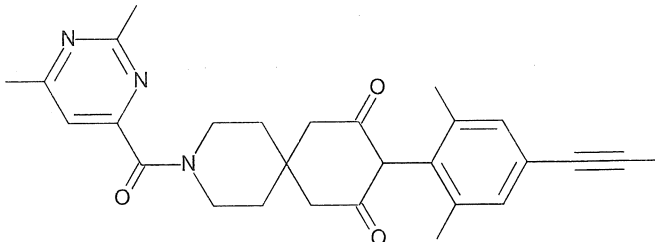
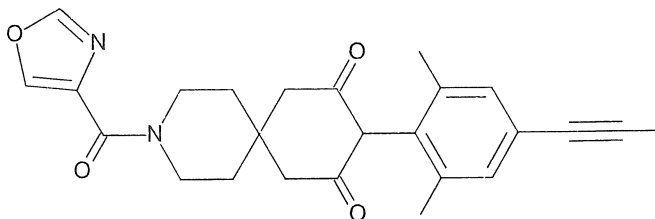
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A103		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 9,10 (t, 1H), 7,71 (d, 2H), 7,04 (s, 2H), 4,00 (s, 2H), 4,19-4,17 (2H), 3,73-3,67 (m, 4H), 2,61 (s, 4H), 2,02-2,00 (9H), 1,77-1,76 (4H), 1,72-1,69 (4H)
A104		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 8,58 (s, 1H), 8,55-8,54(m, 1H), 8,48 (d, 1H), 7,02 (s, 2H), 4,04 (s, 2H), 3,70-3,65 (m, 4H), 2,59 (s, 4H), 2,00-1,98(9H), 1,75-1,73(2H), 1,69-1,67 (2H)

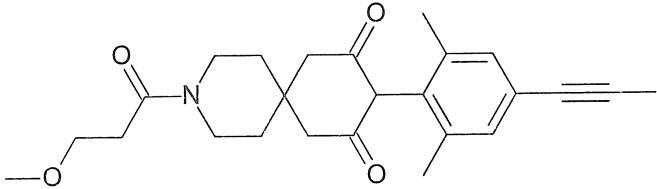
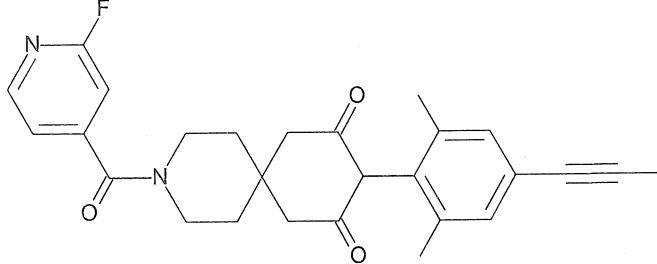
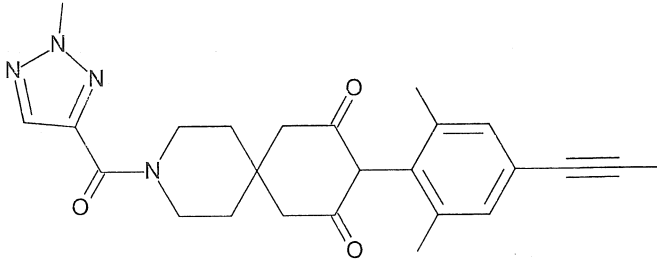
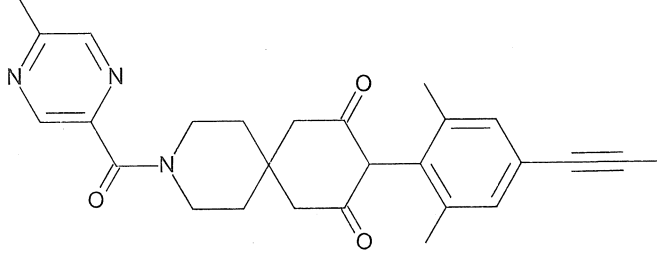
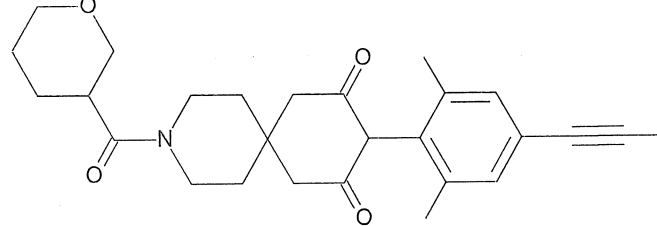
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A105		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 7,06 - 7,00 (m, 2H), 4,14 - 4,10 (m, 3H), 3,93 - 3,85 (m, 2H), 3,84 - 3,77 (m, 2H), 3,67 - 3,63 (m, 3H), 2,69 - 2,59 (m, 4H), 2,03 - 2,01 (m, 3H), 2,01 - 2,00 (m, 3H), 2,00 - 1,98 (m, 3H), 1,81-1,71 (m, 4H)
A106		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 8,32 - 8,27 (m, 1H), 7,35 - 7,28 (m, 2H), 7,06 - 7,00 (m, 2H), 3,86 - 3,69 (m, 4H), 2,68 - 2,61 (m, 4H), 2,03 - 2,00 (m, 6H), 1,99 - 1,98 (m,

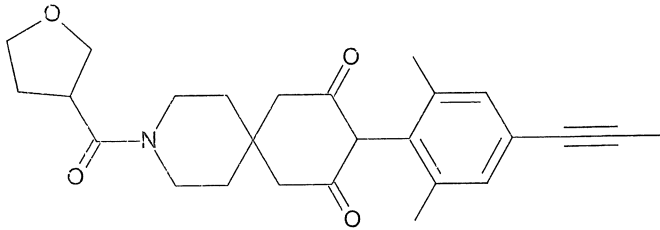
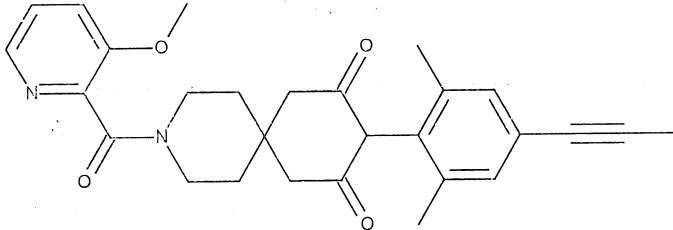
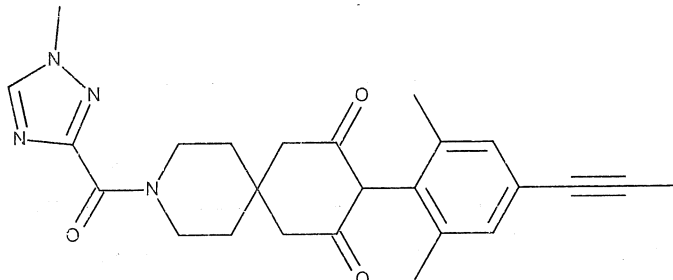
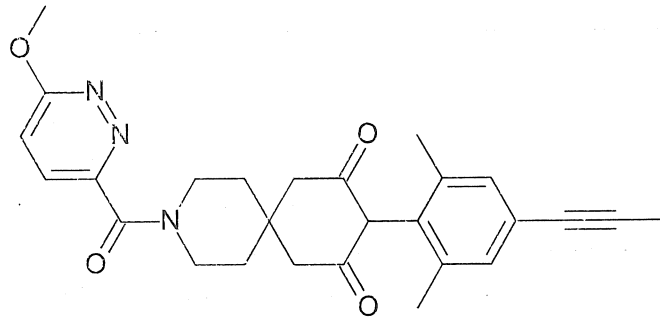
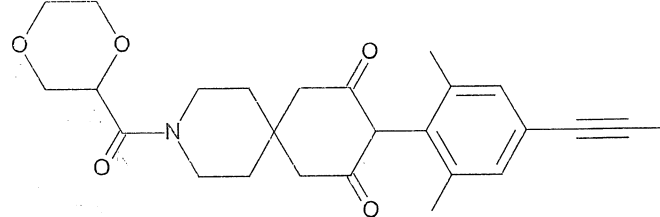
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		3H), 1,84 - 1,78 (m, 4H)
A107		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 9,12 (d, J = 1,5Hz, 1H), 8,86 (d, J = 2,3Hz, 1H), 8,78 (dd, J = 1,5, 2,4Hz, 1H), 7,02 (s, 2H), 3,48 - 3,37 (m, 4H), 2,52 (s, 4H), 1,98 (s, 9H), 1,83 - 1,72 (m, 4H)
A108		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 7,03 (s, 2H), 3,59 - 3,50 (m, 4H), 2,59 (s, 4H), 2,44 (q, J = 7,5Hz, 2H), 2,01 (s, 6H), 2,00 - 1,98 (m, 3H), 1,76 - 1,70 (m,

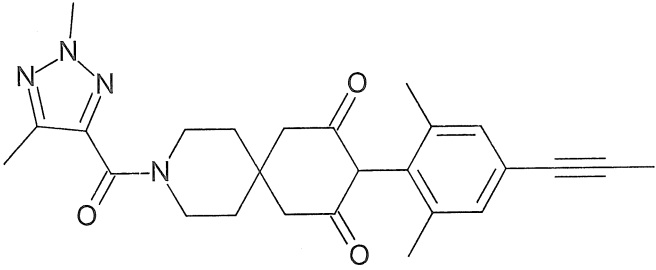
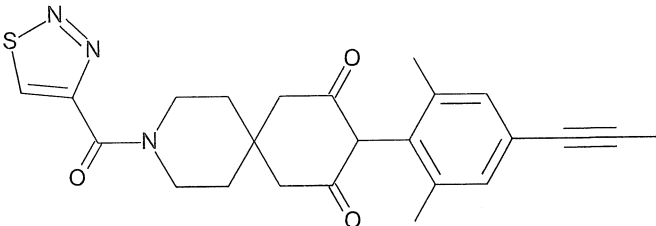
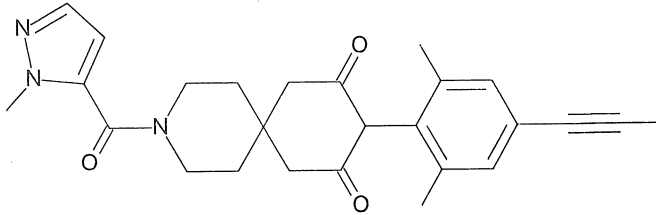
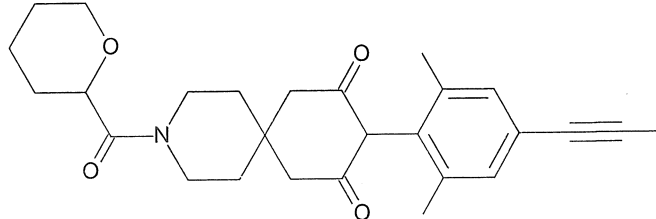
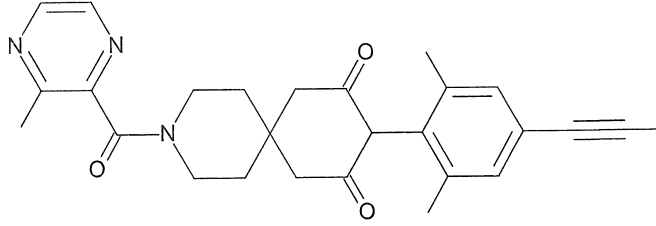
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		4H), 1,13 (t, J = 7,5Hz, 3H)
A109		LCMS M+H: 450
A110		LCMS M+H: 459
A111		LCMS M+H: 459
A112		LCMS M+H: 432
A113		LCMS M+H: 419

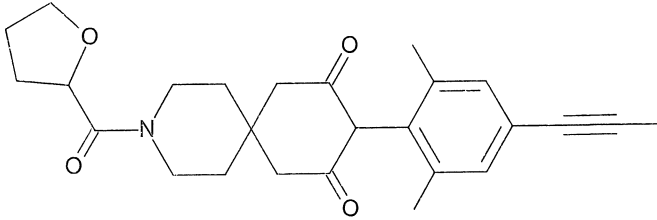
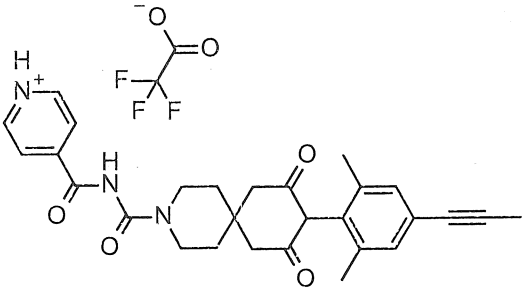
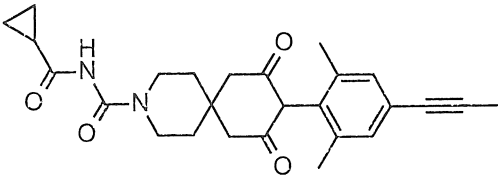
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A114		LCMS M+H: 454
A115		LCMS M+H: 443
A116		LCMS M+H: 419
A117		LCMS M+H: 432
A118		LCMS M+H: 435

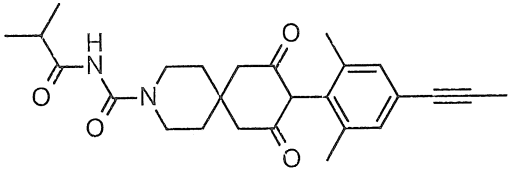
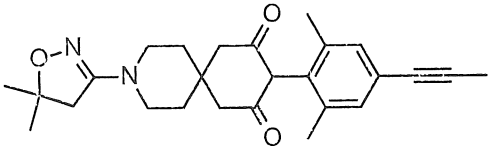
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A119		LCMS M+H: 434
A120		LCMS M+H: 459
A121		LCMS M+H: 459
A122		LCMS M+H: 458
A123		LCMS M+H: 419

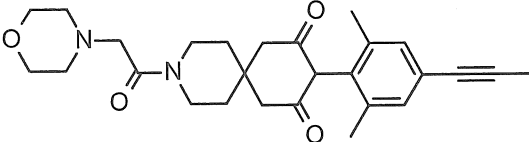
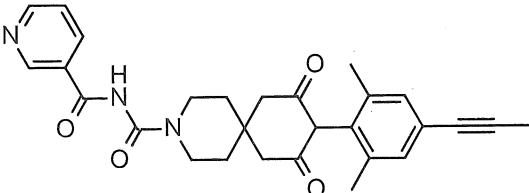
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A124		LCMS M+H: 410
A125		LCMS M+H: 447
A126		LCMS M+H: 433
A127		LCMS M+H: 444
A128		LCMS M+H: 436

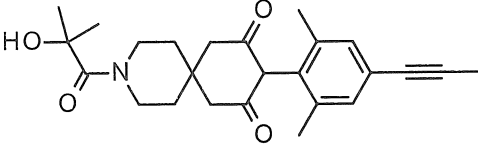
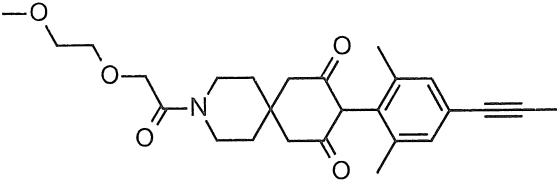
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A129		LCMS M+H: 422
A130		LCMS M+H: 459
A131		LCMS M+H: 433
A132		LCMS M+H: 460
A133		LCMS M+H: 438

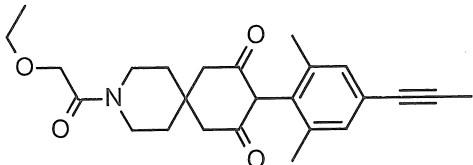
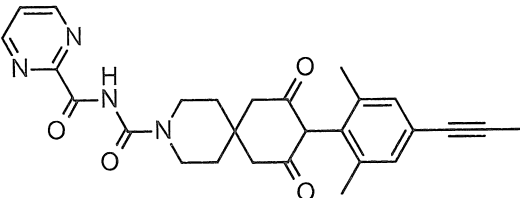
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A134		LCMS M+H: 447
A135		LCMS M+H: 436
A136		LCMS M+H: 432
A137		LCMS M+H: 436
A138		LCMS M+H: 444

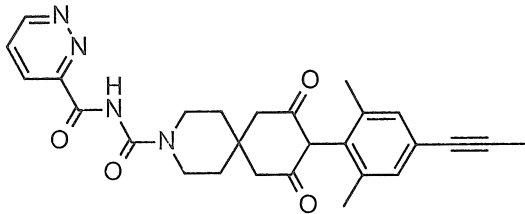
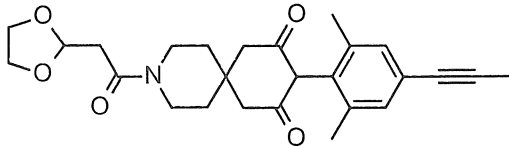
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A139		LCMS M+H: 422
A140		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 8,80 (d, J = 6,0Hz, 2H), 7,94 (d, J = 5,0Hz, 2H), 7,04 (s, 2H), 3,63 (br s, 4H), 2,64 (s, 4H), 2,01 (s, 6H), 2,00 - 1,99 (m, 3H), 1,80 (br d, J = 5,9Hz, 4H)
A141		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 7,03 (s, 2H), 3,59 - 3,51 (m, 4H), 2,59 (s, 4H), 2,01 (s, 6H), 1,99 (s, 3H), 1,94 - 1,87

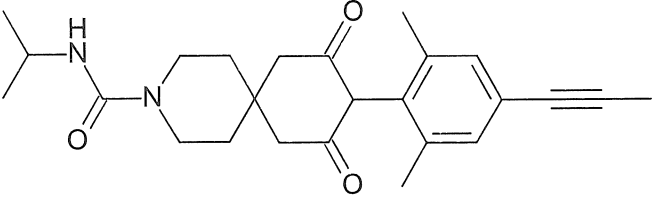
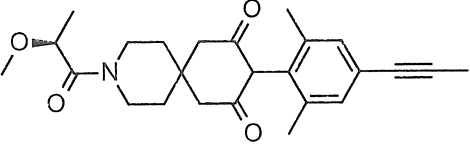
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		(m, 1H), 1,77 - 1,70 (m, 4H), 0,98 - 0,92 (m, 2H), 0,91 - 0,85 (m, 2H)
A142		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 7,03 (s, 2H), 3,59 - 3,48 (m, 4H), 2,66 (quin, J = 6,9Hz, 1H), 2,60 (s, 4H), 2,01 (s, 6H), 1,99 (s, 3H), 1,76 - 1,70 (m, 4H), 1,14 (d, J = 6,8Hz, 6H)
A143		¹ H NMR (400 MHz, metanol) δ ppm 1,35 (s, 6H) 1,69 - 1,78 (m, 4H) 1,96 - 2,03 (m, 9H) 2,58 (s, 4H) 2,87 (s, 2H) 3,22 - 3,28 (m, 4H) 7,03 (s, 2H).

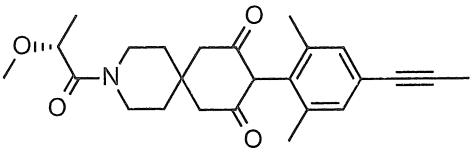
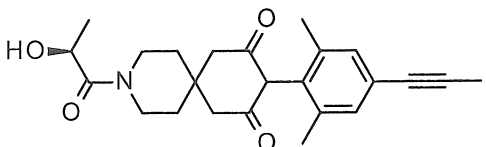
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A144		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 7,06 - 7,02 (m, 2H), 4,84 - 4,82 (m, 8H), 4,32 - 4,26 (m, 2H), 3,72 - 3,66 (m, 2H), 3,48 - 3,43 (m, 2H), 2,67 - 2,57 (m, 4H), 2,03 - 2,00 (m, 6H), 2,00 - 1,98 (m, 3H), 1,82 - 1,75 (m, 2H), 1,75 - 1,68 (m, 2H)
A145		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 8,69 - 8,66 (m, 1H), 8,19 (td, J = 1,0, 7,8Hz, 1H), 8,02 (dt, J = 1,7, 7,7Hz, 1H), 7,63 (ddd, J = 1,2, 4,8, 7,6Hz, 1H), 7,03 (s, 2H), 3,69 -

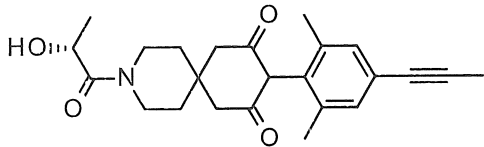
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		3,62 (m, 4H), 2,63 (s, 4H), 2,02 - 2,01 (m, 6H), 2,00 - 1,98 (m, 3H), 1,84 - 1,78 (m, 4H)
A146		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 1,43 (s, 6H) 1,69 (br s, 4H) 1,96 - 2,03 (m, 9H) 2,60 (s, 4H) 3,49 - 4,20 (m, 4H) 7,04 (s, 2H).
A147		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 7,02 (s, 2H), 4,24 (s, 2H), 3,68 - 3,61 (m, 4H), 3,58 - 3,52 (m, 4H), 3,36 (s, 3H), 2,58 (s, 4H), 2,02 (s, 6H), 1,99 (s, 3H), 1,78 - 1,73

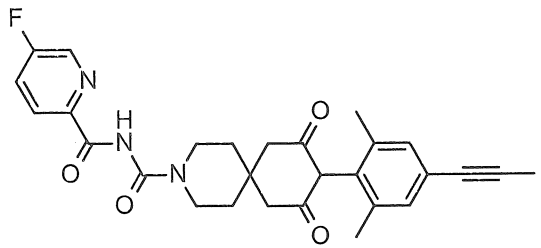
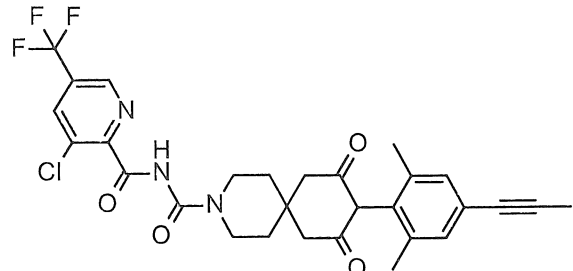
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		(m, 2H), 1,70 - 1,65 (m, 2H)
A148		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 7,03 (s, 2H), 4,19 (s, 2H), 3,66 - 3,61 (m, 2H), 3,59 - 3,52 (m, 4H), 2,58 (s, 4H), 2,03 - 2,00 (m, 6H), 1,99 (s, 3H), 1,77 - 1,72 (m, 2H), 1,71 - 1,65 (m, 2H), 1,22 (t, J = 7,0Hz, 3H)
A149		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 8,97 (d, J = 4,9Hz, 2H), 7,72 (s, 1H), 7,67 (t, J = 4,9Hz, 1H), 7,04 (s, 2H), 3,65 (br s, 4H), 2,61 (s, 4H), 2,02 (s, 6H),

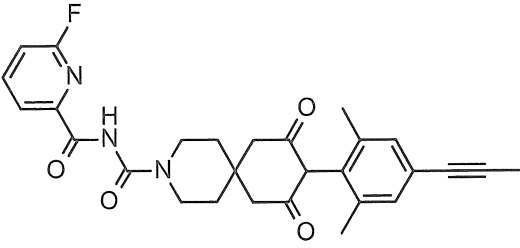
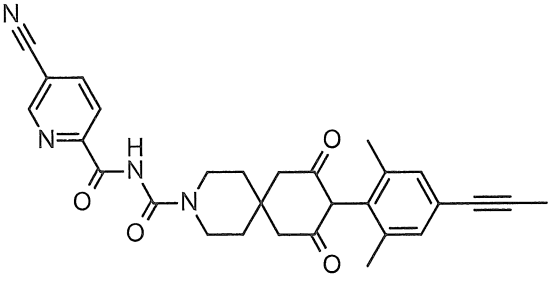
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		1,99 (s, 3H), 1,91 - 1,72 (m, 4H)
A150		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 9,38 (dd, J = 1,7, 5,1Hz, 1H), 8,37 (dd, J = 1,7, 8,5Hz, 1H), 7,94 (dd, J = 5,1, 8,6Hz, 1H), 7,03 (s, 2H), 3,71 - 3,64 (m, 4H), 2,62 (s, 4H), 2,02 (s, 6H), 1,99 (s, 3H), 1,85 - 1,78 (m, 4H)
A151		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 7,05 - 7,00 (m, 2H), 5,22 - 5,17 (m, 1H), 4,00 - 3,92 (m, 2H), 3,90 - 3,83 (m, 2H), 3,68 - 3,59

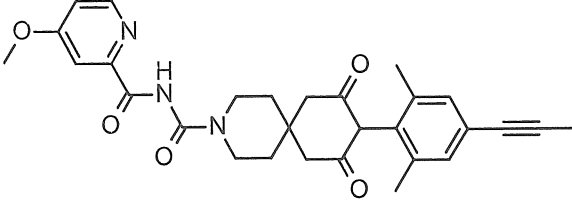
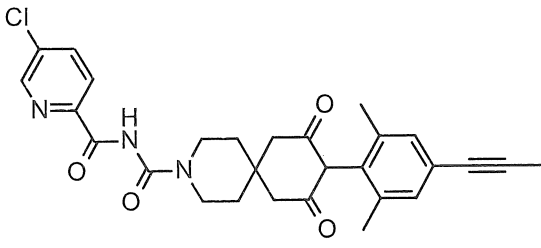
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		(m, 4H), 2,81 - 2,76 (m, 2H), 2,61 - 2,56 (m, 4H), 2,03 - 2,00 (m, 6H), 2,00 - 1,97 (m, 3H), 1,78 - 1,72 (m, 2H), 1,69 - 1,64 (m, 2H)
A152		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 7,03 (s, 2H), 3,94 – 3,82 (m, 1H), 3,50 – 3,39 (m, 4H), 2,58 (s, 4H), 2,01 – 1,99 (m, 9H), 1,72 – 1,58 (m, 4H), 1,14 (d, 6H)
A153		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 1,32 (d, J=6,72Hz, 3H) 1,65 - 1,80 (m, 4H) 2,00 (d, J=8,93Hz, 9H)

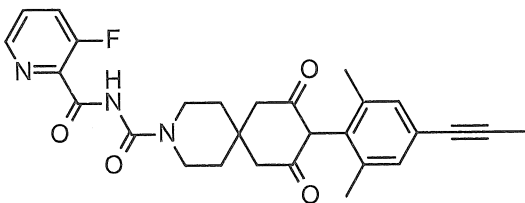
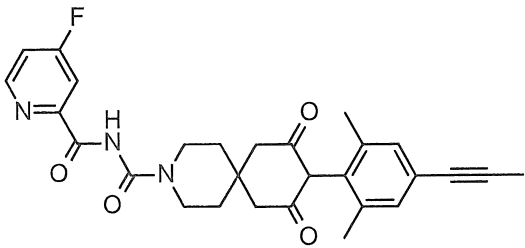
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		2,62 (d, $J=4,52\text{Hz}$, 4H) 3,57 - 3,74 (m, 4H) 4,27 (d, $J=6,60\text{Hz}$, 1H) 7,04 (s, 2H).
A154		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 1,32 (d, $J=6,60\text{Hz}$, 3H) 1,65 - 1,78 (m, 4H) 2,00 (d, $J=9,17\text{Hz}$, 9H) 2,61 (d, $J=4,52\text{Hz}$, 4H) 3,57 - 3,74 (m, 4H) 4,27 (q, $J=6,68\text{Hz}$, 1H) 7,04 (s, 2H).
A155		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 1,43 (t, $J=6,54\text{Hz}$, 5 H) 1,62 - 1,91 (m, 4H) 2,00 (d, $J=8,44\text{Hz}$, 9H)

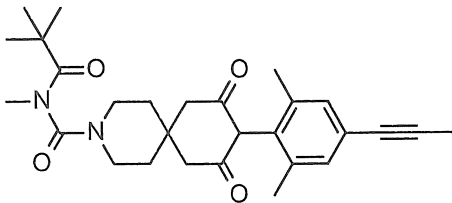
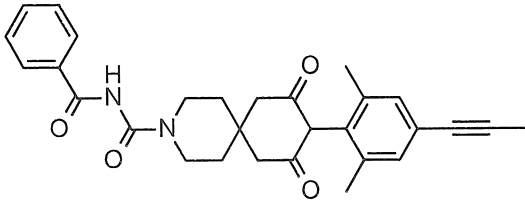
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		2,62 (br d, $J=18,71\text{Hz}$, 4H) 3,44 - 3,84 (m, 4H) 4,31 (d, $J=6,85\text{Hz}$, 1H) 5,46 - 5,54 (m, 1H) 7,04 (s, 2H).
A156		1H NMR (400 MHz, metanol) δ ppm 1,43 (dd, $J=12,47$, $6,85\text{Hz}$, 6H) 1,55 (d, $J=6,97\text{Hz}$, 3H) 2,00 (d, $J=9,66\text{Hz}$, 9H) 2,61 (br d, $J=15,41\text{Hz}$, 5 H) 3,44 - 3,82 (m, 5 H) 4,31 (q, $J=6,97\text{Hz}$, 1H) 5,16 (q, $J=6,97\text{Hz}$, 1H) 5,52 (d, $J=6,85\text{Hz}$, 1H) 7,03 (s, 2H).

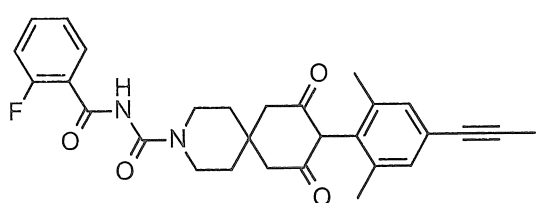
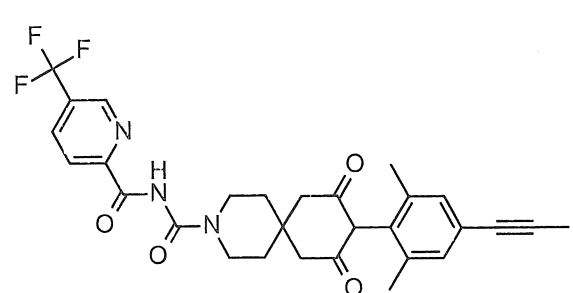
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A157		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 8,57 (d, J = 2,8Hz, 1H), 8,25 (dd, J = 4,5, 8,7Hz, 1H), 7,81 (dt, J = 2,8, 8,5Hz, 1H), 7,03 (s, 2H), 3,65 (br s, 4H), 2,63 (s, 4H), 2,02 (s, 6H), 2,00 - 1,97 (m, 3H), 1,83 - 1,77 (m, 4H)
A158		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 8,82 (s, 1H), 8,36 (s, 1H), 7,03 (s, 2H), 3,58 (br s, 4H), 2,61 (s, 4H), 2,01 (s, 6H), 1,99 (s, 3H), 1,75 (br s, 4H)

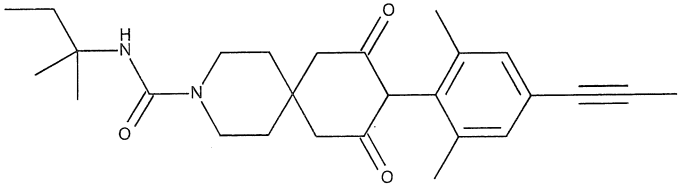
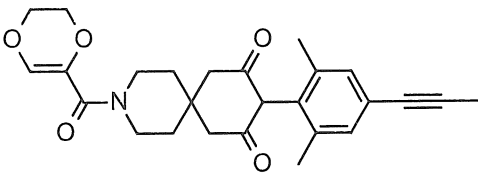
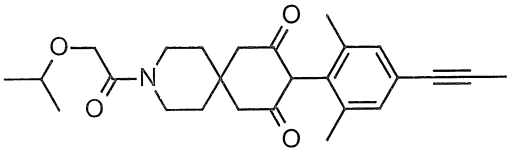
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A159		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 8,21 - 8,07 (m, 2H), 7,35 (dd, J = 1,6, 8,1Hz, 1H), 7,03 (s, 2H), 3,65 - 3,61 (m, 4H), 2,64 (s, 4H), 2,02 (s, 6H), 1,99 (s, 3H), 1,84 - 1,76 (m, 4H)
A160		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 9,01 (dd, J = 0,9, 2,0Hz, 1H), 8,41 (dd, J = 2,0, 8,1Hz, 1H), 8,31 (dd, J = 0,8, 8,1Hz, 1H), 7,03 (s, 2H), 3,66 (s, 4H), 2,64 (s, 4H), 2,01 (d, J = 2,3Hz, 6H), 1,99 (s, 3H), 1,85 - 1,76 (m, 4H)

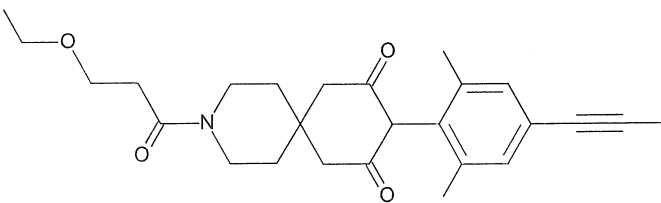
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A161		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 8,47 (d, J = 5,7Hz, 1H), 7,71 (d, J = 2,4Hz, 1H), 7,16 (dd, J = 2,6, 5,7Hz, 1H), 7,02 (s, 2H), 3,95 (s, 2H), 3,65 (br t, J = 5,0Hz, 4H), 2,59 (s, 4H), 2,02 (s, 6H), 1,99 (s, 3H), 1,83 - 1,76 (m, 4H)
A162		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 8,67 (dd, J = 0,6, 2,4Hz, 1H), 8,17 (dd, J = 0,6, 8,4Hz, 1H), 8,07 (dd, J = 2,4, 8,4Hz, 1H), 7,03 (s, 2H), 3,68 - 3,62 (m, J = 5,5Hz, 4H), 2,64

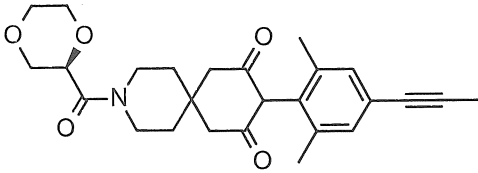
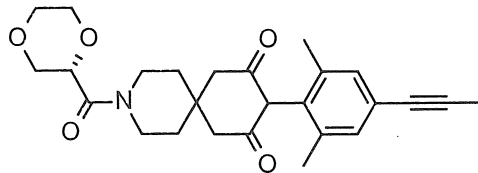
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		(s, 4H), 2,02 (s, 6H), 1,99 (s, 3H), 1,84 - 1,75 (m, 4H)
A163		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 8,49 (td, J = 1,3, 4,5Hz, 1H), 7,81 - 7,74 (m, 1H), 7,71 - 7,65 (m, 1H), 7,03 (s, 2H), 3,67 - 3,61 (m, 4H), 2,64 (s, 4H), 2,02 (s, 6H), 1,99 (s, 3H), 1,82 - 1,77 (m, 4H)
A164		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 8,70 (dd, J = 5,5, 7,8Hz, 1H), 7,93 (dd, J = 2,4, 9,2Hz, 1H), 7,46 (ddd, J = 2,6, 5,7, 8,3Hz, 1H), 7,03 (s, 2H),

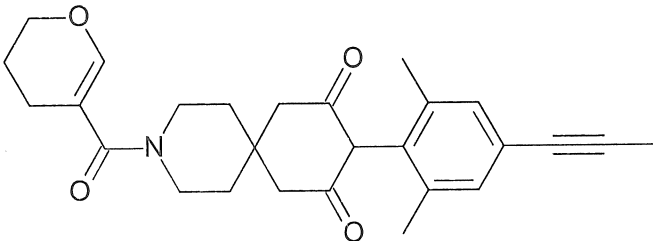
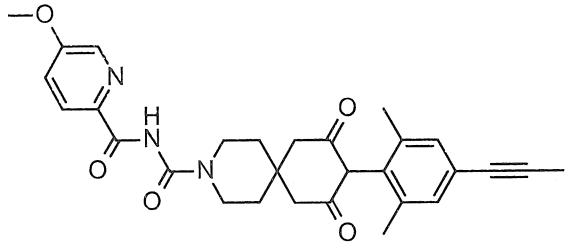
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		3,65 (br d, $J = 5,3\text{Hz}$, 4H), 2,63 (s, 4H), 2,02 (s, 6H), 1,99 (s, 3H), 1,83 - 1,77 (m, 4H)
A165		^1H NMR (400MHz, Metanol- d_4) $\delta =$ 1,26 (s, 9H) 1,75 - 1,81 (m, 4H) 1,97 - 2,04 (m, 9H) 2,63 (s, 4H) 2,98 (s, 3H) 3,59 (br s, 4H) 7,04 (s, 2H).
A166		^1H NMR (400MHz, Metanol- d_4) $\delta =$ 7,91 - 7,85 (m, 2H), 7,62 - 7,58 (m, 1H), 7,52 - 7,48 (m, 2H), 7,03 (s, 2H), 3,63 (br m, 4H), 2,64 (s, 4H), 2,01 - 1,99 (m,

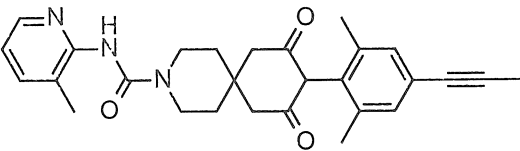
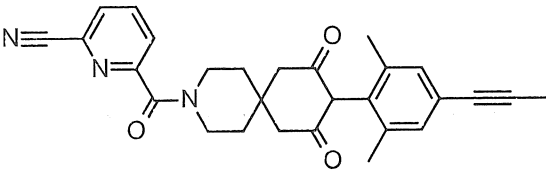
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		9H), 1,84 – 1,73 (m, 4H)
A167		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 7,73 – 7,69 (m, 1H), 7,59 – 7,54 (m, 1H), 7,32 – 7,19 (m, 2H), 7,04 (s, 2H), 3,69 – 3,56 (m, 4H), 2,63 (s, 4H), 2,02 – 1,99 (m, 9H), 1,84 – 1,70 (m, 4H)
A168		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 9,03 - 8,99 (m, 1H), 8,39 - 8,34 (m, 2H), 7,03 (s, 2H), 3,71 - 3,61 (m, 4H), 2,63 (s, 4H), 2,02 (s, 6H), 1,99 (s, 2H), 1,84 - 1,76 (m, 4H)

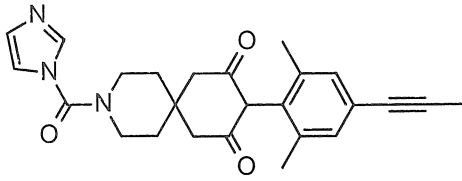
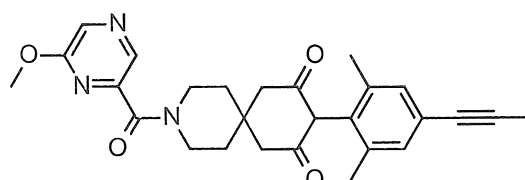
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A169		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 7,03 (s, 2H), 3,45 – 3,36 (m, 4H), 2,58 (s, 4H), 2,01 – 1,99 (m, 9H), 1,77 – 1,62 (m, 6H), 1,27 (s, 6H), 0,84 (t, 3H)
A170		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 7,03 (s, 2H), 6,77 (s, 1H), 4,14 (s, 4H), 3,70 - 3,64 (m, 4H), 2,62 (s, 4H), 2,01 (s, 6H), 1,99 (s, 3H), 1,74 - 1,69 (m, 4H)
A171		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 7,04 (s, 2H), 4,18 (s, 2H),

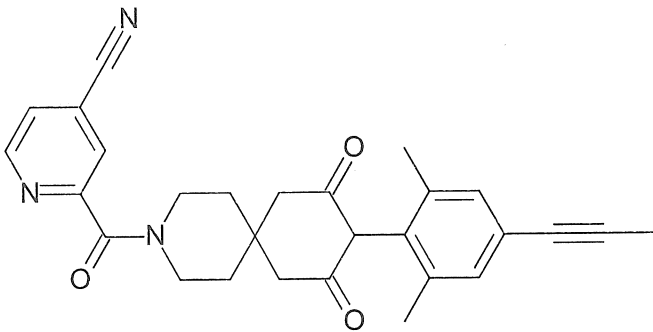
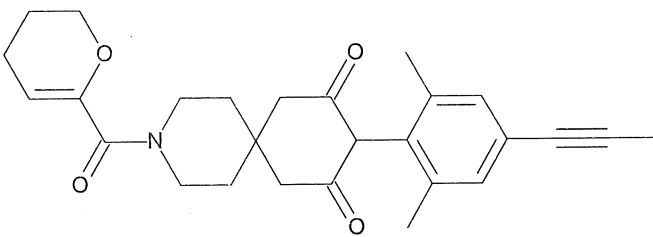
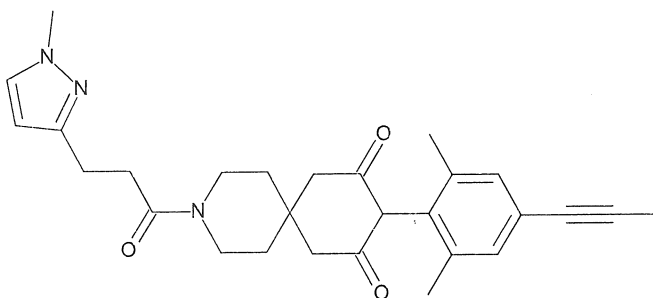
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		3,71 - 3,61 (m, 3H), 3,57 (br dd, $J = 5,0, 5,7\text{Hz}$, 2H), 2,62 (s, 4H), 2,01 (s, 6H), 1,99 (s, 3H), 1,78 - 1,72 (m, 2H), 1,69 (br t, $J = 5,7\text{Hz}$, 2H), 1,19 (d, $J = 6,1\text{Hz}$, 6H)
A172		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 7,04 (s, 2H), 3,70 (t, $J = 6,3\text{Hz}$, 2H), 3,63 (td, $J = 5,8, 12,1\text{Hz}$, 4H), 3,50 (q, $J = 7,1\text{Hz}$, 2H), 2,66 (t, $J = 6,3\text{Hz}$, 2H), 2,61 (s, 4H), 2,01 (s, 6H), 1,99 (s, 3H), 1,78 - 1,73 (m, 2H), 1,69 - 1,64 (m, 2H),

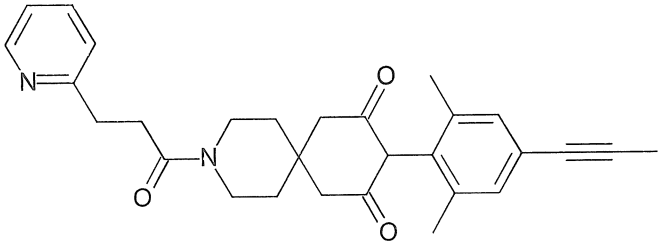
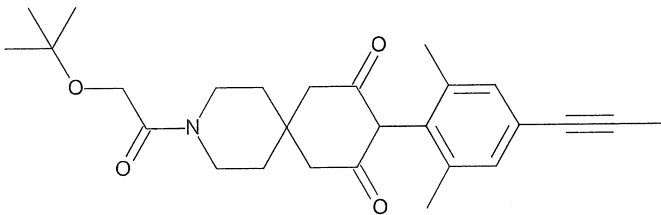
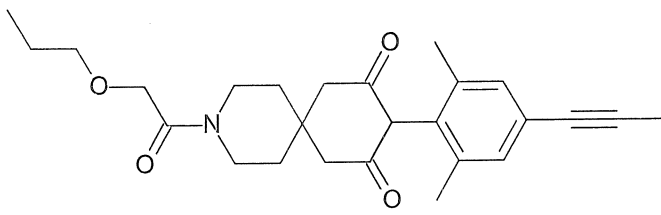
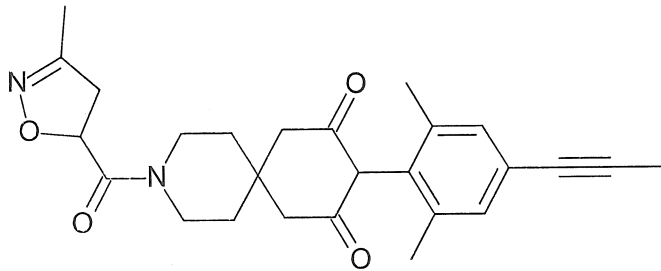
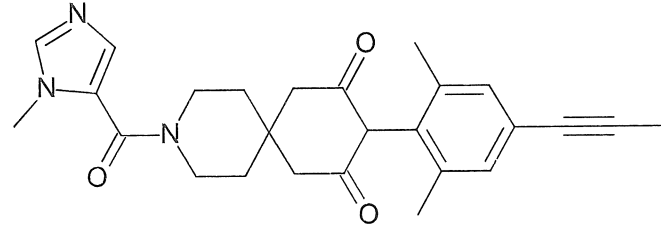
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		1,17 (t, J = 7,0Hz, 3H)
A173		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 7,04 (s, 2H), 4,41 (s, 1H), 3,88 - 3,45 (m, 10H), 2,63 (s, 2H), 2,59 (s, 2H), 2,02 (s, 3H), 2,01 (s, 3H), 1,99 (s, 3H), 1,79 - 1,60 (m, 4H)
A174		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 7,04 (s, 2H), 4,44 - 4,39 (m, 1H), 3,87 - 3,46 (m, 10H), 2,63 (s, 2H), 2,59 (s, 2H), 2,02 (s, 3H), 2,01 (s, 3H), 1,99 (s, 3H), 1,78 - 1,61 (m, 4H)

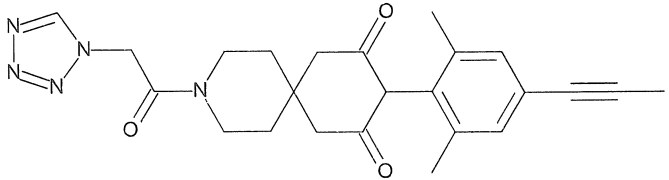
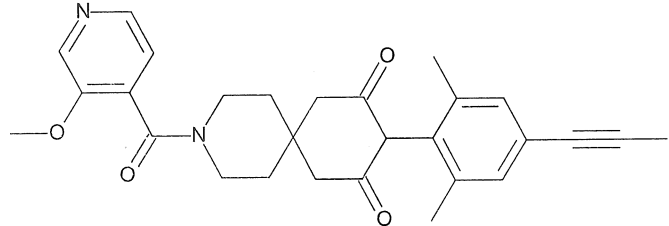
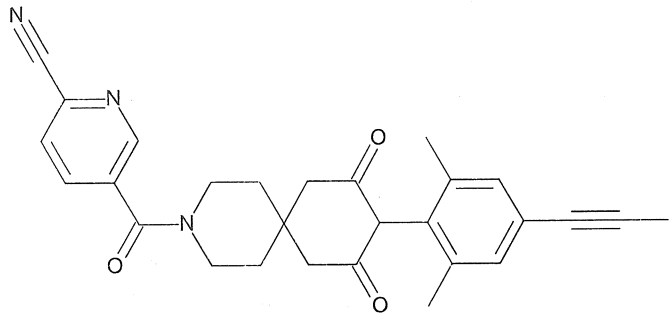
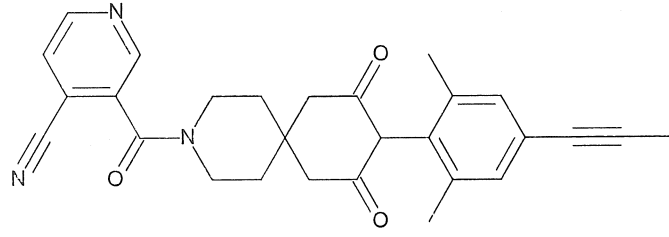
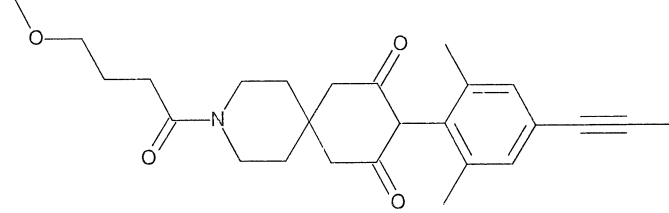
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A175		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 7,03 (s, 2H), 6,78 (s, 1H), 4,06 - 4,01 (m, 2H), 3,71 - 3,63 (m, 4H), 2,62 (s, 4H), 2,24 (t, J = 5,7Hz, 2H), 2,01 (s, 6H), 1,99 (s, 3H), 1,94 - 1,85 (m, 2H), 1,74 - 1,67 (m, 4H)
A176		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 8,32 (d, J = 2,4Hz, 1H), 8,15 (d, J = 9,0Hz, 1H), 7,52 (dd, J = 2,9, 8,8Hz, 1H), 3,95 (s, 3H), 3,67 - 3,61 (m, 4H), 2,63 (s, 4H), 2,02 (s, 6H), 1,99 (s,

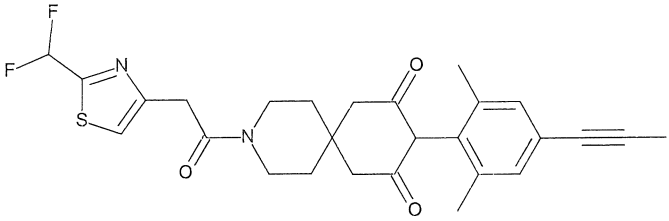
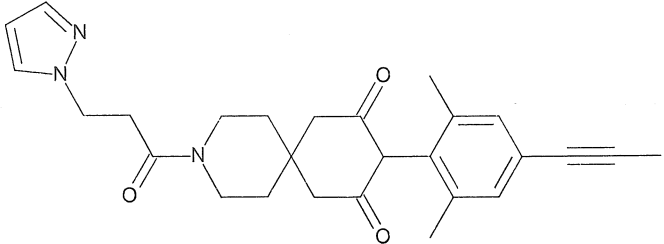
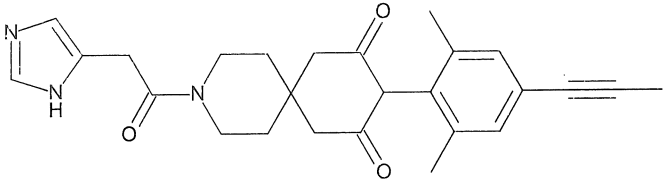
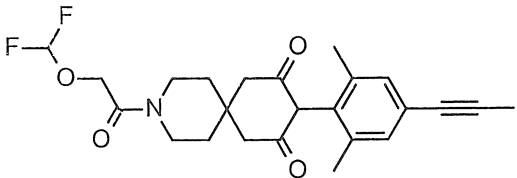
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		3H), 1,86 - 1,76 (m, 4H)
A177		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 8,22 – 8,17 (m, 2H), 7,40 (dd, 1H), 7,05 (s, 2H), 3,78 – 3,63 (m, 4H), 2,65 (s, 4H), 2,46 (s, 3H), 2,02 – 2,00 (m, 9H), 1,86 – 1,78 (m, 4H)
A178		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 8,96 - 8,93 (m, 1H), 8,30 (dd, J = 2,0, 8,1Hz, 1H), 7,76 (d, J = 8,2Hz, 1H), 7,03 (d, J = 4,9Hz, 2H), 3,86 - 3,80 (m, 2H), 3,51 - 3,45 (m, 2H), 2,70 - 2,58 (m, 4H), 2,03 - 2,02

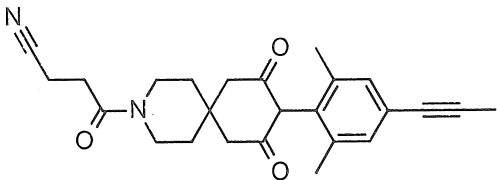
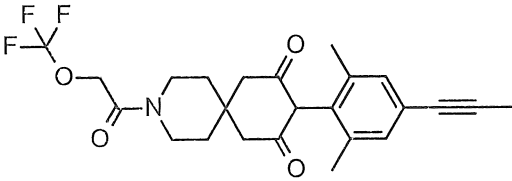
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		(m, 3H), 1,99 (s, 3H), 1,98 (s, 3H), 1,85 - 1,80 (m, 2H), 1,78 - 1,72 (m, 2H)
A179		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 8,06 (s, 1H), 7,44 (t, J = 1,3Hz, 1H), 7,08 (s, 1H), 7,03 (s, 2H), 3,69 - 3,61 (m, 4H), 2,64 (s, 4H), 2,01 (s, 6H), 1,99 (s, 3H), 1,85 - 1,79 (m, 4H)
A180		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 8,28 - 8,36 (m, 2H) 7,01 - 7,05 (m, 2H) 3,96 - 4,01 (m, 3H) 3,80 - 3,86 (m, 2H) 3,57 - 3,64 (m, 2H) 2,59 -

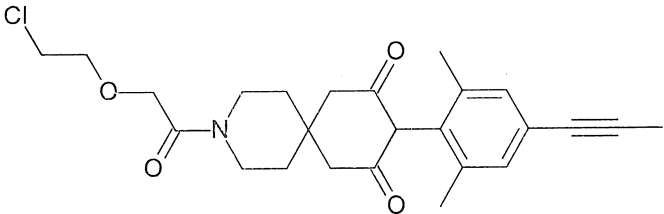
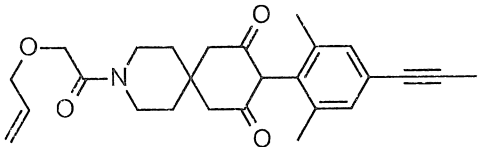
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		2,71 (m, 4H) 2,01 - 2,04 (m, 3H) 1,97 - 2,01 (m, 6H) 1,75 - 1,86 (m, 4H)
A181		LCMS M+H: 454
A182		LCMS M+H: 434
A183		LCMS M+H: 460

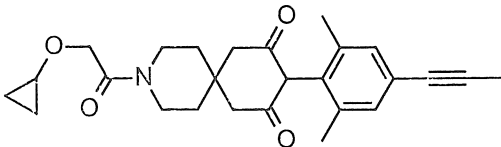
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A184		LCMS M+H: 457
A185		LCMS M+H: 438
A186		LCMS M+H: 424
A187		LCMS M+H: 435
A188		LCMS M+H: 432

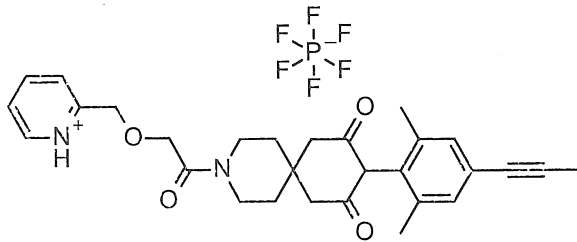
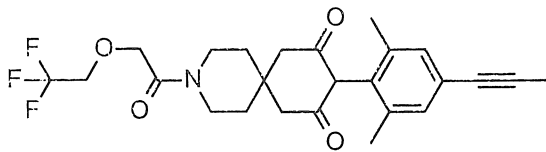
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A189		LCMS M+H: 434
A190		LCMS M+H: 459
A191		LCMS M+H: 454
A192		LCMS M+H: 454
A193		LCMS M+H: 424

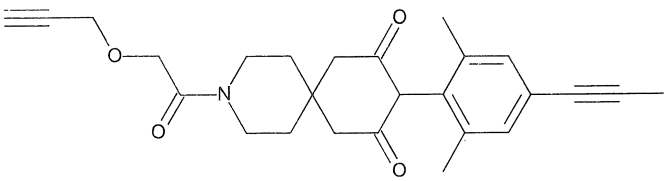
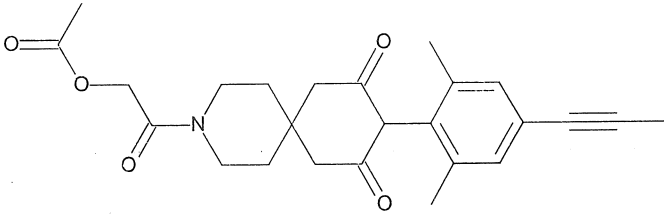
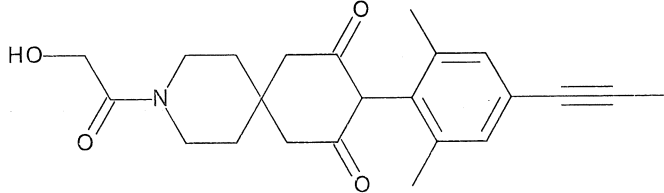
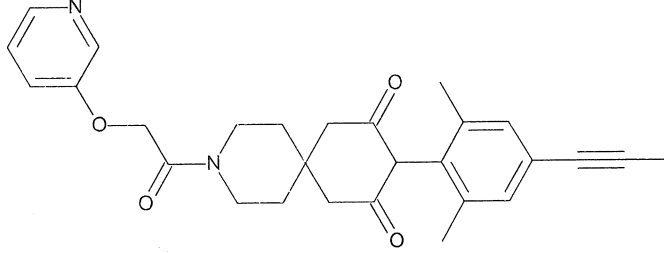
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A194		LCMS M+H: 499
A195		LCMS M+H: 446
A196		LCMS M+H: 432
A197		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 7,03 (s, 2H), 6,50 (t, J = 74,9Hz, 1H), 4,63 (s, 2H), 3,69 - 3,62 (m, 2H), 3,53 - 3,46 (m, 2H), 2,67 - 2,59 (m, 4H), 2,01 (s, 6H), 2,00 - 1,98 (m, 3H), 1,81 - 1,73

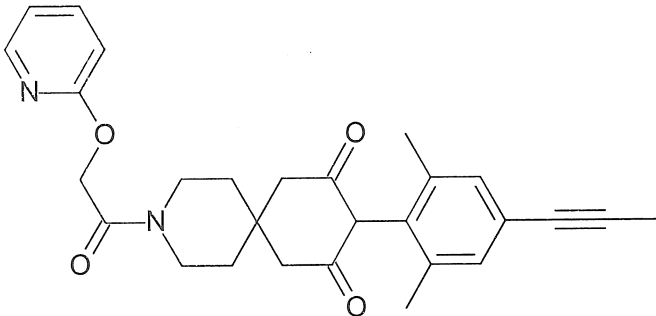
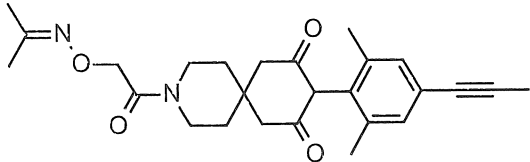
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		(m, 2H), 1,72 - 1,65 (m, 2H)
A198		¹H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 7,03 (s, 2H), 3,68 - 3,63 (m, 2H), 3,58 - 3,53 (m, 2H), 2,83 - 2,78 (m, 2H), 2,70 - 2,65 (m, 2H), 2,59 (s, 4H), 2,02 (s, 6H), 1,99 (s, 3H), 1,78 - 1,73 (m, 2H), 1,70 - 1,66 (m, 2H)
A199		¹H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 7,05 - 7,01 (m, 2H), 3,69 - 3,63 (m, 2H), 3,50 - 3,43 (m, 2H), 2,64 - 2,58 (m, 4H), 2,03 - 2,00 (m, 6H), 2,00 - 1,98 (m, 3H),

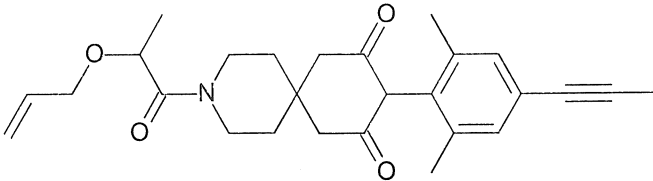
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		1,79 - 1,73 (m, 2H), 1,73 - 1,68 (m, 2H)
A200		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 7,04 (s, 2H), 4,28 (s, 2H), 3,80 - 3,75 (m, 2H), 3,73 - 3,68 (m, 2H), 3,67 - 3,61 (m, 2H), 3,59 - 3,53 (m, 2H), 2,62 (s, 4H), 2,01 (s, 6H), 1,99 (s, 3H), 1,79 - 1,74 (m, 2H), 1,72 - 1,66 (m, 2H)
A201		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 7,03 (s, 2H), 5,94 (tdd, J = 5,5, 10,4, 17,4Hz, 1H), 5,31 (qd, J = 1,7, 17,2Hz, 1H),

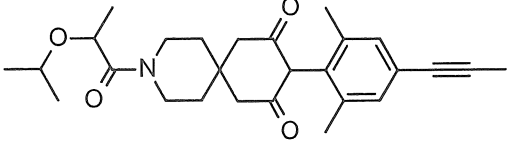
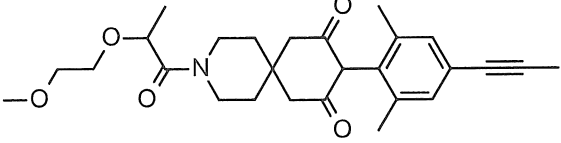
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		5,20 (qd, J = 1,4, 10,5Hz, 1H), 4,21 (s, 2H), 4,05 (td, J = 1,4, 5,6Hz, 2H), 3,66 - 3,61 (m, 2H), 3,57 - 3,50 (m, 2H), 2,61 (s, 4H), 2,01 (s, 6H), 1,99 (s, 3H), 1,76 - 1,71 (m, 2H), 1,71 - 1,66 (m, 2H)
A202		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 7,03 (s, 2H), 4,25 (s, 2H), 3,68 - 3,58 (m, 2H), 3,55 - 3,50 (m, 2H), 3,47 (tt, J = 3,0, 6,0Hz, 1H), 2,61 (s, 4H), 2,01 (s, 6H), 1,99 (s, 3H), 1,77 - 1,72 (m, 2H), 1,71 - 1,65 (m, 2H), 0,64 - 0,58 (m,

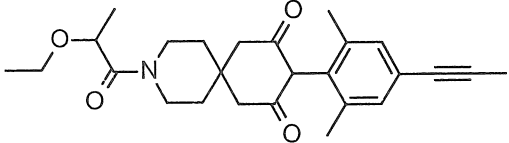
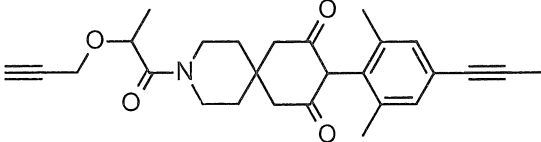
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		2H), 0,52 - 0,46 (m, 2H)
A203		1H NMR (400 MHz, metanol) δ = 8,85 (dd, J = 1,5, 6,4Hz, 1H), 8,59 (dt, J = 1,5, 7,9Hz, 1H), 8,03 - 7,99 (m, 2H), 7,04 (s, 2H), 5,08 (s, 2H), 4,64 (s, 2H), 3,73 - 3,67 (m, 2H), 3,49 - 3,44 (m, 2H), 2,63 (s, 4H), 2,01 (s, 6H), 2,01 - 1,98 (m, 3H), 1,80 - 1,75 (m, 2H), 1,75 - 1,70 (m, 2H)
A204		H NMR (400 MHz, metanol) δ = 7,04 (s, 2H), 4,42 (s, 2H), 4,04 (q, J = 8,9Hz, 2H), 3,68 - 3,60 (m, 2H),

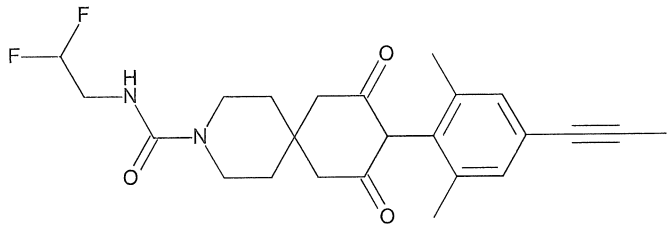
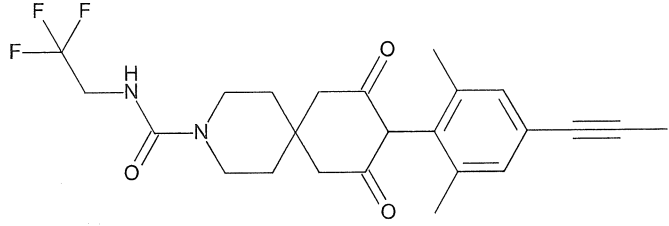
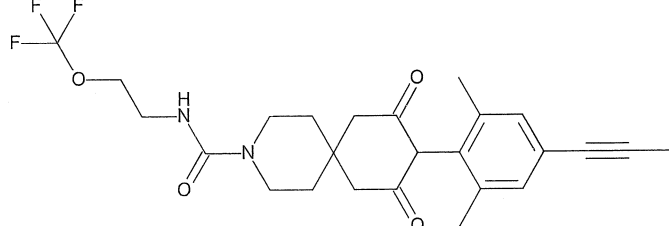
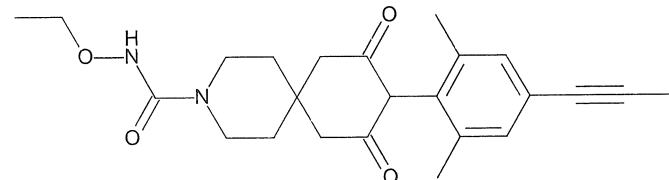
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		3,48 (br t, J = 5,6Hz, 2H), 2,61 (s, 4H), 2,01 (s, 6H), 1,99 (s, 3H), 1,77 - 1,72 (m, 2H), 1,72 - 1,67 (m, 2H)
A205		LCMS M+H: 420
A206		LCMS M+H: 424
A207		LCMS M+H: 382
A208		LCMS M+H: 459

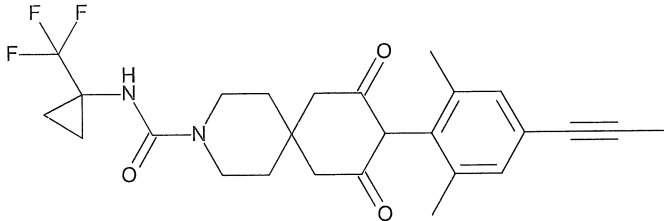
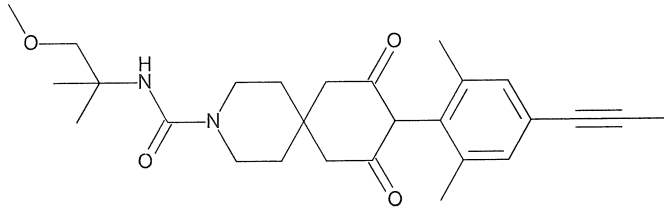
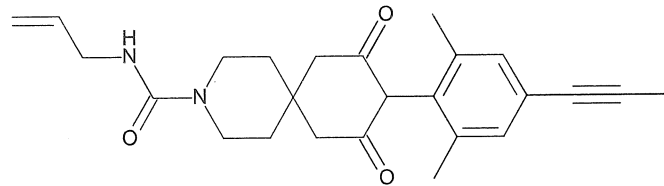
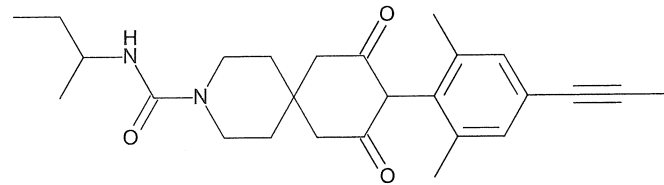
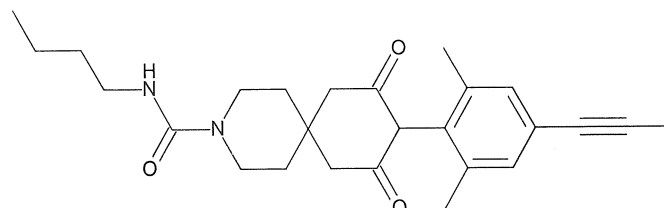
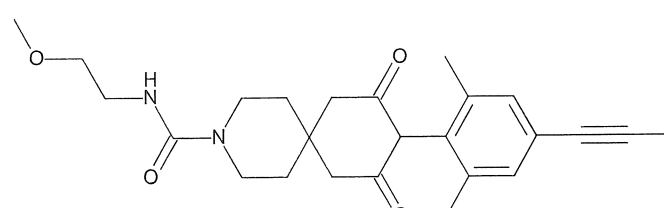
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A209		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 8,12 (br d, J = 3,8Hz, 1H), 7,82 - 7,74 (m, 1H), 7,04 (s, 2H), 7,02 - 6,90 (m, 2H), 5,13 (s, 2H), 3,68 - 3,57 (m, 4H), 2,64 (s, 4H), 2,03 - 2,01 (m, 6H), 1,99 (s, 3H), 1,85 - 1,79 (m, 2H), 1,73 - 1,67 (m, 2H)
A210		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 1,65 - 1,78 (m, 4H) 1,85 (s, 3H) 1,91 (s, 3H) 1,97 - 2,04 (m, 10 H) 2,60 (s, 4H) 3,54 - 3,69 (m, 4H) 4,70 (s, 2H) 7,03 (s, 2H)

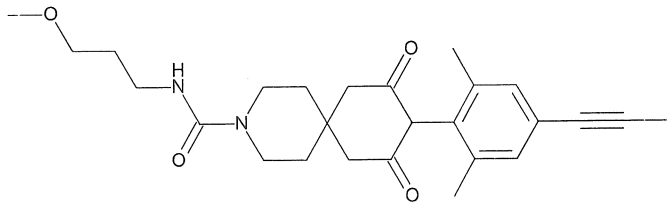
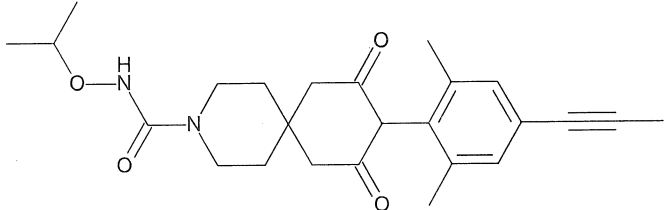
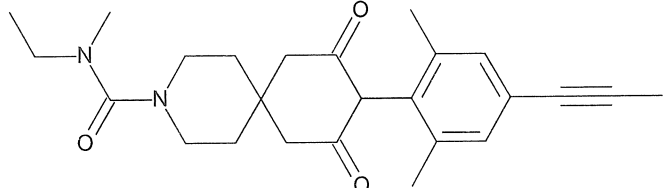
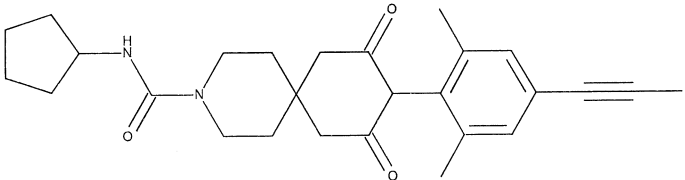
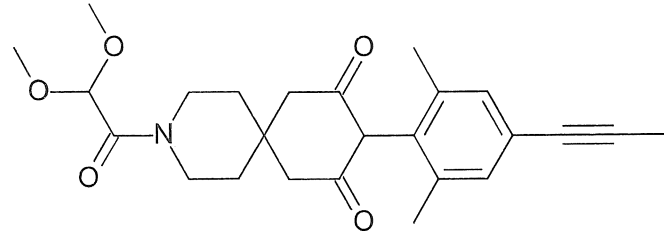
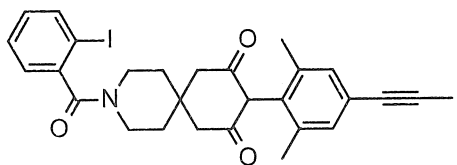
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A211		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 1,35 (d, J=6,72Hz, 3H) 1,71 (dt, J=18,13, 5,73Hz, 4H) 2,00 (d, J=8,07Hz, 9H) 2,61 (d, J=4,89Hz, 4H) 3,55 - 3,76 (m, 4H) 3,86 - 3,96 (m, 1H) 3,98 - 4,08 (m, 1H) 4,41 (d, J=6,72Hz, 1H) 5,17 (dq, J=10,39, 1,39Hz, 1H) 5,29 (dq, J=17,25, 1,67Hz, 1H) 5,93 (dd, J=17,24, 10,39Hz, 1H) 7,04 (s, 2H).

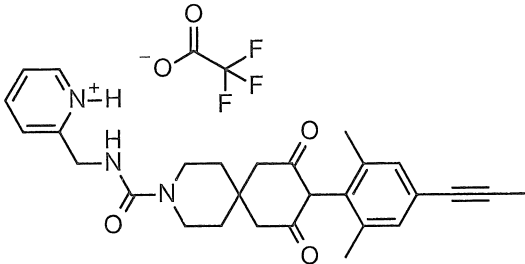
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A212		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 1,16 (d, J=6,11Hz, 7 H) 1,32 (d, J=6,72Hz, 3H) 1,64 - 1,79 (m, 4H) 2,00 (d, J=8,80Hz, 10 H) 2,62 (d, J=4,77Hz, 4H) 3,55 - 3,84 (m, 6H) 4,45 (q, J=6,72Hz, 1H) 7,04 (s, 2H)
A213		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 1,34 (d, J=6,72Hz, 3H) 1,64 - 1,81 (m, 4H) 1,95 - 2,05 (m, 9H) 2,62 (d, J=8,31Hz, 4H) 3,35 (s, 3H) 3,50 - 3,76 (m, 9H) 4,41 (d,

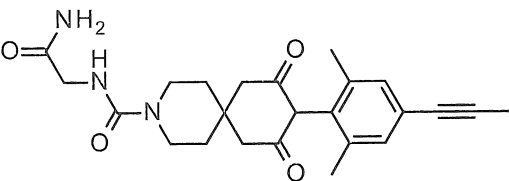
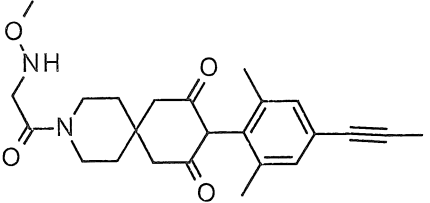
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		J=6,72Hz, 1H) 7,04 (s, 2H)
A214		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 1,20 (t, J=7,03Hz, 3H) 1,33 (d, J=6,72Hz, 3H) 1,64 - 1,79 (m, 4H) 2,00 (d, J=8,44Hz, 9H) 2,62 (d, J=5,01Hz, 4H) 3,39 - 3,55 (m, 2H) 3,57 - 3,75 (m, 4H) 4,35 (d, J=6,72Hz, 1H) 7,04 (s, 2H).
A215		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 1,35 (d, J=6,72Hz, 3H) 1,64 - 1,81 (m, 4H) 2,00 (d, J=8,44Hz, 9H) 2,62 (d,

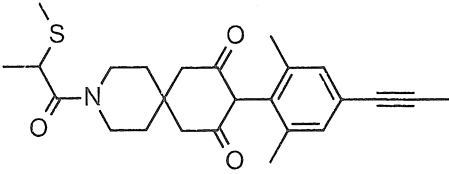
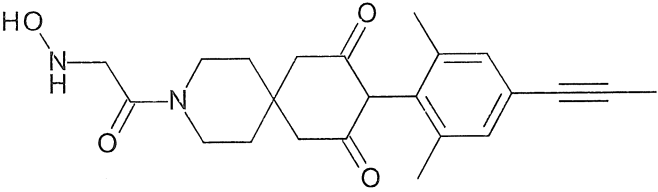
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		J=9,17Hz, 4H) 3,54 - 3,80 (m, 4H) 4,07 - 4,28 (m, 2H) 4,63 (d, J=6,72Hz, 1H) 7,04 (s, 2H).
A216		LCMS M+H: 431
A217		LCMS M+H: 449
A218		LCMS M+H: 479
A219		LCMS M+H: 411

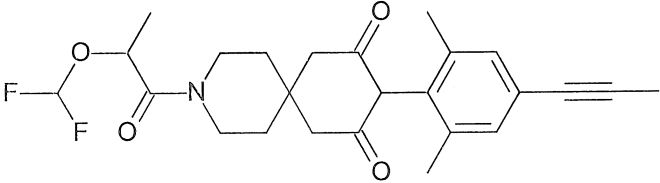
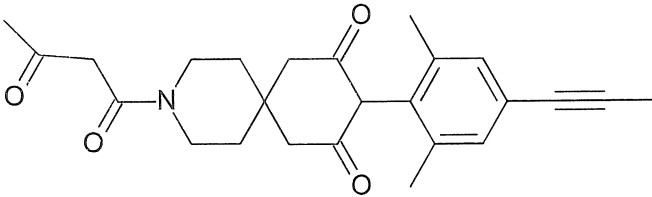
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A220		LCMS M+H: 475
A221		LCMS M+H: 453
A222		LCMS M+H: 407
A223		LCMS M+H: 423
A224		LCMS M+H: 423
A225		LCMS M+H: 425

CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A226		LCMS M+H: 439
A227		LCMS M+H: 425
A228		LCMS M+H: 409
A229		LCMS M+H: 435
A230		LCMS M+H: 426
A231		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 7,91 (dd, J = 0,8,

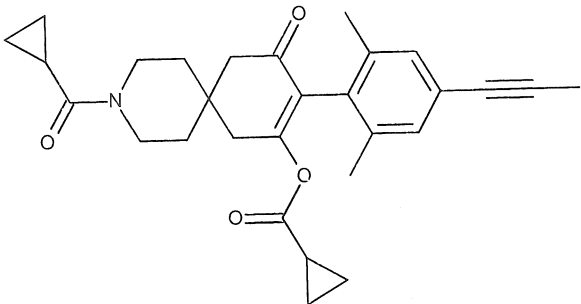
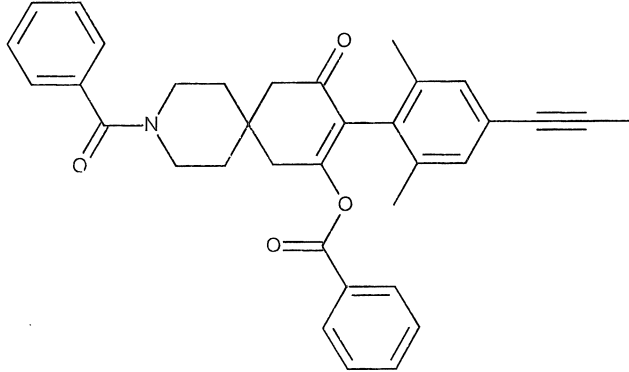
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		8,0Hz, 1H), 7,48 (dt, J = 1,0, 7,5Hz, 1H), 7,28 (dd, J = 1,5, 7,6Hz, 1H), 7,17 (dt, J = 1,7, 7,7Hz, 1H), 7,03 (s, 1H), 7,01 (s, 1H), 3,83 (t, J = 5,7Hz, 2H), 2,64 - 2,64 (m, 1H), 2,68 - 2,50 (m, 3H), 2,03 (s, 3H), 2,00 - 1,98 (m, 3H), 1,97 - 1,93 (m, 3H), 1,90 - 1,74 (m, 3H), 1,70 - 1,61 (m, 1H)
A232		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 8,69 (d, 1H), 8,45 (td, 1H), 7,91 (d, 1H), 7,85 (t, 1H), 7,04 (s, 2H), 4,63 (s, 2H), 3,52 – 3,50 (m,

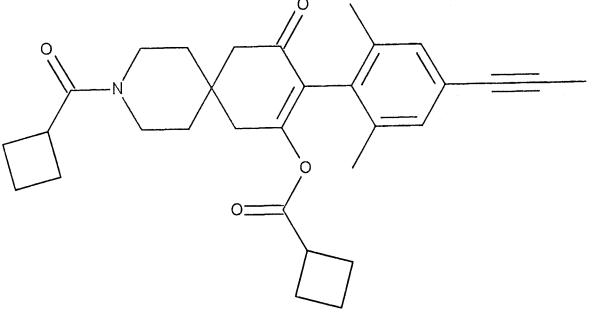
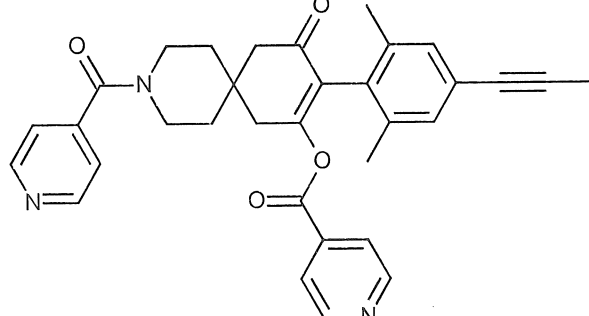
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
		4H), 2,61 (s, 4H), 2,01 – 1,99 (m, 9H), 1,76 – 1,67 (m, 4H)
A233		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 7,03 (s, 2H), 3,78 (s, 2H), 3,54 – 3,42 (m, 4H), 2,60 (s, 4H), 2,01 – 1,99 (m, 9H), 1,76 – 1,64 (m, 4H)
A234		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 7,04 (s, 2H), 4,15 (s, 2H), 3,76 (s, 3H), 3,70 - 3,63 (m, 2H), 3,54 - 3,49 (m, 2H), 2,62 (s, 4H), 2,01 (s, 6H), 1,99 (s, 3H), 1,80 - 1,74 (m, 2H), 1,72 - 1,67 (m, 2H)

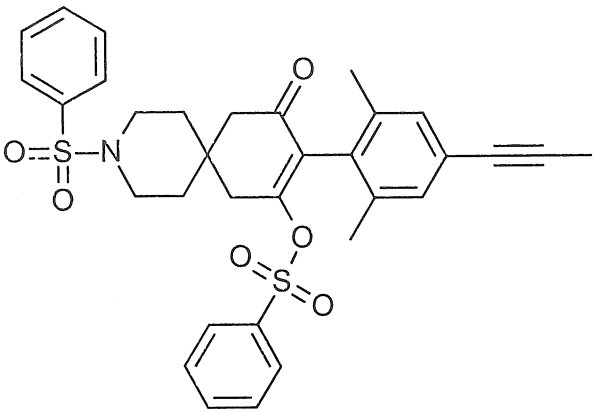
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A235		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 7,05 - 7,01 (m, 2H), 3,88 - 3,81 (m, 1H), 3,80 - 3,69 (m, 2H), 3,61 - 3,48 (m, 2H), 2,64 - 2,56 (m, 4H), 2,05 (s, 3H), 2,03 - 2,00 (m, 6H), 1,99 (s, 3H), 1,83 - 1,61 (d, 3H), 1,43 - 1,39 (m, 4H)
A236		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 1,65 - 1,79 (m, 4H) 1,95 - 2,02 (m, 10 H) 2,55 (s, 2H) 2,82 (s, 2H) 3,42 - 3,65 (m, 3H) 3,71 (s, 2H) 3,73 (s, 3H) 3,75 - 3,86 (m, 1H) 7,01 (s, 2H)

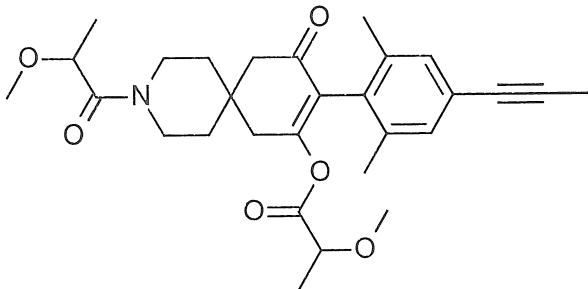
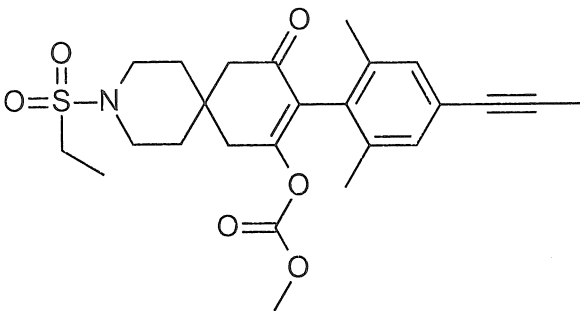
CMP	Cấu trúc	NMR hoặc LCMS
A237		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 1,44 (d, J=6,60Hz, 3H) 1,64 - 1,81 (m, 4H) 2,00 (d, J=8,56Hz, 9H) 2,62 (d, J=5,75Hz, 4H) 3,55 - 3,79 (m, 4H) 5,14 (d, J=6,72Hz, 1H) 6,25 - 6,65 (m, 1H) 7,04 (s, 2H)
A238		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 7,03 (s, 2H), 3,69 – 3,63 (m, 2H), 3,51 – 3,45 (m, 2H), 2,61 (s, 4H), 2,23 (s, 3H), 2,03 – 1,98 (m, 9H), 1,79 – 1,66 (m, 4H)

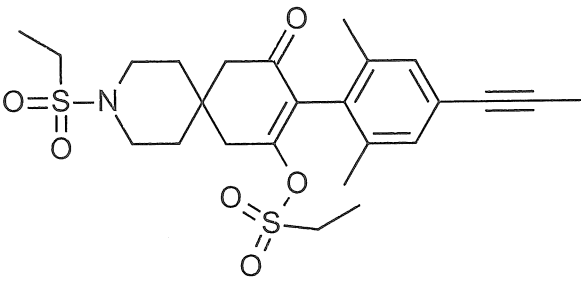
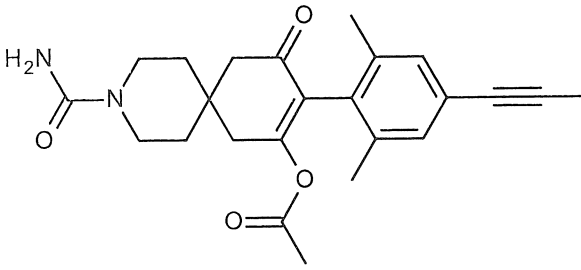
Bảng 2

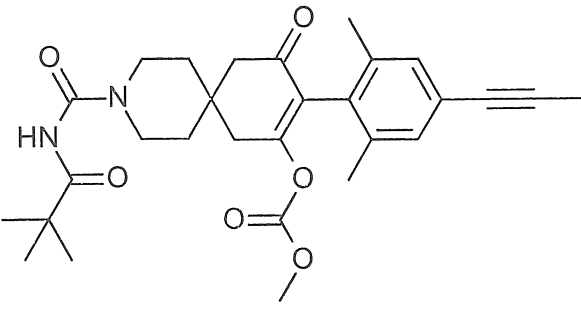
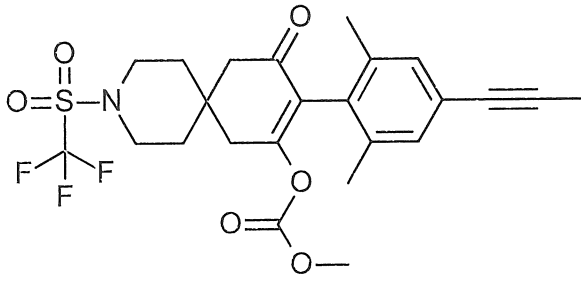
CMP	Cấu trúc	NMR
P1		¹H NMR (400MHz, CDCl₃) δ = 7,12 - 6,95 (m, 2H), 3,81 - 3,52 (m, 4H), 2,79 - 2,57 (m, 4H), 2,07 - 1,98 (m, 9H), 1,90 - 1,66 (m, 5H), 1,44 - 1,37 (m, 1H), 1,01 - 0,93 (m, 2H), 0,81 - 0,67 (m, 6H)
P2		¹H NMR (400MHz, CDCl₃) δ = 7,75 - 7,68 (m, 2H), 7,60 - 7,49 (m, 1H), 7,43 - 7,36 (m, 7H), 7,07 - 6,98 (m, 2H), 3,98 - 3,73 (m, 2H), 3,63 - 3,44 (m, 2H), 3,00 - 2,88 (m, 2H), 2,73 - 2,59 (m,

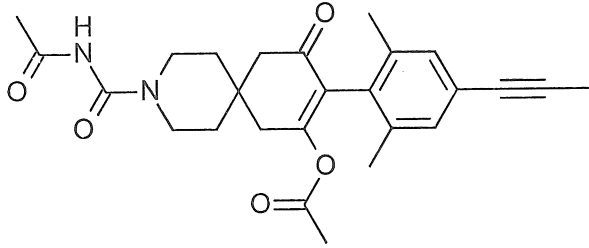
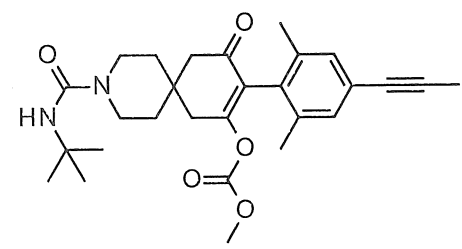
CMP	Cấu trúc	NMR
		2H), 2,14 - 2,04 (m, 6H), 2,02 - 1,95 (m, 3H), 1,92 - 1,70 (m, 4H)
P3		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 7,04 - 6,96 (m, 2H), 3,85 - 3,73 (m, 1H), 3,57 - 3,38 (m, 4H), 3,09 - 2,94 (m, 1H), 2,86 - 2,80 (m, 2H), 2,65 - 2,56 (m, 2H), 2,35 - 2,12 (m, 4H), 2,04 - 1,99 (m, 10H), 1,99 - 1,92 (m, 2H), 1,91 - 1,56 (m, 10H)
P4		1H NMR (400MHz, CDCl₃) δ = 8,77 - 8,60 (m, 4H), 7,53 - 7,45 (m, 2H), 7,32 - 7,29 (m, 2H), 7,08 -

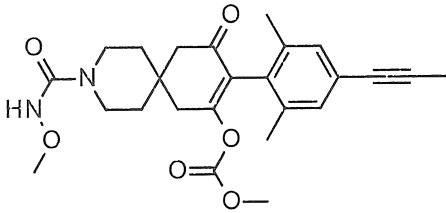
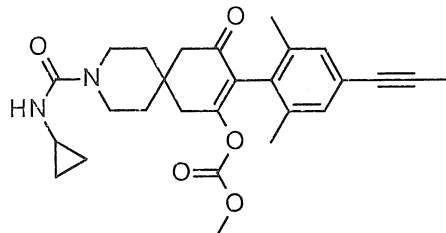
CMP	Cấu trúc	NMR
		6,98 (m, 2H), 3,99 - 3,72 (m, 2H), 3,51 - 3,29 (m, 2H), 2,95 - 2,90 (m, 2H), 2,76 - 2,66 (m, 2H), 2,11 - 2,01 (m, 6H), 2,00 - 1,97 (m, 3H), 1,94 - 1,68 (m, 4H)
P5		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 7,87 - 7,79 (m, 2H), 7,73 - 7,60 (m, 4H), 7,41 - 7,26 (m, 4H), 6,92 - 6,84 (m, 2H), 3,23 - 3,14 (m, 2H), 3,07 - 2,98 (m, 2H), 2,90 - 2,80 (m, 2H), 2,55 - 2,44 (m, 2H), 2,04 - 2,01 (m, 3H), 1,91 - 1,87 (m, 6H), 1,85 - 1,72 (m, 4H)

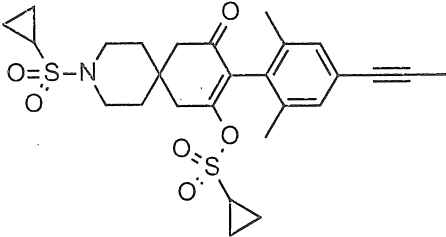
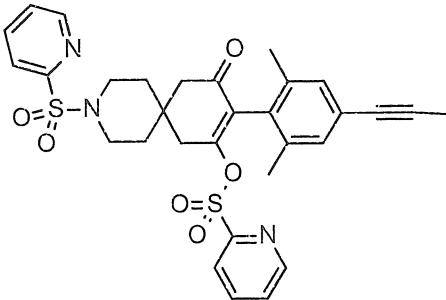
CMP	Cấu trúc	NMR
P6		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 1,32 (d, J=6,72Hz, 3H) 1,63 - 1,82 (m, 4H) 1,99 (s, 3H) 2,01 (s, 6H) 2,62 (d, J=4,65Hz, 4H) 3,55 - 3,82 (m, 4H) 4,28 (d, J=6,72Hz, 1H) 7,04 (s, 2H)
P7		¹H NMR (400MHz, CDCl₃) δ = 7,12 - 7,00 (m, 2H), 3,72 - 3,59 (m, 3H), 3,42 - 3,29 (m, 4H), 3,02 - 2,92 (m, 2H), 2,79 - 2,74 (m, 2H), 2,66 - 2,52 (m, 2H), 2,02 (m, 9H), 1,91 - 1,74 (m, 4H), 1,41 - 1,30 (m, 3H).

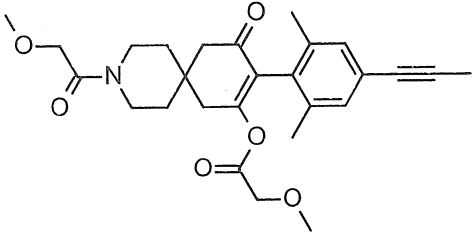
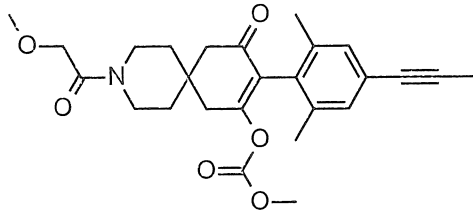
CMP	Cấu trúc	NMR
P8		1H NMR (400MHz, CDCl₃) δ = 7,12 - 7,07 (m, 2H), 3,47 - 3,28 (m, 4H), 3,02 - 2,93 (m, 4H), 2,71 - 2,63 (m, 2H), 2,62 - 2,54 (m, 2H), 2,10 - 1,98 (m, 9H), 1,90 - 1,74 (m, 4H), 1,44 - 1,33 (m, 3H), 1,00 - 0,88 (m, 3H)
P9		1H NMR (400MHz, CDCl₃) δ = 1,62 - 1,84 (m, 5 H) 1,87 (s, 3H) 1,99 - 2,02 (m, 6H) 2,02 - 2,04 (m, 3H) 2,60 (s, 2H) 2,72 (s, 2H) 3,34 - 3,56 (m, 4H) 4,58 (s, 2H) 7,07 (s, 2H)

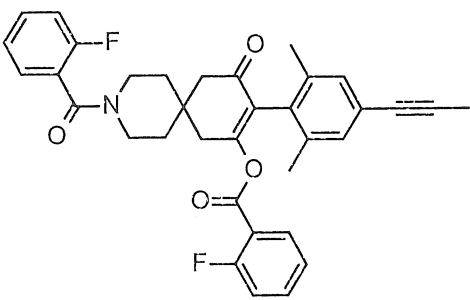
CMP	Cấu trúc	NMR
P10		1H NMR (400MHz, CDCl₃) δ = 7,09 - 7,03 (m, 2H), 3,73 - 3,63 (m, 3H), 3,60 - 3,39 (m, 4H), 2,82 - 2,73 (m, 2H), 2,65 - 2,59 (m, 2H), 2,06 - 2,00 (m, 9H), 1,92 - 1,71 (m, 4H), 1,27 - 1,22 (m, 9H)
P11		1H NMR (400MHz, CDCl₃) δ = 7,08 (s, 2H), 3,70 (s, 3H), 3,66 - 3,35 (m, 4H), 2,80 (s, 2H), 2,67 - 2,59 (m, 2H), 2,04 - 1,99 (m, 9H), 1,97 - 1,75 (m, 4H)

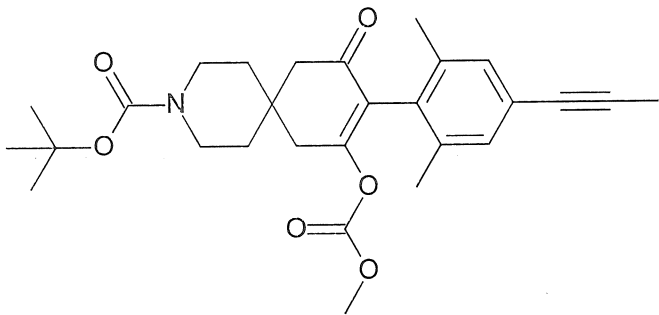
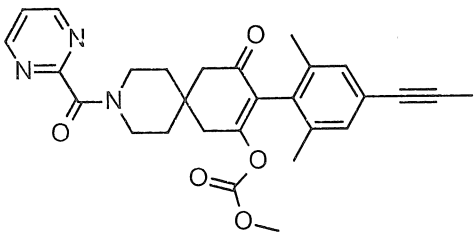
CMP	Cấu trúc	NMR
P12		¹H NMR (400MHz, CDCl₃) δ = 1,68 - 1,86 (m, 5 H) 1,86 - 1,89 (m, 3H) 1,98 - 2,07 (m, 9H) 2,34 (s, 3H) 2,62 (s, 2H) 2,74 (s, 2H) 3,44 - 3,63 (m, 4H) 7,07 (s, 2H) 8,13 (s, 1H)
P13		¹H NMR (400MHz, CDCl₃) δ = 7,10 - 7,01 (m, 2H), 4,37 - 4,28 (m, 1H), 3,70 - 3,63 (m, 3H), 3,47 - 3,38 (m, 2H), 3,36 - 3,26 (m, 2H), 2,77 - 2,72 (m, 2H), 2,63 - 2,53 (m, 2H), 2,05 - 1,98 (m, 9H), 1,84 - 1,62 (m, 4H), 1,39 - 1,31 (m, 9H)

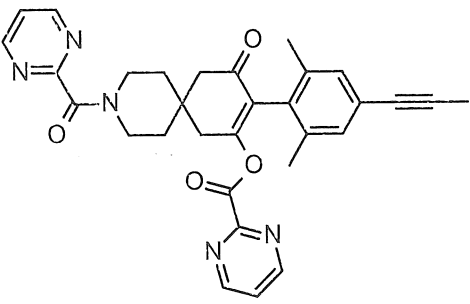
CMP	Cấu trúc	NMR
P14		1H NMR (400MHz, CDCl3) δ = 7,07 (s, 2H), 7,07 - 7,05 (m, 1H), 3,72 (s, 3H), 3,69 (s, 3H), 3,56 - 3,34 (m, 4H), 2,77 (s, 2H), 2,61 (s, 2H), 2,06 - 1,98 (m, 9H), 1,84 - 1,63 (m, 4H).
P15		1H NMR (400MHz, CDCl3) δ = 7,09 - 7,03 (m, 2H), 3,70 - 3,60 (m, 3H), 3,47 - 3,30 (m, 4H), 2,81 - 2,72 (m, 2H), 2,68 - 2,62 (m, 1H), 2,60 - 2,54 (m, 2H), 2,06 - 1,98 (m, 9H), 1,79 - 1,63 (m, 4H), 0,78 - 0,70 (m, 2H), 0,49 - 0,41 (m, 2H)

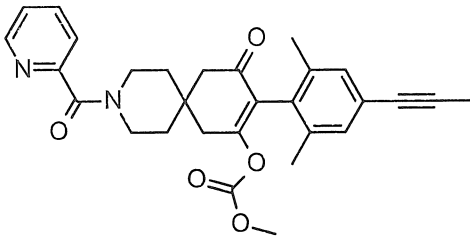
CMP	Cấu trúc	NMR
P16		1H NMR (400MHz, CDCl3) δ = 0,73 - 0,81 (m, 2H) 0,94 - 1,06 (m, 4H) 1,14 - 1,22 (m, 2H) 1,79 (s, 5 H) 2,03 (s, 3H) 2,07 (s, 6H) 2,23. - 2,32 (m, 1H) 2,62 (s, 2H) 2,92 (s, 2H) 3,30 - 3,47 (m, 4H) 7,10 (s, 2H)
P17		1H NMR (400MHz, CDCl3) δ = 1,73 - 1,83 (m, 2H) 1,89 (s, 8 H) 2,04 (d, J=3,79Hz, 4H) 2,55 (s, 2H) 3,01 (s, 2H) 3,48 (t, J=5,62Hz, 4H) 6,80 (s, 2H) 7,31 (dt, J=7,92, 0,93Hz, 1H) 7,47 - 7,56 (m, 2H) 7,72 (td, J=7,79, 1,77Hz,

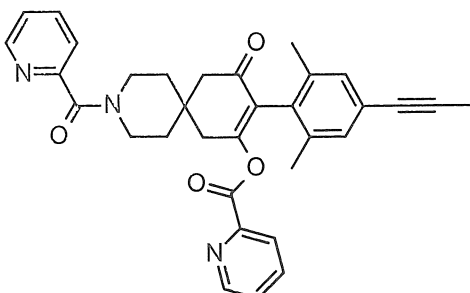
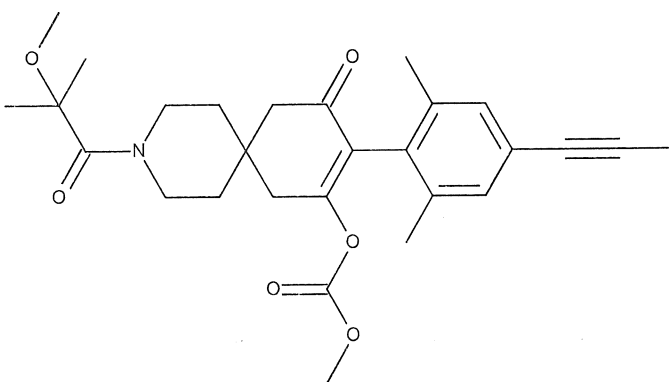
CMP	Cấu trúc	NMR
		1H) 7,90 - 7,99 (m, 2H) 8,51 - 8,55 (m, 1H) 8,73 - 8,79 (m, 1H).
P18		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 7,04 - 7,00 (m, 2H), 4,18 - 4,12 (m, 2H), 3,86 - 3,83 (m, 2H), 3,82 - 3,74 (m, 1H), 3,59 - 3,43 (m, 3H), 3,41 - 3,38 (m, 3H), 3,10 - 3,05 (m, 3H), 2,91 - 2,85 (m, 2H), 2,69 - 2,62 (m, 2H), 2,06 - 1,97 (m, 9H), 1,90 - 1,59 (m, 4H)
P19		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 7,03 - 7,00 (m, 2H), 4,18 - 4,14 (m, 2H), 3,86 -

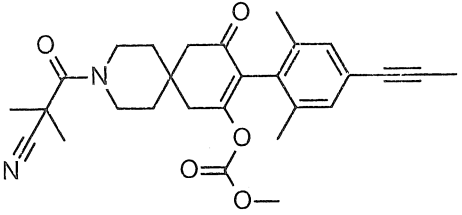
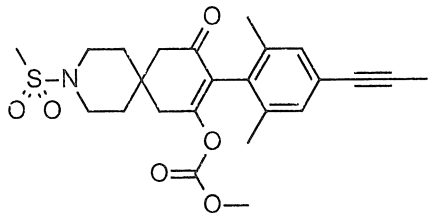
CMP	Cấu trúc	NMR
		3,77 (m, 1H), 3,69 - 3,66 (m, 3H), 3,60 - 3,44 (m, 3H), 3,42 - 3,38 (m, 3H), 2,93 - 2,88 (m, 2H), 2,66 - 2,63 (m, 2H), 2,05 - 1,97 (m, 9H), 1,90 - 1,59 (m, 4H)
P20		1H NMR (400MHz, CDCl ₃) δ = 7,56 - 7,48 (m, 2H), 7,43 - 7,36 (m, 2H), 7,25 - 7,19 (m, 2H), 7,15 - 7,09 (m, 2H), 7,06 - 7,03 (m, 1H), 7,03 - 7,00 (m, 1H), 4,04 - 3,91 (m, 1H), 3,86 - 3,72 (m, 1H), 3,48 - 3,38 (m, 2H), 2,95 - 2,88 (m, 2H), 2,71 - 2,67 (m, 2H), 2,13 - 2,07 (m, 3H), 2,04 -

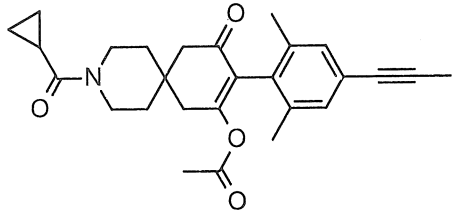
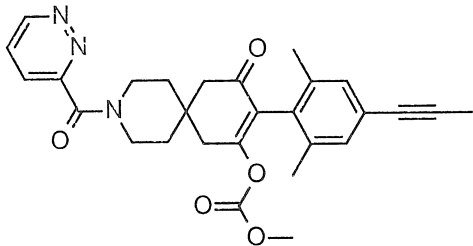
CMP	Cấu trúc	NMR
		2,02 (m, 3H), 2,00 - 1,96 (m, 3H), 1,93 - 1,70 (m, 4H)
P21		¹ H NMR (400MHz, CDCl ₃) δ = 7,11 - 7,05 (m, 2H), 3,70 - 3,63 (m, 3H), 3,59 - 3,48 (m, 2H), 3,47 - 3,35 (m, 3H), 2,81 - 2,73 (m, 2H), 2,63 - 2,38 (m, 2H), 2,04 - 1,99 (m, 9H), 1,77 - 1,61 (m, 5H), 1,50 - 1,41 (m, 9H)
P22		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 8,89 (d, J=5,0Hz, 2H), 7,56 (t, J=5,0Hz, 1H), 7,02 (s, 1H), 7,00 (s, 1H), 4,03 (ddd, J=4,4, 6,1,

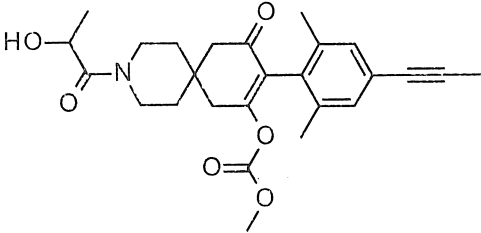
CMP	Cấu trúc	NMR
		13,4Hz, 1H), 3,76 - 3,69 (m, 1H), 3,69 - 3,67 (m, 3H), 3,41 - 3,33 (m, 2H), 2,96 (d, J=1,5Hz, 2H), 2,68 (d, J=3,7Hz, 2H), 2,02 (s, 3H), 1,99 (s, 3H), 1,97 (s, 3H), 1,95 - 1,89 (m, 1H), 1,88 - 1,66 (m, 3H)
P23		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 8,92 - 8,83 (m, 2H), 7,60 - 7,50 (m, 1H), 7,05 - 6,97 (m, 2H), 4,08 - 3,96 (m, 1H), 3,75 - 3,65 (m, 4H), 3,42 - 3,34 (m, 2H), 2,99 - 2,84 (m, 2H), 2,70 - 2,63 (m, 2H), 2,04 - 2,01 (m, 3H),

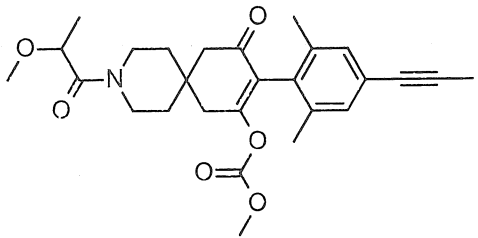
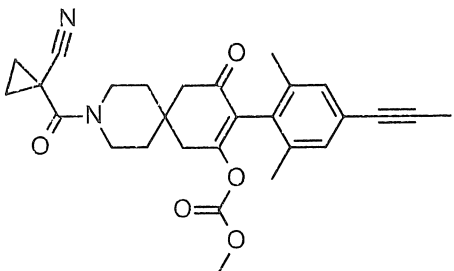
CMP	Cấu trúc	NMR
		2,01 - 1,99 (m, 3H), 1,98 - 1,95 (m, 3H), 1,95 - 1,90 (m, 1H), 1,86 - 1,64 (m, 3H)
P24		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 8,64 - 8,57 (m, 1H), 8,02 - 7,94 (m, 1H), 7,64 - 7,56 (m, 1H), 7,54 - 7,48 (m, 1H), 7,05 - 6,90 (m, 2H), 4,06 - 3,97 (m, 1H), 3,71 - 3,64 (m, 3H), 3,52 - 3,43 (m, 3H), 2,98 - 2,90 (m, 2H), 2,71 - 2,59 (m, 2H), 2,04 - 1,94 (m, 9H), 1,87 - 1,61 (m, 4H)

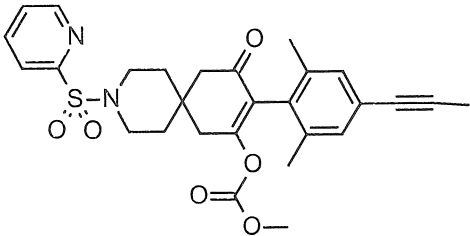
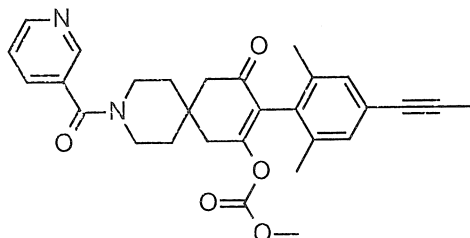
CMP	Cấu trúc	NMR
P25		¹H NMR (400MHz, CDCl₃) δ = 8,74 - 8,68 (m, 1H), 8,62 - 8,54 (m, 1H), 7,84 - 7,71 (m, 2H), 7,73 - 7,59 (m, 2H), 7,52 - 7,42 (m, 1H), 7,39 - 7,27 (m, 1H), 7,04 - 6,92 (m, 2H), 4,07 - 3,96 (m, 1H), 3,80 - 3,56 (m, 3H), 3,02 - 2,89 (m, 2H), 2,74 - 2,66 (m, 2H), 2,16 - 1,98 (m, 9H), 1,97 - 1,70 (m, 4H)
P26		¹H NMR (400MHz, CDCl₃) δ = 7,08 (s, 2H), 4,18 - 4,04 (m, 1H), 4,01 - 3,89 (m, 1H), 3,84 - 3,72 (m, 1H), 3,68 (s, 3H), 3,65 - 3,53 (m, 1H), 3,24 (s,

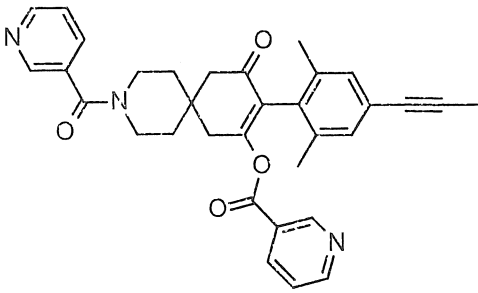
CMP	Cấu trúc	NMR
		3H), 2,80 (s, 2H), 2,62 (br d, J=2,6Hz, 2H), 2,03 (s, 9H), 1,84 - 1,64 (m, 4H), 1,45 (s, 6H)
P27		¹ H NMR (400MHz, CDCl ₃) δ = 7,08 (s, 2H), 3,93 - 3,70 (m, 4H), 3,70 - 3,67 (m, 3H), 2,82 (s, 2H), 2,64 (s, 2H), 2,03 (s, 9H), 1,95 - 1,71 (m, 4H), 1,62 (s, 6H)
P28		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 7,04 - 6,99 (m, 2H), 3,70 - 3,64 (m, 3H), 3,39 - 3,32 (m, 2H), 3,29 - 3,22 (m, 2H), 2,91 - 2,88 (m, 2H), 2,87 -

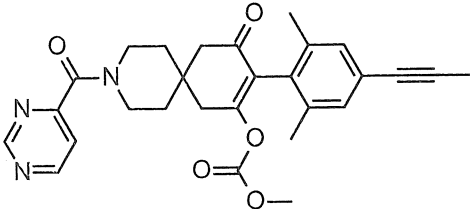
CMP	Cấu trúc	NMR
		2,83 (m, 3H), 2,67 - 2,62 (m, 2H), 2,02 - 2,00 (m, 6H), 2,00 (s, 3H), 1,95 - 1,86 (m, 2H), 1,83 - 1,74 (m, 2H)
P29		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 7,02 (s, 2H), 3,96-3,68 (m, 3H), 3,56-3,45 (m, 1H), 2,88 (s, 2H), 2,65 (s, 2H), 2,01 (s, 6H), 2,00 (s, 3H), 1,98-1,96 (m, 1H), 1,94-1,89 (m, 1H), 1,88 (s, 3H), 1,83-1,54 (m, 3H), 0,89-0,78 (m, 4H)
P30		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 9,28 - 9,22 (m, 1H), 7,92 - 7,86

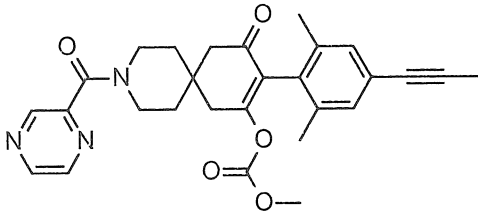
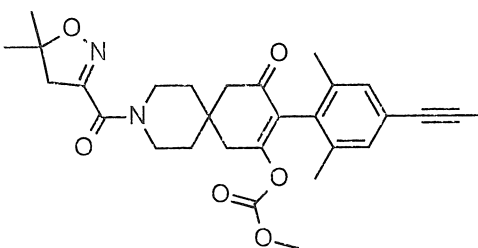
CMP	Cấu trúc	NMR
		(m, 1H), 7,85 - 7,79 (m, 1H), 7,05 - 6,96 (m, 2H), 4,07 - 3,97 (m, 1H), 3,79 - 3,69 (m, 1H), 3,69 - 3,64 (m, 3H), 3,57 - 3,48 (m, 2H), 2,97 - 2,90 (m, 2H), 2,70 - 2,64 (m, 2H), 2,02 (s, 3H), 1,99 (s, 3H), 1,97 (s, 3H), 1,95 - 1,68 (m, 4H)
P31		¹ H NMR (400MHz, CDCl ₃) δ = 7,08 (s, 2H), 4,47 (m, 1H), 3,84 - 3,82 (m, 1H), 3,72 - 3,69 (m, 1H), 3,69 (s, 3H), 3,45 (m, 2H), 2,82 - 2,79 (m, 2H), 2,68 - 2,58 (m, 2H), 2,03 (m, 2H), 2,03 (m, 9H), 1,86 -

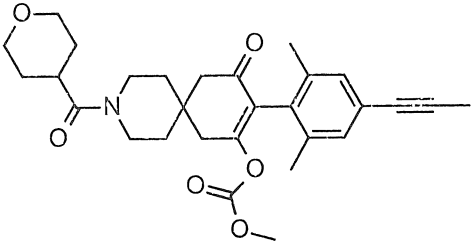
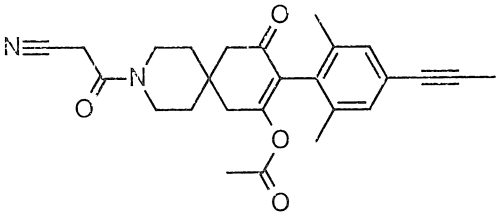
CMP	Cấu trúc	NMR
		1,70 (m, 4H), 1,33 (d, 3H)
P32		¹ H NMR (400MHz, CDCl ₃) δ = 7,08 (s, 2H), 4,16 (q, 1H), 3,84 – 3,52 (m, 4H), 3,69 (s, 3H), 3,35 (s, 3H), 2,80 (s, 2H), 2,63 (s, 2H), 2,03 (s, 9H), 1,91 – 1,63 (m, 4H), 1,40 (d, 3H)
P33		¹ H NMR (400MHz, CDCl ₃) δ = 7,08 (s, 2H), 3,96 - 3,54 (m, 4H), 3,69 (s, 3H), 2,82 (s, 2H), 2,64 (s, 2H), 2,03 (s, 9H), 1,90 - 1,57 (m, 4H), 1,55 – 1,51 (m, 4H)

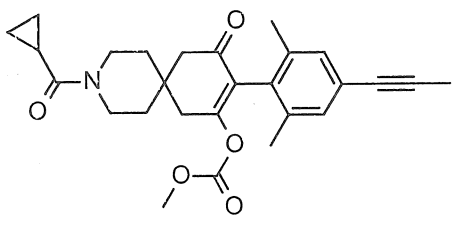
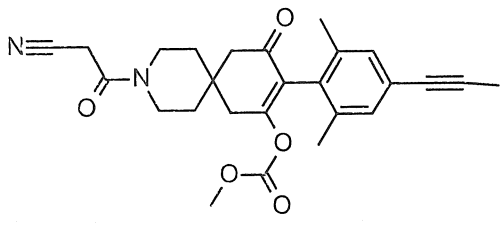
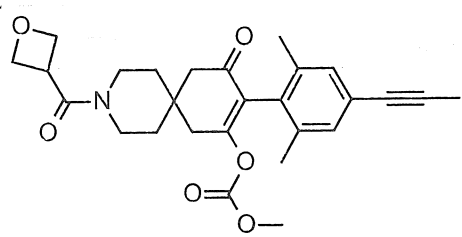
CMP	Cấu trúc	NMR
P34		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 8,76 - 8,71 (m, 1H), 8,11 - 8,05 (m, 1H), 8,00 - 7,95 (m, 1H), 7,68 - 7,62 (m, 1H), 7,02 - 6,92 (m, 2H), 3,68 - 3,60 (m, 3H), 3,49 - 3,41 (m, 2H), 3,39 - 3,33 (m, 2H), 2,80 - 2,74 (m, 2H), 2,58 - 2,51 (m, 2H), 2,00 - 1,98 (m, 3H), 1,98 - 1,95 (m, 6H), 1,90 - 1,80 (m, 2H), 1,77 - 1,68 (m, 2H)
P35		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 8,67 - 8,60 (m, 2H), 7,95 - 7,89 (m, 1H), 7,57 - 7,51 (m, 1H), 7,03 - 6,99 (m,

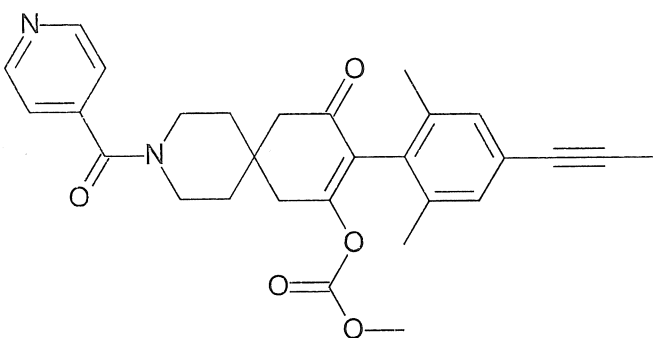
CMP	Cấu trúc	NMR
		2H), 3,70 - 3,67 (m, 3H), 3,56 - 3,46 (m, 2H), 2,99 - 2,89 (m, 2H), 2,81 - 2,72 (m, 2H), 2,71 - 2,63 (m, 2H), 2,02 (br s, 3H), 2,00 - 1,96 (m, 6H), 1,88 - 1,76 (m, 2H), 1,76 - 1,63 (m, 2H)
P36		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 8,86 - 8,79 (m, 2H), 8,79 - 8,71 (m, 2H), 8,27 - 8,21 (m, 1H), 8,18 - 8,10 (m, 1H), 7,84 - 7,74 (m, 1H), 7,57 - 7,49 (m, 1H), 7,01 - 6,92 (m, 2H), 4,10 - 3,98 (m, 1H), 3,80 - 3,68 (m, 1H), 3,60 - 3,48 (m, 2H), 3,12 - 3,05 (m, 2H), 2,80 -

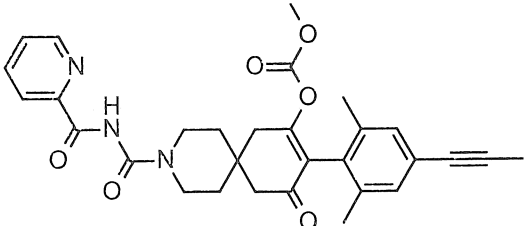
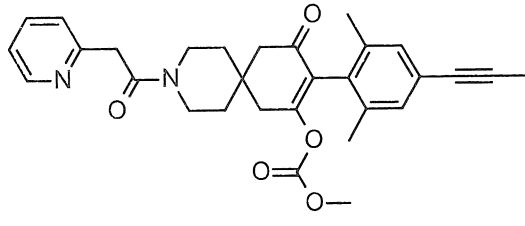
CMP	Cấu trúc	NMR
		2,71 (m, 2H), 2,13 - 2,02 (m, 6H), 2,01 - 1,96 (m, 1H), 1,96 - 1,93 (m, 3H), 1,92 - 1,73 (m, 3H)
P37		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 9,22 (d, J=1,3Hz, 1H), 8,94 (d, J=5,1Hz, 1H), 7,66 (dd, J=1,5, 5,1Hz, 1H), 7,01 (d, J=5,5Hz, 2H), 4,05 - 3,96 (m, 1H), 3,74 - 3,64 (m, 4H), 3,56 - 3,46 (m, 2H), 2,95 (d, J=1,3Hz, 2H), 2,68 (d, J=2,2Hz, 2H), 2,02 (s, 3H), 1,99 (s, 3H), 1,98 (s, 3H), 1,95 - 1,69 (m, 4H)

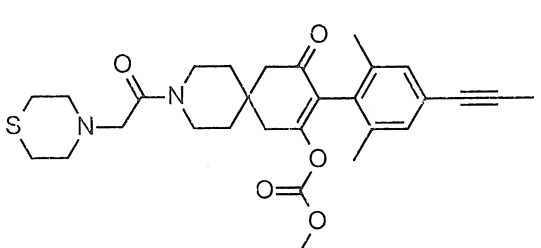
CMP	Cấu trúc	NMR
P38		¹H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 8,84 (d, J=1,5Hz, 1H), 8,69 (d, J=2,7Hz, 1H), 8,65 (dd, J=1,6, 2,6Hz, 1H), 7,02 (s, 1H), 7,00 (s, 1H), 4,07 - 3,98 (m, 1H), 3,77 - 3,69 (m, 1H), 3,65 - 3,52 (m, 2H), 2,96 (s, 2H), 2,69 (d, J=2,2Hz, 2H), 2,02 (s, 3H), 2,00 (s, 3H), 1,98 (s, 3H), 1,95 - 1,68 (m, 4H)
P39		¹H NMR (400MHz, CDCl₃) δ = 1,45 (s, 6H) 1,68 - 1,90 (m, 4H) 1,99 - 2,05 (m, 9H) 2,63 (d, J=1,83Hz, 2H)

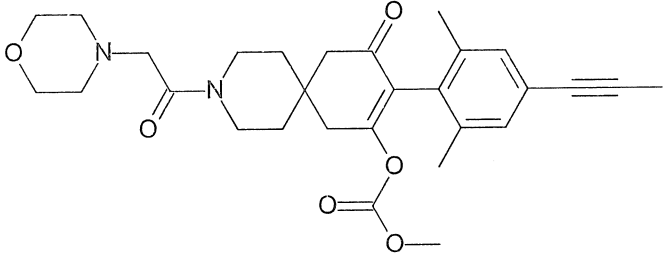
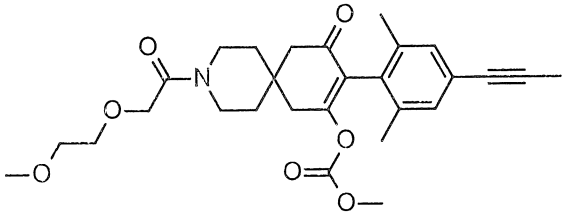
CMP	Cấu trúc	NMR
		2,80 (s, 2H) 3,06 (d, J=3,55Hz, 2H) 3,68 (s, 7 H) 7,07 (s, 2H)
P40		¹H NMR (400MHz, CDCl₃) δ = 1,56 - 1,77 (m, 6H) 1,92 (br d, J=12,59Hz, 3H) 2,03 (s, 9H) 2,62 (d, J=7,58Hz, 2H) 2,79 (s, 3H) 3,45 (td, J=11,77, 2,02Hz, 2H) 3,51 - 3,65 (m, 3H) 3,68 (s, 3H) 3,71 - 3,80 (m, 1H) 4,02 (br dd, J=11,55, 1,90Hz, 2H) 7,08 (s, 2H).
P41		LCMS M+H: 433

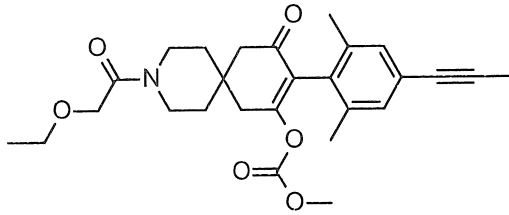
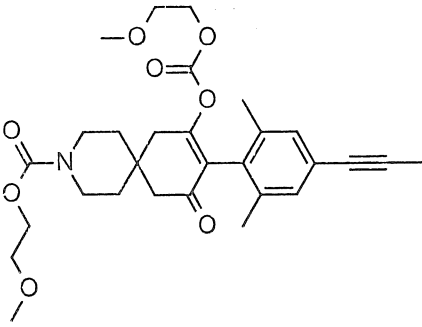
CMP	Cấu trúc	NMR
P42		¹H NMR (400MHz, CDCl₃) δ = 7,13-7,05(m, 2H), 2,84-2,76 (m, 2H), 2,68-2,59 (m, 2H), 2,06-2,02 (m, 9H), 1,93-1,64(m, 5H), 1,05-0,93(m, 2H), 0,83-0,71(m, 2H)
P43		¹H NMR (400MHz, CDCl₃) δ = 7,08(s, 2H), 3,75-3,58 (m, 5H), 3,52-3,49 (m, 4H), 2,80(s, 3H), 2,63(s, 2H), 2,03-2,02 (m, 9H), 1,95-1,69 (m, 4H)
P44		¹H NMR (400MHz, CDCl₃) δ = 7,04 - 6,99 (m, 2H), 4,86 - 4,79 (m,

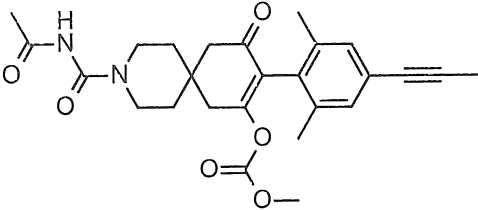
CMP	Cấu trúc	NMR
		4H), 4,24 - 4,14 (m, 1H), 3,88 - 3,69 (m, 2H), 3,69 - 3,65 (m, 3H), 3,62 - 3,36 (m, 2H), 2,93 - 2,88 (m, 2H), 2,67 - 2,61 (m, 2H), 2,02 - 2,00 (m, 6H), 2,00 - 1,99 (m, 3H), 1,85 - 1,75 (m, 2H), 1,68 - 1,59 (m, 2H)
P45		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 8,68 - 8,63 (m, 2H), 7,49 - 7,43 (m, 2H), 6,97 (br d, J = 5,9Hz, 2H), 4,04 - 3,94 (m, 1H), 3,84 - 3,69 (m, 1H), 3,69 - 3,66 (m, 3H), 3,50 - 3,37 (m, 2H), 2,97 - 2,91 (m, 2H), 2,71 - 2,63 (m, 2H), 2,04 - 1,95

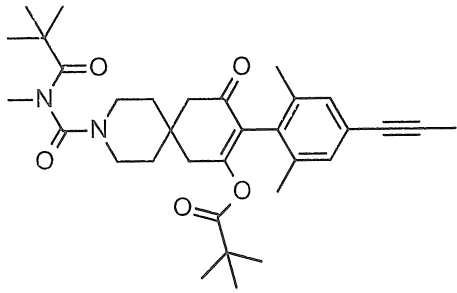
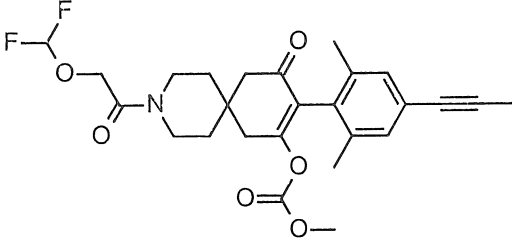
CMP	Cấu trúc	NMR
		(m, 9H), 1,95 - 1,87 (m, 1H), 1,85 - 1,74 (m, 2H), 1,73 - 1,61 (m, 1H)
P46		1H NMR (400MHz, CDCl₃) δ = 9,87(bs, 1H), 8,64-8,60 (m, 1H), 8,24(d, 1H), 7,92(dt, 1H), 7,56-7,50 (m, 1H), 7,08(s, 2H), 3,76-3,57 (m, 7H), 2,84(s, 2H), 2,66(s, 2H), 2,03(s, 9H), 1,93-1,76 (m, 4H)
P47		1H NMR (400MHz, Metanol-d₄) δ = 8,50 - 8,44 (m, 1H), 7,82 - 7,75 (m, 1H), 7,40 - 7,34 (m, 1H), 7,33 - 7,27 (m, 1H), 7,03 - 6,98

CMP	Cấu trúc	NMR
		(m, 2H), 3,99 - 3,94 (m, 1H), 3,89 - 3,80 (m, 1H), 3,76 - 3,69 (m, 1H), 3,69 - 3,64 (m, 3H), 3,65 - 3,56 (m, 1H), 3,56 - 3,46 (m, 1H), 2,91 - 2,84 (m, 2H), 2,66 - 2,57 (m, 2H), 2,08 - 1,96 (m, 9H), 1,83 - 1,74 (m, 2H), 1,67 - 1,55 (m, 2H)
P48		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 7,02 (s, 2H), 3,83 – 3,68 (m, 2H), 3,68 (s, 3H), 3,60 – 3,40 (m, 4H), 2,92 (s, 2H), 2,86 (br s, 4H), 2,74 – 2,73 (m, 4H), 2,65 (s, 2H), 2,03 – 1,98 (m, 9H), 1,86 – 1,60 (m, 4H)

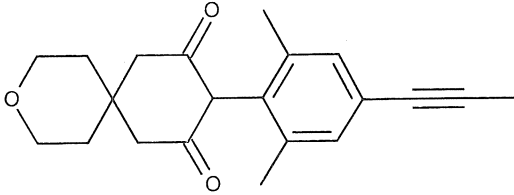
CMP	Cấu trúc	NMR
P49		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 7,04 - 7,00 (m, 2H), 4,32 - 4,27 (m, 2H), 4,12 - 3,79 (m, 5H), 3,70 - 3,66 (m, 3H), 3,44 (br s, 5H), 3,39 - 3,32 (m, 2H), 2,96 - 2,91 (m, 2H), 2,69 - 2,64 (m, 2H), 2,02 - 2,00 (m, 6H), 2,00 - 1,99 (m, 3H), 1,96 - 1,88 (m, 1H), 1,88 - 1,79 (m, 1H), 1,79 - 1,63 (m, 2H)
P50		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 7,02 (s, 2H), 4,24 (d, J = 1,7Hz, 2H), 3,87 - 3,72 (m, 1H), 3,68 - 3,64 (m, 5H), 3,61 - 3,55 (m, 3H), 3,55 -

CMP	Cấu trúc	NMR
		3,45 (m, 2H), 3,36 (s, 3H), 2,91 (s, 2H), 2,64 (s, 2H), 2,01 (s, 6H), 2,00 (s, 3H), 1,88 - 1,57 (m, 4H)
P51		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 7,02 (s, 2H), 4,19 (s, 2H), 3,83 - 3,77 (m, 1H), 3,67 (s, 3H), 3,63 - 3,46 (m, 5H), 2,90 (s, 2H), 2,64 (s, 2H), 2,01 (s, 6H), 2,00 (s, 3H), 1,88 - 1,76 (m, 2H), 1,74 - 1,59 (m, 2H)
P52		1H NMR (400MHz, Metanol-d4) δ = 7,02 (s, 2H), 4,22 - 4,15 (m, 4H), 3,70 - 3,58

CMP	Cấu trúc	NMR
		(m, 4H), 3,54 - 3,41 (m, 4H), 3,37 (s, 3H), 3,26 (s, 3H), 2,89 (s, 2H), 2,63 (s, 2H), 2,01 (s, 6H), 1,99 (s, 3H), 1,79 (ddd, J = 3,7, 6,2, 13,4Hz, 2H), 1,69 - 1,60 (m, 2H)
P53		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 7,01 (s, 2H), 3,68 (s, 3H), 3,69 – 3,61 (m, 2H), 3,55 – 3,41 (m, 2H), 2,91 (s, 2H), 2,64 (s, 2H), 2,15 (s, 3H), 2,00 (m, 9H), 1,89 – 1,63 (m, 4H)

CMP	Cấu trúc	NMR
P54		¹ H NMR (400MHz, CDCl ₃) δ = 0,90 (s, 9H) 1,28 (s, 9H) 1,71 - 1,91 (m, 4H) 2,02 (s, 9H) 2,61 - 2,79 (m, 4H) 2,99 (s, 3H) 3,58 (br s, 4H) 7,06 (s, 2H)
P55		¹ H NMR (400MHz, Metanol-d ₄) δ = 7,01 (s, 2H), 6,50 (t, J = 75,6Hz, 1H), 4,63 (s, 2H), 3,87 - 3,79 (m, 1H), 3,68 (s, 3H), 3,51 (dt, J = 4,0, 8,9Hz, 3H), 2,92 (s, 2H), 2,65 (s, 2H), 1,92 - 1,77 (m, 2H), 1,77 - 1,60 (m, 2H)

Bảng 3. Hợp chất so sánh của tình trạng kỹ thuật.

Hợp chất	Cấu trúc
C1 (Hợp chất A-38 từ WO2014/096289)	

Ví dụ sinh học

Hạt của nhiều loài thử nghiệm được gieo trong đất tiêu chuẩn ở các chậu (*Lolium perenne* (LOLPE), *Setaria faberi* (SETFA), *Alopecurus myosuroides* (ALOMY), *Echinochloa crus-galli* (ECHCG), *Avena fatua* (AVEFA)). Sau khi trồng trong một ngày (trước khi nảy mầm) hoặc sau 8 ngày trồng (sau khi nảy mầm) trong điều kiện có kiểm soát trong nhà kính (ở nhiệt độ 24/16°C, ngày/đêm; 14 giờ sáng; độ ẩm 65%), cây được phun bằng dung dịch phun có nước thu được từ chế phẩm của thành phần hoạt tính kỹ thuật trong dung dịch axeton/nước (50:50) chứa 0,5% Tween 20 (polyoxyetylen sorbitan monolaurat, CAS RN 9005-64-5). Các hợp chất được sử dụng ở tốc độ 250 g/giờ. Cây thử nghiệm sau đó được sinh trưởng trong nhà kính dưới các điều kiện được kiểm soát trong nhà kính (ở 24/16°C, ngày/đêm; 14 giờ chiếu sáng; độ ẩm 65%) và tưới nước hai lần mỗi ngày. Sau 13 ngày đối với trước và sau khi nảy mầm, thử nghiệm được đánh giá về tỉ lệ phần trăm hư hại gây ra cho cây trồng. Các hoạt tính sinh học được thể hiện trong bảng sau đây trên thang điểm năm (5 = 80-100%; 4 = 60-79%; 3=40-59%; 2=20-39%; 1=0-19%).

BẢNG B1

Hợp chất	LOLPE		SETFA		ALOMY		ECHCG		AVEFA	
	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU
A7	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A8	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5

Hợp chất	LOLPE		SETFA		ALOMY		ECHCG		AVEFA	
	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU
A9	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A12	5	5	5	5	4	5	5	5	4	5
A13	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A15	5	5	5	5	5	5	5	NT	5	5
A16	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A17	5	5	5	5	5	5	5	NT	5	5
A18	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A19	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A20	5	5	5	5	5	5	5	NT	5	5
A21	5	5	3	5	5	5	2	NT	5	5
A22	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A37	5	5	5	5	5	5	5	5	4	5
A38	5	5	5	5	5	5	5	5	3	4
A39	5	5	5	5	4	5	5	5	4	5
A40	5	5	5	5	5	5	5	NT	5	5
A41	5	5	5	5	4	4	5	5	4	5

Hợp chất	LOLPE		SETFA		ALOMY		ECHCG		AVEFA	
	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU
A70	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A71	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A72	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A73	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A74	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A75	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A76	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A77	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A78	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A79	5	5	4	5	4	5	4	NT	5	5
A80	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A81	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A82	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A83	5	5	5	5	5	5	5	5	4	5
A84	5	5	5	5	5	5	5	5	4	5
A85	5	5	5	4	5	5	5	5	3	5

Hợp chất	LOLPE		SETFA		ALOMY		ECHCG		AVEFA	
	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU
A86	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A87	5	5	5	5	4	5	5	NT	3	5
A88	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A89	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A90	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A91	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A96	5	5	5	5	5	5	5	NT	5	5
A97	5	5	5	5	4	5	5	NT	5	5
A98	5	5	3	5	4	5	4	NT	5	5
A99	4	4	4	5	3	4	5	5	3	5
A100	5	5	5	5	3	4	5	5	3	5
A101	5	5	5	5	4	5	5	5	4	5
A102	5	5	5	5	2	5	5	5	5	5
A103	4	5	5	5	4	5	5	5	4	5
A104	5	5	5	5	4	5	5	5	5	5
A105	5	5	5	5	5	NT	5	3	5	5

Hợp chất	LOLPE		SETFA		ALOMY		ECHCG		AVEFA	
	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU
A106	3	3	4	5	NT	NT	4	3	2	5
A107	5	5	4	5	NT	NT	3	5	4	5
A108	5	5	5	5	NT	NT	5	5	5	5
A109	5	5	5	5	NT	NT	5	5	5	5
A110	5	5	5	5	NT	NT	5	5	5	5
A112	5	5	5	5	NT	NT	5	5	5	5
A114	5	5	5	5	NT	NT	5	5	4	5
A115	5	5	5	5	NT	NT	5	5	3	5
A116	5	5	5	5	NT	NT	5	5	5	5
A117	4	5	5	5	NT	NT	5	5	2	5
A118	5	5	5	5	NT	NT	5	5	5	5
A119	5	5	5	5	NT	NT	5	5	5	5
A120	5	5	5	5	NT	NT	5	5	4	5
A121	5	5	5	5	NT	NT	5	5	4	5
A122	5	5	5	5	NT	NT	5	5	5	5
A123	5	5	5	5	NT	NT	5	5	5	5

Hợp chất	LOLPE		SETFA		ALOMY		ECHCG		AVEFA	
	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU
A124	5	5	5	5	NT	NT	5	5	5	5
A125	5	5	5	5	NT	NT	5	5	5	5
A126	5	5	5	5	NT	NT	5	5	5	5
A127	5	5	5	5	NT	NT	5	5	5	5
A128	5	5	5	4	NT	NT	5	5	3	5
A129	5	5	5	5	NT	NT	5	5	5	5
A132	5	5	5	5	NT	NT	5	5	5	5
A133	5	5	5	5	NT	NT	5	5	5	5
A134	5	5	5	5	NT	NT	5	5	5	5
A135	5	5	5	5	NT	NT	5	5	5	5
A136	5	5	5	5	NT	NT	5	5	5	5
A138	5	5	5	5	NT	NT	5	5	5	5
A139	5	5	5	5	NT	NT	5	5	5	5
A141	5	5	5	5	NT	NT	5	5	4	5
A142	5	5	5	5	NT	NT	5	5	4	5
A143	5	5	5	5	NT	NT	5	5	4	5

Hợp chất	LOLPE		SETFA		ALOMY		ECHCG		AVEFA	
	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU
A145	4	5	5	5	3	5	5	5	2	5
A146	5	5	5	5	5	5	5	5	4	5
A147	5	5	5	5	4	5	5	5	3	5
A148	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A151	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A152	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A153	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A154	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A155	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A156	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A157	5	5	5	5	3	5	5	5	2	5
A158	3	5	5	5	2	3	5	5	2	5
A159	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A160	3	5	5	5	2	4	4	4	4	5
A162	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A163	4	5	5	5	0	5	5	5	5	5

Hợp chất	LOLPE		SETFA		ALOMY		ECHCG		AVEFA	
	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU
A164	5	5	5	5	4	5	5	5	5	5
A165	4	5	5	5	4	5	5	5	4	5
A166	5	5	5	5	5	5	4	5	4	5
A167	5	5	5	5	4	5	5	5	4	5
A168	4	4	5	4	4	4	5	5	4	4
A169	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A170	4	5	4	5	4	5	3	5	2	5
A171	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A172	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A173	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A174	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A175	5	5	5	5	5	5	5	5	4	5
A176	5	5	5	5	3	5	5	5	2	2
A177	5	5	5	5	2	4	5	5	4	5
A178	5	5	5	5	4	5	4	5	5	5
A180	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5

Hợp chất	LOLPE		SETFA		ALOMY		ECHCG		AVEFA	
	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU
A182	5	5	5	5	5	5	5	5	3	4
A183	5	5	5	5	4	5	5	5	4	5
A184	5	5	5	5	1	4	4	5	2	5
A185	5	5	5	5	5	5	5	5	4	5
A186	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A187	5	5	5	5	4	5	5	5	5	5
A191	5	5	5	5	2	5	5	5	4	5
A192	5	5	5	5	3	5	5	5	3	5
A193	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A194	5	5	5	5	4	4	5	5	5	5
A195	5	5	5	5	4	5	2	5	5	5
A196	5	5	5	5	3	5	5	5	4	5
A197	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A198	5	5	5	5	5	5	5	5	4	5
A199	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A200	5	5	5	5	5	5	5	5	4	5

Hợp chất	LOLPE		SETFA		ALOMY		ECHCG		AVEFA	
	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU
A201	5	5	5	5	5	5	5	5	4	5
A202	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
P1	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
P2	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
P3	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
P4	5	5	5	5	5	5	5	5	4	5
P6	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
P7	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
P9	5	5	5	5	5	5	5	5	4	5
P10	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
P11	5	4	5	5	5	5	5	5	3	5
P12	5	5	5	5	4	5	5	5	4	5
P13	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
P14	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
P15	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
P17	4	5	4	5	5	5	5	5	3	5

Hợp chất	LOLPE		SETFA		ALOMY		ECHCG		AVEFA	
	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU
P18	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
P19	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
P20	5	5	5	5	5	5	5	5	3	5
P21	5	5	5	5	5	5	5	5	4	5
P22	5	5	5	5	5	5	5	NT	5	5
P23	5	5	5	5	5	5	5	NT	4	5
P24	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
P25	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
P26	5	5	5	5	5	5	5	NT	5	5
P27	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
P28	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
P29	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
P30	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
P31	5	5	5	5	5	5	5	NT	5	5
P32	5	5	5	5	5	5	5	NT	5	5
P33	5	5	5	5	5	5	5	NT	5	5

Hợp chất	LOLPE		SETFA		ALOMY		ECHCG		AVEFA	
	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU
P34	5	5	5	5	5	5	5	NT	5	5
P35	5	5	5	5	5	NT	5	5	5	5
P36	5	5	5	5	NT	NT	5	5	4	5
P37	5	5	5	5	5	NT	5	5	5	5
P38	5	5	5	5	5	NT	5	5	5	5
P39	5	5	5	5	5	NT	5	5	5	5
P40	5	5	5	5	5	NT	5	5	5	5
P41	5	5	5	5	5	NT	5	5	5	5
P42	5	5	5	5	5	NT	5	5	5	5
P43	5	5	5	5	5	NT	5	4	5	5
P44	5	5	5	5	5	NT	5	5	5	5
P45	5	5	5	5	NT	NT	5	5	5	5
P46	5	5	5	5	NT	NT	5	5	2	5
P47	5	5	5	5	NT	NT	5	5	5	5
P50	4	5	5	5	3	4	5	5	2	5
P51	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5

Hợp chất	LOLPE		SETFA		ALOMY		ECHCG		AVEFA	
	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU	TRƯỚC	SAU
P52	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
P53	4	5	5	5	4	5	5	5	5	5
P54	5	5	5	5	4	5	5	5	4	4

NT = không được thử nghiệm.

Sử dụng các quy trình nêu khái quát trên đây, cây lúa mỳ và lúa mạch và loài cỏ dại (SETFA) được xử lý hậu nảy mầm bằng hợp chất A11 theo sáng chế hoặc hợp chất so sánh C1 (Hợp chất A-38 từ WO2014/096289) ở tỉ lệ phun đã chỉ định. Các hợp chất này cũng được sử dụng cho lúa mỳ kết hợp với hợp chất an toàn cloquintoxet-mexyl (CQC) ở tỉ lệ 50 g/ha.

BẢNG B2.

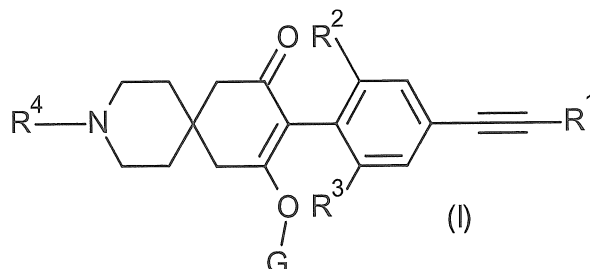
Hợp chất	Tỷ lệ	Lúa mỳ	Lúa mạch	SETFA
C1	30	40	80	100
	60	70	90	100
	60+CQC	60	NT	NT
A11	30	10	10	100
	60	30	40	100
	60+CQC	0	NT	NT

NT = không được thử nghiệm.

Các kết quả này chứng tỏ rằng các hợp chất theo sáng chế, ví dụ minh họa là sử dụng hợp chất A11 thể hiện độ an toàn đối với cây trồng được cải thiện đáng kể so với các hợp chất của tình trạng kỹ thuật mà tương tự về mặt cấu trúc, ví dụ hợp chất C1 trong khi vẫn giữ khả năng kiểm soát cỏ dại tổng quan tốt.

YÊU CẦU BẢO HỘ

1. Hợp chất có công thức (I)



trong đó

R^1 là methyl;

R^2 là methyl hoặc metoxy;

R^3 là methyl hoặc metoxy;

R^4 được chọn từ nhóm bao gồm $-S(O)_n C_1-C_6$ alkyl, $-S(O)_n C_1-C_6$ haloalkyl, $-S(O)_n (CH_2)_n-C_3-C_6$ xycloalkyl, $-S(O)_n C(R^{11})R^{12}R^{13}$, $-C(O)H$, $-C(O)-(CH_2)_n-C_3-C_6$ xycloalkyl, $-C(O)C_2-C_4$ alkenyl, $-C(O)(CR^9R^{10})CN$, $-C(O)(CR^9R^{10})(CR^9R^{10})CN$, $-C(O)CH_2C(O)-C_1-C_6$ alkyl, $-C(O)CH_2OC(O)-C_1-C_6$ alkyl, $-C(O)OC_1-C_6$ alkyl, $-C(O)OC_1-C_6$ haloalkyl, $-C(O)(CR^9R^{10})_n S(O)_n C_1-C_6$ alkyl, $-C(O)C_1-C_3$ alkoxy C_1-C_6 alkyl, $-C(O)C_1-C_3$ alkoxy C_2-C_6 alkenyl, $-C(O)C_1-C_3$ alkoxy C_2-C_6 alkynyl, $-C(O)C_1-C_3$ alkoxy C_1-C_6 haloalkyl, $-C(O)C_1-C_3$ alkoxy C_3-C_6 xycloalkyl, $-C(O)OC_1-C_3$ alkoxy C_1-C_6 alkyl, $-C(O)C_1-C_3$ alkoxy C_1-C_3 alkoxy C_1-C_6 alkyl, $-C(O)(CH_2)_n NR^5R^6$, $-C(O)-(CH_2)_n NR^7C(O)R^8$, $-C(O)-(CH_2)_n-O-N=CR^5R^5$, $-CN$, $-(CH_2)_n$ -phenyl, $-C(O)-(CH_2)_n$ -phenyl, $-S(O)_n-(CH_2)_n$ -phenyl, -heterocyclyl, $-C(O)-(CH_2)_n$ -heterocyclyl, $-C(O)(CH_2)_nO-(CH_2)_n$ -heterocyclyl, $-S(O)_n-(CH_2)_n$ -heterocyclyl, trong đó mỗi heterocyclyl là heterocyclyl có 5 hoặc 6 cạnh mà có thể là thơm, no hoặc no một phần và có thể chứa từ 1 đến 4 nguyên tử khác loại mỗi nguyên tử độc lập được chọn từ nhóm bao gồm oxy, nitơ và lưu huỳnh, và trong đó các nhóm heterocyclyl

hoặc phenyl này tùy ý được thế bằng một, hai hoặc ba nhóm thế độc lập được chọn từ nhóm bao gồm C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₂-C₃alkenyl, C₂-C₃alkynyl, halogen, xyano và nitro;

R⁵ được chọn từ nhóm bao gồm hydro và C₁-C₆ alkyl;

R⁶ được chọn từ nhóm bao gồm hydro, C₁-C₆alkyl, C₂-C₆alkenyl, C₂-C₆alkynyl, C₁-C₆haloalkyl, hydroxyl-, C₁-C₆alkoxy, C₃-C₆xycloalkyl, -C₁-C₄alkoxyC₁-C₆alkyl, -C₁-C₃alkoxyC₁-C₆haloalkyl, -(CR⁹R¹⁰)C₁-C₆haloalkyl, - (CR⁹R¹⁰)C(O)NR⁵R⁵, phenyl, -pyridyl, trong đó phenyl và pyridyl tùy ý được thế bằng một, hai hoặc ba nhóm thế độc lập được chọn từ nhóm bao gồm C₁-C₃ alkyl, C₁-C₃ haloalkyl, C₁-C₃ alkoxy, C₂-C₃ alkenyl, C₂-C₃ alkynyl, halogen, xyano và nitro; hoặc

R⁵ và R⁶ cùng nhau tạo thành -CH₂CH₂OCH₂CH₂-; và

R⁷ được chọn từ nhóm bao gồm hydro và C₁-C₆ alkyl;

R⁸ được chọn từ nhóm bao gồm hydro, C₁-C₆ alkyl, C₁-C₆ alkoxy, C₃-C₆ xycloalkyl, phenyl, -pyridyl, trong đó phenyl và pyridyl tùy ý được thế bằng một, hai hoặc ba nhóm thế độc lập được chọn từ nhóm bao gồm C₁-C₃ alkyl, C₁-C₃ haloalkyl, C₁-C₃ alkoxy, C₂-C₃ alkenyl, C₂-C₃ alkynyl, halogen, xyano và nitro;

R⁹ là hydro hoặc metyl;

R¹⁰ là hydro hoặc metyl; hoặc

R⁹ và R¹⁰ cùng nhau tạo thành -CH₂CH₂-; và

R¹¹ là hydro hoặc metyl;

R¹² được chọn từ nhóm bao gồm hydro, C₁-C₆ alkyl, hydroxyl và C₁-C₆ alkoxy-;

R^{13} được chọn từ nhóm bao gồm hydro, C_1 - C_6 alkyl, hydroxyl và C_1 - C_6 alkoxy; hoặc

R^{12} và R^{13} cùng nhau tạo thành $-\text{CH}_2\text{-X-CH}_2-$; và

X được chọn từ nhóm bao gồm O, S và N-R^{14} ;

R^{14} được chọn từ nhóm bao gồm hydro, C_1 - C_3 alkyl và C_1 - C_3 alkoxy-;

n là 0, 1 hoặc 2;

G được chọn từ nhóm bao gồm hydro, $-(\text{CH}_2)_n\text{-R}^a$, $-\text{C}(\text{O})\text{-R}^a$, $-\text{C}(\text{O})\text{-(CR}^c\text{R}^d)_n\text{-O-R}^b$, $-\text{C}(\text{O})\text{-(CR}^c\text{R}^d)_n\text{-S-R}^b$, $-\text{C}(\text{O})\text{NR}^a\text{R}^a$, $-\text{S}(\text{O})_2\text{-R}^a$ và C_1 - C_8 alkoxy- C_1 - C_3 alkyl-;

R^a độc lập được chọn từ nhóm bao gồm hydro, C_1 - C_8 alkyl, C_1 - C_3 haloalkyl, C_2 - C_8 alkenyl, C_2 - C_8 alkynyl, C_3 - C_6 cycloalkyl, heterocyclyl và phenyl trong đó các nhóm heterocyclyl và phenyl này tùy ý được thế bằng một, hai hoặc ba nhóm thế độc lập được chọn từ nhóm bao gồm C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 haloalkyl, C_1 - C_3 alkoxy, C_2 - C_3 alkenyl, C_2 - C_3 alkynyl, halogen, cyano và nitro;

R^b được chọn từ nhóm bao gồm C_1 - C_8 alkyl, C_1 - C_3 haloalkyl, C_2 - C_8 alkenyl, C_2 - C_8 alkynyl, C_3 - C_6 cycloalkyl, heterocyclyl và phenyl trong đó các nhóm heterocyclyl và phenyl này tùy ý được thế bằng một, hai hoặc ba nhóm thế độc lập được chọn từ nhóm bao gồm C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 haloalkyl, C_1 - C_3 alkoxy, C_2 - C_3 alkenyl, C_2 - C_3 alkynyl, halogen, cyano và nitro;

R^c là hydro hoặc C_1 - C_3 alkyl; và

R^d là hydro hoặc C_1 - C_3 alkyl;

hoặc muối nông dụng của chúng.

2. Hợp chất theo điểm 1, trong đó R^2 là methyl.
3. Hợp chất theo điểm 1 hoặc 2, trong đó R^3 là methyl.
4. Hợp chất theo điểm 1 hoặc 2, trong đó R^3 là metoxy.
5. Hợp chất theo điểm bất kỳ trong số các điểm nêu trên, trong đó R^4 là $-C(O)OC_1-C_6alkyl$.
6. Hợp chất theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 4, trong đó R^4 là $-C(O)NR^5R^6$.
7. Hợp chất theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 4, trong đó R^4 là $-C(O)NR^7C(O)R^8$.
8. Hợp chất theo điểm bất kỳ trong số các điểm nêu trên, trong đó G là hydro.
9. Hợp chất theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 7, trong đó G là $-C(O)C_1-C_6alkyl$.
10. Hợp chất theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 7, trong đó G là $-C(O)-O-C_1-C_6alkyl$.
11. Chế phẩm diệt cỏ chứa hợp chất có công thức (I) theo điểm bất kỳ trong số các điểm nêu trên và chất phụ trợ bào chế nông dụng.
12. Chế phẩm diệt cỏ theo điểm 11, trong đó chế phẩm này còn chứa ít nhất một chất diệt loài gây hại bổ sung.
13. Chế phẩm diệt cỏ theo điểm 12, trong đó chất diệt loài gây hại bổ sung là thuốc diệt cỏ hoặc chất an toàn thuốc diệt cỏ.

14. Phương pháp kiểm soát cỏ dại tại địa điểm bao gồm bước dùng cho địa điểm lượng có hiệu quả kiểm soát cỏ dại của chế phẩm theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 11 đến 13.