



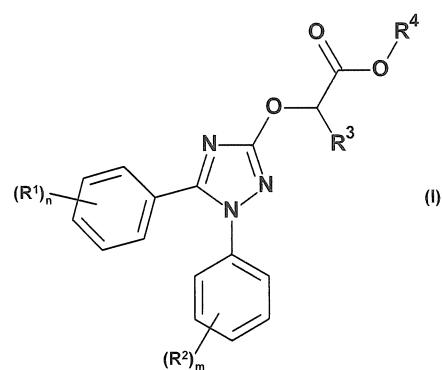
(12) BẢN MÔ TẢ SÁNG CHẾ THUỘC BẰNG ĐỘC QUYỀN SÁNG CHẾ  
(19) Cộng hòa xã hội chủ nghĩa Việt Nam (VN) (11)   
CỤC SỞ HỮU TRÍ TUỆ  
(51)<sup>2021.01</sup> C07D 249/12; A01N 43/00; A01N (13) B  
43/653

- 
- (21) 1-2022-03029 (22) 24/11/2020  
(86) PCT/EP2020/083167 24/11/2020 (87) WO2021/105101 03/06/2021  
(30) 19211511.1 26/11/2019 EP  
(45) 25/07/2025 448 (43) 25/08/2022 413A  
(73) BAYER AKTIENGESELLSCHAFT (DE)  
Kaiser-Wilhelm-Allee 1, 51373 Leverkusen, Germany  
(72) MÜLLER, Thomas (DE); MOSRIN, Marc (FR); REINGRUBER, Anna, Maria (DE);  
HELMKE, Hendrik (DE); ROSINGER, Christopher, Hugh (GB); DITTCGEN, Jan  
(DE).  
(74) Công ty Luật TNHH T&G (TGVN)
- 
- (54) DẪN XUẤT AXIT [(1,5-DIPHENYL-1H-1,2,4-TRIAZOL-3-YL)OXY]AXETIC  
VÀ MUỐI CỦA NÓ, CHẾ PHẨM BẢO VỆ CÂY TRỒNG CHÚA CHÙNG VÀ  
PHƯƠNG PHÁP LÀM GIẢM TÁC DỤNG GÂY ĐỘC TRÊN THỰC VẬT CỦA  
THUỐC DIỆT SINH VẬT GÂY HẠI LÊN THỰC VẬT HỮU ÍCH HOẶC CÂY  
TRỒNG

(21) 1-2022-03029

(57) Sáng chế đề cập đến các hợp chất bảo vệ thực vật hữu hiệu và các chế phẩm chứa các hợp chất cụ thể dùng làm chất an toàn để làm giảm tác dụng gây độc trên thực vật của các chế phẩm hóa nông, đặc biệt là thuốc diệt cỏ.

Cụ thể hơn, sáng chế đề cập đến dẫn xuất axit cụ thể [(1,5-diphenyl-1H-1,2,4-triazol-3-yl)oxy]axetic có công thức chung (I)



và muối của nó, đến phương pháp làm giảm tác dụng gây độc trên thực vật của thuốc diệt sinh vật gây hại lên thực vật hoặc cây trồng hữu ích.

## Lĩnh vực kỹ thuật được đề cập

Sáng chế đề cập đến các hợp chất bảo vệ thực vật hữu hiệu và các chế phẩm chứa các hợp chất cụ thể dùng làm chất an toàn để làm giảm tác dụng gây độc trên thực vật của các chế phẩm hóa nông, đặc biệt là thuốc diệt cỏ. Cụ thể hơn, sáng chế đề cập đến dẫn xuất axit [(1,5-diphenyl-1H-1,2,4-triazol-3-yl)oxy]axetic cụ thể và muối của nó dùng làm chất an toàn và đề cập đến quy trình điều chế chúng.

## Tình trạng kỹ thuật của sáng chế

Khi phòng trừ sinh vật không mong muốn ở các cây trồng hữu ích trong làm vườn và lâm nghiệp bằng thuốc diệt sinh vật gây hại, các cây trồng hữu ích thường cũng bị tổn hại ở mức độ lớn hơn hoặc nhỏ hơn bởi thuốc diệt sinh vật gây hại được sử dụng, như thuốc diệt cỏ, thuốc diệt côn trùng, thuốc diệt nấm, không kể những thuốc diệt sinh vật gây hại khác. Tác dụng phụ gây độc thực vật không mong muốn này xảy ra ở mức độ đặc biệt khi nhiều thuốc diệt cỏ được sử dụng – chủ yếu ở ứng dụng sau nảy mầm – ở các cây trồng hữu ích, ví dụ ngô, lúa hoặc ngũ cốc. Việc sử dụng "chất an toàn" hoặc "chất giải độc" trong một số trường hợp có thể bảo vệ thực vật hữu ích khỏi các đặc tính gây độc thực vật của thuốc diệt sinh vật gây hại mà không làm giảm hoặc làm suy yếu đáng kể tác dụng diệt sinh vật gây hại đối với các sinh vật có hại. Trong một số trường hợp, với sự có mặt của chất an toàn, đã quan sát được tác dụng diệt sinh vật gây hại được cải thiện đối với các sinh vật có hại như cỏ.

Các hợp chất đã được biết đến cho đến nay như chất an toàn nằm trong số lượng lớn các loại cấu trúc hóa học khác nhau, khả năng phù hợp của chúng để làm chất an toàn thường cũng phụ thuộc vào cấu trúc hóa học của các thuốc diệt sinh vật gây hại và trên cây trồng hữu ích.

Tác dụng làm an toàn của các hợp chất thuộc nhóm các dẫn xuất của axit

phenoxy- hoặc heteroaryloxyalkancarboxylic đã được biết đến từ lâu nếu các hợp chất này được dùng kết hợp với thuốc diệt cỏ. Ví dụ về các hợp chất như vậy là MCPA và các hợp chất tương tự, mà đồng thời vẫn có hoạt tính diệt cỏ đối với các thực vật có hại, hoặc cloquintocet-mexyl.

Chất an toàn từ nhóm gồm các dẫn xuất của carboxylic este thơm khác loại được thê N-phenyl với nhiều nguyên tử khác loại trong dị vòng cũng được biết đến. Ví dụ về các chất an toàn như vậy là chất an toàn mefenpyr-dietyl và isoxadifen-etyl mà được sử dụng trong các sản phẩm thương mại.

WO 2004/084631 bộc lộ việc sử dụng dẫn xuất axit carboxylic thơm được thê hydroxy. WO 2005/015994 mô tả các dẫn xuất cụ thể của axit salixylic dùng làm chất an toàn. Các chất này là đặc biệt thích hợp để dùng làm chất an toàn cho cây ngô và đậu tương.

Ngoài ra, WO 2005/112630 bộc lộ dẫn xuất 1,2-dihydroquinoxalin-2-on, và WO 2008/131860 bộc lộ pyridoncarboxamit dùng làm chất an toàn.

Các thành phần hoạt tính từ nhóm hóa học các dẫn xuất axit [(1,5-diphenyl-1H-1,2,4-triazol-3-yl)oxy]axetic với các đặc tính tác động trên thực vật vẫn chưa được biết đến từ các tài liệu.

Các tài liệu khác nhau mô tả dẫn xuất axit [(1,5-diphenyl-1H-1,2,4-triazol-3-yl)oxy]axetic có các đặc tính y học. Polish J. Chem. 2006, 80, 889-897 và Bioorganic & Medicinal Chemistry 2018, 26, 3321-3344 bộc lộ dẫn xuất axit [(1,5-diphenyl-1H-1,2,4-triazol-3-yl)oxy]axetic.

Các dẫn xuất axit [(1,5-diaryl-1H-pyrazol-3-yl)oxy]axetic là đã biết từ J. Heterocyclic Chemistry 2010, 47 (4), 897-902 và J. Heterocyclic Chemistry 2012, 49 (6), 1370-1375.

EP 0310555 A1 mô tả các dẫn xuất axit 1,5-diphenyl-1H-1,2,4-triazol-3-carboxylic để bảo vệ cây trồng khỏi tác dụng gây độc trên thực vật của thuốc diệt cỏ.

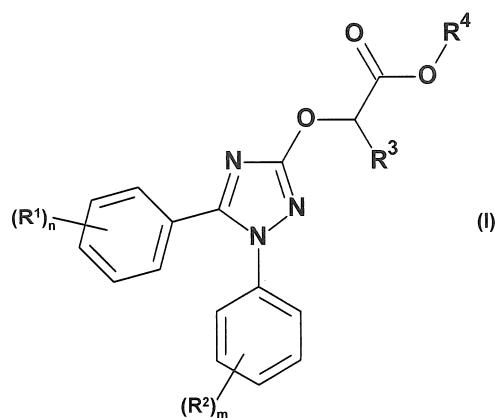
Khi chất an toàn được sử dụng để bảo vệ cây trồng khỏi tổn hại bởi thuốc diệt sinh vật gây hại, đã nhận thấy rằng các chất an toàn đã biết có thể có những nhược điểm trong nhiều trường hợp. Các nhược điểm này bao gồm, ví dụ, (a) đặc tính bảo vệ thực

vật hữu ích là không thích đáng, hoặc (b) khi kết hợp với thuốc diệt cỏ cụ thể, phô thực vật hữu ích mà trong đó tổ hợp chất an toàn/thuốc diệt cỏ được sử dụng là không đủ rộng.

Vì những lý do đã nêu, ngày càng có nhu cầu đề xuất các hợp chất thay thế có tác dụng an toàn hơn.

### Bản chất kỹ thuật của sáng chế

Sáng chế đề xuất các hợp chất bảo vệ thực vật hữu hiệu mới có công thức chung (I) hoặc muối của nó



để làm giảm tác dụng gây độc trên thực vật của thuốc diệt sinh vật gây hại, đặc biệt là thuốc diệt cỏ, lênh thực vật hoặc cây trồng hữu ích,

trong đó:

R<sup>1</sup> và R<sup>2</sup> độc lập là hydro, halogen, xyano, nitro, (C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>)alkyl, (C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>)alkenyl, (C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>)alkynyl, (C<sub>3</sub>-C<sub>8</sub>)xycloalkyl, (C<sub>3</sub>-C<sub>8</sub>)xycloalkenyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>)alkoxy hoặc (C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>)alkylS(O)<sub>p</sub>, trong đó bảy gốc cuối không được thay thế hoặc được thay thế bởi các gốc khác đã biết từ nhóm gồm halogen, xyano, (C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>)alkoxy và (C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>)alkylS(O)<sub>p</sub>,

R<sup>3</sup> là hydro hoặc (C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>)alkyl,

R<sup>4</sup> là hydro, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)haloalkyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)xyanoalkyl, (C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>)alkenyl, (C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>)alkynyl, (C<sub>3</sub>-C<sub>12</sub>)xycloalkyl, (C<sub>3</sub>-C<sub>12</sub>)xycloalkenyl, aryl, heteroaryl, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkoxy-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)haloalkoxy-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkoxy-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)haloalkyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkylthio-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)haloalkylthio-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl, (C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>)haloalkenyl, (C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>)haloalkynyl, heteroxycetyl-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl,

aryl-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl, (C<sub>3</sub>-C<sub>12</sub>)xycloalkyl-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkoxycarbonyl-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl hoăc (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkoxycarbonyl-(C<sub>3</sub>-C<sub>12</sub>)xycloalkyl-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl, hoăc

là gốc có công thức  $-NR^aR^b$  hoặc  $-N=CR^cR^d$ ,

trong đó, trong 2 gốc trước, mỗi gốc trong số các gốc R<sup>a</sup>, R<sup>b</sup>, R<sup>c</sup> và R<sup>d</sup> độc lập là hydro, (C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>)alkyl, (C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>)alkenyl, (C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>)alkynyl, benzyl, benzyl được thé, phenyl hoặc phenyl được thé,

hoặc R<sup>a</sup> và R<sup>b</sup> cùng với nguyên tử nitơ tạo thành dị vòng có 3 đến 8 cạnh mà ngoài nguyên tử nitơ có thể còn chứa một hoặc hai nguyên tử khác loại khác thuộc vòng từ nhóm gồm N, O và S và không được thế hoặc được thế bằng một hoặc nhiều gốc từ nhóm gồm (C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>)-alkyl và (C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>)-haloalkyl,

hoặc R<sup>c</sup> và R<sup>d</sup> cùng với nguyên tử cacbon tạo thành gốc dị vòng hoặc vòng cacbon có 3 đến 8 cạnh có thể chứa 1 đến 3 nguyên tử khác loại thuộc vòng từ nhóm gồm N, O và S, trong đó gốc vòng cacbon hoặc dị vòng không được thê hoặc được thê bằng một hoặc nhiều gốc từ nhóm gồm (C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>)-alkyl và (C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>)-haloalkyl,

n và m              độc lập là số từ 0 đến 5,

và

p bằng 0, 1 hoặc 2,

ngoại trừ etyl [(1,5-diphenyl-1H-1,2,4-triazol-3-yl)oxy]axetat (CAS [931426-67-4]).

## Mô tả chi tiết sáng chế

Các hợp chất có công thức chung (I) có thể tạo thành các muối bằng phản ứng cộng của axit vô cơ hoặc hữu cơ thích hợp, chẳng hạn axit vô cơ, chẳng hạn HCl, HBr, H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, H<sub>3</sub>PO<sub>4</sub> hoặc HNO<sub>3</sub>, hoặc axit hữu cơ, chẳng hạn axit carboxylic như axit formic, axit axetic, axit propionic, axit oxalic, axit lactic hoặc axit salicylic, hoặc axit sulfonic, chẳng hạn axit p-toluensulfonic, vào nhóm bazơ, chẳng hạn amino, alkylamino, dialkylamino, piperidino, morpholino hoặc pyridino. Trong trường hợp như vậy, các muối này bao gồm bazơ liên hợp của axit này ở dạng anion. Các phần tử thế thích hợp ở dạng đã được loại proton, ví dụ axit sulfonic, các sulfonamit hoặc các axit carboxylic

cụ thể, có khả năng tạo thành các muối nội với các nhóm, như các nhóm amino, mà bản thân chúng có thể proton hóa được. Các muối cũng có thể được tạo thành bởi tác dụng của bazơ lên các hợp chất có công thức chung (I). Các bazơ phù hợp là, ví dụ, các amin hữu cơ như trialkylamin, morpholin, piperidin và pyridin, và hydroxit, cacbonat và bicacbonat của amoni, kim loại kiềm hoặc kim loại kiềm thổ, đặc biệt là natri hydroxit, kali hydroxit, natri cacbonat, kali cacbonat, natri bicacbonat và kali bicacbonat. Các muối này là các hợp chất trong đó hydro có tính axit được thay bởi cation thích hợp trong nông nghiệp, ví dụ muối kim loại, đặc biệt là muối kim loại kiềm hoặc muối kim loại kiềm thổ, đặc biệt là muối natri và kali, hoặc cũng như muối amoni, muối với các amin hữu cơ hoặc muối amoni bậc bốn, ví dụ với các cation có công thức  $[NR^eR^fR^gR^h]^+$  trong đó  $R^e$  đến  $R^h$  mỗi nhóm độc lập là gốc hữu cơ, đặc biệt là alkyl, aryl, arylalkyl hoặc alkylaryl. Cũng thích hợp là muối alkylsulfoni và muối alkylsulfoxoni, như muối (C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>)-trialkylsulfoni và (C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>)-trialkylsulfoxoni.

Các hợp chất có công thức (I) được sử dụng theo sáng chế và muối của nó được đề cập đến trong bản mô tả này là "hợp chất có công thức chung (I)".

Tốt hơn là sáng chế đề xuất hợp chất có công thức chung (I) trong đó

$R^1$  và  $R^2$  độc lập là hydro, halogen, xyano, nitro, (C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>)alkyl, (C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>)alkenyl, (C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>)alkynyl, (C<sub>3</sub>-C<sub>6</sub>)xycloalkyl, (C<sub>3</sub>-C<sub>6</sub>)xycloalkenyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>)alkoxy hoặc (C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>)alkylS(O)<sub>p</sub>, trong đó bảy gốc cuối không được thế hoặc được thế bởi các gốc khác đã biết từ nhóm gồm halogen, xyano, (C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>)alkoxy và (C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>)alkylS(O)<sub>p</sub>,

$R^3$  là hydro hoặc (C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>)alkyl,

$R^4$  là hydro, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)haloalkyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)xyanoalkyl, (C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>)alkenyl, (C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>)alkynyl, (C<sub>3</sub>-C<sub>12</sub>)xycloalkyl, (C<sub>3</sub>-C<sub>12</sub>)xycloalkenyl, aryl, heteroaryl, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkoxy-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)haloalkoxy-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkoxy-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)haloalkyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkylthio-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)haloalkylthio-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl, (C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>)haloalkenyl, (C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>)haloalkynyl, heteroxyetyl-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl, aryl-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl, (C<sub>3</sub>-C<sub>12</sub>)xycloalkyl-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkoxycarbonyl-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl, hoặc (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkoxycarbonyl-(C<sub>3</sub>-C<sub>12</sub>)xycloalkyl-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl,

n và m độc lập là số từ 0 đến 4,

và

p                   bằng 0, 1 hoặc 2,

ngoại trừ etyl [(1,5-diphenyl-1H-1,2,4-triazol-3-yl)oxy]axetat.

Đặc biệt tốt hơn là sáng chế đề xuất hợp chất có công thức chung (I) trong đó R<sup>1</sup> và R<sup>2</sup>      độc lập là hydro, halogen, xyano, methyl, CF<sub>3</sub>, CH<sub>2</sub>F, CHF<sub>2</sub>, OCH<sub>3</sub>, OCF<sub>3</sub>, SCH<sub>3</sub> hoặc SCF<sub>3</sub>,

R<sup>3</sup>                   là hydro, CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub> hoặc CH<sub>3</sub>,

R<sup>4</sup>                   là hydro, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)haloalkyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)xyanoalkyl, (C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>)alkenyl, (C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>)alkynyl, (C<sub>3</sub>-C<sub>12</sub>)xycloalkyl, (C<sub>3</sub>-C<sub>12</sub>)xycloalkenyl, aryl, heteroaryl, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkoxy-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)haloalkoxy-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkoxy-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)haloalkyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkylthio-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)haloalkylthio-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl, (C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>)haloalkenyl, (C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>)haloalkynyl, heteroxycycl-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl, aryl-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl, (C<sub>3</sub>-C<sub>12</sub>)xycloalkyl-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkoxycacbonyl-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl, hoặc (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkoxycacbonyl-(C<sub>3</sub>-C<sub>12</sub>)xycloalkyl-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl,

n và m      độc lập là số 0, 1, 2 hoặc 3,

ngoại trừ etyl [(1,5-diphenyl-1H-1,2,4-triazol-3-yl)oxy]axetat.

Đặc biệt tốt hơn là sáng chế đề xuất hợp chất có công thức chung (I) trong đó R<sup>1</sup> và R<sup>2</sup>      độc lập là hydro, flo, clo, brom, iod, CN, methyl, CF<sub>3</sub>, CH<sub>2</sub>F, CHF<sub>2</sub>, OCH<sub>3</sub>, OCF<sub>3</sub>, SCH<sub>3</sub> hoặc SCF<sub>3</sub>,

R<sup>3</sup>                   là hydro hoặc CH<sub>3</sub>,

R<sup>4</sup>                   là hydro, (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)alkyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)haloalkyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)xyanoalkyl, (C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>)alkenyl, (C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>)alkynyl, (C<sub>3</sub>-C<sub>9</sub>)xycloalkyl, (C<sub>3</sub>-C<sub>9</sub>)xycloalkenyl, aryl, heteroaryl, (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)alkoxy-(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)alkyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)haloalkoxy-(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)alkyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)alkoxy-(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)haloalkyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)alkylthio-(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)alkyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)haloalkylthio-(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)alkyl, (C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>)haloalkenyl, (C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>)haloalkynyl, heteroxycycl-(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)alkyl, aryl-(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)alkyl, (C<sub>3</sub>-C<sub>9</sub>)xycloalkyl-(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)alkyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)alkoxycacbonyl-(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)alkyl, hoặc (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)alkoxycacbonyl-(C<sub>3</sub>-C<sub>9</sub>)xycloalkyl-(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)alkyl,

n và m      độc lập là số 0, 1, 2 hoặc 3,

ngoại trừ etyl [(1,5-diphenyl-1H-1,2,4-triazol-3-yl)oxy]axetat.

Rất đặc biệt tốt hơn là sáng chế đề xuất hợp chất có công thức chung (I) trong đó

$R^1$  và  $R^2$       độc lập là hydro, flo, clo, brom, iod, xyano, methyl,  $CF_3$ ,  $CH_2F$ ,  $CHF_2$ ,  $OCH_3$ ,  $OCF_3$ ,  $SCH_3$  hoặc  $SCF_3$ ,

$R^3$       là hydro,

$R^4$       là hydro, methyl, etyl, n-propyl, i-propyl, n-butyl, n-pentyl, phenyl, benzyl,  $CH_2(4-Cl-Ph)$ ,  $CH_2(4-F-Ph)$ ,  $CH_2(4-OMe-Ph)$ , 2-methoxyethyl, tetrahydrofuran-2-yl-methyl, tetrahydrofuran-3-ylmethyl, tetrahydropyran-2-ylmethyl, tetrahydropyran-3-ylmethyl, tetrahydropyran-4-ylmethyl, methylpropionat-3-yl, ethylpropionat-3-yl, methylacetat-2-yl, ethylacetat-2-yl, metylpivalat-2-yl, ethylpivalat-3-yl, methyl-2-methylpropanoat-3-yl, methyl-2,2-dimethylpropanoat-3-yl, ethyl-2-methylpropanoat-3-yl, methyl-2-propanoat-2-yl, ethyl-2-propanoat-2-yl, methylacetat-2-yl, ethylacetat-2-yl, methyl-1-methylxyclopropancarboxylat-2-yl, ethyl-1-methylxyclopropancarboxylat-2-yl, 2-(dimethylamino)ethyl, oxetan-3-yl, (3-methyloxetan-3-yl)methyl, 2,2,2-trifloethyl, 2,2-difloethyl, 2-floethyl, 2,2,3,3,3-pentafloropropyl, xyclopropylmethyl, 1-xyclopropylethyl, (1-methylxyclopropyl)methyl, (2,2-dicloxyxyclopropyl)methyl, (2,2-dimethylxyclopropyl)methyl, allyl, propargyl (prop-2-yn-1-yl), 2-cloprop-2-en-1-yl, 3-phenylprop-2-yn-1-yl, 3,3-dicloprop-2-en-1-yl, 3,3-diclo-2-floroprop-2-en-1-yl, methylprop-2-yn-1-yl, 2-methylprop-2-en-1-yl, but-2-en-1-yl, but-3-en-1-yl, but-2-yn-1-yl, but-3-yn-1-yl, 4-clobut-2-yn-1-yl, 3-methylbut-2-en-1-yl, 3-methylbut-1-en-1-yl, 1-(2E)-1-methylbut-2-en-1-yl, (E)-pent-3-en-2-yl      hoặc      (Z)-pent-3-en-2-yl, xyclobutylmethyl, xyclopentylmethyl, xyclohexylmethyl, heptan-2-yl, isobutyl, 1,3-dioxolan-2-ylmethyl hoặc 1-ethyl-5-methyl-1H-pyrazol-4-methyl,

n và m      độc lập là số 0, 1, 2 hoặc 3,

ngoại trừ etyl [(1,5-diphenyl-1H-1,2,4-triazol-3-yl)oxy]axetat.

Rất đặc biệt tốt hơn là sáng chế đề xuất hợp chất có công thức chung (I) trong đó

$(R^1)_n$ -phenyl là các nhóm từ Q-1.1 đến Q-1.53

Q-1.1	Q-1.2	Q-1.3	Q-1.4	Q-1.5
Q-1.6	Q-1.7	Q-1.8	Q-1.9	Q-1.10
Q-1.11	Q-1.12	Q-1.13	Q-1.14	Q-1.15
Q-1.16	Q-1.17	Q-1.18	Q-1.19	Q-1.20
Q-1.21	Q-1.22	Q-1.23	Q-1.24	Q-1.25
Q-1.26	Q-1.27	Q-1.28	Q-1.29	Q-1.30

Q-1.31	Q-1.32	Q-1.33	Q-1.34	Q-1.35
Q-1.36	Q-1.37	Q-1.38	Q-1.39	Q-1.40
Q-1.41	Q-1.42	Q-1.43	Q-1.44	Q-1.45
Q-1.46	Q-1.47	Q-1.48	Q-1.49	Q-1.50
Q-1.51	Q-1.52	Q-1.53		

và  $(R^2)_m\text{-phenyl}$  là các nhóm từ Q-2.1 đến Q-2.53

Q-2.1	Q-2.2	Q-2.3	Q-2.4	Q-2.5
Q-2.6	Q-2.7	Q-2.8	Q-2.9	Q-2.10
Q-2.11	Q-2.12	Q-2.13	Q-2.14	Q-2.15
Q-2.16	Q-2.17	Q-2.18	Q-2.19	Q-2.20
Q-2.21	Q-2.22	Q-2.23	Q-2.24	Q-2.25
Q-2.26	Q-2.27	Q-2.28	Q-2.29	Q-2.30

Q-2.31	Q-2.32	Q-2.33	Q-2.34	Q-2.35
Q-2.36	Q-2.37	Q-2.38	Q-2.39	Q-2.40
Q-2.41	Q-2.42	Q-2.43	Q-2.44	Q-2.45
Q-2.46	Q-2.47	Q-2.48	Q-2.49	Q-2.50
Q-2.51	Q-2.52	Q-2.53		

 $R^3$ 

là hydro,

và

$R^4$  là hydro, methyl, ethyl, n-propyl, i-propyl, n-butyl, n-pentyl, phenyl, benzyl,  $CH_2(4\text{-Cl-}Ph)$ ,  $CH_2(4\text{-F-}Ph)$ ,  $CH_2(4\text{-OMe-}Ph)$ , 2-methoxyethyl, tetrahydrofuran-2-yl-methyl, tetrahydrofuran-3-ylmethyl, tetrahydropyran-2-ylmethyl, tetrahydropyran-3-

ylmethyl, tetrahydropyran-4-ylmethyl, methylpropionat-3-yl, etylpropionat-3-yl, metylaxetat-2-yl, etylaxetat-2-yl, metylpivalat-2-yl, etylpivalat-3-yl, methyl-2-metylpropanoat-3-yl, methyl-2,2-dimethylpropanoat-3-yl, etyl-2-methylpropanoat-3-yl, methyl-2-propanoat-2-yl, etyl-2-propanoat-2-yl, metylaxetat-2-yl, etylaxetat-2-yl, methyl-1-methylxyclopropancarboxylat-2-yl, etyl-1-methylxyclopropancarboxylat-2-yl, 2-(dimethylamino)ethyl, oxetan-3-yl, (3-metyloxetan-3-yl)methyl, 2,2,2-trifloethyl, 2,2-difloethyl, 2-floethyl, 2,2,3,3,3-pentafloropropyl, xyclopropylmethyl, 1-xcyclopropyletyl, (1-methylxyclopropyl)methyl, (2,2-dicloxcyclopropyl)methyl, (2,2-dimethylxyclopropyl)methyl, allyl, propargyl (prop-2-yn-1-yl), 2-cloprop-2-en-1-yl, 3-phenylprop-2-yn-1-yl, 3,3-dicloprop-2-en-1-yl, 3,3-diclo-2-floprop-2-en-1-yl, methylprop-2-yn-1-yl, 2-methylprop-2-en-1-yl, but-2-en-1-yl, but-3-en-1-yl, but-2-yn-1-yl, but-3-yn-1-yl, 4-clobut-2-yn-1-yl, 3-metylbut-2-en-1-yl, 3-metylbut-1-en-1-yl, 1-(2E)-1-metylbut-2-en-1-yl, (E)-pent-3-en-2-yl hoặc (Z)-pent-3-en-2-yl, xyclobutylmethyl, xcyclopentylmethyl, cyclohexylmethyl, heptan-2-yl, isobutyl, 1,3-dioxolan-2-ylmethyl hoặc 1-etyl-5-methyl-1H-pyrazol-4-metyl,

ngoại trừ etyl [(1,5-diphenyl-1H-1,2,4-triazol-3-yl)oxy]axetat.

Các định nghĩa gốc chung hoặc được ưu tiên nêu trên áp dụng cho cả sản phẩm cuối có công thức chung (I) và, tương ứng, các nguyên liệu ban đầu hoặc các hợp chất trung gian cần thiết để điều chế trong mỗi trường hợp. Các định nghĩa về các gốc này có thể kết hợp với các định nghĩa khác nếu muốn, nghĩa là bao gồm các tổ hợp nằm giữa các khoảng được ưu tiên đã nêu.

Đặc biệt quan tâm, chủ yếu là do hoạt tính diệt cỏ cao hơn, độ chọn lọc tốt hơn và/hoặc khả năng điều chế tốt hơn, là các hợp chất có công thức chung (I) đã nêu theo sáng chế hoặc muối của nó hoặc việc sử dụng nó theo sáng chế trong đó mỗi gốc riêng biệt có một trong số các nghĩa được ưu tiên đã được mô tả hoặc được mô tả dưới đây, hoặc cụ thể là các gốc trong đó một hoặc nhiều nghĩa được ưu tiên đã được mô tả hoặc được mô tả dưới đây xảy ra kết hợp.

Đối với các hợp chất theo sáng chế, các thuật ngữ được sử dụng trên đây và tiếp theo sẽ được làm sáng tỏ dưới đây. Các thuật ngữ này là quen thuộc đối với người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực và đặc biệt là có các định nghĩa được làm sáng tỏ

dưới đây:

Trừ khi được định nghĩa theo cách khác, tên của nhóm hóa học thường được hiểu sao cho việc gắn vào khung hoặc phần còn lại của phân tử là thông qua thành phần cấu trúc của nhóm hóa học tương ứng được đề cập cuối cùng, nghĩa là ví dụ trong trường hợp (C<sub>2</sub>-C<sub>8</sub>)-alkenyloxy thông qua nguyên tử oxy và trong trường hợp heteroxycycl-(C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>)-alkyl hoặc alkylO(O)C-(C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>)-alkyl trong mỗi trường hợp thông qua nguyên tử cacbon của nhóm alkyl.

Theo sáng chế, “alkylsulfonyl”, trừ khi được định nghĩa theo cách khác ở nơi khác - một mình hoặc như một phần của một nhóm hóa học - đề cập đến alkylsulfonyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh, tốt hơn là có từ 1 đến 8 hoặc từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon, ví dụ (nhưng không giới hạn ở) (C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>)-alkylsulfonyl như methylsulfonyl, etylsulfonyl, propylsulfonyl, 1-metyletylsulfonyl, butylsulfonyl, 1-methylpropylsulfonyl, 2-methylpropylsulfonyl, 1,1-dimetyletylsulfonyl, pentylsulfonyl, 1-methylbutylsulfonyl, 2-methylbutylsulfonyl, 3-methylbutylsulfonyl, 1,1-dimethylpropylsulfonyl, 1,2-dimethylpropylsulfonyl, 2,2-dimethylpropylsulfonyl, 1-etylpropylsulfonyl, hexylsulfonyl, 1-methylpentylsulfonyl, 2-methylpentylsulfonyl, 3-methylpentylsulfonyl, 4-methylpentylsulfonyl, 1,1-dimethylbutylsulfonyl, 1,2-dimethylbutylsulfonyl, 1,3-dimethylbutylsulfonyl, 2,2-dimethylbutylsulfonyl, 2,3-dimethylbutylsulfonyl, 3,3-dimethylbutylsulfonyl, 1-etylbutylsulfonyl, 2-etylbutylsulfonyl, 1,1,2-trimethylpropylsulfonyl, 1,2,2-trimethylpropylsulfonyl, 1-etyl-1-methylpropylsulfonyl và 1-etyl-2-methylpropylsulfonyl.

Theo sáng chế, “alkylthio”, trừ khi được định nghĩa theo cách khác ở nơi khác - một mình hoặc như một phần của một nhóm hóa học - đề cập đến S-alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh, tốt hơn là có từ 1 đến 8 hoặc từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon, như (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)-, (C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>)- hoặc (C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>)-alkylthio, ví dụ (nhưng không giới hạn ở) (C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>)-alkylthio như methylthio, ethylthio, propylthio, 1-metylethylthio, butylthio, 1-methylpropylthio, 2-methylpropylthio, 1,1-dimetylethylthio, pentylthio, 1-methylbutylthio, 2-methylbutylthio, 3-methylbutylthio, 1,1-dimethylpropylthio, 1,2-dimethylpropylthio, 2,2-dimethylpropylthio, 1-etylpropylthio, hexylthio, 1-methylpentylthio, 2-methylpentylthio, 3-methylpentylthio, 4-methylpentylthio, 1,1-dimethylbutylthio, 1,2-dimethylbutylthio, 1,3-dimethylbutylthio,

2,2-dimethylbutylthio, 2,3-dimethylbutylthio, 3,3-dimethylbutylthio, 1-ethylbutylthio, 2-ethylbutylthio, 1,1,2-trimethylpropylthio, 1,2,2-trimethylpropylthio, 1-ethyl-1-methylpropylthio và 1-ethyl-2-methylpropylthio.

Theo sáng chế, “alkylsulfinyl (alkyl-S(=O)-)”, trừ khi được định nghĩa theo cách khác ở nơi khác, biểu thị gốc alkyl mà được liên kết với khung thông qua -S(=O)-, như (C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>)- hoặc (C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>)-alkylsulfinyl, ví dụ (nhưng không giới hạn ở) (C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>)-alkylsulfinyl như methylsulfinyl, ethylsulfinyl, propylsulfinyl, 1-methylethylsulfinyl, butylsulfinyl, 1-methylpropylsulfinyl, 2-methylpropylsulfinyl, 1,1-dimethylethylsulfinyl, pentylsulfinyl, 1-methylbutylsulfinyl, 2-methylbutylsulfinyl, 3-methylbutylsulfinyl, 1,1-dimethylpropylsulfinyl, 1,2-dimethylpropylsulfinyl, 2,2-dimethylpropylsulfinyl, 1-ethylpropylsulfinyl, hexylsulfinyl, 1-methylpentylsulfinyl, 2-methylpentylsulfinyl, 3-methylpentylsulfinyl, 4-methylpentylsulfinyl, 1,1-dimethylbutylsulfinyl, 1,2-dimethylbutylsulfinyl, 1,3-dimethylbutylsulfinyl, 2,2-dimethylbutylsulfinyl, 2,3-dimethylbutylsulfinyl, 3,3-dimethylbutylsulfinyl, 1-ethylbutylsulfinyl, 2-ethylbutylsulfinyl, 1,1,2-trimethylpropylsulfinyl, 1,2,2-trimethylpropylsulfinyl, 1-ethyl-1-methylpropylsulfinyl và 1-ethyl-2-methylpropylsulfinyl.

“Alkoxy” biểu thị gốc alkyl được gắn qua nguyên tử oxy, ví dụ (nhưng không giới hạn ở) (C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>)-alkoxy như methoxy, ethoxy, propoxy, 1-methylether, butoxy, 1-methylpropoxy, 2-methylpropoxy, 1,1-dimethylether, pentoxy, 1-methylbutoxy, 2-methylbutoxy, 3-methylbutoxy, 1,1-dimethylpropoxy, 1,2-dimethylpropoxy, 2,2-dimethylpropoxy, 1-ethylpropoxy, hexoxy, 1-methylpentoxy, 2-methylpentoxy, 3-methylpentoxy, 4-methylpentoxy, 1,1-dimethylbutoxy, 1,2-dimethylbutoxy, 1,3-dimethylbutoxy, 2,2-dimethylbutoxy, 2,3-dimethylbutoxy, 3,3-dimethylbutoxy, 1-ethylbutoxy, 2-ethylbutoxy, 1,1,2-trimethylpropoxy, 1,2,2-trimethylpropoxy, 1-ethyl-1-methylpropoxy và 1-ethyl-2-methylpropoxy. Alkenyloxy biểu thị gốc alkenyl được gắn qua nguyên tử oxy, và alkynyloxy biểu thị gốc alkynyl được gắn qua nguyên tử oxy, như (C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>)-, (C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>)- hoặc (C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>)-alkenoxy và (C<sub>3</sub>-C<sub>6</sub>)- hoặc (C<sub>3</sub>-C<sub>4</sub>)-alkynoxy.

Theo sáng chế, “alkylcacbonyl” (alkyl-C(=O)-), trừ khi được định nghĩa theo cách khác ở nơi khác, là gốc alkyl được gắn với khung thông qua -C(=O)-, như (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)-, (C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>)- hoặc (C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>)-alkylcacbonyl. Số nguyên tử cacbon ở đây đề cập đến gốc

alkyl trong nhóm alkylcacbonyl.

Theo sáng ché, “alkoxycacbonyl (alkyl-O-C(=O)-)”, trừ khi được định nghĩa theo cách khác ở nơi khác, là gốc alkyl được gắn với khung thông qua -O-C(=O)-, như (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)-, (C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>)- hoặc (C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>)-alkoxycacbonyl. Số nguyên tử cacbon ở đây đề cập đến gốc alkyl trong nhóm alkoxycacbonyl. Tương tự, “alkenyloxyacacbonyl” và “alkynyloxyacacbonyl”, trừ khi được định nghĩa theo cách khác ở nơi khác, theo sáng ché, tương ứng là các gốc alkenyl và alkynyl được liên kết với khung thông qua -O-C(=O)-, như (C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>)-, (C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>)- hoặc (C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>)-alkenyloxyacacbonyl và (C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>)-, (C<sub>3</sub>-C<sub>6</sub>)- hoặc (C<sub>3</sub>-C<sub>4</sub>)-alkynyloxyacacbonyl. Số nguyên tử cacbon ở đây dùng để chỉ gốc alkenyl hoặc alkynyl trong nhóm alkenyloxyacacbonyl hoặc alkynyloxyacacbonyl.

Theo sáng ché, thuật ngữ “alkylcacbonyloxy” (alkyl-C(=O)-O-), trừ khi được định nghĩa theo cách khác ở nơi khác, là gốc alkyl được liên kết với khung thông qua oxy thuộc nhóm cacbonyloxy (-C(=O)-O-), như (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)-, (C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>)- hoặc (C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>)-alkylcacbonyloxy. Số nguyên tử cacbon ở đây đề cập đến gốc alkyl trong nhóm alkylcacbonyloxy.

Thuật ngữ “aryl” dùng để chỉ hệ thơm một vòng, hai vòng hoặc đa vòng được thể tùy ý tốt hơn là có từ 6 đến 14, đặc biệt là từ 6 đến 10, nguyên tử cacbon thuộc vòng, ví dụ phenyl, naphtyl, anthryl, phenanthrenyl và các vòng tương tự, tốt hơn là phenyl.

Thuật ngữ “aryl” được thể tùy ý cũng bao gồm hệ đa vòng, như tetrahydronaphthyl, indenyl, indanyl, fluorenyl, biphenylyl, trong đó vị trí liên kết nằm ở trên hệ thơm. Về mặt hệ thống, “aryl” thường còn được bao hàm bởi thuật ngữ “phenyl” được thể tùy ý”. Phần tử thể aryl được ưu tiên ở đây là, ví dụ, hydro, halogen, alkyl, cycloalkyl, cycloalkylalkyl, cycloalkenyl, haloxyaloalkyl, alkenyl, alkynyl, aryl, arylalkyl, heteroaryl, heteroarylalkyl, heteroxyacyl, heteroxyacylalkyl, alkoxyalkyl, alkylthio, haloalkylthio, haloalkyl, alkoxy, haloalkoxy, cycloalkoxy, cycloalkylalkoxy, aryloxy, heteroaryloxy, alkoxyalkoxy, alkynylalkoxy, alkenyloxy, bisalkylaminoalkoxy, tris[alkyl]silyl, bis[alkyl]arylsilyl, bis[alkyl]alkylsilyl, tris[alkyl]silylalkynyl, alkylalkynyl, cycloalkylalkynyl, haloalkylalkynyl, heteroxyacyl-N-alkoxy, nitro, xyano, amino, alkylamino, bisalkylamino, alkylcacbonylamino, cycloalkylcacbonylamino, arylcacbonylamino, alkoxyacacbonylamino,

alkoxycarbonylalkylamino, arylalkoxycarbonylalkylamino, hydroxycarbonyl, alkoxycarbonyl, aminocarbonyl, alkylaminocarbonyl, cycloalkylaminocarbonyl, bisalkylaminocarbonyl, heteroarylalkoxy, arylalkoxy.

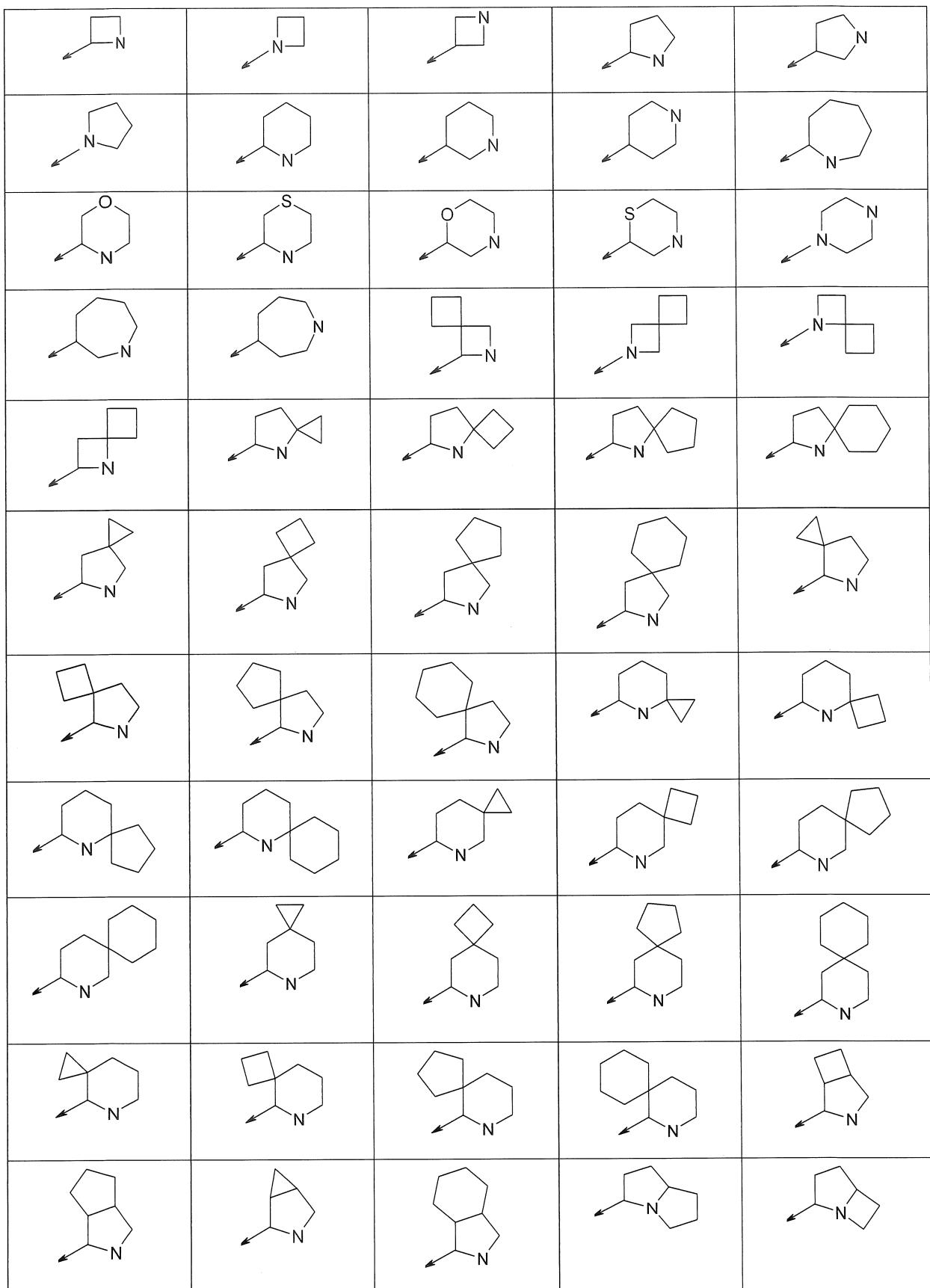
Góc dị vòng (heteroxycycl) chứa ít nhất một vòng dị vòng (=nhân vòng cacbon trong đó ít nhất một nguyên tử cacbon đã được thay thế bằng nguyên tử khác loại, tốt hơn là bằng nguyên tử khác loại từ nhóm gồm N, O, S, P) mà bão hòa, chưa bão hòa, bão hòa một phần hoặc dị thơm và có thể không được thay thế hoặc được thay thế, trong trường hợp này vị trí liên kết nằm ở nguyên tử vòng. Nếu gốc heteroxycycl hoặc vòng dị vòng được thay thế tùy ý, nó có thể được ngưng tụ với các vòng cacbon hoặc vòng dị vòng khác. Trong trường hợp heteroxycycl được thay thế tùy ý, hệ đa vòng cũng được bao gồm, ví dụ 8-azabicyclo[3.2.1]octanyl, 8-azabicyclo[2.2.2]octanyl hoặc 1-azabicyclo[2.2.1]heptyl. Heteroxycycl được thay thế tùy ý cũng bao gồm hệ vòng spiro, ví dụ 1-oxa-5-azaspiro[2.3]hexyl. Trừ khi được định nghĩa theo cách khác, vòng dị vòng tốt hơn là chứa 3 đến 9 nguyên tử vòng, đặc biệt là 3 đến 6 nguyên tử vòng, và một hoặc nhiều, tốt hơn là 1 đến 4, đặc biệt là 1, 2 hoặc 3, nguyên tử khác loại trong vòng dị vòng, tốt hơn là từ nhóm gồm N, O và S, mặc dù hai nguyên tử oxy không được trực tiếp liền kề, ví dụ với một nguyên tử khác loại từ nhóm gồm N, O và S: 1- hoặc 2- hoặc 3-pyrolidinyl, 3,4-dihydro-2H-pyrol-2- hoặc -3-yl, 2,3-dihydro-1H-pyrol-1- hoặc -2- hoặc -3- hoặc -4- hoặc -5-yl; 2,5-dihydro-1H-pyrol-1- hoặc -2- hoặc -3-yl, 1- hoặc 2- hoặc 3- hoặc 4-piperidinyl; 2,3,4,5-tetrahydropyridin-2- hoặc -3- hoặc -4- hoặc -5-yl hoặc -6-yl; 1,2,3,6-tetrahydropyridin-1- hoặc -2- hoặc -3- hoặc -4- hoặc -5- hoặc -6-yl; 1,2,3,4-tetrahydropyridin-1- hoặc -2- hoặc -3- hoặc -4- hoặc -5- hoặc -6-yl; 1,4-dihydropyridin-1- hoặc -2- hoặc -3- hoặc -4-yl; 2,3-dihydropyridin-2- hoặc -3- hoặc -4- hoặc -5- hoặc -6-yl; 2,5-dihydropyridin-2- hoặc -3- hoặc -4- hoặc -5- hoặc -6-yl, 1- hoặc 2- hoặc 3- hoặc 4-azepanyl; 2,3,4,5-tetrahydro-1H-azepin-1- hoặc -2- hoặc -3- hoặc -4- hoặc -5- hoặc -6- hoặc -7-yl; 2,3,4,7-tetrahydro-1H-azepin-1- hoặc -2- hoặc -3- hoặc -4- hoặc -5- hoặc -6- hoặc -7-yl; 2,3,6,7-tetrahydro-1H-azepin-1- hoặc -2- hoặc -3- hoặc -4-yl; 3,4,5,6-tetrahydro-2H-azepin-2- hoặc -3- hoặc -4- hoặc -5- hoặc -6- hoặc -7-yl; 4,5-dihydro-1H-azepin-1- hoặc -2- hoặc -3- hoặc -4-yl; 2,5-dihydro-1H-azepin-1- hoặc -2- hoặc -3- hoặc -4- hoặc -5- hoặc -6- hoặc -7-yl; 2,7-dihydro-1H-azepin-1- hoặc -2- hoặc -3- hoặc -4-yl; 2,3-dihydro-1H-azepin-1- hoặc -2- hoặc -3- hoặc -4- hoặc -5- hoặc -6-yl.

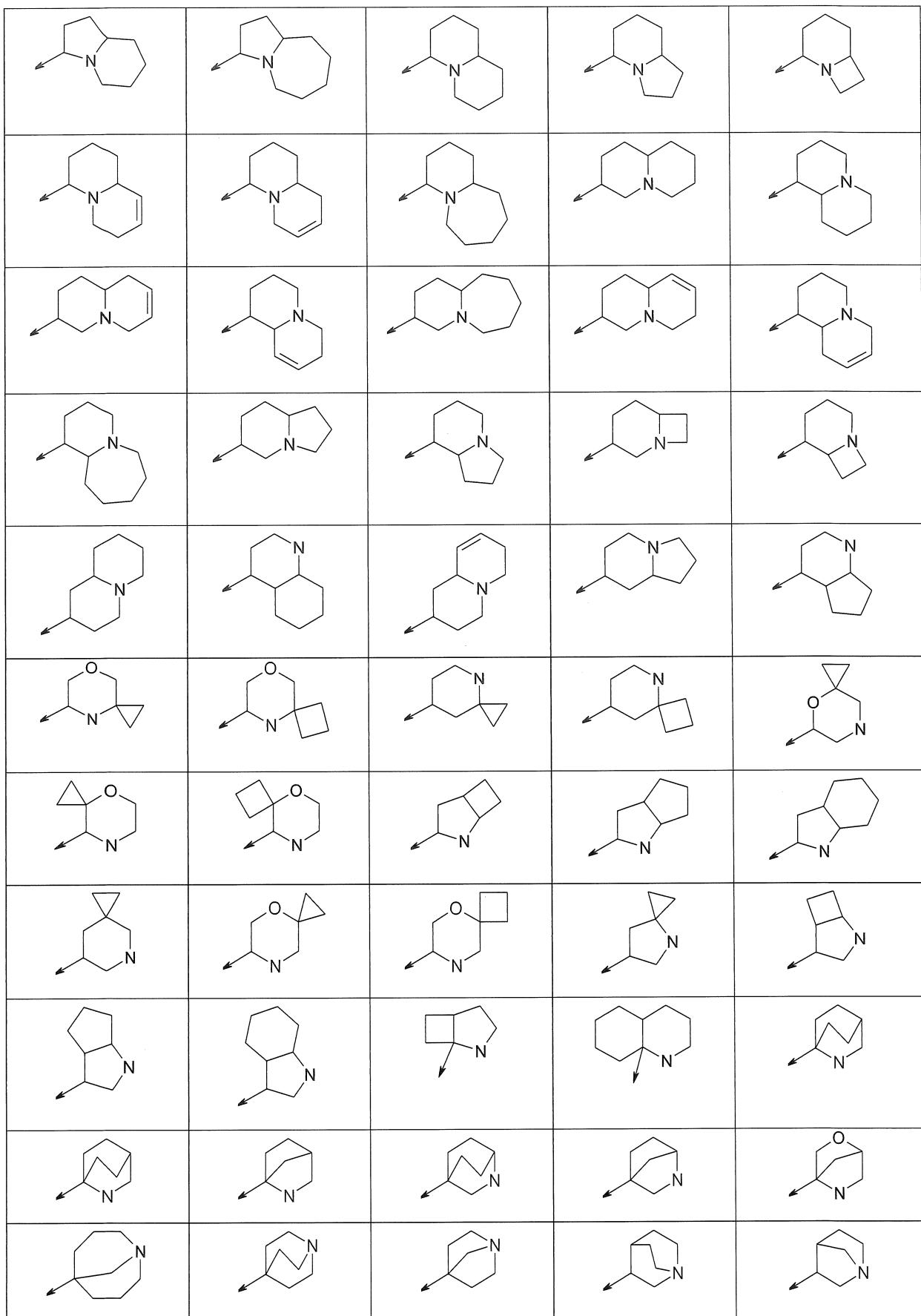
-6- hoặc -7-yl; 3,4-dihydro-2H-azepin-2- hoặc -3- hoặc -4- hoặc -5- hoặc -6- hoặc -7-yl; 3,6-dihydro-2H-azepin-2- hoặc -3- hoặc -4- hoặc -5- hoặc -6- hoặc -7-yl; 5,6-dihydro-2H-azepin-2- hoặc -3- hoặc -4- hoặc -5- hoặc -6- hoặc -7-yl; 4,5-dihydro-3H-azepin-2- hoặc -3- hoặc -4- hoặc -5- hoặc -6- hoặc -7-yl; 1H-azepin-1- hoặc -2- hoặc -3- hoặc -4- hoặc -5- hoặc -6- hoặc -7-yl; 2H-azepin-2- hoặc -3- hoặc -4- hoặc -5- hoặc -6- hoặc -7-yl; 3H-azepin-2- hoặc -3- hoặc -4- hoặc -5- hoặc -6- hoặc -7-yl; 4H-azepin-2- hoặc -3- hoặc -4- hoặc -5- hoặc -6- hoặc -7-yl, 2- hoặc 3-oxolanyl (= 2- hoặc 3-tetrahydrofuranyl); 2,3-dihydrofuran-2- hoặc -3- hoặc -4- hoặc -5- hoặc -6- hoặc -7-yl; 2,5-dihydrofuran-2- hoặc -3-yl, 2- hoặc 3- hoặc 4-oxanyl (= 2- hoặc 3- hoặc 4-tetrahydropyranyl); 3,4-dihydro-2H-pyran-2- hoặc -3- hoặc -4- hoặc -5- hoặc -6-yl; 3,6-dihydro-2H-pyran-2- hoặc -3- hoặc -4- hoặc -5- hoặc -6-yl; 2H-pyran-2- hoặc -3- hoặc -4- hoặc -5- hoặc -6-yl; 4H-pyran-2- hoặc -3- hoặc -4-yl, 2- hoặc 3- hoặc 4-oxepanyl; 2,3,4,5-tetrahydrooxepin-2- hoặc -3- hoặc -4- hoặc -5- hoặc -6- hoặc -7-yl; 2,3,4,7-tetrahydrooxepin-2- hoặc -3- hoặc -4- hoặc -5- hoặc -6- hoặc -7-yl; 2,3,6,7-tetrahydrooxepin-2- hoặc -3- hoặc -4-yl; 2,3-dihydrooxepin-2- hoặc -3- hoặc -4- hoặc -5- hoặc -6- hoặc -7-yl; 4,5-dihydrooxepin-2- hoặc -3- hoặc -4-yl; 2,5-dihydrooxepin-2- hoặc -3- hoặc -4- hoặc -5- hoặc -6- hoặc -7-yl; oxepin-2- hoặc -3- hoặc -4- hoặc -5- hoặc -6- hoặc -7-yl; 2- hoặc 3-tetrahydrothiophenyl; 2,3-dihydrothiophen-2- hoặc -3- hoặc -4- hoặc -5-yl; 2,5-dihydrothiophen-2- hoặc -3-yl; tetrahydro-2H-thiopyran-2- hoặc -3- hoặc -4-yl; 3,4-dihydro-2H-thiopyran-2- hoặc -3- hoặc -4- hoặc -5- hoặc -6-yl; 2H-thiopyran-2- hoặc -3- hoặc -4- hoặc -5- hoặc -6-yl; 4H-thiopyran-2- hoặc -3- hoặc -4-yl. Các dị vòng 3 cạnh và 4 cạnh được ưu tiên là, ví dụ, 1- hoặc 2-aziridinyl, oxiranyl, thiiranyl, 1- hoặc 2- hoặc 3-azetidinyl, 2- hoặc 3-oxetanyl, 2- hoặc 3-thietanyl, 1,3-dioxetan-2-yl. Các ví dụ khác về “heteroxycycl” là gốc dị vòng được hydro hóa một phần hoặc hoàn toàn có hai nguyên tử khác loại từ nhóm gồm N, O và S, ví dụ 1- hoặc 2- hoặc 3- hoặc 4-pyrazolidinyl; 4,5-dihydro-3H-pyrazol-3- hoặc 4- hoặc 5-yl; 4,5-dihydro-1H-pyrazol-1- hoặc 3- hoặc 4- hoặc 5-yl; 2,3-dihydro-1H-pyrazol-1- hoặc 2- hoặc 3- hoặc 4- hoặc 5-yl; 1- hoặc 2- hoặc 3- hoặc 4- imidazolidinyl; 2,3-dihydro-1H-imidazol-1- hoặc 2- hoặc 3- hoặc 4-yl; 2,5-dihydro-1H-imidazol-1- hoặc 2- hoặc 4- hoặc 5-yl; 4,5-dihydro-1H-imidazol-1- hoặc 2- hoặc 4- hoặc 5-yl; hexahydripyridazin-1- hoặc 2- hoặc 3- hoặc

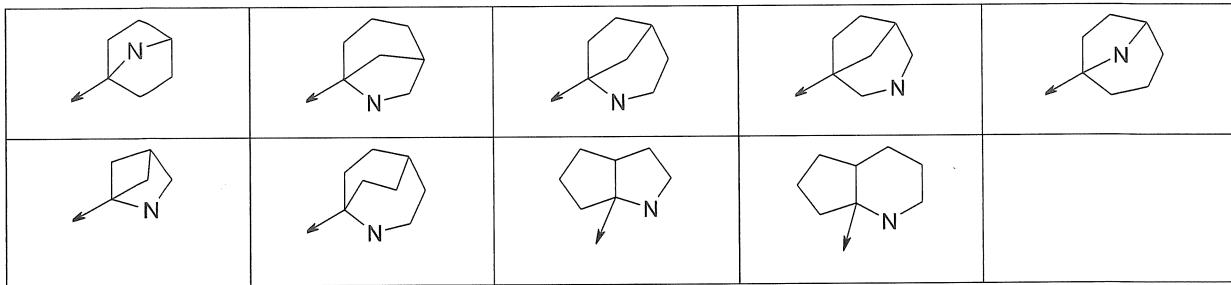
4-yl; 1,2,3,4-tetrahydropyridazin-1- hoặc 2- hoặc 3- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6-yl; 1,2,3,6-tetrahydropyridazin-1- hoặc 2- hoặc 3- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6-yl; 1,4,5,6-tetrahydropyridazin-1- hoặc 3- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6-yl; 3,4,5,6-tetrahydropyridazin-3- hoặc 4- hoặc 5-yl; 4,5-dihydropyridazin-3- hoặc 4-yl; 3,4-dihydropyridazin-3- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6-yl; 3,6-dihydropyridazin-3- hoặc 4-yl; 1,6-dihydropyrazin-1- hoặc 3- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6-yl; hexahydropyrimidin-1- hoặc 2- hoặc 3- hoặc 4-yl; 1,4,5,6-tetrahydropyrimidin-1- hoặc 2- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6-yl; 1,2,5,6-tetrahydropyrimidin-1- hoặc 2- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6-yl; 1,2,3,4-tetrahydropyrimidin-1- hoặc 2- hoặc 3- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6-yl; 1,6-dihydropyrimidin-1- hoặc 2- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6-yl; 1,2-dihydropyrimidin-1- hoặc 2- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6-yl; 2,5-dihydropyrimidin-2- hoặc 4- hoặc 5-yl; 4,5-dihydropyrimidin-4- hoặc 5- hoặc 6-yl; 1,4-dihydropyrimidin-1- hoặc 2- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6-yl; 1- hoặc 2- hoặc 3-piperazinyl; 1,2,3,6-tetrahydropyrazin-1- hoặc 2- hoặc 3- hoặc 5- hoặc 6-yl; 1,2,3,4-tetrahydropyrazin-1- hoặc 2- hoặc 3- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6-yl; 1,2-dihydropyrazin-1- hoặc 2- hoặc 3- hoặc 5- hoặc 6-yl; 2,3-dihydropyrazin-2- hoặc 3- hoặc 5- hoặc 6-yl; 2,5-dihydropyrazin-2- hoặc 3-yl; 1,3-dioxolan-2- hoặc 4- hoặc 5-yl; 1,3-dioxol-2- hoặc 4-yl; 1,3-dioxan-2- hoặc 4- hoặc 5-yl; 4H-1,3-dioxin-2- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6-yl; 1,4-dioxan-2- hoặc 3- hoặc 5- hoặc 6-yl; 2,3-dihydro-1,4-dioxin-2- hoặc 3- hoặc 5- hoặc 6-yl; 1,4-dioxin-2- hoặc 3-yl; 1,2-dithiolan-3- hoặc 4-yl; 3H-1,2-dithiol-3- hoặc 4- hoặc 5-yl; 1,3-dithiolan-2- hoặc 4-yl; 1,3-dithiol-2- hoặc 4-yl; 1,2-dithian-3- hoặc 4-yl; 3,4-dihydro-1,2-dithiin-3- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6-yl; 3,6-dihydro-1,2-dithiin-3- hoặc 4-yl; 1,2-dithiin-3- hoặc 4-yl; 1,3-dithian-2- hoặc 4- hoặc 5-yl; 4H-1,3-dithiin-2- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6-yl; isoxazolidin-2- hoặc 3- hoặc 4- hoặc 5-yl; 2,3-dihydroisoxazol-2- hoặc 3- hoặc 4- hoặc 5-yl; 2,5-dihydroisoxazol-2- hoặc 3- hoặc 4- hoặc 5-yl; 4,5-dihydroisoxazol-3- hoặc 4- hoặc 5-yl; 1,3-oxazolidin-2- hoặc 3- hoặc 4- hoặc 5-yl; 2,3-dihydro-1,3-oxazol-2- hoặc 3- hoặc 4- hoặc 5-yl; 2,5-dihydro-1,3-oxazol-2- hoặc 4- hoặc 5-yl; 4,5-dihydro-1,3-oxazol-2- hoặc 4- hoặc 5-yl; 1,2-oxazinan-2- hoặc 3- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6-yl; 3,4-dihydro-2H-1,2-oxazin-2- hoặc 3- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6-yl; 3,6-dihydro-2H-1,2-oxazin-2- hoặc 3- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6-yl; 5,6-dihydro-2H-1,2-oxazin-2- hoặc 3- hoặc 4- 또는 5- hoặc 6-yl; 5,6-dihydro-4H-1,2-oxazin-3- hoặc 4- 또는 5- hoặc 6-yl; 2H-1,2-oxazin-2- hoặc 3- 또는 4- 또는 5- 또는 6-yl.

yl; 6H-1,2-oxazin-3- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6-yl; 4H-1,2-oxazin-3- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6-yl; 1,3-oxazinan-2- hoặc 3- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6-yl; 3,4-dihydro-2H-1,3-oxazin-2- hoặc 3- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6-yl; 3,6-dihydro-2H-1,3-oxazin-2- hoặc 3- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6-yl; 5,6-dihydro-2H-1,3-oxazin-2- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6-yl; 5,6-dihydro-4H-1,3-oxazin-2- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6-yl; 2H-1,3-oxazin-2- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6-yl; 6H-1,3-oxazin-2- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6-yl; 4H-1,3-oxazin-2- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6-yl; morpholin-2- hoặc 3- hoặc 4-yl; 3,4-dihydro-2H-1,4-oxazin-2- hoặc 3- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6-yl; 3,6-dihydro-2H-1,4-oxazin-2- hoặc 3- hoặc 5- hoặc 6-yl; 2H-1,4-oxazin-2- hoặc 3- hoặc 5- hoặc 6-yl; 4H-1,4-oxazin-2- hoặc 3-yl; 1,2-oxazepan-2- hoặc 3- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6- hoặc 7-yl; 2,3,4,5-tetrahydro-1,2-oxazepin-2- hoặc 3- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6- hoặc 7-yl; 2,3,4,7-tetrahydro-1,2-oxazepin-2- hoặc 3- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6- hoặc 7-yl; 2,3,6,7-tetrahydro-1,2-oxazepin-2- hoặc 3- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6- hoặc 7-yl; 2,5,6,7-tetrahydro-1,2-oxazepin-3- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6- hoặc 7-yl; 2,3-dihydro-1,2-oxazepin-2- hoặc 3- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6- hoặc 7-yl; 2,5-dihydro-1,2-oxazepin-2- hoặc 3- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6- hoặc 7-yl; 4,5-dihydro-1,2-oxazepin-3- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6- hoặc 7-yl; 4,5-dihydro-1,2-oxazepin-3- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6- hoặc 7-yl; 4,7-dihydro-1,2-oxazepin-3- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6- hoặc 7-yl; 6,7-dihydro-1,2-oxazepin-3- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6- hoặc 7-yl; 1,2-oxazepin-3- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6- hoặc 7-yl; 1,3-oxazepan-2- hoặc 3- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6- hoặc 7-yl; 2,3,4,5-tetrahydro-1,3-oxazepin-2- hoặc 3- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6- hoặc 7-yl; 2,3,4,7-tetrahydro-1,3-oxazepin-2- hoặc 3- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6- hoặc 7-yl; 2,3,6,7-tetrahydro-1,3-oxazepin-2- hoặc 3- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6- hoặc 7-yl; 2,5,6,7-tetrahydro-1,3-oxazepin-2- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6- hoặc 7-yl; 4,5,6,7-tetrahydro-1,3-oxazepin-2- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6- hoặc 7-yl; 2,3-dihydro-1,3-oxazepin-2- hoặc 3- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6- hoặc 7-yl; 2,5-dihydro-1,3-oxazepin-2- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6- hoặc 7-yl; 4,5-dihydro-1,3-oxazepin-2- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6- hoặc 7-yl; 4,7-dihydro-1,3-oxazepin-2- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6- hoặc 7-yl; 6,7-dihydro-1,3-oxazepin-2- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6- hoặc 7-yl; 1,3-oxazepin-2- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6- hoặc 7-yl; 1,4-oxazepan-2- hoặc 3- hoặc 5- hoặc 6- hoặc 7-yl; 2,3,4,5-tetrahydro-1,4-oxazepin-2- hoặc 3- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6- hoặc 7-yl;

6- hoặc 7-yl; 2,3,4,7-tetrahydro-1,4-oxazepin-2- hoặc 3- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6- hoặc 7-yl; 2,3,6,7-tetrahydro-1,4-oxazepin-2- hoặc 3- hoặc 5- hoặc 6- hoặc 7-yl; 2,5,6,7-tetrahydro-1,4-oxazepin-2- hoặc 3- hoặc 5- hoặc 6- hoặc 7-yl; 4,5,6,7-tetrahydro-1,4-oxazepin-2- hoặc 3- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6- hoặc 7-yl; 2,3-dihydro-1,4-oxazepin-2- hoặc 3- hoặc 5- hoặc 6- hoặc 7-yl; 2,5-dihydro-1,4-oxazepin-2- hoặc 3- hoặc 5- hoặc 6- hoặc 7-yl; 2,7-dihydro-1,4-oxazepin-2- hoặc 3- hoặc 5- hoặc 6- hoặc 7-yl; 4,5-dihydro-1,4-oxazepin-2- hoặc 3- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6- hoặc 7-yl; 6,7-dihydro-1,4-oxazepin-2- hoặc 3- hoặc 5- hoặc 6- hoặc 7-yl; 1,4-oxazepin-2- hoặc 3- hoặc 5- hoặc 6- hoặc 7-yl; isothiazolidin-2- hoặc 3- hoặc 4- hoặc 5-yl; 2,3-dihydroisothiazol-2- hoặc 3- hoặc 4- hoặc 5-yl; 2,5-dihydroisothiazol-2- hoặc 3- hoặc 4- hoặc 5-yl; 4,5-dihydroisothiazol-3- hoặc 4- hoặc 5-yl; 1,3-thiazolidin-2- hoặc 3- hoặc 4- hoặc 5-yl; 2,3-dihydro-1,3-thiazol-2- hoặc 3- hoặc 4- hoặc 5-yl; 2,5-dihydro-1,3-thiazol-2- hoặc 4- hoặc 5-yl; 4,5-dihydro-1,3-thiazol-2- hoặc 4- hoặc 5-yl; 1,3-thiazinan-2- hoặc 3- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6-yl; 3,4-dihydro-2H-1,3-thiazin-2- hoặc 3- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6-yl; 3,6-dihydro-2H-1,3-thiazin-2- hoặc 3- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6-yl; 5,6-dihydro-2H-1,3-thiazin-2- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6-yl; 5,6-dihydro-4H-1,3-thiazin-2- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6-yl; 2H-1,3-thiazin-2- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6-yl; 6H-1,3-thiazin-2- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6-yl; 4H-1,3-thiazin-2- hoặc 4- hoặc 5- hoặc 6-yl. Các ví dụ khác của “heteroxycycl” là các gốc dị vòng được hydro hóa một phần hoặc hoàn toàn có 3 nguyên tử khác loại từ nhóm gồm N, O và S, ví dụ 1,4,2-dioxazolidin-2- hoặc 3- hoặc 5-yl; 1,4,2-dioxazol-3- hoặc 5-yl; 1,4,2-dioxazinan-2- hoặc -3- hoặc 5- hoặc 6-yl; 5,6-dihydro-1,4,2-dioxazin-3- hoặc 5- hoặc 6-yl; 1,4,2-dioxazin-3- hoặc 5- hoặc 6-yl; 1,4,2-dioxazepan-2- hoặc 3- hoặc 5- hoặc 6- hoặc 7-yl; 6,7-dihydro-5H-1,4,2-dioxazepin-3- hoặc 5- hoặc 6- hoặc 7-yl; 2,3-dihydro-7H-1,4,2-dioxazepin-2- hoặc 3- hoặc 5- hoặc 6- hoặc 7-yl; 2,3-dihydro-5H-1,4,2-dioxazepin-2- hoặc 3- hoặc 5- hoặc 6- hoặc 7-yl; 5H-1,4,2-dioxazepin-3- hoặc 5- hoặc 6- hoặc 7-yl; 7H-1,4,2-dioxazepin-3- hoặc 5- hoặc 6- hoặc 7-yl. Các ví dụ về cấu trúc của dị vòng mà tùy ý được thể tiếp cũng được liệt kê dưới đây:







Dị vòng được liệt kê trên đây tốt hơn là được thẻ, ví dụ, bằng hydro, halogen, alkyl, haloalkyl, hydroxyl, alkoxy, xycloalkoxy, aryloxy, alkoxyalkyl, alkoxyalkoxy, xycloalkyl, haloxycloalkyl, aryl, arylalkyl, heteroaryl, heteroxycycl, alkenyl, alkylcacbonyl, xycloalkylcacbonyl, arylcacbonyl, heteroarylcacbonyl, alkoxycacbonyl, hydroxycacbonyl, xycloalkoxycacbonyl, xycloalkylalkoxycacbonyl, alkoxycacbonyl-alkyl, arylalkoxycacbonyl, arylalkoxycacbonylalkyl, alkynyl, alkynylalkyl, alkylalkynyl, trisalkylsilylalkynyl, nitro, amino, xyano, haloalkoxy, haloalkylthio, alkylthio, hydrothio, hydroxyalkyl, oxo, heteroarylalkoxy, arylalkoxy, heteroxycyclalkoxy, heteroxycyclalkylthio, heteroxycyclxyloxy, heteroxycyclthio, heteroaryloxy, bisalkylamino, alkylamino, xycloalkylamino, hydroxycacbonyl-alkylamino, alkoxycacbonylalkylamino, arylalkoxycacbonylalkyl-amino, alkoxy-cacbonylalkyl(alkyl)amino, aminocacbonyl, alkylaminocacbonyl, bisalkylamino-cacbonyl, xycloalkylaminocacbonyl, hydroxycacbonylalkylamino-cacbonyl, alkoxycacbonylalkylaminocacbonyl, arylalkoxycacbonylalkylaminocacbonyl.

Khi cấu trúc bazơ được thẻ "bằng một hoặc nhiều gốc" từ danh sách gồm các gốc (= nhóm) hoặc nhóm được định nghĩa thông thường gồm các gốc, trong mỗi trường hợp bao gồm sự thẻ đồng thời bởi nhiều gốc giống nhau và/hoặc khác nhau về cấu trúc.

Trong trường hợp dị vòng nitơ bão hòa một phần hoặc hoàn toàn, dị vòng này có thể được nối với phần còn lại của phân tử thông qua cacbon hoặc thông qua nitơ.

Các phân tử thẻ thích hợp đối với gốc dị vòng được thẻ là các phân tử thẻ được chỉ ra tiếp theo dưới đây, và ngoài ra còn có oxo và thioxo. Nhóm oxo như phân tử thẻ trên nguyên tử cacbon thuộc vòng là, ví dụ, nhóm cacbonyl trong vòng dị vòng. Kết quả là, lacton và lactam tốt hơn là cũng được bao gồm. Nhóm oxo cũng có thể xuất hiện trên các nguyên tử khác loại thuộc vòng, mà có thể tồn tại ở các trạng thái oxy hóa khác

nhau, ví dụ trong trường hợp N và S, và trong trường hợp đó tạo thành, ví dụ, các nhóm  $-N(O)-$ ,  $-S(O)-$  (còn gọi tắt là SO) và  $-S(O)_2-$  (còn gọi tắt là SO<sub>2</sub>) trong vòng dị vòng. Trong trường hợp các nhóm  $-N(O)-$  và  $-S(O)-$ , các chất đồng phân đối ảnh trong mỗi trường hợp đều được bao gồm.

Theo sáng chế, khái niệm “heteroaryl” là các hợp chất dị thơm, nghĩa là các hợp chất dị vòng thơm chưa bão hòa hoàn toàn, tốt hơn là vòng có 5 đến 7 cạnh có 1 đến 4, tốt hơn là 1 hoặc 2, nguyên tử khác loại giống nhau hoặc khác nhau, tốt hơn là O, S hoặc N. Heteroaryl theo sáng chế, ví dụ, 1H-pyrol-1-yl; 1H-pyrol-2-yl; 1H-pyrol-3-yl; furan-2-yl; furan-3-yl; thien-2-yl; thien-3-yl, 1H-imidazol-1-yl; 1H-imidazol-2-yl; 1H-imidazol-4-yl; 1H-imidazol-5-yl; 1H-pyrazol-1-yl; 1H-pyrazol-3-yl; 1H-pyrazol-4-yl; 1H-pyrazol-5-yl, 1H-1,2,3-triazol-1-yl, 1H-1,2,3-triazol-4-yl, 1H-1,2,3-triazol-5-yl, 2H-1,2,3-triazol-2-yl, 2H-1,2,3-triazol-4-yl, 1H-1,2,4-triazol-1-yl, 1H-1,2,4-triazol-3-yl, 4H-1,2,4-triazol-4-yl, 1,2,4-oxadiazol-3-yl, 1,2,4-oxadiazol-5-yl, 1,3,4-oxadiazol-2-yl, 1,2,3-oxadiazol-4-yl, 1,2,3-oxadiazol-5-yl, 1,2,5-oxadiazol-3-yl, azepinyl, pyridin-2-yl, pyridin-3-yl, pyridin-4-yl, pyrazin-2-yl, pyrazin-3-yl, pyrimidin-2-yl, pyrimidin-4-yl, pyrimidin-5-yl, pyridazin-3-yl, pyridazin-4-yl, 1,3,5-triazin-2-yl, 1,2,4-triazin-3-yl, 1,2,4-triazin-5-yl, 1,2,4-triazin-6-yl, 1,2,3-triazin-4-yl, 1,2,3-triazin-5-yl, 1,2,4-, 1,3,2-, 1,3,6- và 1,2,6-oxazinyl, isoaxazol-3-yl, isoaxazol-4-yl, isoaxazol-5-yl, 1,3-oxazol-2-yl, 1,3-oxazol-4-yl, 1,3-oxazol-5-yl, isothiazol-3-yl, isothiazol-4-yl, isothiazol-5-yl, 1,3-thiazol-2-yl, 1,3-thiazol-4-yl, 1,3-thiazol-5-yl, oxepinyl, thiepinyl, 1,2,4-triazolonyl và 1,2,4-diazepinyl, 2H-1,2,3,4-tetrazol-5-yl, 1H-1,2,3,4-tetrazol-5-yl, 1,2,3,4-oxatriazol-5-yl, 1,2,3,4-thiatriazol-5-yl, 1,2,3,5-oxatriazol-4-yl, 1,2,3,5-thiatriazol-4-yl. Các nhóm heteroaryl theo sáng chế cũng có thể được thể bằng một hoặc nhiều gốc giống hoặc khác nhau. Nếu hai nguyên tử cacbon liền kề là một phần của một vòng thơm khác, hệ này là hệ dị thơm ngưng tụ, như dị thơm được ngưng tụ benzo hoặc được polyannelat hóa. Các ví dụ được ưu tiên là quinolin (chẳng hạn quinolin-2-yl, quinolin-3-yl, quinolin-4-yl, quinolin-5-yl, quinolin-6-yl, quinolin-7-yl, quinolin-8-yl); isoquinolin (chẳng hạn isoquinolin-1-yl, isoquinolin-3-yl, isoquinolin-4-yl, isoquinolin-5-yl, isoquinolin-6-yl, isoquinolin-7-yl, isoquinolin-8-yl); quinoxalin; quinazolin; xinolin; 1,5-naphthyridin; 1,6-naphthyridin; 1,7-naphthyridin; 1,8-naphthyridin; 2,6-naphthyridin; 2,7-naphthyridin; phtalazin; pyridopyrazin; pyridopyrimidin; pyridopyridazin; pteridin;

pyrimidopyrimidin. Ví dụ về heteroaryl còn là các vòng được ngưng tụ benzo có 5 hoặc 6 cạnh từ nhóm gồm 1H-indol-1-yl, 1H-indol-2-yl, 1H-indol-3-yl, 1H-indol-4-yl, 1H-indol-5-yl, 1H-indol-6-yl, 1H-indol-7-yl, 1-benzofuran-2-yl, 1-benzofuran-3-yl, 1-benzofuran-4-yl, 1-benzofuran-5-yl, 1-benzofuran-6-yl, 1-benzofuran-7-yl, 1-benzothiophen-2-yl, 1-benzothiophen-3-yl, 1-benzothiophen-4-yl, 1-benzothiophen-5-yl, 1-benzothiophen-6-yl, 1-benzothiophen-7-yl, 1H-indazol-1-yl, 1H-indazol-3-yl, 1H-indazol-4-yl, 1H-indazol-5-yl, 1H-indazol-6-yl, 1H-indazol-7-yl, 2H-indazol-2-yl, 2H-indazol-3-yl, 2H-indazol-4-yl, 2H-indazol-5-yl, 2H-indazol-6-yl, 2H-indazol-7-yl, 2H-isoindol-2-yl, 2H-isoindol-1-yl, 2H-isoindol-3-yl, 2H-isoindol-4-yl, 2H-isoindol-5-yl, 2H-isoindol-6-yl; 2H-isoindol-7-yl, 1H-benzimidazol-1-yl, 1H-benzimidazol-2-yl, 1H-benzimidazol-4-yl, 1H-benzimidazol-5-yl, 1H-benzimidazol-6-yl, 1H-benzimidazol-7-yl, 1,3-benzoxazol-2-yl, 1,3-benzoxazol-4-yl, 1,3-benzoxazol-5-yl, 1,3-benzoxazol-6-yl, 1,3-benzoxazol-7-yl, 1,3-benzothiazol-2-yl, 1,3-benzothiazol-4-yl, 1,3-benzothiazol-5-yl, 1,3-benzothiazol-6-yl, 1,3-benzothiazol-7-yl, 1,2-benzisoxazol-3-yl, 1,2-benzisoxazol-4-yl, 1,2-benzisoxazol-5-yl, 1,2-benzisoxazol-6-yl, 1,2-benzisoxazol-7-yl, 1,2-benzisothiazol-3-yl, 1,2-benzisothiazol-4-yl, 1,2-benzisothiazol-5-yl, 1,2-benzisothiazol-6-yl, 1,2-benzisothiazol-7-yl.

Thuật ngữ "halogen" biểu thị, ví dụ, flo, clo, brom hoặc iod. Nếu thuật ngữ này được dùng cho một gốc, "halogen" biểu thị, ví dụ, nguyên tử flo, clo, brom hoặc iod.

Theo sáng chế, "alkyl" có nghĩa gốc hydrocacbon bão hòa, mạch hở thẳng hoặc phân nhánh mà tùy ý được thê một hoặc nhiều lần, và trong trường hợp sau được gọi là "alkyl được thê". Các phần tử thê được ưu tiên là các nguyên tử halogen, alkoxy, haloalkoxy, xyano, alkylthio, haloalkylthio, xycloalkyl, alcoxycacbonyl, hydroxycacbonyl, heteroxycycl, hetaryl, aryl, amino hoặc các nhóm nitro, đặc biệt ưu tiên đối với metoxy, methyl, floalkyl, xyano, nitro, flo, clo, brom hoặc iod. Tiết tố "bis" cũng bao gồm tổ hợp gồm các gốc alkyl khác nhau, chẳng hạn methyl(etyl) hoặc etyl(methyl).

"Haloalkyl", "-alkenyl" và "-alkynyl" tương ứng biểu thị alkyl, alkenyl và alkynyl được thê một phần hoặc hoàn toàn bằng các nguyên tử halogen giống hoặc khác nhau, ví dụ monohaloalkyl như CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>Cl, CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>Br, CHClCH<sub>3</sub>, CH<sub>2</sub>Cl, CH<sub>2</sub>F;

perhaloalkyl như  $\text{CCl}_3$ ,  $\text{CClF}_2$ ,  $\text{CFCl}_2$ ,  $\text{CF}_2\text{CClF}_2$ ,  $\text{CF}_2\text{CClFCF}_3$ ; polyhaloalkyl như  $\text{CH}_2\text{CHFCl}$ ,  $\text{CF}_2\text{CClFH}$ ,  $\text{CF}_2\text{CBrFH}$ ,  $\text{CH}_2\text{CF}_3$ ; thuật ngữ perhaloalkyl cũng bao hàm thuật ngữ perfloalkyl.

“Alkyl được flo hóa một phần” biểu thị hydrocacbon no mạch thẳng hoặc mạch nhánh được thay thế một hoặc nhiều lần bằng flo, trong đó các nguyên tử flo được đề cập có thể có mặt ở dạng phần tử thay thế trên một hoặc nhiều nguyên tử cacbon khác nhau thuộc mạch hydrocarbon mạch thẳng hoặc mạch nhánh, ví dụ  $\text{CHFCH}_3$ ,  $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{F}$ ,  $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CF}_3$ ,  $\text{CHF}_2$ ,  $\text{CH}_2\text{F}$ ,  $\text{CHFCF}_2\text{CF}_3$ .

“Haloalkyl được flo hóa một phần” biểu thị hydrocacbon no mạch thẳng hoặc mạch nhánh được thay thế bằng các nguyên tử halogen khác nhau với ít nhất một nguyên tử flo, trong đó các nguyên tử halogen bất kỳ khác tùy ý có mặt được chọn từ nhóm gồm flo, clo hoặc brom, iot. Các nguyên tử halogen tương ứng có thể có mặt ở dạng phần tử thay thế trên một hoặc nhiều nguyên tử cacbon khác nhau của mạch hydrocacbon mạch thẳng hoặc mạch nhánh. Haloalkyl được flo hóa một phần cũng bao gồm sự thay thế hoàn toàn mạch thẳng hoặc mạch nhánh bằng halogen bao gồm ít nhất một nguyên tử flo.

“Haloalkoxy” là, ví dụ,  $\text{OCF}_3$ ,  $\text{OCHF}_2$ ,  $\text{OCH}_2\text{F}$ ,  $\text{OCF}_2\text{CF}_3$ ,  $\text{OCH}_2\text{CF}_3$  và  $\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{Cl}$ ; điều này áp dụng tương ứng cho haloalkenyl và các gốc được thay thế halogen khác.

Ví dụ, cụm từ "( $\text{C}_1\text{-C}_4$ )-alkyl" được đề cập ở đây là chú thích ngắn gọn cho alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh có 1 đến 4 nguyên tử cacbon theo khoảng được chỉ ra đối với nguyên tử cacbon, nghĩa là bao hàm các gốc methyl, etyl, 1-propyl, 2-propyl, 1-butyl, 2-butyl, 2-metylpropyl hoặc tert-butyl. Gốc alkyl thông thường với khoảng nguyên tử cacbon được chỉ ra lớn hơn, chẳng hạn "( $\text{C}_1\text{-C}_6$ )-alkyl", tương ứng cũng bao gồm gốc alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh với số nguyên tử cacbon lớn hơn, nghĩa là theo phần ví dụ cũng bao gồm gốc alkyl có 5 và 6 nguyên tử cacbon.

Trừ khi được chỉ ra cụ thể, khung cacbon thấp hơn là được ưu tiên, ví dụ có từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon, hoặc có từ 2 đến 6 nguyên tử cacbon trong trường hợp các nhóm chưa no, trong trường hợp các gốc hydrocacbon như các gốc alkyl, alkenyl và alkynyl, bao gồm cả các gốc composit. Các gốc alkyl, bao gồm cả các gốc composit như alkoxy, haloalkyl, v.v., là, ví dụ, methyl, etyl, n-propyl hoặc i-propyl, n-, i-, t- hoặc

2-butyl, pentyl, hexyl như n-hexyl, i-hexyl và 1,3-dimethylbutyl, heptyl như n-heptyl, 1-methylhexyl và 1,4-dimethylpentyl; các gốc alkenyl và alkynyl được định nghĩa là các gốc chưa no có thể có tương ứng với gốc alkyl, trong đó có mặt ít nhất một liên kết đôi hoặc liên kết ba. Các gốc có một liên kết đôi hoặc liên kết ba là được ưu tiên.

Thuật ngữ "alkenyl" cũng bao gồm, cụ thể, gốc hydrocarbon mạch hở thẳng hoặc phân nhánh có nhiều hơn một liên kết đôi, như 1,3-butadienyl và 1,4-pentadienyl, nhưng cũng bao gồm các gốc allenyl hoặc cumulenyl có một hoặc nhiều liên kết đôi được tích tụ, ví dụ allenyl (1,2-propadienyl), 1,2-butadienyl và 1,2,3-pentatrienyl. Alkenyl biểu thị, ví dụ, vinyl mà có thể tùy ý được thể bằng các gốc alkyl, ví dụ (nhưng không giới hạn ở các gốc này) (C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>)-alkenyl như etenyl, 1-propenyl, 2-propenyl, 1-methylethenyl, 1-butenyl, 2-butenyl, 3-butenyl, 1-methyl-1-propenyl, 2-methyl-1-propenyl, 1-methyl-2-propenyl, 2-methyl-2-propenyl, 1-pentenyl, 2-pentenyl, 3-pentenyl, 4-pentenyl, 1-methyl-1-butenyl, 2-methyl-1-butenyl, 3-methyl-1-butenyl, 1-methyl-2-butenyl, 2-methyl-2-butenyl, 3-methyl-2-butenyl, 1-methyl-3-butenyl, 2-methyl-3-butenyl, 3-methyl-3-butenyl, 1,1-dimethyl-2-propenyl, 1,2-dimethyl-1-propenyl, 1,2-dimethyl-2-propenyl, 1-etyl-1-propenyl, 1-etyl-2-propenyl, 1-hexenyl, 2-hexenyl, 3-hexenyl, 4-hexenyl, 5-hexenyl, 1-methyl-1-pentenyl, 2-methyl-1-pentenyl, 3-methyl-1-pentenyl, 4-methyl-1-pentenyl, 1-methyl-2-pentenyl, 2-methyl-2-pentenyl, 3-methyl-2-pentenyl, 4-methyl-2-pentenyl, 1-methyl-3-pentenyl, 2-methyl-3-pentenyl, 3-methyl-3-pentenyl, 4-methyl-3-pentenyl, 1-methyl-4-pentenyl, 2-methyl-4-pentenyl, 3-methyl-4-pentenyl, 4-methyl-4-pentenyl, 1,1-dimethyl-2-butenyl, 1,1-dimethyl-3-butenyl, 1,2-dimethyl-1-butenyl, 1,2-dimethyl-2-butenyl, 1,2-dimethyl-3-butenyl, 1,3-dimethyl-1-butenyl, 1,3-dimethyl-2-butenyl, 1,3-dimethyl-3-butenyl, 2,2-dimethyl-3-butenyl, 2,3-dimethyl-1-butenyl, 2,3-dimethyl-2-butenyl, 2,3-dimethyl-3-butenyl, 3,3-dimethyl-1-butenyl, 3,3-dimethyl-2-butenyl, 1-etyl-1-butenyl, 1-etyl-2-butenyl, 1-etyl-3-butenyl, 2-etyl-1-butenyl, 2-etyl-2-butenyl, 2-etyl-3-butenyl, 1,1,2-trimethyl-2-propenyl, 1-etyl-1-methyl-2-propenyl, 1-etyl-2-methyl-1-propenyl và 1-etyl-2-methyl-2-propenyl.

Thuật ngữ “alkynyl” cũng bao gồm, cụ thể là, gốc hydrocarbon mạch hở thẳng hoặc phân nhánh có nhiều hơn một liên kết ba, hoặc các gốc khác có một hoặc nhiều liên kết ba và một hoặc nhiều liên kết đôi, ví dụ 1,3-butatrienyl hoặc 3-penten-1-yn-1-

yl. ( $C_2-C_6$ )-Alkynyl biểu thị, ví dụ, etynyl, 1-propynyl, 2-propynyl, 1-butynyl, 2-butynyl, 3-butynyl, 1-metyl-2-propynyl, 1-pentynyl, 2-pentynyl, 3-pentynyl, 4-pentynyl, 1-metyl-2-butynyl, 1-metyl-3-butynyl, 2-metyl-3-butynyl, 3-metyl-1-butynyl, 1,1-dimetyl-2-propynyl, 1-etyl-2-propynyl, 1-hexynyl, 2-hexynyl, 3-hexynyl, 4-hexynyl, 5-hexynyl, 1-metyl-2-pentynyl, 1-metyl-3-pentynyl, 1-metyl-4-pentynyl, 2-metyl-3-pentynyl, 2-metyl-4-pentynyl, 3-metyl-1-pentynyl, 3-metyl-4-pentynyl, 4-metyl-1-pentynyl, 4-metyl-2-pentynyl, 1,1-dimetyl-2-butynyl, 1,1-dimetyl-3-butynyl, 1,2-dimetyl-3-butynyl, 2,2-dimetyl-3-butynyl, 3,3-dimetyl-1-butynyl, 1-etyl-2-butynyl, 1-etyl-3-butynyl, 2-etyl-3-butynyl và 1-etyl-1-metyl-2-propynyl.

Thuật ngữ “xycloalkyl” đề cập đến hệ nhân vòng cacbon no tốt hơn là có 3-8 nguyên tử cacbon thuộc vòng, ví dụ xyclopropyl, xyclobutyl, xyclopentyl hoặc xyclohexyl, tùy ý được thê tiếp, tốt hơn là bằng hydro, alkyl, alkoxy, xyano, nitro, alkylthio, haloalkylthio, halogen, alkenyl, alkynyl, haloalkyl, amino, alkylamino, bisalkylamino, alkoxycacbonyl, hydroxycacbonyl, arylalkoxycacbonyl, aminocacbonyl, alkylaminocacbonyl, xycloalkylaminocacbonyl. Trong trường hợp xycloalkyl được thê tùy ý, hệ vòng với các phần tử thê được bao gồm, cũng bao gồm các phần tử thê với liên kết đôi trên gốc xycloalkyl, ví dụ nhóm alkyliden như metyliden. Trong trường hợp xycloalkyl được thê tùy ý, hệ đa vòng béo cũng được bao gồm, ví dụ bixyclo[1.1.0]butan-1-yl, bixyclo[1.1.0]butan-2-yl, bixyclo[2.1.0]pentan-1-yl, bixyclo[1.1.1]pentan-1-yl, bixyclo[2.1.0]pentan-2-yl, bixyclo[2.1.0]pentan-5-yl, bixyclo[2.1.1]hexyl, bixyclo[2.2.1]hept-2-yl, bixyclo[2.2.2]octan-2-yl, bixyclo[3.2.1]octan-2-yl, bixyclo[3.2.2]nonan-2-yl, adamantan-1-yl và adamantan-2-yl, mà còn bao gồm các hệ như 1,1'-bi(xyclopropyl)-1-yl, 1,1'-bi(xyclopropyl)-2-yl, ví dụ. Thuật ngữ “( $C_3-C_7$ )-xycloalkyl” là chú thích ngắn gọn cho xycloalkyl có 3 đến 7 nguyên tử cacbon, tương ứng với khoảng nguyên tử cacbon được chỉ ra.

Trong trường hợp xycloalkyl được thê, hệ vòng spiro béo cũng được bao gồm, ví dụ spiro[2.2]pent-1-yl, spiro[2.3]hex-1-yl, spiro[2.3]hex-4-yl, 3-spiro[2.3]hex-5-yl, spiro[3.3]hept-1-yl, spiro[3.3]hept-2-yl.

“Xycloalkenyl” biểu thị hệ nhân vòng cacbon không thơm không no một phần tốt hơn là có 4-8 nguyên tử cacbon, chẳng hạn 1-xyclobutenyl, 2-xyclobutenyl, 1-

xyclopentenyl, 2-xyclopentenyl, 3-xyclopentenyl, hoặc 1-xyclohexenyl, 2-xyclohexenyl, 3-xyclohexenyl, 1,3-xyclohexadienyl hoặc 1,4-xyclohexadienyl, cũng bao gồm các phần tử thế với liên kết đôi trên gốc xycloalkenyl, ví dụ nhóm alkyliden như metyliden. Trong trường hợp xycloalkenyl được thế tùy ý, áp dụng tương tự các giải thích cho xycloalkyl được thế.

Thuật ngữ “alkyliden”, ví dụ, cũng ở dạng (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)-alkyliden, biểu thị gốc gồm gốc hydrocacbon mạch hở thẳng hoặc phân nhánh được gắn thông qua liên kết đôi. Các vị trí liên kết đôi với alkyliden chỉ là các vị trí tự nhiên trên cấu trúc bazơ ở đó hai nguyên tử hydro có thể được thay thế bằng liên kết đôi; các gốc là, ví dụ, =CH<sub>2</sub>, =CH-CH<sub>3</sub>, =C(CH<sub>3</sub>)-CH<sub>3</sub>, =C(CH<sub>3</sub>)-C<sub>2</sub>H<sub>5</sub> hoặc =C(C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>)-C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>. Xycloalkyliden biểu thị gốc vòng cacbon được liên kết thông qua liên kết đôi.

“Alkoxyalkyl” là gốc alkoxy được liên kết thông qua nhóm alkyl và “alkoxyalkoxy” biểu thị gốc alkoxyalkyl được liên kết thông qua nguyên tử oxy, ví dụ (nhưng không giới hạn ở) metoxymetoxy, metoxyethoxy, ethoxyethoxy, metoxy-n-propoxy.

“Alkylthioalkyl” là gốc alkylthio được liên kết thông qua nhóm alkyl và “alkylthioalkylthio” biểu thị gốc alkylthioalkyl được liên kết thông qua nguyên tử oxy.

“Arylalkoxyalkyl” là gốc aryloxy được liên kết thông qua nhóm alkyl và “heteroaryloxyalkyl” biểu thị gốc heteroaryloxy được liên kết thông qua nhóm alkyl.

“Haloalkoxyalkyl” là gốc haloalkoxy được liên kết và “haloalkylthioalkyl” biểu thị gốc haloalkylthio, được liên kết thông qua nhóm alkyl.

“Arylalkyl” là gốc aryl được liên kết thông qua nhóm alkyl, “heteroarylalkyl” biểu thị gốc heteroaryl được liên kết thông qua nhóm alkyl, và “heteroxycyclalkyl” biểu thị gốc heteroxycycl được liên kết thông qua nhóm alkyl.

“Xycloalkylalkyl” là gốc xycloalkyl được liên kết thông qua nhóm alkyl, ví dụ (nhưng không giới hạn ở các gốc này) xyclopropylmethyl, xyclobutylmethyl, xyclopentylmethyl, xyclohexylmethyl, 1-xyclopropyleth-1-yl, 2-xyclopropyleth-1-yl, 1-xyclopropylprop-1-yl, 3-xyclopropylprop-1-yl.

Theo sáng chế, “haloalkylthio” - ở dạng nó vốn có hoặc như một phần cấu thành

của một nhóm hóa học - là S-haloalkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh, tốt hơn là có từ 1 đến 8, hoặc có từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon, như (C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>)-, (C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>)- hoặc (C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>)- haloalkylthio, ví dụ (nhưng không giới hạn ở các gốc này) triflomethylthio, pentafluorethylthio, diflometyl, 2,2-difluoroth-1-ylthio, 2,2,2-difluoroth-1-ylthio, 3,3,3-prop-1-ylthio.

“Haloxycloalkyl” và “haloxycloalkenyl” biểu thị xycloalkyl và xycloalkenyl, tương ứng, mà được thể một phần hoặc hoàn toàn bằng các nguyên tử halogen giống hoặc khác nhau, như F, Cl và Br, hoặc by haloalkyl, như triflomethyl hoặc diflomethyl, ví dụ 1-fluorocloprop-1-yl, 2-fluorocloprop-1-yl, 2,2-difluorocloprop-1-yl, 1-fluoroclobut-1-yl, 1-triflomethylxycloprop-1-yl, 2-triflomethylxycloprop-1-yl, 1-cloxyprop-1-yl, 2-cloxyprop-1-yl, 2,2-dicloxyprop-1-yl, 3,3-difluoroclobutyl.

Theo sáng chế, “trialkylsilyl” - ở dạng nó vốn có hoặc như một phần cấu thành của nhóm hóa học - là Si-alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh, tốt hơn là có từ 1 đến 8, hoặc có từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon, như tri[(C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>)-, (C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>)- hoặc (C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>)-alkyl]silyl, ví dụ (nhưng không giới hạn ở các gốc này) trimethylsilyl, triethylsilyl, tri(n-propyl)silyl, tri(isopropyl)silyl, tri(n-butyl)silyl, tri(1-methylprop-1-yl)silyl, tri(2-methylprop-1-yl)silyl, tri(1,1-dimethylth-1-yl)silyl, tri(2,2-dimethylth-1-yl)silyl.

Nếu các hợp chất, thông qua sự chuyển dịch hydro, có thể tạo thành chất đồng phân hỗ biến mà cấu trúc của nó sẽ không chính thức được bao hàm bởi công thức chung (I), thì các đồng phân hỗ biến này được bao hàm bởi định nghĩa của hợp chất theo sáng chế có công thức chung (I), trừ khi một chất đồng phân hỗ biến cụ thể đang được xem xét. Ví dụ, nhiều hợp chất carbonyl có thể có mặt ở ở dạng keto và cả ở dạng enol, cả hai dạng được bao hàm bởi định nghĩa về hợp chất có công thức chung (I).

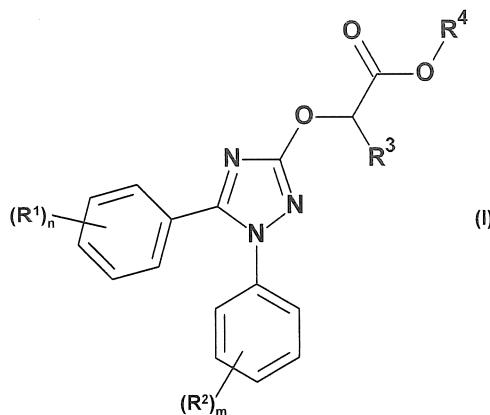
Tùy thuộc vào bản chất của nhóm thế và cách mà chúng được gắn, hợp chất có công thức chung (I) có thể có mặt ở dạng đồng phân lập thể. Các chất đồng phân lập thể có thể có được định nghĩa bởi dạng ba chiều cụ thể của nó, như các chất đồng phân đối ảnh, chất đồng phân không đối quang, các chất đồng phân Z và E, đều được bao hàm bởi công thức chung (I). Nếu, ví dụ, một hoặc nhiều nhóm alkenyl có mặt, chất đồng phân không đối quang (các chất đồng phân Z và E) có thể xảy ra. Nếu, ví dụ, một hoặc nhiều nguyên tử cacbon bất đối xứng có mặt, các chất đồng phân đối ảnh và chất

đồng phân không đối quang có thể xảy ra. Các chất đồng phân lập thể có thể thu được từ hỗn hợp thu được trong quá trình điều chế bằng các phương pháp tách thông thường. Việc tách bằng sắc ký có thể được thực hiện ở quy mô phân tích để tìm lượng dư đồng phân đối ảnh hoặc lượng dư đồng phân không đối quang, hoặc ở quy mô điều chế khác để sản xuất các mẫu thử nghiệm cho thử nghiệm sinh học. Có thể điều chế chọn lọc các chất đồng phân lập thể bằng cách sử dụng các phản ứng chọn lọc lập thể có sử dụng nguyên liệu ban đầu quang hoạt và/hoặc các chất bổ trợ. Vì vậy sáng chế cũng đề cập đến tất cả các chất đồng phân lập thể mà được bao gồm bởi công thức chung (I) nhưng không được chỉ ra ở dạng đồng phân lập thể cụ thể của chúng, và đề cập đến hỗn hợp của chúng.

Nếu các hợp chất thu được ở dạng rắn, việc tinh chế cũng có thể được thực hiện bằng cách tái kết tinh hoặc phân cắt. Nếu các hợp chất riêng rẽ (I) không thể thu được theo cách thỏa mãn bởi các con đường được mô tả dưới đây, chúng có thể được điều chế bằng cách tạo dẫn xuất của các hợp chất khác có công thức chung (I).

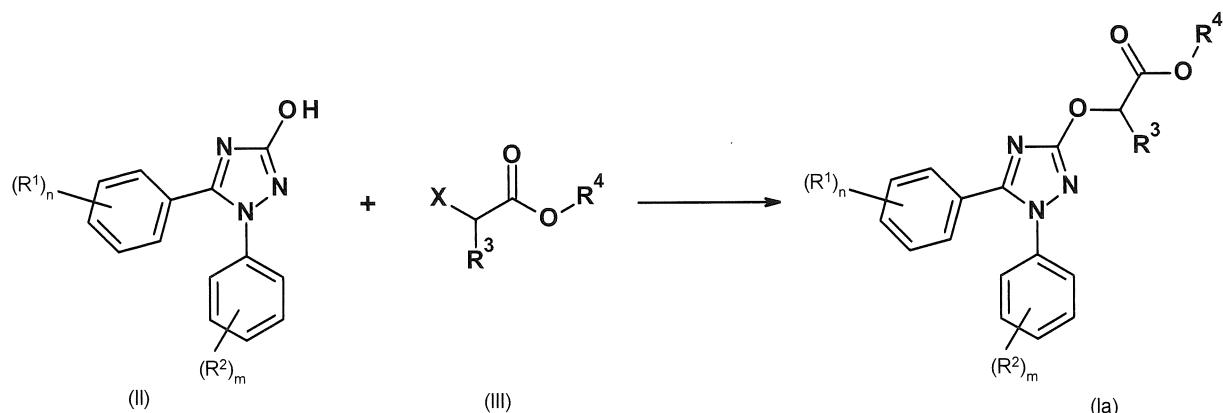
Phương pháp phân lập, phương pháp tinh chế thích hợp và phương pháp phân tách các chất đồng phân lập thể của hợp chất có công thức chung (I) là các phương pháp thường đã biết bởi người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực từ các trường hợp tương tự, ví dụ bởi các quá trình vật lý như như kết tinh, phương pháp sắc ký, cụ thể là sắc ký cột và HPLC (sắc ký lỏng cao áp), chưng cất, tùy ý trong điều kiện áp suất giảm, chiết và các phương pháp khác, hỗn hợp bất kỳ mà thường có thể vẫn được tách bằng phương pháp tách nhờ sắc ký, ví dụ trên các pha rắn bất đối. Các quy trình thích hợp đối với lượng điều chế hoặc ở quy mô công nghiệp là các quy trình như kết tinh, ví dụ về các muối đồng phân không đối quang mà có thể thu được từ hỗn hợp đồng phân không đối quang bằng cách sử dụng các axit quang hoạt và, nếu thích hợp, miễn là các nhóm axit có mặt, bằng cách sử dụng các bazơ hoạt quang.

Tổng hợp dẫn xuất axit [(1,5-diphenyl-1H-1,2,4-triazol-3-yl)oxy]axetic có công thức chung (I)



Dẫn xuất axit [(1,5-diphenyl-1H-1,2,4-triazol-3-yl)oxy]axetic có công thức chung (I) theo sáng chế có thể được điều chế theo các quy trình đã biết. Con đường tổng hợp được sử dụng và được kiểm tra được tiến hành từ các axit benzoic được thể có thể được điều chế sẵn hoặc sẵn có trên thị trường, từ các benzamit được thể tương ứng và từ các hóa chất sẵn có trên thị trường, như phenylhydrazin được thể và diphenyl cacbonat. Trong các sơ đồ dưới đây, các gốc  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ ,  $R^4$ , m, n và p của công thức chung (I) có nghĩa được xác định trên đây, trừ những định nghĩa được minh họa nhưng không nhầm giới hạn được đưa ra.

Hợp chất theo có công thức chung (Ia) được tổng hợp nhờ phản ứng của hợp chất có công thức chung (II) với hợp chất có công thức chung (III) với sự có mặt của bazơ, ví dụ kali cacbonat. Phản ứng tốt hơn là thực hiện trong khoảng nhiệt độ từ 0°C đến 120°C, trong dung môi thích hợp, ví dụ axetonitril (xem sơ đồ 1).

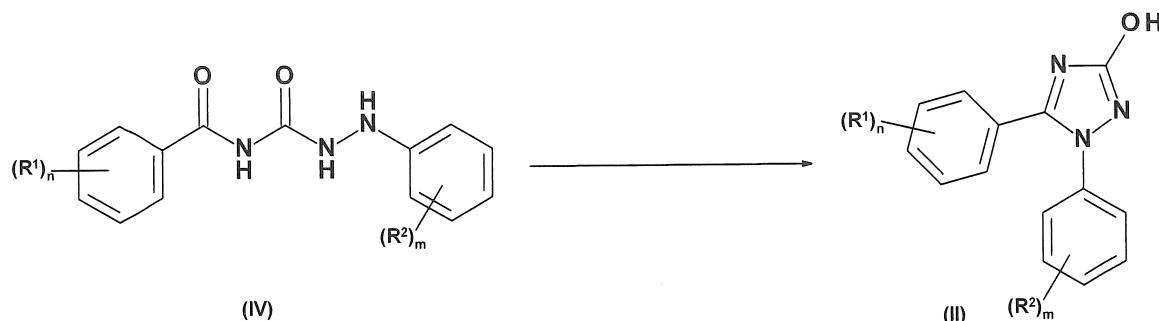


Với X = halogen.

Sơ đồ 1.

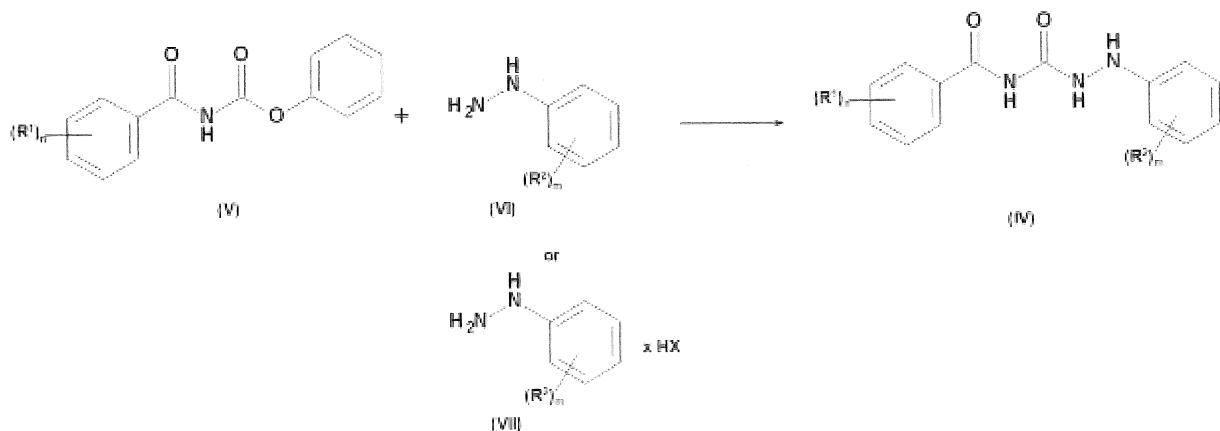
Hợp chất có công thức chung (II) được tổng hợp bằng phản ứng đóng vòng hợp

chất có công thức chung (IV) với sự có mặt của chất phản ứng ngưng tụ, ví dụ axit polyphosphoric. Phản ứng này tốt hơn là thực hiện trong khoảng nhiệt độ từ 0°C đến 180°C, ở dạng ngắn gọn (xem sơ đồ 2).



### Sơ đồ 2.

Việc tổng hợp hợp chất có công thức chung (IV) có thể được điều chế bằng phản ứng của hợp chất có công thức chung (V) với phenylhydrazin có công thức chung (VI) trong dung môi thích hợp, ví dụ axetonitril, trong khoảng nhiệt độ từ -20°C đến 100°C, tốt hơn là -5°C và 50°C. Phản ứng xảy ra với sự có mặt của bazơ, ví dụ trietylamin. Ngoài phenylhydrazin có công thức chung (VI), cũng có thể sử dụng phenylhydrazin hydrohalid có công thức chung (VII) (sơ đồ 3).

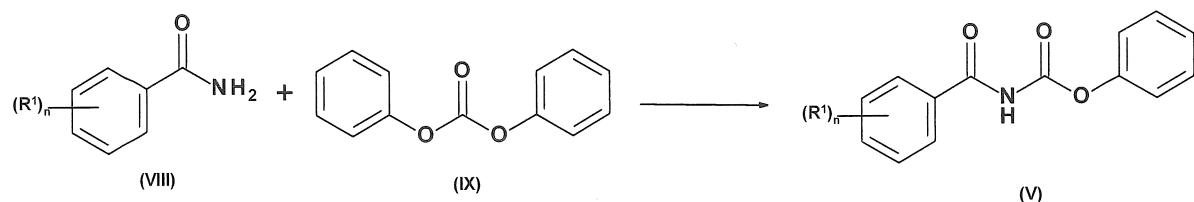


Với X = halogen.

### Sơ đồ 3.

Việc tổng hợp hợp chất có công thức chung (V) có thể được điều chế bằng phản ứng của hợp chất có công thức chung (VIII) với diphenyl cacbonat (IX) với sự có mặt của bazơ, ví dụ natri hydrua (xem sơ đồ 4). Phản ứng tốt hơn là xảy ra trong khoảng nhiệt độ từ -20°C đến 150°C, trong dung môi thích hợp, ví dụ THF. Hợp chất có công

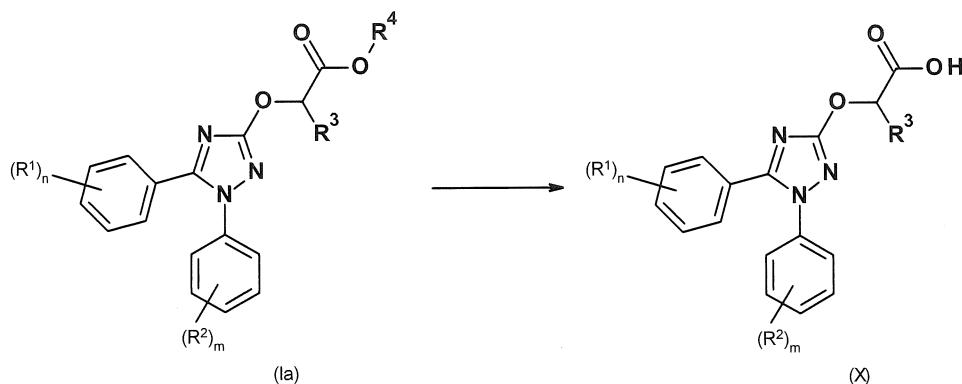
thúc chung (VIII) và (IX) sẵn có trên thị trường hoặc có thể được điều chế tương tự như các phương pháp đã biết đối với người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực.



#### Sơ đồ 4.

Việc tổng hợp axit có công thức chung (X) có thể được điều chế bằng cách thủy phân hợp chất có công thức chung (Ia) bằng hoặc tương tự như các phương pháp đã biết đối với người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực.

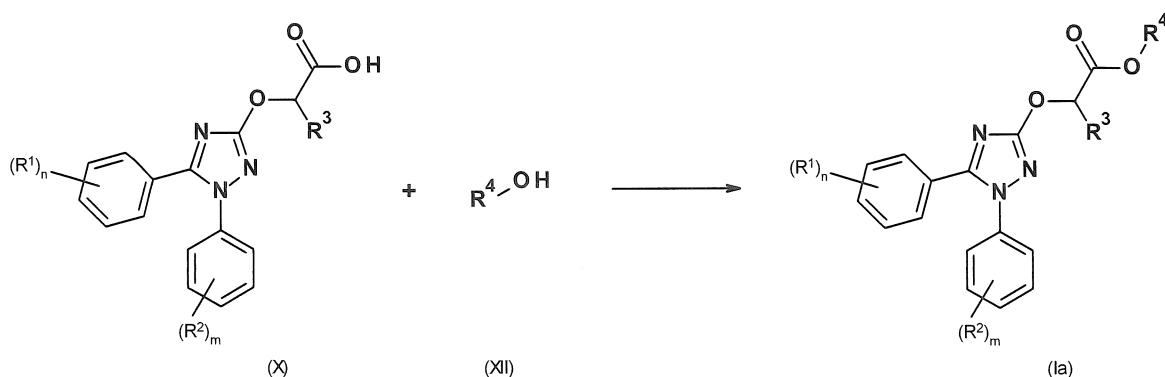
Việc thủy phân có thể được tiến hành với sự có mặt của bazơ hoặc axit Lewis. Bazơ có thể là muối hydroxit của kim loại kiềm (ví dụ lithi, natri hoặc kali; sơ đồ 5), và phản ứng thủy phân tốt hơn là xảy ra trong khoảng nhiệt độ từ nhiệt độ trong phòng đến 100°C. Axit Lewis có thể là bo tribromua, và phản ứng có thể được tiến hành trong khoảng nhiệt độ từ -20°C đến 100°C, tốt hơn là từ -5°C đến 50°C.



#### Sơ đồ 5.

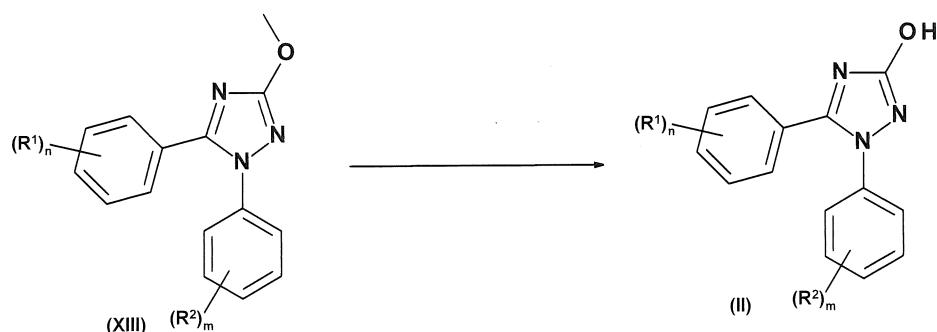
Hợp chất có công thức chung (Ia) theo sáng chế được tổng hợp nhờ phản ứng este hóa của axit có công thức chung (X) với rượu có công thức chung (XII) với sự có mặt của chất phản ứng liên hợp, ví dụ T3P, dixyclohexylcarbodiimide, *N*-(3-dimethylaminopropyl)-*N'*-etylcarbodiimide, *N,N'*-cacbonyldiimidazol, 2-clo-1,3-dimylimidazoli clorua hoặc 2-clo-1-metylpyridini iodua (Xem tài liệu: Chemistry of Peptide Synthesis, Ed. N. Leo Benoiton, Taylor & Francis, 2006, ISBN-10: 1-57444-

454-9). Chất phản ứng được mang bởi polyme, ví dụ dixyclohexylcarbodiimit được mang bởi polyme, cũng phù hợp cho phản ứng liên hợp này. Phản ứng xảy ra tốt hơn là trong khoảng nhiệt độ từ 0°C và 80°C, trong dung môi thích hợp, ví dụ diclometan, axetonitril, *N,N*-dimethylformamit hoặc etyl axetat, và với sự có mặt của bazơ, ví dụ trietylamin, *N,N*-diisopropyletylamin hoặc 1,8-diazabicyclo[5.4.0]undec-7-en (xem sơ đồ 6). Đối với các điều kiện liên hợp T3P, xem *Organic Process Research & Development* 2009, 13, 900-906.



Sơ đồ 6.

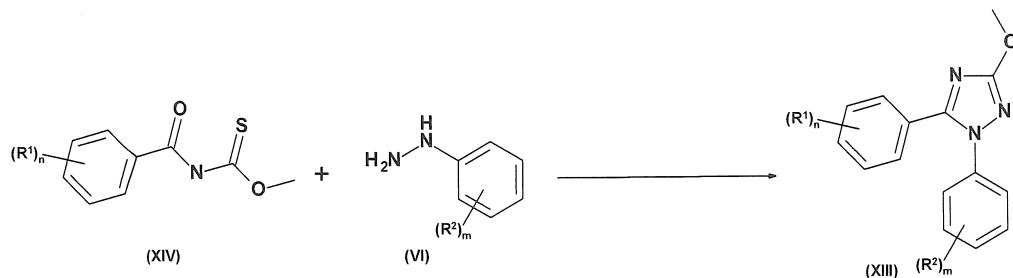
Sơ đồ 7 chỉ ra quá trình tổng hợp hợp chất có công thức chung (II); quá trình tổng hợp này được thực hiện bằng phản ứng của hợp chất có công thức chung (XIII) với sự có mặt của axit Brønsted, ví dụ 33% HBr trong axit axetic. Phản ứng này tốt hơn là xảy ra trong khoảng nhiệt độ từ 0°C và 180°C. Xem *Bioorganic & Medicinal Chemistry* 2018, 26, 3321-3344.



Sơ đồ 7.

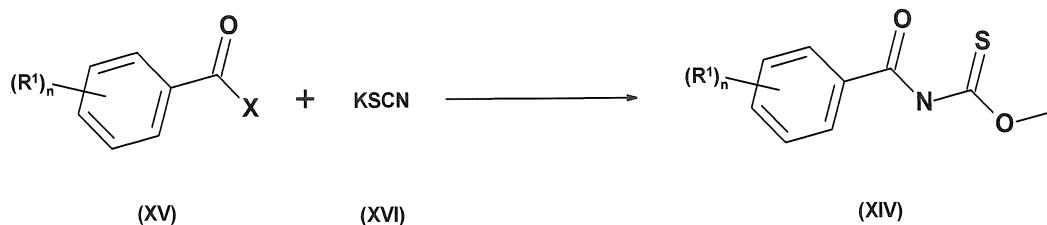
Hợp chất có công thức chung (XIII) có thể được điều chế bằng phản ứng của hợp chất có công thức chung (XIV) và phenylhydrazin có công thức chung (VI) trong dung môi thích hợp, ví dụ etanol (xem sơ đồ 8). Phản ứng này tốt hơn là xảy ra trong khoảng

nhiệt độ từ 0°C đến 150°C.



Sơ đồ 8.

Hợp chất có công thức chung (XIV) có thể được điều chế bằng phản ứng của benzoyl halogenua có công thức chung (XV) với muối thioxyanat có công thức chung (XVI) với sự có mặt của metanol trong dung môi thích hợp, ví dụ axeton (xem sơ đồ 9). Benzoyl halogenua sẵn có trên thị trường hoặc có thể được điều chế tương tự theo các phương pháp đã biết đối với người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực. Xem Tetrahedron 1968, 24, 5205-5214; J. Chem. Soc. 1957, 1091; JP81 53,664 (1981); Justus Liebigs Ann. Chem. 1964, 675, 180 và J. heterocycl. Chem. 1983, 20, 1533.



với X = flor, clo, brom

Sơ đồ 9.

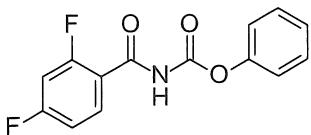
Các ví dụ tổng hợp cụ thể được lựa chọn đối với hợp chất có công thức chung (I) theo sáng chế được viện dẫn dưới đây. Số ví dụ được đề cập tương ứng với đánh số sơ đồ trong các bảng từ I.1 đến I.77 dưới đây. Dữ liệu quang phổ  $^1\text{H}$  NMR,  $^{13}\text{C}$ -NMR và  $^{19}\text{F}$ -NMR được báo cáo đối với các ví dụ hóa học được mô tả trong các phần dưới đây (400 MHz đối với  $^1\text{H}$  NMR và 150 MHz đối với  $^{13}\text{C}$ -NMR và 375 MHz đối với  $^{19}\text{F}$ -NMR, dung môi  $\text{CDCl}_3$ ,  $\text{CD}_3\text{OD}$  hoặc  $d_6$ -DMSO, chất chuẩn nội: tetramethylsilan  $\delta = 0,00$  ppm) thu được trên thiết bị Bruker, và các tín hiệu liệt kê có các nghĩa được đưa ra dưới đây: br = vạch rộng; s = vạch đơn, d = vạch đôi, t = vạch ba, dd = vạch đôi của

vạch đôi, ddd = vạch đôi của vạch đôi của vạch đôi, m = đa vạch, q = bốn vạch, quint = năm vạch, sext = sáu vạch, sept = bảy vạch, dq = vạch đôi của bốn vạch, dt = vạch đôi của ba vạch. Trong trường hợp hỗn hợp đồng phân không đối quang, các tín hiệu có nghĩa đối với mỗi trong số hai chất đồng phân không đối quang được báo cáo hoặc tín hiệu đặc trưng của các chất đồng phân không đối quang chính được báo cáo. Các chữ viết tắt được sử dụng cho các nhóm hóa học có, ví dụ, các nghĩa sau đây: Me = CH<sub>3</sub>, Et = CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>, t-Hex = C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>CH(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>, t-Bu = C(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>, n-Bu = butyl không phân nhánh, n-Pr = propyl không phân nhánh, i-Pr = propyl phân nhánh, c-Pr = xyclopropyl, c-Hex = xyclohexyl.

Các ví dụ tổng hợp:

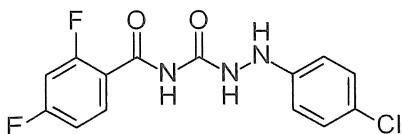
Ví dụ tổng hợp số: I.42-7

Giai đoạn tổng hợp 1: Phenyl (2,4-diflobenzoyl)carbamat



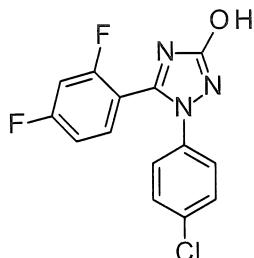
2,4-Diflobenzamit (10 g, 63,65 mmol, 1,0 đương lượng) và diphenyl cacbonat (20,45 g, 1,5 đương lượng) được hòa tan trong THF (100 ml) trong khí quyển chứa argon và được làm lạnh đến 0°C bằng chậu đá. Natri hydrua (60% trong dầu khoáng, 2,55 g, 63,65 mmol, 1,0 đương lượng) được bổ sung vào dung dịch làm một lần. Chú ý: có khí thoát ra! Tiếp theo, chậu đá được lấy đi và hỗn hợp phản ứng được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 1 giờ. Sau đó, hỗn hợp phản ứng được cô đặc đến 1/3 trong điều kiện áp suất giảm, tạo thành chất rắn màu trắng dạng bông tuyết. Chất rắn thu được được lọc hút và làm khô trong không khí. Phenyl (2,4-diflobenzoyl)carbamat được phân lập ở dạng chất rắn màu trắng (11,51 g, 61% theo lý thuyết). <sup>1</sup>H NMR (400 MHz, DMSO-d<sup>6</sup> δ, ppm) 7,76 (m, 1H), 7,36-7,28 (m, 2H), 7,18-6,99 (m, 4H), 6,77-6,74 (m, 2H).

Giai đoạn tổng hợp 2: 2-(4-Clophenyl)-N-(2,4-diflobenzoyl)hydrazincarboxamit



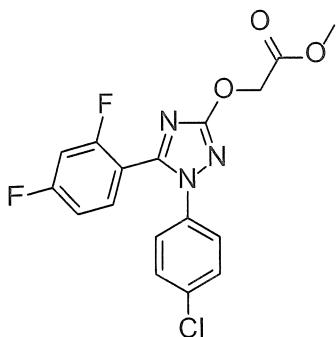
Phenyl (2,4-diflobenzoyl)carbamat (8 g, 28,86 mmol, 1,0 đương lượng) được hòa tan trong axetonitril (85 ml) và sau đó các chất sau được bô sung ở nhiệt độ trong phòng: (4-clophenyl)hydrazin hydrochlorua (1:1) (5,68 g, 31,74 mmol, 1,1 đương lượng) và trietylamin (8,04 ml, 57,72 mmol, 2,0 đương lượng). Dung dịch trở nên hồng sau khoảng 15-30 phút, và chất rắn màu be được kết tủa từ dung dịch. Hỗn hợp phản ứng được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 1 giờ, sau đó chất kết tủa thu được được lọc ra và được làm khô trong không khí. 2-(4-Clophenyl)-N-(2,4-diflobenzoyl)hydrazincarboxamit được phân lập ở dạng chất rắn màu be (3,67 g, 38% theo lý thuyết).  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz, DMSO- $d^6$   $\delta$ , ppm) 9,74 (bs, 1H), 8,11 (bs, 1H), 7,75 (m, 1H), 7,48-7,29 (m, 2H), 7,18 (d, 2 H), 6,73 (d, 2H).

Giai đoạn tổng hợp 3: 1-(4-Clophenyl)-5-(2,4-diflophenyl)-1H-1,2,4-triazol-3-ol



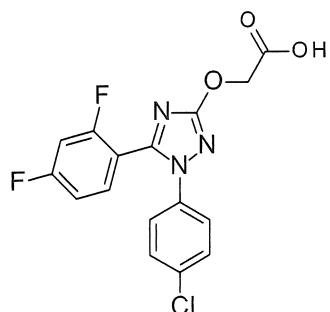
2-(4-Clophenyl)-N-(2,4-diflobenzoyl)hydrazincarboxamit (3 g, 11,21 mmol, 1,0 đương lượng) được trộn trong axit polyphosphoric (50 ml) và sau đó hóa lỏng hỗn hợp phản ứng ở 100°C trong 2 giờ. Sau khi được làm lạnh đến nhiệt độ trong phòng, hỗn hợp phản ứng được bô sung nhỏ giọt vào nước đá, và chất kết tủa màu be nhạt được lọc hút. Chất kết tủa đã được lọc hút được làm khô ở 55°C trong tủ sấy chân không. 1-(4-Clophenyl)-5-(2,4-diflophenyl)-1H-1,2,4-triazol-3-ol được phân lập ở dạng chất rắn màu be nhạt (1,73 g, 49% theo lý thuyết).  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz, DMSO- $d^6$   $\delta$ , ppm) 11,57 (bs, 1H), 7,68 (m, 1H), 7,49 (d, 2H), 7,37 (m, 1H), 7,32-7,24 (m, 3H).

Giai đoạn tổng hợp 4: Metyl {[1-(4-clophenyl)-5-(2,4-diflophenyl)-1H-1,2,4-triazol-3-yl]oxy}axetat (ví dụ tổng hợp I.40-7)



1-(4-Clophenyl)-5-(2,4-diflophenyl)-1H-1,2,4-triazol-3-ol (1,7 g, 5,53 mmol, 1,0 đương lượng) và kali cacbonat (1,53 g, 11,05 mmol, 2 đương lượng) được tạo huyền phù trong axetonitril (20 ml), và tiếp theo methyl bromoaxetat (0,48 g, 6,63 mmol, 1,2 đương lượng) được bô sung. Tiếp theo, huyền phù được khuấy ở nhiệt độ trong phòng qua đêm, chất rắn được lọc ra, và hỗn hợp phản ứng được cô đặc trong điều kiện áp suất giảm. Phần còn lại được tinh chế bằng sắc ký cột (gradien etyl axetat/heptan). Metyl {[1-(4-clophenyl)-5-(2,4-diflophenyl)-1H-1,2,4-triazol-3-yl]oxy}acetat được phân lập ở dạng dầu không màu (1,62 g, 76% theo lý thuyết).  $^1\text{H}$  MR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ , δ, ppm) 7,59 (m, 1H), 7,33 (d, 2H), 7,20 (d, 2H), 7,00 (m, 1H), 6,79 (m, 1H), 4,94 (s, 2H), 3,81 (s, 3H).

Giai đoạn tổng hợp 5: Axit {[1-(4-clophenyl)-5-(2,4-diflophenyl)-1H-1,2,4-triazol-3-yl]oxy}axetic (ví dụ tổng hợp I.42-7)

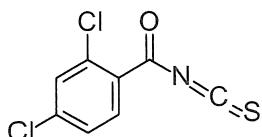


Metyl {[1-(4-clophenyl)-5-(2,4-diflophenyl)-1H-1,2,4-triazol-3-yl]oxy}acetat (1,6 g, 4,21 mmol, 1,0 đương lượng) và lithi hydroxit (101 mg, 4,21 mmol, 1 đương lượng) được hòa tan trong hỗn hợp THF/nước (7:2, 20 ml) và tiếp theo được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 1 giờ. Hỗn hợp phản ứng được cô đặc trong điều kiện áp suất giảm. Phần còn lại được hòa tan trong nước và được điều chỉnh đến độ pH = 2 bằng axit clohydric 2M, xuất hiện sự kết tủa của chất rắn màu vàng nhạt. Chất kết tủa được

lọc hút và được làm khô ở 55°C trong tủ sấy chân không. Axit {[1-(4-clophenyl)-5-(2,4-diflophenyl)-1H-1,2,4-triazol-3-yl]oxy}axetic được phân lập ở dạng chất rắn màu vàng nhạt (1,44 g, 92% theo lý thuyết).  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz, DMSO-d<sup>6</sup> δ, ppm) 13,09 (bs, 1H), 7,77 (m, 1H), 7,53 (d, 2H), 7,41-7,26 (m, 4H), 4,87 (s, 2H).

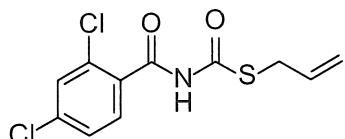
Ví dụ tổng hợp số: I.61-49

Giai đoạn tổng hợp 1: 2,4-Diclobenzoyl isothioxyanat



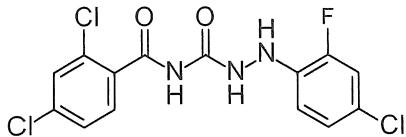
2,4-Diclobenzoyl clorua (10 g, 47,74 mmol, 1,0 đương lượng) được hòa tan trongtoluen (70 ml). Kali thioxyanat (5,57 g, 1,2 đương lượng) được bổ sung vào dung dịch làm một lần. Tiếp theo, hỗn hợp phản ứng được gia nhiệt đến sôi trong 3 giờ. Tiếp theo, dung môi được loại bỏ trong điều kiện áp suất giảm. Sản phẩm thô được sử dụng trong giai đoạn tiếp theo mà không cần tinh chế thêm. 2,4-Diclobenzoyl isothioxyanat được phân lập ở dạng chất rắn màu vàng (15,63 g, 68% theo lý thuyết, độ tinh khiết 70%).  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz, CDCl<sub>3</sub> δ, ppm) 7,97 (d, 1H), 7,53 (d, 1H), 7,34 (d, 1H).

Giai đoạn tổng hợp 2: S-Alyl (2,4-diclobenzoyl)carbamothioat



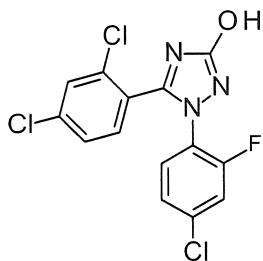
2,4-Diclobenzoyl isothioxyanat (15,6 g, 67,22 mmol, 1,0 đương lượng) được hòa tan trongtoluen (250 ml). Rượu alylic (4,69 g, 80,66 mmol, 1,2 đương lượng) được bổ sung vào dung dịch làm một lần. Tiếp theo, hỗn hợp phản ứng được gia nhiệt đến sôi trong 4 giờ. Tiếp theo, dung môi được loại bỏ trong điều kiện áp suất giảm. Sản phẩm thô được sử dụng trong giai đoạn tiếp theo mà không cần tinh chế thêm. S-Alyl (2,4-diclobenzoyl)carbamothioat được phân lập ở dạng chất rắn màu vàng (17,75 g, 81% theo lý thuyết, độ tinh khiết 90%).  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz, CDCl<sub>3</sub> δ, ppm) 8,82 (bs, 1H), 7,78 (d, 1H), 7,48 (s, 1H), 7,36 (d, 1H), 5,89 (m, 1H), 5,33 (m, 1H), 5,18 (m, 1H), 3,61 (d, 1H).

Giai đoạn tổng hợp 3: 2-(4-clo-2-flophenyl)-N-(2,4-diclobenzoyl)-hydrazincarboxamit



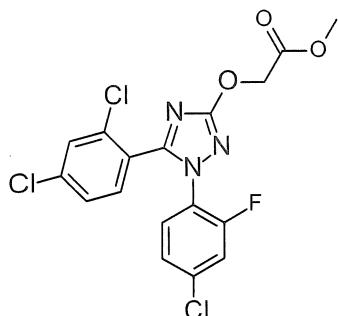
S-Alyl (2,4-diclobenzoyl)carbamothioat (17,75 g, 61,17 mmol, 1,0 đương lượng) được hòa tan trong toluen (180 ml) và sau đó các chất sau được bổ sung ở nhiệt độ trong phòng: (4-clo-2-flophenyl)hydrazin hydrochlorua (1:1) (12,05 g, 61,17 mmol, 1,0 đương lượng) và trietylamin (8,53 ml, 61,17 mmol, 1,0 đương lượng). Hỗn hợp phản ứng được khuấy ở nhiệt độ sôi trong 2 giờ và được làm lạnh, và tiếp theo chất kết tủa tạo thành được lọc ra và được làm khô ở 55°C trong tủ sấy chân không trong 2 giờ. 2-(4-clo-2-flophenyl)-N-(2,4-diclobenzoyl)hydrazincarboxamit được phân lập ở dạng chất rắn màu vàng nhạt (27,33 g, 94% theo lý thuyết, độ tinh khiết 80%). <sup>1</sup>H NMR (400 MHz, DMSO-d<sup>6</sup> δ, ppm) 11,18 (bs, 1H), 10,41 (bs, 1H), 9,68 (bs, 1H), 8,02 (s, 1H), 7,71 (s, 1H), 7,62 (d, 1H), 7,53 (d, 1H), 7,31-7,12 (m, 2H), 8,86 (t, 1H).

Giai đoạn tổng hợp 4: 1-(4-clo-2-flophenyl)-5-(2,4-diclophenyl)-1H-1,2,4-triazol-3-ol



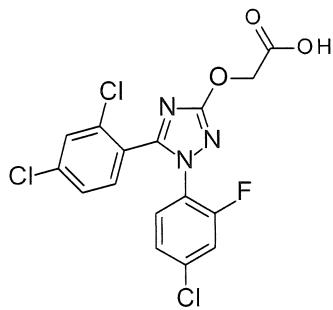
2-(4-clo-2-flophenyl)-N-(2,4-diclobenzoyl)hydrazincarboxamit (110,30 g, 234,31 mmol, 1,0 đương lượng) được trộn trong axít polyphosphoric (1100 ml) và tiếp theo hóa lỏng hỗn hợp phản ứng ở 100°C trong 2 giờ. Sau khi được làm lạnh đến nhiệt độ trong phòng, hỗn hợp phản ứng được bổ sung nhỏ giọt vào nước đá, và chất kết tủa màu be nhạt được lọc hút. Chất kết tủa đã được lọc hút được làm khô ở 55°C trong tủ sấy chân không. 1-(4-clo-2-flophenyl)-5-(2,4-diclophenyl)-1H-1,2,4-triazol-3-ol được phân lập ở dạng chất rắn màu be nhạt (70,88 g, 83% theo lý thuyết). <sup>1</sup>H NMR (400 MHz, DMSO-d<sup>6</sup> δ, ppm) 7,75 (s, 1H), 7,63 (d, 1H), 7,59 (d, 1H), 7,55-7,51 (m, 2H), 7,39 (t, 1H), 3,83 (bs, 1H).

Giai đoạn tổng hợp 5: Metyl {[1-(4-clo-2-flophenyl)-5-(2,4-diclophenyl)-1H-1,2,4-triazol-3-yl]oxy}acetat (ví dụ tổng hợp I.43-49)



1-(4-clo-2-flophenyl)-5-(2,4-diclophenyl)-1H-1,2,4-triazol-3-ol (70,80 g, 197,44 mmol, 1,0 đương lượng) và kali cacbonat (54,57 g, 394,88 mmol, 2 đương lượng) được tạo huyền phù trong axetonitril (700 ml), và tiếp theo methyl bromoacetat (36,25 g, 236,93 mmol, 1,2 đương lượng) được bổ sung. Tiếp theo, huyền phù được khuấy ở nhiệt độ trong phòng qua đêm, chất rắn được lọc ra, và hỗn hợp phản ứng được cô đặc trong điều kiện áp suất giảm. Phần còn lại được tinh chế bằng sắc ký cột (gradien etyl acetate/heptan). Metyl {[1-(4-clo-2-flophenyl)-5-(2,4-diclophenyl)-1H-1,2,4-triazol-3-yl]oxy}acetat được phân lập ở dạng dầu màu nâu nhạt (57,91 g, 67% theo lý thuyết).  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$  δ, ppm) 7,40-7,29 (m, 4H), 7,19 (dd, 1H), 7,12 (dd, 1H), 4,94 (s, 2H), 3,81 (s, 3H).

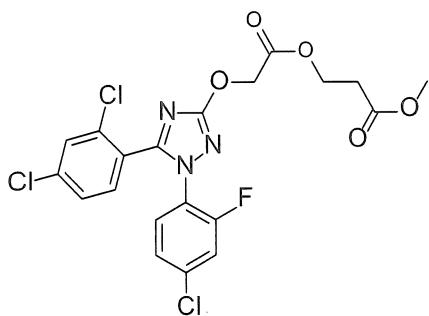
Giai đoạn tổng hợp 6: Axit {[1-(4-clo-2-flophenyl)-5-(2,4-diclophenyl)-1H-1,2,4-triazol-3-yl]oxy}acetic (ví dụ tổng hợp I.45-49)



Metyl {[1-(4-clo-2-flophenyl)-5-(2,4-diclophenyl)-1H-1,2,4-triazol-3-yl]oxy}acetat (5,0 g, 11,61 mmol, 1,0 đương lượng) và lithi hydroxit (417 mg, 17,42 mmol, 1,5 đương lượng) được hòa tan trong hỗn hợp THF/nước (7:2, 20 ml) và tiếp theo được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 1 giờ. Hỗn hợp phản ứng được cô

đặc trong điều kiện áp suất giảm. Phần còn lại được hòa tan trong nước và được điều chỉnh đến độ pH = 2 bằng axit clohydric 2M, xuất hiện sự kết tủa của chất rắn màu vàng nhạt. Chất kết tủa được lọc hút và được làm khô ở 55°C trong tủ sấy chân không. Axit {[1-(4-clo-2-flophenyl)-5-(2,4-diclophenyl)-1H-1,2,4-triazol-3-yl]oxy}axetic được phân lập ở dạng chất rắn màu be nhạt (2,99 g, 61% theo lý thuyết).  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$  δ, ppm) 7,41-7,27 (m, 4H), 7,18 (d, 1H), 7,11 (d, 1H), 4,94 (s, 2H).

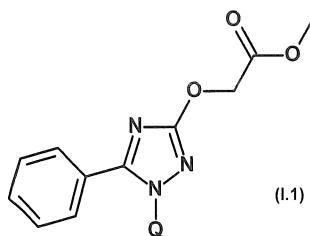
Giai đoạn tổng hợp 7: Metyl 3-(2- {[1-(4-clo-2-flophenyl)-5-(2,4-diclophenyl)-1H-1,2,4-triazol-3-yl]oxy}axetoxy)propanoat (ví dụ tổng hợp I.61-49)



Metyl 3-hydroxypropanoat (47 mg, 0,39 mmol, 1,1 đương lượng) được hòa tan trong diclometan (3 ml), và tiếp theo axit {[1-(4-clo-2-flophenyl)-5-(2,4-diclophenyl)-1H-1,2,4-triazol-3-yl]oxy}axetic (150 mg, 0,36 mmol, 1,0 đương lượng) được bồi sung. Hút T3P (0,32 ml, 0,54 mmol, 1,5 đương lượng) bằng pipet vào dung dịch này, và hỗn hợp phản ứng được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 1 giờ. Sau đó, trietylamin (0,13 ml, 0,90 mmol, 2,5 đương lượng) và DMAP (9 mg, 0,072 mmol, 0,2 đương lượng) được bồi sung vào hỗn hợp phản ứng, và hỗn hợp phản ứng được khuấy ở nhiệt độ trong phòng qua đêm. Sau đó, dung dịch phản ứng được chiết bằng nước và diclometan, và các pha được tách riêng bằng cách sử dụng thiết bị tách pha. Pha hữu cơ được cô đặc trong điều kiện áp suất giảm. Phần còn lại được tinh chế bằng sắc ký cột (gradien etyl axetat/heptan). Metyl 3-(2- {[1-(4-clo-2-flophenyl)-5-(2,4-diclophenyl)-1H-1,2,4-triazol-3-yl]oxy}axetoxy)propanoat được phân lập ở dạng dầu không màu (100 mg, 53% theo lý thuyết).  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$  δ, ppm) 7,41-7,29 (m, 4H), 7,19 (d, 1H), 7,12 (d, 1H), 4,92 (s, 2H), 4,49 (t, 2H), 4,14 (q, 2H), 2,67 (t, 2H), 1,25 (t, 3H).

Tương tự với các ví dụ điều chế nêu trên và được thuật lại ở thời điểm thích hợp,

và có tính đến các chi tiết chung liên quan đến việc điều chế dẫn xuất axit [(1,5-diphenyl-1H-1,2,4-triazol-3-yl)oxy]axetic được thể, thu được các hợp chất được liệt kê dưới đây:



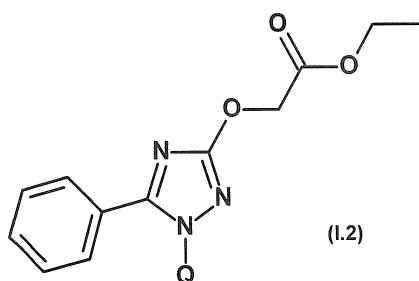
Bảng I.1: Các hợp chất có công thức (I.1) được ưu tiên là các hợp chất từ I.1-1 đến I.1-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.1-1 đến I.1-53 của bảng I.1 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.

Bảng 1:

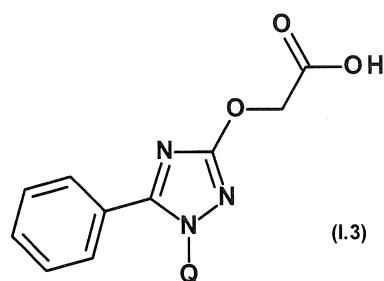
Số	Q
1	Q-2.1
2	Q-2.2
3	Q-2.3
4	Q-2.4
5	Q-2.5
6	Q-2.6
7	Q-2.7
8	Q-2.8
9	Q-2.9
10	Q-2.10
11	Q-2.11
12	Q-2.12
13	Q-2.13
14	Q-2.14
15	Q-2.15
16	Q-2.16

S <sup>6</sup>	Q
17	Q-2.17
18	Q-2.18
19	Q-2.19
20	Q-2.20
21	Q-2.21
22	Q-2.22
23	Q-2.23
24	Q-2.24
25	Q-2.25
26	Q-2.26
27	Q-2.27
28	Q-2.28
29	Q-2.29
30	Q-2.30
31	Q-2.31
32	Q-2.32
33	Q-2.33
34	Q-2.34
35	Q-2.35
36	Q-2.36
37	Q-2.37
38	Q-2.38
39	Q-2.39
40	Q-2.40
41	Q-2.41
42	Q-2.42
43	Q-2.43
44	Q-2.44
45	Q-2.45

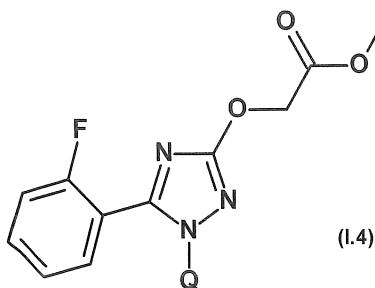
Số	Q
46	Q-2.46
47	Q-2.47
48	Q-2.48
49	Q-2.49
50	Q-2.50
51	Q-2.51
52	Q-2.52
53	Q-2.53



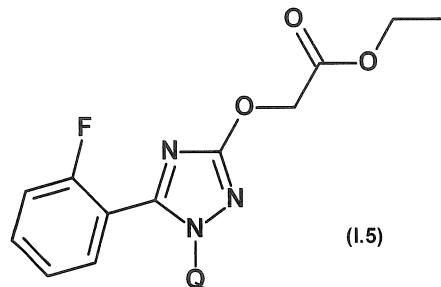
Bảng I.2: Các hợp chất có công thức (I.2) được ưu tiên là các hợp chất từ I.2-2 đến I.2-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.2-2 đến I.2-53 của bảng I.2 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 2 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



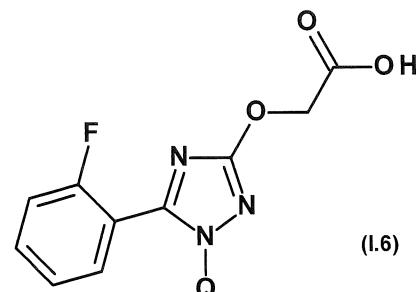
Bảng I.3: Các hợp chất có công thức (I.3) được ưu tiên là các hợp chất từ I.3-1 đến I.3-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.3-1 đến I.3-53 của bảng I.3 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



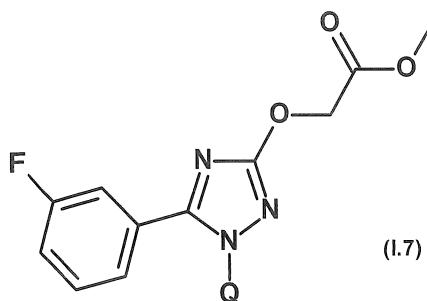
Bảng I.4: Các hợp chất có công thức (I.4) được ưu tiên là các hợp chất từ I.4-1 đến I.4-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.4-1 đến I.4-53 của bảng I.4 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



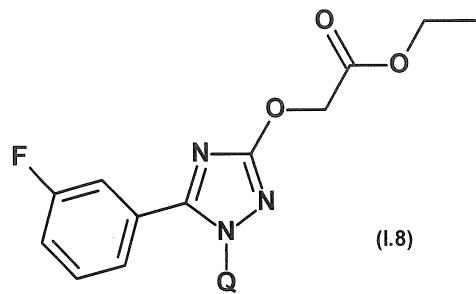
Bảng I.5: Các hợp chất có công thức (I.5) được ưu tiên là các hợp chất từ I.5-1 đến I.5-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.5-1 đến I.5-53 của bảng I.5 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



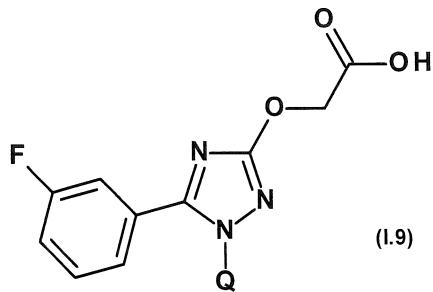
Bảng I.6: Các hợp chất có công thức (I.6) được ưu tiên là các hợp chất từ I.6-1 đến I.6-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.6-1 đến I.6-53 của bảng I.6 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



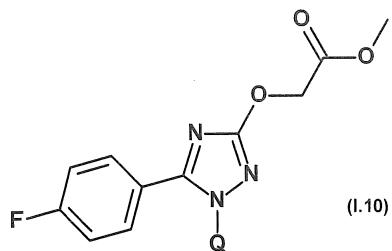
Bảng I.7: Các hợp chất có công thức (I.7) được ưu tiên là các hợp chất từ I.7-1 đến I.7-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.7-1 đến I.7-53 của bảng I.7 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



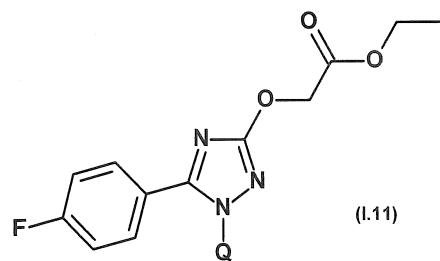
Bảng I.8: Các hợp chất có công thức (I.8) được ưu tiên là các hợp chất từ I.8-1 đến I.8-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.8-1 đến I.8-53 của bảng I.8 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



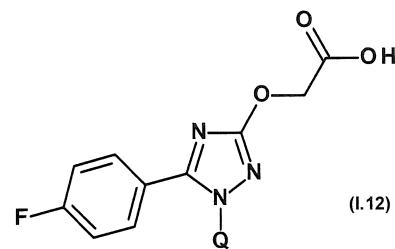
Bảng I.9: Các hợp chất có công thức (I.9) được ưu tiên là các hợp chất từ I.9-1 đến I.9-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.9-1 đến I.9-53 của bảng I.9 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



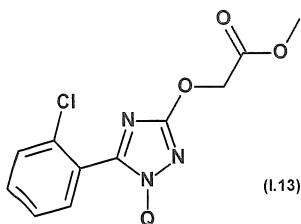
Bảng I.10: Các hợp chất có công thức (I.10) được ưu tiên là các hợp chất từ I.10-1 đến I.10-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.10-1 đến I.10-53 của bảng I.10 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



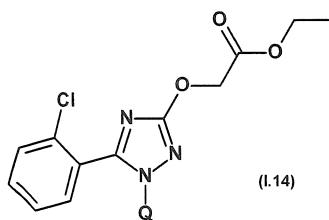
Bảng I.11: Các hợp chất có công thức (I.11) được ưu tiên là các hợp chất từ I.11-1 đến I.11-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.11-1 đến I.11-53 của bảng I.11 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



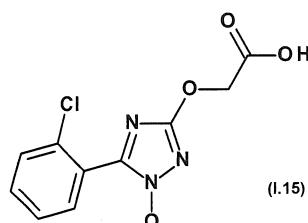
Bảng I.12: Các hợp chất có công thức (I.12) được ưu tiên là các hợp chất từ I.12-1 đến I.12-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.12-1 đến I.12-53 của bảng I.12 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



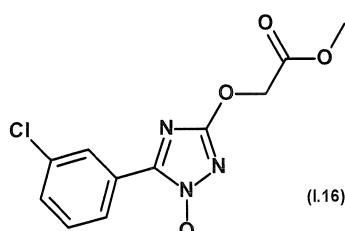
Bảng I.13: Các hợp chất có công thức (I.13) được ưu tiên là các hợp chất từ I.13-1 đến I.13-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.13-1 đến I.13-53 của bảng I.13 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



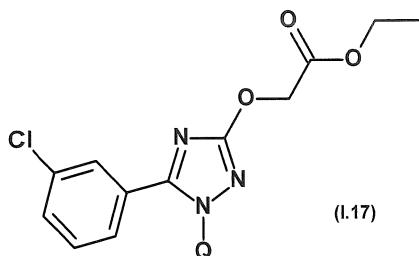
Bảng I.14: Các hợp chất có công thức (I.14) được ưu tiên là các hợp chất từ I.14-1 đến I.14-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.14-1 đến I.14-53 của bảng I.14 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



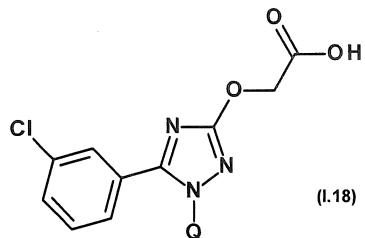
Bảng I.15: Các hợp chất có công thức (I.15) được ưu tiên là các hợp chất từ I.15-1 đến I.15-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.15-1 đến I.15-53 của bảng I.15 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



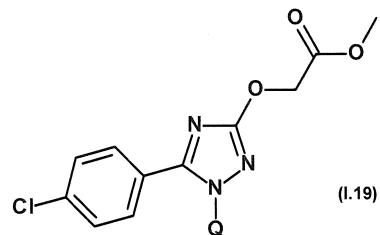
Bảng I.16: Các hợp chất có công thức (I.16) được ưu tiên là các hợp chất từ I.16-1 đến I.16-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.16-1 đến I.16-53 của bảng I.16 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



Bảng I.17: Các hợp chất có công thức (I.17) được ưu tiên là các hợp chất từ I.17-1 đến I.17-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.17-1 đến I.17-53 của bảng I.17 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.

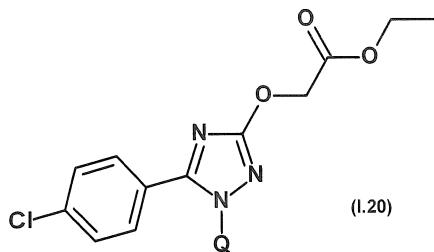


Bảng I.18: Các hợp chất có công thức (I.18) được ưu tiên là các hợp chất từ I.18-1 đến I.18-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.18-1 đến I.18-53 của bảng I.18 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.

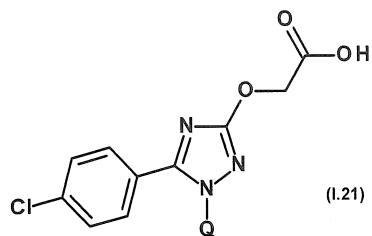


Bảng I.19: Các hợp chất có công thức (I.19) được ưu tiên là các hợp chất từ I.19-1 đến I.19-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.19-1 đến I.19-53 của bảng I.19 được xác định bởi nghĩa của các

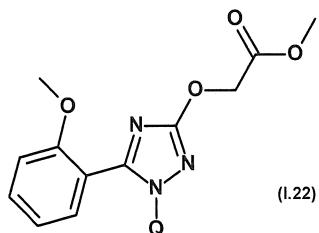
số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



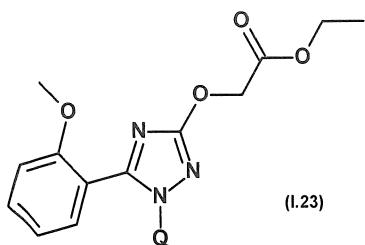
Bảng I.20: Các hợp chất có công thức (I.20) được ưu tiên là các hợp chất từ I.20-1 đến I.20-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.20-1 đến I.20-53 của bảng I.20 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



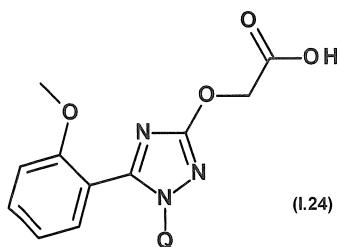
Bảng I.21: Các hợp chất có công thức (I.21) được ưu tiên là các hợp chất từ I.21-1 đến I.21-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.21-1 đến I.21-53 của bảng I.21 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



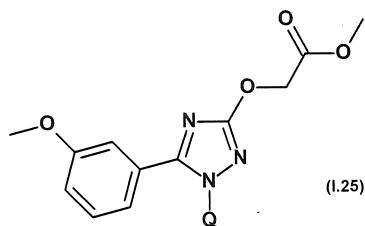
Bảng I.22: Các hợp chất có công thức (I.22) được ưu tiên là các hợp chất từ I.22-1 đến I.22-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.22-1 đến I.22-53 của bảng I.22 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



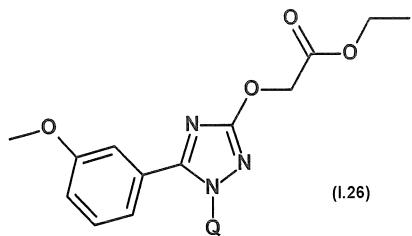
Bảng I.23: Các hợp chất có công thức (I.23) được ưu tiên là các hợp chất từ I.23-1 đến I.23-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.23-1 đến I.23-53 của bảng I.23 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



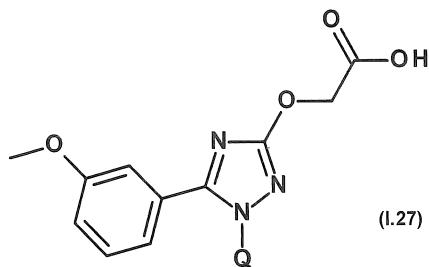
Bảng I.24: Các hợp chất có công thức (I.24) được ưu tiên là các hợp chất từ I.24-1 đến I.24-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.24-1 đến I.24-53 của bảng I.24 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



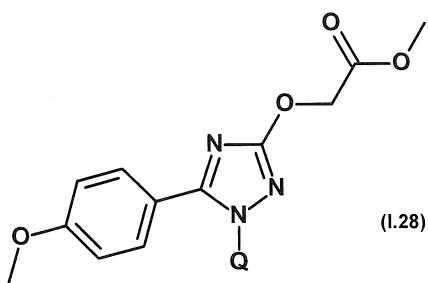
Bảng I.25: Các hợp chất có công thức (I.25) được ưu tiên là các hợp chất từ I.25-1 đến I.25-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.25-1 đến I.25-53 của bảng I.25 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



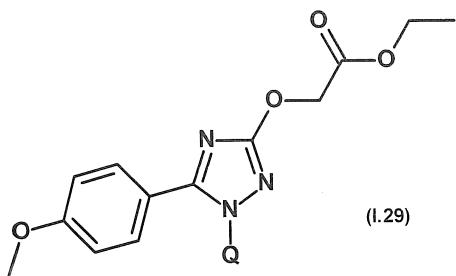
Bảng I.26: Các hợp chất có công thức (I.26) được ưu tiên là các hợp chất từ I.26-1 đến I.26-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.26-1 đến I.26-53 của bảng I.26 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



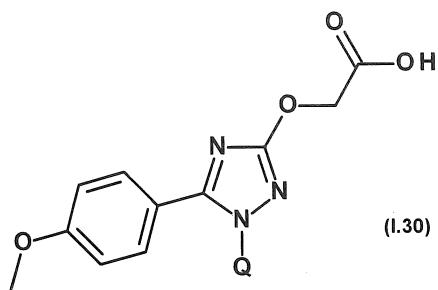
Bảng I.27: Các hợp chất có công thức (I.27) được ưu tiên là các hợp chất từ I.27-1 đến I.27-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.27-1 đến I.27-53 của bảng I.27 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



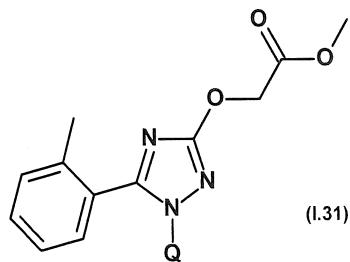
Bảng I.28: Các hợp chất có công thức (I.28) được ưu tiên là các hợp chất từ I.28-1 đến I.28-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.28-1 đến I.28-53 của bảng I.28 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



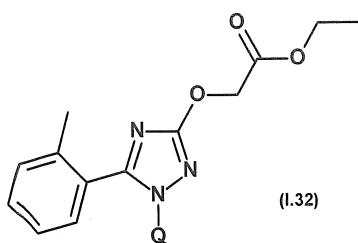
Bảng I.29: Các hợp chất có công thức (I.29) được ưu tiên là các hợp chất từ I.29-1 đến I.29-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.29-1 đến I.29-53 của bảng I.29 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



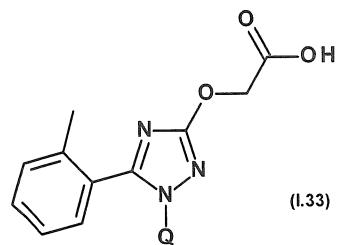
Bảng I.30: Các hợp chất có công thức (I.30) được ưu tiên là các hợp chất từ I.30-1 đến I.30-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.30-1 đến I.30-53 của bảng I.30 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



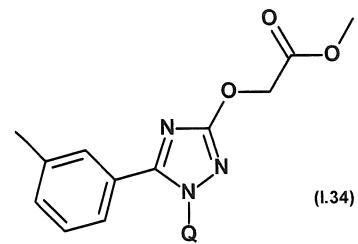
Bảng I.31: Các hợp chất có công thức (I.31) được ưu tiên là các hợp chất từ I.31-1 đến I.31-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.31-1 đến I.31-53 của bảng I.31 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



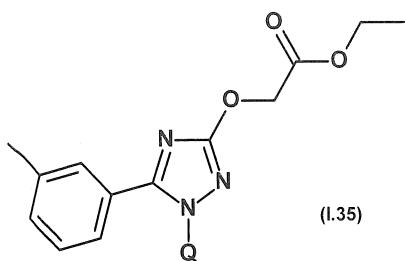
Bảng I.32: Các hợp chất có công thức (I.32) được ưu tiên là các hợp chất từ I.32-1 đến I.32-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.32-1 đến I.32-53 của bảng I.32 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



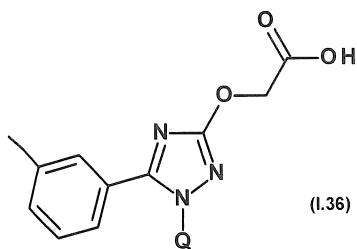
Bảng I.33: Các hợp chất có công thức (I.33) được ưu tiên là các hợp chất từ I.33-1 đến I.33-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.33-1 đến I.33-53 của bảng I.33 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



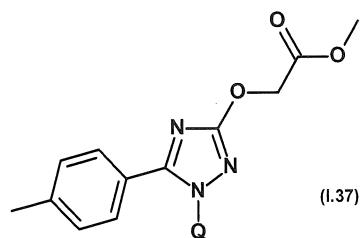
Bảng I.34: Các hợp chất có công thức (I.34) được ưu tiên là các hợp chất từ I.34-1 đến I.34-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.34-1 đến I.34-53 của bảng I.34 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



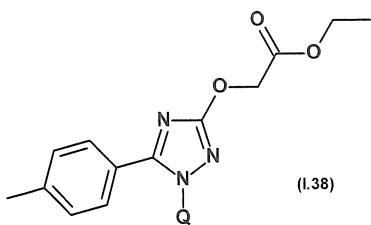
Bảng I.35: Các hợp chất có công thức (I.35) được ưu tiên là các hợp chất từ I.35-1 đến I.35-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.35-1 đến I.35-53 của bảng I.35 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



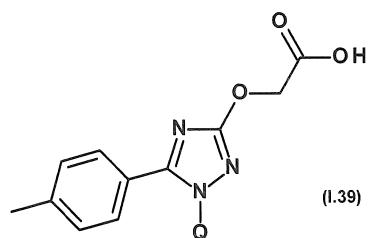
Bảng I.36: Các hợp chất có công thức (I.36) được ưu tiên là các hợp chất từ I.36-1 đến I.36-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.36-1 đến I.36-53 của bảng I.36 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



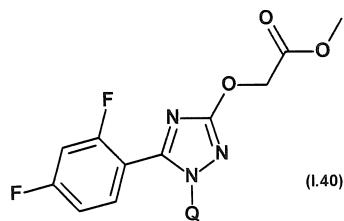
Bảng I.37: Các hợp chất có công thức (I.37) được ưu tiên là các hợp chất từ I.37-1 đến I.37-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.37-1 đến I.37-53 của bảng I.37 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



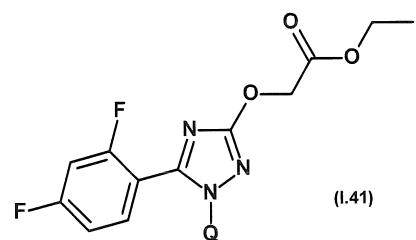
Bảng I.38: Các hợp chất có công thức (I.38) được ưu tiên là các hợp chất từ I.38-1 đến I.38-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.38-1 đến I.38-53 của bảng I.38 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



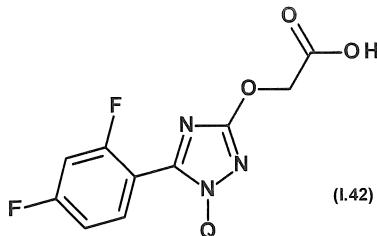
Bảng I.39: Các hợp chất có công thức (I.39) được ưu tiên là các hợp chất từ I.39-1 đến I.39-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.39-1 đến I.39-53 của bảng I.39 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



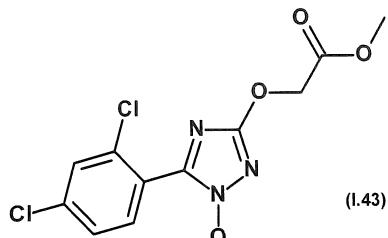
Bảng I.40: Các hợp chất có công thức (I.40) được ưu tiên là các hợp chất từ I.40-1 đến I.40-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.40-1 đến I.40-53 của bảng I.40 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



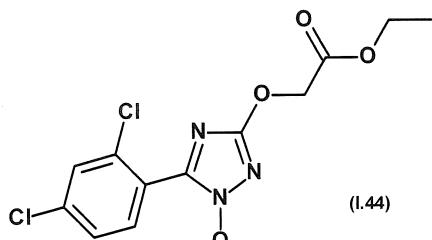
Bảng I.41: Các hợp chất có công thức (I.41) được ưu tiên là các hợp chất từ I.41-1 đến I.41-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.41-1 đến I.41-53 của bảng I.41 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



Bảng I.42: Các hợp chất có công thức (I.42) được ưu tiên là các hợp chất từ I.42-1 đến I.42-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.42-1 đến I.42-53 của bảng I.42 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.

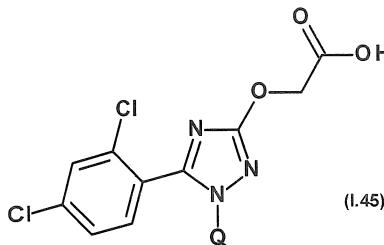


Bảng I.43: Các hợp chất có công thức (I.43) được ưu tiên là các hợp chất từ I.43-1 đến I.43-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.43-1 đến I.43-53 của bảng I.43 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.

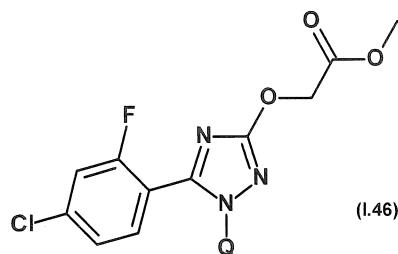


Bảng I.44: Các hợp chất có công thức (I.44) được ưu tiên là các hợp chất từ I.44-1 đến I.44-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.44-1 đến I.44-53 của bảng I.44 được xác định bởi nghĩa của các

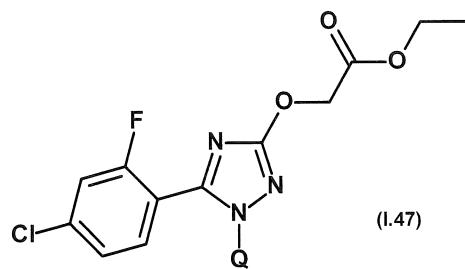
số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



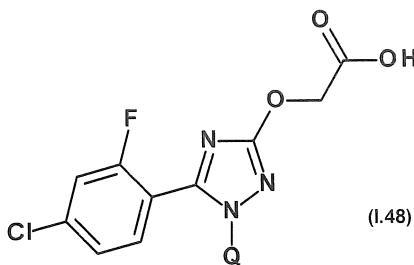
Bảng I.45: Các hợp chất có công thức (I.45) được ưu tiên là các hợp chất từ I.45-1 đến I.45-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.45-1 đến I.45-53 của bảng I.45 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



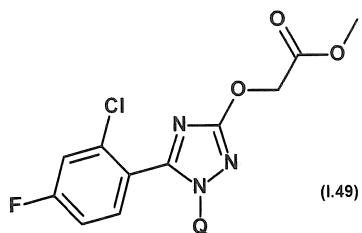
Bảng I.46: Các hợp chất có công thức (I.46) được ưu tiên là các hợp chất từ I.46-1 đến I.46-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.46-1 đến I.46-53 của bảng I.46 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



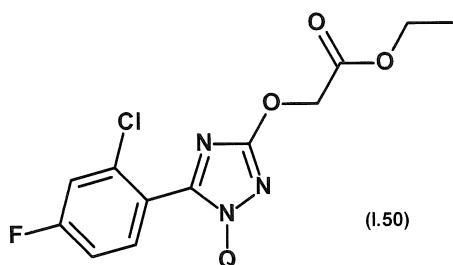
Bảng I.47: Các hợp chất có công thức (I.47) được ưu tiên là các hợp chất từ I.47-1 đến I.47-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.47-1 đến I.47-53 của bảng I.47 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



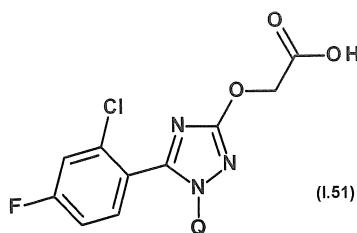
Bảng I.48: Các hợp chất có công thức (I.48) được ưu tiên là các hợp chất từ I.48-1 đến I.48-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.48-1 đến I.48-53 của bảng I.48 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



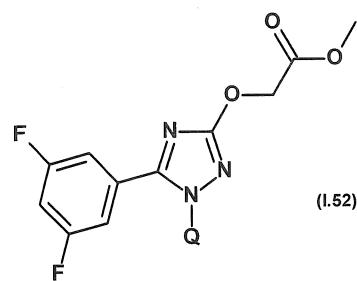
Bảng I.49: Các hợp chất có công thức (I.49) được ưu tiên là các hợp chất từ I.49-1 đến I.49-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.49-1 đến I.49-53 của bảng I.49 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



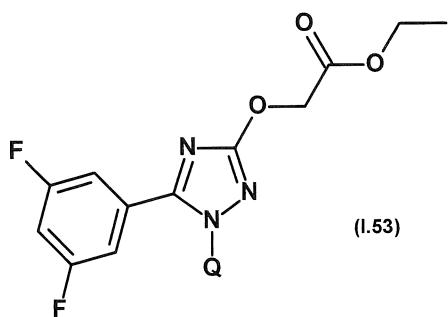
Bảng I.50: Các hợp chất có công thức (I.50) được ưu tiên là các hợp chất từ I.50-1 đến I.50-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.50-1 đến I.50-53 của bảng I.50 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



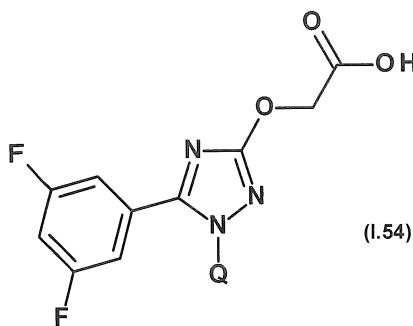
Bảng I.51: Các hợp chất có công thức (I.51) được ưu tiên là các hợp chất từ I.51-1 đến I.51-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất I.51-1 đến I.51-53 của bảng I.2 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



Bảng I.52: Các hợp chất có công thức (I.52) được ưu tiên là các hợp chất từ I.52-1 đến I.52-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.52-1 đến I.52-53 của bảng I.52 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.

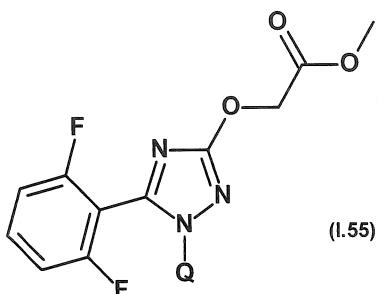


Bảng I.53: Các hợp chất có công thức (I.53) được ưu tiên là các hợp chất từ I.53-1 đến I.53-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.53-1 đến I.53-53 của bảng I.53 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



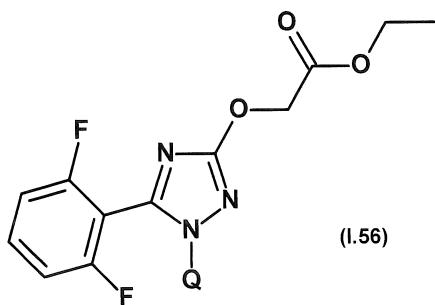
(I.54)

Bảng I.54: Các hợp chất có công thức (I.54) được ưu tiên là các hợp chất từ I.54-1 đến I.54-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.54-1 đến I.54-53 của bảng I.54 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



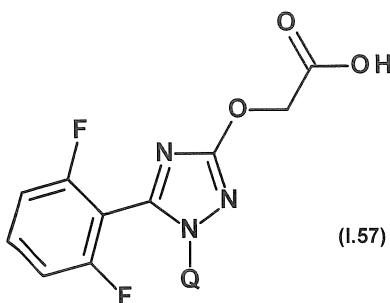
(I.55)

Bảng I.55: Các hợp chất có công thức (I.55) được ưu tiên là các hợp chất từ I.55-1 đến I.55-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.55-1 đến I.55-53 của bảng I.55 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.

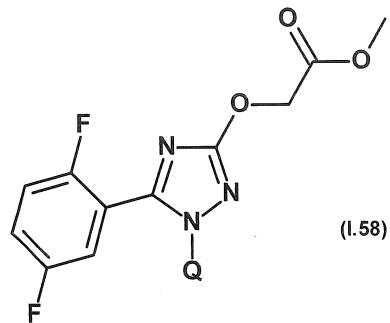


(I.56)

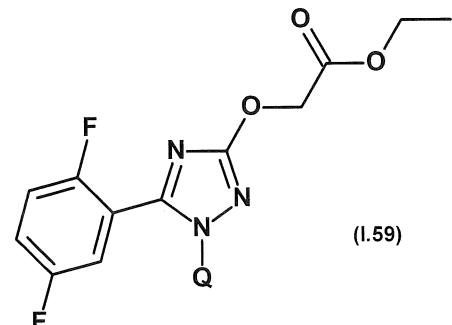
Bảng I.56: Các hợp chất có công thức (I.56) được ưu tiên là các hợp chất từ I.56-1 đến I.56-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.56-1 đến I.56-53 của bảng I.56 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



Bảng I.57: Các hợp chất có công thức (I.57) được ưu tiên là các hợp chất từ I.57-1 đến I.57-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.57-1 đến I.57-53 của bảng I.57 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.

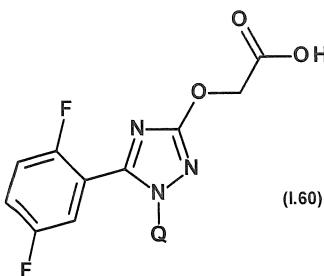


Bảng I.58: Các hợp chất có công thức (I.58) được ưu tiên là các hợp chất từ I.58-1 đến I.58-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.58-1 đến I.58-53 của bảng I.58 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.

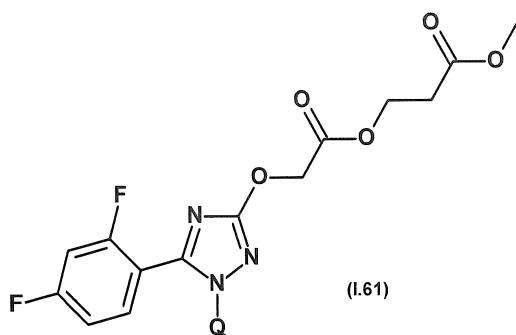


Bảng I.59: Các hợp chất có công thức (I.59) được ưu tiên là các hợp chất từ I.59-1 đến I.59-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.59-1 đến I.59-53 của bảng I.59 được xác định bởi nghĩa của các

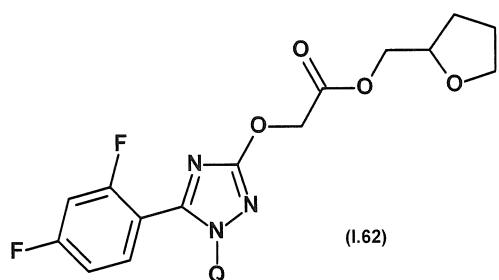
số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



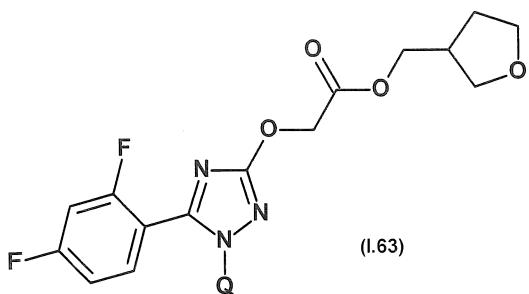
Bảng I.60: Các hợp chất có công thức (I.60) được ưu tiên là các hợp chất từ I.60-1 đến I.60-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.60-1 đến I.60-53 của bảng I.60 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



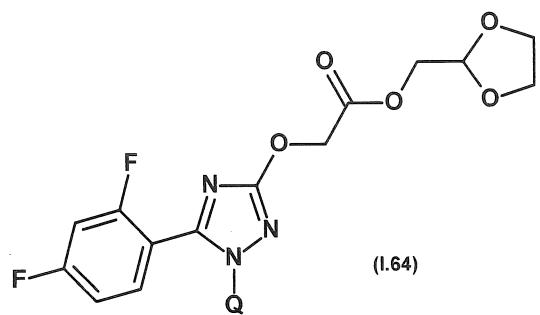
Bảng I.61: Các hợp chất có công thức (I.61) được ưu tiên là các hợp chất từ I.61-1 đến I.61-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.61-1 đến I.61-53 của bảng I.61 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



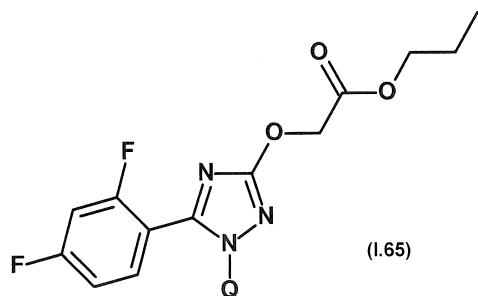
Bảng I.62: Các hợp chất có công thức (I.62) được ưu tiên là các hợp chất từ I.62-1 đến I.62-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.62-1 đến I.62-53 của bảng I.62 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



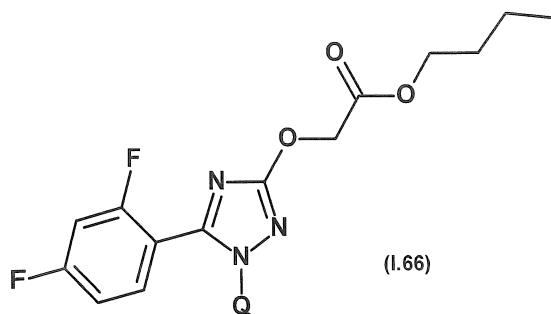
Bảng I.63: Các hợp chất có công thức (I.63) được ưu tiên là các hợp chất từ I.63-1 đến I.63-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.63-1 đến I.63-53 của bảng I.63 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



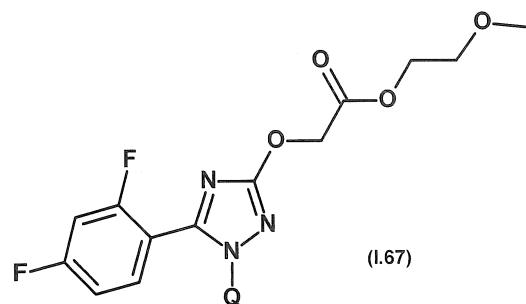
Bảng I.64: Các hợp chất có công thức (I.64) được ưu tiên là các hợp chất từ I.64-1 đến I.64-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.64-1 đến I.64-53 của bảng I.64 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



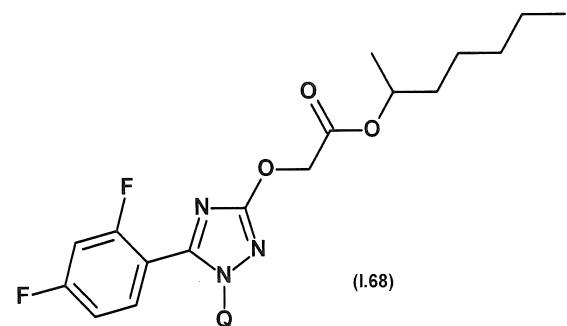
Bảng I.65: Các hợp chất có công thức (I.65) được ưu tiên là các hợp chất từ I.65-1 đến I.65-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.65-1 đến I.65-53 của bảng I.65 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



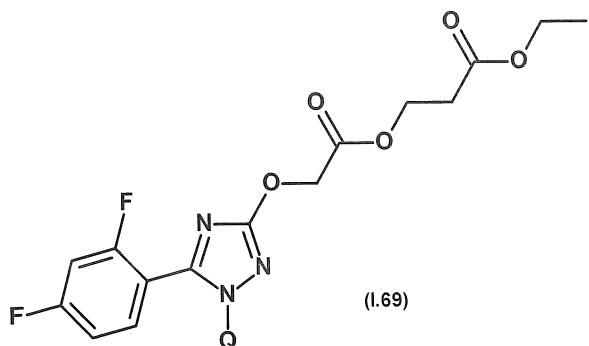
Bảng I.66: Các hợp chất có công thức (I.66) được ưu tiên là các hợp chất từ I.66-1 đến I.66-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.66-1 đến I.66-53 của bảng I.66 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



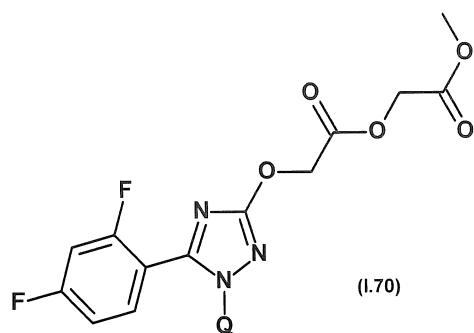
Bảng I.67: Các hợp chất có công thức (I.67) được ưu tiên là các hợp chất từ I.67-1 đến I.67-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.67-1 đến I.67-53 của bảng I.67 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



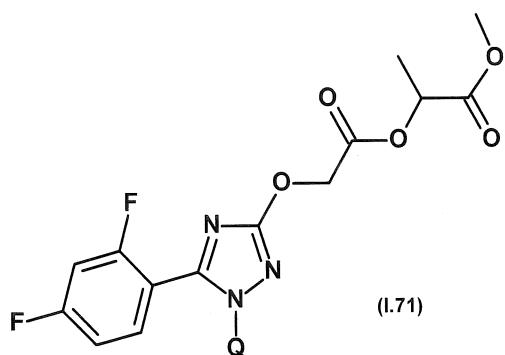
Bảng I.68: Các hợp chất có công thức (I.68) được ưu tiên là các hợp chất từ I.68-1 đến I.68-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.68-1 đến I.68-53 của bảng I.68 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



Bảng I.69: Các hợp chất có công thức (I.69) được ưu tiên là các hợp chất từ I.69-1 đến I.69-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.69-1 đến I.69-53 của bảng I.69 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.

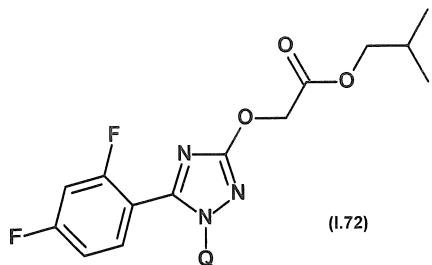


Bảng I.70: Các hợp chất có công thức (I.70) được ưu tiên là các hợp chất từ I.70-1 đến I.70-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.70-1 đến I.70-53 của bảng I.70 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.

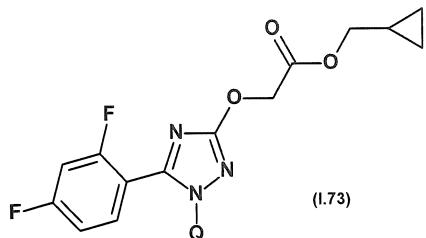


Bảng I.71: Các hợp chất có công thức (I.71) được ưu tiên là các hợp chất từ I.71-1 đến I.71-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì

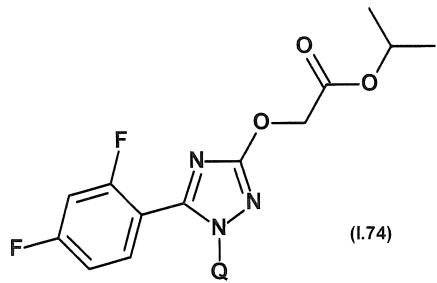
vậy, các hợp chất từ I.71-1 đến I.71-53 của bảng I.71 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



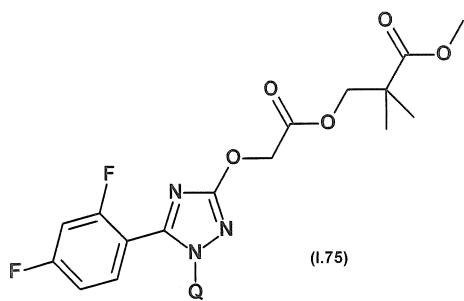
Bảng I.72: Các hợp chất có công thức (I.72) được ưu tiên là các hợp chất từ I.72-1 đến I.72-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.72-1 đến I.72-53 của bảng I.72 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



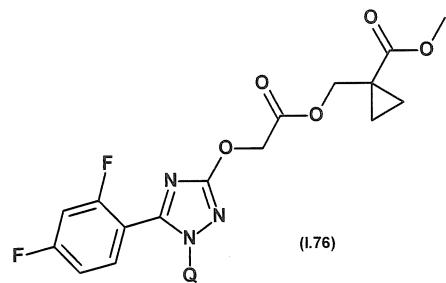
Bảng I.73: Các hợp chất có công thức (I.73) được ưu tiên là các hợp chất từ I.73-1 đến I.73-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.73-1 đến I.73-53 của bảng I.73 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



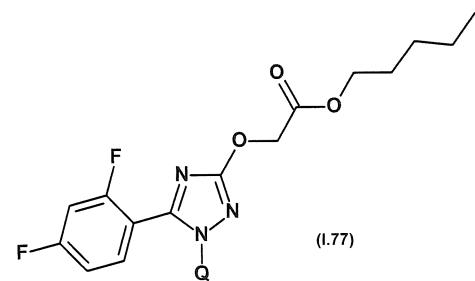
Bảng I.74: Các hợp chất có công thức (I.74) được ưu tiên là các hợp chất từ I.74-1 đến I.74-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.74-1 đến I.74-53 của bảng I.74 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



Bảng I.75: Các hợp chất có công thức (I.75) được ưu tiên là các hợp chất từ I.75-1 đến I.75-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.75-1 đến I.75-53 của bảng I.75 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



Bảng I.76: Các hợp chất có công thức (I.76) được ưu tiên là các hợp chất từ I.76-1 đến I.76-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.76-1 đến I.76-53 của bảng I.76 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.



Bảng I.77: Các hợp chất có công thức (I.77) được ưu tiên là các hợp chất từ I.77-1 đến I.77-53 trong đó Q có các nghĩa từ bảng 1 được chỉ ra trong hàng tương ứng. Vì vậy, các hợp chất từ I.77-1 đến I.77-53 của bảng I.77 được xác định bởi nghĩa của các số đầu vào tương ứng 1 đến 53 đối với Q từ bảng 1.

Dữ liệu quang phổ của các ví dụ chọn lọc nêu trong bảng:

Các ví dụ tổng hợp cụ thể được lựa chọn đối với hợp chất có công thức chung (I) theo sáng chế được viện dẫn dưới đây. Dữ liệu quang phổ  $^1\text{H}$  NMR,  $^{13}\text{C}$ -NMR và  $^{19}\text{F}$ -NMR được báo cáo đối với các ví dụ hóa học được mô tả trong các phần dưới đây (400 MHz đối với  $^1\text{H}$  NMR và 150 MHz đối với  $^{13}\text{C}$ -NMR và 375 MHz đối với  $^{19}\text{F}$ -NMR, dung môi  $\text{CDCl}_3$ ,  $\text{CD}_3\text{OD}$  hoặc  $d_6\text{-DMSO}$ , chất chuẩn nội: tetramethylsilan  $\delta = 0,00$  ppm) thu được trên thiết bị Bruker, và các tín hiệu liệt kê có các nghĩa được đưa ra dưới đây: br = vạch rộng; s = vạch đơn, d = vạch đôi, t = vạch ba, dd = vạch đôi của vạch đôi, ddd = vạch đôi của vạch đôi của vạch đôi, m = đa vạch, q = bốn vạch, quint = năm vạch, sext = sáu vạch, sept = bảy vạch, dq = vạch đôi của bốn vạch, dt = vạch đôi của ba vạch. Trong trường hợp hỗn hợp đồng phân không đối quang, các tín hiệu có nghĩa đối với mỗi trong đó hai chất đồng phân không đối quang được báo cáo hoặc tín hiệu đặc trưng của các chất đồng phân không đối quang chính được báo cáo. Các chữ viết tắt được sử dụng cho các nhóm hóa học có, ví dụ, các nghĩa sau đây: Me =  $\text{CH}_3$ , Et =  $\text{CH}_2\text{CH}_3$ , t-Hex =  $\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$ , t-Bu =  $\text{C}(\text{CH}_3)_3$ , n-Bu = butyl không phân nhánh, n-Pr = propyl không phân nhánh, i-Pr = propyl phân nhánh, c-Pr = cyclopropyl, c-Hex = cyclohexyl.

Dữ liệu quang phổ được liệt kê dưới đây đối với các ví dụ chọn lọc trong bảng được đánh giá thông qua sự thể hiện  $^1\text{H}$  NMR thông thường hoặc thông qua phương pháp liệt kê định NMR.

#### Sự thể hiện $^1\text{H}$ NMR thông thường

Ví dụ số I.77-49:

$^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$  δ, ppm) 7,59 (m, 1H), 7,37 (t, 1H), 7,22 (m, 1H), 7,14 (dd, 1H), 6,97 (m, 1H), 6,77 (m, 1H), 4,92 (s, 2H), 4,20 (t, 2H), 1,67-1,63 (m, 2H), 1,32-1,26 (m, 4H), 0,87 (t, 3H).

Ví dụ số I.71-49:

$^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$  δ, ppm) 7,59 (m, 1H), 7,40 (t, 1H), 7,22 (dd, 1H), 7,14 (dd, 1H), 6,97 (dt, 1H), 6,77 (dt, 1H), 5,24 (q, 1H), 5,01 (s, 2H), 3,74 (s, 3H).

Ví dụ số I.70-49:

$^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$  δ, ppm) 7,60 (m, 1H), 7,40 (t, 1H), 7,21 (m, 1H),

7,14 (m, 1H), 6,96 (m, 1H), 6,77 (m, 1H), 5,05 (s, 2H), 4,75 (s, 2H), 3,77 (s, 3H).

Ví dụ số I.72-49:

$^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$  δ, ppm) 7,57 (m, 1H), 7,37 (t, 1H), 7,21 (m, 1H), 7,14 (dd, 1H), 6,96 (dt, 1H), 6,77 (dt, 1H), 4,93 (s, 2H), 3,99 (d, 2H), 1,95 (m, 1H), 0,90 (d, 6H).

### Phương pháp liệt kê đỉnh NMR

Dữ liệu  $^1\text{H}$  NMR của các ví dụ được lựa chọn được thể hiện dưới dạng liệt kê các đỉnh  $^1\text{H}$  NMR. Đối với mỗi một đỉnh tín hiệu, trước tiên, giá trị δ tính bằng ppm và sau đó, cường độ tín hiệu nằm trong dấu ngoặc đơn được liệt kê. Các cặp số giá trị δ/cường độ tín hiệu của các đỉnh tín hiệu khác nhau được liệt kê có phân cách nhau bằng dấu phẩy.

Do đó, danh sách đỉnh của một ví dụ có dạng:

$\delta_1$  (cường độ<sub>1</sub>);  $\delta_2$  (cường độ<sub>2</sub>);.....;  $\delta_i$  (cường độ<sub>i</sub>);.....;  $\delta_n$  (cường độ<sub>n</sub>)

Cường độ của các tín hiệu rõ nét tương ứng với độ cao của các tín hiệu trong ví dụ được in ra của phô NMR tính bằng cm và thể hiện các tỷ lệ thực của các cường độ tín hiệu. Trong trường hợp tín hiệu rộng, một số đỉnh hoặc giá trị trung bình của cường độ tín hiệu và cường độ tương đối của nó có thể được thể hiện trong phép so sánh với tín hiệu cường độ mạnh nhất trong phô.

Để hiệu chỉnh độ dịch chuyển hóa học của phô  $^1\text{H}$  NMR, sử dụng tetramethylsilan và/hoặc độ dịch chuyển hóa học của dung môi, đặc biệt là trong trường hợp phô được đo trong DMSO. Do đó, đỉnh tetramethylsilan có thể nhưng không nhất thiết xuất hiện trong các danh sách đỉnh NMR.

Các danh sách các đỉnh  $^1\text{H}$  NMR là tương tự như dữ liệu  $^1\text{H}$  NMR in ra thông thường và do đó thường chứa tất cả các đỉnh được liệt kê trong diễn giải NMR thông thường.

Ngoài ra, giống như dữ liệu  $^1\text{H}$  NMR in ra thông thường, các danh sách này có thể thể hiện các tín hiệu về dung môi, các tín hiệu về chất đồng phân lập thể của các hợp chất đích, mà tương tự cấu thành một phần đối tượng của sáng chế, và/hoặc các

đỉnh của tạp chất.

Khi thông báo về các tín hiệu của hợp chất nằm trong khoảng delta của dung môi và/hoặc nước, danh sách các đỉnh 1H NMR ở đây thể hiện các đỉnh dung môi thông thường, ví dụ các đỉnh của DMSO trong DMSO-D<sub>6</sub> và đỉnh của nước, trung bình đỉnh này thông thường có cường độ cao.

Các đỉnh của chất đồng phân lập thể của các hợp chất đích và/hoặc các đỉnh của tạp chất thường có cường độ ở mức trung bình thấp hơn so với đỉnh của các hợp chất đích (ví dụ, với độ tinh khiết > 90%).

Các chất đồng phân lập thể và/hoặc tạp chất như vậy có thể là đặc trưng trong quy trình điều chế cụ thể. Do đó, các đỉnh của chúng có thể giúp để nhận biết khả năng mô phỏng của quy trình điều chế của tác giả sáng chế với việc tham chiếu "các dấu ấn sản phẩm phụ".

Chuyên gia tính toán đỉnh của các hợp chất đích bằng các phương pháp đã biết (MestreC, mô phỏng ACD, và cả bằng các giá trị kỳ vọng đánh giá theo kinh nghiệm), nếu cần có thể tách riêng đỉnh của các hợp chất đích, tùy ý sử dụng các bộ lọc cường độ bổ sung. Sự tách riêng này có thể sẽ tương tự như việc chọn đỉnh thích hợp trong cách diễn giải 1H NMR thông thường.

Chi tiết hơn về danh sách đỉnh 1H NMR có thể xem trong tài liệu Research Disclosure Database Number 564025.

I.1-43: <sup>1</sup>H-NMR(400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,7545 (0,6); 7,7491 (0,6); 7,7330 (1,2); 7,7168 (0,7); 7,7116 (0,8); 7,6955 (0,3); 7,5227 (0,6); 7,5121 (1,2); 7,5010 (1,2); 7,4907 (0,9); 7,4804 (0,4); 7,4705 (0,5); 7,4685 (0,5); 7,4624 (0,5); 7,4482 (8,4); 7,4373 (9,3); 7,4145 (3,4); 7,3937 (1,6); 4,9955 (8,7); 3,7118 (16,0); 3,3498 (10,0); 2,5110 (3,9); 2,5068 (5,1); 2,5025 (3,8); 0,0000 (0,4)

I.22-2: <sup>1</sup>H-NMR(400,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,4855 (2,3); 7,4669 (3,6); 7,4471 (2,4); 7,4282 (1,2); 7,3669 (1,4); 7,3436 (3,2); 7,3229 (1,8); 7,2502 (1,3); 7,2310 (1,9); 7,2119 (0,8); 7,0641 (1,3); 7,0457 (2,3); 7,0269 (1,1); 6,9660 (2,3); 6,9451 (2,1); 4,9517 (9,2); 3,7114 (16,0); 3,3503 (15,0);

3,3188 (3,6); 2,5009 (13,3); -0,0002 (4,9)

I.22-20:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,4092 (0,7); 7,4049 (0,8); 7,3849 (1,8); 7,3810 (1,0); 7,3696 (1,0); 7,3654 (2,0); 7,3500 (1,6); 7,3457 (2,1); 7,3413 (1,1); 7,3311 (1,7); 7,3270 (1,4); 7,2892 (1,4); 7,2852 (1,4); 7,2697 (1,6); 7,2657 (1,5); 7,0385 (1,8); 7,0192 (1,5); 7,0176 (1,5); 6,9993 (1,9); 6,9805 (3,2); 6,9615 (1,6); 6,9445 (1,9); 6,9237 (1,7); 4,9178 (8,3); 3,7096 (16,0); 3,4599 (14,8); 3,3933 (14,6); 3,3045 (1,3); 2,5090 (3,2); 2,5048 (6,4); 2,5004 (8,6); 2,4959 (6,2); 2,4918 (3,0); 2,0718 (0,7); 0,0009 (3,9)

I.22-49:  $^1\text{H-NMR}$ (400,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,6671 (1,7); 7,6628 (1,6); 7,6416 (1,7); 7,5063 (2,1); 7,4885 (2,9); 7,4705 (2,0); 7,4512 (1,2); 7,4145 (1,0); 7,3936 (2,2); 7,3739 (2,1); 7,3555 (2,5); 7,3339 (1,1); 7,0814 (1,4); 7,0628 (2,4); 7,0441 (1,2); 6,9942 (2,4); 6,9733 (2,2); 4,9550 (9,1); 3,7105 (16,0); 3,6714 (0,4); 3,3967 (15,0); 3,3236 (0,9); 2,5019 (7,0); -0,0003 (1,9)

I.23-2:  $^1\text{H-NMR}$ (300,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,5017 (0,7); 7,4820 (4,5); 7,4742 (3,0); 7,4569 (5,3); 7,4484 (4,0); 7,4214 (1,9); 7,4160 (1,4); 7,3731 (2,0); 7,3644 (1,3); 7,3588 (1,3); 7,3387 (4,6); 7,3133 (3,1); 7,2558 (2,2); 7,2296 (2,9); 7,2054 (1,1); 7,0696 (2,2); 7,0445 (3,9); 7,0199 (1,8); 6,9689 (3,8); 6,9414 (3,5); 4,9261 (16,0); 4,2154 (2,3); 4,1918 (7,2); 4,1681 (7,3); 4,1444 (2,4); 3,3520 (27,0); 3,3172 (15,4); 3,2936 (0,6); 2,5063 (23,2); 2,5010 (29,0); 1,2267 (7,7); 1,2031 (15,5); 1,1794 (7,4); 0,0000 (16,0); -0,0107 (0,6)

I.23-20:  $^1\text{H-NMR}$ (300,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,4162 (1,2); 7,4102 (1,4); 7,3862 (3,6); 7,3632 (3,9); 7,3586 (3,7); 7,3476 (2,9); 7,3412 (3,3); 7,3341 (2,1); 7,3223 (3,2); 7,3170 (2,6); 7,2867 (2,7); 7,2816 (2,5); 7,2609 (3,2); 7,2554 (2,8); 7,0410 (3,4); 7,0051 (3,8); 6,9798 (6,1); 6,9484 (4,0); 6,9203 (3,3); 4,8923 (15,2); 4,2130 (2,3); 4,1892 (7,0); 4,1656 (7,1); 4,1419 (2,4); 3,4589 (26,8); 3,4438 (1,0); 3,3943 (27,0); 3,3184 (223,5); 2,5065 (34,4); 2,5008 (44,5); 2,4953 (31,6); 1,2305 (7,8); 1,2068 (16,0); 1,1832 (7,6); 1,1476 (0,6); -0,0001 (10,0)

I.23-20:  $^1\text{H-NMR}$ (300,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,4166 (1,0); 7,4108 (1,2); 7,3921 (2,4); 7,3869 (3,1); 7,3643 (3,4); 7,3590 (3,3); 7,3483 (2,6); 7,3418 (3,0); 7,3346 (2,0); 7,3230 (3,0); 7,3175 (2,3); 7,2876 (2,3); 7,2821 (2,4); 7,2616 (3,0); 7,2561 (2,5); 7,0414 (3,0); 7,0129 (2,8); 7,0086 (2,8); 7,0050 (3,3); 6,9802 (5,4); 6,9487 (3,5); 6,9204 (2,8); 5,0361 (0,4); 4,8937 (13,7); 4,7867 (0,5); 4,2120 (2,1); 4,1883 (6,7); 4,1646 (6,9); 4,1410 (2,3); 3,4587 (25,1); 3,3932 (24,8); 3,3242 (18,8); 2,5129 (17,9); 2,5071 (35,3); 2,5012 (46,6); 2,4953 (32,3); 1,2298 (7,6); 1,2061 (16,0); 1,1824 (7,3); 1,1724 (0,8); -0,0001 (7,5)

I.23-32:  $^1\text{H-NMR}$ (300,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,8077 (5,6); 7,8007 (5,7); 7,5052 (2,2); 7,4979 (2,3); 7,4849 (4,2); 7,4770 (6,4); 7,4694 (6,0); 7,4603 (4,6); 7,4517 (3,8); 7,4318 (7,6); 7,4034 (3,2); 7,0669 (2,4); 7,0418 (4,2); 7,0170 (2,0); 6,9796 (4,1); 6,9518 (3,7); 4,9194 (15,9); 4,2079 (2,4); 4,1842 (7,4); 4,1605 (7,5); 4,1369 (2,5); 3,4468 (27,0); 3,3280 (10,9); 2,5023 (11,8); 2,0759 (0,5); 1,2251 (8,0); 1,2015 (16,0); 1,1778 (7,7); -0,0001 (2,6)

I.23-38:  $^1\text{H-NMR}$ (300,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,4893 (5,4); 7,4647 (7,6); 7,4361 (4,2); 7,4172 (2,5); 7,4078 (1,4); 7,3878 (1,2); 7,1695 (1,0); 7,1424 (1,7); 7,1138 (0,8); 7,0782 (2,1); 7,0532 (3,7); 7,0290 (1,7); 6,9875 (3,5); 6,9600 (3,3); 4,9240 (15,5); 4,2136 (2,3); 4,1899 (7,2); 4,1662 (7,3); 4,1426 (2,4); 3,4123 (26,5); 3,3226 (97,3); 3,2997 (1,2); 2,5069 (29,9); 2,5014 (38,2); 2,4958 (27,0); 2,0742 (3,3); 1,2253 (7,8); 1,2017 (16,0); 1,1780 (7,6); -0,0001 (28,2)

I.23-49:  $^1\text{H-NMR}$ (300,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,6727 (2,6); 7,6659 (2,6); 7,6379 (2,7); 7,6335 (2,6); 7,5008 (4,0); 7,4756 (4,7); 7,4446 (2,0); 7,4148 (1,3); 7,3863 (3,6); 7,3582 (6,1); 7,3513 (4,6); 7,3291 (1,2); 7,3223 (1,2); 7,0868 (2,3); 7,0616 (3,9); 7,0367 (1,8); 6,9972 (3,9); 6,9696 (3,6); 4,9282 (15,8); 4,2137 (2,4); 4,1901 (7,3); 4,1664 (7,5); 4,1427 (2,5); 3,3971 (27,0); 3,3171 (15,4); 2,5064 (26,3); 2,5012 (32,4); 2,0741 (0,3); 1,2251 (8,0); 1,2014 (16,0); 1,1777 (7,5); 0,0000 (16,4)

I.24-2:  $^1\text{H-NMR}$ (300,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 13,0568 (3,4); 7,4904 (4,8); 7,4657 (6,6); 7,4482 (4,8); 7,4214 (2,4); 7,3721 (3,9); 7,3413 (6,3); 7,3203 (2,7); 7,3139 (3,1); 7,2563 (3,0); 7,2307 (4,0); 7,2065 (1,5); 7,0702 (3,0); 7,0452 (5,2); 7,0208 (2,4); 6,9689 (5,1); 6,9410 (4,6); 4,8266 (16,0); 3,3514 (34,8); 3,3256 (6,3); 2,7288 (0,4); 2,5068 (48,0); 2,5017 (61,3); 2,2724 (0,4); 2,0750 (6,5); 0,0001 (37,3)

I.24-20:  $^1\text{H-NMR}$ (300,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 13,1077 (0,4); 13,1021 (0,4); 13,0535 (0,6); 13,0168 (0,7); 12,9800 (0,5); 12,8009 (0,4); 7,6556 (0,5); 7,6271 (0,5); 7,4144 (1,5); 7,3845 (4,7); 7,3562 (7,2); 7,3304 (5,5); 7,2977 (3,2); 7,2715 (4,2); 7,2386 (0,3); 7,1848 (0,5); 7,1563 (0,4); 7,0854 (0,3); 7,0644 (0,5); 7,0379 (4,5); 7,0087 (6,9); 6,9803 (7,6); 6,9547 (4,0); 6,9464 (5,0); 6,9184 (4,1); 4,7833 (16,0); 4,7501 (0,6); 3,8942 (0,9); 3,8525 (0,4); 3,8055 (0,5); 3,7782 (0,4); 3,6896 (1,6); 3,4545 (31,6); 3,4244 (0,7); 3,3927 (31,7); 3,3205 (46,3); 3,2305 (0,4); 2,7265 (0,9); 2,6120 (0,4); 2,5522 (0,7); 2,5063 (112,8); 2,5010 (142,4); 2,2692 (0,8); 0,1952 (0,4); -0,0001 (81,6); -0,1992 (0,4); -3,3101 (0,3)

I.24-32:  $^1\text{H-NMR}$ (300,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 13,1044 (0,3); 13,0604 (2,0); 7,8024 (6,0); 7,7952 (6,1); 7,5056 (2,4); 7,4963 (3,8); 7,4902 (3,9); 7,4769 (6,8); 7,4699 (8,6); 7,4492 (3,5); 7,4389 (8,8); 7,4235 (2,2); 7,4183 (1,9); 7,4102 (3,4); 7,0656 (2,5); 7,0406 (4,4); 7,0155 (2,0); 6,9784 (4,3); 6,9509 (3,9); 4,8155 (16,0); 3,4463 (29,4); 3,3251 (13,2); 2,5067 (40,8); 2,5014 (52,8); 2,2696 (0,3); 1,1486 (0,6); -0,0001 (16,7)

I.24-38:  $^1\text{H-NMR}$ (300,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 13,0563 (1,7); 7,4977 (4,2); 7,4869 (3,2); 7,4732 (5,4); 7,4603 (5,3); 7,4549 (5,1); 7,4438 (3,0); 7,4295 (3,4); 7,4234 (3,5); 7,3946 (1,4); 7,1653 (1,2); 7,1436 (2,0); 7,1152 (1,0); 7,0783 (2,5); 7,0531 (4,3); 7,0280 (2,0); 6,9870 (4,2); 6,9592 (3,8); 4,8233 (16,0); 3,4125 (28,6); 3,3258 (4,4); 2,5068 (34,1); 2,5016 (43,8); 2,0752 (0,7); -0,0001 (22,2)

I.24-49:  $^1\text{H-NMR}$ (300,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 13,0791 (2,0); 7,6721 (2,8); 7,6654 (2,8); 7,6377 (2,9); 7,6321 (2,8); 7,5092 (3,5); 7,4843 (4,2); 7,4708 (3,3); 7,4446 (2,0); 7,4217 (1,5); 7,3934 (3,9); 7,3685 (4,5); 7,3597 (5,2); 7,3531 (4,4); 7,3305 (1,3); 7,3244 (1,3); 7,0869 (2,5); 7,0621 (4,4); 7,0372 (2,0); 6,9973 (4,4); 6,9693 (3,9); 4,8264 (16,0); 3,3966 (28,6); 3,3251 (5,6); 2,5016 (46,0); -0,0001 (37,6)

I.3-43:  $^1\text{H-NMR}$ (300,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 13,0909 (1,3); 7,7766 (0,5); 7,7551 (1,0); 7,7486 (0,8); 7,7335 (0,7); 7,7264 (2,0); 7,7193 (0,8); 7,7042 (0,9); 7,6977 (1,2); 7,6763 (0,6); 7,5365 (0,3); 7,5241 (0,6); 7,5195 (0,8); 7,5075 (1,7); 7,4914 (2,0); 7,4791 (2,0); 7,4664 (1,3); 7,4460 (16,0); 7,4311 (11,3); 7,4034 (4,8); 7,3757 (2,3); 4,8624 (12,7); 3,3217 (0,9); 2,5144 (5,6); 2,5085 (10,6); 2,5026 (13,6); 2,4966 (9,2); 2,0743 (1,8); -0,0002 (1,7)

I.40-38:  $^1\text{H-NMR}$ (300,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,6932 (1,1); 7,6851 (0,8); 7,6647 (2,4); 7,6440 (1,8); 7,6367 (1,6); 7,6157 (1,0); 7,4455 (0,7); 7,4376 (0,8); 7,4079 (1,2); 7,3788 (2,7); 7,3503 (3,5); 7,3221 (1,6); 7,2886 (0,8); 7,2808 (0,7); 7,2603 (1,3); 7,2531 (1,2); 7,2324 (0,7); 7,2244 (0,6); 4,9983 (8,5); 3,7105 (16,0); 3,3399 (13,2); 3,3167 (2,0); 2,5050 (9,1); 2,0786 (0,5)

I.40-48:  $^1\text{H-NMR}$ (400,0 MHz, CDCl<sub>3</sub>):

$\delta$ = 7,5714 (0,6); 7,5558 (0,6); 7,5502 (0,8); 7,5345 (0,8); 7,5297 (0,6); 7,5140 (0,6); 7,4528 (0,6); 7,4500 (0,6); 7,4392 (0,6); 7,4365 (0,6); 7,4307 (0,7); 7,4280 (0,7); 7,4171 (0,7); 7,4144 (0,7); 7,2624 (5,3); 7,1791 (1,1); 7,1722 (1,3); 7,1590 (1,2); 7,1521 (1,3); 7,0838 (0,8); 7,0769 (0,7); 7,0649 (0,9); 7,0618 (0,8); 7,0580 (0,8); 7,0548 (0,7); 7,0429 (0,7); 7,0359 (0,6); 6,9342 (0,8); 6,9307 (0,6); 6,9281 (0,8); 6,7757 (0,6); 6,7696 (0,6); 6,7540 (0,6); 6,7502 (0,7); 6,7481 (0,7); 6,7443 (0,6); 6,7288 (0,6); 6,7226 (0,6); 5,3002 (3,8); 4,9376 (8,7); 3,8050 (16,0); 1,5764 (2,8); -0,0002 (6,9)

I.40-49:  $^1\text{H-NMR}$ (400,0 MHz, CDCl<sub>3</sub>):

$\delta$ = 7,6163 (0,5); 7,6006 (0,6); 7,5951 (0,8); 7,5796 (0,8); 7,5745 (0,6); 7,5589

(0,6); 7,4006 (0,9); 7,3798 (1,4); 7,3597 (1,2); 7,2647 (3,2); 7,2288 (0,8); 7,2256 (0,9); 7,2232 (0,9); 7,2202 (0,9); 7,2073 (0,6); 7,2042 (0,7); 7,2018 (0,7); 7,1988 (0,7); 7,1548 (1,3); 7,1494 (1,1); 7,1309 (1,3); 7,1254 (1,1); 6,9701 (0,8); 6,9670 (0,6); 6,9640 (0,7); 6,7952 (0,6); 6,7891 (0,5); 6,7735 (0,6); 6,7697 (0,7); 6,7677 (0,6); 6,7638 (0,6); 6,7482 (0,6); 6,7421 (0,5); 5,3001 (0,8); 4,9369 (8,7); 3,8098 (16,0); 1,6166 (1,5); -0,0002 (3,2)

I.40-7:  $^1\text{H-NMR}$ (400,0 MHz, CDCl<sub>3</sub>):

$\delta$ = 7,6207 (0,6); 7,6050 (0,6); 7,5993 (0,8); 7,5836 (0,8); 7,5792 (0,7); 7,5636 (0,6); 7,3381 (3,1); 7,3327 (1,2); 7,3213 (1,3); 7,3158 (4,7); 7,3088 (0,6); 7,2600 (33,0); 7,2240 (0,6); 7,2170 (4,6); 7,2115 (1,3); 7,2001 (1,1); 7,1948 (3,0); 7,0053 (0,5); 7,0030 (0,8); 6,9994 (0,6); 6,9967 (0,9); 6,8218 (0,6); 6,8157 (0,6); 6,8002 (0,7); 6,7969 (0,7); 6,7941 (0,7); 6,7909 (0,6); 6,7754 (0,6); 6,7693 (0,6); 4,9441 (8,9); 3,8124 (16,0); 2,0432 (1,3); 1,5456 (2,5); 1,2763 (0,6); 1,2584 (1,0); 0,8818 (0,9); 0,0079 (0,6); -0,0002 (19,0); -0,0085 (0,7)

I.41-49:  $^1\text{H-NMR}$ (400,0 MHz, CDCl<sub>3</sub>):

$\delta$ = 7,5688 (0,9); 7,5532 (1,1); 7,5476 (1,4); 7,5319 (1,4); 7,5271 (1,1); 7,5115 (1,0); 7,4512 (1,1); 7,4484 (1,1); 7,4376 (1,1); 7,4348 (1,1); 7,4291 (1,2); 7,4263 (1,2); 7,4155 (1,2); 7,4128 (1,2); 7,2613 (18,3); 7,1769 (2,0); 7,1700 (2,2); 7,1568 (2,0); 7,1500 (2,2); 7,0836 (1,4); 7,0766 (1,2); 7,0647 (1,6); 7,0615 (1,4); 7,0578 (1,4); 7,0546 (1,2); 7,0426 (1,3); 7,0357 (1,1); 6,9546 (0,7); 6,9521 (0,7); 6,9485 (0,8); 6,9461 (0,8); 6,9350 (0,8); 6,9327 (1,3); 6,9292 (1,1); 6,9265 (1,4); 6,9133 (0,6); 6,9108 (0,7); 6,9071 (0,7); 6,9048 (0,6); 6,7746 (1,0); 6,7685 (1,0); 6,7529 (1,2); 6,7492 (1,3); 6,7470 (1,2); 6,7432 (1,1); 6,7277 (1,0); 6,7215 (1,0); 5,3001 (3,9); 4,9161 (15,8); 4,2968 (2,1); 4,2790 (6,3); 4,2611 (6,4); 4,2433 (2,1); 1,5558 (6,2); 1,3083 (7,8); 1,2905 (16,0); 1,2726 (7,7); 0,0694 (4,2); 0,0080 (0,9); -0,0002 (24,9); -0,0084 (1,0)

I.42-43:  $^1\text{H-NMR}$ (300,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,7129 (1,2); 7,6979 (2,8); 7,6915 (3,1); 7,6834 (2,8); 7,6767 (3,8); 7,6697 (6,8); 7,6629 (5,9); 7,6549 (3,1); 7,6484 (6,0); 7,6415 (5,7); 7,6342 (3,7); 7,6202 (3,1); 7,6131 (1,7); 7,4433 (2,9); 7,4351 (3,1); 7,4122 (3,6); 7,4048 (4,6); 7,3994 (3,9); 7,3762

(10,6); 7,3686 (4,3); 7,3478 (13,5); 7,3199 (6,4); 7,2899 (2,7); 7,2833 (2,5); 7,2625 (4,8); 7,2548 (4,4); 7,2335 (2,4); 7,2271 (2,1); 4,8706 (16,0); 3,4352 (0,4); 3,3934 (0,4); 3,3702 (0,4); 3,3464 (0,4); 3,2609 (0,3); 2,5203 (7,8); 2,5145 (15,3); 2,5086 (20,1); 2,5027 (14,0); 2,0807 (12,2); -0,0001 (1,5)

I.42-48:  $^1\text{H-NMR}$ (400,0 MHz, DMSO\_5mm):

$\delta$ = 7,7634 (2,3); 7,7494 (2,5); 7,7412 (2,6); 7,7273 (2,4); 7,6931 (2,8); 7,6862 (2,8); 7,6718 (2,9); 7,6649 (2,7); 7,6115 (1,2); 7,5949 (1,7); 7,5903 (2,4); 7,5741 (2,5); 7,5696 (1,7); 7,5529 (1,2); 7,4128 (1,8); 7,4053 (2,7); 7,3983 (2,0); 7,3921 (2,9); 7,3835 (3,2); 7,3780 (2,7); 7,3753 (2,7); 7,3713 (3,0); 7,3635 (1,6); 7,3548 (1,4); 7,3488 (1,4); 7,2322 (1,4); 7,2270 (1,3); 7,2113 (2,5); 7,2059 (2,3); 7,1900 (1,2); 7,1847 (1,1); 4,8464 (16,0); 3,3428 (12,8); 2,5082 (13,6); 2,5041 (17,4); 2,5000 (13,1); 1,9902 (0,7); -0,0002 (3,7)

I.42-49:  $^1\text{H-NMR}$ (400,0 MHz, CDCl3):

$\delta$ = 7,6227 (1,0); 7,6071 (1,2); 7,6015 (1,6); 7,5860 (1,6); 7,5811 (1,2); 7,5654 (1,1); 7,4081 (1,8); 7,3872 (3,0); 7,3672 (2,3); 7,2617 (8,7); 7,2304 (1,7); 7,2273 (1,8); 7,2249 (1,9); 7,2221 (1,8); 7,2090 (1,3); 7,2059 (1,4); 7,2035 (1,6); 7,2006 (1,5); 7,1558 (2,6); 7,1503 (2,2); 7,1319 (2,6); 7,1264 (2,3); 6,9898 (0,8); 6,9875 (0,8); 6,9835 (0,8); 6,9816 (0,8); 6,9680 (1,5); 6,9644 (1,2); 6,9619 (1,6); 6,9485 (0,8); 6,9462 (0,8); 6,9422 (0,8); 6,7967 (1,2); 6,7907 (1,1); 6,7751 (1,3); 6,7712 (1,5); 6,7694 (1,4); 6,7654 (1,2); 6,7499 (1,2); 6,7438 (1,1); 4,9739 (16,0); -0,0002 (11,3)

I.42-7:  $^1\text{H-NMR}$ (400,0 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,7376 (1,1); 7,7214 (1,4); 7,7164 (2,2); 7,7003 (2,2); 7,6953 (1,5); 7,6791 (1,2); 7,5392 (0,8); 7,5317 (8,0); 7,5264 (2,8); 7,5150 (2,9); 7,5096 (10,2); 7,5022 (1,2); 7,4139 (1,2); 7,4077 (1,2); 7,3904 (1,5); 7,3874 (1,7); 7,3844 (1,7); 7,3816 (1,6); 7,3642 (1,3); 7,3577 (2,3); 7,3500 (10,1); 7,3446 (3,0); 7,3332 (2,6); 7,3279 (7,8); 7,3203 (0,9); 7,3041 (1,0); 7,3024 (1,1); 7,2975 (1,0); 7,2819 (2,0); 7,2760 (1,9); 7,2617 (1,0); 7,2599 (1,0); 7,2550 (0,9); 4,8718 (16,0); 3,3328 (1,9); 2,5223 (0,5); 2,5136 (6,3); 2,5092 (13,2); 2,5046 (18,0); 2,5001 (12,9); 2,4956 (6,1); 1,3584 (3,4); -0,0002 (2,0)

I.43-2:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,7527 (2,9); 7,7479 (3,0); 7,5974 (1,7); 7,5765 (3,6); 7,5449 (3,5); 7,5404 (3,0); 7,5247 (3,5); 7,5209 (2,5); 7,5124 (1,3); 7,5062 (1,5); 7,5023 (1,2); 7,4942 (0,7); 7,3887 (0,9); 7,3650 (1,3); 7,3431 (0,7); 7,3401 (0,7); 7,3214 (1,0); 7,3005 (1,6); 7,2829 (0,7); 4,9858 (8,4); 3,7139 (16,0); 3,3281 (11,6); 2,5085 (4,6); 2,5043 (5,9); 2,5000 (4,4); 0,0010 (2,5)

I.43-32:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,8486 (2,9); 7,8430 (3,0); 7,6726 (1,8); 7,6513 (2,8); 7,5853 (2,4); 7,5796 (2,2); 7,5719 (0,5); 7,5639 (1,9); 7,5583 (1,6); 7,5533 (0,7); 7,5465 (0,9); 7,5418 (1,2); 7,5373 (0,8); 7,5328 (0,6); 7,5279 (0,7); 7,5219 (1,3); 7,5188 (1,1); 7,5040 (0,8); 7,4998 (0,6); 7,3144 (1,0); 7,3123 (1,2); 7,2954 (2,1); 7,2764 (2,0); 7,2745 (1,7); 7,2523 (0,8); 4,9763 (7,8); 3,7080 (16,0); 3,3301 (7,8); 2,5120 (3,4); 2,5078 (7,0); 2,5034 (9,4); 2,4989 (6,9); 0,0006 (6,1)

I.43-20:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,7219 (2,9); 7,7171 (2,9); 7,4647 (1,5); 7,4609 (2,5); 7,4569 (1,4); 7,4440 (2,0); 7,4407 (4,1); 7,4359 (3,2); 7,4165 (1,7); 7,4077 (3,9); 7,3967 (1,1); 7,3925 (1,0); 7,3868 (1,7); 7,0590 (3,2); 7,0389 (2,7); 7,0232 (0,9); 7,0208 (0,7); 4,9607 (1,1); 4,9463 (8,1); 3,7231 (1,7); 3,7084 (16,0); 3,5226 (14,5); 3,3234 (11,0); 2,5067 (12,1); 2,5023 (16,0); 2,4980 (11,7); 0,0086 (0,5); 0,0008 (9,4); -0,0073 (0,4)

I.43-32:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,8366 (2,3); 7,8311 (2,5); 7,7672 (2,3); 7,7627 (2,4); 7,6727 (2,3); 7,6513 (3,6); 7,5783 (1,9); 7,5726 (1,9); 7,5681 (1,5); 7,5569 (1,4); 7,5509 (1,7); 7,5473 (4,2); 7,5315 (2,4); 7,5267 (2,3); 7,5105 (0,8); 7,5058 (0,8); 4,9752 (7,7); 3,7077 (16,0); 3,3232 (4,5); 2,5136 (1,8); 2,5092 (3,8); 2,5047 (5,3); 2,5002 (3,9); 2,4958 (2,0); 0,0008 (3,5)

I.43-38:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,7680 (2,8); 7,7632 (3,0); 7,6521 (0,6); 7,6373 (0,6); 7,6302 (1,1); 7,6192 (2,0); 7,6160 (1,4); 7,6083 (0,7); 7,5984 (3,6); 7,5611 (2,2); 7,5561 (2,1); 7,5402 (1,1);

7,5352 (1,1); 7,5154 (0,6); 7,5086 (0,6); 7,4927 (0,7); 7,4885 (0,9); 7,4824 (0,7); 7,4665 (0,6); 7,4597 (0,6); 7,2480 (0,4); 7,2447 (0,5); 7,2411 (0,5); 7,2385 (0,4); 7,2244 (0,8); 7,2221 (0,8); 7,2189 (0,8); 7,2053 (0,4); 7,2021 (0,4); 7,1985 (0,4); 4,9832 (8,0); 3,7130 (16,0); 3,6740 (0,3); 3,3255 (11,9); 2,5131 (2,1); 2,5089 (4,4); 2,5044 (6,0); 2,5000 (4,3); 2,0773 (1,6); 0,0009 (3,6)

I.43-49:  $^1\text{H-NMR}$ (400,6 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ):

$\delta$ = 7,4027 (1,4); 7,3827 (4,0); 7,3784 (3,0); 7,3674 (1,0); 7,3476 (1,2); 7,3462 (1,4); 7,3266 (1,3); 7,3155 (2,2); 7,3103 (1,8); 7,2949 (1,3); 7,2898 (1,3); 7,2627 (4,9); 7,2004 (0,8); 7,1974 (0,9); 7,1949 (0,9); 7,1919 (0,9); 7,1790 (0,6); 7,1759 (0,6); 7,1735 (0,7); 7,1705 (0,7); 7,1284 (1,2); 7,1230 (1,0); 7,1044 (1,2); 7,0990 (1,1); 4,9431 (8,3); 3,8092 (16,0); -0,0002 (6,5)

I.4-38:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz,  $d_6\text{-DMSO}$ ):

$\delta$ = 7,6669 (0,5); 7,6521 (0,6); 7,6449 (1,0); 7,6302 (1,0); 7,6230 (0,6); 7,6082 (0,6); 7,5965 (0,4); 7,5829 (1,2); 7,5788 (1,8); 7,5636 (2,2); 7,5604 (2,0); 7,5445 (1,4); 7,5331 (0,6); 7,5262 (0,6); 7,5104 (0,7); 7,5064 (0,8); 7,5041 (0,8); 7,5001 (0,7); 7,4842 (0,6); 7,4774 (0,6); 7,3371 (0,9); 7,3349 (1,1); 7,3164 (1,6); 7,2996 (1,4); 7,2973 (1,2); 7,2798 (0,8); 7,2761 (1,0); 7,2517 (1,0); 7,2483 (0,6); 7,2446 (0,5); 7,2415 (0,4); 7,2276 (0,8); 7,2253 (0,8); 7,2220 (0,7); 7,2086 (0,4); 7,2052 (0,4); 7,2017 (0,4); 7,1988 (0,3); 4,9850 (8,0); 3,7148 (16,0); 3,3307 (5,1); 2,5124 (2,5); 2,5082 (5,3); 2,5037 (7,2); 2,4992 (5,2); 2,4949 (2,5); 2,0777 (2,2); 0,0008 (5,0)

I.44-2:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz,  $d_6\text{-DMSO}$ ):

$\delta$ = 8,3230 (0,5); 7,7562 (5,2); 7,7515 (5,4); 7,5966 (2,8); 7,5757 (6,6); 7,5487 (4,5); 7,5438 (4,9); 7,5352 (1,9); 7,5277 (3,1); 7,5227 (3,9); 7,5161 (3,6); 7,5074 (1,7); 7,5011 (1,9); 7,4968 (2,1); 7,3933 (1,6); 7,3915 (1,6); 7,3811 (0,4); 7,3680 (2,3); 7,3458 (1,2); 7,3428 (1,1); 7,3220 (1,8); 7,3011 (2,9); 7,2836 (1,3); 4,9633 (14,9); 4,2071 (2,3); 4,1894 (7,1); 4,1716 (7,2); 4,1538 (2,4); 3,3372 (6,4); 2,5096 (10,8); 2,5053 (14,4); 2,5011 (10,6); 2,0796 (1,2); 1,2185 (7,8); 1,2007 (16,0); 1,1830 (7,7); 0,0008 (2,3)

I.44-20:  $^1\text{H}$ -NMR(300,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,9395 (0,4); 7,9113 (0,5); 7,8484 (0,5); 7,8419 (0,5); 7,7273 (3,1); 7,7211 (3,3); 7,4737 (1,1); 7,4670 (2,0); 7,4609 (2,0); 7,4463 (3,4); 7,4396 (4,2); 7,4217 (2,1); 7,4127 (4,9); 7,3952 (1,2); 7,3848 (1,8); 7,0687 (2,9); 7,0437 (2,4); 7,0214 (1,1); 4,9423 (1,9); 4,9271 (9,1); 4,2152 (1,4); 4,2025 (0,9); 4,1916 (4,3); 4,1789 (1,0); 4,1678 (4,4); 4,1555 (0,4); 4,1442 (1,4); 3,5273 (16,0); 3,3346 (63,0); 3,3117 (1,0); 2,5132 (14,9); 2,5078 (18,9); 2,5025 (13,3); 1,2516 (0,8); 1,2300 (5,6); 1,2066 (9,9); 1,1830 (4,4); 0,0054 (10,8)

I.4-43:  $^1\text{H}$ -NMR(300,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,6764 (0,6); 7,6683 (0,5); 7,6549 (0,4); 7,6476 (1,2); 7,6404 (0,5); 7,6276 (0,6); 7,6236 (0,8); 7,6190 (0,8); 7,6111 (0,4); 7,6048 (0,8); 7,5969 (1,8); 7,5864 (0,6); 7,5799 (0,8); 7,5726 (2,0); 7,5594 (0,4); 7,5532 (0,8); 7,5475 (0,9); 7,5429 (0,5); 7,3681 (1,4); 7,3649 (2,1); 7,3607 (1,9); 7,3408 (2,0); 7,3383 (2,0); 7,3325 (2,9); 7,3176 (1,6); 7,3046 (1,4); 7,3001 (1,0); 7,2901 (0,9); 7,2827 (1,0); 7,2547 (0,7); 5,0031 (7,6); 3,7133 (16,0); 3,3428 (5,4); 3,3194 (0,8); 2,5179 (1,5); 2,5120 (3,0); 2,5060 (4,0); 2,5001 (2,8); 2,4943 (1,3); -0,0002 (0,3)

I.44-32:  $^1\text{H}$ -NMR(400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 8,3227 (0,5); 7,8427 (5,1); 7,8371 (5,2); 7,7728 (4,8); 7,7684 (4,9); 7,6708 (4,0); 7,6495 (6,3); 7,5828 (3,6); 7,5771 (3,4); 7,5666 (2,2); 7,5614 (2,6); 7,5557 (2,5); 7,5459 (7,4); 7,5343 (4,8); 7,5296 (4,4); 7,5133 (1,2); 7,5087 (1,3); 4,9531 (13,6); 4,1990 (2,2); 4,1813 (7,0); 4,1635 (7,0); 4,1457 (2,3); 2,5137 (7,6); 2,5096 (15,1); 2,5053 (20,1); 2,5009 (14,3); 2,4969 (6,8); 1,2186 (7,7); 1,2008 (16,0); 1,1831 (7,5); 0,0007 (2,7)

I.44-38:  $^1\text{H}$ -NMR(300,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,7745 (5,3); 7,7684 (5,5); 7,6575 (1,0); 7,6381 (1,2); 7,6251 (3,4); 7,6088 (2,4); 7,5967 (7,8); 7,5793 (1,6); 7,5695 (4,5); 7,5631 (4,1); 7,5417 (1,7); 7,5347 (2,1); 7,5226 (1,2); 7,4949 (1,8); 7,4879 (1,5); 7,4664 (1,2); 7,4576 (1,2); 7,2561 (1,0); 7,2263 (1,7); 7,1993 (0,9); 4,9617 (14,9); 4,2178 (2,2); 4,1942 (7,2); 4,1704 (7,3); 4,1468 (2,4); 3,3354 (144,8); 3,3127 (1,4); 2,5134 (24,5); 2,5079 (31,2); 2,5026 (22,1); 1,2274 (7,9);

1,2037 (16,0); 1,1801 (7,5); 0,0050 (13,8)

I.44-49:  $^1\text{H-NMR}$ (300,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,7824 (5,3); 7,7763 (5,4); 7,7072 (2,5); 7,7001 (2,6); 7,6732 (2,5); 7,6660 (2,6); 7,6299 (2,5); 7,6021 (7,0); 7,5915 (2,3); 7,5774 (4,8); 7,5709 (4,6); 7,5636 (4,4); 7,5495 (1,8); 7,5430 (2,0); 7,5360 (3,0); 7,4426 (2,5); 7,4388 (2,4); 7,4140 (1,7); 4,9664 (14,2); 4,2180 (2,2); 4,1943 (7,1); 4,1707 (7,2); 4,1471 (2,4); 3,3343 (99,1); 2,5135 (29,5); 2,5078 (37,5); 2,5022 (26,3); 1,2274 (7,8); 1,2037 (16,0); 1,1801 (7,5); 0,0053 (22,0); -0,0056 (0,9)

I.4-49:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,7125 (1,2); 7,7070 (1,3); 7,6872 (1,3); 7,6816 (1,3); 7,6114 (1,2); 7,6057 (0,6); 7,5902 (3,2); 7,5701 (2,9); 7,5541 (1,5); 7,4418 (1,0); 7,4391 (1,1); 7,4362 (1,1); 7,4203 (0,8); 7,4176 (0,9); 7,4147 (0,8); 7,4126 (0,8); 7,3459 (0,9); 7,3436 (1,1); 7,3267 (1,5); 7,3250 (1,6); 7,3134 (0,9); 7,3082 (1,0); 7,3057 (1,0); 7,2917 (0,8); 7,2880 (1,0); 7,2855 (0,8); 7,2655 (0,7); 4,9886 (7,7); 3,7145 (16,0); 3,3311 (5,5); 2,5122 (3,6); 2,5079 (7,7); 2,5034 (10,6); 2,4989 (7,7); 2,4946 (3,6); 2,0776 (1,1); 0,0007 (8,4)

I.45-2:  $^1\text{H-NMR}$ (300,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,7615 (1,8); 7,7552 (1,9); 7,6111 (0,9); 7,5833 (2,4); 7,5579 (2,2); 7,5512 (1,6); 7,5299 (1,7); 7,5175 (0,7); 7,5086 (0,9); 7,4931 (0,4); 7,4023 (0,6); 7,3706 (0,8); 7,3365 (1,0); 7,3078 (1,0); 7,2845 (0,4); 4,8576 (4,4); 3,3378 (6,5); 2,5179 (12,5); 2,5122 (16,0); 2,5066 (11,1); 0,0101 (5,1)

I.45-20:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,7114 (3,3); 7,7067 (3,4); 7,4601 (2,5); 7,4397 (4,1); 7,4347 (3,0); 7,4099 (5,2); 7,3889 (2,5); 7,0545 (2,4); 7,0392 (2,2); 7,0334 (2,1); 7,0218 (1,0); 4,8052 (2,8); 3,5201 (16,0); 3,3127 (5,5); 2,5102 (11,3); 2,5060 (23,0); 2,5016 (31,0); 2,4971 (22,2); 2,0735 (0,7); 0,0089 (1,1); 0,0009 (25,5); -0,0073 (0,9)

I.45-32:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 13,1051 (0,4); 7,8315 (6,7); 7,8259 (7,0); 7,7641 (6,4); 7,7594 (6,6); 7,6728 (5,2); 7,6514 (8,0); 7,5776 (4,6); 7,5718 (4,8); 7,5688 (3,8); 7,5562 (3,2); 7,5478 (9,6); 7,5304 (5,6); 7,5256 (5,2); 7,5094 (1,8); 7,5046 (1,9); 4,8472 (16,0); 3,3259 (1,7); 2,8923 (0,6); 2,7333 (0,5); 2,5129 (5,4); 2,5086 (11,4); 2,5042 (15,6); 2,4998 (11,3); 2,4955 (5,5); 0,0089 (0,4); 0,0008 (13,6); -0,0073 (0,5)

I.45-38:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,7609 (5,6); 7,7561 (5,9); 7,6475 (1,1); 7,6326 (1,4); 7,6256 (2,4); 7,6166 (4,1); 7,6109 (2,6); 7,6036 (1,7); 7,5958 (7,6); 7,5892 (1,5); 7,5584 (4,5); 7,5535 (4,3); 7,5376 (2,3); 7,5326 (2,3); 7,5073 (1,2); 7,5005 (1,3); 7,4844 (1,5); 7,4793 (1,8); 7,4744 (1,6); 7,4584 (1,2); 7,4516 (1,2); 7,2441 (0,9); 7,2408 (1,0); 7,2373 (1,0); 7,2206 (1,8); 7,2013 (0,8); 7,1981 (0,9); 7,1945 (0,8); 4,8506 (16,0); 3,3137 (9,2); 2,8917 (0,4); 2,7324 (0,4); 2,5111 (10,6); 2,5069 (22,2); 2,5024 (30,4); 2,4980 (21,9); 2,4940 (10,5); 2,0743 (0,9); 0,0091 (0,8); 0,0011 (21,6); -0,0070 (0,8)

I.46-2:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,6056 (1,1); 7,5848 (2,7); 7,5773 (2,9); 7,5649 (2,1); 7,5574 (3,4); 7,5459 (1,2); 7,5397 (1,4); 7,5359 (1,1); 7,5275 (0,6); 7,4358 (1,6); 7,4309 (1,6); 7,4257 (1,0); 7,4236 (1,0); 7,4150 (1,4); 7,4099 (1,4); 7,3997 (1,3); 7,3776 (0,7); 7,3747 (0,6); 7,3465 (1,0); 7,3258 (1,6); 7,3080 (0,7); 4,9907 (8,4); 3,7157 (16,0); 3,3298 (2,7); 2,5094 (4,9); 2,5051 (6,4); 2,5008 (4,6); 2,0784 (4,2); 0,0007 (1,1)

I.46-20:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,5515 (1,4); 7,5468 (1,4); 7,5265 (1,4); 7,5218 (1,4); 7,4620 (3,2); 7,4429 (4,7); 7,4203 (2,7); 7,4005 (1,6); 7,3530 (1,8); 7,3483 (1,7); 7,3321 (1,1); 7,3273 (1,0); 7,0945 (1,8); 7,0759 (2,0); 7,0601 (1,8); 7,0411 (0,9); 4,9540 (8,3); 3,7104 (16,0); 3,4940 (14,7); 3,3301 (3,9); 2,5081 (5,3); 2,5037 (6,8); 2,4994 (4,9); 0,0007 (0,8)

I.46-32:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,8650 (2,9); 7,8594 (3,1); 7,6923 (2,0); 7,6709 (3,0); 7,5995 (2,2); 7,5936 (3,2); 7,5884 (1,5); 7,5781 (1,5); 7,5722 (1,7); 7,5685 (2,1); 7,5629 (1,5); 7,5489 (2,1);

7,5290 (1,4); 7,4286 (1,5); 7,4238 (1,4); 7,4075 (1,1); 7,4028 (1,1); 4,9760 (7,6); 3,7049 (16,0); 3,3249 (7,8); 2,5109 (3,9); 2,5065 (8,0); 2,5020 (10,8); 2,4976 (7,8); 2,4933 (3,6); 2,0756 (0,4); -0,0015 (2,1)

I.46-38:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,6870 (0,6); 7,6721 (0,8); 7,6650 (1,3); 7,6503 (1,2); 7,6433 (0,8); 7,6283 (0,7); 7,6184 (1,3); 7,5980 (3,8); 7,5778 (1,8); 7,5728 (1,8); 7,5681 (1,8); 7,5548 (0,8); 7,5481 (0,8); 7,5267 (1,2); 7,5059 (0,7); 7,4991 (0,7); 7,4484 (1,8); 7,4440 (1,7); 7,4276 (1,4); 7,4230 (1,4); 7,2632 (0,6); 7,2598 (0,6); 7,2417 (1,1); 7,2208 (0,6); 4,9850 (8,6); 3,7134 (16,0); 3,6708 (0,4); 3,3273 (9,8); 2,5080 (8,6); 2,5039 (11,1); 2,4999 (8,8); 2,0766 (0,5); 0,0012 (5,9)

I.46-38:  $^1\text{H-NMR}$ (400,0 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,6629 (0,8); 7,6482 (0,8); 7,6410 (0,5); 7,6167 (1,0); 7,5961 (1,8); 7,5925 (1,3); 7,5875 (1,2); 7,5763 (1,3); 7,5669 (1,1); 7,5620 (1,2); 7,5259 (0,5); 7,5218 (0,6); 7,5192 (0,6); 7,5151 (0,5); 7,4464 (1,1); 7,4450 (1,1); 7,4406 (1,0); 7,4254 (0,9); 7,4241 (0,9); 7,4200 (0,8); 7,2402 (0,6); 7,2379 (0,5); 7,2344 (0,5); 4,9836 (6,6); 3,7131 (16,0); 3,3334 (7,1); 2,5204 (0,5); 2,5117 (5,4); 2,5072 (11,2); 2,5026 (15,3); 2,4980 (10,4); 2,4934 (4,6)

I.46-38:  $^1\text{H-NMR}$ (599,6 MHz, CDCl<sub>3</sub>):

$\delta$ = 7,5459 (3,7); 7,5324 (5,9); 7,5194 (4,0); 7,4377 (1,7); 7,4281 (1,9); 7,4235 (3,0); 7,4139 (3,0); 7,4093 (1,9); 7,3997 (1,6); 7,2630 (10,3); 7,2288 (4,1); 7,2262 (4,2); 7,2148 (3,7); 7,2123 (3,8); 7,0538 (4,3); 7,0507 (4,1); 7,0375 (4,3); 7,0344 (4,0); 6,9685 (1,6); 6,9664 (1,6); 6,9558 (2,7); 6,9537 (2,9); 6,9516 (2,8); 6,9432 (1,3); 6,9409 (1,4); 6,9388 (1,4); 6,8848 (2,0); 6,8804 (1,8); 6,8708 (2,5); 6,8683 (2,9); 6,8642 (2,2); 6,8545 (2,0); 6,8501 (1,7); 4,9368 (30,5); 3,8098 (50,0); 1,5930 (25,4); 1,4267 (5,0); -0,0001 (13,2)

I.46-49:  $^1\text{H-NMR}$ (400,6 MHz, CDCl<sub>3</sub>):

$\delta$ = 7,5589 (1,1); 7,5398 (1,2); 7,5382 (1,4); 7,5192 (1,2); 7,3987 (0,9); 7,3776

(1,3); 7,3578 (1,1); 7,2627 (6,0); 7,2412 (0,9); 7,2395 (0,9); 7,2361 (1,0); 7,2346 (1,0); 7,2320 (1,0); 7,2289 (0,9); 7,2265 (1,0); 7,2234 (1,0); 7,2203 (0,8); 7,2186 (0,9); 7,2153 (0,9); 7,2138 (0,9); 7,2106 (0,7); 7,2075 (0,7); 7,2050 (0,7); 7,2020 (0,7); 7,1603 (1,2); 7,1549 (1,0); 7,1364 (1,2); 7,1310 (1,1); 7,0684 (1,2); 7,0635 (1,1); 7,0440 (1,2); 7,0391 (1,1); 4,9356 (8,3); 3,8098 (16,0); 1,5837 (4,7); -0,0002 (7,2)

I.47-2:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,5987 (2,2); 7,5856 (3,2); 7,5790 (6,0); 7,5705 (2,2); 7,5582 (6,4); 7,5510 (3,7); 7,5468 (4,3); 7,5272 (2,5); 7,4367 (3,1); 7,4322 (3,2); 7,4266 (2,1); 7,4247 (2,1); 7,4155 (2,6); 7,4114 (2,7); 7,4010 (2,5); 7,3789 (1,2); 7,3760 (1,1); 7,3449 (1,9); 7,3253 (3,0); 7,3063 (1,3); 4,9641 (14,8); 4,2086 (2,4); 4,1909 (7,2); 4,1731 (7,3); 4,1553 (2,4); 3,3331 (1,7); 3,3091 (2,8); 2,5084 (16,0); 2,5044 (21,0); 2,5005 (16,2); 2,0788 (1,6); 1,2168 (7,9); 1,1991 (16,0); 1,1813 (7,6); 0,0013 (11,1)

I.47-20:  $^1\text{H-NMR}$ (300,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,5646 (1,0); 7,5583 (1,0); 7,5310 (1,0); 7,5250 (1,0); 7,4742 (0,7); 7,4655 (1,1); 7,4602 (1,1); 7,4496 (1,8); 7,4400 (1,3); 7,4347 (1,3); 7,4209 (1,8); 7,3956 (1,3); 7,3636 (1,5); 7,3574 (1,3); 7,3357 (0,7); 7,3294 (0,6); 7,1052 (1,4); 7,0930 (1,0); 7,0752 (1,2); 7,0678 (1,3); 7,0423 (0,6); 4,9343 (5,9); 4,2211 (0,9); 4,1975 (2,8); 4,1738 (2,8); 4,1502 (0,9); 3,5003 (10,5); 3,3302 (16,0); 2,5164 (10,5); 2,5108 (13,6); 2,5053 (9,6); 1,2326 (3,1); 1,2089 (6,2); 1,1853 (3,0); 0,0203 (0,4); 0,0094 (10,0); -0,0013 (0,4)

I.47-32:  $^1\text{H-NMR}$ (300,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,8747 (1,8); 7,8673 (1,9); 7,7003 (1,1); 7,6718 (2,1); 7,6140 (1,4); 7,6069 (2,0); 7,6015 (1,1); 7,5855 (0,8); 7,5782 (1,5); 7,5673 (1,0); 7,5517 (1,4); 7,5252 (1,0); 7,4410 (1,1); 7,4347 (1,0); 7,4129 (0,7); 7,4067 (0,7); 4,9603 (4,9); 4,2170 (0,8); 4,1933 (2,5); 4,1696 (2,5); 4,1460 (0,8); 3,3305 (16,0); 2,5164 (6,8); 2,5107 (8,9); 2,5050 (6,2); 1,2289 (2,7); 1,2053 (5,6); 1,1816 (2,6); 0,0084 (6,2)

I.47-38:  $^1\text{H-NMR}$ (400,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,6613 (0,9); 7,6465 (1,0); 7,6393 (1,8); 7,6246 (1,8); 7,6174 (1,1); 7,6026

(1,0); 7,5942 (1,9); 7,5798 (2,6); 7,5744 (5,5); 7,5540 (4,4); 7,5497 (2,7); 7,5367 (1,0); 7,5299 (1,0); 7,5141 (1,2); 7,5098 (1,4); 7,5035 (1,2); 7,4877 (1,0); 7,4809 (0,9); 7,4303 (2,4); 7,4254 (2,4); 7,4099 (1,8); 7,4045 (1,9); 7,2488 (0,8); 7,2453 (0,8); 7,2418 (0,8); 7,2250 (1,4); 7,2228 (1,4); 7,2061 (0,7); 7,2026 (0,8); 7,1991 (0,7); 4,9412 (13,5); 4,1887 (2,1); 4,1709 (6,8); 4,1532 (6,8); 4,1354 (2,2); 3,3057 (38,2); 2,4939 (6,2); 2,4895 (12,5); 2,4851 (16,8); 2,4806 (11,9); 2,4762 (5,6); 1,1977 (7,6); 1,1799 (16,0); 1,1622 (7,4); -0,0095 (0,5); -0,0176 (12,4); -0,0259 (0,5)

I.47-49:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,7341 (2,2); 7,7287 (2,4); 7,7088 (2,3); 7,7033 (2,3); 7,6277 (3,8); 7,6071 (10,2); 7,5866 (7,0); 7,4584 (4,8); 7,4537 (4,8); 7,4374 (3,6); 7,4327 (3,7); 4,9674 (14,2); 4,2098 (2,3); 4,1921 (7,1); 4,1743 (7,2); 4,1566 (2,3); 3,3292 (2,1); 2,5108 (5,4); 2,5064 (7,3); 2,5020 (5,4); 1,2181 (7,8); 1,2003 (16,0); 1,1826 (7,6); 0,0014 (4,7)

I.48-2:  $^1\text{H-NMR}$ (300,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 13,1472 (0,4); 7,6207 (1,7); 7,5921 (6,2); 7,5655 (6,2); 7,5578 (4,6); 7,5502 (1,9); 7,5381 (1,9); 7,5254 (1,1); 7,4485 (2,7); 7,4413 (3,2); 7,4206 (2,0); 7,4134 (2,4); 7,4051 (2,0); 7,3849 (0,4); 7,3760 (1,0); 7,3715 (0,9); 7,3597 (1,6); 7,3312 (2,4); 7,3079 (1,1); 4,8669 (11,5); 3,3436 (4,1); 2,5177 (12,5); 2,5121 (16,0); 2,5065 (11,3); 0,0090 (4,9)

I.48-20:  $^1\text{H-NMR}$ (300,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,5645 (1,1); 7,5583 (1,1); 7,5310 (1,1); 7,5250 (1,1); 7,4739 (2,4); 7,4560 (1,2); 7,4488 (3,2); 7,4293 (1,9); 7,4039 (1,4); 7,3650 (1,6); 7,3588 (1,4); 7,3372 (0,8); 7,3307 (0,7); 7,1025 (1,6); 7,0942 (1,2); 7,0698 (1,9); 7,0425 (0,7); 4,8205 (5,7); 3,4982 (11,5); 3,3373 (3,9); 2,5176 (12,5); 2,5122 (16,0); 2,5070 (11,3); 0,0102 (3,4)

I.48-38:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 13,1161 (0,4); 7,6852 (1,1); 7,6703 (1,3); 7,6632 (2,3); 7,6484 (2,3); 7,6413 (1,4); 7,6263 (1,4); 7,6215 (2,5); 7,6010 (4,8); 7,5963 (3,5); 7,5913 (3,2); 7,5810 (3,2); 7,5706 (2,9); 7,5658 (3,1); 7,5511 (1,3); 7,5443 (1,3); 7,5284 (1,5); 7,5241 (1,9); 7,5181

(1,6); 7,5022 (1,3); 7,4954 (1,2); 7,4487 (3,2); 7,4438 (3,1); 7,4278 (2,5); 7,4229 (2,5); 7,2658 (0,9); 7,2626 (1,0); 7,2589 (1,0); 7,2424 (1,8); 7,2401 (1,8); 7,2368 (1,8); 7,2232 (0,9); 7,2200 (1,0); 7,2164 (0,9); 4,8591 (16,0); 3,3289 (1,9); 2,8925 (0,5); 2,7335 (0,4); 2,5131 (4,0); 2,5089 (8,4); 2,5045 (11,4); 2,5001 (8,4); 2,4959 (4,2); 2,0769 (1,5); 0,0008 (8,3); -0,0074 (0,4)

I.48-43:  $^1\text{H-NMR}$ (300,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,7186 (0,9); 7,6972 (2,0); 7,6896 (1,8); 7,6756 (1,5); 7,6685 (4,0); 7,6613 (1,8); 7,6471 (5,5); 7,6399 (3,1); 7,6187 (12,1); 7,5925 (6,7); 7,5905 (6,7); 7,5834 (5,5); 7,4745 (5,5); 7,4685 (5,0); 7,4471 (3,9); 7,4403 (3,9); 7,3826 (6,1); 7,3543 (10,4); 7,3265 (4,8); 4,8719 (16,0); 3,4569 (0,5); 3,3710 (0,6); 2,5479 (0,4); 2,5202 (6,8); 2,5145 (13,3); 2,5085 (17,7); 2,5027 (12,5); 2,4972 (5,9); 2,0809 (0,7); 1,2336 (0,4); -0,0001 (1,7)

I.48-48:  $^1\text{H-NMR}$ (400,0 MHz, CDCl<sub>3</sub>):

$\delta$ = 7,5198 (0,6); 7,5101 (2,0); 7,4894 (2,8); 7,4703 (2,3); 7,4606 (1,1); 7,4472 (1,1); 7,4445 (1,2); 7,4385 (1,2); 7,4359 (1,3); 7,4225 (1,2); 7,2610 (100,2); 7,2069 (1,8); 7,2031 (1,8); 7,1836 (3,0); 7,1770 (2,5); 7,1638 (2,1); 7,1570 (2,3); 7,0937 (1,4); 7,0867 (1,2); 7,0748 (1,5); 7,0715 (1,4); 7,0679 (1,3); 7,0646 (1,3); 7,0570 (2,3); 7,0525 (3,3); 7,0457 (1,2); 7,0326 (2,2); 7,0278 (2,1); 6,9970 (0,5); 4,9840 (16,0); 2,1739 (2,4); 1,4320 (0,7); 0,0079 (1,4); -0,0002 (58,0); -0,0085 (1,8)

I.48-49:  $^1\text{H-NMR}$ (300,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,7426 (1,7); 7,7353 (1,7); 7,7086 (1,7); 7,7015 (1,7); 7,6440 (2,6); 7,6166 (6,8); 7,5892 (4,5); 7,4668 (3,7); 7,4615 (3,6); 7,4385 (2,5); 7,4335 (2,6); 4,8641 (9,0); 3,3367 (4,6); 2,5155 (12,8); 2,5102 (16,0); 2,0832 (0,8); 0,0075 (8,5)

I.5-2:  $^1\text{H-NMR}$ (400,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,5668 (0,4); 7,5623 (0,6); 7,5533 (0,6); 7,5485 (1,2); 7,5416 (1,8); 7,5384 (1,9); 7,5349 (1,8); 7,5278 (2,5); 7,5202 (4,1); 7,5054 (4,0); 7,4863 (2,6); 7,3796 (1,3); 7,3770 (1,3); 7,3579 (1,2); 7,3540 (1,8); 7,3508 (1,4); 7,3314 (1,2); 7,3094 (1,5); 7,3071 (1,5); 7,3019 (1,9); 7,2994 (2,0); 7,2904 (2,4); 7,2871 (2,4); 7,2829 (3,0); 7,2808 (2,8);

7,2708 (1,2); 7,2685 (1,2); 7,2615 (2,8); 7,2406 (1,5); 7,2360 (1,7); 7,2148 (1,3); 4,9422 (13,9); 4,1925 (2,1); 4,1747 (6,7); 4,1569 (6,8); 4,1392 (2,2); 3,3077 (75,2); 2,8739 (0,8); 2,7149 (0,7); 2,4941 (7,8); 2,4896 (15,9); 2,4851 (21,4); 2,4806 (15,0); 2,4762 (6,9); 1,2183 (1,0); 1,2117 (0,6); 1,2009 (7,8); 1,1831 (16,0); 1,1654 (7,4); 1,0812 (0,4); -0,0085 (1,0); -0,0166 (26,7); -0,0249 (0,8)

I.5-20:  $^1\text{H}$ -NMR(300,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,5043 (0,6); 7,5004 (0,4); 7,4765 (0,6); 7,4702 (0,4); 7,4583 (0,4); 7,4521 (0,4); 7,4456 (0,5); 7,4399 (0,7); 7,4307 (1,0); 7,4250 (1,1); 7,4161 (1,2); 7,4112 (0,8); 7,4051 (1,1); 7,3998 (1,4); 7,3919 (1,0); 7,3863 (0,5); 7,3759 (0,8); 7,3699 (0,7); 7,3503 (0,6); 7,3448 (0,5); 7,2610 (0,7); 7,2357 (1,3); 7,2295 (0,9); 7,2133 (1,1); 7,2013 (0,6); 7,1886 (0,5); 7,0686 (1,3); 7,0627 (1,0); 7,0382 (1,9); 7,0121 (0,5); 7,0084 (0,4); 4,9189 (4,7); 4,2081 (0,8); 4,1844 (2,4); 4,1608 (2,4); 4,1370 (0,8); 4,0910 (0,7); 4,0673 (0,8); 3,4549 (9,0); 3,3592 (1,4); 3,3253 (16,0); 2,5080 (6,6); 2,5023 (12,1); 2,4964 (15,5); 2,4906 (10,8); 1,2201 (3,0); 1,2036 (1,5); 1,1964 (5,9); 1,1801 (2,1); 1,1727 (2,9); 1,1564 (0,9); -0,0057 (4,7)

I.5-32:  $^1\text{H}$ -NMR(400,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,8513 (5,3); 7,8458 (5,5); 7,6695 (3,4); 7,6481 (5,7); 7,5906 (4,0); 7,5850 (4,2); 7,5693 (3,7); 7,5637 (3,5); 7,5496 (1,8); 7,5443 (1,3); 7,5347 (2,0); 7,5190 (2,8); 7,5009 (1,6); 7,4973 (1,4); 7,3155 (2,4); 7,2980 (4,4); 7,2790 (4,1); 7,2552 (1,7); 5,3292 (0,4); 4,9549 (15,4); 4,2054 (2,3); 4,1876 (7,2); 4,1698 (7,3); 4,1521 (2,4); 3,4042 (0,5); 3,3488 (374,6); 3,2975 (0,5); 2,5115 (16,9); 2,5075 (22,4); 2,5035 (17,0); 2,0800 (1,8); 2,0320 (0,4); 2,0137 (0,7); 1,9943 (0,7); 1,9792 (0,4); 1,2940 (0,4); 1,2389 (3,8); 1,2206 (8,2); 1,2028 (16,0); 1,1851 (7,7); 1,1691 (0,4); 0,8744 (0,4); 0,8579 (0,9); 0,8405 (0,4); 0,0041 (1,3)

I.5-38:  $^1\text{H}$ -NMR(300,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,6719 (1,0); 7,6522 (1,2); 7,6426 (2,1); 7,6229 (2,2); 7,6135 (1,8); 7,5893 (2,5); 7,5833 (3,5); 7,5628 (4,1); 7,5583 (4,1); 7,5440 (2,0); 7,5380 (3,3); 7,5139 (1,6); 7,5086 (1,7); 7,5052 (1,7); 7,5001 (1,4); 7,4789 (1,2); 7,4697 (1,2); 7,3466 (1,9); 7,3436

(2,1); 7,3201 (3,1); 7,3135 (2,2); 7,2963 (1,6); 7,2930 (1,7); 7,2837 (1,8); 7,2779 (2,0); 7,2637 (1,1); 7,2587 (1,2); 7,2492 (2,2); 7,2317 (1,6); 7,2064 (0,8); 7,2017 (0,8); 7,1973 (0,8); 7,1930 (0,7); 4,9630 (13,9); 4,2226 (2,2); 4,1989 (6,9); 4,1752 (7,0); 4,1515 (2,3); 3,3313 (76,8); 2,5194 (9,8); 2,5137 (17,9); 2,5078 (22,8); 2,5019 (16,0); 2,0808 (2,6); 1,2284 (7,8); 1,2047 (16,0); 1,1811 (7,5); 0,0164 (0,9); 0,0055 (15,8); -0,0056 (0,8)

I.5-49:  $^1\text{H-NMR}$ (400,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,7127 (2,3); 7,7072 (2,3); 7,6874 (2,3); 7,6818 (2,2); 7,6117 (0,7); 7,6059 (2,2); 7,5983 (0,9); 7,5935 (1,7); 7,5878 (3,9); 7,5850 (4,6); 7,5693 (3,7); 7,5640 (2,9); 7,5528 (1,7); 7,4447 (1,9); 7,4420 (2,0); 7,4391 (1,9); 7,4232 (1,4); 7,4205 (1,5); 7,4176 (1,4); 7,3486 (1,8); 7,3464 (1,9); 7,3296 (2,9); 7,3110 (2,0); 7,3087 (1,7); 7,2933 (1,5); 7,2880 (1,7); 7,2671 (1,3); 4,9655 (13,8); 4,2120 (2,2); 4,1943 (6,8); 4,1765 (6,9); 4,1588 (2,2); 3,3452 (304,7); 2,5161 (7,6); 2,5117 (15,2); 2,5072 (20,2); 2,5028 (14,3); 2,4984 (6,6); 2,0137 (0,4); 1,9945 (0,4); 1,2392 (2,1); 1,2208 (7,8); 1,2031 (16,0); 1,1853 (7,4); 0,8580 (0,6); 0,0041 (6,4)

I.55-1:  $^1\text{H-NMR}$ (300,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,7139 (0,6); 7,7076 (0,5); 7,6916 (0,4); 7,6854 (1,2); 7,6793 (0,4); 7,6630 (0,5); 7,6570 (0,7); 7,6349 (0,3); 7,4674 (0,5); 7,4615 (0,4); 7,4515 (1,9); 7,4458 (1,3); 7,4423 (1,3); 7,4324 (3,5); 7,4271 (4,4); 7,4194 (0,8); 7,4168 (0,8); 7,4112 (0,5); 7,3022 (2,8); 7,2934 (3,6); 7,2871 (1,4); 7,2829 (1,0); 7,2757 (2,1); 7,2661 (3,6); 7,2384 (1,6); 7,2312 (0,4); 5,0087 (7,5); 3,7196 (16,0); 3,3369 (18,1); 2,5147 (5,6); 2,5088 (11,4); 2,5028 (15,3); 2,4968 (10,5); 2,4910 (4,8); 2,0765 (0,4); -0,0002 (1,2)

I.55-2:  $^1\text{H-NMR}$ (300,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,6967 (0,3); 7,6743 (0,7); 7,6685 (0,7); 7,6461 (1,3); 7,6233 (0,7); 7,6178 (0,8); 7,5957 (0,4); 7,5811 (0,3); 7,5757 (0,4); 7,5513 (1,9); 7,5262 (2,5); 7,5050 (1,3); 7,4129 (0,9); 7,3852 (1,0); 7,3785 (1,2); 7,3517 (1,6); 7,3299 (1,7); 7,3040 (0,7); 7,2591 (2,2); 7,2314 (3,8); 7,2036 (1,8); 5,0023 (8,6); 3,7149 (16,0); 3,3287 (2,4); 2,5083 (5,3); 2,5031 (6,8); -0,0002 (3,1)

I.55-43:  $^1\text{H-NMR}$ (300,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,6939 (0,8); 7,6875 (0,7); 7,6772 (0,8); 7,6656 (1,6); 7,6587 (0,8); 7,6485 (1,5); 7,6425 (1,2); 7,6374 (1,1); 7,6270 (0,7); 7,6200 (0,9); 7,5987 (0,4); 7,3681 (1,9); 7,3398 (3,3); 7,3116 (1,5); 7,2842 (2,2); 7,2562 (3,8); 7,2284 (1,8); 5,0087 (8,4); 3,7097 (16,0); 3,3282 (1,7); 2,8911 (0,4); 2,7319 (0,4); 2,5086 (6,8); 2,5031 (8,5); 2,4978 (6,1); -0,0001 (4,9)

I.55-49:  $^1\text{H-NMR}$ (300,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,7320 (1,2); 7,7246 (1,6); 7,7022 (0,8); 7,6977 (1,7); 7,6906 (1,4); 7,6803 (0,5); 7,6741 (1,2); 7,6680 (0,5); 7,6516 (0,6); 7,6456 (0,7); 7,6276 (1,0); 7,5996 (2,0); 7,5719 (1,3); 7,4629 (1,0); 7,4591 (1,1); 7,4555 (1,1); 7,4522 (1,0); 7,4342 (0,7); 7,4305 (0,8); 7,4268 (0,8); 7,4234 (0,7); 7,2892 (2,0); 7,2613 (3,4); 7,2337 (1,6); 5,0078 (7,4); 3,7159 (16,0); 3,3401 (10,7); 3,3164 (1,2); 2,5179 (1,8); 2,5120 (3,5); 2,5060 (4,7); 2,5001 (3,2); 2,4943 (1,5); 2,0793 (0,6)

I.57-1:  $^1\text{H-NMR}$ (300,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,7344 (1,0); 7,7122 (2,2); 7,7059 (2,1); 7,6838 (4,2); 7,6612 (2,2); 7,6555 (2,6); 7,6334 (1,1); 7,4802 (1,0); 7,4739 (0,8); 7,4668 (1,9); 7,4608 (1,8); 7,4499 (7,5); 7,4293 (14,4); 7,4256 (16,0); 7,4146 (4,0); 7,4087 (2,2); 7,3928 (0,6); 7,3870 (0,5); 7,3015 (10,0); 7,2923 (13,4); 7,2816 (5,2); 7,2748 (8,4); 7,2646 (13,9); 7,2368 (6,2); 4,8760 (7,6); 3,5685 (0,3); 3,5087 (0,6); 3,4930 (0,5); 3,3571 (1,1); 3,1581 (0,3); 2,5160 (10,5); 2,5102 (20,8); 2,5044 (27,7); 2,4985 (19,7); 2,0770 (5,2); 1,2345 (0,4); -0,0002 (1,8)

I.57-2:  $^1\text{H-NMR}$ (300,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,6912 (0,8); 7,6689 (1,8); 7,6630 (1,8); 7,6406 (3,4); 7,6179 (2,0); 7,6124 (2,2); 7,5902 (1,1); 7,5749 (0,9); 7,5695 (1,2); 7,5458 (4,9); 7,5242 (6,4); 7,5210 (6,6); 7,5000 (4,0); 7,4049 (2,5); 7,3783 (2,5); 7,3717 (3,3); 7,3531 (3,4); 7,3438 (2,7); 7,3275 (4,4); 7,3016 (1,9); 7,2547 (5,8); 7,2269 (9,9); 7,1993 (4,8); 4,8445 (16,0); 2,5302 (1,2); 2,5084 (16,4); 2,5029 (21,4); 2,4974 (16,0); 2,0761 (0,6); -0,0003 (10,5)

I.57-43:  $^1\text{H-NMR}$ (300,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 13,1663 (0,4); 7,7140 (0,6); 7,6918 (1,5); 7,6855 (1,4); 7,6758 (1,5); 7,6635 (3,0); 7,6561 (1,6); 7,6471 (2,9); 7,6405 (2,4); 7,6351 (2,0); 7,6253 (1,4); 7,6185 (1,8); 7,5973 (0,7); 7,3652 (3,8); 7,3369 (6,6); 7,3088 (3,1); 7,2826 (4,5); 7,2547 (7,7); 7,2269 (3,7); 4,8828 (16,0); 3,3431 (0,6); 2,5116 (5,3); 2,5059 (6,9); 2,5002 (4,9); 2,0781 (1,6); -0,0002 (3,6)

I.57-49:  $^1\text{H-NMR}$ (300,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,7245 (6,3); 7,7174 (7,2); 7,6964 (3,7); 7,6904 (8,7); 7,6832 (6,9); 7,6684 (5,4); 7,6457 (2,8); 7,6400 (3,3); 7,6190 (5,0); 7,5913 (8,2); 7,5637 (5,5); 7,4566 (5,6); 7,4529 (5,4); 7,4280 (4,0); 7,4242 (3,8); 7,2846 (9,2); 7,2567 (16,0); 7,2290 (7,6); 4,8599 (14,9); 3,5687 (0,4); 3,3338 (1,1); 3,1292 (0,4); 2,7313 (0,5); 2,5433 (1,6); 2,5157 (18,9); 2,5098 (38,0); 2,5039 (50,8); 2,4980 (35,6); 2,4923 (16,7); 2,2738 (0,3); 2,0768 (0,5); 1,7555 (0,7); -0,0002 (3,2)

I.61-48:  $^1\text{H-NMR}$ (400,0 MHz, CDCl<sub>3</sub>):

$\delta$ = 7,5709 (0,5); 7,5553 (0,6); 7,5499 (0,8); 7,5341 (0,8); 7,5292 (0,6); 7,5136 (0,6); 7,4751 (0,6); 7,4724 (0,6); 7,4615 (0,6); 7,4588 (0,6); 7,4529 (0,7); 7,4504 (0,6); 7,4394 (0,7); 7,4368 (0,6); 7,2614 (10,9); 7,1785 (1,1); 7,1716 (1,2); 7,1584 (1,1); 7,1515 (1,2); 7,0866 (0,8); 7,0797 (0,7); 7,0677 (0,8); 7,0646 (0,8); 7,0608 (0,7); 7,0576 (0,6); 7,0457 (0,7); 7,0387 (0,6); 6,9331 (0,8); 6,9298 (0,6); 6,9271 (0,8); 6,7774 (0,6); 6,7714 (0,5); 6,7558 (0,7); 6,7520 (0,7); 6,7461 (0,6); 6,7305 (0,6); 6,7244 (0,5); 5,3002 (5,4); 4,9186 (8,6); 4,4979 (2,1); 4,4819 (4,4); 4,4659 (2,1); 3,6839 (16,0); 2,7040 (2,1); 2,6880 (4,3); 2,6720 (2,0); 1,5581 (3,8); 0,0693 (2,2); -0,0002 (14,6)

I.61-49:  $^1\text{H-NMR}$ (400,0 MHz, CDCl<sub>3</sub>):

$\delta$ = 7,6191 (0,5); 7,6035 (0,6); 7,5982 (0,8); 7,5827 (0,8); 7,5774 (0,6); 7,5618 (0,5); 7,4160 (0,9); 7,3952 (1,5); 7,3750 (1,1); 7,2630 (11,0); 7,2305 (0,8); 7,2273 (0,8); 7,2250 (0,9); 7,2220 (0,8); 7,2090 (0,6); 7,2059 (0,6); 7,2035 (0,7); 7,2006 (0,7); 7,1554 (1,2); 7,1500 (1,0); 7,1315 (1,2); 7,1260 (1,1); 6,9700 (0,7); 6,9639 (0,7); 6,7965 (0,6); 6,7905 (0,5); 6,7749 (0,6); 6,7710 (0,7); 6,7652 (0,6); 6,7497 (0,6); 6,7436 (0,5); 5,3004

(1,0); 4,9163 (8,6); 4,5026 (2,1); 4,4866 (4,4); 4,4707 (2,2); 3,6814 (16,0); 2,7049 (2,1); 2,6889 (4,3); 2,6730 (2,0); 1,5837 (1,1); -0,0002 (7,4)

I.6-2:  $^1\text{H-NMR}$ (400,1 MHz,  $\text{d}_6\text{-DMSO}$ ):

$\delta$ = 7,5867 (0,9); 7,5825 (1,2); 7,5683 (3,3); 7,5644 (4,7); 7,5490 (7,8); 7,5302 (7,8); 7,5150 (2,5); 7,5108 (2,5); 7,3949 (2,1); 7,3715 (3,0); 7,3495 (1,6); 7,3464 (1,5); 7,3280 (2,7); 7,3233 (3,1); 7,3214 (3,1); 7,3088 (4,5); 7,3044 (4,9); 7,2831 (3,9); 7,2568 (2,7); 7,2346 (1,9); 4,8488 (16,0); 3,3316 (1,3); 2,5117 (14,3); 2,5074 (18,5); 2,5032 (13,6); 1,9946 (0,6); 1,2409 (1,6); 1,1799 (0,4); 0,8592 (0,4); 0,0055 (21,6)

I.6-20:  $^1\text{H-NMR}$ (300,1 MHz,  $\text{d}_6\text{-DMSO}$ ):

$\delta$ = 13,0300 (0,3); 7,4903 (0,8); 7,4634 (1,9); 7,4406 (2,2); 7,4158 (1,4); 7,4032 (5,6); 7,3779 (7,8); 7,3486 (4,5); 7,3227 (2,4); 7,2727 (0,4); 7,2222 (2,5); 7,2013 (3,6); 7,1907 (3,5); 7,1776 (4,7); 7,1589 (2,6); 7,0294 (6,5); 7,0022 (8,2); 6,9761 (2,2); 4,7752 (16,0); 4,7509 (1,1); 3,4193 (29,8); 3,3713 (1,1); 3,2800 (5,6); 3,1751 (0,8); 3,0985 (0,3); 2,4624 (36,8); 2,3503 (0,3); 2,2341 (0,3); 1,1960 (0,4); -0,0383 (20,7)

I.62-49:  $^1\text{H-NMR}$ (400,0 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ):

$\delta$ = 7,6113 (1,0); 7,5956 (1,1); 7,5902 (1,5); 7,5745 (1,5); 7,5696 (1,2); 7,5539 (1,0); 7,3999 (1,7); 7,3791 (2,8); 7,3590 (2,2); 7,2596 (37,0); 7,2257 (1,6); 7,2226 (1,7); 7,2202 (1,8); 7,2173 (1,6); 7,2043 (1,2); 7,2012 (1,3); 7,1988 (1,4); 7,1959 (1,4); 7,1488 (2,4); 7,1433 (2,0); 7,1248 (2,4); 7,1194 (2,1); 6,9884 (0,7); 6,9861 (0,8); 6,9822 (0,8); 6,9801 (0,8); 6,9666 (1,4); 6,9606 (1,4); 6,9472 (0,7); 6,9448 (0,7); 6,9410 (0,8); 6,7911 (1,1); 6,7851 (1,0); 6,7695 (1,2); 6,7657 (1,4); 6,7598 (1,1); 6,7442 (1,1); 6,7381 (1,0); 4,9630 (16,0); 4,2851 (0,7); 4,2807 (1,8); 4,2620 (2,5); 4,2574 (1,2); 4,2542 (0,8); 4,2464 (0,5); 4,2430 (0,6); 4,1806 (1,6); 4,1651 (3,4); 4,1541 (1,7); 4,1473 (1,1); 4,1422 (3,8); 4,1382 (2,3); 4,1294 (0,9); 4,1217 (0,9); 3,8837 (0,8); 3,8667 (1,6); 3,8628 (1,5); 3,8501 (1,1); 3,8458 (2,4); 3,8294 (1,2); 3,7954 (1,2); 3,7780 (1,7); 3,7618 (1,4); 3,7411 (0,6); 2,1693 (5,4); 1,9821 (0,7); 1,9781 (0,6); 1,9735 (0,5); 1,9687 (0,6); 1,9646 (0,9); 1,9520 (0,8); 1,9481 (0,6); 1,9346 (0,6); 1,9199 (0,7); 1,9087 (0,7); 1,9044 (1,0); 1,8997 (0,9); 1,8921 (1,8); 1,8875 (1,2); 1,8837 (1,2); 1,8754 (1,8); 1,8713 (1,4); 1,8579 (0,8); 1,8541

(1,1); 1,6338 (0,8); 1,6292 (0,6); 1,6203 (0,6); 1,6168 (0,6); 1,6123 (0,8); 1,6032 (0,7); 1,5953 (0,5); 1,5832 (0,6); 1,5400 (8,8); 0,0080 (1,5); -0,0002 (45,7); -0,0084 (1,7)

I.62-7:  $^1\text{H-NMR}$ (400,0 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ):

$\delta$ = 7,6208 (1,0); 7,6052 (1,1); 7,5995 (1,4); 7,5837 (1,4); 7,5794 (1,2); 7,5637 (1,1); 7,3411 (0,7); 7,3341 (5,9); 7,3287 (2,2); 7,3173 (2,4); 7,3117 (8,8); 7,3048 (1,2); 7,2599 (31,9); 7,2202 (1,1); 7,2133 (8,4); 7,2078 (2,4); 7,1963 (2,0); 7,1909 (5,8); 7,1839 (0,6); 7,0241 (0,8); 7,0216 (0,8); 7,0179 (0,8); 7,0155 (0,8); 7,0045 (0,9); 7,0022 (1,5); 6,9986 (1,2); 6,9961 (1,7); 6,9829 (0,7); 6,9804 (0,7); 6,9766 (0,7); 6,9743 (0,7); 6,8189 (1,1); 6,8128 (1,0); 6,7973 (1,3); 6,7940 (1,4); 6,7913 (1,3); 6,7880 (1,2); 6,7724 (1,1); 6,7664 (1,0); 4,9713 (16,0); 4,2904 (1,9); 4,2714 (2,6); 4,2640 (0,8); 4,2537 (0,8); 4,1809 (1,5); 4,1652 (3,3); 4,1571 (1,7); 4,1476 (1,1); 4,1437 (4,3); 4,1380 (1,2); 4,1321 (1,0); 4,1248 (0,9); 3,8852 (0,8); 3,8681 (1,6); 3,8643 (1,5); 3,8517 (1,1); 3,8472 (2,6); 3,8309 (1,2); 3,7973 (1,1); 3,7800 (1,7); 3,7639 (1,4); 3,7613 (1,1); 3,7593 (1,1); 3,7432 (0,7); 2,1693 (3,0); 2,0001 (0,5); 1,9884 (0,7); 1,9857 (0,7); 1,9765 (0,5); 1,9729 (0,5); 1,9680 (0,9); 1,9553 (0,7); 1,9206 (0,7); 1,9116 (0,6); 1,9091 (0,6); 1,9040 (0,9); 1,9004 (0,9); 1,8942 (1,7); 1,8882 (1,0); 1,8839 (1,2); 1,8778 (1,6); 1,8745 (1,3); 1,8602 (0,8); 1,8569 (1,0); 1,6351 (0,8); 1,6306 (0,5); 1,6222 (0,6); 1,6186 (0,6); 1,6137 (0,8); 1,6048 (0,7); 1,5970 (0,5); 1,5875 (0,6); 1,5558 (0,6); 0,0080 (1,1); -0,0002 (38,5); -0,0085 (1,3)

I.6-32:  $^1\text{H-NMR}$ (400,1 MHz,  $d_6\text{-DMSO}$ ):

$\delta$ = 7,8293 (7,4); 7,8243 (7,6); 7,6594 (5,2); 7,6380 (8,2); 7,5787 (6,1); 7,5737 (6,4); 7,5576 (6,0); 7,5528 (5,9); 7,5399 (5,1); 7,5224 (6,0); 7,5052 (2,8); 7,3097 (3,8); 7,2911 (9,3); 7,2710 (6,2); 7,2447 (2,7); 4,6875 (16,0); 4,5008 (0,3); 3,4684 (0,4); 3,4570 (0,4); 3,4311 (0,4); 3,4091 (0,4); 3,3532 (0,4); 3,3343 (0,4); 3,3260 (0,4); 3,3215 (0,4); 3,2830 (0,4); 3,2736 (0,4); 3,1737 (0,6); 2,5081 (31,0); 2,0812 (0,7); 0,0049 (17,8)

I.63-49:  $^1\text{H-NMR}$ (400,0 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ):

$\delta$ = 7,6031 (1,0); 7,5875 (1,1); 7,5821 (1,5); 7,5666 (1,4); 7,5614 (1,1); 7,5459 (1,0); 7,3897 (1,6); 7,3690 (2,7); 7,3489 (2,2); 7,2613 (53,1); 7,2295 (1,5); 7,2264 (1,8); 7,2240 (1,7); 7,2211 (1,6); 7,2081 (1,1); 7,2051 (1,2); 7,2026 (1,4); 7,1997 (1,3); 7,1591

(2,4); 7,1537 (2,0); 7,1352 (2,3); 7,1298 (2,0); 6,9928 (0,7); 6,9906 (0,7); 6,9866 (0,7); 6,9710 (1,4); 6,9650 (1,4); 6,9517 (0,7); 6,9492 (0,6); 6,9432 (0,7); 6,7993 (1,1); 6,7933 (1,0); 6,7777 (1,2); 6,7738 (1,3); 6,7680 (1,0); 6,7525 (1,0); 6,7464 (1,0); 5,3001 (3,2); 4,9299 (16,0); 4,2444 (1,4); 4,2280 (1,4); 4,2174 (2,3); 4,2011 (2,3); 4,1376 (2,5); 4,1177 (2,5); 4,1106 (1,5); 4,0907 (1,6); 3,8503 (0,7); 3,8364 (0,8); 3,8294 (1,5); 3,8154 (1,6); 3,8090 (1,2); 3,8036 (1,7); 3,7952 (1,2); 3,7857 (1,9); 3,7814 (2,1); 3,7635 (2,0); 3,7483 (1,2); 3,7293 (1,8); 3,7116 (1,5); 3,6904 (0,9); 3,5427 (2,0); 3,5289 (2,0); 3,5204 (1,7); 3,5067 (1,7); 2,6128 (0,6); 2,5954 (0,8); 2,5779 (0,6); 2,0333 (0,5); 2,0272 (0,6); 2,0147 (0,9); 2,0065 (0,5); 2,0017 (0,6); 1,9957 (0,8); 1,9819 (0,7); 1,9751 (0,5); 1,6475 (0,6); 1,6304 (0,8); 1,6156 (1,1); 1,5960 (1,0); 1,5811 (0,7); 1,5579 (5,3); 1,2547 (1,0); 0,0079 (1,0); -0,0002 (35,8); -0,0085 (1,0)

I.6-38:  $^1\text{H-NMR}$ (300,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 13,1738 (0,3); 13,1227 (0,6); 13,1026 (0,5); 13,0877 (0,5); 13,0378 (0,4); 7,6754 (1,3); 7,6556 (1,6); 7,6461 (2,7); 7,6264 (2,8); 7,6176 (1,7); 7,6069 (1,3); 7,5953 (2,8); 7,5884 (3,4); 7,5696 (3,6); 7,5643 (5,9); 7,5398 (5,0); 7,5310 (1,7); 7,5096 (1,7); 7,5043 (2,0); 7,4956 (1,8); 7,4751 (1,4); 7,4660 (1,4); 7,3436 (2,8); 7,3188 (4,2); 7,3112 (2,8); 7,2964 (2,0); 7,2931 (2,2); 7,2773 (2,7); 7,2477 (2,7); 7,2296 (2,0); 7,2049 (1,0); 7,2000 (1,0); 4,8541 (16,0); 3,4490 (0,4); 3,4393 (0,4); 3,3288 (121,5); 2,7342 (0,7); 2,5195 (46,8); 2,5135 (93,2); 2,5076 (124,1); 2,5016 (85,4); 2,4958 (39,1); 2,4568 (0,4); 2,2780 (0,8); 2,0807 (1,8); 0,2020 (0,4); 0,0172 (3,8); 0,0062 (112,4); -0,0048 (4,0); -0,0219 (0,5); -0,0332 (0,3); -0,1929 (0,5)

I.6-38:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 13,1136 (2,7); 7,6639 (1,1); 7,6489 (1,3); 7,6419 (2,3); 7,6271 (2,3); 7,6201 (1,4); 7,6051 (1,3); 7,5994 (0,7); 7,5948 (1,0); 7,5848 (2,0); 7,5806 (3,1); 7,5628 (5,4); 7,5443 (3,4); 7,5311 (1,3); 7,5242 (1,3); 7,5032 (2,0); 7,4822 (1,2); 7,4754 (1,2); 7,3356 (2,4); 7,3168 (4,0); 7,2995 (3,5); 7,2756 (2,6); 7,2515 (2,3); 7,2268 (1,9); 7,2052 (1,0); 4,8583 (16,0); 3,3332 (1,8); 2,5081 (19,6); 2,5040 (26,1); 2,4999 (19,5); 2,0780 (0,7); 0,0014 (14,2)

I.6-43:  $^1\text{H-NMR}$ (300,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,6936 (0,6); 7,6718 (1,3); 7,6650 (1,4); 7,6435 (2,6); 7,6161 (2,4); 7,5938 (4,9); 7,5692 (5,8); 7,5471 (3,3); 7,3625 (4,2); 7,3564 (4,8); 7,3392 (5,2); 7,3277 (8,0); 7,3150 (5,5); 7,2997 (4,2); 7,2874 (3,2); 7,2797 (3,4); 7,2513 (2,2); 4,8688 (16,0); 3,3442 (1,0); 2,5050 (15,3); -0,0003 (0,7)

I.64-49:  $^1\text{H-NMR}$ (400,0 MHz, CDCl<sub>3</sub>):

$\delta$ = 7,5537 (2,0); 7,5332 (2,8); 7,5139 (2,3); 7,4548 (0,8); 7,4404 (0,9); 7,4332 (1,4); 7,4189 (1,5); 7,4118 (0,9); 7,3974 (0,9); 7,2622 (11,2); 7,2339 (1,8); 7,2288 (1,9); 7,2129 (1,5); 7,2079 (1,7); 7,0572 (2,2); 7,0524 (2,1); 7,0328 (2,2); 7,0280 (2,1); 6,9806 (0,6); 6,9769 (0,7); 6,9739 (0,7); 6,9703 (0,7); 6,9614 (0,7); 6,9580 (1,2); 6,9547 (1,3); 6,9514 (1,2); 6,9392 (0,6); 6,9355 (0,6); 6,9324 (0,6); 6,9289 (0,6); 6,8904 (1,1); 6,8836 (0,9); 6,8695 (1,2); 6,8656 (1,3); 6,8630 (1,1); 6,8591 (1,0); 6,8449 (1,1); 6,8382 (0,9); 5,1817 (2,2); 5,1721 (4,8); 5,1625 (2,4); 4,9768 (16,0); 4,2577 (8,8); 4,2481 (8,6); 4,0035 (1,6); 3,9897 (2,2); 3,9866 (4,3); 3,9807 (2,8); 3,9755 (2,6); 3,9688 (3,4); 3,9453 (1,2); 3,9354 (1,2); 3,9119 (3,3); 3,9052 (2,5); 3,9000 (2,7); 3,8942 (4,2); 3,8772 (1,6); 1,5752 (3,0); -0,0002 (14,4)

I.6-49:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 13,1212 (4,2); 7,7086 (2,7); 7,7032 (2,8); 7,6833 (2,8); 7,6778 (2,8); 7,6087 (2,7); 7,6041 (1,4); 7,5945 (2,3); 7,5879 (6,7); 7,5722 (5,6); 7,5673 (4,9); 7,5537 (3,2); 7,4388 (2,7); 7,4359 (2,6); 7,4174 (2,0); 7,4144 (2,0); 7,3439 (2,4); 7,3251 (4,1); 7,3086 (2,4); 7,2867 (2,6); 7,2643 (1,5); 4,8638 (16,0); 3,3319 (2,5); 2,5080 (19,0); 2,5037 (25,5); 2,4994 (18,7); 0,0091 (0,6); 0,0011 (15,6); -0,0071 (0,6)

I.65-49:  $^1\text{H-NMR}$ (400,0 MHz, CDCl<sub>3</sub>):

$\delta$ = 7,6103 (0,9); 7,5946 (1,0); 7,5891 (1,4); 7,5735 (1,4); 7,5686 (1,1); 7,5530 (1,0); 7,3940 (1,6); 7,3731 (2,6); 7,3531 (2,1); 7,2649 (7,4); 7,2274 (1,5); 7,2243 (1,6); 7,2219 (1,6); 7,2189 (1,5); 7,2060 (1,1); 7,2029 (1,2); 7,2004 (1,3); 7,1975 (1,3); 7,1523 (2,3); 7,1468 (1,9); 7,1283 (2,3); 7,1229 (2,0); 6,9908 (0,7); 6,9884 (0,7); 6,9845 (0,7); 6,9823 (0,7); 6,9711 (0,8); 6,9689 (1,3); 6,9655 (1,0); 6,9628 (1,3); 6,9495 (0,6); 6,9471

(0,6); 6,9432 (0,7); 6,9410 (0,6); 6,7938 (1,0); 6,7877 (1,0); 6,7722 (1,1); 6,7684 (1,2); 6,7663 (1,2); 6,7625 (1,0); 6,7469 (1,0); 6,7408 (1,0); 4,9240 (16,0); 4,1900 (4,0); 4,1734 (8,4); 4,1568 (4,2); 1,7022 (1,8); 1,6854 (3,6); 1,6670 (3,8); 1,6501 (1,9); 1,6318 (0,7); 1,6223 (0,8); 1,2555 (0,5); 0,9326 (7,0); 0,9141 (14,2); 0,8955 (6,4); -0,0002 (6,3)

I.66-49:  $^1\text{H-NMR}$ (400,0 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ):

$\delta$ = 7,6119 (1,0); 7,5963 (1,0); 7,5908 (1,4); 7,5752 (1,4); 7,5703 (1,1); 7,5547 (1,0); 7,3955 (1,6); 7,3746 (2,6); 7,3546 (2,1); 7,2649 (7,4); 7,2281 (1,5); 7,2250 (1,6); 7,2226 (1,7); 7,2196 (1,6); 7,2067 (1,1); 7,2036 (1,2); 7,2012 (1,3); 7,1982 (1,3); 7,1525 (2,3); 7,1471 (1,9); 7,1286 (2,3); 7,1231 (2,0); 6,9914 (0,7); 6,9890 (0,7); 6,9852 (0,7); 6,9830 (0,7); 6,9718 (0,8); 6,9696 (1,3); 6,9661 (1,0); 6,9635 (1,3); 6,9501 (0,7); 6,9478 (0,7); 6,9439 (0,6); 6,9417 (0,6); 6,7943 (1,0); 6,7882 (1,0); 6,7726 (1,2); 6,7688 (1,3); 6,7668 (1,2); 6,7629 (1,0); 6,7474 (1,0); 6,7413 (0,9); 4,9157 (16,0); 4,2313 (3,7); 4,2148 (7,7); 4,1983 (3,8); 1,6666 (0,8); 1,6501 (2,0); 1,6425 (0,7); 1,6340 (2,1); 1,6319 (2,6); 1,6261 (2,0); 1,6177 (1,1); 1,6122 (2,4); 1,5957 (1,0); 1,3789 (1,6); 1,3645 (0,9); 1,3600 (2,4); 1,3461 (1,0); 1,3410 (2,6); 1,3226 (1,6); 1,3043 (0,5); 1,2554 (0,5); 0,9155 (6,5); 0,8971 (13,6); 0,8786 (5,6); -0,0002 (6,2)

I.67-48:  $^1\text{H-NMR}$ (400,0 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ):

$\delta$ = 7,5479 (0,6); 7,5322 (0,6); 7,5275 (0,5); 7,4360 (0,5); 7,4302 (0,6); 7,4275 (0,6); 7,4166 (0,5); 7,4140 (0,5); 7,2631 (4,1); 7,1762 (0,9); 7,1693 (1,0); 7,1561 (0,9); 7,1492 (1,0); 7,0827 (0,7); 7,0757 (0,6); 7,0638 (0,7); 7,0606 (0,6); 7,0569 (0,6); 7,0537 (0,6); 7,0417 (0,6); 7,0348 (0,5); 6,9327 (0,6); 6,9266 (0,6); 6,7518 (0,5); 6,7481 (0,6); 6,7460 (0,5); 5,3003 (3,5); 4,9676 (7,3); 4,3694 (1,8); 4,3611 (1,0); 4,3577 (1,8); 4,3540 (0,9); 4,3458 (1,9); 3,6302 (2,2); 3,6220 (1,0); 3,6183 (2,0); 3,6150 (1,0); 3,6066 (2,0); 3,3654 (16,0); 1,5923 (1,5); 0,0700 (1,1); -0,0002 (5,6)

I.67-49:  $^1\text{H-NMR}$ (400,0 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ):

$\delta$ = 7,5913 (0,6); 7,5756 (0,6); 7,5708 (0,5); 7,3999 (0,7); 7,3789 (1,2); 7,3590 (1,0); 7,2594 (18,4); 7,2256 (0,7); 7,2225 (0,8); 7,2201 (0,8); 7,2170 (0,8); 7,2041 (0,6); 7,2010 (0,6); 7,1986 (0,6); 7,1956 (0,6); 7,1494 (1,0); 7,1439 (0,9); 7,1254 (1,0); 7,1200

(0,9); 6,9662 (0,6); 6,9627 (0,5); 6,9601 (0,7); 6,7692 (0,5); 6,7655 (0,6); 6,7633 (0,6); 6,7595 (0,5); 4,9646 (7,3); 4,3725 (1,8); 4,3641 (1,0); 4,3607 (1,9); 4,3570 (1,0); 4,3489 (2,0); 3,6287 (2,2); 3,6205 (1,1); 3,6169 (2,1); 3,6136 (1,1); 3,6051 (2,0); 3,3622 (16,0); 1,5370 (2,8); 0,0080 (0,7); -0,0002 (22,8); -0,0084 (0,8)

I.67-7:  $^1\text{H-NMR}$ (400,0 MHz, CDCl<sub>3</sub>):

$\delta$ = 7,5990 (0,6); 7,5834 (0,6); 7,5789 (0,5); 7,3346 (2,4); 7,3293 (0,9); 7,3179 (1,0); 7,3123 (3,7); 7,2598 (12,4); 7,2149 (3,5); 7,2094 (1,0); 7,1980 (0,8); 7,1927 (2,4); 7,0016 (0,6); 6,9981 (0,5); 6,9956 (0,7); 6,7976 (0,5); 6,7943 (0,6); 6,7915 (0,5); 4,9728 (7,0); 4,3764 (1,8); 4,3681 (1,0); 4,3647 (1,8); 4,3610 (1,0); 4,3529 (1,9); 3,6324 (2,1); 3,6242 (1,0); 3,6205 (2,0); 3,6172 (1,0); 3,6089 (2,0); 3,3633 (16,0); 2,1691 (5,4); 1,5450 (2,1); -0,0002 (15,3); -0,0085 (0,5)

I.68-49:  $^1\text{H-NMR}$ (400,0 MHz, CDCl<sub>3</sub>):

$\delta$ = 7,6116 (0,8); 7,5959 (0,9); 7,5906 (1,3); 7,5750 (1,3); 7,5699 (0,9); 7,5542 (0,8); 7,3905 (1,4); 7,3697 (2,5); 7,3496 (1,8); 7,2617 (23,2); 7,2230 (1,4); 7,2199 (1,5); 7,2176 (1,6); 7,2147 (1,4); 7,2016 (1,0); 7,1986 (1,2); 7,1962 (1,3); 7,1933 (1,2); 7,1491 (2,4); 7,1436 (2,0); 7,1251 (2,4); 7,1197 (2,0); 6,9853 (0,7); 6,9813 (0,7); 6,9658 (1,2); 6,9599 (1,3); 6,9442 (0,6); 6,9402 (0,6); 6,7915 (1,0); 6,7854 (0,9); 6,7699 (1,2); 6,7660 (1,3); 6,7602 (1,0); 6,7446 (1,0); 6,7385 (0,9); 5,0636 (0,8); 5,0480 (1,1); 5,0313 (1,1); 5,0158 (0,8); 4,8799 (16,0); 1,6057 (0,5); 1,5949 (0,6); 1,5816 (0,7); 1,5685 (6,6); 1,5128 (0,5); 1,4991 (0,6); 1,4892 (0,6); 1,4780 (0,6); 1,4547 (0,5); 1,2895 (1,0); 1,2469 (15,3); 1,2312 (15,5); 0,8658 (2,2); 0,8589 (1,7); 0,8490 (6,9); 0,8321 (2,2); 0,0079 (0,6); -0,0002 (19,6); -0,0085 (0,6)

I.69-49:  $^1\text{H-NMR}$ (400,0 MHz, CDCl<sub>3</sub>):

$\delta$ = 7,6191 (1,0); 7,6034 (1,1); 7,5979 (1,4); 7,5823 (1,4); 7,5774 (1,1); 7,5617 (1,0); 7,4159 (1,7); 7,3951 (2,7); 7,3750 (2,1); 7,2661 (7,9); 7,2300 (1,5); 7,2269 (1,6); 7,2245 (1,6); 7,2215 (1,5); 7,2085 (1,1); 7,2055 (1,2); 7,2031 (1,3); 7,2001 (1,3); 7,1548 (2,3); 7,1493 (1,9); 7,1309 (2,3); 7,1254 (2,0); 6,9915 (0,7); 6,9892 (0,7); 6,9853 (0,7); 6,9832 (0,7); 6,9697 (1,3); 6,9663 (1,1); 6,9636 (1,3); 6,9502 (0,6); 6,9480 (0,7); 6,9440

(0,7); 6,9420 (0,6); 6,7963 (1,0); 6,7902 (1,0); 6,7746 (1,2); 6,7708 (1,3); 6,7689 (1,2); 6,7650 (1,0); 6,7494 (1,0); 6,7433 (0,9); 4,9164 (15,7); 4,5023 (3,7); 4,4862 (8,0); 4,4702 (3,9); 4,1664 (2,2); 4,1486 (6,8); 4,1307 (6,9); 4,1129 (2,3); 2,6901 (4,0); 2,6741 (8,2); 2,6581 (3,8); 1,6332 (3,4); 1,2613 (8,0); 1,2435 (16,0); 1,2256 (7,7); -0,0002 (6,6)

I.73-49:  $^1\text{H-NMR}$ (400,0 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ):

$\delta$ = 7,6159 (0,9); 7,6002 (1,0); 7,5947 (1,4); 7,5791 (1,4); 7,5742 (1,0); 7,5586 (1,0); 7,4003 (1,6); 7,3794 (2,6); 7,3595 (2,0); 7,2620 (19,7); 7,2277 (1,5); 7,2245 (1,5); 7,2222 (1,6); 7,2192 (1,5); 7,2062 (1,1); 7,2031 (1,2); 7,2007 (1,3); 7,1978 (1,2); 7,1522 (2,3); 7,1468 (1,9); 7,1283 (2,2); 7,1228 (2,0); 6,9910 (0,7); 6,9887 (0,7); 6,9848 (0,7); 6,9826 (0,7); 6,9691 (1,3); 6,9658 (1,0); 6,9630 (1,3); 6,9497 (0,6); 6,9474 (0,6); 6,9435 (0,6); 6,9413 (0,6); 6,7938 (1,0); 6,7877 (0,9); 6,7722 (1,1); 6,7684 (1,2); 6,7663 (1,2); 6,7625 (1,0); 6,7469 (1,0); 6,7408 (0,9); 4,9406 (16,0); 4,0584 (7,3); 4,0402 (7,4); 1,5705 (5,0); 1,1677 (0,7); 1,1610 (0,6); 1,1491 (1,2); 1,1371 (0,6); 1,1292 (0,8); 0,5783 (0,9); 0,5663 (2,5); 0,5631 (2,8); 0,5513 (1,2); 0,5461 (2,8); 0,5429 (2,4); 0,5313 (1,1); 0,3038 (1,0); 0,2921 (3,3); 0,2891 (2,6); 0,2802 (2,5); 0,2770 (3,3); 0,2652 (0,7); 0,0697 (1,4); -0,0002 (16,7); -0,0085 (0,5)

I.74-49:  $^1\text{H-NMR}$ (400,0 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ):

$\delta$ = 7,6082 (0,5); 7,5926 (0,6); 7,5871 (0,8); 7,5716 (0,8); 7,5666 (0,6); 7,5509 (0,5); 7,3907 (0,9); 7,3698 (1,4); 7,3498 (1,1); 7,2630 (6,7); 7,2257 (0,8); 7,2226 (0,8); 7,2202 (0,9); 7,2172 (0,8); 7,2043 (0,6); 7,2012 (0,6); 7,1988 (0,7); 7,1958 (0,7); 7,1520 (1,2); 7,1465 (1,0); 7,1281 (1,2); 7,1226 (1,1); 6,9671 (0,7); 6,9637 (0,6); 6,9610 (0,7); 6,7932 (0,6); 6,7872 (0,5); 6,7716 (0,6); 6,7679 (0,7); 6,7658 (0,6); 6,7619 (0,6); 6,7463 (0,6); 6,7403 (0,5); 5,1584 (1,0); 5,1427 (1,3); 5,1270 (1,0); 4,8752 (9,6); 1,5903 (1,0); 1,2762 (16,0); 1,2605 (16,0); -0,0002 (5,7)

I.45-49:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz,  $d_6\text{-DMSO}$ ):

$\delta$ = 13,0938 (0,7); 7,7719 (6,1); 7,7670 (6,5); 7,6903 (2,7); 7,6847 (2,9); 7,6649 (2,8); 7,6593 (2,9); 7,6235 (3,8); 7,6026 (7,7); 7,5859 (2,4); 7,5674 (6,3); 7,5635 (7,1); 7,5466 (3,3); 7,5437 (4,0); 7,4356 (2,3); 7,4331 (2,5); 7,4300 (2,5); 7,4141 (1,8); 7,4116

(1,9); 7,4085 (1,9); 4,8597 (16,0); 3,3224 (8,5); 2,8916 (0,4); 2,7324 (0,4); 2,5117 (8,5); 2,5073 (18,0); 2,5029 (24,9); 2,4984 (18,4); 2,4941 (9,2); 0,0087 (0,7); 0,0006 (21,2); -0,0075 (1,0)

I.48-32:  $^1\text{H-NMR}$ (300,1 MHz,  $\text{d}_6\text{-DMSO}$ ):

$\delta$ = 13,0785 (0,8); 8,3179 (0,5); 7,8625 (7,1); 7,8552 (7,3); 7,6971 (4,1); 7,6686 (7,2); 7,6043 (5,9); 7,5969 (6,7); 7,5931 (4,0); 7,5760 (4,5); 7,5680 (4,3); 7,5656 (4,0); 7,5587 (3,8); 7,5507 (4,9); 7,5244 (3,6); 7,4332 (3,6); 7,4265 (3,4); 7,4043 (2,4); 7,3984 (2,3); 4,8487 (16,0); 3,3250 (9,0); 2,7283 (0,5); 2,5138 (31,2); 2,5079 (60,0); 2,5019 (78,7); 2,4960 (53,7); 2,2721 (0,5); 2,0754 (0,5); 0,0108 (0,8); -0,0001 (20,8); -0,0112 (0,7)

I.11-38:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz,  $\text{d}_6\text{-DMSO}$ ):

$\delta$ = 7,8261 (0,9); 7,8112 (1,0); 7,8042 (1,8); 7,7893 (1,8); 7,7822 (1,0); 7,7673 (0,9); 7,5855 (0,9); 7,5787 (1,0); 7,5627 (1,2); 7,5592 (1,4); 7,5563 (1,4); 7,5529 (1,3); 7,5370 (1,0); 7,5303 (1,0); 7,4967 (2,9); 7,4913 (1,4); 7,4833 (3,3); 7,4778 (2,4); 7,4743 (3,9); 7,4663 (1,8); 7,4609 (3,5); 7,4535 (0,6); 7,3532 (0,7); 7,3499 (0,8); 7,3464 (0,8); 7,3434 (0,8); 7,3294 (1,4); 7,3275 (1,4); 7,3107 (1,1); 7,3041 (4,4); 7,2819 (6,6); 7,2648 (1,2); 7,2597 (3,0); 7,2524 (0,4); 5,7562 (2,7); 4,9423 (13,0); 4,8270 (0,9); 4,2061 (2,0); 4,1883 (6,5); 4,1795 (0,5); 4,1706 (6,6); 4,1528 (2,1); 3,3358 (107,7); 2,6766 (0,4); 2,6721 (0,6); 2,6674 (0,4); 2,5255 (1,9); 2,5120 (40,6); 2,5077 (81,4); 2,5032 (105,6); 2,4986 (76,6); 2,4942 (37,8); 2,3345 (0,5); 2,3300 (0,6); 2,3254 (0,5); 1,2352 (0,6); 1,2297 (0,6); 1,2165 (7,7); 1,1988 (16,0); 1,1810 (7,4); -0,0002 (7,0)

I.2-38:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz,  $\text{d}_6\text{-DMSO}$ ):

$\delta$ = 7,8216 (0,8); 7,8066 (0,9); 7,7996 (1,6); 7,7847 (1,6); 7,7777 (0,9); 7,7628 (0,8); 7,5747 (0,8); 7,5678 (0,9); 7,5483 (1,3); 7,5451 (1,3); 7,5422 (1,2); 7,5261 (0,8); 7,5194 (0,9); 7,5001 (0,4); 7,4904 (0,7); 7,4881 (0,8); 7,4782 (2,0); 7,4663 (2,0); 7,4568 (1,7); 7,4471 (0,9); 7,4257 (16,0); 7,4145 (10,4); 7,3947 (0,4); 7,3430 (0,8); 7,3395 (0,7); 7,3363 (0,7); 7,3222 (1,4); 7,3003 (0,8); 7,2970 (0,7); 5,7564 (2,8); 4,9455 (11,9); 4,9280 (0,4); 4,8450 (2,1); 4,2081 (1,8); 4,1904 (5,9); 4,1726 (6,0); 4,1549 (2,0); 3,3336 (77,4);

2,6762 (0,4); 2,6719 (0,5); 2,6673 (0,4); 2,5252 (1,6); 2,5203 (2,5); 2,5117 (33,1); 2,5073 (67,4); 2,5028 (88,2); 2,4983 (64,2); 2,4938 (31,8); 2,3342 (0,4); 2,3295 (0,5); 2,3251 (0,4); 1,2345 (0,8); 1,2315 (0,8); 1,2182 (6,9); 1,2004 (14,2); 1,1827 (6,6); -0,0002 (5,8)

I.2-4:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,4869 (0,4); 7,4762 (0,9); 7,4719 (1,1); 7,4654 (2,1); 7,4574 (3,6); 7,4529 (3,1); 7,4515 (3,1); 7,4449 (4,4); 7,4402 (3,2); 7,4348 (5,7); 7,4282 (2,8); 7,4225 (5,3); 7,4136 (11,1); 7,4109 (10,2); 7,4025 (10,7); 7,3898 (0,8); 7,3692 (0,6); 7,3611 (4,3); 7,3554 (1,4); 7,3395 (6,2); 7,3228 (1,1); 7,3172 (2,7); 5,7552 (2,4); 4,9674 (0,7); 4,9412 (14,1); 4,8438 (0,5); 4,2132 (2,1); 4,1954 (6,8); 4,1777 (7,0); 4,1599 (2,2); 4,1029 (0,4); 3,7160 (1,2); 3,3453 (130,7); 2,6767 (0,4); 2,6722 (0,6); 2,6676 (0,4); 2,5254 (2,2); 2,5118 (40,7); 2,5077 (78,1); 2,5032 (99,1); 2,4987 (72,0); 2,4946 (35,9); 2,3345 (0,4); 2,3300 (0,6); 2,3255 (0,4); 1,2289 (7,7); 1,2111 (16,0); 1,1934 (7,5); 1,1816 (0,4); 1,1681 (0,4); -0,0002 (1,5)

I.11-4:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,4742 (3,7); 7,4676 (4,3); 7,4608 (5,2); 7,4554 (6,1); 7,4519 (6,6); 7,4446 (6,7); 7,4384 (5,8); 7,4327 (4,7); 7,3686 (4,2); 7,3468 (6,5); 7,3302 (1,2); 7,3249 (2,9); 7,2922 (4,4); 7,2700 (7,9); 7,2478 (3,6); 5,7518 (1,6); 4,9372 (13,7); 4,8363 (2,9); 4,2114 (2,2); 4,1937 (7,0); 4,1759 (7,0); 4,1582 (2,3); 4,1022 (0,4); 3,7144 (0,4); 3,5709 (0,4); 3,5376 (0,5); 3,3828 (201,8); 3,2601 (0,6); 2,6795 (0,5); 2,6748 (0,7); 2,6701 (0,5); 2,5280 (2,1); 2,5144 (45,2); 2,5103 (88,5); 2,5058 (113,4); 2,5013 (82,7); 2,4971 (41,3); 2,3371 (0,5); 2,3324 (0,7); 2,3282 (0,5); 1,2278 (7,8); 1,2101 (16,0); 1,1997 (1,1); 1,1923 (7,6); 1,1822 (0,5)

I.12-38:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,8320 (0,5); 7,8204 (1,3); 7,8060 (1,7); 7,7987 (2,8); 7,7840 (2,7); 7,7769 (1,8); 7,7621 (1,3); 7,5832 (0,6); 7,5713 (1,6); 7,5642 (1,8); 7,5487 (2,5); 7,5452 (2,5); 7,5423 (2,5); 7,5229 (1,7); 7,5160 (1,6); 7,4962 (5,1); 7,4826 (6,3); 7,4740 (6,7); 7,4607 (5,8); 7,3411 (1,6); 7,3329 (1,6); 7,3208 (3,1); 7,3140 (2,8); 7,3037 (3,9); 7,2973 (7,5); 7,2814 (5,6); 7,2750 (10,6); 7,2590 (3,0); 7,2528 (4,7); 5,7552 (6,0); 4,9688 (7,4); 4,7429

(8,1); 4,0243 (0,4); 4,0142 (0,7); 4,0067 (0,7); 3,9965 (1,3); 3,9890 (0,8); 3,9789 (1,4); 3,9610 (0,7); 3,9360 (0,4); 3,9186 (0,4); 3,9088 (0,4); 3,8990 (0,4); 3,8926 (0,5); 3,8600 (0,5); 3,7431 (1,2); 3,7280 (1,4); 3,7107 (16,0); 3,6299 (3,2); 3,6215 (2,4); 3,6062 (2,6); 3,5737 (3,0); 3,3826 (27,1); 3,1694 (2,5); 2,9236 (0,5); 2,8920 (0,6); 2,8648 (0,4); 2,7329 (0,5); 2,6775 (1,2); 2,6730 (1,6); 2,6686 (1,2); 2,5395 (1,2); 2,5263 (5,3); 2,5126 (96,5); 2,5085 (184,9); 2,5041 (234,3); 2,4996 (169,1); 2,4954 (83,6); 2,3352 (1,1); 2,3309 (1,4); 2,3263 (1,1); 1,2986 (0,6); 1,2588 (1,0); 1,2353 (3,0); 1,1986 (0,3); 1,1763 (1,2); 1,1585 (2,2); 1,1407 (1,2); 1,1109 (0,4); 0,8538 (0,5); -0,0001 (2,1)

I.3-4:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,4767 (0,4); 7,4665 (0,9); 7,4630 (1,3); 7,4545 (1,9); 7,4505 (1,4); 7,4423 (4,0); 7,4332 (2,6); 7,4298 (3,3); 7,4241 (2,5); 7,4195 (4,2); 7,4080 (16,0); 7,3970 (7,6); 7,3597 (0,8); 7,3525 (0,5); 7,3439 (3,2); 7,3382 (2,0); 7,3310 (0,7); 7,3223 (4,5); 7,3168 (1,5); 7,3056 (0,8); 7,3001 (1,9); 5,7550 (5,6); 4,9674 (2,6); 4,6818 (5,0); 3,7491 (0,4); 3,7160 (5,9); 3,6448 (0,8); 3,6218 (0,9); 3,5966 (1,3); 3,4251 (5,8); 3,1691 (1,3); 3,1292 (0,4); 3,1242 (0,4); 2,6769 (0,4); 2,6725 (0,6); 2,6679 (0,4); 2,5258 (1,8); 2,5209 (3,0); 2,5124 (31,7); 2,5080 (62,8); 2,5035 (81,0); 2,4989 (58,3); 2,4944 (28,3); 2,3348 (0,4); 2,3301 (0,5); 2,3257 (0,4); -0,0002 (0,4)

I.42-4:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,7182 (1,5); 7,7016 (1,9); 7,6970 (3,0); 7,6808 (3,0); 7,6762 (2,1); 7,6597 (1,6); 7,3953 (1,8); 7,3893 (2,3); 7,3833 (4,0); 7,3777 (2,5); 7,3709 (6,7); 7,3661 (6,0); 7,3608 (8,3); 7,3539 (3,3); 7,3483 (7,3); 7,3400 (2,6); 7,3101 (6,8); 7,3044 (2,2); 7,2883 (10,1); 7,2715 (2,1); 7,2660 (6,6); 7,2588 (3,1); 7,2431 (1,6); 7,2377 (1,4); 5,7557 (9,5); 4,9835 (0,8); 4,8098 (16,0); 3,7459 (0,4); 3,7387 (0,4); 3,7177 (1,9); 3,6758 (0,6); 3,3617 (7,5); 3,1691 (3,0); 3,0054 (0,4); 2,6767 (0,8); 2,6723 (1,0); 2,6678 (0,8); 2,5255 (3,3); 2,5117 (59,2); 2,5078 (115,9); 2,5033 (150,0); 2,4989 (110,6); 2,3347 (0,6); 2,3302 (0,9); 2,3256 (0,7); 1,2349 (0,4); -0,0002 (1,0)

I.42-1:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,7156 (1,6); 7,6945 (3,5); 7,6781 (3,5); 7,6572 (1,8); 7,4659 (0,5); 7,4574

(1,5); 7,4504 (2,0); 7,4437 (3,4); 7,4350 (6,9); 7,4297 (4,8); 7,4246 (6,3); 7,4164 (10,6); 7,3974 (2,7); 7,3889 (1,2); 7,3816 (2,5); 7,3755 (2,0); 7,3561 (3,1); 7,3386 (0,9); 7,3323 (2,0); 7,3261 (1,6); 7,3081 (2,8); 7,2997 (6,6); 7,2954 (6,9); 7,2876 (4,4); 7,2836 (5,9); 7,2793 (7,4); 7,2593 (3,6); 7,2379 (1,8); 5,7550 (7,5); 4,9877 (7,6); 4,7690 (7,7); 3,9015 (0,4); 3,8825 (0,4); 3,8693 (0,4); 3,8584 (0,4); 3,8353 (0,4); 3,8298 (0,4); 3,7193 (16,0); 3,6391 (1,3); 3,3839 (15,6); 3,1693 (2,2); 3,0656 (0,7); 3,0308 (0,6); 2,9952 (0,5); 2,9410 (0,4); 2,8913 (0,5); 2,7319 (0,3); 2,6770 (0,9); 2,6725 (1,2); 2,6682 (0,9); 2,5256 (3,8); 2,5080 (143,5); 2,5036 (182,5); 2,4992 (133,9); 2,3347 (0,8); 2,3304 (1,1); 2,3259 (0,8); 1,2348 (0,9); -0,0002 (1,4)

I.12-1:  $^1\text{H}$ -NMR(400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,9723 (0,3); 7,5229 (0,7); 7,5104 (2,3); 7,4998 (8,3); 7,4951 (8,4); 7,4867 (15,1); 7,4822 (14,5); 7,4765 (4,0); 7,4690 (6,6); 7,4636 (3,1); 7,4554 (7,0); 7,4466 (8,3); 7,4385 (3,4); 7,4331 (7,5); 7,4259 (1,2); 7,4052 (0,6); 7,4009 (0,6); 7,3837 (8,4); 7,3762 (6,3); 7,3731 (5,8); 7,3643 (6,6); 7,3594 (4,8); 7,3496 (0,5); 7,2867 (1,2); 7,2797 (7,2); 7,2744 (2,7); 7,2574 (12,3); 7,2351 (5,4); 5,7552 (9,7); 4,9676 (5,9); 4,8141 (16,0); 3,7896 (0,4); 3,7703 (0,4); 3,7481 (0,6); 3,7154 (12,7); 3,6935 (0,6); 3,6615 (0,8); 3,6481 (0,7); 3,3609 (23,9); 3,1693 (2,2); 3,0320 (0,4); 3,0295 (0,4); 2,9878 (0,4); 2,6771 (0,9); 2,6726 (1,2); 2,6681 (0,9); 2,6636 (0,5); 2,5428 (0,7); 2,5259 (4,3); 2,5125 (75,6); 2,5082 (146,4); 2,5036 (185,7); 2,4991 (133,6); 2,4947 (64,9); 2,3394 (0,4); 2,3349 (0,8); 2,3304 (1,1); 2,3259 (0,8); 1,2347 (0,6); 0,9000 (0,6); -0,0002 (2,5)

I.3-1:  $^1\text{H}$ -NMR(400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,4990 (0,8); 7,4943 (2,0); 7,4892 (3,0); 7,4840 (3,9); 7,4772 (6,6); 7,4718 (4,8); 7,4614 (1,2); 7,4595 (1,3); 7,4555 (1,1); 7,4499 (0,9); 7,4471 (1,3); 7,4415 (0,8); 7,4378 (0,9); 7,4337 (0,9); 7,4277 (0,4); 7,4233 (0,5); 7,4133 (0,9); 7,4030 (16,0); 7,3922 (8,4); 7,3781 (1,8); 7,3761 (1,7); 7,3724 (2,9); 7,3666 (2,1); 7,3601 (2,3); 7,3536 (2,5); 7,3481 (1,4); 5,7565 (4,1); 4,9713 (4,9); 4,8083 (3,2); 3,7171 (9,9); 3,3367 (2,6); 2,6713 (0,4); 2,5247 (1,2); 2,5199 (2,0); 2,5112 (25,3); 2,5069 (49,9); 2,5023 (63,7); 2,4977 (45,6); 2,4933 (21,9); 2,3291 (0,4); -0,0002 (4,6)

I.41-1:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,7106 (0,9); 7,6946 (1,3); 7,6895 (1,8); 7,6810 (0,6); 7,6734 (1,9); 7,6685 (1,2); 7,6591 (0,3); 7,6522 (1,0); 7,4655 (0,8); 7,4581 (1,2); 7,4536 (0,9); 7,4433 (4,6); 7,4347 (1,8); 7,4239 (8,0); 7,4185 (2,9); 7,4084 (1,8); 7,4058 (1,6); 7,3905 (1,4); 7,3846 (1,3); 7,3644 (1,7); 7,3610 (1,7); 7,3411 (1,1); 7,3350 (1,2); 7,3035 (4,7); 7,2987 (4,2); 7,2933 (1,7); 7,2830 (4,9); 7,2794 (4,0); 7,2646 (2,0); 7,2589 (1,8); 7,2427 (1,0); 7,2379 (0,9); 5,7566 (3,2); 4,9623 (13,5); 4,8626 (2,3); 4,2152 (2,1); 4,1974 (6,6); 4,1796 (6,8); 4,1619 (2,2); 3,3327 (83,5); 2,6762 (0,4); 2,6716 (0,6); 2,6672 (0,4); 2,5250 (2,0); 2,5115 (40,0); 2,5072 (78,4); 2,5027 (99,9); 2,4981 (71,5); 2,4937 (34,7); 2,3341 (0,4); 2,3295 (0,6); 2,3250 (0,4); 1,2263 (7,8); 1,2085 (16,0); 1,1908 (7,4); -0,0002 (6,6)

I.11-1:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,5270 (0,4); 7,5143 (1,2); 7,5039 (4,5); 7,4998 (4,8); 7,4912 (7,8); 7,4867 (9,4); 7,4765 (1,5); 7,4656 (3,4); 7,4601 (1,7); 7,4520 (3,8); 7,4482 (2,9); 7,4433 (4,3); 7,4350 (2,3); 7,4298 (3,9); 7,4225 (0,5); 7,3966 (0,3); 7,3836 (4,7); 7,3756 (3,6); 7,3729 (3,6); 7,3644 (3,7); 7,3592 (3,0); 7,2894 (0,6); 7,2821 (4,4); 7,2771 (1,5); 7,2599 (7,8); 7,2427 (1,3); 7,2377 (3,5); 5,7555 (2,5); 4,9411 (14,4); 4,8380 (2,1); 4,2124 (2,2); 4,1947 (6,9); 4,1769 (7,0); 4,1592 (2,2); 3,3411 (133,6); 2,6767 (0,4); 2,6720 (0,6); 2,6675 (0,4); 2,5253 (2,2); 2,5118 (40,9); 2,5076 (79,4); 2,5031 (101,7); 2,4986 (73,9); 2,4943 (36,6); 2,3343 (0,4); 2,3299 (0,6); 2,3254 (0,4); 1,2277 (7,9); 1,2100 (16,0); 1,1922 (7,5); -0,0002 (3,4)

I.41-38:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,6730 (0,8); 7,6588 (1,6); 7,6509 (1,8); 7,6433 (1,3); 7,6372 (2,8); 7,6290 (1,2); 7,6222 (1,9); 7,6167 (1,5); 7,6010 (0,9); 7,5418 (0,9); 7,5349 (0,9); 7,5191 (1,1); 7,5151 (1,4); 7,5087 (1,1); 7,4929 (0,9); 7,4862 (0,9); 7,4100 (0,9); 7,4039 (1,0); 7,3866 (1,2); 7,3831 (1,4); 7,3809 (1,4); 7,3776 (1,2); 7,3602 (1,0); 7,3541 (1,0); 7,2587 (1,6); 7,2522 (1,5); 7,2362 (2,8); 7,2314 (2,6); 7,2161 (1,4); 7,2099 (1,3); 5,7540 (1,7); 4,9542 (13,0); 4,2062 (2,1); 4,1885 (6,6); 4,1707 (6,7); 4,1529 (2,1); 3,3612 (387,1); 2,6785 (0,4); 2,6738 (0,6); 2,6693 (0,4); 2,5272 (1,9); 2,5224 (3,0); 2,5138 (39,4); 2,5094 (79,7);

2,5048 (103,7); 2,5003 (75,2); 2,4958 (36,8); 2,3361 (0,5); 2,3316 (0,6); 2,3269 (0,5); 1,2162 (7,7); 1,1984 (16,0); 1,1806 (7,4); -0,0002 (0,4)

I.54-38:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,8591 (1,7); 7,8442 (2,1); 7,8370 (3,5); 7,8223 (3,5); 7,8152 (2,1); 7,8003 (1,8); 7,5953 (1,9); 7,5885 (2,0); 7,5726 (2,6); 7,5690 (3,0); 7,5663 (2,9); 7,5629 (2,5); 7,5469 (2,0); 7,5402 (1,9); 7,4800 (1,2); 7,4742 (2,1); 7,4686 (1,3); 7,4567 (2,6); 7,4510 (4,1); 7,4452 (2,4); 7,4334 (1,4); 7,4276 (2,1); 7,4221 (1,1); 7,3748 (1,6); 7,3717 (1,7); 7,3682 (1,6); 7,3514 (3,1); 7,3322 (1,6); 7,3290 (1,6); 7,3256 (1,5); 7,1389 (0,5); 7,1333 (1,0); 7,1201 (5,7); 7,1146 (6,9); 7,1032 (5,3); 7,1000 (7,1); 7,0946 (5,1); 7,0815 (0,9); 5,7560 (10,9); 4,9883 (1,1); 4,7601 (16,0); 3,8472 (0,3); 3,7613 (0,5); 3,7383 (0,6); 3,7129 (2,9); 3,6453 (1,0); 3,3814 (7,3); 3,1692 (3,2); 3,0015 (0,5); 2,9877 (0,5); 2,6769 (0,9); 2,6725 (1,2); 2,6680 (0,9); 2,5258 (3,3); 2,5121 (87,6); 2,5080 (168,9); 2,5035 (214,5); 2,4990 (156,7); 2,4947 (79,4); 2,4133 (0,6); 2,3347 (1,2); 2,3303 (1,5); 2,3258 (1,2); 2,1799 (0,3); 1,2589 (0,4); 1,2350 (2,1); 0,8537 (0,4); 0,0079 (0,4); -0,0002 (11,6); -0,0085 (0,6)

I.21-38:  $^1\text{H-NMR}$ (600,4 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,7804 (1,3); 7,7703 (1,6); 7,7659 (2,7); 7,7560 (2,7); 7,7513 (1,7); 7,7414 (1,3); 7,5507 (1,7); 7,5461 (1,7); 7,5333 (2,7); 7,5185 (1,9); 7,5141 (1,8); 7,5030 (10,9); 7,4999 (3,9); 7,4917 (4,8); 7,4886 (16,0); 7,4848 (2,3); 7,4537 (0,3); 7,4421 (0,4); 7,4296 (14,5); 7,4152 (10,0); 7,3470 (0,4); 7,3257 (1,5); 7,3225 (1,5); 7,3120 (2,8); 7,3084 (2,7); 7,2974 (1,4); 7,2942 (1,4); 5,1456 (0,4); 4,4497 (3,3); 3,9009 (1,4); 3,7098 (0,6); 3,6588 (0,3); 3,5099 (0,6); 3,3110 (62,2); 2,6183 (1,6); 2,6153 (3,5); 2,6123 (4,8); 2,6093 (3,5); 2,6063 (1,6); 2,5213 (11,4); 2,5183 (13,9); 2,5152 (13,9); 2,5064 (277,4); 2,5034 (577,9); 2,5003 (791,6); 2,4972 (580,4); 2,4942 (277,5); 2,3903 (1,6); 2,3873 (3,4); 2,3843 (4,7); 2,3812 (3,4); 2,3782 (1,6); 1,9012 (0,5); 1,8315 (0,4); 1,2587 (0,5); 1,2555 (0,5); 1,2358 (2,4); 0,8540 (0,5); 0,6987 (0,3); 0,0053 (2,4); -0,0001 (77,8); -0,0057 (2,6)

I.53-4:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,5160 (2,8); 7,5106 (1,2); 7,5037 (3,2); 7,4988 (2,1); 7,4933 (4,1); 7,4867

(1,6); 7,4812 (3,9); 7,4727 (0,4); 7,4604 (0,6); 7,4545 (1,1); 7,4487 (0,6); 7,4371 (1,3); 7,4312 (2,2); 7,4254 (1,2); 7,4137 (0,7); 7,4077 (1,3); 7,3975 (3,9); 7,3918 (1,3); 7,3845 (0,8); 7,3758 (5,7); 7,3591 (1,0); 7,3535 (2,7); 7,1177 (0,5); 7,1049 (2,8); 7,0992 (3,3); 7,0879 (2,4); 7,0844 (3,4); 7,0788 (2,5); 7,0719 (0,5); 7,0661 (0,4); 5,7548 (2,1); 4,9529 (13,1); 4,8503 (1,2); 4,7553 (0,5); 4,2137 (2,0); 4,1960 (6,6); 4,1782 (6,8); 4,1605 (2,1); 4,1315 (0,4); 4,1137 (0,4); 4,1023 (0,3); 3,3511 (231,6); 2,6776 (0,4); 2,6732 (0,6); 2,6685 (0,4); 2,5265 (1,8); 2,5216 (3,0); 2,5131 (37,2); 2,5087 (74,5); 2,5041 (96,2); 2,4996 (69,6); 2,4951 (33,9); 2,3354 (0,4); 2,3309 (0,6); 2,3264 (0,4); 1,2299 (7,6); 1,2122 (16,0); 1,1993 (1,5); 1,1944 (7,4); 1,1817 (0,5); -0,0002 (0,6)

I.20-4:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,5112 (5,2); 7,5063 (2,0); 7,4944 (2,6); 7,4895 (8,9); 7,4836 (1,8); 7,4787 (2,9); 7,4731 (1,4); 7,4664 (3,0); 7,4613 (2,1); 7,4561 (4,2); 7,4439 (3,9); 7,4354 (0,7); 7,4279 (1,5); 7,4222 (8,6); 7,4172 (2,6); 7,4053 (2,1); 7,4004 (5,4); 7,3833 (0,6); 7,3751 (4,0); 7,3695 (1,3); 7,3535 (5,9); 7,3367 (1,1); 7,3313 (2,7); 7,3229 (0,3); 5,7561 (3,1); 4,9415 (13,7); 4,2106 (2,1); 4,1928 (6,7); 4,1750 (6,8); 4,1573 (2,2); 3,3347 (83,7); 2,6764 (0,4); 2,6720 (0,5); 2,6672 (0,4); 2,5251 (1,8); 2,5114 (38,2); 2,5073 (74,6); 2,5028 (95,4); 2,4983 (69,5); 2,4941 (34,8); 2,3341 (0,4); 2,3299 (0,6); 2,3251 (0,4); 1,2268 (7,7); 1,2090 (16,0); 1,1912 (7,5); -0,0002 (5,4)

I.21-4:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,5108 (3,4); 7,5064 (4,4); 7,5018 (1,6); 7,4940 (1,9); 7,4889 (6,7); 7,4847 (7,7); 7,4790 (2,0); 7,4742 (2,4); 7,4714 (2,7); 7,4660 (1,8); 7,4612 (4,0); 7,4517 (3,5); 7,4490 (3,2); 7,4396 (2,8); 7,4301 (2,0); 7,4244 (10,1); 7,4194 (2,9); 7,4075 (2,3); 7,4028 (6,0); 7,3818 (0,4); 7,3738 (2,5); 7,3674 (3,2); 7,3613 (1,2); 7,3520 (3,8); 7,3458 (4,4); 7,3356 (1,0); 7,3297 (2,0); 7,3235 (1,9); 5,7551 (6,3); 4,9676 (7,3); 4,7760 (4,4); 3,7137 (16,0); 3,6994 (0,4); 3,6931 (0,6); 3,5263 (1,1); 3,3616 (15,6); 3,1692 (1,0); 2,6772 (0,6); 2,6725 (0,7); 2,6679 (0,6); 2,5260 (2,6); 2,5126 (45,1); 2,5082 (90,2); 2,5036 (116,5); 2,4990 (83,9); 2,4946 (40,7); 2,3350 (0,5); 2,3304 (0,7); 2,3259 (0,5); -0,0002 (0,9)

I.54-4:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,5194 (1,7); 7,5079 (4,4); 7,5027 (2,5); 7,4965 (5,8); 7,4907 (3,3); 7,4856 (6,5); 7,4793 (2,2); 7,4737 (4,7); 7,4653 (0,6); 7,4609 (0,5); 7,4547 (0,7); 7,4491 (1,1); 7,4434 (1,4); 7,4374 (1,4); 7,4314 (1,4); 7,4258 (2,2); 7,4201 (2,8); 7,4142 (1,8); 7,4081 (0,9); 7,4025 (1,4); 7,3954 (3,5); 7,3863 (5,1); 7,3805 (1,9); 7,3735 (4,1); 7,3646 (7,6); 7,3512 (2,0); 7,3481 (1,6); 7,3425 (3,5); 7,1198 (0,4); 7,1137 (0,8); 7,1084 (2,0); 7,1011 (4,6); 7,0978 (4,3); 7,0953 (4,7); 7,0881 (3,4); 7,0809 (5,0); 7,0751 (3,4); 7,0626 (0,6); 5,7552 (7,0); 4,9795 (7,4); 4,7569 (7,8); 3,7162 (16,0); 3,3724 (10,7); 3,1693 (1,5); 2,6771 (0,8); 2,6726 (1,1); 2,6681 (0,8); 2,6636 (0,5); 2,5427 (0,6); 2,5259 (3,5); 2,5125 (65,6); 2,5081 (128,8); 2,5036 (164,7); 2,4990 (117,6); 2,4946 (56,5); 2,3349 (0,7); 2,3304 (1,0); 2,3258 (0,7); 1,2345 (0,4); -0,0001 (8,0)

I.20-7:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz,  $d_6$ -DMSO):

$\delta$ = 7,5898 (0,7); 7,5824 (6,3); 7,5775 (2,2); 7,5658 (2,5); 7,5607 (8,3); 7,5534 (1,0); 7,5278 (5,4); 7,5231 (2,0); 7,5112 (2,6); 7,5063 (9,1); 7,5008 (1,5); 7,4466 (1,6); 7,4410 (9,0); 7,4360 (2,8); 7,4307 (1,5); 7,4234 (10,0); 7,4194 (7,6); 7,4065 (2,3); 7,4016 (6,4); 7,3942 (0,7); 5,7551 (2,8); 4,9464 (13,7); 4,2104 (2,2); 4,1926 (7,0); 4,1748 (7,0); 4,1571 (2,3); 4,1030 (0,4); 3,3438 (155,0); 2,6767 (0,4); 2,6722 (0,6); 2,6677 (0,4); 2,5254 (1,9); 2,5120 (40,4); 2,5078 (79,5); 2,5033 (102,1); 2,4988 (74,2); 2,4945 (36,6); 2,3345 (0,4); 2,3300 (0,6); 2,3258 (0,4); 1,2265 (7,8); 1,2088 (16,0); 1,1994 (0,9); 1,1910 (7,6); -0,0002 (0,7)

I.53-38:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz,  $d_6$ -DMSO):

$\delta$ = 7,8632 (0,9); 7,8483 (1,1); 7,8412 (1,8); 7,8264 (1,8); 7,8193 (1,1); 7,8044 (0,9); 7,6094 (0,9); 7,6026 (1,0); 7,5867 (1,2); 7,5831 (1,5); 7,5804 (1,5); 7,5768 (1,4); 7,5609 (1,0); 7,5542 (1,0); 7,4934 (0,6); 7,4877 (1,1); 7,4820 (0,6); 7,4703 (1,3); 7,4644 (2,2); 7,4587 (1,2); 7,4470 (0,7); 7,4411 (1,1); 7,4354 (0,6); 7,3854 (0,7); 7,3819 (0,9); 7,3786 (0,8); 7,3616 (1,5); 7,3594 (1,5); 7,3425 (0,8); 7,3393 (0,8); 7,3358 (0,8); 7,1398 (0,5); 7,1265 (2,9); 7,1210 (3,5); 7,1095 (2,7); 7,1064 (3,7); 7,1009 (2,6); 7,0874 (0,4); 5,7566 (3,3); 4,9616 (13,5); 4,8530 (0,9); 4,2089 (2,1); 4,1912 (6,7); 4,1734 (6,8); 4,1556 (2,2); 3,3345 (113,5); 2,6767 (0,5); 2,6723 (0,6); 2,6676 (0,4); 2,5256 (2,1); 2,5119 (42,8); 2,5078 (83,0); 2,5033 (105,4); 2,4988 (76,4); 2,4945 (37,9); 2,3346 (0,4); 2,3301

(0,6); 2,3258 (0,4); 1,2346 (0,5); 1,2188 (7,7); 1,2011 (16,0); 1,1833 (7,4); -0,0002 (6,0)

I.12-7:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,5742 (4,4); 7,5716 (5,1); 7,5524 (6,5); 7,5498 (6,4); 7,4946 (3,1); 7,4809 (3,7); 7,4731 (4,2); 7,4595 (3,7); 7,4246 (0,7); 7,4173 (5,4); 7,4129 (6,1); 7,4005 (1,6); 7,3954 (4,9); 7,3912 (4,3); 7,3084 (4,2); 7,2863 (7,7); 7,2641 (3,5); 5,7554 (6,7); 4,9689 (7,7); 4,8249 (5,1); 3,7141 (16,0); 3,5267 (0,4); 3,3426 (25,8); 3,1689 (0,6); 2,6765 (0,6); 2,6722 (0,7); 2,6677 (0,6); 2,5255 (2,4); 2,5119 (47,1); 2,5077 (94,2); 2,5032 (122,0); 2,4986 (89,2); 2,4943 (44,6); 2,3345 (0,5); 2,3300 (0,7); 2,3255 (0,5); -0,0002 (3,5)

I.53-7:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,6094 (0,6); 7,6020 (5,8); 7,5968 (2,2); 7,5853 (2,2); 7,5799 (8,0); 7,5727 (1,0); 7,4781 (0,6); 7,4722 (1,1); 7,4662 (0,8); 7,4605 (1,2); 7,4532 (9,2); 7,4483 (4,1); 7,4432 (1,6); 7,4363 (2,3); 7,4311 (6,7); 7,4254 (1,5); 7,4198 (0,6); 7,1525 (0,5); 7,1396 (2,7); 7,1339 (3,1); 7,1229 (2,3); 7,1193 (3,2); 7,1137 (2,3); 7,1066 (0,4); 7,1009 (0,4); 5,7554 (2,8); 4,9575 (12,4); 4,8562 (1,2); 4,2134 (2,0); 4,1956 (6,6); 4,1779 (6,7); 4,1601 (2,2); 3,3428 (178,8); 2,6770 (0,4); 2,6725 (0,6); 2,6679 (0,4); 2,5260 (1,8); 2,5211 (2,8); 2,5125 (37,2); 2,5080 (76,2); 2,5035 (99,6); 2,4989 (72,0); 2,4944 (35,2); 2,3348 (0,4); 2,3303 (0,6); 2,3258 (0,4); 1,2299 (7,6); 1,2121 (16,0); 1,1944 (7,4); 1,1816 (0,4); -0,0002 (2,8)

I.21-1:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,5250 (0,6); 7,5191 (0,8); 7,5104 (2,9); 7,4995 (11,0); 7,4935 (15,8); 7,4900 (13,9); 7,4850 (13,8); 7,4776 (8,5); 7,4721 (14,5); 7,4665 (2,9); 7,4163 (16,0); 7,4114 (5,0); 7,3946 (11,1); 7,3879 (8,3); 7,3789 (5,7); 7,3773 (5,7); 7,3686 (5,0); 7,3634 (4,1); 7,3532 (0,5); 5,7553 (10,7); 4,9715 (5,2); 4,7608 (8,6); 3,8970 (0,4); 3,8835 (0,4); 3,7946 (0,5); 3,7862 (0,5); 3,7149 (11,6); 3,3814 (15,4); 3,1691 (3,9); 3,0012 (0,5); 2,9505 (0,4); 2,8917 (0,4); 2,6770 (1,0); 2,6725 (1,2); 2,6681 (1,0); 2,5259 (4,0); 2,5124 (75,5); 2,5081 (148,0); 2,5036 (189,1); 2,4990 (136,2); 2,4947 (66,2); 2,3349 (0,8); 2,3304 (1,1); 2,3259 (0,8); 1,2342 (0,3); 0,9009 (0,5); -0,0001 (5,0)

I.21-7:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,5813 (3,8); 7,5746 (4,2); 7,5593 (5,6); 7,5526 (5,2); 7,5268 (3,8); 7,5237 (4,1); 7,5056 (6,9); 7,5024 (6,2); 7,4434 (10,1); 7,4275 (7,0); 7,4217 (8,8); 7,4060 (4,0); 7,3974 (3,7); 5,7537 (4,2); 4,9727 (7,6); 4,7744 (4,1); 3,7140 (16,0); 3,6925 (0,5); 3,6698 (0,5); 3,6384 (0,6); 3,5783 (0,9); 3,3719 (61,7); 3,1700 (1,1); 2,6781 (0,7); 2,6737 (0,9); 2,6693 (0,7); 2,5266 (3,2); 2,5090 (114,8); 2,5047 (142,3); 2,5003 (103,2); 2,3356 (0,6); 2,3313 (0,9); -0,0001 (0,4)

I.54-7:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 8,3135 (0,4); 7,6003 (3,2); 7,5949 (2,5); 7,5888 (12,1); 7,5841 (5,5); 7,5783 (5,3); 7,5671 (16,0); 7,4715 (0,8); 7,4652 (2,0); 7,4560 (6,1); 7,4445 (15,7); 7,4364 (8,0); 7,4228 (11,4); 7,4133 (3,1); 7,1338 (6,6); 7,1285 (7,7); 7,1140 (7,5); 7,0954 (1,0); 5,7544 (13,4); 4,9841 (6,2); 4,7446 (7,7); 4,1462 (0,3); 4,1306 (0,4); 4,1146 (0,4); 4,1000 (0,4); 4,0663 (0,4); 4,0524 (0,4); 4,0384 (0,4); 4,0253 (0,5); 3,9893 (0,5); 3,8978 (0,7); 3,8336 (0,9); 3,7773 (1,1); 3,7161 (14,7); 3,4038 (46,2); 3,1695 (4,8); 3,1185 (1,6); 3,0735 (1,2); 3,0294 (0,9); 2,9594 (0,7); 2,8915 (0,6); 2,8277 (0,4); 2,7946 (0,4); 2,7810 (0,4); 2,7639 (0,4); 2,7317 (0,4); 2,7192 (0,3); 2,6779 (1,5); 2,6734 (2,0); 2,6688 (1,5); 2,5827 (0,4); 2,5690 (0,4); 2,5267 (6,4); 2,5133 (119,0); 2,5089 (235,7); 2,5043 (303,1); 2,4998 (218,4); 2,4954 (106,6); 2,3357 (1,3); 2,3311 (1,8); 2,3265 (1,4); 1,9086 (0,4); 1,2346 (0,4); -0,0002 (1,4)

I.54-1:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,5360 (2,5); 7,5278 (4,6); 7,5203 (11,4); 7,5113 (13,5); 7,5046 (16,0); 7,4948 (2,4); 7,4459 (0,7); 7,4263 (4,5); 7,4175 (9,4); 7,4086 (10,4); 7,4034 (8,6); 7,3994 (8,3); 7,3934 (6,2); 7,3857 (2,2); 7,3795 (2,5); 7,3738 (1,3); 7,0842 (1,9); 7,0815 (2,0); 7,0717 (6,1); 7,0665 (8,0); 7,0516 (7,1); 7,0462 (5,3); 7,0335 (1,0); 5,7563 (10,8); 4,9837 (5,5); 4,6672 (12,6); 3,7173 (11,5); 3,5728 (1,5); 3,3893 (4,6); 3,1688 (1,9); 3,1224 (0,8); 2,8912 (2,0); 2,7314 (1,5); 2,6764 (0,8); 2,6719 (1,1); 2,6675 (0,8); 2,5252 (1,6); 2,5073 (170,7); 2,5029 (221,8); 2,4984 (165,3); 2,3342 (1,4); 2,3297 (1,7); 2,3253 (1,4); 2,1774 (0,3); 1,2344 (1,7); 0,0080 (0,4); -0,0002 (13,2); -0,0083 (0,7)

I.2-42:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,5390 (0,3); 7,5297 (0,7); 7,5275 (0,6); 7,5174 (1,8); 7,5078 (1,4); 7,5053 (1,7); 7,4958 (1,5); 7,4858 (0,8); 7,4734 (1,0); 7,4637 (16,0); 7,4525 (10,1); 7,4402 (1,2); 7,4343 (1,9); 7,4285 (1,1); 7,4167 (0,6); 7,4109 (0,9); 7,4052 (0,5); 7,2189 (0,4); 7,2063 (2,6); 7,2007 (2,8); 7,1871 (2,9); 7,1816 (2,4); 7,1694 (0,4); 5,7547 (1,6); 4,9607 (12,1); 4,2195 (1,8); 4,2017 (5,9); 4,1934 (0,5); 4,1840 (5,9); 4,1662 (1,9); 3,3535 (182,3); 2,6775 (0,3); 2,6729 (0,4); 2,6684 (0,3); 2,5263 (1,5); 2,5128 (30,5); 2,5085 (60,2); 2,5039 (77,2); 2,4994 (55,7); 2,4951 (27,3); 2,3352 (0,3); 2,3307 (0,5); 2,3262 (0,3); 1,2356 (6,8); 1,2179 (14,3); 1,2001 (6,8)

I.11-42:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,5351 (3,1); 7,5298 (1,5); 7,5216 (3,7); 7,5162 (2,6); 7,5129 (4,1); 7,5047 (1,9); 7,4994 (3,7); 7,4922 (0,5); 7,4773 (0,6); 7,4716 (1,1); 7,4661 (0,7); 7,4540 (1,2); 7,4483 (2,1); 7,4428 (1,4); 7,4306 (0,7); 7,4249 (1,1); 7,4197 (0,6); 7,3398 (0,5); 7,3325 (4,0); 7,3274 (1,4); 7,3103 (7,1); 7,2932 (1,2); 7,2882 (3,2); 7,2454 (0,5); 7,2324 (3,4); 7,2269 (3,6); 7,2135 (3,8); 7,2082 (3,1); 7,1954 (0,5); 5,7560 (2,9); 4,9560 (13,8); 4,8497 (1,2); 4,2170 (2,1); 4,1992 (6,8); 4,1815 (6,9); 4,1637 (2,2); 3,3366 (137,2); 2,6764 (0,5); 2,6720 (0,6); 2,6675 (0,5); 2,5253 (2,2); 2,5118 (42,9); 2,5076 (83,3); 2,5031 (106,3); 2,4986 (77,0); 2,4943 (38,0); 2,3344 (0,5); 2,3298 (0,6); 2,3253 (0,4); 1,2340 (8,0); 1,2163 (16,0); 1,1985 (7,6); -0,0002 (5,0)

I.41-42:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,7488 (0,9); 7,7327 (1,2); 7,7275 (1,7); 7,7116 (1,8); 7,7065 (1,2); 7,6903 (0,9); 7,4476 (1,0); 7,4416 (1,0); 7,4211 (2,5); 7,4157 (2,0); 7,4037 (1,4); 7,3980 (3,0); 7,3921 (2,2); 7,3805 (0,7); 7,3747 (1,0); 7,3691 (0,6); 7,3329 (1,0); 7,3276 (0,9); 7,3121 (1,8); 7,3064 (1,7); 7,2918 (0,9); 7,2852 (0,8); 7,1644 (0,5); 7,1517 (3,1); 7,1463 (3,3); 7,1326 (3,5); 7,1273 (2,8); 7,1146 (0,5); 5,7559 (3,3); 4,9823 (13,0); 4,8752 (0,9); 4,2198 (2,0); 4,2020 (6,6); 4,1843 (6,7); 4,1665 (2,1); 3,3382 (144,4); 2,6769 (0,4); 2,6724 (0,6); 2,6678 (0,4); 2,5258 (1,9); 2,5124 (38,7); 2,5080 (75,5); 2,5035 (96,1); 2,4989 (68,9); 2,4945 (33,4); 2,3348 (0,4); 2,3304 (0,6); 2,3258 (0,4); 1,2317 (7,9); 1,2139 (16,0);

1,1962 (7,4); -0,0002 (5,5)

I.3-42:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,5264 (0,7); 7,5142 (1,3); 7,5035 (1,4); 7,5002 (1,0); 7,4924 (1,3); 7,4819 (0,6); 7,4749 (0,9); 7,4638 (16,0); 7,4535 (6,9); 7,4321 (1,2); 7,4266 (1,6); 7,4209 (0,9); 7,4089 (0,5); 7,4032 (0,8); 7,3975 (0,4); 7,2136 (0,4); 7,2004 (2,3); 7,1952 (2,4); 7,1818 (2,5); 7,1764 (2,0); 7,1633 (0,3); 5,7557 (2,7); 4,9872 (0,4); 4,8346 (6,6); 3,7214 (0,9); 3,4715 (0,6); 3,3427 (3,5); 3,1690 (5,8); 2,6719 (0,4); 2,5252 (1,3); 2,5117 (25,0); 2,5074 (49,5); 2,5029 (63,6); 2,4984 (45,7); 2,4940 (22,3); 2,3299 (0,4); -0,0002 (3,6)

I.20-38:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,8278 (0,9); 7,8129 (1,0); 7,8057 (1,8); 7,7910 (1,8); 7,7838 (1,1); 7,7690 (0,9); 7,5930 (1,0); 7,5862 (1,0); 7,5702 (1,2); 7,5668 (1,5); 7,5637 (1,5); 7,5604 (1,3); 7,5445 (1,0); 7,5376 (1,0); 7,5246 (5,0); 7,5196 (2,0); 7,5078 (2,5); 7,5027 (8,9); 7,4970 (1,5); 7,4439 (8,5); 7,4387 (2,5); 7,4269 (2,0); 7,4220 (5,0); 7,3568 (0,7); 7,3535 (0,8); 7,3500 (0,8); 7,3332 (1,4); 7,3311 (1,4); 7,3141 (0,7); 7,3107 (0,8); 7,3073 (0,7); 5,7567 (3,2); 4,9474 (13,2); 4,2058 (2,1); 4,1881 (6,6); 4,1703 (6,7); 4,1525 (2,2); 3,3312 (74,7); 2,6766 (0,4); 2,6719 (0,6); 2,6674 (0,5); 2,5253 (2,2); 2,5117 (40,0); 2,5075 (78,9); 2,5030 (101,7); 2,4984 (73,9); 2,4941 (36,7); 2,3343 (0,4); 2,3298 (0,6); 2,3253 (0,4); 1,2353 (1,1); 1,2158 (7,7); 1,1980 (16,0); 1,1803 (7,4); -0,0002 (6,6)

I.53-42:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,5100 (1,0); 7,5044 (1,7); 7,4988 (1,0); 7,4866 (2,0); 7,4810 (3,4); 7,4755 (1,9); 7,4632 (1,1); 7,4576 (1,7); 7,4522 (0,9); 7,2905 (0,4); 7,2779 (2,8); 7,2723 (3,0); 7,2589 (3,1); 7,2534 (2,5); 7,2468 (0,6); 7,2407 (0,4); 7,2009 (0,5); 7,1879 (2,5); 7,1823 (3,0); 7,1712 (2,1); 7,1679 (3,1); 7,1622 (2,3); 7,1494 (0,4); 5,7558 (3,1); 4,9714 (12,7); 4,2192 (2,0); 4,2014 (6,4); 4,1837 (6,5); 4,1659 (2,1); 3,3412 (151,0); 2,6769 (0,4); 2,6724 (0,5); 2,6678 (0,4); 2,5259 (1,6); 2,5210 (2,9); 2,5124 (36,3); 2,5080 (72,4); 2,5035 (93,5); 2,4989 (67,2); 2,4944 (32,5); 2,3348 (0,4); 2,3303 (0,6); 2,3257 (0,4); 1,2358 (7,6); 1,2180 (16,0); 1,2002 (7,4); -0,0002 (1,7)

I.20-42:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,5501 (4,8); 7,5450 (2,0); 7,5334 (2,6); 7,5282 (9,4); 7,5227 (1,8); 7,4814 (9,4); 7,4762 (3,1); 7,4645 (3,0); 7,4596 (6,1); 7,4434 (0,7); 7,4376 (1,0); 7,4320 (0,6); 7,2684 (0,5); 7,2556 (3,1); 7,2502 (3,4); 7,2367 (3,4); 7,2314 (2,7); 7,2189 (0,5); 5,7548 (2,4); 4,9586 (12,8); 4,8492 (0,4); 4,2162 (2,2); 4,1984 (6,6); 4,1806 (6,7); 4,1629 (2,2); 3,3477 (250,3); 2,6773 (0,4); 2,6727 (0,6); 2,6681 (0,5); 2,5661 (0,3); 2,5263 (1,9); 2,5127 (40,2); 2,5084 (79,5); 2,5039 (101,9); 2,4993 (74,1); 2,4950 (36,8); 2,3353 (0,4); 2,3307 (0,6); 2,3260 (0,4); 1,2331 (7,7); 1,2154 (16,0); 1,1976 (7,6); 1,1741 (0,5); -0,0002 (0,5)

I.12-42:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,5350 (4,6); 7,5299 (2,3); 7,5214 (5,4); 7,5130 (6,2); 7,5047 (2,7); 7,4995 (5,6); 7,4761 (0,3); 7,4702 (0,6); 7,4642 (0,4); 7,4509 (1,6); 7,4469 (1,7); 7,4330 (1,5); 7,4275 (2,6); 7,4099 (0,8); 7,4041 (1,2); 7,3987 (0,7); 7,3312 (2,5); 7,3259 (4,8); 7,3090 (5,4); 7,3037 (8,2); 7,2867 (2,9); 7,2815 (3,5); 7,2386 (1,7); 7,2329 (1,9); 7,2194 (2,4); 7,2112 (4,1); 7,2057 (3,9); 7,1922 (4,0); 7,1869 (3,2); 7,1739 (0,5); 5,7540 (5,0); 4,9822 (7,4); 4,7468 (7,4); 3,9017 (0,4); 3,8715 (0,4); 3,8287 (0,4); 3,7488 (0,7); 3,7193 (16,0); 3,3970 (30,3); 3,1696 (1,9); 3,0541 (0,6); 2,6778 (0,8); 2,6734 (1,1); 2,6690 (0,8); 2,5266 (3,8); 2,5131 (64,8); 2,5089 (124,0); 2,5044 (156,8); 2,4999 (112,2); 2,4955 (54,4); 2,3357 (0,7); 2,3311 (0,9); 2,3266 (0,6); 1,2351 (0,5); -0,0002 (0,5)

I.42-42:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,7549 (0,9); 7,7337 (2,1); 7,7161 (2,1); 7,6965 (1,0); 7,4432 (1,2); 7,4408 (1,2); 7,4376 (1,2); 7,4169 (3,1); 7,4113 (2,6); 7,4052 (1,6); 7,3989 (1,9); 7,3935 (3,0); 7,3878 (3,1); 7,3820 (1,6); 7,3760 (0,9); 7,3702 (1,0); 7,3645 (1,0); 7,3588 (0,6); 7,3313 (1,4); 7,3254 (1,3); 7,3099 (2,5); 7,3043 (2,3); 7,2890 (1,3); 7,2829 (1,1); 7,1614 (1,8); 7,1559 (2,2); 7,1423 (4,6); 7,1373 (4,4); 7,1238 (3,4); 7,1187 (2,6); 7,1056 (0,5); 5,7566 (7,2); 5,0078 (7,6); 4,8263 (6,7); 3,7231 (16,0); 3,5733 (0,4); 3,5353 (0,5); 3,3385 (7,5); 3,1691 (1,0); 2,6767 (0,7); 2,6721 (0,9); 2,6676 (0,7); 2,5424 (0,5); 2,5255 (3,1); 2,5120 (60,2); 2,5077 (119,0); 2,5032 (153,1); 2,4986 (110,5); 2,4942 (54,4); 2,3345 (0,7);

2,3300 (0,9); 2,3254 (0,6); 1,2349 (0,7); 0,8843 (0,3); -0,0001 (9,2); -0,0084 (0,3)

I.54-42:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 8,3138 (0,3); 7,5085 (0,6); 7,5028 (1,1); 7,4958 (1,4); 7,4896 (2,5); 7,4841 (3,2); 7,4793 (2,9); 7,4724 (2,9); 7,4663 (4,7); 7,4606 (4,7); 7,4554 (2,7); 7,4492 (1,7); 7,4430 (2,4); 7,4373 (2,1); 7,4317 (0,8); 7,2827 (1,7); 7,2771 (2,0); 7,2636 (2,6); 7,2577 (5,3); 7,2520 (4,6); 7,2386 (4,7); 7,2332 (3,6); 7,2015 (0,9); 7,1954 (1,0); 7,1892 (2,2); 7,1826 (5,1); 7,1793 (4,7); 7,1768 (5,0); 7,1737 (4,0); 7,1658 (4,4); 7,1627 (5,6); 7,1568 (3,5); 7,1504 (0,9); 7,1442 (0,6); 5,7544 (6,7); 4,9983 (7,2); 4,7426 (8,3); 3,9581 (0,3); 3,9416 (0,4); 3,9228 (0,4); 3,9033 (0,4); 3,8028 (0,6); 3,7852 (0,6); 3,7547 (0,7); 3,7210 (16,0); 3,3990 (28,9); 3,1696 (2,0); 2,9847 (0,4); 2,9591 (0,4); 2,6780 (1,0); 2,6734 (1,2); 2,6688 (1,0); 2,5436 (2,6); 2,5267 (4,1); 2,5133 (76,2); 2,5089 (148,0); 2,5044 (187,8); 2,4998 (133,6); 2,4954 (64,0); 2,3357 (0,8); 2,3311 (1,1); 2,3267 (0,8); -0,0002 (0,8)

I.1-7:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,5755 (0,6); 7,5681 (6,0); 7,5628 (2,1); 7,5514 (2,2); 7,5459 (7,9); 7,5387 (1,0); 7,5044 (0,3); 7,4985 (0,4); 7,4954 (0,5); 7,4928 (0,6); 7,4882 (0,7); 7,4831 (1,5); 7,4769 (1,2); 7,4731 (1,1); 7,4694 (1,5); 7,4681 (1,6); 7,4613 (1,6); 7,4525 (1,2); 7,4500 (1,4); 7,4459 (0,8); 7,4320 (7,4); 7,4307 (7,1); 7,4260 (7,3); 7,4188 (9,9); 7,4096 (1,5); 7,4022 (8,2); 7,3968 (2,4); 7,3854 (2,1); 7,3801 (6,1); 7,3727 (0,6); 5,7542 (1,9); 4,9465 (12,7); 4,8475 (0,9); 4,2131 (2,0); 4,1954 (6,4); 4,1776 (6,5); 4,1599 (2,0); 3,3565 (141,8); 2,6774 (0,4); 2,6729 (0,5); 2,6684 (0,4); 2,5264 (1,6); 2,5216 (2,6); 2,5129 (32,1); 2,5085 (65,1); 2,5039 (84,6); 2,4993 (60,3); 2,4948 (28,9); 2,3353 (0,4); 2,3307 (0,5); 2,3261 (0,4); 1,2287 (7,5); 1,2109 (16,0); 1,1931 (7,3); -0,0002 (0,9)

I.41-7:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,7284 (0,9); 7,7121 (1,3); 7,7071 (1,9); 7,6910 (2,0); 7,6863 (1,3); 7,6699 (1,0); 7,5397 (0,8); 7,5326 (7,0); 7,5278 (2,6); 7,5157 (2,8); 7,5107 (8,9); 7,5035 (1,1); 7,4186 (1,1); 7,4126 (1,2); 7,3920 (1,8); 7,3896 (1,9); 7,3691 (1,2); 7,3630 (1,3); 7,3431 (8,3); 7,3381 (2,6); 7,3211 (6,6); 7,3135 (0,8); 7,3047 (1,2); 7,2991 (1,1); 7,2835 (2,1); 7,2778 (1,9); 7,2625 (1,1); 7,2568 (1,0); 5,7553 (2,8); 4,9651 (13,8); 4,8652 (1,6); 4,2138

(2,2); 4,1960 (7,0); 4,1783 (7,1); 4,1605 (2,3); 3,3453 (218,0); 3,2760 (0,3); 2,6771 (0,5); 2,6727 (0,7); 2,6683 (0,5); 2,5259 (2,3); 2,5082 (94,0); 2,5038 (119,8); 2,4993 (87,8); 2,3788 (0,4); 2,3351 (0,5); 2,3305 (0,7); 2,3264 (0,5); 1,2254 (7,8); 1,2077 (16,0); 1,1899 (7,6); -0,0001 (0,5)

I.3-7:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,5666 (3,9); 7,5607 (7,0); 7,5554 (2,4); 7,5499 (1,8); 7,5444 (6,6); 7,5386 (8,6); 7,5314 (1,1); 7,4990 (0,5); 7,4940 (0,8); 7,4905 (1,2); 7,4838 (1,4); 7,4789 (2,2); 7,4734 (1,6); 7,4685 (2,7); 7,4619 (1,5); 7,4582 (2,1); 7,4516 (1,7); 7,4488 (1,7); 7,4299 (16,0); 7,4280 (15,7); 7,4192 (14,8); 7,4069 (6,3); 7,3994 (8,6); 7,3941 (2,8); 7,3903 (1,9); 7,3848 (4,3); 7,3773 (6,5); 7,3700 (0,7); 5,7542 (6,5); 4,9727 (7,3); 4,8040 (8,5); 3,7161 (15,6); 3,3663 (27,0); 3,1695 (1,8); 2,6773 (0,7); 2,6728 (0,9); 2,6684 (0,7); 2,5509 (0,3); 2,5262 (2,7); 2,5127 (52,8); 2,5084 (104,0); 2,5039 (133,4); 2,4993 (96,4); 2,4949 (47,1); 2,3352 (0,6); 2,3306 (0,8); 2,3261 (0,6); -0,0002 (0,4)

I.20-1:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,5196 (0,9); 7,5154 (1,1); 7,5103 (4,1); 7,5073 (4,2); 7,4995 (11,2); 7,4934 (9,9); 7,4834 (3,5); 7,4784 (9,1); 7,4728 (1,8); 7,4202 (1,5); 7,4145 (8,8); 7,4095 (2,8); 7,3974 (2,8); 7,3928 (9,1); 7,3868 (2,9); 7,3840 (3,4); 7,3815 (3,2); 7,3740 (3,1); 7,3684 (2,8); 7,3583 (0,3); 5,7565 (2,8); 4,9452 (13,7); 4,2118 (2,1); 4,1940 (6,8); 4,1763 (6,9); 4,1585 (2,2); 3,3337 (49,1); 2,6761 (0,4); 2,6715 (0,5); 2,6670 (0,4); 2,5249 (1,6); 2,5115 (33,8); 2,5071 (68,1); 2,5026 (88,9); 2,4981 (64,7); 2,4937 (32,0); 2,3340 (0,4); 2,3294 (0,5); 2,3248 (0,4); 1,2268 (7,7); 1,2091 (16,0); 1,1994 (0,8); 1,1913 (7,5); -0,0002 (5,6)

I.53-1:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,5475 (0,5); 7,5372 (5,3); 7,5289 (6,2); 7,5209 (6,8); 7,5107 (0,9); 7,4504 (0,6); 7,4443 (1,2); 7,4387 (0,9); 7,4313 (3,8); 7,4279 (3,1); 7,4214 (4,5); 7,4151 (3,4); 7,4105 (1,9); 7,4071 (2,7); 7,3980 (1,2); 7,3922 (0,6); 7,0957 (0,4); 7,0829 (2,5); 7,0773 (3,1); 7,0658 (2,1); 7,0624 (3,2); 7,0568 (2,4); 7,0501 (0,5); 7,0440 (0,4); 5,7555 (2,2); 4,9567 (13,6); 4,2151 (2,1); 4,1974 (6,7); 4,1796 (6,8); 4,1619 (2,2); 3,3395 (176,2); 2,6767 (0,4); 2,6722 (0,5); 2,6677 (0,3); 2,5257 (1,5); 2,5121 (30,9); 2,5078 (61,7);

2,5032 (79,6); 2,4987 (57,2); 2,4942 (27,7); 2,3344 (0,4); 2,3301 (0,5); 2,3255 (0,4); 1,2301 (7,7); 1,2124 (16,0); 1,1946 (7,4); -0,0002 (3,4)

I.5-38:  $^1\text{H-NMR}$ (300,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,6719 (1,0); 7,6522 (1,2); 7,6426 (2,1); 7,6229 (2,2); 7,6135 (1,8); 7,5893 (2,5); 7,5833 (3,5); 7,5628 (4,1); 7,5583 (4,1); 7,5440 (2,0); 7,5380 (3,3); 7,5139 (1,6); 7,5086 (1,7); 7,5052 (1,7); 7,5001 (1,4); 7,4789 (1,2); 7,4697 (1,2); 7,3466 (1,9); 7,3436 (2,1); 7,3201 (3,1); 7,3135 (2,2); 7,2963 (1,6); 7,2930 (1,7); 7,2837 (1,8); 7,2779 (2,0); 7,2637 (1,1); 7,2587 (1,2); 7,2492 (2,2); 7,2317 (1,6); 7,2064 (0,8); 7,2017 (0,8); 7,1973 (0,8); 7,1930 (0,7); 4,9630 (13,9); 4,2226 (2,2); 4,1989 (6,9); 4,1752 (7,0); 4,1515 (2,3); 3,3313 (76,8); 2,5194 (9,8); 2,5137 (17,9); 2,5078 (22,8); 2,5019 (16,0); 2,0808 (2,6); 1,2284 (7,8); 1,2047 (16,0); 1,1811 (7,5); 0,0164 (0,9); 0,0055 (15,8); -0,0056 (0,8)

I.45-38:  $^1\text{H-NMR}$ (300,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,7771 (1,9); 7,7709 (1,9); 7,6685 (0,4); 7,6486 (0,5); 7,6333 (1,2); 7,6198 (0,9); 7,6055 (2,5); 7,5903 (0,5); 7,5731 (1,5); 7,5668 (1,4); 7,5449 (0,6); 7,5385 (0,7); 7,5243 (0,4); 7,4967 (0,7); 7,4683 (0,4); 7,4587 (0,4); 7,2561 (0,4); 7,2321 (0,6); 7,2044 (0,4); 4,8552 (4,4); 3,3376 (5,3); 2,5172 (12,8); 2,5120 (16,0); 0,0099 (4,9)

I.45-38:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,7609 (5,6); 7,7561 (5,9); 7,6475 (1,1); 7,6326 (1,4); 7,6256 (2,4); 7,6166 (4,1); 7,6109 (2,6); 7,6036 (1,7); 7,5958 (7,6); 7,5892 (1,5); 7,5584 (4,5); 7,5535 (4,3); 7,5376 (2,3); 7,5326 (2,3); 7,5073 (1,2); 7,5005 (1,3); 7,4844 (1,5); 7,4793 (1,8); 7,4744 (1,6); 7,4584 (1,2); 7,4516 (1,2); 7,2441 (0,9); 7,2408 (1,0); 7,2373 (1,0); 7,2206 (1,8); 7,2013 (0,8); 7,1981 (0,9); 7,1945 (0,8); 4,8506 (16,0); 3,3137 (9,2); 2,8917 (0,4); 2,7324 (0,4); 2,5111 (10,6); 2,5069 (22,2); 2,5024 (30,4); 2,4980 (21,9); 2,4940 (10,5); 2,0743 (0,9); 0,0091 (0,8); 0,0011 (21,6); -0,0070 (0,8)

I.45-38:  $^1\text{H-NMR}$ (400,0 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,7616 (2,6); 7,7567 (2,8); 7,6333 (0,5); 7,6260 (1,0); 7,6147 (1,8); 7,6116 (1,1); 7,6040 (0,6); 7,5939 (3,2); 7,5571 (2,2); 7,5521 (2,1); 7,5363 (1,2); 7,5312 (1,1);

7,5008 (0,5); 7,4852 (0,6); 7,4811 (0,7); 7,4745 (0,6); 7,4589 (0,5); 7,4520 (0,5); 7,2203 (0,6); 4,9800 (7,0); 3,7118 (16,0); 3,4255 (2,9); 2,5200 (0,6); 2,5113 (8,3); 2,5067 (17,8); 2,5021 (24,8); 2,4976 (17,4); 2,4930 (7,9); 2,0736 (0,6); -0,0002 (0,5)

I.42-48:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,7572 (3,0); 7,7432 (3,3); 7,7350 (3,5); 7,7211 (3,3); 7,6853 (4,0); 7,6784 (3,7); 7,6698 (1,2); 7,6639 (4,2); 7,6571 (3,5); 7,6086 (1,5); 7,5923 (2,1); 7,5874 (3,3); 7,5712 (3,3); 7,5665 (2,3); 7,5501 (1,7); 7,4083 (2,4); 7,4012 (2,5); 7,3962 (2,4); 7,3882 (4,5); 7,3808 (3,5); 7,3661 (5,0); 7,3591 (2,4); 7,3465 (1,8); 7,3406 (1,8); 7,2277 (1,8); 7,2228 (1,7); 7,2071 (3,3); 7,2015 (3,1); 7,1854 (1,6); 7,1804 (1,5); 5,7544 (11,3); 4,9687 (3,3); 4,8394 (16,0); 3,7059 (7,1); 3,3573 (134,6); 3,1699 (1,7); 3,1230 (0,4); 2,6779 (1,0); 2,6734 (1,3); 2,6690 (1,0); 2,5266 (4,3); 2,5129 (93,9); 2,5089 (176,5); 2,5044 (220,6); 2,4999 (159,7); 2,4958 (79,1); 2,3356 (1,0); 2,3311 (1,3); 2,3268 (1,0); 0,0079 (0,5); -0,0001 (11,0); -0,0084 (0,4)

I.45-38:  $^1\text{H-NMR}$ (300,1 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,7771 (1,9); 7,7709 (1,9); 7,6685 (0,4); 7,6486 (0,5); 7,6333 (1,2); 7,6198 (0,9); 7,6055 (2,5); 7,5903 (0,5); 7,5731 (1,5); 7,5668 (1,4); 7,5449 (0,6); 7,5385 (0,7); 7,5243 (0,4); 7,4967 (0,7); 7,4683 (0,4); 7,4587 (0,4); 7,2561 (0,4); 7,2321 (0,6); 7,2044 (0,4); 4,8552 (4,4); 3,3376 (5,3); 2,5172 (12,8); 2,5120 (16,0); 0,0099 (4,9)

I.12-4:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,4863 (0,6); 7,4790 (4,1); 7,4716 (4,3); 7,4656 (5,7); 7,4591 (6,4); 7,4567 (7,0); 7,4488 (7,2); 7,4430 (6,3); 7,4366 (5,4); 7,4284 (0,7); 7,3751 (0,6); 7,3668 (5,1); 7,3610 (1,5); 7,3452 (7,4); 7,3285 (1,3); 7,3229 (3,4); 7,3145 (0,4); 7,2996 (0,6); 7,2924 (4,8); 7,2870 (1,5); 7,2701 (8,4); 7,2649 (1,8); 7,2530 (1,5); 7,2478 (3,8); 7,2405 (0,4); 5,7551 (11,7); 4,9636 (0,4); 4,8397 (16,0); 3,7142 (0,8); 3,3470 (49,3); 3,1728 (0,6); 3,1673 (0,6); 2,6769 (0,5); 2,6726 (0,6); 2,6680 (0,5); 2,5429 (0,4); 2,5260 (2,1); 2,5125 (40,6); 2,5081 (80,4); 2,5036 (103,4); 2,4990 (74,3); 2,4946 (36,0); 2,3348 (0,4); 2,3304 (0,6); 2,3258 (0,4); -0,0002 (0,6)

I.21-42:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,5479 (6,8); 7,5428 (2,7); 7,5313 (3,6); 7,5261 (14,2); 7,5208 (2,5); 7,4894 (2,4); 7,4841 (14,0); 7,4789 (5,3); 7,4674 (2,9); 7,4622 (8,2); 7,4557 (3,6); 7,4497 (1,8); 7,4379 (1,0); 7,4320 (1,5); 7,4264 (0,8); 7,2734 (0,4); 7,2662 (0,8); 7,2534 (4,3); 7,2481 (4,6); 7,2348 (4,8); 7,2294 (3,8); 7,2164 (0,6); 5,7551 (16,0); 4,9849 (1,1); 4,8415 (14,5); 3,7184 (2,6); 3,6500 (0,3); 3,3505 (18,7); 3,1692 (1,8); 2,6771 (0,7); 2,6725 (0,9); 2,6681 (0,7); 2,6639 (0,4); 2,5661 (0,4); 2,5428 (0,5); 2,5259 (2,9); 2,5210 (4,6); 2,5125 (55,5); 2,5081 (111,0); 2,5036 (143,4); 2,4990 (103,3); 2,4946 (50,2); 2,3350 (0,6); 2,3304 (0,8); 2,3258 (0,6); -0,0002 (0,9)

I.41-38:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,6756 (1,0); 7,6605 (1,7); 7,6538 (1,9); 7,6390 (3,4); 7,6319 (1,2); 7,6228 (1,9); 7,6175 (2,0); 7,6017 (1,0); 7,5482 (0,9); 7,5413 (0,9); 7,5253 (1,1); 7,5214 (1,4); 7,5151 (1,1); 7,4992 (0,9); 7,4923 (0,9); 7,4161 (1,0); 7,4100 (1,0); 7,3867 (1,8); 7,3741 (0,7); 7,3660 (1,2); 7,3636 (1,2); 7,3602 (1,2); 7,3512 (0,7); 7,3187 (0,6); 7,2974 (0,8); 7,2745 (0,4); 7,2609 (1,7); 7,2545 (1,6); 7,2384 (3,0); 7,2336 (2,7); 7,2182 (1,5); 7,2119 (1,3); 4,9552 (13,3); 4,2181 (0,3); 4,2129 (0,4); 4,2056 (2,1); 4,1952 (1,3); 4,1878 (6,6); 4,1775 (1,4); 4,1701 (6,7); 4,1596 (0,6); 4,1523 (2,2); 3,3303 (91,3); 2,6759 (0,5); 2,6714 (0,7); 2,6669 (0,5); 2,5418 (1,2); 2,5248 (2,2); 2,5112 (49,5); 2,5069 (98,6); 2,5024 (126,9); 2,4979 (92,1); 2,4936 (45,4); 2,3896 (0,4); 2,3339 (0,6); 2,3292 (0,8); 2,3248 (0,6); 1,2584 (0,4); 1,2381 (1,2); 1,2246 (1,9); 1,2151 (7,7); 1,2069 (3,0); 1,1974 (16,0); 1,1892 (1,7); 1,1796 (7,4); -0,0002 (0,6)

I.11-7:  $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, d<sub>6</sub>-DMSO):

$\delta$ = 7,5835 (0,7); 7,5761 (6,4); 7,5712 (2,5); 7,5594 (2,5); 7,5541 (8,8); 7,5469 (1,2); 7,4920 (3,1); 7,4867 (1,4); 7,4786 (3,6); 7,4751 (2,6); 7,4698 (4,2); 7,4616 (2,0); 7,4563 (3,7); 7,4490 (0,5); 7,4200 (1,1); 7,4127 (8,4); 7,4075 (2,6); 7,3958 (2,4); 7,3908 (6,6); 7,3835 (0,7); 7,3170 (0,5); 7,3098 (4,2); 7,3046 (1,4); 7,2876 (7,4); 7,2704 (1,2); 7,2653 (3,4); 7,2580 (0,4); 5,7555 (6,4); 4,9428 (13,7); 4,8452 (1,6); 4,2110 (2,1); 4,1932 (6,9); 4,1755 (6,8); 4,1577 (2,2); 3,3422 (186,6); 2,6766 (0,4); 2,6724 (0,6); 2,6678 (0,4);

2,5256 (1,8); 2,5120 (39,7); 2,5078 (79,5); 2,5033 (103,2); 2,4988 (75,1); 2,4944 (37,3);  
 2,3346 (0,4); 2,3301 (0,6); 2,3256 (0,5); 1,2274 (7,6); 1,2096 (16,0); 1,1993 (0,8); 1,1919  
 (7,5); 1,1669 (0,5); -0,0002 (0,5)

Sáng chế cũng đề xuất phương pháp bảo vệ cây trồng hoặc thực vật hữu ích khỏi tác dụng gây độc trên thực vật của các chế phẩm hóa nông, như thuốc diệt sinh vật gây hại, hoặc thuốc diệt cỏ cụ thể là, các chế phẩm hóa nông gây tổn hại cho cây trồng hoặc thực vật hữu ích, đặc trưng ở chỗ hợp chất có công thức chung (I) hoặc muối của nó được dùng làm chất an toàn, ưu tiên áp dụng một lượng hữu hiệu hợp chất có công thức chung (I) hoặc muối của nó cho thực vật, phần của thực vật hoặc hạt (hoặc nguyên liệu hạt) của nó.

Hợp chất có công thức chung (I) (= chất an toàn) như được chỉ ra trên đây là thích hợp để dùng cùng với các thành phần hoạt tính (thuốc diệt sinh vật gây hại) để phòng trừ chọn lọc các sinh vật gây hại ở một số giống cây trồng, ví dụ ở các cây trồng quan trọng về mặt kinh tế như ngũ cốc (lúa mỳ, lúa mạch, tiêu hắc mạch, lúa mạch đen, lúa, ngô, kê/lúa miến), củ cải đường, mía, hạt cải dầu, bông, hướng dương, đậu Hà Lan, đậu và đậu tương. Tổ hợp thuốc diệt cỏ-chất an toàn với chất an toàn có công thức chung (I) cũng phù hợp để phòng trừ thực vật có hại trên các vườn và các diện tích thực vật hữu ích và cây cảnh, ví dụ các diện tích bãi cỏ với các bãi cỏ hữu ích hoặc bãi cỏ trang trí, cụ thể là cỏ lúa mạch đen, cỏ xanh hoặc cỏ bermuda.

Cũng cần quan tâm đến thực vật hữu ích và cây trồng trong đó tổ hợp thuốc diệt cỏ-chất an toàn chứa hợp chất có công thức chung (I) nêu trên có thể được sử dụng là các cây trồng đột biến mà có khả năng kháng một phần hoặc hoàn toàn hoặc cây chuyển gen mà kháng một phần hoặc hoàn toàn một số thuốc diệt sinh vật gây hại, ví dụ cây ngô kháng glufosinat hoặc glyphosat, hoặc cây đậu tương kháng imidazolinon có tác dụng gây hại cho thực vật. Tuy nhiên, lợi ích cụ thể của chất an toàn có công thức chung (I) được sử dụng theo cách mới là tác dụng hữu hiệu của chúng ở các cây trồng mà thường có tính kháng không thích đáng với thuốc diệt sinh vật gây hại được sử dụng.

Để sử dụng chung với thuốc diệt sinh vật gây hại, hợp chất có công thức chung

(I) có thể được triển khai đồng thời hoặc theo trình tự bất kỳ với các thành phần hoạt tính, và sau đó có khả năng làm giảm hoặc ngăn ngừa hoàn toàn tác dụng phụ có hại của các thành phần hoạt tính này trong trường hợp cây trồng mà không làm suy yếu hoặc giảm đáng kể hiệu lực của các thành phần hoạt tính đối với các sinh vật gây hại không mong muốn. Ở đây nó cũng có thể làm giảm đáng kể hoặc ngăn ngừa hoàn toàn tổn hại gây ra do việc sử dụng nhiều hơn một thuốc diệt sinh vật gây hại, ví dụ bởi nhiều hơn một thuốc diệt cỏ hoặc bởi thuốc diệt cỏ kết hợp với thuốc diệt côn trùng hoặc thuốc diệt nấm. Điều này có thể giúp mở rộng đáng kể lĩnh vực sử dụng thuốc diệt sinh vật gây hại thông thường. Nếu các chế phẩm theo sáng chế chứa thuốc diệt sinh vật gây hại, các chế phẩm này, ở tỷ lệ pha loãng thích hợp, được áp dụng trực tiếp cho diện tích đang trồng trọt, thực vật có hại và/hoặc thực vật hữu ích đã nảy mầm, hoặc cho thực vật có hại và/hoặc thực vật hữu ích đã được nhú lên. Nếu chế phẩm theo sáng chế không chứa thuốc diệt sinh vật gây hại bất kỳ, các chế phẩm này có thể được sử dụng theo phương pháp gọi là phương pháp trộn trong thùng, có nghĩa là người sử dụng trộn và pha loãng các sản phẩm phối chế riêng rẽ (= chế phẩm bảo vệ thực vật hữu hiệu và thuốc diệt sinh vật gây hại) ngay trước khi dùng cho diện tích được xử lý, hoặc trước khi dùng thuốc diệt sinh vật gây hại, hoặc sau khi dùng thuốc diệt sinh vật gây hại, hoặc để tiền xử lý hạt, nghĩa là, ví dụ, để bao áo hạt thực vật hữu hiệu. Ưu tiên áp dụng nhanh chóng chất an toàn với thuốc diệt sinh vật gây hại, đặc biệt là khi chất an toàn được áp dụng cho thực vật sau thuốc diệt cỏ. Quan sát thấy tác dụng có lợi của hợp chất có công thức chung (I) khi chúng được sử dụng cùng với thuốc diệt sinh vật gây hại bằng phương pháp trước nảy mầm hoặc sau nảy mầm, ví dụ trong trường hợp dùng đồng thời ở dạng hỗn hợp trộn trong thùng hoặc ở dạng đồng phối chế hoặc áp dụng riêng rẽ song song hoặc kế tiếp (dùng tách ra). Cũng có thể dùng lặp lại nhiều hơn một lần. Đôi khi cũng có thể có nghĩa khi kết hợp dùng trước nảy mầm với dùng sau nảy mầm. Một lựa chọn thường dùng là áp dụng sau nảy mầm cho thực vật hữu ích hoặc cây trồng với việc áp dụng đồng thời hoặc sau đó thuốc diệt sinh vật gây hại. Một lựa chọn khác là dùng các hợp chất (I) theo sáng chế trong quá trình bao áo hạt, xử lý (nhúng) cây con (chẳng hạn lúa) hoặc xử lý vật liệu nhân giống khác (chẳng hạn củ khoai tây).

Khi hợp chất có công thức chung (I) được dùng kết hợp với thuốc diệt cỏ, trường hợp này thường không chỉ quan sát thấy tác dụng an toàn mà còn quan sát thấy tác dụng

diệt cỏ tăng cường đối với thực vật có hại. Hơn nữa, sự sinh trưởng của thực vật hữu ích và cây trồng được cải thiện trong nhiều trường hợp, và có thể gia tăng sản lượng thu hoạch.

Chế phẩm theo sáng chế có thể chứa một hoặc nhiều thuốc diệt sinh vật gây hại. Ví dụ về thuốc diệt sinh vật gây hại hữu hiệu bao gồm thuốc diệt cỏ, thuốc diệt côn trùng, thuốc diệt nấm, thuốc diệt ve bét và thuốc diệt giun tròn mà, khi được dùng một mình, mỗi loại sẽ gây ra thiệt hại gây độc thực vật cho cây trồng hoặc ở đó có khả năng gây ra sự thiệt hại. Các chất quan tâm cụ thể là các thành phần diệt loài gây hại có hoạt tính tương ứng từ nhóm gồm thuốc diệt cỏ, thuốc diệt côn trùng, thuốc diệt ve bét, thuốc diệt giun tròn và thuốc diệt nấm, đặc biệt là thuốc diệt cỏ.

Tỷ lệ khối lượng của chất an toàn (có công thức chung (I)) với thuốc diệt sinh vật gây hại có thể thay đổi trong giới hạn rộng và thường nằm trong khoảng từ 1:100 đến 100:1, tốt hơn là từ 1:20 đến 20:1, đặc biệt là từ 1:10 đến 10:1. Tỷ lệ khối lượng tối ưu giữa chất an toàn và thuốc diệt sinh vật gây hại tùy thuộc vào cả chất an toàn tương ứng được sử dụng và thuốc diệt sinh vật gây hại tương ứng và loại thực vật hữu ích hoặc cây trồng cần bảo vệ. Tùy theo thuốc diệt sinh vật gây hại được được sử dụng và loại thực vật hữu ích cần bảo vệ, tỷ lệ áp dụng cần thiết của chất an toàn có thể thay đổi trong giới hạn rộng và thường nằm trong khoảng từ 0,001 đến 10 kg, tốt hơn là 0,01 đến 1 kg, đặc biệt là 0,01 đến 0,2 kg, chất an toàn trên một hecta. Lượng và tỷ lệ khối lượng cần thiết để xử lý thành công có thể được xác định bởi các thử nghiệm sơ bộ thông thường.

Trong trường hợp bao áo hạt, ví dụ, 0,005 đến 20 g chất an toàn (có công thức chung (I)) trên một kilogam hạt, tốt hơn là 0,01 đến 10 g chất an toàn trên một kilogram hạt, đặc biệt là 0,05 đến 5 g chất an toàn trên một kilogam hạt, được sử dụng.

Khi dung dịch chất an toàn (có công thức chung (I)) được dùng trong xử lý hạt và hạt hoặc cây con được làm ướt bằng các dung dịch, nồng độ thích hợp thường nằm trong khoảng từ 1 đến 10 000 ppm, tốt hơn là 100 đến 1000 ppm, tính theo khối lượng. Lượng và tỷ lệ khối lượng cần thiết để xử lý thành công có thể được xác định bởi các thử nghiệm sơ bộ thông thường.

Chất an toàn có công thức chung (I) có thể được điều chế theo cách thông thường,

riêng rẽ hoặc cùng với thuốc diệt sinh vật gây hại. Vì vậy, các chế phẩm bảo vệ thực vật hữu ích hoặc bảo vệ cây trồng cũng được đề xuất.

Ưu tiên sử dụng chung chất an toàn và thuốc diệt sinh vật gây hại, đặc biệt là sử dụng chung chất an toàn và thuốc diệt cỏ ở dạng chế phẩm hoàn thiện hoặc sử dụng theo phương pháp trộn trong thùng.

Tương tự, ưu tiên sử dụng chất an toàn có công thức chung (I) trong xử lý hạt với việc áp dụng sau đó thuốc diệt sinh vật gây hại, tốt hơn là thuốc diệt cỏ, sau khi gieo mạ bằng phương pháp trước hoặc sau nảy mầm.

Hợp chất có công thức chung (I) hoặc muối của nó có thể được sử dụng như nó vốn có hoặc ở dạng các chế phẩm chứa chúng (hỗn hợp phối chế) kết hợp với các chất có hoạt tính diệt loài gây hại khác, ví dụ thuốc diệt côn trùng, thuốc diệt ve bét, thuốc diệt giun tròn, thuốc diệt cỏ, thuốc diệt nấm, chất an toàn, phân bón và/hoặc chất điều hòa sinh trưởng, ví dụ ở dạng chế phẩm hoàn thiện hoặc hỗn hợp trộn trong thùng. Chế phẩm kết hợp có thể được sản xuất dựa trên các hỗn hợp phối nêu trên, có tính đến các đặc tính vật lý và độ ổn định của các thành phần hoạt tính được kết hợp.

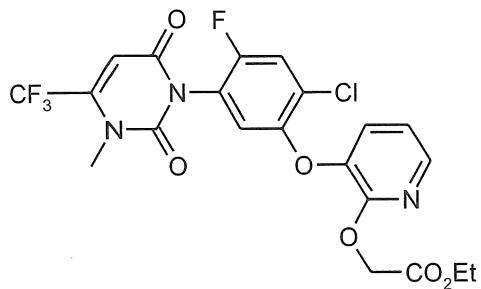
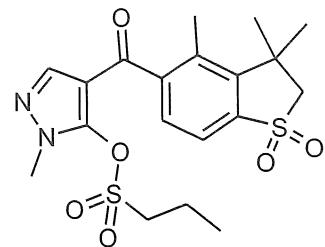
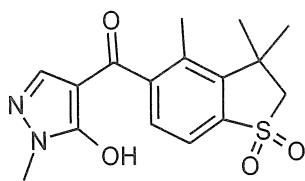
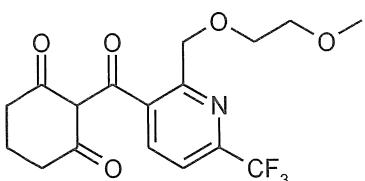
Các thành phần kết hợp có thể sử dụng đối với các hợp chất theo sáng chế trong các hỗn hợp phối chế được trộn hoặc trong hỗn hợp trộn trong thùng là, ví dụ, các thành phần hoạt tính đã biết dựa trên sự ứng chế, ví dụ, axetolactat synthaza, axetyl-CoA carboxylaza, xenluloza synthaza, enolpyruvylshikimat-3-phosphat synthaza, glutamin synthetaza, p-hydroxyphenylpyruvat dioxygenaza, phytoen desaturaza, photosystem I, photosystem II hoặc protoporphyrinogen oxidaza, như đã biết, ví dụ, từ Weed Research 26 (1986) 441-445 hoặc "The Pesticide Manual", 16th edition, The British Crop Protection Council and the Royal Soc. of Chemistry, 2006, và các tài liệu được trích dẫn trong đó. Thuốc diệt cỏ hoặc chất điều hòa sinh trưởng thực vật đã biết có thể được kết hợp với các hợp chất theo sáng chế là, ví dụ, các chất sau đây, trong đó các thành phần hoạt tính này được đề cập đến bởi "tên chung" của chúng phù hợp với Tổ chức quốc tế về tiêu chuẩn hóa - International Organization for Standardization (ISO) hoặc bởi tên hóa học của chúng hoặc bởi số mã của chúng. Chúng luôn bao gồm tất cả các dạng sử dụng, ví dụ axit, muối, este và tất cả các dạng đồng phân như đồng phân lập thể và đồng phân quang học, ngay cả khi chúng không được đề cập rõ ràng.

Ví dụ về các thành phần phối trộn thuốc diệt cỏ như vậy là:

axetochlor, acifluorfen, acifluorfen-natri, aclonifen, alachlor, allidochlor, alloxydim, alloxydim-natri, ametryn, amicarbazon, amidochlor, amidosulfuron, axit 4-amino-3-clo-6-(4-clo-2-flo-3-metylphenyl)-5-flopyridin-2-carboxylic, aminoxyxypyrrachlor, aminoxyxypyrrachlor-kali, aminoxyxypyrrachlor-metyl, aminopyralid, amitrole, amonisulfamat, anilofos, asulam, atrazin, azafenidin, azimsulfuron, beflubutamid, benazolin, benazolin-etyl, benfluralin, benfuresat, bensulfuron, bensulfuron-metyl, bensulide, bentazon, benzobixyclon, benzofenap, bixyclopyron, bifenoxt, bilanafos, bilanafos-natri, bispyribac, bispyribac-natri, bromacil, bromobutide, bromofenoxim, bromoxynil, bromoxynil-butyrat, -kali, -heptanoat và -octanoat, busoxinon, butachlor, butafenacil, butamifos, butenachlor, butralin, butroxydim, butylat, cafenstrol, carbetamit, carfentrazon, carfentrazon-etyl, chloramben, chlorbromuron, chlorfenac, chlorfenac-natri, chlorfenprop, chlorflurenol, chlorflurenol-metyl, chloridazon, chlorimuron, chlorimuron-etyl, clophthalim, clotoluron, chlorthal-dimetyl, chlorsulfuron, cinidon, cinidon-etyl, cinmetilylin, cinosulfuron, clacyfos, clethodim, clodinafop, clodinafop-propargyl, clomazon, clomeprop, clopyralid, cloransulam, cloransulam-metyl, cumyluron, xyanamit, xyanazin, xycloat, xyclopyrimorat, xyclosulfamuron, xycloxydim, xyhalofop, xyhalofop-butyl, xyprazin, 2,4-D, 2,4-D-butotyl, -butyl, -dimethylamoni, -diolamin, -etyl, 2-ethylhexyl, -isobutyl, -isoctyl, -isopropylamoni, -kali, -triisopropanolamoni và -trolamin, 2,4-DB, 2,4-DB-butyl, -dimethylamoni, isoocetyl, -kali và -natri, daimuron (dymron), dalapon, dazomet, n-decanol, desmedipham, detosyl-pyrazolat (DTP), dicamba, diclobenil, 2-(2,4-diclobenzyl)-4,4-dimetyl-1,2-oxazolidin-3-on, 2-(2,5-diclobenzyl)-4,4-dimetyl-1,2-oxazolidin-3-on, dichlorprop, dichlorprop-P, diclofop, diclofop-metyl, diclofop-P-metyl, diclosulam, difenzoquat, diflufenican, diflufenzopyr, diflufenzopyr-natri, dimefuron, dimepiperat, dimethachlor, dimethametryn, dimethenamid, dimethenamid-P, dimetasulfuron, dinitramin, dinoterb, diphenamid, diquat, diquat-dibromid, dithiopyr, diuron, DNOC, endothal, EPTC, esprocarb, ethalfluralin, ethametsulfuron, ethametsulfuron-metyl, ethiozin, ethofumesat, etoxyfen, etoxyfen-etyl, etoxysulfuron, etobenzanid, F-9600, F-5231, nghĩa là N-[2-clo-4-flo-5-[4-(3-flopropyl)-4,5-dihydro-5-oxo-1H-tetrazol-1-yl]-phenyl]etansulfonamit, F-7967,

nghĩa là 3-[7-clo-5-flo-2-(triflometyl)-1H-benzimidazol-4-yl]-1-metyl-6-(triflometyl)pyrimidin-2,4(1H,3H)-dion, fenoxyprop, fenoxyprop-P, fenoxyprop-etyl, fenoxyprop-P-etyl, fenoxyasulfon, fenquinotrión, fentrazamit, flamprop, flamprop-M-isopropyl, flamprop-M-metyl, flazasulfuron, florasulam, fluazifop, fluazifop-P, fluazifop-butyl, fluazifop-P-butyl, flucarbazon, flucarbazon-natri, flucetosulfuron, fluchloralin, flufenacet, flufenpyr, flufenpyr-etyl, flumetsulam, flumiclorac, flumiclorac-pentyl, flumioxazin, fluometuron, flurenol, flurenol-butyl, -dimethylamoni và -metyl, floglycofen, floglycofen-etyl, flupropanat, flupyrssulfuron, flupyrssulfuron-metyl-natri, fluridon, flocloridon, fluroxypyr, fluroxypyr-meptyl, flurtamon, fluthiacet, fluthiacet-metyl, fomesafen, fomesafen-natri, foramsulfuron, fosamin, glufosinat, glufosinat-amoni, glufosinat-P-natri, glufosinat-P-amoni, glufosinat-P-natri, glyphosate, glyphosat-amoni, -isopropylamoni, -diamoni, -dimethylamoni, -kali, -natri và -trimesium, H-9201, nghĩa là O-(2,4-dimetyl-6-nitrophenyl) O-etyl isopropylphosphoramidothioat, halauxifen, halauxifen-metyl, halosafen, halosulfuron, halosulfuron-metyl, haloxyfop, haloxyfop-P, haloxyfop-etoxyethyl, haloxyfop-P-etoxyethyl, haloxyfop-metyl, haloxyfop-P-metyl, hexazinon, HW-02, nghĩa là 1-(dimethoxyphosphoryl)etyl (2,4-diclophenoxy)axetat, imazamethabenz, Imazamethabenz-metyl, imazamox, imazamox-amoni, imazapic, imazapic-amoni, imazapyr, imazapyr-isopropylamoni, imazaquin, imazaquin-amoni, imazethapyr, imazethapyr-imoni, imazosulfuron, indanofan, indaziflam, iodosulfuron, iodosulfuron-metyl-natri, ioxynil, ioxynil-octanoat, -kali và natri, ipfencarbazone, isoproturon, isouron, isoxaben, isoxaflutol, karbutilat, KUH-043, nghĩa là 3-({[5-(diflometyl)-1-metyl-3-(triflometyl)-1H-pyrazol-4-yl]metyl}sulfonyl)-5,5-dimetyl-4,5-dihydro-1,2-oxazol, ketospiradox, lactofen, lenacil, linuron, MCPA, MCPA-butotyl, -dimethylamoni, -2-ethylhexyl, -isopropylamoni, -kali và -natri, MCPB, MCPB-metyl, -etyl và -natri, mecoprop, mecoprop-natri, và -butotyl, mecoprop-P, mecoprop-P-butotyl, -dimethylamoni, -2-ethylhexyl và -kali, mefenacet, mefluidide, mesosulfuron, mesosulfuron-metyl, mesotrion, methabenzthiazuron, metam, metamifop, metamitron, metazachlor, metazosulfuron, methabenzthiazuron, methiopyrsulfuron, methiozolin, methyl isothioxyanat, metobromuron, metolachlor, S-metolachlor, metosulam, metoxuron, metribuzin, metsulfuron, metsulfuron-metyl, molinat, monolinuron,

monosulfuron, monosulfuron-este, MT-5950, nghĩa là N-[3-clo-4-(1-metyleetyl)phenyl]-2-methylpentanamit, NGGC-011, napropamit, NC-310, nghĩa là 4-(2,4-diclobenzoyl)-1-metyl-5-benzyloxyypyrazol, neburon, nicosulfuron, axit nonanoic (axit pelargonic), norflurazon, axit oleic (axit béo), orbencarb, orthosulfamuron, oryzalin, oxadiargyl, oxadiazon, oxasulfuron, oxaziclomefon, oxyfluorfen, paraquat, paraquat diclorua, pebulat, pendimethalin, penoxsulam, pentachlorphenol, pentoazon, pethoxamid, dầu mỏ, phenmedipham, picloram, picolinafen, pinoxaden, piperophos, pretilachlor, primisulfuron, primisulfuron-metyl, prodiamin, profoxydim, prometon, prometryn, propachlor, propanil, propaquizafop, propazin, propham, propisochlor, propoxycarbazon, propoxycarbazon-natri, propyrisulfuron, propyzamit, prosulfocarb, prosulfuron, pyraclonil, pyraflufen, pyraflufen-etyl, pyrasulfotol, pyrazolynate (pyrazolat), pyrazosulfuron, pyrazosulfuron-etyl, pyrazoxyfen, pyribambenz, pyribambenz-isopropyl, pyribambenz-propyl, pyribenzoxim, pyributicarb, pyridafol, pyridat, pyriftalid, pyriminobac, pyriminobac-metyl, pyrimisulfan, pyrithiobac, pyrithiobac-natri, pyroxasulfon, pyroxsulam, quinchlorac, quinmerac, quinoclamin, quizalofop, quizalofop-etyl, quizalofop-P, quizalofop-P-etyl, quizalofop-P-tefuryl, rimsulfuron, saflufenacil, setoxydim, siduron, simazin, simetryn, SL-261, sulcotrion, sulfentrazon, sulfometuron, sulfometuron-metyl, sulfosulfuron, SYP-249, nghĩa là 1-etoxy-3-metyl-1-oxobut-3-en-2-yl 5-[2-clo-4-(triflometyl)phenoxy]-2-nitrobenzoat, SYP-300, nghĩa là 3-oxo-4-(prop-2-yn-1-yl)-3,4-dihydro-2H-1,4-benzoxazin-6-yl]-3-propyl-2-thioxoimidazolidin-4,5-dion, 2,3,6-TBA, TCA (axit trifloaxetic), TCA-natri, tebuthiuron, tefuryltrion, tembotrion, tepraloxydim, terbacil, terbucarb, terbumeton, terbutylazin, terbutryn, thenylchlor, thiazopyr, thiencarbazon, thiencarbazon-metyl, thifensulfuron, thifensulfuron-metyl, thiobencarb, tiafenacil, tolpyralat, topramezon, tralkoxydim, triafamon, tri-alat, triasulfuron, triaziflam, tribenuron, tribenuron-metyl, triclopyr, trietazin, trifloxysulfuron, trifloxysulfuron-natri, trifludimoxazin, trifluralin, triflusulfuron, triflusulfuron-metyl, tritosulfuron, ure sulfat, vernolat, XDE-848, ZJ-0862, nghĩa là 3,4-diclo-N-{2-[(4,6-dimetoxyypyrimidin-2-yl)oxy]benzyl}anilin, và các hợp chất sau đây:



Ví dụ về chất điều hòa sinh trưởng thực vật dùng làm các thành phần phối trộn có thể có là:

acibenzolar, acibenzolar-S-metyl, axit 5-aminolevulinic, ancymidol, 6-benzylaminopurin, brassinolide, catechol, chlormequat clorua, cloprop, xyclanilit, axit 3-(xycloprop-1-enyl)propionic, daminozit, dazomet, n-decanol, dikegulac, dikegulac-natri, endothal, endothal-dikali, -dinatri, và mono(N,N-dimethylalkylamonium), ethephon, flumetralin, flurenol, flurenol-butyl, flurprimidol, forchlorfenuron, axit gibberellic, inabenfide, axit indol-3-axetic (IAA), axit 4-indol-3-ylbutyric, isoprothiolan, probenazol, axit jasmonic, methyl este của axit jasmonic, maleic hydrazit, mepiquat clorua, 1-metylxcyclopropen, 2-(1-naphthyl)acetamit, axit 1-naphtylaxetic, axit 2-naphtyloxyaxetic, hỗn hợp nitrophenolat, axit 4-oxo-4[(2-phenyletyl)amino]butyric, paclobutrazol, axit N-phenylphtalamic, prohexadion, prohexadion-canxi, prohydrojasmon, axit salixylic, strigolacton, tecnazen, thidiazuron, triacontanol, trinexapac, trinexapac-etyl, tsitodef, uniconazol, uniconazol-P.

Trong trường hợp dùng ở dạng hỗn hợp phối chế hoặc hỗn hợp đồng phối chế của thành phần hoạt tính, các hỗn hợp này thường chứa, tùy từng trường hợp có thể là, chất kết dính thông thường tương ứng, chất làm ướt, chất phân tán, chất nhũ hóa, chất thẩm, chất bảo quản, chất chống đông và dung môi, chất độn, chất mang và thuốc nhuộm, chất khử bọt, chất úc chế bay hơi, và chất cải biến độ pH và độ nhớt.

Hợp chất có công thức chung (I) và tổ hợp của nó với một hoặc nhiều thuốc diệt sinh vật gây hại đã nêu có thể được điều chế theo các cách khác nhau tùy thuộc vào các thông số hóa lý và sinh học xác định. Các ví dụ thích hợp về các loại hỗn hợp phối chế bao gồm:

- dịch cô đặc có thể nhũ hóa được sản xuất bằng cách hòa tan các thành phần hoạt tính trong dung môi hữu cơ, ví dụ butanol, xyclohexanon, dimetylformamit, xylen, hoặc các hydrocacbon có nhiệt độ sôi tương đối cao hoặc hỗn hợp gồm các dung môi hữu cơ, có bổ sung một hoặc nhiều chất hoạt động bề mặt ion và/hoặc không ion (chất nhũ hóa). Các chất nhũ hóa thích hợp là, ví dụ, canxi alkylarylsulfonat, polyglycol este của axit béo, alkylaryl polyglycol ete, polyglycol ete của rượu béo, sản phẩm ngưng tụ propylen oxit-etylen oxit, alkyl polyete, sorbitan este và este của axit béo với polyoxyetylen sorbitan;
- các sản phẩm dạng bụi thu được bằng cách nghiền các thành phần hoạt tính với các chất vô cơ hoặc hữu cơ rắn đã được nghiền mịn, chẳng hạn bột talc, đất sét tự nhiên, như kaolin, bentonit và pyrophyllit, đất tảo diatomit hoặc bột mỳ;
- Dịch cô đặc huyền phù trên cơ sở nước hoặc dầu có thể được sản xuất, ví dụ, bằng cách nghiền ướt bằng thiết bị nghiền hạt;
  - bột tan trong nước;
  - dịch cô đặc tan trong nước;
  - hạt, như hạt tan trong nước, hạt có thể phân tán trong nước và hạt để rải và dùng cho đất;
  - bột có thể thấm ướt mà, cũng như là thành phần hoạt tính, còn chứa chất pha loãng hoặc các chất tro và chất hoạt động bề mặt;
    - huyền phù chứa nang và vi nang;
    - hỗn hợp phối chế thể tích cực nhỏ.

Các loại hỗn hợp phối chế nêu trên là đã biết đối với người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực và được mô tả, ví dụ, trong: K. Martens, "Spray Drying Handbook", 3rd ed., G. Goodwin Ltd., London. 1979; W. van Valkenburg, "Pesticide

Formulations”, Marcel Dekker, N.Y. 1973; Winacker-Küchler, “Chemische Technologie” [Chemical Technology], volume 7, C. Hanser Verlag Munich, 4th edition 1986; “Perry's Chemical Engineer's Handbook”, 5th ed., McGraw-Hill, N.Y. 1973, pages 8-57.

Chất phụ trợ phối chế cần thiết như các nguyên liệu trợ, các chất hoạt động bề mặt, các dung môi và các phụ gia khác cũng đã được biết và được mô tả, ví dụ, trong: McCutcheon's “Detergents and Emulsifiers Annual”, MC Publ. Corp., Ridgewood N.J.; C. Marsden, “Solvents Guide”, 2nd ed., Interscience, N.Y. 1963; H. von Olphen, “Introduction to Clay Colloid Chemistry”, 2nd ed., J. Wiley & Sons, N.Y.; Schönfeldt, “Grenzflächenaktive Äthylenoxidaddukte” [Interface-active ethylene Oxide Adducts], Wiss. Verlagsgesellschaft, Stuttgart 1976; Sisley and Wood, “Encyclopedia of Surface Active Agents”, Chem. Publ. Co. Inc., N.Y. 1964; Watkins, “Handbook of Insecticide Dust Diluents and Carriers”, 2nd ed., Darland Books, Caldwell N.J.; Winnacker-Küchler, “Chemische Technologie”, volume 7, C. Hanser Verlag Munich, 4th edition 1986.

Ngoài các chất phụ trợ phối chế nêu trên, các chế phẩm bảo vệ thực vật hữu hiệu có thể, tùy từng trường hợp có thể, chứa chất làm thấm thông dụng, chất gây dính, chất phân tán, chất gây thấm, chất nhũ hóa, chất bảo quản, chất chống đông, chất độn, chất mang và thuốc nhuộm, chất khử bọt, chất ức chế bay hơi, và chất cải biến độ pH hoặc chất cải biến độ nhớt.

Theo loại hỗn hợp phối chế, chế phẩm bảo vệ thực vật hữu hiệu thường chứa 0,1% đến 99% khối lượng, đặc biệt là 0,2% đến 95% khối lượng, một hoặc nhiều chất an toàn có công thức chung (I) hoặc tổ hợp gồm chất an toàn và thuốc diệt sinh vật gây hại. Chúng còn chứa 1% đến 99,9%, đặc biệt là 4% đến 99,5%, khối lượng một hoặc nhiều chất bổ trợ dạng rắn hoặc lỏng và 0% đến 25%, đặc biệt là 0,1 đến 25%, khối lượng chất hoạt động bề mặt. Trong dịch có đặc có thể nhũ hóa, nồng độ thành phần hoạt tính, nghĩa là nồng độ của chất an toàn và/hoặc thuốc diệt sinh vật gây hại, thường từ 1% đến 90%, đặc biệt là 5% đến 80%, khối lượng. Sản phẩm dạng mù thường chứa 1% đến 30%, tốt hơn là 5% đến 20%, khối lượng thành phần hoạt tính. Trong bột có thể thấm ướt, nồng độ thành phần hoạt tính thường là từ 10% đến 90% khối lượng.

Trong hạt có thể phân tán trong nước, hàm lượng thành phần hoạt tính là, ví dụ, nằm trong khoảng từ 1% đến 95% khối lượng, tốt hơn là nằm trong khoảng từ 10% đến 80% khối lượng.

Để sử dụng, hỗn hợp phôi chế ở dạng thương mại được pha loãng nếu cần theo cách thông thường, ví dụ pha loãng với nước trong trường hợp bột có thể thấm ướt, dịch cô đặc có thể nhũ hóa, thể phân tán và hạt có thể phân tán trong nước. Các chế phẩm ở dạng mù, hạt và dung dịch có thể phun được thường không được pha loãng tiếp theo bằng các chất trơ khác trước khi sử dụng. Tỷ lệ sử dụng cần thiết của chất an toàn có công thức chung (I) thay đổi theo các điều kiện bên ngoài bao gồm nhiệt độ, độ ẩm và loại thuốc diệt cỏ được sử dụng.

Trong các ví dụ dưới đây, minh họa nhưng không giới hạn sáng chế, các tuyên bố về lượng là dựa trên khối lượng trừ khi được định nghĩa theo cách khác.

### **Ví dụ thực hiện sáng chế**

#### 1. Ví dụ phôi chế

##### 1.1. Sản phẩm dạng mù

Sản phẩm dạng mù thu được bằng cách trộn 10 phần khối lượng hợp chất có công thức chung (I) (chất an toàn) hoặc hỗn hợp thành phần hoạt tính gồm thuốc diệt sinh vật gây hại (chẳng hạn thuốc diệt cỏ) và chất an toàn có công thức chung (I) và 90 phần khối lượng bột talc làm chất trơ, và tán nhỏ trong máy nghiền hạt.

##### 1.2. Bột có thể phân tán được trong nước

Bột có thể thấm ướt phân tán được trong nước dễ dàng thu được bằng cách trộn 25 phần khối lượng hợp chất có công thức chung (I) hoặc hỗn hợp thành phần hoạt tính gồm thuốc diệt sinh vật gây hại (chẳng hạn thuốc diệt cỏ) và chất an toàn có công thức chung (I), 64 phần khối lượng của thạch anh chứa kaolin làm chất trơ, 10 phần khối lượng kali lignosulfonat và 1 phần khối lượng natri oleoylmethyltaurat làm tác nhân thấm ướt và chất phân tán, và nghiền trong máy nghiền đĩa có trực cán.

##### 1.3 Dịch cô đặc có thể phân tán trong nước

Dịch cô đặc chứa thể phân tán có thể phân tán trong nước thu được bằng cách

trộn 20 phần khối lượng hợp chất có công thức chung (I) hoặc hỗn hợp thành phần hoạt tính gồm thuốc diệt sinh vật gây hại (chẳng hạn thuốc diệt cỏ) và chất an toàn có công thức (I) với 6 phần khối lượng alkylphenol polyglycol ete (®Triton X 207), 3 phần khối lượng isotridecanol polyglycol ete và 71 phần khối lượng dầu khoáng parafin, và nghiền trong máy nghiền bi ma sát đến độ mịn dưới 5 micron.

#### 1.4. Dịch cô đặc có thể nhũ hóa

Dịch cô đặc có thể nhũ hóa thu được từ 15 phần khối lượng hợp chất có công thức chung (I) hoặc hỗn hợp thành phần hoạt tính gồm thuốc diệt sinh vật gây hại (chẳng hạn thuốc diệt cỏ) và chất an toàn có công thức chung (I), 75 phần khối lượng xyclohexanon làm dung môi và 10 phần khối lượng nonylphenol được etoxyl hóa làm chất nhũ hóa.

#### 1.5. Hạt có thể phân tán trong nước

Hạt có thể phân tán trong nước thu được bằng cách trộn

75 phần khối lượng chất an toàn có công thức chung (I) hoặc hỗn hợp gồm thuốc diệt sinh vật gây hại và chất an toàn có công thức chung (I),

10 phần khối lượng canxi lignosulfonat,

5 phần khối lượng natri laurylsulfat,

3 phần khối lượng rượu polyvinylic và

7 phần khối lượng rượu polyvinylic và

7 phần khối lượng kaolin,

nghiền hỗn hợp trong máy nghiền đĩa có trực cán, và tạo hạt bột này trong thiết bị tạo hạt kiểu tầng sôi bằng cách phun nước làm chất lỏng tạo hạt.

Hạt có thể phân tán trong nước cũng thu được bằng cách đồng hóa và tán nhỏ, trong thiết bị nghiền keo,

25 phần khối lượng chất an toàn có công thức chung (I) hoặc hỗn hợp

gồm thuốc diệt sinh vật gây hại và chất an toàn có công thức chung (I),

5 phần khối lượng natri 2,2'-dinaphthylmetan-6,6'-disulfonat,

- 2 phần khối lượng natri oleoylmethyltaurinat,
- 17 phần khối lượng canxi cacbonat,
- 50 phần khối lượng nước và
- 1 phần khối lượng rượu polyvinylic,

tiếp theo nghiên hồn hợp trong thiết bị nghiên hạt và phun sương và làm khô huyền phù thu được trong tháp sấy phun bằng cách sử dụng vòi mít pha.

## 2. Ví dụ sinh học

### 2.1. Tác dụng tuyệt đối của các hợp chất chọn lọc theo sáng chế khi sử dụng ví dụ giảm thiệt hại bởi mesosulfuron-metyl ở lúa mỳ mùa hè (TRZAS)

Hạt của cây trồng cần xử lý được ướm trong đất mùn pha cát trong chậu bằng xơ gỗ hoặc bằng nhựa (đường kính ~ 4 cm), được phủ bằng đất và trồng trong nhà kính trong các điều kiện tốt để nảy mầm và sinh trưởng. Các cây thử nghiệm được xử lý ở giai đoạn lá đầu (BBCH10 – BBCH12). Trong quá trình xử lý này, hợp chất có công thức chung (I) theo sáng chế được điều chế ở dạng bột có thể thẩm ướt (WP) được phun lên phần thực vật nằm trên mặt đất ở dạng huyền phù chứa nước với tỷ lệ áp dụng nước tương đương với 800 l/ha có bổ sung tác nhân thẩm ướt (chẳng hạn 0,2% agrotin) theo liều lượng đã chỉ ra.

Bước này được sau bởi bước dùng thuốc diệt cỏ. Nhằm mục đích này, mesosulfuron-metyl, được phối chế ở dạng hạt có thể phân tán trong nước (WG), được phun lên phần thực vật ở trên mặt đất ở dạng thể phân tán chứa nước với tỷ lệ áp dụng nước tương ứng với 800 l/ha có bổ sung tác nhân thẩm ướt (chẳng hạn 0,2% agrotin) ở liều lượng 20 g/ha. Liều lượng thuốc diệt cỏ ở đây được chọn sao cho nó gây ra tổn hại rõ rệt có thể nhìn thấy bằng mắt thường (tối thiểu là 30%, tối đa là 75%) so với cây trồng chưa được xử lý ở thời điểm đánh giá trên nhóm cây trồng đối chứng không xử lý bằng chất an toàn mà được bao hàm trong cùng một thử nghiệm.

Sau khi dùng, thực vật được trồng trong các điều kiện sinh trưởng tốt trong nhà kính. Tổn hại được đánh giá bằng mắt thường 14-21 ngày sau khi dùng.

Ảnh hưởng tổn hại được đánh giá bằng mắt thường theo thang 0-100% bằng cách

so sánh với thực vật đối chứng chưa được xử lý, và lấy trung bình trên 2-3 mẫu lặp trên mỗi lần xử lý. Các ví dụ

0% = không ảnh hưởng đáng kể so với thực vật chưa được xử lý

20% = quần thể thực vật đã được xử lý có mức tổn hại 20% so với quần thể đối chứng chưa được xử lý (chẳng hạn chiều cao sinh trưởng, tổn hại ở lá, v.v.)

100% = thực vật đã xử lý bị tổn hại hoàn toàn/bị chết.

Thử nghiệm chỉ ra rằng tổn hại đối với cây trồng lúa mỳ mùa hè (TRZAS; cv. Triso) gây ra bởi thuốc diệt cỏ mesosulfuron-metyl (= tổn hại bởi thuốc diệt cỏ không cùng với hợp chất có công thức (I) trong bảng dưới đây) được giảm đáng kể bằng cách xử lý bằng các chất theo sáng chế (= tổn hại do thuốc diệt cỏ cùng với hợp chất có công thức (I) trong bảng dưới đây):

Ví dụ số	Liều lượng chất an toàn có công thức (I) (g/ha)	Cây trồng	Tổn hại bởi thuốc diệt cỏ không cùng với hợp chất có công thức (I)	Tổn hại bởi thuốc diệt cỏ cùng với hợp chất có công thức (I)	Mức giảm tuyệt đối về tổn hại (Chênh lệch)
I.11-38		TRZAS	50	30	20
I.2-38	1000 g/ha	TRZAS	50	30	20
I.2-4	1000 g/ha	TRZAS	50	30	20
I.3-4	1000 g/ha	TRZAS	50	23	27
I.3-4	250 g/ha	TRZAS	50	30	20
I.54-38	1000 g/ha	TRZAS	50	30	20
I.21-38	1000 g/ha	TRZAS	43	20	23
I.53-4	1000 g/ha	TRZAS	43	23	20
I.54-4	250 g/ha	TRZAS	43	20	23
I.53-38	1000 g/ha	TRZAS	43	23	20
I.12-7	250 g/ha	TRZAS	43	20	23

Ví dụ số	Liều lượng chất an toàn có công thức (I) (g/ha)	Cây trồng	Tồn hại bởi thuốc diệt cỏ không cùng với hợp chất có công thức (I)	Tồn hại bởi thuốc diệt cỏ cùng với hợp chất có công thức (I)	Mức giảm tuyệt đối về tồn hại (Chênh lệch)
I.53-7	250 g/ha	TRZAS	43	10	33
I.42-7	250 g/ha	TRZAS	43	0	43
I.41-7	250 g/ha	TRZAS	43	20	23
I.3-7	1000 g/ha	TRZAS	43	10	33
I.3-7	250 g/ha	TRZAS	43	20	23
I.20-1	1000 g/ha	TRZAS	43	7	36
I.20-1	250 g thành phần hoạt tính/ha	TRZAS	43	13	30
I.5-49	125 g thành phần hoạt tính/ha	TRZAS	67	13	54
I.6-49	250 g thành phần hoạt tính/ha	TRZAS	57	27	30
I.5-32	1000 g thành phần hoạt tính/ha	TRZAS	57	30	27
I.6-38	125 g	TRZAS	67	17	50

Ví dụ số	Liều lượng chất an toàn có công thức (I) (g/ha)	Cây trồng	Tồn hại bởi thuốc diệt cỏ không cùng với hợp chất có công thức (I)	Tồn hại bởi thuốc diệt cỏ cùng với hợp chất có công thức (I)	Mức giảm tuyệt đối về tồn hại (Chênh lệch)
	thành phần hoạt tính/ ha				
I.47-38	125 g thành phần hoạt tính/ ha	TRZAS	40	13	27
I.47-32	500 g thành phần hoạt tính/ ha	TRZAS	57	13	44
I.47-32	125 g thành phần hoạt tính/ ha	TRZAS	57	23	34
I.47-49	125 g thành phần hoạt tính/ ha	TRZAS	60	30	30
I.48-38	125 g thành phần hoạt tính/ ha	TRZAS	60	30	30

Ví dụ số	Liều lượng chất an toàn có công thức (I) (g/ha)	Cây trồng	Tổn hại bởi thuốc diệt cỏ không cùng với hợp chất có công thức (I)	Tổn hại bởi thuốc diệt cỏ cùng với hợp chất có công thức (I)	Mức giảm tuyệt đối về tổn hại (Chênh lệch)
I.48-32	500 g thành phần hoạt tính/ ha	TRZAS	60	23	37
I.48-32	125 g thành phần hoạt tính/ ha	TRZAS	60	30	30
I.48-49	500 g thành phần hoạt tính/ ha	TRZAS	60	20	40
I.48-49	125 g thành phần hoạt tính/ ha	TRZAS	60	23	37
I.44-32	500 g thành phần hoạt tính/ ha	TRZAS	63	7	56
I.44-32	125 g thành phần hoạt tính/ ha	TRZAS	63	10	53

Ví dụ số	Liều lượng chất an toàn có công thức (I) (g/ha)	Cây trồng	Tồn hại bởi thuốc diệt cỏ không cùng với hợp chất có công thức (I)	Tồn hại bởi thuốc diệt cỏ cùng với hợp chất có công thức (I)	Mức giảm tuyệt đối về tồn hại (Chênh lệch)
I.45-38	500 g thành phần hoạt tính/ha	TRZAS	63	20	43
I.45-38	125 g thành phần hoạt tính/ha	TRZAS	63	30	33
I.45-32	500 g thành phần hoạt tính/ha	TRZAS	63	33	30
I.45-32	125 g thành phần hoạt tính/ha	TRZAS	63	40	23
I.45-49	500 g thành phần hoạt tính/ha	TRZAS	63	40	23
I.45-49	125 g thành phần	TRZAS	63	43	20

Ví dụ số	Liều lượng chất an toàn có công thức (I) (g/ha)	Cây trồng	Tổn hại bởi thuốc diệt cỏ không cùng với hợp chất có công thức (I)	Tổn hại bởi thuốc diệt cỏ cùng với hợp chất có công thức (I)	Mức giảm tuyệt đối về tổn hại (Chênh lệch)
	hoạt tính/ha				
I.48-2	125 g thành phần hoạt tính/ha	TRZAS	30	3	27
I.45-2	500 g thành phần hoạt tính/ha	TRZAS	50	30	20
I.44-38	500 g thành phần hoạt tính/ha	TRZAS	63	3	60
I.44-38	125 g thành phần hoạt tính/ha	TRZAS	63	10	53
I.44-49	500 g thành phần hoạt tính/ha	TRZAS	53	7	46
I.44-49	125 g	TRZAS	53	10	43

Ví dụ số	Liều lượng chất an toàn có công thức (I) (g/ha)	Cây trồng	Tồn hại bởi thuốc diệt cỏ không cùng với hợp chất có công thức (I)	Tồn hại bởi thuốc diệt cỏ cùng với hợp chất có công thức (I)	Mức giảm tuyệt đối về tồn hại (Chênh lệch)
I.24-2	thành phần hoạt tính/ ha				
I.43-49	500 g thành phần hoạt tính/ ha	TRZAS			
I.43-49	500 g thành phần hoạt tính/ ha	TRZAS			
I.46-38	125 g thành phần hoạt tính/ ha	TRZAS			
I.43-32	125 g thành phần hoạt tính/ ha	TRZAS			
			50	30	20
			63	23	40
			63	27	36
			63	30	33
			63	20	43

Ví dụ số	Liều lượng chất an toàn có công thức (I) (g/ha)	Cây trồng	Tồn hại bởi thuốc diệt cỏ không cùng với hợp chất có công thức (I)	Tồn hại bởi thuốc diệt cỏ cùng với hợp chất có công thức (I)	Mức giảm tuyệt đối về tồn hại (Chênh lệch)
I.43-32	125 g thành phần hoạt tính/ ha	TRZAS	63	30	33
I.43-38	500 g thành phần hoạt tính/ ha	TRZAS	63	30	33
I.43-38	125 g thành phần hoạt tính/ ha	TRZAS	63	33	30
I.46-32	500 g thành phần hoạt tính/ ha	TRZAS	53	7	46
I.46-32	125 g thành phần hoạt tính/ ha	TRZAS	53	10	43
I.46-49	125 g thành phần hoạt tính/ ha	TRZAS	53	10	43

Ví dụ số	Liều lượng chất an toàn có công thức (I) (g/ha)	Cây trồng	Tồn hại bởi thuốc diệt cỏ không cùng với hợp chất có công thức (I)	Tồn hại bởi thuốc diệt cỏ cùng với hợp chất có công thức (I)	Mức giảm tuyệt đối về tồn hại (Chênh lệch)
I.46-2	125 g thành phần hoạt tính/ha	TRZAS	53	7	46
I.4-38	125 g thành phần hoạt tính/ha	TRZAS	57	30	27
I.4-49	125 g thành phần hoạt tính/ha	TRZAS	57	17	40
I.4-32	500 g thành phần hoạt tính/ha	TRZAS	57	10	47
I.4-32	125 g thành phần hoạt tính/ha	TRZAS	57	23	34

2.2. Tác dụng tuyệt đối của các hợp chất chọn lọc theo sáng chế khi sử dụng ví dụ giảm tồn hại bằng mesosulfuron-metyl ở lúa mạch mùa hè (HORVS)

Hạt của cây trồng cần xử lý được ướm trong đất mùn pha cát trong chậu bằng xơ gỗ hoặc bằng nhựa (đường kính ~ 4 cm), được phủ bằng đất và trồng trong nhà kính trong các điều kiện tốt để nảy mầm và sinh trưởng. Các cây thử nghiệm được xử lý ở giai đoạn lá đầu (BBCH10 – BBCH12). Trong quá trình xử lý này, hợp chất có công thức chung (I) theo sáng chế được điều chế ở dạng bột có thể thẩm ướt (WP) được phun lên phần thực vật nằm trên mặt đất ở dạng huyền phù chứa nước với tỷ lệ áp dụng nước tương đương với 800 l/ha có bổ sung tác nhân thẩm ướt (chẳng hạn 0,2% agrotin) theo liều lượng đã chỉ ra.

Bước này được sau bởi bước dùng thuốc diệt cỏ. Nhằm mục đích này, mesosulfuron-metyl, được phối chế ở dạng hạt có thể phân tán trong nước (WG), được phun lên trên phần thực vật ở trên mặt đất ở dạng thể phân tán chứa nước với tỷ lệ áp dụng nước tương ứng với 800 l/ha có bổ sung tác nhân thẩm ướt (chẳng hạn 0,2% agrotin) ở liều lượng 20 g/ha. Liều lượng thuốc diệt cỏ ở đây được chọn sao cho nó gây ra tổn hại rõ rệt có thể nhìn thấy bằng mắt thường (tối thiểu là 30%, tối đa là 75%) so với cây trồng chưa được xử lý ở thời điểm đánh giá trên nhóm cây trồng đối chứng không xử lý bằng chất an toàn mà được bao hàm trong cùng một thử nghiệm.

Sau khi dùng, thực vật được trồng trong các điều kiện sinh trưởng tốt trong nhà kính. Tổn hại được đánh giá bằng mắt thường 14-21 ngày sau khi dùng.

Ảnh hưởng tổn hại được đánh giá bằng mắt thường theo thang 0-100% bằng cách so sánh với thực vật đối chứng chưa được xử lý, và lấy trung bình trên 2-3 mẫu lặp trên mỗi lần xử lý. Các ví dụ

0% = không ảnh hưởng đáng kể so với thực vật chưa được xử lý

20% = quần thể thực vật đã được xử lý có mức tổn hại 20% so với quần thể đối chứng chưa được xử lý (chẳng hạn chiều cao sinh trưởng, tổn hại ở lá, v.v.)

100% = thực vật đã xử lý bị tổn hại hoàn toàn/bị chết.

Thử nghiệm chỉ ra rằng tổn hại đối với cây trồng lúa mạch hè (HORVS; cv. Montoya) gây ra bởi thuốc diệt cỏ mesosulfuron-metyl (= hư hại bởi thuốc diệt cỏ không cùng với hợp chất có công thức (I) trong bảng dưới đây) được giảm đáng kể bằng cách xử lý bằng các chất theo sáng chế (= tổn hại do thuốc diệt cỏ cùng với hợp chất có công

thức (I) trong bảng dưới đây):

Ví dụ số	Liều lượng chất an toàn có công thức (I)	Cây trồng	Tồn hại bởi thuốc diệt cỏ không cùng với hợp chất có công thức (I) (%)	Tồn hại bởi thuốc diệt cỏ cùng với hợp chất có công thức (I) (%)	Mức giảm tồn hại tuyệt đối (Chênh lệch)
I.41-38	1000 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	53	30	23
I.41-38	250 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	53	30	23
I.54-38	1000 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	53	20	33
I.54-38	250 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	53	30	23
I.21-38	1000 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	60	20	40
I.21-38	250 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	60	30	30
I.53-4	250 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	60	33	27
I.54-4	250 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	60	37	23
I.53-38	1000 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	60	20	40
I.53-38	250 g thành	HORVS	60	30	30

Ví dụ số	Liều lượng chất an toàn có công thức (I)	Cây trồng	Tồn hại bởi thuốc diệt cỏ không cùng với hợp chất có công thức (I) (%)	Tồn hại bởi thuốc diệt cỏ cùng với hợp chất có công thức (I) (%)	Mức giám tồn hại tuyệt đối (Chênh lệch)
	phân hoạt tính/ ha				
I.12-7	1000 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	60	40	20
I.53-7	250 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	60	20	40
I.42-7	250 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	60	0	60
I.41-7	1000 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	60	20	40
I.3-7	250 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	60	40	20
I.5-49	500 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	73	17	56
I.5-49	125 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	73	23	50
I.6-49	1000 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	60	30	30
I.6-49	250 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	60	40	20

Ví dụ số	Liều lượng chất an toàn có công thức (I)	Cây trồng	Tồn hại bởi thuốc diệt cỏ không cùng với hợp chất có công thức (I) (%)	Tồn hại bởi thuốc diệt cỏ cùng với hợp chất có công thức (I) (%)	Mức giảm tồn hại tuyệt đối (Chênh lệch)
I.6-32	250 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	60	40	20
I.6-38	125 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	73	20	53
I.47-38	500 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	57	10	47
I.47-38	125 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	57	17	40
I.47-32	500 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	57	10	47
I.47-49	125 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	60	10	50
I.48-38	125 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	60	10	50
I.48-32	500 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	60	10	50
I.48-32	125 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	60	20	40
I.48-49	500 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	60	0	60

Ví dụ số	Liều lượng chất an toàn có công thức (I)	Cây trồng	Tồn hại bởi thuốc diệt cỏ không cùng với hợp chất có công thức (I) (%)	Tồn hại bởi thuốc diệt cỏ cùng với hợp chất có công thức (I) (%)	Mức giảm tồn hại tuyệt đối (Chênh lệch)
I.48-49	125 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	60	20	40
I.44-32	500 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	60	13	47
I.44-32	125 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	60	27	33
I.45-38	500 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	60	20	40
I.45-38	125 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	60	30	30
I.45-49	500 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	60	30	30
I.45-49	125 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	60	40	20
I.48-2	500 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	47	20	27
I.48-2	125 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	47	27	20
I.44-38	500 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	60	10	50

Ví dụ số	Liều lượng chất an toàn có công thức (I)	Cây trồng	Tồn hại bởi thuốc diệt cỏ không cùng với hợp chất có công thức (I) (%)	Tồn hại bởi thuốc diệt cỏ cùng với hợp chất có công thức (I) (%)	Mức giảm tồn hại tuyệt đối (Chênh lệch)
I.44-38	125 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	60	17	43
I.44-49	125 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	60	30	30
I.43-49	500 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	63	30	33
I.43-49	125 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	63	33	30
I.46-38	500 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	63	20	43
I.46-38	125 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	63	23	40
I.43-32	500 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	63	30	33
I.43-32	125 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	63	37	26
I.43-38	125 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	63	37	26
I.46-32	500 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	60	27	33

Ví dụ số	Liều lượng chất an toàn có công thức (I)	Cây trồng	Tồn hại bởi thuốc diệt cỏ không cùng với hợp chất có công thức (I) (%)	Tồn hại bởi thuốc diệt cỏ cùng với hợp chất có công thức (I) (%)	Mức giảm tồn hại tuyệt đối (Chênh lệch)
I.46-32	125 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	60	33	27
I.46-49	500 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	60	17	43
I.46-49	125 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	60	20	40
I.46-2	500 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	60	27	33
I.46-2	125 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	60	37	23
I.4-38	500 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	57	7	50
I.4-49	500 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	57	10	47
I.4-49	125 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	57	13	44
I.4-32	500 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	57	13	44
I.4-32	125 g thành phần hoạt tính/ ha	HORVS	57	37	20

### 2.3. Tác dụng tương đối của các hợp chất chọn lọc theo sáng chế khi sử dụng ví dụ giảm tổn hại bởi mesosulfuron-metyl ở lúa mỳ mùa hè (TRZAS)

Hạt của cây trồng cần xử lý được ướm trong đất mùn pha cát trong chậu băng nhựa (đường kính ~ 4 cm), được phủ băng đất và trồng trong nhà kính trong các điều kiện tốt để nảy mầm và sinh trưởng. Các cây thử nghiệm được xử lý ở giai đoạn lá đầu (BBCH10 – BBCH12). Trong quá trình xử lý này, hợp chất có công thức chung (I) theo sáng chế được điều chế ở dạng bột có thể thẩm ướt (WP) được phun lên phần thực vật nằm trên mặt đất ở dạng huyền phù chứa nước với tỷ lệ áp dụng nước tương đương với 800 l/ha có bổ sung tác nhân thẩm ướt (chẳng hạn 0,2% Genapol-LRO hoặc 0,2% Mero) theo liều lượng đã chỉ ra.

Bước này được sau bởi bước dùng thuốc diệt cỏ. Nhằm mục đích này, mesosulfuron-metyl, được phối chế ở dạng hạt có thể phân tán trong nước (WG), được phun lên trên phần ở trên mặt đất của thực vật ở dạng thể phân tán chứa nước với tỷ lệ áp dụng nước tương ứng với 800 l/ha có bổ sung tác nhân thẩm ướt (chẳng hạn 0,2% Genapol-LRO hoặc 1 l/ha Biopower) ở liều lượng 40-60 g/ha. Liều lượng thuốc diệt cỏ được chọn ở đây sao cho nó gây ra tổn hại rõ rệt có thể nhìn thấy bằng mắt thường (tối thiểu là 30%, tối đa là 75%) so với cây trồng chưa được xử lý ở thời điểm đánh giá trên nhóm cây trồng đối chứng không xử lý bằng chất an toàn mà được bao hàm trong cùng một thử nghiệm.

Sau khi dùng, thực vật được trồng trong các điều kiện sinh trưởng tốt trong nhà kính. 9-13 ngày sau khi dùng, hiệu quả của các hợp chất thử nghiệm được đánh giá bằng mắt thường. Nhằm mục đích này, hình dạng bên ngoài của thực vật được xử lý bằng hợp chất thử nghiệm và thuốc diệt cỏ được so sánh với các mẫu đối chứng dùng thuốc diệt cỏ tương ứng (không cùng với chất an toàn; với tổn hại có thể thấy được rõ rệt) và các mẫu đối chứng chưa được xử lý (không kèm theo tổn hại). Tác dụng làm giảm tổn hại của các hợp chất thử nghiệm được biểu thị trong bản mô tả này ở dạng mã hiệu quả theo bậc theo sơ đồ dưới đây:

0: không có sự giảm tổn hại (hình dạng bên ngoài tương ứng với mẫu đối chứng dùng thuốc diệt cỏ)

1: sự giảm nhẹ về mức tổn hại

2: sự giảm dễ nhận thấy về mức tổn hại

3: sự giảm đáng kể về mức tổn hại

4: sự giảm hoàn toàn về mức tổn hại (hình dạng bên ngoài tương ứng với mẫu đối chứng chưa xử lý)

Thử nghiệm chỉ ra hiệu quả rõ rệt của các chất theo sáng chế đối với sự giảm tổn hại ở cây trồng lúa mỳ mùa hè (TRZAS; cv. Triso) gây ra bởi thuốc diệt cỏ mesosulfuron-metyl:

Ví dụ số	Liều lượng chất an toàn có công thức (I)	Cây trồng	Hiệu quả của chất an toàn (Mã hiệu quả)
I.40-49	500	TRZAS	4
I.40-49	100	TRZAS	4
I.40-7	500	TRZAS	4
I.40-7	100	TRZAS	4
I.42-49	500	TRZAS	2
I.42-49	100	TRZAS	2
I.55-2	500	TRZAS	2
I.55-2	100	TRZAS	2
I.55-49	500	TRZAS	2
I.55-49	100	TRZAS	2
I.57-2	500	TRZAS	2
I.57-2	100	TRZAS	2
I.57-43	500	TRZAS	2
I.61-49	100	TRZAS	2
I.62-49	500	TRZAS	2
I.62-49	100	TRZAS	2
I.62-7	100	TRZAS	3
I.63-49	100	TRZAS	2
I.64-49	100	TRZAS	2

I.67-49	500	TRZAS	2
I.67-49	100	TRZAS	2
I.67-7	100	TRZAS	3
I.41-49	100	TRZAS	2
I.3-43	500	TRZAS	2
I.3-43	100	TRZAS	2
I.57-43	500	TRZAS	2
I.48-43	500	TRZAS	2
I.42-43	500	TRZAS	2
I.42-43	100	TRZAS	2
I.66-49	100	TRZAS	2
I.68-49	100	TRZAS	2
I.69-49	100	TRZAS	2
I.73-49	100	TRZAS	2
I.40-48	100	TRZAS	2
I.41-49	100	TRZAS	2
I.67-48	100	TRZAS	2
I.61-48	100	TRZAS	2

2.4. Tác dụng tương đối của các hợp chất chọn lọc theo sáng chế khi sử dụng ví dụ giảm tổn hại bằng mesosulfuron-metyl ở lúa mạch mùa hè (HORVS)

Hạt của cây trồng cần xử lý được ướm trong đất mùn pha cát trong chậu bằng nhựa (đường kính ~ 4 cm), được phủ bằng đất và trồng trong nhà kính trong các điều kiện tốt để nảy mầm và sinh trưởng. Các cây thử nghiệm được xử lý ở giai đoạn lá đầu (BBCH10 – BBCH12). Trong quá trình xử lý này, hợp chất có công thức chung (I) theo sáng chế được điều chế ở dạng bột có thể thẩm ướt (WP) được phun lên phần thực vật nằm trên mặt đất ở dạng huyền phù chứa nước với tỷ lệ áp dụng nước tương đương với 800 l/ha có bổ sung tác nhân thẩm ướt (chẳng hạn 0,2% Genapol-LRO hoặc 0,2% Mero) theo liều lượng đã chỉ ra.

Bước này được sau bởi bước dùng thuốc diệt cỏ. Nhằm mục đích này, mesosulfuron-metyl, được phối chế ở dạng hạt có thể phân tán trong nước (WG), được phun lên trên phần thực vật ở trên mặt đất ở dạng thể phân tán chứa nước với tỷ lệ áp dụng nước tương ứng với 800 l/ha có bổ sung tác nhân thấm ướt (chẳng hạn 0,2% Genapol-LRO hoặc 1 l/ha Biopower) ở liều lượng 40-60 g/ha. Liều lượng thuốc diệt cỏ ở đây được chọn sao cho nó gây ra tổn hại rõ rệt có thể nhìn thấy bằng mắt thường (tối thiểu là 30%, tối đa là 75%) so với cây trồng chưa được xử lý ở thời điểm đánh giá trên nhóm cây trồng đối chứng không xử lý bằng chất an toàn mà được bao hàm trong cùng một thử nghiệm.

Sau khi dùng, thực vật được trồng trong các điều kiện sinh trưởng tốt trong nhà kính. 9-13 ngày sau khi dùng, hiệu quả của các hợp chất thử nghiệm được đánh giá bằng mắt thường. Nhằm mục đích này, hình dạng bên ngoài của thực vật được xử lý bằng hợp chất thử nghiệm và thuốc diệt cỏ được so sánh với các mẫu đối chứng dùng thuốc diệt cỏ tương ứng (không cùng với chất an toàn; với tổn hại có thể thấy được rõ rệt) và các mẫu đối chứng chưa được xử lý (không kèm theo tổn hại). Tác dụng làm giảm tổn hại của các hợp chất thử nghiệm được biểu thị trong bản mô tả này một cách riêng biệt cho hai mẫu lặp các mã hiệu quả theo bậc theo sơ đồ dưới đây:

0: không có sự giảm tổn hại (hình dạng bên ngoài tương ứng với mẫu đối chứng dùng thuốc diệt cỏ)

1: sự giảm nhẹ về mức tổn hại

2: sự giảm dễ nhận thấy về mức tổn hại

3: sự giảm đáng kể về mức tổn hại

4: sự giảm hoàn toàn về mức tổn hại (hình dạng bên ngoài tương ứng với mẫu đối chứng chưa xử lý)

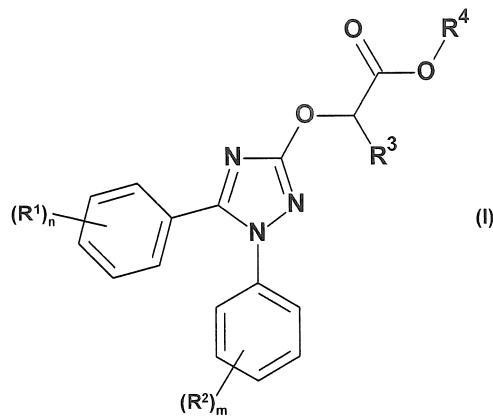
Thử nghiệm chỉ ra hiệu quả rõ rệt của các chất theo sáng chế đối với sự giảm tổn hại ở cây trồng lúa mạch mùa hè (HORVS; cv. Montoya) gây ra bởi thuốc diệt cỏ mesosulfuron-metyl:

Ví dụ số	Liều lượng chất an toàn có công thức (I) (g/ha)	Cây trồng	Hiệu quả của chất an toàn (Mã hiệu quả)
I.40-49	500	HORVS	4
I.40-49	100	HORVS	4
I.40-7	500	HORVS	4
I.40-7	100	HORVS	2
I.42-49	500	HORVS	3
I.42-49	100	HORVS	2
I.55-49	500	HORVS	2
I.55-49	100	HORVS	2
I.57-49	500	HORVS	2
I.57-49	100	HORVS	2
I.61-49	100	HORVS	2
I.62-49	500	HORVS	2
I.62-49	100	HORVS	2
I.62-7	500	HORVS	2
I.62-7	100	HORVS	2
I.63-49	100	HORVS	2
I.64-49	100	HORVS	2
I.67-49	500	HORVS	2
I.67-49	100	HORVS	2
I.67-7	500	HORVS	2
I.67-7	100	HORVS	2
I.41-49	100	HORVS	2
I.3-43	500	HORVS	2
I.3-43	100	HORVS	2
I.57-43	500	HORVS	2
I.48-43	500	HORVS	2
I.42-43	500	HORVS	2
I.42-43	100	HORVS	2

I.66-49	100	HORVS	2
I.68-49	100	HORVS	2
I.69-49	100	HORVS	2
I.73-49	100	HORVS	2
I.40-48	100	HORVS	2
I.41-49	100	HORVS	2
I.67-48	100	HORVS	2
I.61-48	100	HORVS	2

## YÊU CẦU BẢO HỘ

### 1. Hợp chất có công thức chung (I) hoặc muối của nó



trong đó:

$R^1$  và  $R^2$  độc lập là hydro, halogen, xyano, nitro,  $(C_1-C_6)$ alkyl,  $(C_2-C_6)$ alkenyl,  $(C_2-C_6)$ alkynyl,  $(C_3-C_8)$ xcycloalkyl,  $(C_3-C_8)$ xcycloalkenyl,  $(C_1-C_6)$ alkoxy hoặc  $(C_1-C_6)$ alkylS(O)<sub>p</sub>, trong đó bảy gốc cuối không được thê hoặc được thê bởi các gốc khác đã biết từ nhóm gồm halogen, xyano,  $(C_1-C_6)$ alkoxy và  $(C_1-C_6)$ alkylS(O)<sub>p</sub>,

$R^3$  là hydro hoặc  $(C_1-C_6)$ alkyl,

$R^4$  là hydro,  $(C_1-C_{18})$ alkyl,  $(C_1-C_{18})$ haloalkyl,  $(C_1-C_{18})$ xyanoalkyl,  $(C_2-C_{18})$ alkenyl,  $(C_2-C_{18})$ alkynyl,  $(C_3-C_{12})$ xcycloalkyl,  $(C_3-C_{12})$ xcycloalkenyl, aryl, heteroaryl,  $(C_1-C_{18})$ alkoxy-( $C_1-C_{18}$ )alkyl,  $(C_1-C_{18})$ haloalkoxy-( $C_1-C_{18}$ )alkyl,  $(C_1-C_{18})$ alkoxy-( $C_1-C_{18}$ )haloalkyl,  $(C_1-C_{18})$ alkylthio-( $C_1-C_{18}$ )alkyl,  $(C_1-C_{18})$ haloalkylthio-( $C_1-C_{18}$ )alkyl,  $(C_2-C_{18})$ haloalkenyl,  $(C_2-C_{18})$ haloalkynyl, heteroxycycl-( $C_1-C_{18}$ )alkyl, aryl-( $C_1-C_{18}$ )alkyl,  $(C_3-C_{12})$ xcycloalkyl-( $C_1-C_{18}$ )alkyl,  $(C_1-C_{18})$ alkoxycarbonyl-( $C_1-C_{18}$ )alkyl, và  $(C_1-C_{18})$ alkoxycarbonyl-( $C_3-C_{12})$ xcycloalkyl-( $C_1-C_{18}$ )alkyl, hoặc

gốc có công thức  $-NR^aR^b$  hoặc  $-N=CR^cR^d$ ,

trong đó, trong 2 gốc trước, mỗi trong số các gốc  $R^a$ ,  $R^b$ ,  $R^c$  và  $R^d$  độc lập là hydro,  $(C_1-C_4)$ alkyl,  $(C_2-C_4)$ alkenyl,  $(C_2-C_4)$ alkynyl, benzyl, benzyl được thê, phenyl hoặc phenyl được thê

hoặc  $R^a$  và  $R^b$  cùng với nguyên tử nitơ tạo thành dị vòng có 3 đến 8 cạnh mà ngoài nguyên tử nitơ có thể còn chứa một hoặc hai nguyên tử khác loại khác thuộc vòng

từ nhóm gồm N, O và S và không được thế hoặc được thế bằng một hoặc nhiều gốc từ nhóm gồm (C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>)-alkyl và (C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>)-haloalkyl,

hoặc R<sup>c</sup> và R<sup>d</sup> cùng với nguyên tử cacbon tạo thành gốc dị vòng hoặc vòng cacbon có 3 đến 8 cạnh có thể chứa 1 đến 3 nguyên tử khác loại thuộc vòng từ nhóm gồm N, O và S, trong đó gốc vòng cacbon hoặc dị vòng không được thế hoặc được thế bằng một hoặc nhiều gốc từ nhóm gồm (C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>)-alkyl và (C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>)-haloalkyl,

n và m      độc lập là số từ 0 đến 5,

và

p              bằng 0, 1 hoặc 2,

ngoại trừ etyl [(1,5-diphenyl-1H-1,2,4-triazol-3-yl)oxy]axetat (CAS [931426-67-4]).

2. Hợp chất có công thức chung (I) theo điểm 1 hoặc muối của nó,

trong đó:

R<sup>1</sup> và R<sup>2</sup>      độc lập là hydro, halogen, xyano, nitro, (C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>)alkyl, (C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>)alkenyl, (C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>)alkynyl, (C<sub>3</sub>-C<sub>6</sub>)xycloalkyl, (C<sub>3</sub>-C<sub>6</sub>)xycloalkenyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>)alkoxy hoặc (C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>)alkylS(O)<sub>p</sub>, trong đó bảy gốc cuối không được thế hoặc được thế bởi các gốc khác đã biết từ nhóm gồm halogen, xyano, (C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>)alkoxy và (C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>)alkylS(O)<sub>p</sub>,

R<sup>3</sup>              là hydro hoặc (C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>)alkyl,

R<sup>4</sup>              là hydro, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)haloalkyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)xyanoalkyl, (C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>)alkenyl, (C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>)alkynyl, (C<sub>3</sub>-C<sub>12</sub>)xycloalkyl, (C<sub>3</sub>-C<sub>12</sub>)xycloalkenyl, aryl, heteroaryl, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkoxy-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)haloalkoxy-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkoxy-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)haloalkyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkylthio-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)haloalkylthio-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl, (C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>)haloalkenyl, (C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>)haloalkynyl, heteroxycycl-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl, aryl-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl, (C<sub>3</sub>-C<sub>12</sub>)xycloalkyl-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkoxycacbonyl-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl, hoặc (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkoxycacbonyl-(C<sub>3</sub>-C<sub>12</sub>)xycloalkyl-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl,

n và m      độc lập là số từ 0 đến 4,

và

p bằng 0, 1 hoặc 2,

ngoại trừ etyl [(1,5-diphenyl-1H-1,2,4-triazol-3-yl)oxy]axetat.

3. Hợp chất có công thức chung (I) theo điểm 1 hoặc muối của nó,

trong đó:

$R^1$  và  $R^2$  độc lập là hydro, halogen, xyano, methyl,  $CF_3$ ,  $CH_2F$ ,  $CHF_2$ ,  $OCH_3$ ,  $OCF_3$ ,  $SCH_3$  hoặc  $SCF_3$ ,

$R^3$  là hydro,  $CH_2CH_3$  hoặc  $CH_3$ ,

$R^4$  là hydro, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)haloalkyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)xyanoalkyl, (C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>)alkenyl, (C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>)alkynyl, (C<sub>3</sub>-C<sub>12</sub>)xycloalkyl, (C<sub>3</sub>-C<sub>12</sub>)xycloalkenyl, aryl, heteroaryl, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkoxy-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)haloalkoxy-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkoxy-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)haloalkyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkylthio-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)haloalkylthio-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl, (C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>)haloalkenyl, (C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>)haloalkynyl, heteroxycyl-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl, aryl-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl, (C<sub>3</sub>-C<sub>12</sub>)xycloalkyl-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkoxycarbonyl-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl, hoặc (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkoxycarbonyl-(C<sub>3</sub>-C<sub>12</sub>)xycloalkyl-(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>)alkyl,

n và m độc lập là số 0, 1, 2 hoặc 3,

ngoại trừ etyl [(1,5-diphenyl-1H-1,2,4-triazol-3-yl)oxy]axetat.

4. Hợp chất có công thức chung (I) theo điểm 1 hoặc muối của nó,

trong đó:

$R^1$  và  $R^2$  độc lập là hydro, flo, clo, brom, iod, CN, methyl,  $CF_3$ ,  $CH_2F$ ,  $CHF_2$ ,  $OCH_3$ ,  $OCF_3$ ,  $SCH_3$  hoặc  $SCF_3$ ,

$R^3$  là hydro hoặc  $CH_3$ ,

$R^4$  là hydro, ( $C_1-C_{10}$ )alkyl, ( $C_1-C_{10}$ )haloalkyl, ( $C_1-C_{10}$ )xyanoalkyl, ( $C_2-C_{10}$ )alkenyl, ( $C_2-C_{10}$ )alkynyl, ( $C_3-C_9$ )xycloalkyl, ( $C_3-C_9$ )xycloalkenyl, aryl, heteroaryl, ( $C_1-C_{10}$ )alkoxy-( $C_1-C_{10}$ )alkyl, ( $C_1-C_{10}$ )haloalkoxy-( $C_1-C_{10}$ )alkyl, ( $C_1-C_{10}$ )alkoxy-( $C_1-C_{10}$ )haloalkyl, ( $C_1-C_{10}$ )alkylthio-( $C_1-C_{10}$ )alkyl, ( $C_1-C_{10}$ )haloalkylthio-( $C_1-C_{10}$ )alkyl, ( $C_2-C_{18}$ )haloalkenyl, ( $C_2-C_{18}$ )haloalkynyl, heteroxycycl-( $C_1-C_{10}$ )alkyl, aryl-( $C_1-C_{10}$ )alkyl, ( $C_3-C_9$ )xycloalkyl-( $C_1-C_{10}$ )alkyl, ( $C_1-C_{10}$ )alkoxycarbonyl-( $C_1-C_{10}$ )alkyl

hoặc (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)alkoxycarbonyl-(C<sub>3</sub>-C<sub>9</sub>)xycloalkyl-(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)alkyl,

n và m      độc lập là số 0, 1, 2 hoặc 3,

ngoại trừ etyl [(1,5-diphenyl-1H-1,2,4-triazol-3-yl)oxy]acetat.

5. Hợp chất có công thức chung (I) theo điểm 1 hoặc muối của nó,

trong đó:

R<sup>1</sup> và R<sup>2</sup>      độc lập là hydro, flo, clo, brom, iod, xyano, methyl, CF<sub>3</sub>, CH<sub>2</sub>F, CHF<sub>2</sub>, OCH<sub>3</sub>, OCF<sub>3</sub>, SCH<sub>3</sub> hoặc SCF<sub>3</sub>,

R<sup>3</sup>      là hydro,

R<sup>4</sup>      là hydro, methyl, etyl, n-propyl, i-propyl, n-butyl, n-pentyl, phenyl, benzyl, CH<sub>2</sub>(4-Cl-Ph), CH<sub>2</sub>(4-F-Ph), CH<sub>2</sub>(4-OMe-Ph), 2-methoxyethyl, tetrahydrofuran-2-yl-methyl, tetrahydrofuran-3-ylmethyl, tetrahydropyran-2-ylmethyl, tetrahydropyran-3-ylmethyl, tetrahydropyran-4-ylmethyl, methylpropionat-3-yl, ethylpropionat-3-yl, methylacetat-2-yl, ethylacetat-2-yl, methylpivalat-2-yl, ethylpivalat-3-yl, methyl-2-methylpropanoat-3-yl, methyl-2,2-dimethylpropanoat-3-yl, ethyl-2-methylpropanoat-3-yl, methyl-2-propanoat-2-yl, ethyl-2-propanoat-2-yl, methylacetat-2-yl, ethylacetat-2-yl, methyl-1-methylxyclopropancarboxylat-2-yl, ethyl-1-methylxyclopropancarboxylat-2-yl, 2-(dimethylamino)ethyl, oxetan-3-yl, (3-methyloxetan-3-yl)methyl, 2,2,2-trifloethyl, 2,2-difloethyl, 2-floethyl, 2,2,3,3,3-pentafloropropyl, xyclopropylmethyl, 1-xyclopropylethyl, (1-methylxyclopropyl)methyl, (2,2-dicloxcyclopropyl)methyl, (2,2-dimethylxyclopropyl)methyl, allyl, propargyl (prop-2-yn-1-yl), 2-cloprop-2-en-1-yl, 3-phenylprop-2-yn-1-yl, 3,3-dicloprop-2-en-1-yl, 3,3-diclo-2-floroprop-2-en-1-yl, methylprop-2-yn-1-yl, 2-methylprop-2-en-1-yl, but-2-en-1-yl, but-3-en-1-yl, but-2-yn-1-yl, but-3-yn-1-yl, 4-clobut-2-yn-1-yl, 3-methylbut-2-en-1-yl, 3-methylbut-1-en-1-yl, 1-(2E)-1-methylbut-2-en-1-yl, (E)-pent-3-en-2-yl      hoặc      (Z)-pent-3-en-2-yl, xyclobutylmethyl, xyclopentylmethyl, xyclohexylmethyl, heptan-2-yl, isobutyl, 1,3-dioxolan-2-ylmethyl hoặc 1-ethyl-5-methyl-1H-pyrazol-4-methyl,

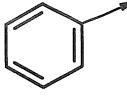
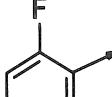
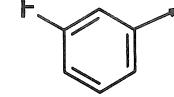
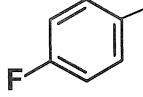
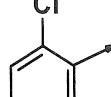
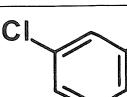
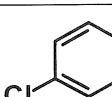
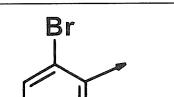
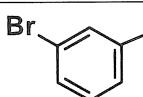
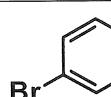
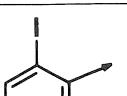
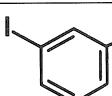
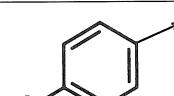
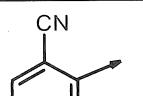
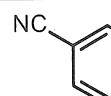
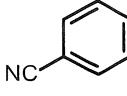
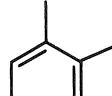
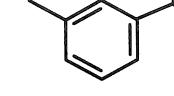
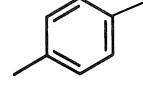
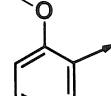
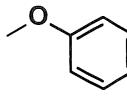
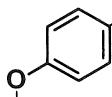
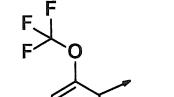
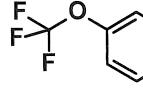
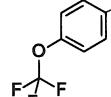
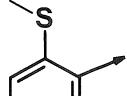
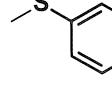
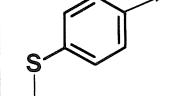
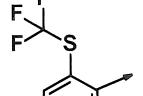
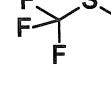
n và m      độc lập là số 0, 1, 2 hoặc 3,

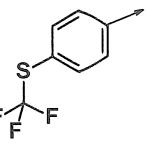
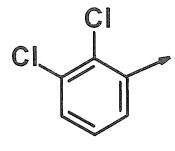
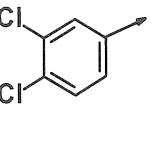
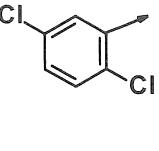
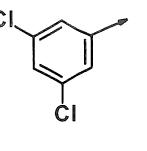
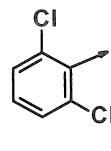
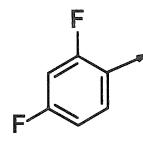
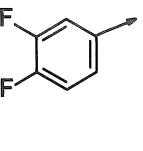
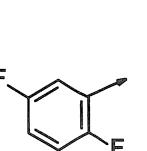
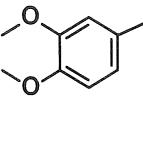
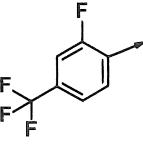
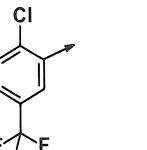
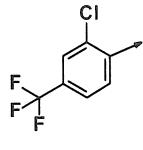
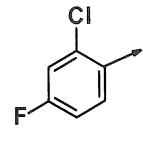
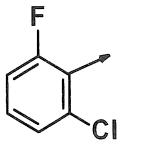
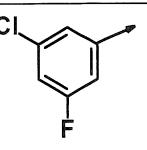
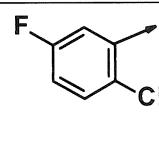
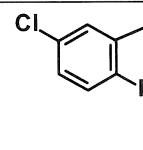
ngoại trừ etyl [(1,5-diphenyl-1H-1,2,4-triazol-3-yl)oxy]acetat.

6. Hợp chất có công thức chung (I) theo điểm 1 hoặc muối của nó,

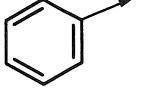
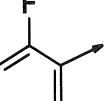
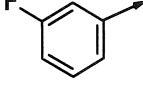
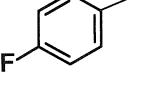
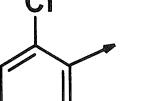
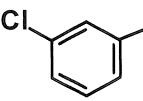
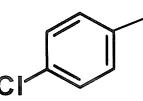
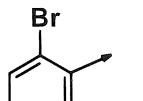
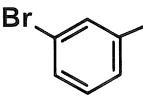
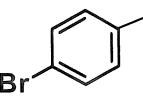
trong đó:

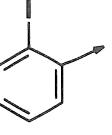
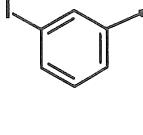
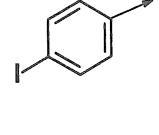
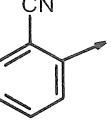
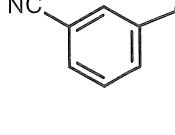
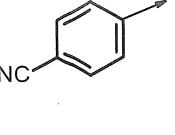
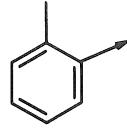
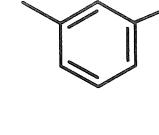
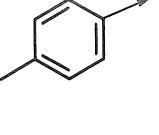
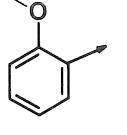
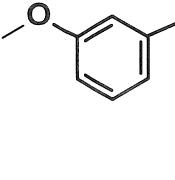
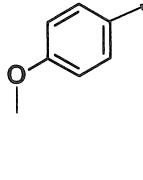
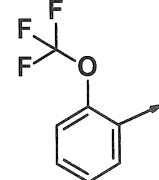
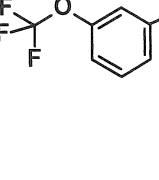
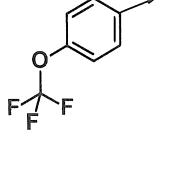
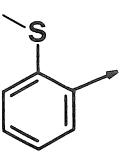
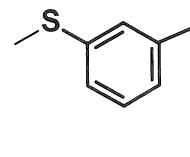
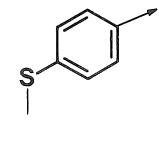
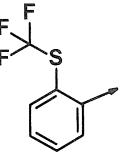
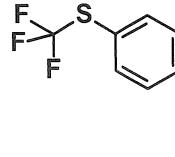
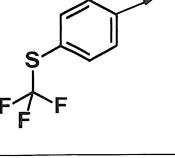
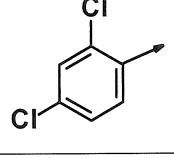
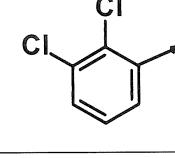
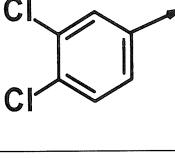
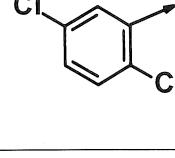
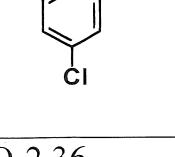
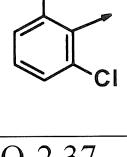
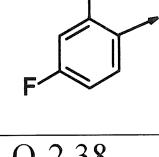
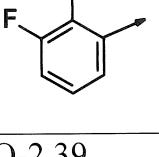
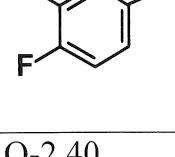
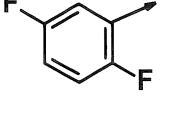
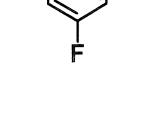
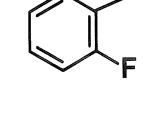
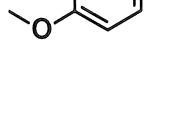
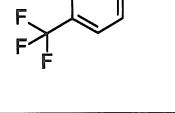
$(R^1)_n\text{-phenyl}$  là các nhóm từ Q-1.1 đến Q-1.53

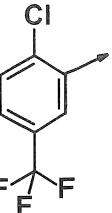
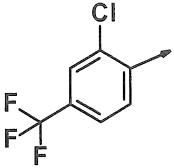
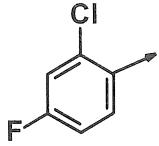
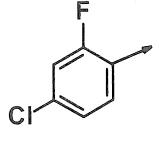
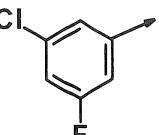
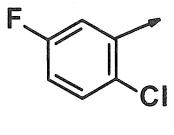
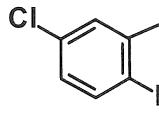
				
Q-1.1	Q-1.2	Q-1.3	Q-1.4	Q-1.5
				
Q-1.6	Q-1.7	Q-1.8	Q-1.9	Q-1.10
				
Q-1.11	Q-1.12	Q-1.13	Q-1.14	Q-1.15
				
Q-1.16	Q-1.17	Q-1.18	Q-1.19	Q-1.20
				
Q-1.21	Q-1.22	Q-1.23	Q-1.24	Q-1.25
				
Q-1.26	Q-1.27	Q-1.28	Q-1.29	Q-1.30

				
Q-1.31	Q-1.32	Q-1.33	Q-1.34	Q-1.35
				
Q-1.36	Q-1.37	Q-1.38	Q-1.39	Q-1.40
				
Q-1.41	Q-1.42	Q-1.43	Q-1.44	Q-1.45
				
Q-1.46	Q-1.47	Q-1.48	Q-1.49	Q-1.50
				
Q-1.51	Q-1.52	Q-1.53		

$(R^2)_m\text{-phenyl}$  là các nhóm Q-2.1 đến Q-2.53

				
Q-2.1	Q-2.2	Q-2.3	Q-2.4	Q-2.5
				
Q-2.6	Q-2.7	Q-2.8	Q-2.9	Q-2.10

				
Q-2.11	Q-2.12	Q-2.13	Q-2.14	Q-2.15
				
Q-2.16	Q-2.17	Q-2.18	Q-2.19	Q-2.20
				
Q-2.21	Q-2.22	Q-2.23	Q-2.24	Q-2.25
				
Q-2.26	Q-2.27	Q-2.28	Q-2.29	Q-2.30
				
Q-2.31	Q-2.32	Q-2.33	Q-2.34	Q-2.35
				
Q-2.36	Q-2.37	Q-2.38	Q-2.39	Q-2.40
				
Q-2.41	Q-2.42	Q-2.43	Q-2.44	Q-2.45

				
Q-2.46	Q-2.47	Q-2.48	Q-2.49	Q-2.50
				
Q-2.51	Q-2.52	Q-2.53		

$R^3$  là hydro,

và

$R^4$  là hydro, methyl, ethyl, n-propyl, i-propyl, n-butyl, n-pentyl, phenyl, benzyl,  $CH_2(4\text{-Cl-Ph})$ ,  $CH_2(4\text{-F-Ph})$ ,  $CH_2(4\text{-OMe-Ph})$ , 2-methoxyethyl, tetrahydrofuran-2-yl-methyl, tetrahydrofuran-3-ylmethyl, tetrahydropyran-2-ylmethyl, tetrahydropyran-3-ylmethyl, tetrahydropyran-4-ylmethyl, methylpropionat-3-yl, ethylpropionat-3-yl, methylacetat-2-yl, ethylacetat-2-yl, methylpivalat-2-yl, ethylpivalat-3-yl, methyl-2-methylpropanoat-3-yl, methyl-2,2-dimethylpropanoat-3-yl, ethyl-2-methylpropanoat-3-yl, methyl-2-propanoat-2-yl, ethyl-2-propanoat-2-yl, methylacetat-2-yl, ethylacetat-2-yl, methyl-1-methylxyclopropancarboxylat-2-yl, ethyl-1-methylxyclopropancarboxylat-2-yl, 2-(dimethylamino)ethyl, oxetan-3-yl, (3-methyloxetan-3-yl)methyl, 2,2,2-trifloethyl, 2,2-difloethyl, 2-floethyl, 2,2,3,3,3-pentafloropropyl, xyclopropylmethyl, 1-xyclopropylethyl, (1-methylxyclopropyl)methyl, (2,2-dicloxcyclopropyl)methyl, (2,2-dimethylxyclopropyl)methyl, allyl, propargyl (prop-2-yn-1-yl), 2-cloprop-2-en-1-yl, 3-phenylprop-2-yn-1-yl, 3,3-dicloprop-2-en-1-yl, 3,3-diclo-2-floprop-2-en-1-yl, methylprop-2-yn-1-yl, 2-methylprop-2-en-1-yl, but-2-en-1-yl, but-3-en-1-yl, but-2-yn-1-yl, but-3-yn-1-yl, 4-clobut-2-yn-1-yl, 3-metylbut-2-en-1-yl, 3-metylbut-1-en-1-yl, 1-(2E)-1-metylbut-2-en-1-yl, (E)-pent-3-en-2-yl hoặc (Z)-pent-3-en-2-yl, xyclobutylmethyl, xyclopentylmethyl, cyclohexylmethyl, heptan-2-yl, isobutyl, 1,3-dioxolan-2-ylmethyl hoặc 1-etyl-5-methyl-

1H-pyrazol-4-metyl,

ngoại trừ etyl [(1,5-diphenyl-1H-1,2,4-triazol-3-yl)oxy]axetat.

7. Chế phẩm bảo vệ thực vật hữu ích hoặc cây trồng, đặc trưng ở chỗ chứa ít nhất một hợp chất có công thức chung (I) hoặc muối của nó theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 6 kết hợp với các chế phẩm hóa nông khác và tùy ý các chất phụ trợ phối chế.

8. Chế phẩm theo điểm 7, chứa ít nhất một thuốc diệt cỏ.

9. Phương pháp làm giảm tác dụng gây độc trên thực vật của thuốc diệt sinh vật gây hại lên thực vật hoặc cây trồng hữu ích bằng cách sử dụng một hoặc nhiều hợp chất theo điểm 1-6 hoặc chế phẩm theo điểm 7 hoặc 8.

10. Phương pháp làm giảm tác dụng gây độc trên thực vật của thuốc diệt sinh vật gây hại lên thực vật hoặc cây trồng hữu ích, đặc trưng ở chỗ một hoặc nhiều hợp chất có công thức chung (I) theo sáng chế theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 6 để dùng chung với thuốc diệt sinh vật gây hại được triển khai đồng thời hoặc theo trình tự bất kỳ với thuốc diệt sinh vật gây hại.

11. Phương pháp theo điểm 10, trong đó thuốc diệt sinh vật gây hại là một hoặc nhiều thuốc diệt cỏ.

12. Phương pháp theo điểm 10 hoặc 11, đặc trưng ở chỗ hợp chất có công thức (I) hoặc muối của nó theo điểm 1 đến 6 được dùng cho thực vật, phần của thực vật, hoặc hạt hoặc nguyên liệu hạt của nó.