



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

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

(11)



1-0049058

(51)^{2020.01} C07D 237/16; C07D 401/10; C07D
417/10; C07D 409/10; C07D 413/10;
A01N 43/58; C07D 403/10

(13) B

(21) 1-2022-00772

(22) 17/07/2020

(86) PCT/EP2020/070242 17/07/2020

(87) WO 2021/009334 21/01/2021

(30) 1910290.4 18/07/2019 GB

(45) 25/07/2025 448

(43) 25/07/2022 412A

(73) SYNGENTA CROP PROTECTION AG (CH)

Rosentalstrasse 67, 4058, Basel, Switzerland

(72) LING, Kenneth, Bruce (GB); SEDEN, Peter, Timothy (GB); MATHEWS,
Christopher, John (GB); SHANAHAN, Stephen, Edward (GB); KITSIOU, Christiana
(CY); FINNEY, John (GB).

(74) Công ty TNHH Ban Ca (BANCA)

(54) HỢP CHẤT PYRIDAZINON ĐƯỢC THỂ LÀM CHẤT DIỆT CỎ, CHẾ PHẨM
DIỆT CỎ BAO GỒM HỢP CHẤT DIỆT CỎ NÀY VÀ PHƯƠNG PHÁP KIỂM
SOÁT SỰ SINH TRƯỞNG CỦA THỰC VẬT KHÔNG MONG MUỐN

(21) 1-2022-00772

(57) Sáng chế đề cập đến các phenyl-pyridazin-dion được thể có tính diệt cỏ và các dẫn xuất phenyl-pyridazinon được thể có công thức (I), cũng như các quy trình và các chất trung gian dùng để điều chế các dẫn xuất này. Sáng chế còn mở rộng đến các chế phẩm diệt cỏ bao gồm các dẫn xuất này. Các hợp chất và các chế phẩm này được sử dụng trong việc kiểm soát sinh trưởng của thực vật không mong muốn: cụ thể là việc sử dụng để kiểm soát các loài cỏ dại, chẳng hạn như các loài cỏ dại hai lá mầm lá rộng, trong mùa vụ của các thực vật hữu dụng.

Lĩnh vực kỹ thuật được đề cập

Sáng chế đề cập đến các phenyl-pyridazin-dion được thể có tính diệt cỏ và các dẫn xuất phenyl-pyridazinon được thể có công thức (I), cũng như các quy trình và các chất trung gian dùng để điều chế các dẫn xuất này. Sáng chế còn mở rộng đến các chế phẩm diệt cỏ bao gồm các dẫn xuất này, cũng như là việc sử dụng các hợp chất và các chế phẩm này trong việc kiểm soát sinh trưởng của thực vật không mong muốn: cụ thể là việc sử dụng để kiểm soát các loài cỏ dại, chẳng hạn như cỏ dại hai lá mầm lá rộng, ở các cây trồng hữu dụng.

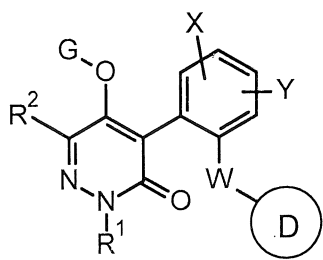
Tình trạng kỹ thuật của sáng chế

Pyridazinon có tính diệt cỏ đã được biết từ tài liệu đơn sáng chế WO2009/086041. Ngoài ra, pyridazinon được thể bởi heteroxyclyl có 5/6 cạnh có tính diệt cỏ đã được biết từ tài liệu đơn sáng chế WO 2011/045271. Trong khi đó tài liệu đơn sáng chế WO2013/160126 mô tả các dẫn xuất indolyl-pyridazinon, mà biểu hiện hoạt tính diệt cỏ.

Bản chất kỹ thuật của sáng chế

Sáng chế dựa trên phát hiện các phenyl-pyridazin-dion được thể và các dẫn xuất phenyl-pyridazinon được thể có công thức (I), thể hiện hoạt tính diệt cỏ tốt đáng kinh ngạc.

Do đó, theo khía cạnh thứ nhất, sáng chế đề xuất hợp chất có công thức (I)



(I), hoặc muối hoặc N-oxit của nó, trong đó

R^1 được lựa chọn từ nhóm bao gồm C_1 - C_4 alkyl, C_3 - C_6 cycloalkyl, C_3 - C_6 alkoxy, C_1 - C_2 alkoxy- C_1 - C_2 alkyl, C_2 - C_4 alkenyl, C_1 - C_4 haloalkyl, xyano- C_1 - C_4 alkyl, C_2 - C_4 haloalkenyl, C_2 - C_4 alkynyl và C_2 - C_4 haloalkynyl;

R^2 được lựa chọn từ nhóm bao gồm hydro, halogen, xyano, C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 haloalkyl, C_1 - C_6 haloalkoxy, C_1 - C_3 haloalkoxy- C_1 - C_3 alkyl-, C_1 - C_6 alkoxy, C_1 - C_3 alkoxy- C_1 - C_3 alkyl-, C_1 - C_3 alkoxy- C_1 - C_3 alkoxy- C_1 - C_3 alkyl-, C_3 - C_6 xycloalkyl, C_2 - C_6 alkenyl, C_2 - C_6 haloalkenyl, C_2 - C_6 alkynyl, C_1 - C_6 hydroxyalkyl-, C_1 - C_6 alkylcarbonyl-, $-S(O)_mC_1$ - C_6 alkyl, amino, C_1 - C_6 alkylamino, C_1 - C_6 dialkylamino, $-C(C_1-C_3alkyl)=N-O-C_1-C_3alkyl$ và C_2 - C_6 haloalkynyl;

G là hydro, hoặc $C(O)R^3$;

R^3 được lựa chọn từ nhóm bao gồm C_1 - C_6 alkyl, C_2 - C_6 alkenyl, C_2 - C_6 alkynyl, C_1 - C_6 alkyl-S-, C_1 - C_6 alkoxy, $-NR^4R^5$ và phenyl tùy ý được thế bởi một hoặc nhiều R^6 ;

mỗi R^4 và R^5 một cách độc lập được lựa chọn từ nhóm bao gồm hydro, C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 alkoxy, và C_3 - C_6 xycloalkyl, hoặc R^4 và R^5 cùng nhau có thể tạo thành vòng morpholinyl; và,

mỗi R^{4a} và R^{5a} một cách độc lập được lựa chọn từ nhóm bao gồm C_1 - C_6 alkoxy, và C_3 - C_6 xycloalkyl, hoặc R^{4a} và R^{5a} cùng nhau có thể tạo thành vòng morpholinyl; và,

R^6 được lựa chọn từ nhóm bao gồm halogen, xyano, nitro, C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 haloalkyl, C_1 - C_3 alkoxy và C_1 - C_3 haloalkoxy;

mỗi X và Y một cách độc lập là hydro, C_1 - C_3 alkyl, xyclopropyl, C_1 - C_3 alkoxy, C_1 - C_3 haloalkyl, C_1 - C_3 haloalkoxy, hoặc halogen;

D là vòng heteroaryl đơn vòng được thế chứa 1, 2, hoặc 3 dị nguyên tử một cách độc lập được lựa chọn từ oxy, nitơ và lưu huỳnh, được thế trên ít nhất một nguyên tử cacbon mạch vòng với R^8 và/hoặc trên ít nhất một nguyên tử nitơ mạch vòng với R^9 ;

ít nhất một R^8 được lựa chọn từ nhóm bao gồm C_1 - C_6 haloalkylcarbonyl-, C_3 - C_6 xycloalkylcarbonyl-, $-S(O)_mC_1$ - C_6 haloalkyl, $-S(O)_mC_3$ - C_6 xycloalkyl, $-O-S(O)_2C_1$ - C_3 alkyl, $-C_1$ - C_3 alkyl- $S(O)_mC_1$ - C_6 alkyl, $-C_1$ - C_3 alkyl- $S(O)_mC_1$ - C_6 haloalkyl, $-C_1$ - C_3 alkyl- $S(O)_mC_3$ - C_6 xycloalkyl, xyano- C_1 - C_6 -alkyl-, $-NR^{4a}R^{5a}$, $-C(S)NR^4R^5$, $-S(O)_2NHC(O)C_1$ - C_3 alkyl-, $-S(O)_2NR^4R^5$, $-C(O)OH$, $-C(O)OC_1$ - C_6 alkyl, $-C(O)NHS(O)_2C_1$ - C_6 alkyl, $-C(O)NR^4R^5$, $-NR^4C(O)NR^4R^5$, C_1 - C_6 alkylcarbonyl(C_1 - C_6 alkyl)amino-, C_1 - C_6 haloalkylcarbonylamino-, C_1 - C_6 haloalkylcarbonyl(C_1 - C_6 alkyl)amino-, C_1 - C_6 alkylsulfonylamino-, C_1 - C_6 alkylsulfonyl(C_1 - C_6 alkyl)amino-, C_1 - C_6 haloalkylsulfonylamino-, C_1 - C_6 haloalkylsulfonyl(C_1 - C_6 alkyl)amino-, C_3 -

C₆xycloalkylsulfonylamino-, C₃-C₆xycloalkylsulfonyl(C₁-C₆alkyl)amino-, hydroxyamino-, hydroxy(C₁-C₆alkyl)amino, C₁-C₆alkoxyamino, C₁-C₆alkoxy(C₁-C₆alkyl)amino, C₁-C₆haloalkoxyamino, C₁-C₆haloalkoxy(C₁-C₆alkyl)amino; và hệ thống vòng được lựa chọn từ nhóm bao gồm vòng phenyl, vòng heteroaryl có từ 5 đến 6 cạnh và vòng heterocyclyl có từ 3 đến 6 cạnh, trong đó hệ thống vòng đã nêu được thế bởi từ 0 đến 5 R¹⁶;

ít nhất một R⁹ được lựa chọn từ nhóm bao gồm C₅-C₆alkyl, C₅-C₆haloalkyl, C₃-C₆xycloalkyl, C₁-C₃alkoxy-C₃alkyl-, C₃alkoxy-C₁-C₂alkyl-, C₁-C₃haloalkoxy-C₁-C₃alkyl-, C₁-C₃alkoxy-C₁-C₃alkoxy-C₁-C₃alkyl-, C₁-C₆hydroxyalkyl-, -C₁-C₃alkyl-S(O)_m-C₁-C₆alkyl, -C₁-C₃alkyl-S(O)_m-C₁-C₆haloalkyl, -C₁-C₃alkyl-S(O)_m-C₃-C₆xycloalkyl, xyano-C₁-C₆-alkyl-, và hệ thống vòng được lựa chọn từ nhóm bao gồm: vòng phenyl, vòng heteroaryl có từ 5 đến 6 cạnh và vòng heterocyclyl có từ 3 đến 6 cạnh, trong đó hệ thống vòng đã nêu được thế bởi từ 0 đến 5 R¹⁶;

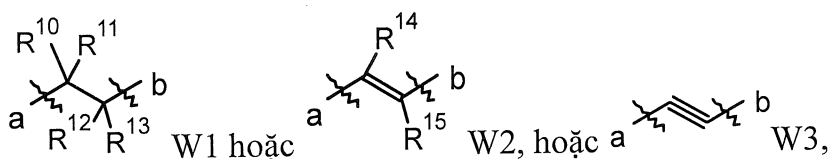
m là số nguyên 0, 1, hoặc 2;

mỗi R¹⁶ độc lập là halogen, xyano, C₁-C₆alkyl, C₁-C₆haloalkyl, C₁-C₆alkoxy hoặc C₁-C₆haloalkoxy;

hoặc D là vòng phenyl được thế bởi ít nhất một R⁸;

và,

W là hoặc



trong đó:

“a” biểu thị điểm gắn với gốc phenyl-pyridazin dion/phenyl-pyridazinon,

“b” biểu thị điểm gắn với vòng D,

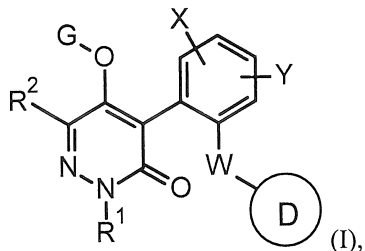
mỗi R¹⁰, R¹², R¹⁴ và R¹⁵ một cách độc lập là hydro, C₁-C₃alkyl, hoặc C₁-C₃haloalkyl;

hoặc R¹⁰ và R¹² cùng với các nguyên tử cacbon mà chúng gắn vào tạo thành vòng C₃-C₆ carboxycyclic; và

mỗi R¹¹ và R¹³ một cách độc lập là hydro, halogen, C₁-C₃alkyl, hoặc C₁-C₃haloalkyl;

với điều kiện khi một trong số R^{11} hoặc R^{13} là halogen, C_1 - C_3 alkyl hoặc C_1 - C_3 haloalkyl, nhóm còn lại là hydro.

Trong khía cạnh thứ hai, sáng chế đề xuất hợp chất có công thức (I)



hoặc muối hoặc N-oxit của chúng, trong đó

R^1 được lựa chọn từ nhóm bao gồm C_1 - C_4 alkyl, C_3 - C_6 xycloalkyl, C_3 - C_6 alkoxy, C_1 - C_2 alkoxy- C_1 - C_2 alkyl, C_2 - C_4 alkenyl, C_1 - C_4 haloalkyl, xyano- C_1 - C_4 alkyl, C_2 - C_4 haloalkenyl, C_2 - C_4 alkynyl và C_2 - C_4 haloalkynyl;

R^2 được lựa chọn từ nhóm bao gồm hydro, halogen, xyano, C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 haloalkyl, C_1 - C_6 haloalkoxy, C_1 - C_3 haloalkoxy- C_1 - C_3 alkyl-, C_1 - C_6 alkoxy, C_1 - C_3 alkoxy- C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 alkoxy- C_1 - C_3 alkoxy- C_1 - C_3 alkyl-, C_3 - C_6 xycloalkyl, C_2 - C_6 alkenyl, C_2 - C_6 haloalkenyl, C_2 - C_6 alkynyl, C_1 - C_6 hydroxyalkyl-, C_1 - C_6 alkylcarbonyl-, $-S(O)_mC_1$ - C_6 alkyl, $-NR^4R^5$, $-C(C_1-C_3alkyl)=N-O-C_1-C_3alkyl$ và C_2 - C_6 haloalkynyl;

G là hydro, hoặc $C(O)R^3$;

R^3 được lựa chọn từ nhóm bao gồm C_1 - C_6 alkyl, C_2 - C_6 alkenyl, C_2 - C_6 alkynyl, C_1 - C_6 alkyl-S-, C_1 - C_6 alkoxy, $-NR^4R^5$ và phenyl tùy ý được thế bởi một hoặc nhiều R^6 ;

mỗi R^4 và R^5 một cách độc lập được lựa chọn từ nhóm bao gồm hydro, C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 alkoxy, và C_3 - C_6 xycloalkyl, hoặc R^4 và R^5 cùng nhau có thể tạo thành vòng morpholinyl; và,

R^6 được lựa chọn từ nhóm bao gồm halogen, xyano, nitro, C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 haloalkyl, C_1 - C_3 alkoxy và C_1 - C_3 haloalkoxy;

X là xyclopropyl (tốt hơn là, X là *ortho* đối với gốc pyridazinon/pyridazin-dion);

Y là hydro, C_1 - C_3 alkyl, xyclopropyl, C_1 - C_3 alkoxy, C_1 - C_3 haloalkyl, C_1 - C_3 haloalkoxy, hoặc halogen (Y là *ortho* (vị trí 3) đối với gốc -W-D);

D là vòng heteroaryl đơn vòng được thể hoặc không được thể chứa 1, 2, hoặc 3 dị nguyên tử độc lập được lựa chọn từ oxy, nitơ và lưu huỳnh, và trong đó khi D được thể nó được thể trên ít nhất một nguyên tử cacbon mạch vòng với R^8 và/hoặc trên nguyên tử nitơ mạch vòng với R^9 ;

mỗi R^8 độc lập là oxy, hydroxyl, halogen, xyano, C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 haloalkyl, C_3 - C_6 -xycloalkyl, C_1 - C_6 alkoxy, C_1 - C_6 haloalkoxy, C_1 - C_3 alkoxy- C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 haloalkoxy- C_1 - C_3 alkyl-, C_1 - C_3 alkoxy- C_1 - C_3 alkoxy- C_1 - C_3 alkyl-, C_2 - C_6 alkenyl, C_2 - C_6 haloalkenyl, C_2 - C_6 alkynyl, C_2 - C_6 haloalkynyl, C_1 - C_6 hydroxyalkyl-, C_1 - C_6 alkylcarbonyl-, C_1 - C_6 haloalkylcarbonyl-, C_3 - C_6 xycloalkylcarbonyl-, $-S(O)_m$ - C_1 - C_6 haloalkyl, $-S(O)_m$ - C_3 - C_6 xycloalkyl, $-O-S(O)_2$ - C_1 - C_3 alkyl, $-C_1$ - C_3 alkyl- $S(O)_m$ - C_1 - C_6 alkyl, $-C_1$ - C_3 alkyl- $S(O)_m$ - C_1 - C_6 haloalkyl, $-C_1$ - C_3 alkyl- $S(O)_m$ - C_3 - C_6 xycloalkyl, xyano- C_1 - C_6 -alkyl-, NR^4R^5 , $-C(S)NR^4R^5$, $-S(O)_2NHC(O)C_1$ - C_3 alkyl-, $-S(O)_2NR^4R^5$, $-C(O)OH$, $-C(O)OC_1$ - C_6 alkyl, $-C(O)NHS-(O)_2C_1$ - C_6 alkyl, $-C(O)NR^4R^5$, $-NR^4C(O)NR^4R^5$, C_1 - C_6 alkylcarbonyl(C_1 - C_6 alkyl)amino-, C_1 - C_6 haloalkylcarbonylamino-, C_1 - C_6 haloalkylcarbonyl(C_1 - C_6 alkyl)amino-, C_1 - C_6 alkylsulfonylamino-, C_1 - C_6 alkylsulfonyl(C_1 - C_6 alkyl)amino-, C_1 - C_6 haloalkylsulfonylamino-, C_1 - C_6 haloalkylsulfonyl(C_1 - C_6 alkyl)amino-, C_3 - C_6 xycloalkylsulfonylamino-, C_3 - C_6 xycloalkylsulfonyl(C_1 - C_6 alkyl)amino-, hydroxyamino-, hydroxy(C_1 - C_6 alkyl)amino, C_1 - C_6 alkoxyamino, C_1 - C_6 alkoxy(C_1 - C_6 alkyl)amino, C_1 - C_6 haloalkoxyamino, C_1 - C_6 haloalkoxy(C_1 - C_6 alkyl)amino; hoặc hệ thống vòng được lựa chọn từ nhóm bao gồm vòng phenyl, vòng heteroaryl có từ 5 đến 6 cạnh và vòng heteroxyclyl có từ 3 đến 6 cạnh, trong đó hệ thống vòng đã nêu được thể bởi từ 0 đến 5 R^{16} ;

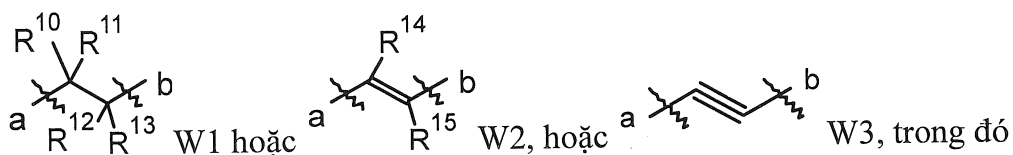
m là số nguyên 0, 1, hoặc 2 (tốt hơn là 0 hoặc 2); và

mỗi R^9 độc lập là C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 haloalkyl, C_3 - C_6 -xycloalkyl, C_1 - C_3 alkoxy- C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 haloalkoxy- C_1 - C_3 alkyl-, C_1 - C_3 alkoxy- C_1 - C_3 alkoxy- C_1 - C_3 alkyl-, C_1 - C_6 hydroxyalkyl-, $-C_1$ - C_3 alkyl- $S(O)_m$ - C_1 - C_6 alkyl, $-C_1$ - C_3 alkyl- $S(O)_m$ - C_1 - C_6 haloalkyl, $-C_1$ - C_3 alkyl- $S(O)_m$ - C_3 - C_6 xycloalkyl, xyano- C_1 - C_6 -alkyl-, hoặc hệ thống vòng được lựa chọn từ nhóm bao gồm: vòng phenyl, vòng heteroaryl có từ 5 đến 6 cạnh và vòng heteroxyclyl có từ 3 đến 6 cạnh, trong đó hệ thống vòng đã nêu được thể bởi từ 0 đến 5 R^{16} ;

mỗi R^{16} độc lập là halogen, xyano, C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 haloalkyl, C_1 - C_6 alkoxy hoặc C_1 - C_6 haloalkoxy;

hoặc D là vòng phenyl được thế hoặc không được thế, và trong đó khi vòng phenyl đã nêu được thế, nó được thế bởi từ 1 đến 5 R^8 ;

và, W là hoặc



“a” biểu thị điểm gắn với gốc phenyl-pyridazin dion/phenyl-pyridazinon,

“b” biểu thị điểm gắn với vòng D,

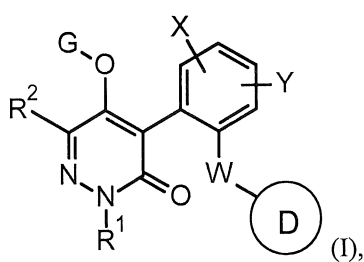
mỗi R^{10} , R^{12} , R^{14} và R^{15} một cách độc lập là hydro, C_1 - C_3 alkyl, hoặc C_1 - C_3 haloalkyl;

hoặc R^{10} và R^{12} cùng với các nguyên tử cacbon mà chúng gắn vào tạo thành vòng C_3 - C_6 cacboxyclic; và

mỗi R^{11} và R^{13} một cách độc lập là hydro, halogen, C_1 - C_3 alkyl, hoặc C_1 - C_3 haloalkyl;

với điều kiện khi một trong số R^{11} hoặc R^{13} là halogen, C_1 - C_3 alkyl hoặc C_1 - C_3 haloalkyl, nhóm còn lại là hydro.

Trong khía cạnh thứ ba có đề xuất hợp chất có công thức (I)



hoặc muối hoặc N-oxit của chúng, trong đó

R^1 được lựa chọn từ nhóm bao gồm C_1 - C_4 alkyl, C_3 - C_6 cycloalkyl, C_3 - C_6 alkoxy, C_1 - C_2 alkoxy- C_1 - C_2 alkyl, C_2 - C_4 alkenyl, C_1 - C_4 haloalkyl, xyano- C_1 - C_4 alkyl, C_2 - C_4 haloalkenyl, C_2 - C_4 alkynyl và C_2 - C_4 haloalkynyl;

R^2 được lựa chọn từ nhóm bao gồm hydro, halogen, xyano, C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 haloalkyl, C_1 - C_6 haloalkoxy, C_1 - C_3 haloalkoxy- C_1 - C_3 alkyl-, C_1 - C_6 alkoxy, C_1 - C_3 alkoxy- C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 alkoxy- C_1 - C_3 alkoxy- C_1 - C_3 alkyl-, C_3 - C_6 cycloalkyl, C_2 - C_6 alkenyl, C_2 - C_6

haloalkenyl, C₂-C₆ alkynyl, C₁-C₆hydroxyalkyl-, C₁-C₆alkylcarbonyl-, -S(O)_mC₁-C₆alkyl-, -NR⁴R⁵, -C(C₁-C₃alkyl)=N-O-C₁-C₃alkyl và C₂-C₆ haloalkynyl;

G là hydro, hoặc C(O)R³;

R³ được lựa chọn từ nhóm bao gồm C₁-C₆alkyl, C₂-C₆alkenyl, C₂-C₆alkynyl, C₁-C₆alkyl-S-, C₁-C₆alkoxy, -NR⁴R⁵ và phenyl tùy ý được thế bởi một hoặc nhiều R⁶;

mỗi R⁴ và R⁵ một cách độc lập được lựa chọn từ nhóm bao gồm hydro, C₁-C₆ alkyl, C₁-C₆ alkoxy, và C₃-C₆cycloalkyl, hoặc R⁴ và R⁵ cùng nhau có thể tạo thành vòng morpholinyl; và,

R⁶ được lựa chọn từ nhóm bao gồm halogen, xyano, nitro, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy và C₁-C₃haloalkoxy.

X là hydro, C₁-C₃ alkyl, cyclopropyl, C₁-C₃ alkoxy, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃haloalkoxy, hoặc halogen (tốt hơn là, X là *ortho* đối với gốc pyridazinon/pyridazin-dion);

Y là cyclopropyl (tốt hơn là, Y là *ortho* đối với gốc -W-D);

D là vòng heteroaryl đơn vòng được thế hoặc không được thế chứa 1, 2, hoặc 3 dị nguyên tử độc lập được lựa chọn từ oxy, nitơ và lưu huỳnh, và trong đó khi D được thế, nó được thế trên ít nhất một nguyên tử cacbon mạch vòng với R⁸ và/hoặc trên nguyên tử nitơ mạch vòng với R⁹;

mỗi R⁸ độc lập là oxy, hydroxyl, halogen, xyano, C₁-C₆alkyl, C₁-C₆haloalkyl, C₃-C₆-cycloalkyl, C₁-C₆alkoxy, C₁-C₆haloalkoxy, C₁-C₃alkoxy-C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkoxy-C₁-C₃alkyl-, C₁-C₃alkoxy-C₁-C₃alkoxy-C₁-C₃alkyl-, C₂-C₆alkenyl, C₂-C₆haloalkenyl, C₂-C₆alkynyl, C₂-C₆ haloalkynyl, C₁-C₆hydroxyalkyl-, C₁-C₆alkylcarbonyl-, C₁-C₆haloalkylcarbonyl-, C₃-C₆cycloalkylcarbonyl-, -S(O)_m-C₁-C₆haloalkyl, -S(O)_m-C₃-C₆cycloalkyl, -O-S(O)₂C₁-C₃alkyl, -C₁-C₃alkyl-S(O)_m-C₁-C₆alkyl, -C₁-C₃alkyl-S(O)_m-C₁-C₆haloalkyl, -C₁-C₃alkyl-S(O)_m-C₃-C₆cycloalkyl, xyano-C₁-C₆-alkyl-, NR⁴R⁵, -C(S)NR⁴R⁵, -S(O)₂NHC(O)C₁-C₃alkyl-, -S(O)₂NR⁴R⁵, -C(O)OH, -C(O)OC₁-C₆alkyl, -C(O)NHS-(O)₂C₁-C₆alkyl, -C(O)NR⁴R⁵, -NR⁴C(O)NR⁴R⁵, C₁-C₆alkylcarbonyl(C₁-C₆alkyl)amino-, C₁-C₆haloalkylcarbonylamino-, C₁-C₆haloalkylcarbonyl(C₁-C₆alkyl)amino-, C₁-C₆alkylsulfonylamino-, C₁-C₆alkylsulfonyl(C₁-C₆alkyl)amino-, C₁-C₆haloalkylsulfonylamino-, C₁-C₆haloalkylsulfonyl(C₁-C₆alkyl)amino-, C₃-C₆cycloalkylsulfonylamino-, C₃-C₆cycloalkylsulfonyl(C₁-C₆alkyl)amino-,

hydroxyamino-, hydroxy(C₁-C₆alkyl)amino, C₁-C₆alkoxyamino, C₁-C₆alkoxy(C₁-C₆alkyl)amino, C₁-C₆haloalkoxyamino, C₁-C₆haloalkoxy(C₁-C₆alkyl)amino; hoặc hệ thống vòng được lựa chọn từ nhóm bao gồm vòng phenyl, vòng heteroaryl có từ 5 đến 6 cạnh và vòng heterocyclyl có từ 3 đến 6 cạnh, trong đó hệ thống vòng đã nêu được thế bởi từ 0 đến 5 R¹⁶;

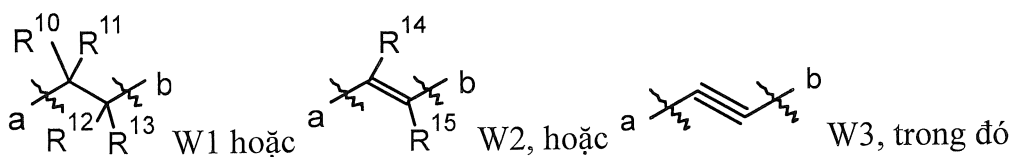
m là số nguyên bằng 0, 1, hoặc 2; và

mỗi R⁹ độc lập là C₁-C₆alkyl, C₁-C₆haloalkyl, C₃-C₆-xycloalkyl, C₁-C₃alkoxy-C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkoxy-C₁-C₃alkyl-, C₁-C₃alkoxy-C₁-C₃alkoxy-C₁-C₃alkyl-, C₁-C₆hydroxyalkyl-, -C₁-C₃alkyl-S(O)_m-C₁-C₆alkyl, -C₁-C₃alkyl-S(O)_m-C₁-C₆haloalkyl, -C₁-C₃alkyl-S(O)_m-C₃-C₆xycloalkyl, xyano-C₁-C₆-alkyl-, hoặc hệ thống vòng được lựa chọn từ nhóm bao gồm: vòng phenyl, vòng heteroaryl có từ 5 đến 6 cạnh và vòng heterocyclyl có từ 3 đến 6 cạnh, trong đó hệ thống vòng đã nêu được thế bởi từ 0 đến 5 R¹⁶;

mỗi R¹⁶ độc lập là halogen, xyano, C₁-C₆alkyl, C₁-C₆haloalkyl, C₁-C₆alkoxy hoặc C₁-C₆haloalkoxy;

hoặc D là vòng phenyl được thế hoặc không được thế, và trong đó khi vòng phenyl đã nêu được thế, nó được thế bởi từ 1 đến 5 R⁸; và,

W là



“a” biểu thị điểm gắn với gốc phenyl-pyridazin dion/phenyl-pyridazinon,

“b” biểu thị điểm gắn với vòng D,

mỗi R¹⁰, R¹², R¹⁴ và R¹⁵ một cách độc lập là hydro, C₁-C₃alkyl, hoặc C₁-C₃haloalkyl;

hoặc R¹⁰ và R¹² cùng với các nguyên tử cacbon mà chúng được kết hợp với tạo thành vòng C₃-C₆ cacboxyclic;

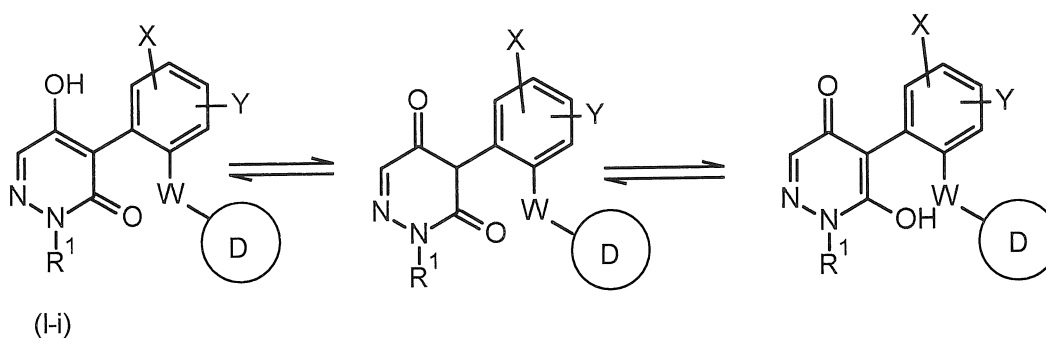
mỗi R¹¹ và R¹³ một cách độc lập là hydro, halogen, C₁-C₃alkyl, hoặc C₁-C₃haloalkyl;

với điều kiện khi một trong số R¹¹ hoặc R¹³ là halogen, C₁-C₃alkyl hoặc C₁-C₃ haloalkyl, nhóm còn lại là hydro.

Các hợp chất có công thức (I) có thể chứa các tâm bất đối xứng và có thể có mặt ở dạng chất đồng phân đối ảnh đơn lẻ, cặp chất đồng phân đối ảnh ở tỷ lệ bất kỳ hoặc, trong đó nhiều hơn một tâm bất đối xứng có mặt, chứa các chất đồng phân không đối quang ở tất cả các tỷ lệ có thể có. Thông thường, một trong số các chất đồng phân đối quang có hoạt tính sinh học được tăng cường so với các khả năng khác.

Tương tự, khi có alken được thế hai lần, chúng có thể có mặt dưới dạng E hoặc Z hoặc là hỗn hợp của cả hai ở tỷ lệ bất kỳ.

Ngoài ra, các hợp chất có công thức (I) có thể cân bằng với các dạng hõ biến thay thế. Ví dụ, hợp chất có công thức (I-i), tức là hợp chất có công thức (I) trong đó R² là hydro và G là hydro, có thể được tạo ra ở ít nhất ba dạng hõ biến:



Cần hiểu rằng tất cả các dạng hõ biến (chất hõ biến đơn lẻ hoặc hỗn hợp của chúng), hỗn hợp triệt quang và các chất đồng phân đơn lẻ đều nằm trong phạm vi của sáng chế.

Mỗi gốc alkyl hoặc là một mình hoặc là một phần của nhóm lớn hơn (như alkoxy, alkylthio, alkoxyacarbonyl, alkylacarbonyl, alkylaminocarbonyl, hoặc dialkylaminocarbonyl, và tương tự) có thể là mạch thẳng hoặc mạch nhánh. Thông thường, alkyl là, ví dụ, metyl, etyl, *n*-propyl, isopropyl, *n*-butyl, *sec*-butyl, isobutyl, *tert*-butyl, *n*-pentyl, neopentyl, hoặc *n*-hexyl. Các nhóm alkyl thường là các nhóm C₁-C₆alkyl (trừ khi đã được xác định hẹp hơn), nhưng tốt hơn là nhóm C₁-C₄alkyl hoặc C₁-C₃alkyl, và, tốt hơn nữa là, nhóm C₁-C₂alkyl (chẳng hạn như metyl).

Các gốc alkenyl và alkynyl có thể ở dạng mạch thẳng hoặc mạch nhánh, và các gốc alkenyl, khi thích hợp, có thể có cấu hình (*E*) hoặc (*Z*). Các gốc alkenyl hoặc alkynyl thường là C₂-C₄alkenyl hoặc C₂-C₄alkynyl, đặc biệt hơn là vinyl, alyl, etynyl, propargyl hoặc prop-1-ynyl. Các gốc alkenyl và alkynyl có thể chứa một hoặc nhiều liên kết đôi và/hoặc ba ở dạng kết hợp bất kỳ; nhưng tốt hơn là chỉ chứa một liên kết đôi (đối với alkenyl) hoặc chỉ chứa một liên kết ba (đối với alkynyl).

Tốt hơn là, thuật ngữ xycloalkyl đề cập đến xyclopropyl, xyclobutyl, xyclopentyl hoặc xyclohexyl.

Trong ngữ cảnh của bản mô tả này, tốt hơn là thuật ngữ "aryl" có nghĩa là phenyl. Thuật ngữ "heteroaryl" như dùng trong bản mô tả này có nghĩa là hệ vòng thơm chứa ít nhất một dị nguyên tử vòng và gồm có vòng đơn. Tốt hơn là, các vòng đơn chứa 1, 2 hoặc 3 dị nguyên tử vòng độc lập được lựa chọn từ nitơ, oxy và lưu huỳnh. Điển hình là "heteroaryl" là furyl, thienyl, pyrolyl, pyrazolyl, imidazolyl, 1,2,3-triazolyl, 1,2,4-triazolyl, oxazolyl, isoxazolyl, thiazolyl, isothiazolyl, 1,2,4-oxadiazolyl, 1,3,4-oxadiazolyl, 1,2,5-oxadiazolyl, 1,2,3-thiadiazolyl, 1,2,4-thiadiazolyl, 1,3,4-thiadiazolyl, 1,2,5-thiadiazolyl, pyridyl, pyrimidinyl, pyridazinyl, pyrazinyl, 1,2,3-triazinyl, 1,2,4-triazinyl, hoặc 1,3,5-triazinyl.

Các nhóm heteroxyclyl và các vòng heterocyclic (hoặc riêng lẻ hoặc như một phần của nhóm lớn hơn, chẳng hạn như heteroxyclyl-alkyl-) là các hệ thống vòng chứa ít nhất một dị nguyên tử và có thể có dạng đơn vòng hoặc nhị vòng. Tốt hơn là, các nhóm heteroxyclyl sẽ chứa tới hai dị nguyên tử mà sẽ tốt hơn là được chọn từ nitơ, oxy và lưu huỳnh. Các ví dụ của nhóm dị vòng bao gồm oxetanyl, thietanyl, azetidinyl và 7-oxa-bixyclo[2.2.1]hept-2-yl. Nhóm heteroxyclyl chứa nguyên tử oxy đơn lẻ làm dị nguyên tử được ưu tiên nhất. Các nhóm heteroxyclyl tốt hơn là các vòng đơn vòng có từ 3 đến 8 cạnh, tốt hơn nữa là có từ 3 đến 6 cạnh, và có thể no hoàn toàn hoặc một phần.

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

Nhóm haloalkyl có chiều dài chuỗi nằm trong khoảng từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon là, ví dụ, flometyl, điflometyl, triflometyl, clometyl, điclometyl, triclometyl, 2,2,2-trifloetyl, 2-floetyl, 2-cloetyl, pentaflloetyl, 1,1-điflo-2,2,2-tricloetyl, 2,2,3,3-tetraflloetyl và 2,2,2-tricloetyl, heptafllo-n-propyl và perfllo-n-hexyl.

Nhóm alkoxy tốt hơn là có chiều dài mạch nằm trong khoảng từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon. Alkoxy là, ví dụ, metoxy, etoxy, propoxy, isopropoxy, n-butoxy, isobutoxy, sec-butoxy hoặc tert-butoxy hoặc chất đồng phân pentyloxy hoặc hexyloxy, tốt hơn là metoxy và etoxy. Cũng cần hiểu rõ rằng hai phần tử thế alkoxy có thể có mặt trên cùng nguyên tử cacbon.

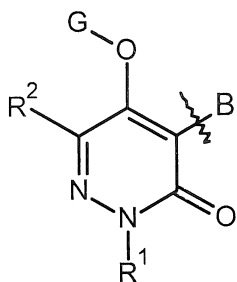
Haloalkoxy là, ví dụ, flometoxy, điflometoxy, triflometoxy, 2,2,2-trifloetoxy, 1,1,2,2-tetrafloetoxy, 2-floetoxy, 2-cloetoxy, 2,2-đifloetoxy hoặc 2,2,2-tricloetoxy, tốt hơn là điflometoxy, 2-cloetoxy hoặc triflometoxy.

C_1 - C_6 alkyl-S- (alkylthio) là, ví dụ, metylthio, etylthio, propylthio, isopropylthio, n-butylthio, isobutylthio, sec-butylthio hoặc tert-butylthio, tốt hơn là metylthio hoặc etylthio.

C_1 - C_6 alkyl-S(O)- (alkylsulfinyl) là, ví dụ như, metylsulfinyl, etylsulfinyl, propylsulfinyl, isopropylsulfinyl, n-butylsulfinyl, isobutylsulfinyl, sec-butylsulfinyl hoặc tert-butylsulfinyl, tốt hơn là metylsulfinyl hoặc etylsulfinyl.

C_1 - C_6 alkyl-S(O)₂- (alkylsulfonyl) là, ví dụ như, metylsulfonyl, etylsulfonyl, propylsulfonyl, isopropylsulfonyl, n-butylsulfonyl, isobutylsulfonyl, sec-butylsulfonyl hoặc tert-butylsulfonyl, tốt hơn là metylsulfonyl hoặc etylsulfonyl.

Nhóm Q



(Q) được đề cập đến trong bản mô tả này dưới dạng gốc pyridazin dion/pyridazinon, trong đó B biểu thị điểm gắn vào phần còn lại của phân tử (tức là vào gốc phenyl-W-D được thể tùy chọn).

Sáng chế cũng bao gồm muối được chấp nhận dùng trong nông nghiệp mà các hợp chất có công thức (I) có thể tạo thành với amin (ví dụ như amoniac, đimetylamin và trietylamin), bazơ kim loại kiềm và kim loại kiềm thổ hoặc bazơ amoni bậc bốn. Trong số các hydroxit, oxit, alkoxit và hydro cacbonat và cacbonat của kim loại kiềm và kim loại kiềm thổ được sử dụng làm chất tạo muối, đặc biệt chú ý đến hydroxit, alkoxit, oxit và cacbonat của liti, natri, kali, magie và canxi, nhưng đặc biệt là của natri, magie và canxi. Muối trimetylsulfonium tương ứng cũng có thể được sử dụng. Các hợp chất có công thức (I) theo sáng chế cũng bao gồm các hydrat mà có thể được tạo thành trong suốt quá trình tạo thành muối.

Các giá trị ưu tiên của $R^1, R^2, R^3, R^4, R^5, R^{4a}, R^{5a}, R^6, R^8, R^9, R^{10}, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, W, D, Dp, G, X, Y$, và m là như được thiết đặt dưới đây, và hợp chất có công thức (I) theo sáng chế có thể bao gồm kết hợp bất kỳ của các giá trị nêu trên. Người có trình độ trung bình trong lĩnh vực kỹ thuật sẽ hiểu rằng các giá trị cho bất kỳ tập hợp các phương án cụ thể nào có thể được kết hợp với các giá trị cho bất kỳ tập hợp các phương án khác trong đó các kết hợp này không loại trừ lẫn nhau.

Tốt hơn là R^1 được lựa chọn từ nhóm bao gồm metyl, etyl, propyl (cụ thể là *n*- hoặc *c*-propyl), propargyl hoặc C_1 haloalkyl. Tốt hơn nữa là R^1 là metyl, etyl, xyclopropyl, propargyl hoặc C_1 floalkyl. Còn tốt hơn nữa là R^1 là metyl, etyl, xyclopropyl hoặc propargyl. Tốt nhất là, R^1 là metyl.

Tốt hơn là R^2 được lựa chọn từ nhóm bao gồm hydro, halogen, C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 haloalkyl, C_1 - C_6 alkoxy, C_1 - C_3 alkoxy- C_1 - C_3 alkyl-, C_3 - C_6 xycloalkyl, C_2 - C_6 alkenyl, C_2 - C_6 haloalkenyl, C_2 - C_6 alkynyl và C_2 - C_6 haloalkynyl. Tốt hơn nữa là R^2 được lựa chọn từ nhóm bao gồm clo, flo, metyl, etyl, xyclopropyl, triflometyl và metoxymetyl, còn tốt hơn nữa là clo, xyclopropyl, triflometyl hoặc metyl, tốt nhất là clo hoặc metyl. Trong một tập hợp các phương án của sáng chế R^2 là hydro. Trong tập hợp các phương án khác R^2 là xyclopropyl, trong tập thứ ba của các phương án R^2 là metyl, trong tập thứ tư của các phương án R^2 là triflometyl, và trong tập thứ năm của các phương án R^2 là clo.

Như được mô tả ở đây, G có thể là hydro hoặc $-C(O)-R^3$, và R^3 được lựa chọn từ nhóm bao gồm C_1 - C_6 alkyl, C_2 - C_6 alkenyl, C_2 - C_6 alkynyl, C_1 - C_6 alkyl-S-, C_1 - C_6 alkoxy, - NR^4R^5 và phenyl tùy chọn được thế bởi một hoặc nhiều R^6 .

Như được xác định ở đây, R^4 và R^5 một cách độc lập được lựa chọn từ nhóm bao gồm hydro, C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 alkoxy, và C_3 - C_6 xycloalkyl, hoặc chúng có thể cùng nhau tạo thành vòng morpholinyl. Trong trường hợp của nhóm thế G (và do đó cả R^3) tốt hơn là mỗi R^4 và R^5 một cách độc lập được lựa chọn từ nhóm bao gồm metyl, etyl, propyl, metoxy, etoxy và propoxy, và có thể được gọi là R^{34} và R^{35} một cách tương ứng. Trong trường hợp của các nhóm thế khác (ví dụ R^2, R^8), tốt hơn là mỗi R^4 và R^5 một cách độc lập là hydro, C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 alkoxy, hoặc C_3 - C_6 xycloalkyl, và có thể được gọi là R^{84} và R^{85} một cách tương ứng. Khi nhiều hơn một R^4 được bao gồm trong nhóm lớn hơn, ví dụ trong nhóm $-NR^4C(O)NR^4R^5$, người có trình độ trung bình trong lĩnh vực kỹ thuật

sẽ hiểu rằng mỗi R^4 là độc lập, và do đó trong gốc này hai nhóm R^4 có thể hoặc là giống nhau hoặc chúng có thể là khác nhau.

R^6 được lựa chọn từ nhóm bao gồm halogen, xyano, nitro, C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 haloalkyl, C_1 - C_3 alkoxy và C_1 - C_3 haloalkoxy. Tốt hơn là R^6 được lựa chọn từ nhóm bao gồm halogen, C_1 - C_3 alkyl, và C_1 - C_3 haloalkyl.

Tốt hơn là R^3 là C_1 - C_4 alkyl, C_2 - C_3 alkenyl, C_2 - C_3 alkynyl, $-C_1$ - C_4 alkoxy, $-NR^4R^5$ trong đó R^4 và R^5 cùng nhau tạo thành vòng morpholinyl, hoặc phenyl. Tốt hơn nữa là R^3 là isopropyl, t-butyl, metyl, etyl, propargyl, metoxy, etoxy, hoặc *tert*-butoxy. Tốt hơn nữa là R^3 là isopropyl, t-butyl, metyl, etyl, propargyl, hoặc metoxy.

Theo một bộ phương án G là hydro hoặc $-C(O)-R^3$, trong đó R^3 là C_1 - C_4 alkyl, C_2 - C_3 alkenyl, C_2 - C_3 alkynyl hoặc $-C_1$ - C_4 alkoxy. Theo bộ phương án khác, G là hydro hoặc $-C(O)-R^3$, trong đó R^3 là isopropyl, t-butyl, metyl, etyl, propargyl hoặc metoxy. Tuy nhiên, được đặc biệt ưu tiên là G là hydro, hoặc $-C(O)-R^3$ trong đó R^3 là isopropyl.

Khi Y là xyclopropyl, X tốt hơn là hydro, xyclopropyl, halogen, hoặc C_1 haloalkyl, tốt hơn nữa là hydro, flo, clo, brom, hoặc C_1 floalkyl và còn tốt hơn nữa là, hydro, flo, clo hoặc triflometyl. Tốt nhất là, khi Y là xyclopropyl, X là flo. Trong một tập hợp các phương án tốt hơn là X là *ortho* (vị trí 6) đối với gốc pyridazinon/pyridazin-dion (nhóm Q). Đặc biệt tốt hơn là X là flo, clo hoặc C_1 -haloalkyl (cụ thể là C_1 floalkyl) và là *ortho* (vị trí 6) đối với gốc pyridazinon/pyridazin-dion (nhóm Q). Tốt nhất là, X là flo và là *ortho* (vị trí 6) đối với gốc pyridazinon/pyridazin-dion (nhóm Q).

Khi X là xyclopropyl, Y tốt hơn là hydro, C_1 - C_3 alkyl, xylcopropyl, C_1 - C_3 haloalkyl, hoặc halogen, và tốt hơn nữa là Y là hydro, clo, flo, hoặc brom trong các phương án này. Tốt nhất là, khi X là xyclopropyl, Y là clo.

Trong một tập hợp các phương án tốt hơn là Y là *ortho* (vị trí 3) đối với gốc -W-D. Trong tập hợp các phương án khác, Y là *para* đối với gốc pyridazinon/pyridazin-dion (nhóm Q).

Đặc biệt tốt hơn là Y là *ortho* (vị trí 3) đối với gốc -W-D và là halogen, cụ thể là clo hoặc flo; còn tốt hơn nữa là clo.

Như được mô tả ở đây, D là vòng phenyl được thế hoặc không được thế (Dp) hoặc là vòng heteroaryl đơn vòng có 5 hoặc 6 cạnh được thế hoặc không được thế chứa

1, 2, hoặc 3 dị nguyên tử một cách độc lập được lựa chọn từ oxy, nitơ và lưu huỳnh, và trong đó khi D là vòng heteroaryl được thế hoặc vòng phenyl được thế, nó được thế trên ít nhất một nguyên tử cacbon mạch vòng với R^8 và/hoặc, trong trường hợp vòng heteroaryl, trên nguyên tử nitơ mạch vòng với R^9 . Trong đó, D là vòng heteroaryl đơn vòng có 5 hoặc 6 cạnh được thế hoặc không được thế, nó tốt hơn là vòng furyl, thienyl, pyrolyl, pyrazolyl, imidazolyl, 1,2,3-triazolyl, 1,2,4-triazolyl, oxazolyl, isoxazolyl, thiazolyl, isothiazolyl, 1,2,4-oxadiazolyl, 1,3,4-oxadiazolyl, 1,2,5-oxadiazolyl, 1,2,3-thiadiazolyl, 1,2,4-thiadiazolyl, 1,3,4-thiadiazolyl, 1,2,5-thiadiazolyl, pyridyl, pyridonyl, pyrimidinyl, pyridazinyl, pyrazinyl, 1,2,3-triazinyl, 1,2,4-triazinyl, hoặc 1,3,5-triazinyl được thế (như được mô tả ở đây) hoặc không được thế.

Theo các phương án này, D tốt hơn là vòng pyridyl, pyrazolyl, thiazolyl, pyrimidinyl, thienyl, triazolyl hoặc oxadiazolyl được thế (như được mô tả trong bản mô tả này) hoặc không được thế, và tốt hơn nữa là vòng pyridyl.

Theo một bộ phương án, D là vòng pyrazolyl, imidazolyl, oxazolyl, isoxazolyl, thiazolyl, isothiazolyl, pyridyl, pyridonyl, pyrimidinyl, pyridazinyl, hoặc pyrazinyl được thế (như được mô tả trong bản mô tả này) hoặc không được thế.

Theo bộ khác của các phương án này, D là vòng oxazolyl, thiazolyl, hoặc pyridyl được thế (như được mô tả trong bản mô tả này) hoặc không được thế. Theo các phương án nhất định, D là pyridyl- được thế hoặc không được thế, hoặc vòng thiazolyl được thế hoặc không được thế.

Việc thế của D bởi R^8 sẽ phụ thuộc vào sự có mặt hoặc vắng mặt của xyclopropyl tại vị trí X và/hoặc Y. Tuy nhiên, nói chung, khi D là vòng heteroaryl 5 hoặc 6 cạnh được thế, nó tốt hơn là được thế bởi 1 hoặc 2 R^8 và/hoặc 1 R^9 , còn tốt hơn nữa là bởi 1 hoặc 2 R^8 . Khi D là vòng heteroaryl được thế có 5 cạnh, nó tốt nhất là được thế bằng 1 R^8 . Khi D là vòng phenyl được thế, nó tốt hơn là được thế bởi 1 hoặc 2 R^8 , còn tốt hơn nữa là bởi 1 R^8 .

Khi ít nhất một trong số X và Y là xyclopropyl, và D được thế, mỗi R^8 có thể một cách độc lập được lựa chọn từ hydro, oxy, hydroxyl, halogen, xyano, C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 haloalkyl, C_3 - C_6 -xycloalkyl, C_1 - C_6 alkoxy, C_1 - C_6 haloalkoxy, C_1 - C_3 alkoxy- C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 haloalkoxy- C_1 - C_3 alkyl-, C_1 - C_3 alkoxy- C_1 - C_3 alkoxy- C_1 - C_3 alkyl-, C_2 - C_6 alkenyl, C_2 - C_6 haloalkenyl, C_2 - C_6 alkynyl, C_2 - C_6 haloalkynyl, C_1 - C_6 hydroxyalkyl-,

C₁-C₆alkylcarbonyl-, C₁-C₆haloalkylcarbonyl-, C₃-C₆xycloalkylcarbonyl-, -S(O)_m-C₁-C₆haloalkyl, -S(O)_m-C₃-C₆xycloalkyl, -O-S(O)₂C₁-C₃alkyl, -C₁-C₃alkyl-S(O)_m-C₁-C₆alkyl, -C₁-C₃alkyl-S(O)_m-C₁-C₆haloalkyl, -C₁-C₃alkyl-S(O)_m-C₃-C₆xycloalkyl, xyano-C₁-C₆-alkyl-, NR⁴R⁵, -C(S)NR⁴R⁵, -S(O)₂NHC(O)C₁-C₃alkyl-, -S(O)₂NR⁴R⁵, -C(O)OH, -C(O)OC₁-C₆alkyl, -C(O)NHS-(O)₂C₁-C₆alkyl, -C(O)NR⁴R⁵, -NR⁴C(O)NR⁴R⁵, C₁-C₆alkylcarbonyl(C₁-C₆alkyl)amino-, C₁-C₆haloalkylcarbonylamino-, C₁-C₆haloalkylcarbonyl(C₁-C₆alkyl)amino-, -NR⁴C(O)NR⁴R⁵, C₁-C₆alkylsulfonylamino-, C₁-C₆alkylsulfonyl(C₁-C₆alkyl)amino-, C₁-C₆haloalkylsulfonylamino-, C₁-C₆haloalkylsulfonyl(C₁-C₆alkyl)amino-, C₃-C₆xycloalkylsulfonylamino-, C₃-C₆xycloalkylsulfonyl(C₁-C₆alkyl)amino-, hydroxyamino-, hydroxy(C₁-C₆alkyl)amino, C₁-C₆alkoxyamino, C₁-C₆alkoxy(C₁-C₆alkyl)amino, C₁-C₆haloalkoxyamino, C₁-C₆haloalkoxy(C₁-C₆alkyl)amino; hoặc hệ thống vòng được lựa chọn từ nhóm bao gồm vòng phenyl, vòng heteroaryl có từ 5 đến 6 cạnh và vòng heterocyclyl có từ 3 đến 6 cạnh, trong đó hệ thống vòng đã nêu được thể bởi từ 0 đến 5 R¹⁶;

m là số nguyên 0, 1, hoặc 2 (tốt hơn là 0 hoặc 2); và mỗi R⁹ độc lập là hydro, C₁-C₆alkyl, C₁-C₆haloalkyl, C₃-C₆-xycloalkyl, C₁-C₃alkoxy-C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkoxy-C₁-C₃alkyl-, C₁-C₃alkoxy-C₁-C₃alkoxy-C₁-C₃alkyl-, C₁-C₆hydroxyalkyl-, -C₁-C₃alkyl-S(O)_m-C₁-C₆alkyl, -C₁-C₃alkyl-S(O)_m-C₁-C₆haloalkyl, -C₁-C₃alkyl-S(O)_m-C₃-C₆xycloalkyl, xyano-C₁-C₆-alkyl-, hoặc hệ thống vòng được lựa chọn từ nhóm bao gồm: vòng phenyl, vòng heteroaryl có từ 5 đến 6 cạnh và vòng heterocyclyl có từ 3 đến 6 cạnh, trong đó hệ thống vòng đã nêu được thể bởi từ 0 đến 5 R¹⁶;

mỗi R¹⁶ độc lập là halogen, xyano, C₁-C₆alkyl, C₁-C₆haloalkyl, C₁-C₆alkoxy hoặc C₁-C₆haloalkoxy.

Khi cả X và Y là khác xyclopropyl, và D là vòng phenyl, D sẽ được thể bởi ít nhất một R⁸ được lựa chọn từ nhóm bao gồm C₁-C₆haloalkylcarbonyl-, C₃-C₆xycloalkylcarbonyl-, -S(O)_m-C₁-C₆haloalkyl, -S(O)_m-C₃-C₆xycloalkyl, -O-S(O)₂C₁-C₃alkyl, -C₁-C₃alkyl-S(O)_m-C₁-C₆alkyl, -C₁-C₃alkyl-S(O)_m-C₁-C₆haloalkyl, -C₁-C₃alkyl-S(O)_m-C₃-C₆xycloalkyl, xyano-C₁-C₆-alkyl-, -NR^{4a}R^{5a}, -C(S)NR⁴R⁵, -S(O)₂NHC(O)C₁-C₃alkyl, -S(O)₂NR⁴R⁵, -C(O)OH, -C(O)OC₁-C₆alkyl, -C(O)NHS-(O)₂C₁-C₆alkyl, -C(O)NR⁴R⁵, -NR⁴C(O)NR⁴R⁵, C₁-C₆alkylcarbonyl(C₁-C₆alkyl)amino-, C₁-C₆haloalkylcarbonylamino-, C₁-C₆haloalkylcarbonyl(C₁-

C₆alkyl)amino-, , C₁-C₆alkylsulfonylamino-, C₁-C₆alkylsulfonyl(C₁-C₆alkyl)amino-, C₁-C₆haloalkylsulfonylamino-, C₁-C₆haloalkylsulfonyl(C₁-C₆alkyl)amino-, C₃-C₆xycloalkylsulfonylamino-, C₃-C₆xycloalkylsulfonyl(C₁-C₆alkyl)amino-, hydroxyamino-, hydroxy(C₁-C₆alkyl)amino, C₁-C₆alkoxyamino, C₁-C₆alkoxy(C₁-C₆alkyl)amino, C₁-C₆haloalkoxyamino, C₁-C₆haloalkoxy(C₁-C₆alkyl)amino; hoặc hệ thống vòng được lựa chọn từ nhóm bao gồm vòng phenyl, vòng heteroaryl có từ 5 đến 6 cạnh và vòng heterocyclyl có từ 3 đến 6 cạnh, trong đó hệ thống vòng đã nêu được thể bởi từ 0 đến 5 R¹⁶; trong đó m, R⁴, R⁵ và R¹⁶ là như được xác định ở đây.

Như được xác định ở đây, trong bối cảnh trong đó cả X và Y là khác cyclopropyl, mỗi R^{4a} và R^{5a} một cách độc lập được lựa chọn từ nhóm bao gồm C₁-C₆ alkoxy, và C₃-C₆xycloalkyl, hoặc R⁴ và R⁵ cùng nhau có thể tạo thành vòng morpholinyl.

Nhóm thế R⁸ bất kỳ khác có thể được lựa chọn từ nhóm bao gồm oxy, hydroxyl, halogen, xyano, C₁-C₆alkyl, C₁-C₆haloalkyl, C₃-C₆-xycloalkyl, C₁-C₆alkoxy, C₁-C₆haloalkoxy, C₁-C₃alkoxy-C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkoxy-C₁-C₃alkyl-, C₁-C₃alkoxy-C₁-C₃alkoxy-C₁-C₃alkyl-, C₂-C₆alkenyl, C₂-C₆haloalkenyl, C₂-C₆alkynyl, C₂-C₆haloalkynyl, C₁-C₆hydroxyalkyl-, C₁-C₆alkylcarbonyl-, C₁-C₆haloalkylcarbonyl-, C₃-C₆xycloalkylcarbonyl-, -S(O)_m-C₁-C₆haloalkyl, -S(O)_m-C₃-C₆xycloalkyl, -O-S(O)₂-C₁-C₃alkyl, -C₁-C₃alkyl-S(O)_m-C₁-C₆alkyl, -C₁-C₃alkyl-S(O)_m-C₁-C₆haloalkyl, -C₁-C₃alkyl-S(O)_m-C₃-C₆xycloalkyl, xyano-C₁-C₆-alkyl-, NR⁴R⁵, -C(S)NR⁴R⁵, -S(O)₂NHC(O)C₁-C₃alkyl-, -S(O)₂NR⁴R⁵, -C(O)OH, -C(O)OC₁-C₆alkyl, -C(O)NHS-(O)₂C₁-C₆alkyl, -C(O)NR⁴R⁵, -NR⁴C(O)NR⁴R⁵, C₁-C₆alkylcarbonyl(C₁-C₆alkyl)amino-, C₁-C₆haloalkylcarbonylamino-, C₁-C₆haloalkylcarbonyl(C₁-C₆alkyl)amino-, -NR⁴C(O)NR⁴R⁵, C₁-C₆alkylsulfonylamino-, C₁-C₆alkylsulfonyl(C₁-C₆alkyl)amino-, C₁-C₆haloalkylsulfonylamino-, C₁-C₆haloalkylsulfonyl(C₁-C₆alkyl)amino-, C₃-C₆xycloalkylsulfonylamino-, C₃-C₆xycloalkylsulfonyl(C₁-C₆alkyl)amino-, hydroxyamino-, hydroxy(C₁-C₆alkyl)amino, C₁-C₆alkoxyamino, C₁-C₆alkoxy(C₁-C₆alkyl)amino, C₁-C₆haloalkoxyamino, C₁-C₆haloalkoxy(C₁-C₆alkyl)amino; hoặc hệ thống vòng được lựa chọn từ nhóm bao gồm vòng phenyl, vòng heteroaryl có từ 5 đến 6 cạnh và vòng heterocyclyl có từ 3 đến 6 cạnh, trong đó hệ thống vòng đã nêu được thể bởi từ 0 đến 5 R¹⁶; trong đó m, R⁴, R⁵ và R¹⁶ là như được xác định ở đây.

Khi cả X và Y là khác xyclopropyl và D là vòng heteroaryl đơn vòng, D sẽ được thể hoặc trên cacbon mạch vòng bởi ít nhất một R^8 được lựa chọn từ nhóm bao gồm C_1 - C_6 haloalkylcarbonyl-, C_3 - C_6 xycloalkylcarbonyl-, $-S(O)_m$ - C_1 - C_6 haloalkyl-, $-S(O)_m$ - C_3 - C_6 xycloalkyl-, $-O-S(O)_2C_1$ - C_3 alkyl-, $-C_1$ - C_3 alkyl- $S(O)_m$ - C_1 - C_6 alkyl-, $-C_1$ - C_3 alkyl- $S(O)_m$ - C_1 - C_6 haloalkyl-, $-C_1$ - C_3 alkyl- $S(O)_m$ - C_3 - C_6 xycloalkyl-, xyno- C_1 - C_6 -alkyl-, $NR^{4a}R^{5a}$ -, $C(S)NR^4R^5$ -, $-S(O)_2NHC(O)C_1$ - C_3 alkyl-, $-S(O)_2NR^4R^5$ -, $-C(O)OH$ -, $-C(O)OC_1$ - C_6 alkyl-, $-C(O)NHS-(O)_2C_1$ - C_6 alkyl-, $-C(O)NR^4R^5$ -, $-NR^4C(O)NR^4R^5$ -, C_1 - C_6 alkylcarbonyl(C_1 - C_6 alkyl)amino-, C_1 - C_6 haloalkylcarbonylamino-, C_1 - C_6 haloalkylcarbonyl(C_1 - C_6 alkyl)amino-, C_1 - C_6 alkylsulfonylamino-, C_1 - C_6 alkylsulfonyl(C_1 - C_6 alkyl)amino-, C_1 - C_6 haloalkylsulfonylamino-, C_1 - C_6 haloalkylsulfonyl(C_1 - C_6 alkyl)amino-, C_3 - C_6 xycloalkylsulfonylamino-, C_3 - C_6 xycloalkylsulfonyl(C_1 - C_6 alkyl)amino-, hydroxyamino-, hydroxy(C_1 - C_6 alkyl)amino, C_1 - C_6 alkoxyamino, C_1 - C_6 alkoxy(C_1 - C_6 alkyl)amino, C_1 - C_6 haloalkoxyamino, C_1 - C_6 haloalkoxy(C_1 - C_6 alkyl)amino; và hệ thống vòng được lựa chọn từ nhóm bao gồm vòng phenyl, vòng heteroaryl có từ 5 đến 6 cạnh và vòng heterocyclyl có từ 3 đến 6 cạnh, trong đó hệ thống vòng đã nêu được thể bởi từ 0 đến 5 R^{16} ; và/hoặc D sẽ được thể trên nitơ mạch vòng bởi ít nhất một R^9 được lựa chọn từ nhóm bao gồm C_5 - C_6 alkyl, C_5 - C_6 haloalkyl, C_3 - C_6 -xycloalkyl, C_1 - C_3 alkoxy- C_3 alkyl-, C_3 alkoxy- C_1 - C_2 alkyl-, C_1 - C_3 haloalkoxy- C_1 - C_3 alkyl-, C_1 - C_3 alkoxy- C_1 - C_3 alkoxy- C_1 - C_3 alkyl-, C_1 - C_6 hydroxyalkyl-, $-C_1$ - C_3 alkyl- $S(O)_m$ - C_1 - C_6 alkyl-, $-C_1$ - C_3 alkyl- $S(O)_m$ - C_1 - C_6 haloalkyl-, $-C_1$ - C_3 alkyl- $S(O)_m$ - C_3 - C_6 xycloalkyl-, xyno- C_1 - C_6 -alkyl-, và hệ thống vòng được lựa chọn từ nhóm bao gồm: vòng phenyl, vòng heteroaryl có từ 5 đến 6 cạnh và vòng heterocyclyl có từ 3 đến 6 cạnh, trong đó hệ thống vòng đã nêu được thể bởi từ 0 đến 5 R^{16} ; trong đó m, R^4 , R^5 , R^{4a} , R^{5a} và R^{16} là như được xác định ở đây.

Trong các phương án này trong đó cả X và Y là khác xyclopropyl, các nhóm thể R^8 cacbon mạch vòng bất kỳ khác có thể được lựa chọn từ nhóm bao gồm nhóm bao gồm oxy, hydroxyl, halogen, xyno, C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 haloalkyl, C_3 - C_6 -xycloalkyl, C_1 - C_6 alkoxy, C_1 - C_6 haloalkoxy, C_1 - C_3 alkoxy- C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 haloalkoxy- C_1 - C_3 alkyl-, C_1 - C_3 alkoxy- C_1 - C_3 alkoxy- C_1 - C_3 alkyl-, C_2 - C_6 alkenyl, C_2 - C_6 haloalkenyl, C_2 - C_6 alkynyl, C_2 - C_6 haloalkynyl, C_1 - C_6 hydroxyalkyl-, C_1 - C_6 alkylcarbonyl-, C_1 - C_6 haloalkylcarbonyl-, C_3 - C_6 xycloalkylcarbonyl-, $-S(O)_m$ - C_1 - C_6 haloalkyl-, $-S(O)_m$ - C_3 - C_6 xycloalkyl-, $-O-S(O)_2C_1$ - C_3 alkyl-, $-C_1$ - C_3 alkyl- $S(O)_m$ - C_1 - C_6 alkyl-, $-C_1$ - C_3 alkyl- $S(O)_m$ - C_1 - C_6 haloalkyl-, -

$C_1-C_3\text{alkyl-S(O)}_m-C_3-C_6\text{xycloalkyl}$, $\text{xyano-}C_1-C_6\text{-alkyl-}$, $-NR^4R^5$, $-C(S)NR^4R^5$, $-S(O)_2NHC(O)C_1-C_3\text{alkyl-}$, $-S(O)_2NR^4R^5$, $-C(O)OH$, $-C(O)OC_1-C_6\text{alkyl-}$, $-C(O)NHS(O)_2C_1-C_6\text{alkyl-}$, $-C(O)NR^4R^5$, $-NR^4C(O)NR^4R^5$, $C_1-C_6\text{alkylcacbonyl}(C_1-C_6\text{alkyl})\text{amino-}$, $C_1-C_6\text{haloalkylcacbonylamino-}$, $C_1-C_6\text{haloalkylcacbonyl}(C_1-C_6\text{alkyl})\text{amino-}$, $C_1-C_6\text{alkylsulfonylamino-}$, $C_1-C_6\text{alkylsulfonyl}(C_1-C_6\text{alkyl})\text{amino-}$, $C_1-C_6\text{haloalkylsulfonylamino-}$, $C_1-C_6\text{haloalkylsulfonyl}(C_1-C_6\text{alkyl})\text{amino-}$, $C_3-C_6\text{xycloalkylsulfonylamino-}$, $C_3-C_6\text{xycloalkylsulfonyl}(C_1-C_6\text{alkyl})\text{amino-}$, hydroxyamino- , $\text{hydroxy}(C_1-C_6\text{alkyl})\text{amino}$, $C_1-C_6\text{alkoxyamino}$, $C_1-C_6\text{alkoxy}(C_1-C_6\text{alkyl})\text{amino}$, $C_1-C_6\text{haloalkoxyamino}$, $C_1-C_6\text{haloalkoxy}(C_1-C_6\text{alkyl})\text{amino}$; hoặc hệ thống vòng được lựa chọn từ nhóm bao gồm vòng phenyl, vòng heteroaryl có từ 5 đến 6 cạnh và vòng heterocyclyl có từ 3 đến 6 cạnh, trong đó hệ thống vòng đã nêu được thể bởi từ 0 đến 5 R^{16} ; trong đó m , R^4 , R^5 và R^{16} là như được xác định ở đây, và/hoặc các nhóm thế R^9 nitơ mạch vòng bất kỳ khác có thể được lựa chọn từ nhóm bao gồm $C_1-C_6\text{alkyl}$, $C_1-C_6\text{haloalkyl}$, $C_3-C_6\text{-xycloalkyl}$, $C_1-C_3\text{alkoxy-}C_1-C_3\text{alkyl}$, $C_1-C_3\text{haloalkoxy-}C_1-C_3\text{alkyl-}$, $C_1-C_3\text{alkoxy-}C_1-C_3\text{alkoxy-}C_1-C_3\text{alkyl-}$, $C_1-C_6\text{hydroxyalkyl-}$, $-C_1-C_3\text{alkyl-S(O)}_m-C_1-C_6\text{alkyl}$, $-C_1-C_3\text{alkyl-S(O)}_m-C_1-C_6\text{haloalkyl}$, $-C_1-C_3\text{alkyl-S(O)}_m-C_3-C_6\text{xycloalkyl}$, $\text{xyano-}C_1-C_6\text{-alkyl-}$, và hệ thống vòng được lựa chọn từ nhóm bao gồm: vòng phenyl, vòng heteroaryl có từ 5 đến 6 cạnh và vòng heterocyclyl có từ 3 đến 6 cạnh, trong đó hệ thống vòng đã nêu được thể bởi từ 0 đến 5 R^{16} ; trong đó m , R^4 , R^5 và R^{16} là như được xác định ở đây.

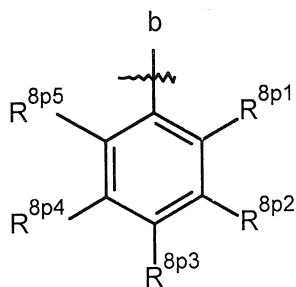
Trong các phương án trong đó ít nhất một trong số X và Y là xyclopropyl, mỗi R^8 một cách độc lập tốt hơn là oxo, $C_1-C_4\text{alkyl}$, $C_1-C_4\text{haloalkyl}$, halogen, xyano, amino, $-NHC(O)CH_3$, hydroxyl, $C_1-C_4\text{alkoxy}$, hoặc $C_1-C_4\text{alkylthio}$. Tốt hơn nữa là mỗi R^8 độc lập là oxo, $C_1-C_4\text{alkyl}$, $C_1-C_4\text{haloalkyl}$, halogen, xyano, hydroxyl, $C_1-C_4\text{alkoxy}$, hoặc $C_1-C_4\text{alkylthio}$, tốt nhất là mỗi R^8 độc lập là halogen, hoặc $C_1-C_4\text{haloalkyl}$.

Trong các phương án trong đó ít nhất một trong số X và Y là xyclopropyl, mỗi R^9 một cách độc lập tốt hơn là $C_1-C_4\text{alkyl}$, $C_1-C_4\text{haloalkyl}$, hydroxyl, $C_1-C_4\text{alkoxy}$, hoặc $C_1-C_4\text{alkylthio}$.

Trong các phương án cụ thể trong đó ít nhất một trong số X và Y là xyclopropyl và D là vòng heteroaryl đơn vòng có 5 hoặc 6 cạnh được thể hoặc không được thể như được mô tả ở trên, D được lựa chọn từ nhóm bao gồm 4-clo-3-pyridyl, 4-triflometylpyridyl, 3-pyridyl, và 2-clo-thiazo-5-yl, 2-clo-3-pyridyl, 3-clo-4-pyridyl, 1-

metyl-3-(triflometyl)-pyrazol-4-yl, thiazol-2-yl, thiazol-5-yl, pyrimidin-5-yl, 4-(*tert*-butoxy)phenyl, 2-clo-4-pyridyl, 2-metyl-4-pyridyl, 2-triflometyl-4-pyridyl, 4-pyridyl, 2-amino-4-pyridyl, thiophen-3-yl, 1-metyl-pyrazol-4-yl, 2-metyl-triazol-4-yl, 5-metyl-1,3,4-oxadiazol-2-yl, 5-metyl-3-pyridyl, 5-metyl-2-pyridyl, 6-metyl-2-pyridyl, 3-metyl-2-pyridyl, 6-choro-3-pyridyl, 3-triflometyl-3-pyridyl, 4-metyl-2-pyridyl, 2-axetamidothiazol-5-yl, 2-flo-4-pyridyl, và 2-triflometyl-3-pyridyl. Trong tập con của các phương án này D được lựa chọn từ nhóm bao gồm 4-clo-3-pyridyl, 4-triflometylpyridyl, 3-pyridyl, và 2-clo-thiazo-5-yl, 2-clo-3-pyridyl, 3-clo-4-pyridyl, 1-metyl-3-(triflometyl)-pyrazol-4-yl, thiazol-2-yl, thiazol-5-yl, pyrimidin-5-yl, 4-(*tert*-butoxy)phenyl, 2-clo-4-pyridyl, 2-metyl-4-pyridyl, 2-triflometyl-4-pyridyl, 4-pyridyl, thiophen-3-yl, 5-metyl-3-pyridyl, 5-metyl-2-pyridyl, 6-metyl-2-pyridyl, 3-triflometyl-3-pyridyl, 2-flo-4-pyridyl, và 2-triflometyl-3-pyridyl. Trong tập con khác của các phương án này, D được lựa chọn từ nhóm bao gồm 4-clo-3-pyridyl, 4-triflometylpyridyl, 3-pyridyl, 2-flo-4-pyridyl và 2-clo-thiazo-5-yl (tốt hơn là 2-flo-4-pyridyl).

Khi D là vòng phenyl Dp, và được thế, nó có thể được thế bởi từ 1 đến 5 R⁸ và do đó có thể được thể hiện bởi cấu trúc sau đây:



(Dp), trong đó ít nhất một R^{8p1}, R^{8p2}, R^{8p3}, R^{8p4} và R^{8p5} là khác hydro. Người có trình độ trung bình trong lĩnh vực kỹ thuật sẽ hiểu rằng nếu ít nhất một trong số R^{8p1}, R^{8p2}, R^{8p3}, R^{8p4} và R^{8p5} không phải là hydro, bất kỳ vị trí còn lại nào trên vòng phenyl có thể không được thế, hoặc, thay vào đó, mang nhóm thế R⁸ khác mà vị trí của nó trên vòng phenyl được biểu thị bởi số p viết bên trên. Khi Dp không được thế, R^{8p1}, R^{8p2}, R^{8p3}, R^{8p4} và R^{8p5} sẽ vắng mặt.

Như được nêu ở trên, việc thế của D bởi R⁸ sẽ phụ thuộc vào sự có mặt hoặc vắng mặt của xyclopropyl tại vị trí X và/hoặc Y. Do đó trong Dp, trong đó ít nhất một trong số X và Y là xyclopropyl, tốt hơn là một hoặc nhiều trong số R^{8p1}, R^{8p2}, R^{8p3}, R^{8p4} và R^{8p5} một cách độc lập được lựa chọn từ nhóm bao gồm xyano, amino, C₁-

C₃dialkylamino, hydroxy, C₁-C₃alkyl, C₁-C₄alkoxy, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃haloalkoxy, và halogen, và b là điểm gắn với phần còn lại của phân tử.

Trong tập hợp các phương án này một hoặc nhiều trong số R^{8p1}, R^{8p2}, R^{8p3}, R^{8p4} và R^{8p5} mỗi trong số chúng một cách độc lập được lựa chọn từ xyano, C₁-C₃ alkyl, C₁-C₄alkoxy, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃haloalkoxy, hoặc halogen. Tốt hơn là một hoặc nhiều trong số R^{8p1}, R^{8p2}, R^{8p3}, R^{8p4} và R^{8p5} một cách độc lập được lựa chọn từ, xyano, halogen (cụ thể là clo hoặc flo), metyl, metoxy, và triflometyl.

Trong tập hợp các phương án khác nữa mỗi trong số R^{8p1}, R^{8p2}, R^{8p4} và R^{8p5} vắng mặt và R^{8p3} là xyano, C₁-C₃ alkyl, C₁-C₄ alkoxy, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃haloalkoxy, hoặc halogen. Tốt hơn là trong tập hợp các phương án này, R^{8p3} là halogen, còn tốt hơn nữa là clo.

Trong tập hợp các phương án khác nữa, mỗi trong số R^{8p1}, R^{8p4} và R^{8p5} vắng mặt, và mỗi R^{8p2} và R^{8p3} một cách độc lập là xyano, C₁-C₃ alkyl, C₁-C₄ alkoxy, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃haloalkoxy, hoặc halogen. Trong tập hợp các phương án này đặc biệt tốt hơn là mỗi R^{8p2} và R^{8p3} một cách độc lập là halogen, và còn tốt hơn nữa là R^{8p2} và R^{8p3} đều là clo.

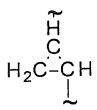
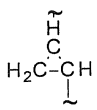
Trong một tập hợp các phương án đặc biệt ưu tiên trong đó ít nhất một trong số X và/hoặc Y là xyclopropyl, D là vòng phenyl không được thế.

Trong các phương án khác, tập hợp các phương án được đặc biệt ưu tiên trong đó ít nhất một trong số X và/hoặc Y là xyclopropyl, D được lựa chọn từ nhóm bao gồm 4-clo-phenyl, 4-triflometyl-phenyl, 4-xyanophenyl, 4-flo-phenyl, 3,4-di-flo-phenyl, 2-triflometyl-phenyl và 4-tolyl.

W đóng vai trò làm gốc liên kết, nối vòng D vào phần còn lại của phân tử (tức là vào gốc phenyl-pyridazinon/phenyl-pyridazin dion). Các hợp chất có công thức (I) trong đó cầu nối là W1 là chất diệt cỏ, trong khi đó các hợp chất có công thức (I) trong đó cầu nối là W2 có thể không chỉ là chất diệt cỏ, mà còn là chất trung gian hữu dụng trong việc sản xuất các hợp chất có công thức (I) mang cầu nối W1. Do đó, theo một bộ phương án, W là W1, trong khi đó theo bộ thứ hai của các phương án, W là W2. Theo bộ thứ ba của các phương án, W là -C≡C-.

Tốt hơn là mỗi R^{10} , R^{11} , R^{12} và R^{13} độc lập được lựa chọn từ hydro hoặc C_1 - C_3 alkyl. Theo một bộ phương án R^{10} , R^{11} , R^{12} , và R^{13} đều là hydro.

Tốt hơn là mỗi R^{14} và R^{15} độc lập được lựa chọn từ hydro hoặc C_1 - C_3 alkyl. Theo một bộ phương án R^{14} và R^{15} đều là hydro.

Các ví dụ cụ thể về W bao gồm $-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$, và $-\text{CH}=\text{CH}-$, *cis*  và *trans*  , và $-\text{C}\equiv\text{C}-$. Theo các phương án được ưu tiên hơn W là $-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$, hoặc $-\text{CH}=\text{CH}-$ (cụ thể là (*E*) $-\text{CH}=\text{CH}-$), tốt hơn nữa là $-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$.

Trong một tập hợp các phương án ưu tiên (trong đó cả X và Y là khác xyclopropyl) trong hợp chất có công thức (I);

R^1 là metyl, etyl, xyclopropyl, propargyl hoặc C_1 floalkyl;

R^2 là clo, xyclopropyl, triflometyl hoặc metyl;

G là hydro hoặc $-\text{C}(\text{O})-\text{R}^3$, trong đó R^3 là isopropyl, t-butyl, metyl, etyl, propargyl, metoxy, etoxy, hoặc *tert*-butoxy;

X là flo, clo hoặc C_1 -haloalkyl và là *ortho* đối với gốc pyridazinon/pyridazin-dion;

Y là hydro, clo, flo, hoặc brom và *ortho* đối với gốc -W-D;

D là vòng phenyl được thế bởi ít nhất một R^8 được lựa chọn từ nhóm bao gồm C_1 - C_6 haloalkylcacbonyl-, C_3 - C_6 xycloalkylcacbonyl-, $-\text{S}(\text{O})_m-\text{C}_1$ - C_6 haloalkyl, $-\text{S}(\text{O})_m-\text{C}_3$ - C_6 xycloalkyl, $-\text{O}-\text{S}(\text{O})_2\text{C}_1$ - C_3 alkyl, $-\text{C}_1$ - C_3 alkyl- $\text{S}(\text{O})_m-\text{C}_1$ - C_6 alkyl, $-\text{C}_1$ - C_3 alkyl- $\text{S}(\text{O})_m-\text{C}_1$ - C_6 haloalkyl, $-\text{C}_1$ - C_3 alkyl- $\text{S}(\text{O})_m-\text{C}_3$ - C_6 xycloalkyl, xyano- C_1 - C_6 -alkyl-, $-\text{NR}^{4a}\text{R}^{5a}$, $-\text{C}(\text{S})\text{NR}^4\text{R}^5$, $-\text{S}(\text{O})_2\text{NHC}(\text{O})\text{C}_1$ - C_3 alkyl, $-\text{S}(\text{O})_2\text{NR}^4\text{R}^5$, $-\text{C}(\text{O})\text{OH}$, $-\text{C}(\text{O})\text{OC}_1$ - C_6 alkyl, $-\text{C}(\text{O})\text{NHS}-(\text{O})_2\text{C}_1$ - C_6 alkyl, $-\text{C}(\text{O})\text{NR}^4\text{R}^5$, $-\text{NR}^4\text{C}(\text{O})\text{NR}^4\text{R}^5$, C_1 - C_6 alkylcacbonyl(C_1 - C_6 alkyl)amino-, C_1 - C_6 haloalkylcacbonylamino-, C_1 - C_6 haloalkylcacbonyl(C_1 - C_6 alkyl)amino-, C_1 - C_6 alkylsulfonylamino-, C_1 - C_6 alkylsulfonyl(C_1 - C_6 alkyl)amino-, C_1 - C_6 haloalkylsulfonylamino-, C_1 - C_6 haloalkylsulfonyl(C_1 - C_6 alkyl)amino-, C_3 - C_6 xycloalkylsulfonylamino-, C_3 - C_6 xycloalkylsulfonyl(C_1 - C_6 alkyl)amino-, hydroxyamino-, hydroxy(C_1 - C_6 alkyl)amino, C_1 - C_6 alkoxyamino, C_1 - C_6 alkoxy(C_1 - C_6 alkyl)amino, C_1 - C_6 haloalkoxyamino và C_1 - C_6 haloalkoxy(C_1 - C_6 alkyl)amino; hoặc hệ

thông vòng được lựa chọn từ nhóm bao gồm vòng phenyl, vòng heteroaryl có từ 5 đến 6 cạnh và vòng heterocyclyl có từ 3 đến 6 cạnh, trong đó hệ thông vòng đã nêu được thể bởi từ 0 đến 5 R^{16} ; và

nhóm thế R^8 bất kỳ khác có thể được lựa chọn từ nhóm bao gồm hydroxyl, halogen, xyano, C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 haloalkyl, C_3 - C_6 -xycloalkyl, C_1 - C_6 alkoxy, C_2 - C_6 alkenyl, và C_2 - C_6 alkynyl;

mỗi R^4 và R^5 một cách độc lập là hydro, C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 alkoxy, hoặc C_3 - C_6 xycloalkyl;

m là số nguyên 0, 1, hoặc 2 (tốt hơn là 0 hoặc 2);

mỗi R^{4a} và R^{5a} một cách độc lập được lựa chọn từ nhóm bao gồm C_1 - C_6 alkoxy, và C_3 - C_6 xycloalkyl, hoặc R^{4a} và R^{5a} cùng nhau có thể tạo thành vòng morpholiny; và,

mỗi R^{16} độc lập là halogen, xyano, C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 haloalkyl, C_1 - C_6 alkoxy hoặc C_1 - C_6 haloalkoxy;

W là W1; và

R^{10} , R^{11} , R^{12} , và R^{13} đều là hydro.

Trong tập hợp các phương án ưu tiên hơn (trong đó cả X và Y là khác xyclopropyl) trong hợp chất có công thức (I);

R^1 là metyl;

R^2 là metyl;

G là hydro hoặc $-C(O)-R^3$, trong đó R^3 là isopropyl, t-butyl, metyl, etyl, propargyl, metoxy, etoxy, hoặc *tert*-butoxy;

X là flo và là *ortho* đối với gốc pyridazinon/pyridazin-dion;

Y là clo và *ortho* đối với gốc -W-D;

D là vòng phenyl được thế bởi 1 hoặc 2 R^8 , trong đó ít nhất một R^8 được lựa chọn từ nhóm bao gồm C_1 - C_6 haloalkylcarbonyl-, C_3 - C_6 xycloalkylcarbonyl-, $-S(O)_m$ - C_1 - C_6 haloalkyl, $-S(O)_m$ - C_3 - C_6 xycloalkyl, $-O-S(O)_2$ - C_1 - C_3 alkyl, $-C_1$ - C_3 alkyl- $S(O)_m$ - C_1 - C_6 alkyl, $-C_1$ - C_3 alkyl- $S(O)_m$ - C_1 - C_6 haloalkyl, $-C_1$ - C_3 alkyl- $S(O)_m$ - C_3 - C_6 xycloalkyl, $-S(O)_2$ NHC(O)- C_1 - C_3 alkyl, $-S(O)_2$ NR⁴R⁵, $-C(O)OH$, $-C(O)OC_1$ - C_6 alkyl, $-C(O)NHS$ -(O)₂- C_1 - C_6 alkyl, $-C(O)NR^4R^5$, $-NR^4C(O)NR^4R^5$, C_1 - C_6 alkylcarbonyl(C_1 - C_6 alkyl)amino-, C_1 - C_6 haloalkylcarbonylamino- và C_1 - C_6 haloalkylcarbonyl(C_1 -

C₆alkyl)amino-; hoặc hệ thống vòng được lựa chọn từ nhóm bao gồm vòng phenyl, vòng heteroaryl có từ 5 đến 6 cạnh và vòng heteroxyclyl có từ 3 đến 6 cạnh, trong đó hệ thống vòng đã nêu được thể bởi từ 0 đến 5 R¹⁶; và

nhóm thế R⁸ bất kỳ khác có thể được lựa chọn từ nhóm bao gồm halogen, C₁-C₆alkyl và C₁-C₆haloalkyl;

mỗi R⁴ và R⁵ một cách độc lập là hydro, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃alkoxy, hoặc C₃-C₆xylcoalkyl;

m là 0 hoặc 2 (tốt hơn là 0);

mỗi R¹⁶ độc lập là halogen, xyano, C₁-C₄alkyl, C₁-C₃haloalkyl hoặc C₁-C₄alkoxy;

W là W₁; và

R¹⁰, R¹¹, R¹², và R¹³ đều là hydro.

Trong tập hợp các phương án được ưu tiên hơn nữa (trong đó cả X và Y là khác xyclopropyl) trong hợp chất có công thức (I);

R¹ là metyl;

R² là metyl;

G là hydro hoặc -C(O)-R³, trong đó R³ là isopropyl, t-butyl, metyl, etyl, propargyl, hoặc metoxy;

X là flo và là *ortho* đối với gốc pyridazinon/pyridazin-dion;

Y là clo và *ortho* đối với gốc -W-D;

D là vòng phenyl được thể bởi một R⁸ được lựa chọn từ nhóm bao gồm -C₁-C₃alkyl-S(O)_m-C₁-C₆alkyl, -S(O)₂NHC(O)C₁-C₃alkyl, -S(O)₂NR⁴R⁵, -C(O)OH, -C(O)OC₁-C₆alkyl và -C(O)NR⁴R⁵; hoặc hệ thống vòng được lựa chọn từ nhóm bao gồm vòng phenyl, morpholinyl, tetrahydrofuranyl, furyl, thienyl, pyreryl, pyrazolyl, imidazolyl, 1,2,3-triazolyl, 1,2,4-triazolyl, tetrazolyl, oxazolyl, isoxazolyl, thiazolyl, isothiazolyl, 1,2,4-oxadiazolyl, 1,3,4-oxadiazolyl, 1,2,5-oxadiazolyl, 1,2,3-thiadiazolyl, 1,2,4-thiadiazolyl, 1,3,4-thiadiazolyl, 1,2,5-thiadiazolyl, pyridyl, pyridonyl, pyrimidinyl, pyridazinyl, pyrazinyl, 1,2,3-triazinyl, 1,2,4-triazinyl, hoặc 1,3,5-triazinyl, trong đó hệ thống vòng đã nêu được thể bởi từ 0 đến 2 R¹⁶;

mỗi R⁴ và R⁵ một cách độc lập là hydro hoặc C₁-C₃alkyl;

m là 0 hoặc 2 (tốt hơn là 0);

mỗi R^{16} độc lập là halogen hoặc C_1 - C_4 alkyl (tốt hơn là metyl);

W là W1; và

R^{10} , R^{11} , R^{12} , và R^{13} đều là hydro.

Trong tập hợp các phương án còn được ưu tiên hơn nữa (trong đó cả X và Y là khác xyclopropyl) trong hợp chất có công thức (I);

R^1 là metyl;

R^2 là metyl;

G là hydro hoặc $-C(O)-R^3$, trong đó R^3 là isopropyl;

X là flo và là *ortho* đối với gốc pyridazinon/pyridazin-dion;

Y là clo và *ortho* đối với gốc -W-D;

D là vòng phenyl được thế bởi một R^8 được lựa chọn từ nhóm bao gồm methylsulfanylmetyl, isopropylsulfanylmetyl, sulfamoyl, methylsulfamoyl và carbamoyl; hoặc hệ thống vòng được lựa chọn từ nhóm bao gồm vòng phenyl, morpholinyl, tetrahydrofuranyl, furyl, thienyl, pyrolyl, pyrazolyl, 1,2,4-triazolyl, oxazolyl và thiazolyl, trong đó hệ thống vòng đã nêu được thế bởi từ 0 đến 2 R^{16} ;

mỗi R^{16} là metyl;

W là W1; và

R^{10} , R^{11} , R^{12} , và R^{13} đều là hydro.

Trong tập hợp các phương án được ưu tiên thay thế (trong đó cả X và Y là khác xyclopropyl) trong hợp chất có công thức (I);

R^1 là metyl, etyl, xyclopropyl, propargyl hoặc C_1 floalkyl;

R^2 là clo, xyclopropyl, triflometyl hoặc metyl;

G là hydro hoặc $-C(O)-R^3$, trong đó R^3 là isopropyl, t-butyl, metyl, etyl, propargyl, metoxy, etoxy, hoặc *tert*-butoxy;

X là flo, clo hoặc C_1 -haloalkyl và là *ortho* đối với gốc pyridazinon/pyridazin-dion;

Y là hydro, clo, flo, hoặc brom và *ortho* đối với gốc -W-D;

D là vòng heteroaryl đơn vòng có 5 hoặc 6 cạnh chứa 1, 2, hoặc 3 dị nguyên tử một cách độc lập được lựa chọn từ oxy, nitơ và lưu huỳnh được thế hoặc trên cacbon mạch vòng bởi ít nhất một R^8 được lựa chọn từ nhóm bao gồm C_1 - C_6 haloalkylcarbonyl-, C_3 - C_6 cycloalkylcarbonyl-, $-S(O)_m$ - C_1 - C_6 haloalkyl-, $-S(O)_m$ - C_3 - C_6 cycloalkyl-, $-O-S(O)_2$ - C_1 - C_3 alkyl-, $-C_1$ - C_3 alkyl- $S(O)_m$ - C_1 - C_6 alkyl-, $-C_1$ - C_3 alkyl- $S(O)_m$ - C_1 - C_6 haloalkyl-, $-C_1$ - C_3 alkyl- $S(O)_m$ - C_3 - C_6 cycloalkyl-, xyano- C_1 - C_6 -alkyl-, $NR^{4a}R^{5a}$, $-C(S)NR^4R^5$, $-S(O)_2NHC(O)C_1$ - C_3 alkyl-, $-S(O)_2NR^4R^5$, $-C(O)OH$, $-C(O)OC_1$ - C_6 alkyl-, $-C(O)NHS(O)_2C_1$ - C_6 alkyl-, $-C(O)NR^4R^5$, $-NR^4C(O)NR^4R^5$, C_1 - C_6 alkylcarbonyl(C_1 - C_6 alkyl)amino-, C_1 - C_6 haloalkylcarbonylamino-, C_1 - C_6 haloalkylcarbonyl(C_1 - C_6 alkyl)amino-, C_1 - C_6 alkylsulfonylamino-, C_1 - C_6 alkylsulfonyl(C_1 - C_6 alkyl)amino-, C_1 - C_6 haloalkylsulfonylamino-, C_1 - C_6 haloalkylsulfonyl(C_1 - C_6 alkyl)amino-, C_3 - C_6 cycloalkylsulfonylamino-, C_3 - C_6 cycloalkylsulfonyl(C_1 - C_6 alkyl)amino-, hydroxyamino-, hydroxy(C_1 - C_6 alkyl)amino, C_1 - C_6 alkoxyamino, C_1 - C_6 alkoxy(C_1 - C_6 alkyl)amino, C_1 - C_6 haloalkoxyamino, C_1 - C_6 haloalkoxy(C_1 - C_6 alkyl)amino; và hệ thống vòng được lựa chọn từ nhóm bao gồm vòng phenyl, vòng heteroaryl có từ 5 đến 6 cạnh và vòng heterocyclyl có từ 3 đến 6 cạnh, trong đó hệ thống vòng đã nêu được thế bởi từ 0 đến 5 R^{16} ; và

nhóm thế R^8 bất kỳ khác có thể được lựa chọn từ nhóm bao gồm hydroxyl, halogen, xyano, C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 haloalkyl, C_3 - C_6 -cycloalkyl, C_1 - C_6 alkoxy, C_2 - C_6 alkenyl, và C_2 - C_6 alkynyl; và/hoặc D sẽ được thế trên nitơ mạch vòng bởi ít nhất một R^9 được lựa chọn từ nhóm bao gồm C_5 - C_6 alkyl, C_5 - C_6 haloalkyl, C_3 - C_6 -cycloalkyl, C_1 - C_3 alkoxy- C_3 alkyl-, C_3 alkoxy- C_1 - C_2 alkyl-, C_1 - C_3 haloalkoxy- C_1 - C_3 alkyl-, C_1 - C_3 alkoxy- C_1 - C_3 alkoxy- C_1 - C_3 alkyl-, C_1 - C_6 hydroxyalkyl-, $-C_1$ - C_3 alkyl- $S(O)_m$ - C_1 - C_6 alkyl-, $-C_1$ - C_3 alkyl- $S(O)_m$ - C_1 - C_6 haloalkyl-, $-C_1$ - C_3 alkyl- $S(O)_m$ - C_3 - C_6 cycloalkyl, xyano- C_1 - C_6 -alkyl-, và hệ thống vòng được lựa chọn từ nhóm bao gồm: vòng phenyl, vòng heteroaryl có từ 5 đến 6 cạnh và vòng heterocyclyl có từ 3 đến 6 cạnh, trong đó hệ thống vòng đã nêu được thế bởi từ 0 đến 5 R^{16} ;

mỗi R^4 và R^5 một cách độc lập là hydro, C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 alkoxy, hoặc C_3 - C_6 xylcoalkyl;

m là số nguyên 0, 1, hoặc 2 (tốt hơn là 0 hoặc 2);

mỗi R^{4a} và R^{5a} một cách độc lập được lựa chọn từ nhóm bao gồm C_1 - C_6 alkoxy, và C_3 - C_6 cycloalkyl, hoặc R^{4a} và R^{5a} cùng nhau có thể tạo thành vòng morpholinyl; và,

mỗi R^{16} độc lập là halogen, xyano, C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 haloalkyl, C_1 - C_6 alkoxy hoặc C_1 - C_6 haloalkoxy;

W là W1; và

R^{10} , R^{11} , R^{12} , và R^{13} đều là hydro.

Trong tập hợp các phương án ưu tiên thay thế khác (trong đó cả X và Y là khác xyclopropyl) trong hợp chất có công thức (I);

R^1 là metyl;

R^2 là metyl;

G là hydro hoặc $-C(O)-R^3$, trong đó R^3 là isopropyl, t-butyl, metyl, etyl, propargyl, metoxy, etoxy, hoặc *tert*-butoxy;

X là flo và là *ortho* đối với gốc pyridazinon/pyridazin-dion;

Y là clo và *ortho* đối với gốc -W-D;

D là vòng heteroaryl đơn vòng có 5 hoặc 6 cạnh chứa 1, 2, hoặc 3 dị nguyên tử một cách độc lập được lựa chọn từ oxy, nitơ và lưu huỳnh được thế hoặc trên cacbon mạch vòng bởi 1 hoặc 2 R^8 , trong đó ít nhất một R^8 được lựa chọn từ nhóm bao gồm C_1 - C_6 haloalkylcarbonyl-, C_3 - C_6 xycloalkylcarbonyl-, $-S(O)_m-C_1$ - C_6 haloalkyl, $-S(O)_m-C_3$ - C_6 xycloalkyl, $-O-S(O)_2C_1$ - C_3 alkyl, $-C_1$ - C_3 alkyl- $S(O)_m-C_1$ - C_6 alkyl, $-C_1$ - C_3 alkyl- $S(O)_m-C_1$ - C_6 haloalkyl, $-C_1$ - C_3 alkyl- $S(O)_m-C_3$ - C_6 xycloalkyl, $-S(O)_2NHC(O)C_1$ - C_3 alkyl, $-S(O)_2NR^4R^5$, $-C(O)OH$, $-C(O)OC_1$ - C_6 alkyl, $-C(O)NHS-(O)_2C_1$ - C_6 alkyl, $-C(O)NR^4R^5$, $-NR^4C(O)NR^4R^5$, C_1 - C_6 alkylcarbonyl(C_1 - C_6 alkyl)amino-, C_1 - C_6 haloalkylcarbonylamino- và C_1 - C_6 haloalkylcarbonyl(C_1 - C_6 alkyl)amino-; hoặc hệ thống vòng được lựa chọn từ nhóm bao gồm vòng phenyl, vòng heteroaryl có từ 5 đến 6 cạnh và vòng heteroxyclyl có từ 3 đến 6 cạnh, trong đó hệ thống vòng đã nêu được thế bởi từ 0 đến 5 R^{16} ; và

nhóm thế R^8 bất kỳ khác có thể được lựa chọn từ nhóm bao gồm halogen, C_1 - C_6 alkyl và C_1 - C_6 haloalkyl; và/hoặc D sẽ được thế trên nitơ mạch vòng bởi một R^9 được lựa chọn từ nhóm bao gồm C_5 - C_6 alkyl, C_5 - C_6 haloalkyl, C_3 - C_6 -xycloalkyl, $-C_1$ - C_3 alkyl- $S(O)_m-C_1$ - C_6 alkyl, $-C_1$ - C_3 alkyl- $S(O)_m-C_1$ - C_6 haloalkyl, $-C_1$ - C_3 alkyl- $S(O)_m-C_3$ - C_6 xycloalkyl, và hệ thống vòng được lựa chọn từ nhóm bao gồm: vòng phenyl, vòng heteroaryl có từ 5 đến

6 cạnh và vòng heteroxyclyl có từ 3 đến 6 cạnh, trong đó hệ thống vòng đã nêu được thể bởi từ 0 đến 5 R¹⁶;

mỗi R⁴ và R⁵ một cách độc lập là hydro, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃alkoxy, hoặc C₃-C₆xylcoalkyl;

m là 0 hoặc 2 (tốt hơn là 0);

mỗi R¹⁶ độc lập là halogen, xyano, C₁-C₄alkyl, C₁-C₃haloalkyl hoặc C₁-C₄alkoxy;

W là W₁; và

R¹⁰, R¹¹, R¹², và R¹³ đều là hydro.

Trong tập hợp các phương án còn được ưu tiên hơn thay thế khác (trong đó cả X và Y là khác xyclopropyl) trong hợp chất có công thức (I);

R¹ là metyl;

R² là metyl;

G là hydro hoặc -C(O)-R³, trong đó R³ là isopropyl, t-butyl, metyl, etyl, propargyl, hoặc metoxy;

X là flo và là *ortho* đối với gốc pyridazinon/pyridazin-dion;

Y là clo và *ortho* đối với gốc -W-D;

D là vòng heteroaryl đơn vòng có 5 hoặc 6 cạnh chứa 1, 2, hoặc 3 nguyên tử nitơ được thể hoặc trên cacbon mạch vòng bởi một R⁸ được lựa chọn từ nhóm bao gồm -C₁-C₃alkyl-S(O)_m-C₁-C₆alkyl, -S(O)₂NHC(O)C₁-C₃alkyl, -S(O)₂NR⁴R⁵, -C(O)OH, -C(O)OC₁-C₆alkyl và -C(O)NR⁴R⁵; hoặc hệ thống vòng được lựa chọn từ nhóm bao gồm vòng phenyl, morpholinyl, tetrahydrofuranyl, furyl, thienyl, pyrolyl, pyrazolyl, imidazolyl, 1,2,3-triazolyl, 1,2,4-triazolyl, tetrazolyl, oxazolyl, isoxazolyl, thiazolyl, isothiazolyl, 1,2,4-oxadiazolyl, 1,3,4-oxadiazolyl, 1,2,5-oxadiazolyl, 1,2,3-thiadiazolyl, 1,2,4-thiadiazolyl, 1,3,4-thiadiazolyl, 1,2,5-thiadiazolyl, pyridyl, pyridonyl, pyrimidinyl, pyridazinyl, pyrazinyl, 1,2,3-triazinyl, 1,2,4-triazinyl, hoặc 1,3,5-triazinyl, trong đó hệ thống vòng đã nêu được thể bởi từ 0 đến 2 R¹⁶; và/hoặc D sẽ được thể trên nitơ mạch vòng bởi một R⁹ được lựa chọn từ nhóm bao gồm C₅-C₆alkyl, C₃-C₆-xycloalkyl, và hệ thống vòng được lựa chọn từ nhóm bao gồm: vòng phenyl, vòng heteroaryl có từ 5 đến 6 cạnh và vòng heteroxyclyl có từ 3 đến 6 cạnh, trong đó hệ thống vòng đã nêu được thể bởi từ 0 đến 2 R¹⁶;

mỗi R^4 và R^5 một cách độc lập là hydro hoặc C_1 - C_3 alkyl;

m là 0 hoặc 2 (tốt hơn là 0);

mỗi R^{16} độc lập là halogen hoặc C_1 - C_4 alkyl (tốt hơn là metyl);

W là $W1$; và

R^{10} , R^{11} , R^{12} , và R^{13} đều là hydro.

Trong tập hợp các phương án còn được ưu tiên hơn thay thế khác nữa (trong đó cả X và Y là khác xyclopropyl) trong hợp chất có công thức (I);

R^1 là metyl;

R^2 là metyl;

G là hydro hoặc $-C(O)-R^3$, trong đó R^3 là isopropyl;

X là flo và là *ortho* đối với gốc pyridazinon/pyridazin-dion;

Y là clo và *ortho* đối với gốc $-W-D$;

D là pyrazolyl hoặc pyridyl được thế hoặc trên cacbon mạch vòng bởi một R^8 được lựa chọn từ nhóm bao gồm metylsulfanylmetyl, isopropylsulfanylmetyl, sulfamoyl, metylsulfamoyl và carbamoyl; hoặc hệ thống vòng được lựa chọn từ nhóm bao gồm vòng phenyl, morpholinyl, tetrahydrofuranyl, furyl, thienyl, pyrolyl, pyrazolyl, 1,2,4-triazolyl, oxazolyl và thiazolyl, trong đó hệ thống vòng đã nêu được thế bởi từ 0 đến 2 R^{16} ; và/hoặc D sẽ được thế trên nitơ mạch vòng bởi một R^9 được lựa chọn từ xyclopropyl hoặc phenyl;

mỗi R^{16} là metyl;

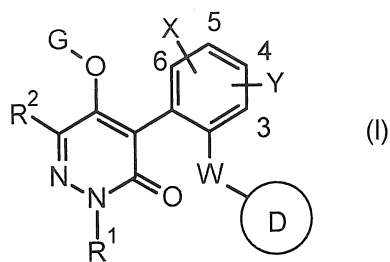
W là $W1$; và

R^{10} , R^{11} , R^{12} , và R^{13} đều là hydro.

Mô tả chi tiết sáng chế

Các bảng A-1, A-2, A-3, A-4, B-1, B-2, B-3, B-4, C-1, C-2, C-3, và C-4 dưới đây minh họa các ví dụ cụ thể của các hợp chất có công thức (I) của sáng chế.

Các hợp chất diệt cỏ theo sáng chế. Hệ thống đánh số được sử dụng để mô tả các vị trí của X và Y trong hợp chất có công thức (I) được thể hiện dưới đây, được thể hiện chỉ nhằm mục đích cho rõ ràng.



Bảng A-1 cung cấp 672 hợp chất từ A-1,001 đến A-1,672 có công thức (I) trong đó G là -H, W là -CH₂-CH₂- và R¹, R², X, Y, D là như được xác định cho các công thức số từ 1,001 đến 1,672 một cách tương ứng trong bảng 1 dưới đây.

Bảng 1: Các định nghĩa nhóm thế của R¹, R², X, Y và D:

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	Y	D
1,001	-Me	-Me	6-F	3-F	4-oxazol-5-ylphenyl-
1,002	-Me	-Me	6-F	3-F	4-axetamidophenyl-
1,003	-Me	-Me	6-F	3-F	4-(dimetylsulfamoyl)phenyl-
1,004	-Me	-Me	6-F	3-F	4-tert-butylphenyl-
1,005	-Me	-Me	6-F	3-F	4-biphenyl-
1,006	-Me	-Me	6-F	3-F	4-[etyl(metyl)carbamoyl]-3-flophenyl-
1,007	-Me	-Me	6-F	3-F	2-xyanophenyl-
1,008	-Me	-Me	6-F	3-F	3-xyanophenyl-
1,009	-Me	-Me	6-F	3-F	4-amino-3-metylphenyl-
1,010	-Me	-Me	6-F	3-F	4-metylsulfonylphenyl-
1,011	-Me	-Me	6-F	3-F	4-dimetylaminophenyl-
1,012	-Me	-Me	6-F	3-F	4-metylaminophenyl-
1,013	-Me	-Me	6-F	3-F	4-tert-butoxyphenyl-
1,014	-Me	-Me	6-F	3-F	4-xyanophenyl-
1,015	-Me	-Me	6-F	3-F	4-hydroxyphenyl-
1,016	-Me	-Me	6-F	3-F	4-xyclopropylphenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	Y	D
1,017	-Me	-Me	6-F	3-F	4-(metylsulfanyl)phenyl-
1,018	-Me	-Me	6-F	3-F	4-cacboxyphenyl-
1,019	-Me	-Me	6-F	3-F	4-metoxycacbonylphenyl-
1,020	-Me	-Me	6-F	3-F	4-(tert-butoxycacbonylamino)- 3-flo-phenyl-
1,021	-Me	-Me	6-F	3-F	2-(metylsulfanyl)-4-pyridyl-
1,022	-Me	-Me	6-F	3-F	2-axetamido-4-pyridyl-
1,023	-Me	-Me	6-F	3-Cl	4-oxazol-5-ylphenyl-
1,024	-Me	-Me	6-F	3-Cl	4-axetamidophenyl-
1,025	-Me	-Me	6-F	3-Cl	4-(dimetylsulfamoyl)phenyl-
1,026	-Me	-Me	6-F	3-Cl	4-tert-butylphenyl-
1,027	-Me	-Me	6-F	3-Cl	4-biphenyl-
1,028	-Me	-Me	6-F	3-Cl	4-[etyl(metyl)carbamoyl]-3-flo- phenyl-
1,029	-Me	-Me	6-F	3-Cl	2-xyanophenyl-
1,030	-Me	-Me	6-F	3-Cl	3-xyanophenyl-
1,031	-Me	-Me	6-F	3-Cl	4-amino-3-metylphenyl-
1,032	-Me	-Me	6-F	3-Cl	4-metylsulfonylphenyl-
1,033	-Me	-Me	6-F	3-Cl	4-dimetylaminophenyl-
1,034	-Me	-Me	6-F	3-Cl	4-metylaminophenyl-
1,035	-Me	-Me	6-F	3-Cl	4-tert-butoxyphenyl-
1,036	-Me	-Me	6-F	3-Cl	4-xyanophenyl-
1,037	-Me	-Me	6-F	3-Cl	4-hydroxyphenyl-
1,038	-Me	-Me	6-F	3-Cl	4-xyclopropylphenyl-
1,039	-Me	-Me	6-F	3-Cl	4-(metylsulfanyl)phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	Y	D
1,040	-Me	-Me	6-F	3-Cl	4-cacboxyphenyl-
1,041	-Me	-Me	6-F	3-Cl	4-metoxycacbonylphenyl-
1,042	-Me	-Me	6-F	3-Cl	4-(tert-butoxycacbonylamino)- 3-flo-phenyl-
1,043	-Me	-Me	6-F	3-Cl	2-(metylsulfanyl)-4-pyridyl-
1,044	-Me	-Me	6-F	3-Cl	2-axetamido-4-pyridyl-
1,045	-Me	-Me	6-Cl	3-F	4-oxazol-5-ylphenyl-
1,046	-Me	-Me	6-Cl	3-F	4-axetamidophenyl-
1,047	-Me	-Me	6-Cl	3-F	4-(dimetylsulfamoyl)phenyl-
1,048	-Me	-Me	6-Cl	3-F	4-tert-butylphenyl-
1,049	-Me	-Me	6-Cl	3-F	4-biphenyl-
1,050	-Me	-Me	6-Cl	3-F	4-[etyl(metyl)carbamoyl]-3-flo- phenyl-
1,051	-Me	-Me	6-Cl	3-F	2-xyanophenyl-
1,052	-Me	-Me	6-Cl	3-F	3-xyanophenyl-
1,053	-Me	-Me	6-Cl	3-F	4-amino-3-metylphenyl-
1,054	-Me	-Me	6-Cl	3-F	4-metylsulfonylphenyl-
1,055	-Me	-Me	6-Cl	3-F	4-dimetylaminophenyl-
1,056	-Me	-Me	6-Cl	3-F	4-metylaminophenyl-
1,057	-Me	-Me	6-Cl	3-F	4-tert-butoxyphenyl-
1,058	-Me	-Me	6-Cl	3-F	4-xyanophenyl-
1,059	-Me	-Me	6-Cl	3-F	4-hydroxyphenyl-
1,060	-Me	-Me	6-Cl	3-F	4-xyclopropylphenyl-
1,061	-Me	-Me	6-Cl	3-F	4-(metylsulfanyl)phenyl-
1,062	-Me	-Me	6-Cl	3-F	4-cacboxyphenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	Y	D
1,063	-Me	-Me	6-Cl	3-F	4-metoxycacbonylphenyl-
1,064	-Me	-Me	6-Cl	3-F	4-(tert-butoxycacbonylamino)- 3-flo-phenyl-
1,065	-Me	-Me	6-Cl	3-F	2-(metylsulfanyl)-4-pyridyl-
1,066	-Me	-Me	6-Cl	3-F	2-axetamido-4-pyridyl-
1,067	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	4-oxazol-5-ylphenyl-
1,068	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	4-axetamidophenyl-
1,069	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	4-(dimetylsulfamoyl)phenyl-
1,070	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	4-tert-butylphenyl-
1,071	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	4-biphenyl-
1,072	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	4-[etyl(metyl)carbamoyl]-3-flo- phenyl-
1,073	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	2-xyanophenyl-
1,074	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	3-xyanophenyl-
1,075	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	4-amino-3-metylphenyl-
1,076	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	4-metylsulfonylphenyl-
1,077	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	4-dimetylaminophenyl-
1,078	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	4-metylaminophenyl-
1,079	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	4-tert-butoxyphenyl-
1,080	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	4-xyanophenyl-
1,081	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	4-hydroxyphenyl-
1,082	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	4-xyclopropylphenyl-
1,083	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	4-(metylsulfanyl)phenyl-
1,084	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	4-cacboxyphenyl-
1,085	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	4-metoxycacbonylphenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	Y	D
1,086	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	4-(tert-butoxycarbonylamino)- 3-flu-phenyl-
1,087	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	2-(methylsulfonyl)-4-pyridyl-
1,088	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	2-acetamido-4-pyridyl-
1,089	-Me	-Cl	6-F	3-F	4-oxazol-5-ylphenyl-
1,090	-Me	-Cl	6-F	3-F	4-acetamidophenyl-
1,091	-Me	-Cl	6-F	3-F	4-(dimethylsulfonyl)phenyl-
1,092	-Me	-Cl	6-F	3-F	4-tert-butylphenyl-
1,093	-Me	-Cl	6-F	3-F	4-biphenyl-
1,094	-Me	-Cl	6-F	3-F	4-[ethyl(methyl)carbamoyl]-3-flu- phenyl-
1,095	-Me	-Cl	6-F	3-F	2-cyanophenyl-
1,096	-Me	-Cl	6-F	3-F	3-cyanophenyl-
1,097	-Me	-Cl	6-F	3-F	4-amino-3-methylphenyl-
1,098	-Me	-Cl	6-F	3-F	4-methylsulfonylphenyl-
1,099	-Me	-Cl	6-F	3-F	4-dimethylaminophenyl-
1,100	-Me	-Cl	6-F	3-F	4-methylaminophenyl-
1,101	-Me	-Cl	6-F	3-F	4-tert-butoxyphenyl-
1,102	-Me	-Cl	6-F	3-F	4-cyanophenyl-
1,103	-Me	-Cl	6-F	3-F	4-hydroxyphenyl-
1,104	-Me	-Cl	6-F	3-F	4-cyclopropylphenyl-
1,105	-Me	-Cl	6-F	3-F	4-(methylsulfonyl)phenyl-
1,106	-Me	-Cl	6-F	3-F	4-carboxyphenyl-
1,107	-Me	-Cl	6-F	3-F	4-methoxycarbonylphenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	Y	D
1,108	-Me	-Cl	6-F	3-F	4-(tert-butoxycarbonylamino)- 3-flu-phenyl-
1,109	-Me	-Cl	6-F	3-F	2-(methylsulfonyl)-4-pyridyl-
1,110	-Me	-Cl	6-F	3-F	2-axetamido-4-pyridyl-
1,111	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	4-oxazol-5-ylphenyl-
1,112	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	4-axetamidophenyl-
1,113	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	4-(dimethylsulfonyl)phenyl-
1,114	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	4-tert-butylphenyl-
1,115	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	4-biphenyl-
1,116	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	4-[ethyl(methyl)carbamoyl]-3-flu- phenyl-
1,117	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	2-xyanophenyl-
1,118	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	3-xyanophenyl-
1,119	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	4-amino-3-methylphenyl-
1,120	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	4-methylsulfonylphenyl-
1,121	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	4-dimethylaminophenyl-
1,122	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	4-methylaminophenyl-
1,123	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	4-tert-butoxyphenyl-
1,124	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	4-xyanophenyl-
1,125	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	4-hydroxyphenyl-
1,126	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	4-xyclopropylphenyl-
1,127	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	4-(methylsulfonyl)phenyl-
1,128	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	4-carboxyphenyl-
1,129	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	4-metoxycarbonylphenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	Y	D
1,130	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	4-(tert-butoxycarbonylamino)- 3-fluorophenyl-
1,131	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	2-(methylsulfonyl)-4-pyridyl-
1,132	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	2-acetamido-4-pyridyl-
1,133	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	4-oxazol-5-ylphenyl-
1,134	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	4-acetamidophenyl-
1,135	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	4-(dimethylsulfonyl)phenyl-
1,136	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	4-tert-butylphenyl-
1,137	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	4-biphenyl-
1,138	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	4-[ethyl(methyl)carbamoyl]-3-fluorophenyl-
1,139	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	2-cyanophenyl-
1,140	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	3-cyanophenyl-
1,141	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	4-amino-3-methylphenyl-
1,142	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	4-methylsulfonylphenyl-
1,143	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	4-dimethylaminophenyl-
1,144	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	4-methylaminophenyl-
1,145	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	4-tert-butoxyphenyl-
1,146	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	4-cyanophenyl-
1,147	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	4-hydroxyphenyl-
1,148	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	4-cyclopropylphenyl-
1,149	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	4-(methylsulfonyl)phenyl-
1,150	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	4-carboxyphenyl-
1,151	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	4-methoxycarbonylphenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	Y	D
1,152	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	4-(tert-butoxycarbonylamino)- 3-flu-phenyl-
1,153	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	2-(methylsulfonyl)-4-pyridyl-
1,154	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	2-acetamido-4-pyridyl-
1,155	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-oxazol-5-ylphenyl-
1,156	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-acetamidophenyl-
1,157	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-(dimethylsulfonyl)phenyl-
1,158	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-tert-butylphenyl-
1,159	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-biphenyl-
1,160	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-[ethyl(methyl)carbamoyl]-3-flu- phenyl-
1,161	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	2-cyanophenyl-
1,162	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	3-cyanophenyl-
1,163	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-amino-3-methylphenyl-
1,164	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-methylsulfonylphenyl-
1,165	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-dimethylaminophenyl-
1,166	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-methylaminophenyl-
1,167	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-tert-butoxyphenyl-
1,168	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-cyanophenyl-
1,169	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-hydroxyphenyl-
1,170	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-cyclopropylphenyl-
1,171	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-(methylsulfonyl)phenyl-
1,172	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-carboxyphenyl-
1,173	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-methoxycarbonylphenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	Y	D
1,174	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-(tert-butoxycarbonylamino)- 3-flu-phenyl-
1,175	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	2-(methylsulfonyl)-4-pyridyl-
1,176	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	2-acetamido-4-pyridyl-
1,177	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-F	4-oxazol-5-ylphenyl-
1,178	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-F	4-acetamidophenyl-
1,179	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-F	4-(dimethylsulfonyl)phenyl-
1,180	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-F	4-tert-butylphenyl-
1,181	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-F	4-biphenyl-
1,182	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-F	4-[ethyl(methyl)carbamoyl]-3-flu- phenyl-
1,183	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-F	2-cyanophenyl-
1,184	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-F	3-cyanophenyl-
1,185	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-F	4-amino-3-methylphenyl-
1,186	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-F	4-methylsulfonylphenyl-
1,187	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-F	4-dimethylaminophenyl-
1,188	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-F	4-methylaminophenyl-
1,189	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-F	4-tert-butoxyphenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	Y	D
1,190	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-F	4-xyanophenyl-
1,191	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-F	4-hydroxyphenyl-
1,192	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-F	4-xyclopropylphenyl-
1,193	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-F	4-(metylsulfanyl)phenyl-
1,194	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-F	4-cacboxyphenyl-
1,195	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-F	4-metoxycacbonylphenyl-
1,196	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-F	4-(tert-butoxycacbonylamino)- 3-flo-phenyl-
1,197	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-F	2-(metylsulfanyl)-4-pyridyl-
1,198	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-F	2-axetamido-4-pyridyl-
1,199	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	4-oxazol-5-ylphenyl-
1,200	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	4-axetamidophenyl-
1,201	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	4-(dimetylsulfamoyl)phenyl-
1,202	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	4-tert-butylphenyl-
1,203	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	4-biphenyl-
1,204	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	4-[etyl(metyl)carbamoyl]-3-flo- phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	Y	D
1,205	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	2-xyanophenyl-
1,206	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	3-xyanophenyl-
1,207	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	4-amino-3-metylphenyl-
1,208	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	4-metylsulfonylphenyl-
1,209	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	4-dimetylaminophenyl-
1,210	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	4-metylaminophenyl-
1,211	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	4-tert-butoxyphenyl-
1,212	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	4-xyanophenyl-
1,213	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	4-hydroxyphenyl-
1,214	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	4-xyclopropylphenyl-
1,215	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	4-(metylsulfanyl)phenyl-
1,216	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	4-cacboxyphenyl-
1,217	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	4-metoxycacbonylphenyl-
1,218	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	4-(tert-butoxycacbonylamino)- 3-flo-phenyl-
1,219	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	2-(metylsulfanyl)-4-pyridyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	Y	D
1,220	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	2-axetamido-4-pyridyl-
1,221	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	4-oxazol-5-ylphenyl-
1,222	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	4-axetamidophenyl-
1,223	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	4-(dimetylsulfamoyl)phenyl-
1,224	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	4-tert-butylphenyl-
1,225	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	4-biphenyl-
1,226	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	4-[etyl(metyl)carbamoyl]-3-flo- phenyl-
1,227	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	2-xyanophenyl-
1,228	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	3-xyanophenyl-
1,229	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	4-amino-3-metylphenyl-
1,230	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	4-metylsulfonylphenyl-
1,231	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	4-dimetylaminophenyl-
1,232	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	4-metylaminophenyl-
1,233	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	4-tert-butoxyphenyl-
1,234	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	4-xyanophenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	Y	D
1,235	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	4-hydroxyphenyl-
1,236	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	4-xyclopropylphenyl-
1,237	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	4-(metylsulfanyl)phenyl-
1,238	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	4-cacboxyphenyl-
1,239	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	4-metoxycacbonylphenyl-
1,240	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	4-(tert-butoxycacbonylamino)- 3-flo-phenyl-
1,241	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	2-(metylsulfanyl)-4-pyridyl-
1,242	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	2-axetamido-4-pyridyl-
1,243	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	4-oxazol-5-ylphenyl-
1,244	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	4-axetamidophenyl-
1,245	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	4-(dimetylsulfamoyl)phenyl-
1,246	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	4-tert-butylphenyl-
1,247	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	4-biphenyl-
1,248	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	4-[etyl(metyl)carbamoyl]-3-flo- phenyl-
1,249	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	2-xyanophenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	Y	D
1,250	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	3-xyanophenyl-
1,251	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	4-amino-3-metylphenyl-
1,252	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	4-metylsulfonylphenyl-
1,253	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	4-dimetylaminophenyl-
1,254	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	4-metylaminophenyl-
1,255	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	4-tert-butoxyphenyl-
1,256	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	4-xyanophenyl-
1,257	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	4-hydroxyphenyl-
1,258	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	4-xyclopropylphenyl-
1,259	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	4-(metylsulfanyl)phenyl-
1,260	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	4-cacboxyphenyl-
1,261	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	4-metoxycacbonylphenyl-
1,262	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	4-(tert-butoxycacbonylamino)- 3-flo-phenyl-
1,263	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	2-(metylsulfanyl)-4-pyridyl-
1,264	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	2-axetamido-4-pyridyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	Y	D
1,265	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-F	4-oxazol-5-ylphenyl-
1,266	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-F	4-axetamidophenyl-
1,267	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-F	4-(dimetylsulfamoyl)phenyl-
1,268	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-F	4-tert-butylphenyl-
1,269	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-F	4-biphenyl-
1,270	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-F	4-[etyl(metyl)carbamoyl]-3-flo- phenyl-
1,271	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-F	2-xyanophenyl-
1,272	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-F	3-xyanophenyl-
1,273	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-F	4-amino-3-metylphenyl-
1,274	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-F	4-metylsulfonylphenyl-
1,275	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-F	4-dimetylaminophenyl-
1,276	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-F	4-metylaminophenyl-
1,277	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-F	4-tert-butoxyphenyl-
1,278	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-F	4-xyanophenyl-
1,279	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-F	4-hydroxyphenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	Y	D
1,280	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-F	4-xyclopropylphenyl-
1,281	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-F	4-(metylsulfanyl)phenyl-
1,282	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-F	4-cacboxyphenyl-
1,283	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-F	4-metoxycacbonylphenyl-
1,284	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-F	4-(tert-butoxycacbonylamino)- 3-flo-phenyl-
1,285	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-F	2-(metylsulfanyl)-4-pyridyl-
1,286	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-F	2-axetamido-4-pyridyl-
1,287	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	4-oxazol-5-ylphenyl-
1,288	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	4-axetamidophenyl-
1,289	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	4-(dimetylsulfamoyl)phenyl-
1,290	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	4-tert-butylphenyl-
1,291	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	4-biphenyl-
1,292	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	4-[etyl(metyl)carbamoyl]-3-flo- phenyl-
1,293	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	2-xyanophenyl-
1,294	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	3-xyanophenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	Y	D
1,295	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	4-amino-3-methylphenyl-
1,296	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	4-methylsulfonylphenyl-
1,297	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	4-dimethylaminophenyl-
1,298	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	4-methylaminophenyl-
1,299	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	4-tert-butoxyphenyl-
1,300	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	4-xyanophenyl-
1,301	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	4-hydroxyphenyl-
1,302	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	4-xyclopropylphenyl-
1,303	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	4-(methylsulfonyl)phenyl-
1,304	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	4-carboxyphenyl-
1,305	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	4-methoxycarbonylphenyl-
1,306	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	4-(tert-butoxycarbonylamino)- 3-fluorophenyl-
1,307	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	2-(methylsulfonyl)-4-pyridyl-
1,308	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	2-acetamido-4-pyridyl-
1,309	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	4-oxazol-5-ylphenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	Y	D
1,310	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	4-axetamidophenyl-
1,311	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	4-(dimetylsulfamoyl)phenyl-
1,312	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	4-tert-butylphenyl-
1,313	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	4-biphenyl-
1,314	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	4-[etyl(metyl)carbamoyl]-3-flo- phenyl-
1,315	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	2-xyanophenyl-
1,316	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	3-xyanophenyl-
1,317	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	4-amino-3-metylphenyl-
1,318	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	4-metylsulfonylphenyl-
1,319	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	4-dimetylaminophenyl-
1,320	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	4-metylaminophenyl-
1,321	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	4-tert-butoxyphenyl-
1,322	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	4-xyanophenyl-
1,323	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	4-hydroxyphenyl-
1,324	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	4-xyclopropylphenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	Y	D
1,325	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	4-(metylsulfanyl)phenyl-
1,326	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	4-cacboxyphenyl-
1,327	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	4-metoxycacbonylphenyl-
1,328	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	4-(tert-butoxycacbonylamino)- 3-flo-phenyl-
1,329	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	2-(metylsulfanyl)-4-pyridyl-
1,330	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	2-axetamido-4-pyridyl-
1,331	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-oxazol-5-ylphenyl-
1,332	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-axetamidophenyl-
1,333	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-(dimetylsulfamoyl)phenyl-
1,334	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-tert-butylphenyl-
1,335	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-biphenyl-
1,336	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-[etyl(metyl)carbamoyl]-3-flo- phenyl-
1,337	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	2-xyanophenyl-
1,338	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	3-xyanophenyl-
1,339	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-amino-3-metylphenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	Y	D
1,340	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-metylsulfonylphenyl-
1,341	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-dimetylaminophenyl-
1,342	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-metylaminophenyl-
1,343	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-tert-butoxyphenyl-
1,344	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-xyanophenyl-
1,345	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-hydroxyphenyl-
1,346	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-xyclopropylphenyl-
1,347	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-(metylsulfanyl)phenyl-
1,348	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-cacboxyphenyl-
1,349	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-metoxycacbonylphenyl-
1,350	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-(tert-butoxycacbonylamino)- 3-flo-phenyl-
1,351	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	2-(metylsulfanyl)-4-pyridyl-
1,352	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	2-axetamido-4-pyridyl-
1,353	-Me	-Me	6-F	3-F	4-(1-metylpyrazol-3-yl)phenyl-
1,354	-Me	-Me	6-F	3-F	4-(5-metyltetrazol-1-yl)phenyl-
1,355	-Me	-Me	6-F	3-F	4-morpholinophenyl-
1,356	-Me	-Me	6-F	3-F	4-(3-metylpyrazol-1-yl)phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	Y	D
1,357	-Me	-Me	6-F	3-F	4-(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)phenyl-
1,358	-Me	-Me	6-F	3-F	4-pyrazol-1-ylphenyl-
1,359	-Me	-Me	6-F	3-F	4-pyrol-1-ylphenyl-
1,360	-Me	-Me	6-F	3-F	4-(5-metyltetrahydrofuran-2-yl)phenyl-
1,361	-Me	-Me	6-F	3-F	4-(5-metyl-2-furyl)phenyl-
1,362	-Me	-Me	6-F	3-F	4-oxazol-2-ylphenyl-
1,363	-Me	-Me	6-F	3-F	4-(2-methylthiazol-4-yl)phenyl-
1,364	-Me	-Me	6-F	3-F	4-(2-thienyl)phenyl-
1,365	-Me	-Me	6-F	3-F	4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenyl-
1,366	-Me	-Me	6-F	3-F	1-phenyl-4-pyrazolyl-
1,367	-Me	-Me	6-F	3-F	1-xyclopropyl-4-pyrazolyl-
1,368	-Me	-Me	6-F	3-F	4-(metylsulfanylmetyl)phenyl-
1,369	-Me	-Me	6-F	3-F	4-(isopropylsulfanylmetyl)phenyl-
1,370	-Me	-Me	6-F	3-F	4-(metylsulfamoyl)phenyl-
1,371	-Me	-Me	6-F	3-F	4-sulfamoylphenyl-
1,372	-Me	-Me	6-F	3-F	4-carbamoylphenyl-
1,373	-Me	-Me	6-F	3-Cl	4-(1-methylpyrazol-3-yl)phenyl-
1,374	-Me	-Me	6-F	3-Cl	4-(5-metyltetrazol-1-yl)phenyl-
1,375	-Me	-Me	6-F	3-Cl	4-morpholinophenyl-
1,376	-Me	-Me	6-F	3-Cl	4-(3-methylpyrazol-1-yl)phenyl-
1,377	-Me	-Me	6-F	3-Cl	4-(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)phenyl-
1,378	-Me	-Me	6-F	3-Cl	4-pyrazol-1-ylphenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	Y	D
1,379	-Me	-Me	6-F	3-Cl	4-pyrol-1-ylphenyl-
1,380	-Me	-Me	6-F	3-Cl	4-(5-metyltetrahydrofuran-2-yl)phenyl-
1,381	-Me	-Me	6-F	3-Cl	4-(5-metyl-2-furyl)phenyl-
1,382	-Me	-Me	6-F	3-Cl	4-oxazol-2-ylphenyl-
1,383	-Me	-Me	6-F	3-Cl	4-(2-metylthiazol-4-yl)phenyl-
1,384	-Me	-Me	6-F	3-Cl	4-(2-thienyl)phenyl-
1,385	-Me	-Me	6-F	3-Cl	4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenyl-
1,386	-Me	-Me	6-F	3-Cl	1-phenyl-4-pyrazolyl-
1,387	-Me	-Me	6-F	3-Cl	1-xyclopropyl-4-pyrazolyl-
1,388	-Me	-Me	6-F	3-Cl	4-(metylsulfanylmetyl)phenyl-
1,389	-Me	-Me	6-F	3-Cl	4-(isopropylsulfanylmetyl)phenyl-
1,390	-Me	-Me	6-F	3-Cl	4-(metylsulfamoyl)phenyl-
1,391	-Me	-Me	6-F	3-Cl	4-sulfamoylphenyl-
1,392	-Me	-Me	6-F	3-Cl	4-carbamoylphenyl-
1,393	-Me	-Me	6-Cl	3-F	4-(1-metylpyrazol-3-yl)phenyl-
1,394	-Me	-Me	6-Cl	3-F	4-(5-metyltetrazol-1-yl)phenyl-
1,395	-Me	-Me	6-Cl	3-F	4-morpholinophenyl-
1,396	-Me	-Me	6-Cl	3-F	4-(3-metylpyrazol-1-yl)phenyl-
1,397	-Me	-Me	6-Cl	3-F	4-(3,5-dimetylpyrazol-1-yl)phenyl-
1,398	-Me	-Me	6-Cl	3-F	4-pyrazol-1-ylphenyl-
1,399	-Me	-Me	6-Cl	3-F	4-pyrol-1-ylphenyl-
1,400	-Me	-Me	6-Cl	3-F	4-(5-metyltetrahydrofuran-2-yl)phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	Y	D
1,401	-Me	-Me	6-Cl	3-F	4-(5-metyl-2-furyl)phenyl-
1,402	-Me	-Me	6-Cl	3-F	4-oxazol-2-ylphenyl-
1,403	-Me	-Me	6-Cl	3-F	4-(2-metylthiazol-4-yl)phenyl-
1,404	-Me	-Me	6-Cl	3-F	4-(2-thienyl)phenyl-
1,405	-Me	-Me	6-Cl	3-F	4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenyl-
1,406	-Me	-Me	6-Cl	3-F	1-phenyl-4-pyrazolyl-
1,407	-Me	-Me	6-Cl	3-F	1-xyclopropyl-4-pyrazolyl-
1,408	-Me	-Me	6-Cl	3-F	4-(metylsulfanylmetyl)phenyl-
1,409	-Me	-Me	6-Cl	3-F	4- (isopropylsulfanylmetyl)phenyl-
1,410	-Me	-Me	6-Cl	3-F	4-(metylsulfamoyl)phenyl-
1,411	-Me	-Me	6-Cl	3-F	4-sulfamoylphenyl-
1,412	-Me	-Me	6-Cl	3-F	4-carbamoylphenyl-
1,413	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	4-(1-metylpyrazol-3-yl)phenyl-
1,414	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	4-(5-metyltetrazol-1-yl)phenyl-
1,415	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	4-morpholinophenyl-
1,416	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	4-(3-metylpyrazol-1-yl)phenyl-
1,417	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	4-(3,5-dimetylpyrazol-1-yl)phenyl-
1,418	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	4-pyrazol-1-ylphenyl-
1,419	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	4-pyrol-1-ylphenyl-
1,420	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	4-(5-metyltetrahydrofuran-2-yl)phenyl-
1,421	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	4-(5-metyl-2-furyl)phenyl-
1,422	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	4-oxazol-2-ylphenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	Y	D
1,423	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	4-(2-methylthiazol-4-yl)phenyl-
1,424	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	4-(2-thienyl)phenyl-
1,425	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenyl-
1,426	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	1-phenyl-4-pyrazolyl-
1,427	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	1-xyclopropyl-4-pyrazolyl-
1,428	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	4-(metylsulfanylmetyl)phenyl-
1,429	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	4- (isopropylsulfanylmetyl)phenyl-
1,430	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	4-(metylsulfamoyl)phenyl-
1,431	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	4-sulfamoylphenyl-
1,432	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	4-carbamoylphenyl-
1,433	-Me	-Cl	6-F	3-F	4-(1-methylpyrazol-3-yl)phenyl-
1,434	-Me	-Cl	6-F	3-F	4-(5-metyltetrazol-1-yl)phenyl-
1,435	-Me	-Cl	6-F	3-F	4-morpholinophenyl-
1,436	-Me	-Cl	6-F	3-F	4-(3-methylpyrazol-1-yl)phenyl-
1,437	-Me	-Cl	6-F	3-F	4-(3,5-dimethylpyrazol-1- yl)phenyl-
1,438	-Me	-Cl	6-F	3-F	4-pyrazol-1-ylphenyl-
1,439	-Me	-Cl	6-F	3-F	4-pyrol-1-ylphenyl-
1,440	-Me	-Cl	6-F	3-F	4-(5-metyltetrahydrofuran-2- yl)phenyl-
1,441	-Me	-Cl	6-F	3-F	4-(5-metyl-2-furyl)phenyl-
1,442	-Me	-Cl	6-F	3-F	4-oxazol-2-ylphenyl-
1,443	-Me	-Cl	6-F	3-F	4-(2-methylthiazol-4-yl)phenyl-
1,444	-Me	-Cl	6-F	3-F	4-(2-thienyl)phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	Y	D
1,445	-Me	-Cl	6-F	3-F	4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenyl-
1,446	-Me	-Cl	6-F	3-F	1-phenyl-4-pyrazolyl-
1,447	-Me	-Cl	6-F	3-F	1-xyclopropyl-4-pyrazolyl-
1,448	-Me	-Cl	6-F	3-F	4-(metylsulfanylmetyl)phenyl-
1,449	-Me	-Cl	6-F	3-F	4- (isopropylsulfanylmetyl)phenyl-
1,450	-Me	-Cl	6-F	3-F	4-(metylsulfamoyl)phenyl-
1,451	-Me	-Cl	6-F	3-F	4-sulfamoylphenyl-
1,452	-Me	-Cl	6-F	3-F	4-carbamoylphenyl-
1,453	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	4-(1-methylpyrazol-3-yl)phenyl-
1,454	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	4-(5-metyltetrazol-1-yl)phenyl-
1,455	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	4-morpholinophenyl-
1,456	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	4-(3-methylpyrazol-1-yl)phenyl-
1,457	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	4-(3,5-dimethylpyrazol-1- yl)phenyl-
1,458	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	4-pyrazol-1-ylphenyl-
1,459	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	4-pyrol-1-ylphenyl-
1,460	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	4-(5-metyltetrahydrofuran-2- yl)phenyl-
1,461	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	4-(5-metyl-2-furyl)phenyl-
1,462	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	4-oxazol-2-ylphenyl-
1,463	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	4-(2-methylthiazol-4-yl)phenyl-
1,464	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	4-(2-thienyl)phenyl-
1,465	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenyl-
1,466	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	1-phenyl-4-pyrazolyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	Y	D
1,467	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	1-xyclopropyl-4-pyrazolyl-
1,468	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	4-(metylsulfanylmetyl)phenyl-
1,469	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	4- (isopropylsulfanylmetyl)phenyl-
1,470	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	4-(metylsulfamoyl)phenyl-
1,471	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	4-sulfamoylphenyl-
1,472	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	4-carbamoylphenyl-
1,473	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	4-(1-metylpyrazol-3-yl)phenyl-
1,474	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	4-(5-metyltetrazol-1-yl)phenyl-
1,475	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	4-morpholinophenyl-
1,476	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	4-(3-metylpyrazol-1-yl)phenyl-
1,477	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	4-(3,5-dimetylpyrazol-1- yl)phenyl-
1,478	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	4-pyrazol-1-ylphenyl-
1,479	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	4-pyrol-1-ylphenyl-
1,480	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	4-(5-metyltetrahydrofuran-2- yl)phenyl-
1,481	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	4-(5-metyl-2-furyl)phenyl-
1,482	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	4-oxazol-2-ylphenyl-
1,483	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	4-(2-metylthiazol-4-yl)phenyl-
1,484	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	4-(2-thienyl)phenyl-
1,485	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenyl-
1,486	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	1-phenyl-4-pyrazolyl-
1,487	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	1-xyclopropyl-4-pyrazolyl-
1,488	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	4-(metylsulfanylmetyl)phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	Y	D
1,489	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	4-(isopropylsulfanylmetyl)phenyl-
1,490	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	4-(metylsulfamoyl)phenyl-
1,491	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	4-sulfamoylphenyl-
1,492	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	4-carbamoylphenyl-
1,493	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-(1-methylpyrazol-3-yl)phenyl-
1,494	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-(5-metyltetrazol-1-yl)phenyl-
1,495	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-morpholinophenyl-
1,496	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-(3-methylpyrazol-1-yl)phenyl-
1,497	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)phenyl-
1,498	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-pyrazol-1-ylphenyl-
1,499	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-pyrol-1-ylphenyl-
1,500	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-(5-metyltetrahydrofuran-2-yl)phenyl-
1,501	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-(5-metyl-2-furyl)phenyl-
1,502	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-oxazol-2-ylphenyl-
1,503	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-(2-methylthiazol-4-yl)phenyl-
1,504	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-(2-thienyl)phenyl-
1,505	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenyl-
1,506	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	1-phenyl-4-pyrazolyl-
1,507	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	1-xyclopropyl-4-pyrazolyl-
1,508	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-(metylsulfanylmetyl)phenyl-
1,509	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-(isopropylsulfanylmetyl)phenyl-
1,510	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-(metylsulfamoyl)phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	Y	D
1,511	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-sulfamoylphenyl-
1,512	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-carbamoylphenyl-
1,513	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-F	4-(1-methylpyrazol-3-yl)phenyl-
1,514	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-F	4-(5-methyltetrazol-1-yl)phenyl-
1,515	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-F	4-morpholinophenyl-
1,516	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-F	4-(3-methylpyrazol-1-yl)phenyl-
1,517	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-F	4-(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)phenyl-
1,518	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-F	4-pyrazol-1-ylphenyl-
1,519	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-F	4-pyrol-1-ylphenyl-
1,520	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-F	4-(5-methyltetrahydrofuran-2-yl)phenyl-
1,521	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-F	4-(5-methyl-2-furyl)phenyl-
1,522	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-F	4-oxazol-2-ylphenyl-
1,523	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-F	4-(2-methylthiazol-4-yl)phenyl-
1,524	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-F	4-(2-thienyl)phenyl-
1,525	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-F	4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenyl-
1,526	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-F	1-phenyl-4-pyrazolyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	Y	D
1,527	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-F	1-xyclopropyl-4-pyrazolyl-
1,528	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-F	4-(metylsulfanylmetyl)phenyl-
1,529	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-F	4- (isopropylsulfanylmetyl)phenyl-
1,530	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-F	4-(metylsulfamoyl)phenyl-
1,531	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-F	4-sulfamoylphenyl-
1,532	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-F	4-carbamoylphenyl-
1,533	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	4-(1-metylpyrazol-3-yl)phenyl-
1,534	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	4-(5-metyltetrazol-1-yl)phenyl-
1,535	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	4-morpholinophenyl-
1,536	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	4-(3-metylpyrazol-1-yl)phenyl-
1,537	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	4-(3,5-dimetylpyrazol-1- yl)phenyl-
1,538	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	4-pyrazol-1-ylphenyl-
1,539	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	4-pyrol-1-ylphenyl-
1,540	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	4-(5-metyltetrahydrofuran-2- yl)phenyl-
1,541	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	4-(5-metyl-2-furyl)phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	Y	D
1,542	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	4-oxazol-2-ylphenyl-
1,543	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	4-(2-methylthiazol-4-yl)phenyl-
1,544	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	4-(2-thienyl)phenyl-
1,545	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenyl-
1,546	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	1-phenyl-4-pyrazolyl-
1,547	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	1-xyclopropyl-4-pyrazolyl-
1,548	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	4-(metylsulfanylmetyl)phenyl-
1,549	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	4- (isopropylsulfanylmetyl)phenyl-
1,550	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	4-(metylsulfamoyl)phenyl-
1,551	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	4-sulfamoylphenyl-
1,552	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	4-carbamoylphenyl-
1,553	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	4-(1-methylpyrazol-3-yl)phenyl-
1,554	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	4-(5-metyltetrazol-1-yl)phenyl-
1,555	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	4-morpholinophenyl-
1,556	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	4-(3-methylpyrazol-1-yl)phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	Y	D
1,557	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	4-(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)phenyl-
1,558	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	4-pyrazol-1-ylphenyl-
1,559	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	4-pyrol-1-ylphenyl-
1,560	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	4-(5-metyltetrahydrofuran-2-yl)phenyl-
1,561	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	4-(5-metyl-2-furyl)phenyl-
1,562	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	4-oxazol-2-ylphenyl-
1,563	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	4-(2-metylthiazol-4-yl)phenyl-
1,564	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	4-(2-thienyl)phenyl-
1,565	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenyl-
1,566	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	1-phenyl-4-pyrazolyl-
1,567	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	1-xyclopropyl-4-pyrazolyl-
1,568	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	4-(metylsulfanylmetyl)phenyl-
1,569	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	4-(isopropylsulfanylmetyl)phenyl-
1,570	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	4-(metylsulfamoyl)phenyl-
1,571	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	4-sulfamoylphenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	Y	D
1,572	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	4-carbamoylphenyl-
1,573	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	4-(1-methylpyrazol-3-yl)phenyl-
1,574	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	4-(5-methyltetrazol-1-yl)phenyl-
1,575	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	4-morpholinophenyl-
1,576	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	4-(3-methylpyrazol-1-yl)phenyl-
1,577	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	4-(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)phenyl-
1,578	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	4-pyrazol-1-ylphenyl-
1,579	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	4-pyrol-1-ylphenyl-
1,580	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	4-(5-methyltetrahydrofuran-2-yl)phenyl-
1,581	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	4-(5-methyl-2-furyl)phenyl-
1,582	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	4-oxazol-2-ylphenyl-
1,583	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	4-(2-methylthiazol-4-yl)phenyl-
1,584	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	4-(2-thienyl)phenyl-
1,585	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenyl-
1,586	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	1-phenyl-4-pyrazolyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	Y	D
1,587	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	1-xyclopropyl-4-pyrazolyl-
1,588	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	4-(metylsulfanylmetyl)phenyl-
1,589	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	4- (isopropylsulfanylmetyl)phenyl-
1,590	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	4-(metylsulfamoyl)phenyl-
1,591	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	4-sulfamoylphenyl-
1,592	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	4-carbamoylphenyl-
1,593	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-F	4-(1-metylpyrazol-3-yl)phenyl-
1,594	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-F	4-(5-metyltetrazol-1-yl)phenyl-
1,595	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-F	4-morpholinophenyl-
1,596	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-F	4-(3-metylpyrazol-1-yl)phenyl-
1,597	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-F	4-(3,5-dimetylpyrazol-1- yl)phenyl-
1,598	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-F	4-pyrazol-1-ylphenyl-
1,599	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-F	4-pyrol-1-ylphenyl-
1,600	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-F	4-(5-metyltetrahydrofuran-2- yl)phenyl-
1,601	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-F	4-(5-metyl-2-furyl)phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	Y	D
1,602	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-F	4-oxazol-2-ylphenyl-
1,603	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-F	4-(2-methylthiazol-4-yl)phenyl-
1,604	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-F	4-(2-thienyl)phenyl-
1,605	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-F	4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenyl-
1,606	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-F	1-phenyl-4-pyrazolyl-
1,607	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-F	1-xyclopropyl-4-pyrazolyl-
1,608	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-F	4-(metylsulfanylmetyl)phenyl-
1,609	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-F	4- (isopropylsulfanylmetyl)phenyl-
1,610	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-F	4-(metylsulfamoyl)phenyl-
1,611	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-F	4-sulfamoylphenyl-
1,612	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-F	4-carbamoylphenyl-
1,613	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	4-(1-methylpyrazol-3-yl)phenyl-
1,614	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	4-(5-metyltetrazol-1-yl)phenyl-
1,615	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	4-morpholinophenyl-
1,616	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	4-(3-methylpyrazol-1-yl)phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	Y	D
1,617	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	4-(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)phenyl-
1,618	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	4-pyrazol-1-ylphenyl-
1,619	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	4-pyrol-1-ylphenyl-
1,620	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	4-(5-metyltetrahydrofuran-2-yl)phenyl-
1,621	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	4-(5-metyl-2-furyl)phenyl-
1,622	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	4-oxazol-2-ylphenyl-
1,623	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	4-(2-metylthiazol-4-yl)phenyl-
1,624	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	4-(2-thienyl)phenyl-
1,625	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenyl-
1,626	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	1-phenyl-4-pyrazolyl-
1,627	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	1-xyclopropyl-4-pyrazolyl-
1,628	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	4-(metylsulfanylmetyl)phenyl-
1,629	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	4-(isopropylsulfanylmetyl)phenyl-
1,630	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	4-(metylsulfamoyl)phenyl-
1,631	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	4-sulfamoylphenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	Y	D
1,632	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	4-carbamoylphenyl-
1,633	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	4-(1-methylpyrazol-3-yl)phenyl-
1,634	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	4-(5-methyltetrazol-1-yl)phenyl-
1,635	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	4-morpholinophenyl-
1,636	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	4-(3-methylpyrazol-1-yl)phenyl-
1,637	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	4-(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)phenyl-
1,638	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	4-pyrazol-1-ylphenyl-
1,639	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	4-pyrol-1-ylphenyl-
1,640	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	4-(5-methyltetrahydrofuran-2-yl)phenyl-
1,641	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	4-(5-methyl-2-furyl)phenyl-
1,642	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	4-oxazol-2-ylphenyl-
1,643	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	4-(2-methylthiazol-4-yl)phenyl-
1,644	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	4-(2-thienyl)phenyl-
1,645	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenyl-
1,646	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	1-phenyl-4-pyrazolyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	Y	D
1,647	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	1-xyclopropyl-4-pyrazolyl-
1,648	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	4-(metylsulfanylmetyl)phenyl-
1,649	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	4- (isopropylsulfanylmetyl)phenyl-
1,650	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	4-(metylsulfamoyl)phenyl-
1,651	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	4-sulfamoylphenyl-
1,652	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	4-carbamoylphenyl-
1,653	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-(1-metylpyrazol-3-yl)phenyl-
1,654	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-(5-metyltetrazol-1-yl)phenyl-
1,655	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-morpholinophenyl-
1,656	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-(3-metylpyrazol-1-yl)phenyl-
1,657	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-(3,5-dimetylpyrazol-1- yl)phenyl-
1,658	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-pyrazol-1-ylphenyl-
1,659	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-pyrol-1-ylphenyl-
1,660	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-(5-metyltetrahydrofuran-2- yl)phenyl-
1,661	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-(5-metyl-2-furyl)phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	Y	D
1,662	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-oxazol-2-ylphenyl-
1,663	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-(2-methylthiazol-4-yl)phenyl-
1,664	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-(2-thienyl)phenyl-
1,665	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenyl-
1,666	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	1-phenyl-4-pyrazolyl-
1,667	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	1-xyclopropyl-4-pyrazolyl-
1,668	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-(metylsulfanylmetyl)phenyl-
1,669	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-(isopropylsulfanylmetyl)phenyl-
1,670	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-(metylsulfamoyl)phenyl-
1,671	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-sulfamoylphenyl-
1,672	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-carbamoylphenyl-

Bảng A-2 cung cấp 672 hợp chất từ A-2,001 đến A-2,672 có công thức (I) trong đó G là -H, W là (E)-CH=CH- và R¹, R², X, Y, D là như được xác định cho các công thức số từ 1,001 đến 1,672 một cách tương ứng trong bảng 1 trên đây.

Bảng A-3 cung cấp 672 hợp chất từ A-3,001 đến A-3,672 có công thức (I) trong đó G là -(C=O)iPr, W là -CH₂-CH₂- và R¹, R², X, Y, D là như được xác định cho các công thức số từ 1,001 đến 1,672 một cách tương ứng trong bảng 1 trên đây.

Bảng A-4 cung cấp 672 hợp chất từ A-4,001 đến A-4,672 có công thức (I) trong đó G là $-(C=O)iPr$, W là $(E)-CH=CH-$ và R^1 , R^2 , X, Y, D là như được xác định cho các công thức số từ 1,001 đến 1,672 một cách tương ứng trong bảng 1 trên đây.

Bảng B-1 cung cấp 744 hợp chất từ B-1,001 đến B-1,744 có công thức (I) trong đó G là $-H$, W là $-CH_2-CH_2-$ X là 6-xyclopropyl, và R^1 , R^2 , Y, D là như được xác định cho hợp chất số từ 2,001 đến 2,744 một cách tương ứng trong bảng 2 dưới đây.

Bảng 2: Các định nghĩa nhóm thế của R^1 , R^2 , Y và D:

Hợp chất số	R^1	R^2	Y	D
2,001	-Me	-Me	3-F	-Ph
2,002	-Me	-Me	3-F	1-metyl-3-(triflometyl)pyrazol-4-yl-
2,003	-Me	-Me	3-F	1-metyl-pyrazol-4-yl-
2,004	-Me	-Me	3-F	2-(metylsulfanyl)-4-pyridyl-
2,005	-Me	-Me	3-F	2-axetamido-4-pyridyl-
2,006	-Me	-Me	3-F	2-axetamidothiazol-5-yl-
2,007	-Me	-Me	3-F	2-amino-4-pyridyl-
2,008	-Me	-Me	3-F	2-clo-3-pyridyl-
2,009	-Me	-Me	3-F	2-clo-4-pyridyl-
2,010	-Me	-Me	3-F	2-clothiazol-5-yl-
2,011	-Me	-Me	3-F	2-xyanophenyl-
2,012	-Me	-Me	3-F	2-xyano-phenyl-
2,013	-Me	-Me	3-F	2-flo-4-pyridyl-
2,014	-Me	-Me	3-F	2-metyl-4-pyridyl-
2,015	-Me	-Me	3-F	2-metyl-triazol-4-yl-
2,016	-Me	-Me	3-F	2-tolyl-
2,017	-Me	-Me	3-F	2-triflometyl-4-pyridyl-
2,018	-Me	-Me	3-F	2-triflometyl-phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	Y	D
2,019	-Me	-Me	3-F	3,4-diflo-phenyl-
2,020	-Me	-Me	3-F	3,5-diflo-phenyl-
2,021	-Me	-Me	3-F	3-clo-4-flo-phenyl-
2,022	-Me	-Me	3-F	3-clo-4-pyridyl-
2,023	-Me	-Me	3-F	3-xyanophenyl-
2,024	-Me	-Me	3-F	3-xyano-phenyl-
2,025	-Me	-Me	3-F	3-metyl-2-pyridyl-
2,026	-Me	-Me	3-F	3-metyl-4-amino-phenyl-
2,027	-Me	-Me	3-F	3-pyridyl-
2,028	-Me	-Me	3-F	3-tolyl-
2,029	-Me	-Me	3-F	3-triflometyl-3-pyridyl-
2,030	-Me	-Me	3-F	3-triflometyl-phenyl-
2,031	-Me	-Me	3-F	4-(dimetyl-amino)-phenyl-
2,032	-Me	-Me	3-F	4-(dimetylsulfamoyl)phenyl-
2,033	-Me	-Me	3-F	4-(metyl-amino)-phenyl-
2,034	-Me	-Me	3-F	4-(metylsulfanyl)phenyl-
2,035	-Me	-Me	3-F	4-(tert-butoxy)-phenyl-
2,036	-Me	-Me	3-F	4-(tert-butoxycacbonylamino)- 3-flo-phenyl-
2,037	-Me	-Me	3-F	4-(triflometoxy)-phenyl-
2,038	-Me	-Me	3-F	4-[etyl(metyl)carbamoyl]-3-flo- phenyl-
2,039	-Me	-Me	3-F	4-axetamidophenyl-
2,040	-Me	-Me	3-F	4-amino-3-metylphenyl-
2,041	-Me	-Me	3-F	4-amino-phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	Y	D
2,042	-Me	-Me	3-F	4-biphenyl-
2,043	-Me	-Me	3-F	4-cacboxyphenyl-
2,044	-Me	-Me	3-F	4-clo-3-pyridyl-
2,045	-Me	-Me	3-F	4-clo-phenyl-
2,046	-Me	-Me	3-F	4-xyanophenyl-
2,047	-Me	-Me	3-F	4-xyano-phenyl-
2,048	-Me	-Me	3-F	4-xyclopropylphenyl-
2,049	-Me	-Me	3-F	4-xyclopropyl-phenyl-
2,050	-Me	-Me	3-F	4-dimetylaminophenyl-
2,051	-Me	-Me	3-F	4-flo-phenyl-
2,052	-Me	-Me	3-F	4-hydroxyphenyl-
2,053	-Me	-Me	3-F	4-hydroxy-phenyl-
2,054	-Me	-Me	3-F	4-metoxycacbonylphenyl-
2,055	-Me	-Me	3-F	4-metyl-2-pyridyl-
2,056	-Me	-Me	3-F	4-metylaminophenyl-
2,057	-Me	-Me	3-F	4-metylsulfonylphenyl-
2,058	-Me	-Me	3-F	4-oxazol-5-ylphenyl-
2,059	-Me	-Me	3-F	4-pyridyl-
2,060	-Me	-Me	3-F	4-tert-butoxyphenyl-
2,061	-Me	-Me	3-F	4-tert-butylphenyl-
2,062	-Me	-Me	3-F	4-tolyl-
2,063	-Me	-Me	3-F	4-triflometyl-3-pyridyl-
2,064	-Me	-Me	3-F	4-triflometyl-phenyl-
2,065	-Me	-Me	3-F	5-metyl-1,3,4-oxadiazol-2-yl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	Y	D
2,066	-Me	-Me	3-F	5-metyl-2-pyridyl-
2,067	-Me	-Me	3-F	5-metyl-3-pyridyl-
2,068	-Me	-Me	3-F	6-clo-3-pyridyl-
2,069	-Me	-Me	3-F	6-metyl-2-pyridyl-
2,070	-Me	-Me	3-F	pyrimidin-5-yl-
2,071	-Me	-Me	3-F	thiazol-2-yl-
2,072	-Me	-Me	3-F	thiazol-5-yl-
2,073	-Me	-Me	3-F	thiophen-3-yl-
2,074	-Me	-Me	3-Cl	-Ph
2,075	-Me	-Me	3-Cl	1-metyl-3-(triflometyl)pyrazol-4-yl-
2,076	-Me	-Me	3-Cl	1-metyl-pyrazol-4-yl-
2,077	-Me	-Me	3-Cl	2-(metylsulfanyl)-4-pyridyl-
2,078	-Me	-Me	3-Cl	2-axetamido-4-pyridyl-
2,079	-Me	-Me	3-Cl	2-axetamidothiazol-5-yl-
2,080	-Me	-Me	3-Cl	2-amino-4-pyridyl-
2,081	-Me	-Me	3-Cl	2-clo-3-pyridyl-
2,082	-Me	-Me	3-Cl	2-clo-4-pyridyl-
2,083	-Me	-Me	3-Cl	2-clothiazol-5-yl-
2,084	-Me	-Me	3-Cl	2-xyanophenyl-
2,085	-Me	-Me	3-Cl	2-xyano-phenyl-
2,086	-Me	-Me	3-Cl	2-flo-4-pyridyl-
2,087	-Me	-Me	3-Cl	2-metyl-4-pyridyl-
2,088	-Me	-Me	3-Cl	2-metyl-triazol-4-yl-
2,089	-Me	-Me	3-Cl	2-tolyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	Y	D
2,090	-Me	-Me	3-Cl	2-triflometyl-4-pyridyl-
2,091	-Me	-Me	3-Cl	2-triflometyl-phenyl-
2,092	-Me	-Me	3-Cl	3,4-diflo-phenyl-
2,093	-Me	-Me	3-Cl	3,5-diflo-phenyl-
2,094	-Me	-Me	3-Cl	3-clo-4-flo-phenyl-
2,095	-Me	-Me	3-Cl	3-clo-4-pyridyl-
2,096	-Me	-Me	3-Cl	3-xyanophenyl-
2,097	-Me	-Me	3-Cl	3-xyano-phenyl-
2,098	-Me	-Me	3-Cl	3-metyl-2-pyridyl-
2,099	-Me	-Me	3-Cl	3-metyl-4-amino-phenyl-
2,100	-Me	-Me	3-Cl	3-pyridyl-
2,101	-Me	-Me	3-Cl	3-tolyl-
2,102	-Me	-Me	3-Cl	3-triflometyl-3-pyridyl-
2,103	-Me	-Me	3-Cl	3-triflometyl-phenyl-
2,104	-Me	-Me	3-Cl	4-(dimetylamino)-phenyl-
2,105	-Me	-Me	3-Cl	4-(dimetylsulfamoyl)phenyl-
2,106	-Me	-Me	3-Cl	4-(metylamino)-phenyl-
2,107	-Me	-Me	3-Cl	4-(metylsulfanyl)phenyl-
2,108	-Me	-Me	3-Cl	4-(tert-butoxy)-phenyl-
2,109	-Me	-Me	3-Cl	4-(tert-butoxycacbonylamino)- 3-flo-phenyl-
2,110	-Me	-Me	3-Cl	4-(triflometoxy)-phenyl-
2,111	-Me	-Me	3-Cl	4-[etyl(metyl)carbamoyl]-3-flo- phenyl-
2,112	-Me	-Me	3-Cl	4-axetamidophenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	Y	D
2,113	-Me	-Me	3-Cl	4-amino-3-metylphenyl-
2,114	-Me	-Me	3-Cl	4-amino-phenyl-
2,115	-Me	-Me	3-Cl	4-biphenyl-
2,116	-Me	-Me	3-Cl	4-cacboxyphenyl-
2,117	-Me	-Me	3-Cl	4-clo-3-pyridyl-
2,118	-Me	-Me	3-Cl	4-clo-phenyl-
2,119	-Me	-Me	3-Cl	4-xyanophenyl-
2,120	-Me	-Me	3-Cl	4-xyano-phenyl-
2,121	-Me	-Me	3-Cl	4-xyclopropylphenyl-
2,122	-Me	-Me	3-Cl	4-xyclopropyl-phenyl-
2,123	-Me	-Me	3-Cl	4-dimetylaminophenyl-
2,124	-Me	-Me	3-Cl	4-flo-phenyl-
2,125	-Me	-Me	3-Cl	4-hydroxyphenyl-
2,126	-Me	-Me	3-Cl	4-hydroxy-phenyl-
2,127	-Me	-Me	3-Cl	4-metoxycacbonylphenyl-
2,128	-Me	-Me	3-Cl	4-metyl-2-pyridyl-
2,129	-Me	-Me	3-Cl	4-metylaminophenyl-
2,130	-Me	-Me	3-Cl	4-metylsulfonylphenyl-
2,131	-Me	-Me	3-Cl	4-oxazol-5-ylphenyl-
2,132	-Me	-Me	3-Cl	4-pyridyl-
2,133	-Me	-Me	3-Cl	4-tert-butoxyphenyl-
2,134	-Me	-Me	3-Cl	4-tert-butylphenyl-
2,135	-Me	-Me	3-Cl	4-tolyl-
2,136	-Me	-Me	3-Cl	4-triflometyl-3-pyridyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	Y	D
2,137	-Me	-Me	3-Cl	4-triflometyl-phenyl-
2,138	-Me	-Me	3-Cl	5-metyl-1,3,4-oxadiazol-2-yl-
2,139	-Me	-Me	3-Cl	5-metyl-2-pyridyl-
2,140	-Me	-Me	3-Cl	5-metyl-3-pyridyl-
2,141	-Me	-Me	3-Cl	6-clo-3-pyridyl-
2,142	-Me	-Me	3-Cl	6-metyl-2-pyridyl-
2,143	-Me	-Me	3-Cl	pyrimidin-5-yl-
2,144	-Me	-Me	3-Cl	thiazol-2-yl-
2,145	-Me	-Me	3-Cl	thiazol-5-yl-
2,146	-Me	-Me	3-Cl	thiophen-3-yl-
2,147	-Me	-Cl	3-F	-Ph
2,148	-Me	-Cl	3-F	1-metyl-3-(triflometyl)pyrazol-4-yl-
2,149	-Me	-Cl	3-F	1-metyl-pyrazol-4-yl-
2,150	-Me	-Cl	3-F	2-(metylsulfanyl)-4-pyridyl-
2,151	-Me	-Cl	3-F	2-axetamido-4-pyridyl-
2,152	-Me	-Cl	3-F	2-axetamidothiazol-5-yl-
2,153	-Me	-Cl	3-F	2-amino-4-pyridyl-
2,154	-Me	-Cl	3-F	2-clo-3-pyridyl-
2,155	-Me	-Cl	3-F	2-clo-4-pyridyl-
2,156	-Me	-Cl	3-F	2-clothiazol-5-yl-
2,157	-Me	-Cl	3-F	2-xyanophenyl-
2,158	-Me	-Cl	3-F	2-xyano-phenyl-
2,159	-Me	-Cl	3-F	2-flo-4-pyridyl-
2,160	-Me	-Cl	3-F	2-metyl-4-pyridyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	Y	D
2,161	-Me	-Cl	3-F	2-metyl-triazol-4-yl-
2,162	-Me	-Cl	3-F	2-tolyl-
2,163	-Me	-Cl	3-F	2-triflometyl-4-pyridyl-
2,164	-Me	-Cl	3-F	2-triflometyl-phenyl-
2,165	-Me	-Cl	3-F	3,4-diflo-phenyl-
2,166	-Me	-Cl	3-F	3,5-diflo-phenyl-
2,167	-Me	-Cl	3-F	3-clo-4-flo-phenyl-
2,168	-Me	-Cl	3-F	3-clo-4-pyridyl-
2,169	-Me	-Cl	3-F	3-xyanophenyl-
2,170	-Me	-Cl	3-F	3-xyano-phenyl-
2,171	-Me	-Cl	3-F	3-metyl-2-pyridyl-
2,172	-Me	-Cl	3-F	3-metyl-4-amino-phenyl-
2,173	-Me	-Cl	3-F	3-pyridyl-
2,174	-Me	-Cl	3-F	3-tolyl-
2,175	-Me	-Cl	3-F	3-triflometyl-3-pyridyl-
2,176	-Me	-Cl	3-F	3-triflometyl-phenyl-
2,177	-Me	-Cl	3-F	4-(dimetylamino)-phenyl-
2,178	-Me	-Cl	3-F	4-(dimetylsulfamoyl)phenyl-
2,179	-Me	-Cl	3-F	4-(metylamino)-phenyl-
2,180	-Me	-Cl	3-F	4-(metylsulfanyl)phenyl-
2,181	-Me	-Cl	3-F	4-(tert-butoxy)-phenyl-
2,182	-Me	-Cl	3-F	4-(tert-butoxycacbonylamino)- 3-flo-phenyl-
2,183	-Me	-Cl	3-F	4-(triflometoxy)-phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	Y	D
2,184	-Me	-Cl	3-F	4-[etyl(metyl)carbamoyl]-3-flo-phenyl-
2,185	-Me	-Cl	3-F	4-axetamidophenyl-
2,186	-Me	-Cl	3-F	4-amino-3-metylphenyl-
2,187	-Me	-Cl	3-F	4-amino-phenyl-
2,188	-Me	-Cl	3-F	4-biphenyl-
2,189	-Me	-Cl	3-F	4-cacboxyphenyl-
2,190	-Me	-Cl	3-F	4-clo-3-pyridyl-
2,191	-Me	-Cl	3-F	4-clo-phenyl-
2,192	-Me	-Cl	3-F	4-xyanophenyl-
2,193	-Me	-Cl	3-F	4-xyano-phenyl-
2,194	-Me	-Cl	3-F	4-xyclopropylphenyl-
2,195	-Me	-Cl	3-F	4-xyclopropyl-phenyl-
2,196	-Me	-Cl	3-F	4-dimetylaminophenyl-
2,197	-Me	-Cl	3-F	4-flo-phenyl-
2,198	-Me	-Cl	3-F	4-hydroxyphenyl-
2,199	-Me	-Cl	3-F	4-hydroxy-phenyl-
2,200	-Me	-Cl	3-F	4-metoxycacbonylphenyl-
2,201	-Me	-Cl	3-F	4-metyl-2-pyridyl-
2,202	-Me	-Cl	3-F	4-metylaminophenyl-
2,203	-Me	-Cl	3-F	4-metylsulfonylphenyl-
2,204	-Me	-Cl	3-F	4-oxazol-5-ylphenyl-
2,205	-Me	-Cl	3-F	4-pyridyl-
2,206	-Me	-Cl	3-F	4-tert-butoxyphenyl-
2,207	-Me	-Cl	3-F	4-tert-butylphenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	Y	D
2,208	-Me	-Cl	3-F	4-tolyl-
2,209	-Me	-Cl	3-F	4-triflometyl-3-pyridyl-
2,210	-Me	-Cl	3-F	4-triflometyl-phenyl-
2,211	-Me	-Cl	3-F	5-metyl-1,3,4-oxadiazol-2-yl-
2,212	-Me	-Cl	3-F	5-metyl-2-pyridyl-
2,213	-Me	-Cl	3-F	5-metyl-3-pyridyl-
2,214	-Me	-Cl	3-F	6-clo-3-pyridyl-
2,215	-Me	-Cl	3-F	6-metyl-2-pyridyl-
2,216	-Me	-Cl	3-F	pyrimidin-5-yl-
2,217	-Me	-Cl	3-F	thiazol-2-yl-
2,218	-Me	-Cl	3-F	thiazol-5-yl-
2,219	-Me	-Cl	3-F	thiophen-3-yl-
2,220	-Me	-Cl	3-Cl	-Ph
2,221	-Me	-Cl	3-Cl	1-metyl-3-(triflometyl)pyrazol-4-yl-
2,222	-Me	-Cl	3-Cl	1-metyl-pyrazol-4-yl-
2,223	-Me	-Cl	3-Cl	2-(metylsulfanyl)-4-pyridyl-
2,224	-Me	-Cl	3-Cl	2-axetamido-4-pyridyl-
2,225	-Me	-Cl	3-Cl	2-axetamidothiazol-5-yl-
2,226	-Me	-Cl	3-Cl	2-amino-4-pyridyl-
2,227	-Me	-Cl	3-Cl	2-clo-3-pyridyl-
2,228	-Me	-Cl	3-Cl	2-clo-4-pyridyl-
2,229	-Me	-Cl	3-Cl	2-clothiazol-5-yl-
2,230	-Me	-Cl	3-Cl	2-xyanophenyl-
2,231	-Me	-Cl	3-Cl	2-xyano-phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	Y	D
2,232	-Me	-Cl	3-Cl	2-flo-4-pyridyl-
2,233	-Me	-Cl	3-Cl	2-metyl-4-pyridyl-
2,234	-Me	-Cl	3-Cl	2-metyl-triazol-4-yl-
2,235	-Me	-Cl	3-Cl	2-tolyl-
2,236	-Me	-Cl	3-Cl	2-triflometyl-4-pyridyl-
2,237	-Me	-Cl	3-Cl	2-triflometyl-phenyl-
2,238	-Me	-Cl	3-Cl	3,4-diflo-phenyl-
2,239	-Me	-Cl	3-Cl	3,5-diflo-phenyl-
2,240	-Me	-Cl	3-Cl	3-clo-4-flo-phenyl-
2,241	-Me	-Cl	3-Cl	3-clo-4-pyridyl-
2,242	-Me	-Cl	3-Cl	3-xyanophenyl-
2,243	-Me	-Cl	3-Cl	3-xyano-phenyl-
2,244	-Me	-Cl	3-Cl	3-metyl-2-pyridyl-
2,245	-Me	-Cl	3-Cl	3-metyl-4-amino-phenyl-
2,246	-Me	-Cl	3-Cl	3-pyridyl-
2,247	-Me	-Cl	3-Cl	3-tolyl-
2,248	-Me	-Cl	3-Cl	3-triflometyl-3-pyridyl-
2,249	-Me	-Cl	3-Cl	3-triflometyl-phenyl-
2,250	-Me	-Cl	3-Cl	4-(dimetylamino)-phenyl-
2,251	-Me	-Cl	3-Cl	4-(dimetylsulfamoyl)phenyl-
2,252	-Me	-Cl	3-Cl	4-(metylamino)-phenyl-
2,253	-Me	-Cl	3-Cl	4-(metylsulfanyl)phenyl-
2,254	-Me	-Cl	3-Cl	4-(tert-butoxy)-phenyl-
2,255	-Me	-Cl	3-Cl	4-(tert-butoxycacbonylamino)- 3-flo-phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	Y	D
2,256	-Me	-Cl	3-Cl	4-(triflometoxy)-phenyl-
2,257	-Me	-Cl	3-Cl	4-[etyl(metyl)carbamoyl]-3-flo-phenyl-
2,258	-Me	-Cl	3-Cl	4-axetamidophenyl-
2,259	-Me	-Cl	3-Cl	4-amino-3-metylphenyl-
2,260	-Me	-Cl	3-Cl	4-amino-phenyl-
2,261	-Me	-Cl	3-Cl	4-biphenyl-
2,262	-Me	-Cl	3-Cl	4-cacboxyphenyl-
2,263	-Me	-Cl	3-Cl	4-clo-3-pyridyl-
2,264	-Me	-Cl	3-Cl	4-clo-phenyl-
2,265	-Me	-Cl	3-Cl	4-xyanophenyl-
2,266	-Me	-Cl	3-Cl	4-xyano-phenyl-
2,267	-Me	-Cl	3-Cl	4-xyclopropylphenyl-
2,268	-Me	-Cl	3-Cl	4-xyclopropyl-phenyl-
2,269	-Me	-Cl	3-Cl	4-dimetylaminophenyl-
2,270	-Me	-Cl	3-Cl	4-flo-phenyl-
2,271	-Me	-Cl	3-Cl	4-hydroxyphenyl-
2,272	-Me	-Cl	3-Cl	4-hydroxy-phenyl-
2,273	-Me	-Cl	3-Cl	4-metoxycacbonylphenyl-
2,274	-Me	-Cl	3-Cl	4-metyl-2-pyridyl-
2,275	-Me	-Cl	3-Cl	4-metylaminophenyl-
2,276	-Me	-Cl	3-Cl	4-metylsulfonylphenyl-
2,277	-Me	-Cl	3-Cl	4-oxazol-5-ylphenyl-
2,278	-Me	-Cl	3-Cl	4-pyridyl-
2,279	-Me	-Cl	3-Cl	4-tert-butoxyphenyl-

Hợp số	chất	R ¹	R ²	Y	D
2,280		-Me	-Cl	3-Cl	4-tert-butylphenyl-
2,281		-Me	-Cl	3-Cl	4-tolyl-
2,282		-Me	-Cl	3-Cl	4-triflometyl-3-pyridyl-
2,283		-Me	-Cl	3-Cl	4-triflometyl-phenyl-
2,284		-Me	-Cl	3-Cl	5-metyl-1,3,4-oxadiazol-2-yl-
2,285		-Me	-Cl	3-Cl	5-metyl-2-pyridyl-
2,286		-Me	-Cl	3-Cl	5-metyl-3-pyridyl-
2,287		-Me	-Cl	3-Cl	6-clo-3-pyridyl-
2,288		-Me	-Cl	3-Cl	6-metyl-2-pyridyl-
2,289		-Me	-Cl	3-Cl	pyrimidin-5-yl-
2,290		-Me	-Cl	3-Cl	thiazol-2-yl-
2,291		-Me	-Cl	3-Cl	thiazol-5-yl-
2,292		-Me	-Cl	3-Cl	thiophen-3-yl-
2,293		-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	-Ph
2,294		-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	1-metyl-3-(triflometyl)pyrazol- 4-yl-
2,295		-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	1-metyl-pyrazol-4-yl-
2,296		-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	2-(metylsulfanyl)-4-pyridyl-
2,297		-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	2-axetamido-4-pyridyl-
2,298		-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	2-axetamidothiazol-5-yl-
2,299		-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	2-amino-4-pyridyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	Y	D
2,300	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	2-clo-3-pyridyl-
2,301	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	2-clo-4-pyridyl-
2,302	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	2-clothiazol-5-yl-
2,303	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	2-xyanophenyl-
2,304	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	2-xyano-phenyl-
2,305	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	2-flo-4-pyridyl-
2,306	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	2-metyl-4-pyridyl-
2,307	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	2-metyl-triazol-4-yl-
2,308	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	2-tolyl-
2,309	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	2-triflometyl-4-pyridyl-
2,310	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	2-triflometyl-phenyl-
2,311	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	3,4-diflo-phenyl-
2,312	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	3,5-diflo-phenyl-
2,313	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	3-clo-4-flo-phenyl-
2,314	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	3-clo-4-pyridyl-
2,315	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	3-xyanophenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	Y	D
2,316	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	3-cyano-phenyl-
2,317	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	3-methyl-2-pyridyl-
2,318	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	3-methyl-4-amino-phenyl-
2,319	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	3-pyridyl-
2,320	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	3-tolyl-
2,321	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	3-trifluoromethyl-3-pyridyl-
2,322	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	3-trifluoromethyl-phenyl-
2,323	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-(dimethylamino)-phenyl-
2,324	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-(dimethylsulfonyl)phenyl-
2,325	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-(methylamino)-phenyl-
2,326	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-(methylsulfonyl)phenyl-
2,327	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-(tert-butoxy)-phenyl-
2,328	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-(tert-butoxycarbonylamino)- 3-fluoro-phenyl-
2,329	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-(trifluoromethoxy)-phenyl-
2,330	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-[ethyl(methyl)carbamoyl]-3-fluoro- phenyl-
2,331	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-acetamidophenyl-

Hợp số	chất R ¹	R ²	Y	D
2,332	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-amino-3-metylphenyl-
2,333	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-amino-phenyl-
2,334	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-biphenyl-
2,335	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-cacboxyphenyl-
2,336	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-clo-3-pyridyl-
2,337	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-clo-phenyl-
2,338	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-xyanophenyl-
2,339	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-xyano-phenyl-
2,340	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-xyclopropylphenyl-
2,341	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-xyclopropyl-phenyl-
2,342	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-dimetylaminophenyl-
2,343	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-flo-phenyl-
2,344	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-hydroxyphenyl-
2,345	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-hydroxy-phenyl-
2,346	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-metoxycacbonylphenyl-
2,347	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-metyl-2-pyridyl-

Hợp số	chất R ¹	R ²	Y	D
2,348	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-metylaminophenyl-
2,349	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-metylsulfonylphenyl-
2,350	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-oxazol-5-ylphenyl-
2,351	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-pyridyl-
2,352	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-tert-butoxyphenyl-
2,353	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-tert-butylphenyl-
2,354	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-tolyl-
2,355	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-triflometyl-3-pyridyl-
2,356	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-triflometyl-phenyl-
2,357	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	5-metyl-1,3,4-oxadiazol-2-yl-
2,358	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	5-metyl-2-pyridyl-
2,359	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	5-metyl-3-pyridyl-
2,360	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	6-clo-3-pyridyl-
2,361	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	6-metyl-2-pyridyl-
2,362	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	pyrimidin-5-yl-
2,363	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	thiazol-2-yl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	Y	D
2,364	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	thiazol-5-yl-
2,365	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	thiophen-3-yl-
2,366	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	-Ph
2,367	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	1-metyl-3-(triflometyl)pyrazol- 4-yl-
2,368	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	1-metyl-pyrazol-4-yl-
2,369	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	2-(metylsulfanyl)-4-pyridyl-
2,370	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	2-axetamido-4-pyridyl-
2,371	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	2-axetamidothiazol-5-yl-
2,372	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	2-amino-4-pyridyl-
2,373	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	2-clo-3-pyridyl-
2,374	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	2-clo-4-pyridyl-
2,375	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	2-clothiazol-5-yl-
2,376	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	2-xyanophenyl-
2,377	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	2-xyano-phenyl-
2,378	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	2-flo-4-pyridyl-
2,379	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	2-metyl-4-pyridyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	Y	D
2,380	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	2-metyl-triazol-4-yl-
2,381	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	2-tolyl-
2,382	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	2-triflometyl-4-pyridyl-
2,383	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	2-triflometyl-phenyl-
2,384	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	3,4-diflo-phenyl-
2,385	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	3,5-diflo-phenyl-
2,386	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	3-clo-4-flo-phenyl-
2,387	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	3-clo-4-pyridyl-
2,388	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	3-xyanophenyl-
2,389	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	3-xyano-phenyl-
2,390	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	3-metyl-2-pyridyl-
2,391	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	3-metyl-4-amino-phenyl-
2,392	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	3-pyridyl-
2,393	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	3-tolyl-
2,394	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	3-triflometyl-3-pyridyl-
2,395	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	3-triflometyl-phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	Y	D
2,396	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-(dimethylamino)-phenyl-
2,397	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-(dimethylsulfamoyl)phenyl-
2,398	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-(methylamino)-phenyl-
2,399	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-(methylsulfanyl)phenyl-
2,400	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-(tert-butoxy)-phenyl-
2,401	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-(tert-butoxycarbonylamino)- 3-flu-phenyl-
2,402	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-(trifluoromethoxy)-phenyl-
2,403	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-[ethyl(methyl)carbamoyl]-3-flu- phenyl-
2,404	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-acetamidophenyl-
2,405	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-amino-3-methylphenyl-
2,406	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-amino-phenyl-
2,407	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-biphenyl-
2,408	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-carboxyphenyl-
2,409	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-chloro-3-pyridyl-
2,410	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-chloro-phenyl-
2,411	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-cyanophenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	Y	D
2,412	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-cyano-phenyl-
2,413	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-cyclopropylphenyl-
2,414	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-cyclopropyl-phenyl-
2,415	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-dimethylaminophenyl-
2,416	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-fluoro-phenyl-
2,417	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-hydroxyphenyl-
2,418	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-hydroxy-phenyl-
2,419	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-methoxycarbonylphenyl-
2,420	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-methyl-2-pyridyl-
2,421	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-methylaminophenyl-
2,422	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-methylsulfonylphenyl-
2,423	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-oxazol-5-ylphenyl-
2,424	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-pyridyl-
2,425	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-tert-butoxyphenyl-
2,426	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-tert-butylphenyl-
2,427	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-tolyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	Y	D
2,428	-CH ₂ -C≡CH	-Me	3-Cl	4-triflometyl-3-pyridyl-
2,429	-CH ₂ -C≡CH	-Me	3-Cl	4-triflometyl-phenyl-
2,430	-CH ₂ -C≡CH	-Me	3-Cl	5-metyl-1,3,4-oxadiazol-2-yl-
2,431	-CH ₂ -C≡CH	-Me	3-Cl	5-metyl-2-pyridyl-
2,432	-CH ₂ -C≡CH	-Me	3-Cl	5-metyl-3-pyridyl-
2,433	-CH ₂ -C≡CH	-Me	3-Cl	6-clo-3-pyridyl-
2,434	-CH ₂ -C≡CH	-Me	3-Cl	6-metyl-2-pyridyl-
2,435	-CH ₂ -C≡CH	-Me	3-Cl	pyrimidin-5-yl-
2,436	-CH ₂ -C≡CH	-Me	3-Cl	thiazol-2-yl-
2,437	-CH ₂ -C≡CH	-Me	3-Cl	thiazol-5-yl-
2,438	-CH ₂ -C≡CH	-Me	3-Cl	thiophen-3-yl-
2,439	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	3-F	-Ph
2,440	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	3-F	1-metyl-3-(triflometyl)pyrazol-4-yl-
2,441	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	3-F	1-metyl-pyrazol-4-yl-
2,442	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	3-F	2-(metylsulfanyl)-4-pyridyl-
2,443	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	3-F	2-axetamido-4-pyridyl-

Hợp số	chất R ¹	R ²	Y	D
2,444	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	2-axetamidothiazol-5-yl-
2,445	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	2-amino-4-pyridyl-
2,446	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	2-clo-3-pyridyl-
2,447	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	2-clo-4-pyridyl-
2,448	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	2-clothiazol-5-yl-
2,449	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	2-xyanophenyl-
2,450	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	2-xyano-phenyl-
2,451	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	2-flo-4-pyridyl-
2,452	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	2-metyl-4-pyridyl-
2,453	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	2-metyl-triazol-4-yl-
2,454	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	2-tolyl-
2,455	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	2-triflometyl-4-pyridyl-
2,456	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	2-triflometyl-phenyl-
2,457	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	3,4-diflo-phenyl-
2,458	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	3,5-diflo-phenyl-
2,459	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	3-clo-4-flo-phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	Y	D
2,460	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	3-clo-4-pyridyl-
2,461	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	3-xyanophenyl-
2,462	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	3-xyano-phenyl-
2,463	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	3-metyl-2-pyridyl-
2,464	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	3-metyl-4-amino-phenyl-
2,465	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	3-pyridyl-
2,466	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	3-tolyl-
2,467	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	3-triflometyl-3-pyridyl-
2,468	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	3-triflometyl-phenyl-
2,469	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-(dimetyl-amino)-phenyl-
2,470	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-(dimetylsulfamoyl)phenyl-
2,471	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-(metyl-amino)-phenyl-
2,472	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-(metylsulfanyl)phenyl-
2,473	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-(tert-butoxy)-phenyl-
2,474	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-(tert-butoxycacbonyl-amino)- 3-flo-phenyl-
2,475	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-(triflometoxy)-phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	Y	D
2,476	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-[etyl(metyl)carbamoyl]-3-flo- phenyl-
2,477	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-axetamidophenyl-
2,478	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-amino-3-metylphenyl-
2,479	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-amino-phenyl-
2,480	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-biphenyl-
2,481	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-cacboxyphenyl-
2,482	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-clo-3-pyridyl-
2,483	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-clo-phenyl-
2,484	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-xyanophenyl-
2,485	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-xyano-phenyl-
2,486	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-xyclopropylphenyl-
2,487	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-xyclopropyl-phenyl-
2,488	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-dimetylaminophenyl-
2,489	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-flo-phenyl-
2,490	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-hydroxyphenyl-
2,491	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-hydroxy-phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	Y	D
2,492	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-metoxycacbonylphenyl-
2,493	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-metyl-2-pyridyl-
2,494	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-metylaminophenyl-
2,495	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-metylsulfonylphenyl-
2,496	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-oxazol-5-ylphenyl-
2,497	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-pyridyl-
2,498	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-tert-butoxyphenyl-
2,499	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-tert-butylphenyl-
2,500	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-tolyl-
2,501	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-triflometyl-3-pyridyl-
2,502	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-triflometyl-phenyl-
2,503	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	5-metyl-1,3,4-oxadiazol-2-yl-
2,504	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	5-metyl-2-pyridyl-
2,505	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	5-metyl-3-pyridyl-
2,506	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	6-clo-3-pyridyl-
2,507	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	6-metyl-2-pyridyl-

Hợp số	chất R ¹	R ²	Y	D
2,508	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	pyrimidin-5-yl-
2,509	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	thiazol-2-yl-
2,510	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	thiazol-5-yl-
2,511	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	thiophen-3-yl-
2,512	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	-Ph
2,513	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	1-metyl-3-(triflometyl)pyrazol- 4-yl-
2,514	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	1-metyl-pyrazol-4-yl-
2,515	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	2-(metylsulfanyl)-4-pyridyl-
2,516	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	2-axetamido-4-pyridyl-
2,517	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	2-axetamidothiazol-5-yl-
2,518	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	2-amino-4-pyridyl-
2,519	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	2-clo-3-pyridyl-
2,520	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	2-clo-4-pyridyl-
2,521	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	2-clothiazol-5-yl-
2,522	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	2-xyanophenyl-
2,523	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	2-xyano-phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	Y	D
2,524	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	2-flo-4-pyridyl-
2,525	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	2-metyl-4-pyridyl-
2,526	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	2-metyl-triazol-4-yl-
2,527	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	2-tolyl-
2,528	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	2-triflometyl-4-pyridyl-
2,529	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	2-triflometyl-phenyl-
2,530	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	3,4-diflo-phenyl-
2,531	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	3,5-diflo-phenyl-
2,532	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	3-clo-4-flo-phenyl-
2,533	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	3-clo-4-pyridyl-
2,534	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	3-xyanophenyl-
2,535	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	3-xyano-phenyl-
2,536	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	3-metyl-2-pyridyl-
2,537	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	3-metyl-4-amino-phenyl-
2,538	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	3-pyridyl-
2,539	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	3-tolyl-

Hợp số	chất R ¹	R ²	Y	D
2,540	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	3-triflometyl-3-pyridyl-
2,541	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	3-triflometyl-phenyl-
2,542	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-(dimethylamino)-phenyl-
2,543	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-(dimethylsulfamoyl)phenyl-
2,544	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-(methylamino)-phenyl-
2,545	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-(methylsulfanyl)phenyl-
2,546	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-(tert-butoxy)-phenyl-
2,547	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-(tert-butoxycarbonylamino)- 3-flo-phenyl-
2,548	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-(triflometoxy)-phenyl-
2,549	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-[etyl(metyl)carbamoyl]-3-flo- phenyl-
2,550	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-axetamidophenyl-
2,551	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-amino-3-metylphenyl-
2,552	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-amino-phenyl-
2,553	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-biphenyl-
2,554	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-cacboxyphenyl-
2,555	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-clo-3-pyridyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	Y	D
2,556	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-clo-phenyl-
2,557	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-xyanophenyl-
2,558	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-xyano-phenyl-
2,559	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-xyclopropylphenyl-
2,560	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-xyclopropyl-phenyl-
2,561	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-dimethylaminophenyl-
2,562	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-flo-phenyl-
2,563	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-hydroxyphenyl-
2,564	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-hydroxy-phenyl-
2,565	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-metoxycacbonylphenyl-
2,566	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-metyl-2-pyridyl-
2,567	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-metylaminophenyl-
2,568	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-metylsulfonylphenyl-
2,569	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-oxazol-5-ylphenyl-
2,570	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-pyridyl-
2,571	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-tert-butoxyphenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	Y	D
2,572	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-tert-butylphenyl-
2,573	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-tolyl-
2,574	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-triflometyl-3-pyridyl-
2,575	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-triflometyl-phenyl-
2,576	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	5-metyl-1,3,4-oxadiazol-2-yl-
2,577	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	5-metyl-2-pyridyl-
2,578	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	5-metyl-3-pyridyl-
2,579	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	6-clo-3-pyridyl-
2,580	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	6-metyl-2-pyridyl-
2,581	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	pyrimidin-5-yl-
2,582	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	thiazol-2-yl-
2,583	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	thiazol-5-yl-
2,584	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	thiophen-3-yl-
2,585	-Me	-Me	3-F	4-(1-metylpyrazol-3-yl)phenyl-
2,586	-Me	-Me	3-F	4-(5-metyltetrazol-1-yl)phenyl-
2,587	-Me	-Me	3-F	4-morpholinophenyl-
2,588	-Me	-Me	3-F	4-(3-metylpyrazol-1-yl)phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	Y	D
2,589	-Me	-Me	3-F	4-(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)phenyl-
2,590	-Me	-Me	3-F	4-pyrazol-1-ylphenyl-
2,591	-Me	-Me	3-F	4-pyrol-1-ylphenyl-
2,592	-Me	-Me	3-F	4-(5-metyltetrahydrofuran-2-yl)phenyl-
2,593	-Me	-Me	3-F	4-(5-metyl-2-furyl)phenyl-
2,594	-Me	-Me	3-F	4-oxazol-2-ylphenyl-
2,595	-Me	-Me	3-F	4-(2-methylthiazol-4-yl)phenyl-
2,596	-Me	-Me	3-F	4-(2-thienyl)phenyl-
2,597	-Me	-Me	3-F	4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenyl-
2,598	-Me	-Me	3-F	1-phenyl-4-pyrazolyl-
2,599	-Me	-Me	3-F	1-xyclopropyl-4-pyrazolyl-
2,600	-Me	-Me	3-F	4-(metylsulfanylmetyl)phenyl-
2,601	-Me	-Me	3-F	4-(isopropylsulfanylmetyl)phenyl-
2,602	-Me	-Me	3-F	4-(metylsulfamoyl)phenyl-
2,603	-Me	-Me	3-F	4-sulfamoylphenyl-
2,604	-Me	-Me	3-F	4-carbamoylphenyl-
2,605	-Me	-Me	3-Cl	4-(1-methylpyrazol-3-yl)phenyl-
2,606	-Me	-Me	3-Cl	4-(5-metyltetrazol-1-yl)phenyl-
2,607	-Me	-Me	3-Cl	4-morpholinophenyl-
2,608	-Me	-Me	3-Cl	4-(3-methylpyrazol-1-yl)phenyl-
2,609	-Me	-Me	3-Cl	4-(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)phenyl-
2,610	-Me	-Me	3-Cl	4-pyrazol-1-ylphenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	Y	D
2,611	-Me	-Me	3-Cl	4-pyrol-1-ylphenyl-
2,612	-Me	-Me	3-Cl	4-(5-metyltetrahydrofuran-2-yl)phenyl-
2,613	-Me	-Me	3-Cl	4-(5-metyl-2-furyl)phenyl-
2,614	-Me	-Me	3-Cl	4-oxazol-2-ylphenyl-
2,615	-Me	-Me	3-Cl	4-(2-methylthiazol-4-yl)phenyl-
2,616	-Me	-Me	3-Cl	4-(2-thienyl)phenyl-
2,617	-Me	-Me	3-Cl	4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenyl-
2,618	-Me	-Me	3-Cl	1-phenyl-4-pyrazolyl-
2,619	-Me	-Me	3-Cl	1-xyclopropyl-4-pyrazolyl-
2,620	-Me	-Me	3-Cl	4-(metylsulfanylmetyl)phenyl-
2,621	-Me	-Me	3-Cl	4-(isopropylsulfanylmetyl)phenyl-
2,622	-Me	-Me	3-Cl	4-(metylsulfamoyl)phenyl-
2,623	-Me	-Me	3-Cl	4-sulfamoylphenyl-
2,624	-Me	-Me	3-Cl	4-carbamoylphenyl-
2,625	-Me	-Cl	3-F	4-(1-methylpyrazol-3-yl)phenyl-
2,626	-Me	-Cl	3-F	4-(5-metyltetrazol-1-yl)phenyl-
2,627	-Me	-Cl	3-F	4-morpholinophenyl-
2,628	-Me	-Cl	3-F	4-(3-methylpyrazol-1-yl)phenyl-
2,629	-Me	-Cl	3-F	4-(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)phenyl-
2,630	-Me	-Cl	3-F	4-pyrazol-1-ylphenyl-
2,631	-Me	-Cl	3-F	4-pyrol-1-ylphenyl-
2,632	-Me	-Cl	3-F	4-(5-metyltetrahydrofuran-2-yl)phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	Y	D
2,633	-Me	-Cl	3-F	4-(5-metyl-2-furyl)phenyl-
2,634	-Me	-Cl	3-F	4-oxazol-2-ylphenyl-
2,635	-Me	-Cl	3-F	4-(2-metylthiazol-4-yl)phenyl-
2,636	-Me	-Cl	3-F	4-(2-thienyl)phenyl-
2,637	-Me	-Cl	3-F	4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenyl-
2,638	-Me	-Cl	3-F	1-phenyl-4-pyrazolyl-
2,639	-Me	-Cl	3-F	1-xyclopropyl-4-pyrazolyl-
2,640	-Me	-Cl	3-F	4-(metylsulfanylmetyl)phenyl-
2,641	-Me	-Cl	3-F	4-(isopropylsulfanylmetyl)phenyl-
2,642	-Me	-Cl	3-F	4-(metylsulfamoyl)phenyl-
2,643	-Me	-Cl	3-F	4-sulfamoylphenyl-
2,644	-Me	-Cl	3-F	4-carbamoylphenyl-
2,645	-Me	-Cl	3-Cl	4-(1-metylpyrazol-3-yl)phenyl-
2,646	-Me	-Cl	3-Cl	4-(5-metyltetrazol-1-yl)phenyl-
2,647	-Me	-Cl	3-Cl	4-morpholinophenyl-
2,648	-Me	-Cl	3-Cl	4-(3-metylpyrazol-1-yl)phenyl-
2,649	-Me	-Cl	3-Cl	4-(3,5-dimetylpyrazol-1-yl)phenyl-
2,650	-Me	-Cl	3-Cl	4-pyrazol-1-ylphenyl-
2,651	-Me	-Cl	3-Cl	4-pyrol-1-ylphenyl-
2,652	-Me	-Cl	3-Cl	4-(5-metyltetrahydrofuran-2-yl)phenyl-
2,653	-Me	-Cl	3-Cl	4-(5-metyl-2-furyl)phenyl-
2,654	-Me	-Cl	3-Cl	4-oxazol-2-ylphenyl-
2,655	-Me	-Cl	3-Cl	4-(2-metylthiazol-4-yl)phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	Y	D
2,656	-Me	-Cl	3-Cl	4-(2-thienyl)phenyl-
2,657	-Me	-Cl	3-Cl	4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenyl-
2,658	-Me	-Cl	3-Cl	1-phenyl-4-pyrazolyl-
2,659	-Me	-Cl	3-Cl	1-xyclopropyl-4-pyrazolyl-
2,660	-Me	-Cl	3-Cl	4-(metylsulfanylmetyl)phenyl-
2,661	-Me	-Cl	3-Cl	4-(isopropylsulfanylmetyl)phenyl-
2,662	-Me	-Cl	3-Cl	4-(metylsulfamoyl)phenyl-
2,663	-Me	-Cl	3-Cl	4-sulfamoylphenyl-
2,664	-Me	-Cl	3-Cl	4-carbamoylphenyl-
2,665	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-(1-methylpyrazol-3-yl)phenyl-
2,666	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-(5-metyltetrazol-1-yl)phenyl-
2,667	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-morpholinophenyl-
2,668	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-(3-methylpyrazol-1-yl)phenyl-
2,669	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)phenyl-
2,670	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-pyrazol-1-ylphenyl-
2,671	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-pyrol-1-ylphenyl-
2,672	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-(5-metyltetrahydrofuran-2-yl)phenyl-
2,673	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-(5-metyl-2-furyl)phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	Y	D
2,674	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-oxazol-2-ylphenyl-
2,675	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-(2-methylthiazol-4-yl)phenyl-
2,676	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-(2-thienyl)phenyl-
2,677	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenyl-
2,678	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	1-phenyl-4-pyrazolyl-
2,679	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	1-xyclopropyl-4-pyrazolyl-
2,680	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-(metylsulfanylmetyl)phenyl-
2,681	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4- (isopropylsulfanylmetyl)phenyl-
2,682	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-(metylsulfamoyl)phenyl-
2,683	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-sulfamoylphenyl-
2,684	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-F	4-carbamoylphenyl-
2,685	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-(1-methylpyrazol-3-yl)phenyl-
2,686	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-(5-metyltetrazol-1-yl)phenyl-
2,687	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-morpholinophenyl-
2,688	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-(3-methylpyrazol-1-yl)phenyl-
2,689	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	Y	D
2,690	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-pyrazol-1-ylphenyl-
2,691	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-pyrol-1-ylphenyl-
2,692	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-(5-metyltetrahydrofuran-2-yl)phenyl-
2,693	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-(5-metyl-2-furyl)phenyl-
2,694	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-oxazol-2-ylphenyl-
2,695	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-(2-methylthiazol-4-yl)phenyl-
2,696	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-(2-thienyl)phenyl-
2,697	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenyl-
2,698	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	1-phenyl-4-pyrazolyl-
2,699	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	1-xyclopropyl-4-pyrazolyl-
2,700	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-(metylsulfanylmetyl)phenyl-
2,701	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-(isopropylsulfanylmetyl)phenyl-
2,702	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-(metylsulfamoyl)phenyl-
2,703	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-sulfamoylphenyl-
2,704	-CH ₂ - C≡CH	-Me	3-Cl	4-carbamoylphenyl-
2,705	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-(1-metylpyrazol-3-yl)phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	Y	D
2,706	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-(5-metyltetrazol-1-yl)phenyl-
2,707	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-morpholinophenyl-
2,708	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-(3-methylpyrazol-1-yl)phenyl-
2,709	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)phenyl-
2,710	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-pyrazol-1-ylphenyl-
2,711	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-pyrol-1-ylphenyl-
2,712	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-(5-metyltetrahydrofuran-2-yl)phenyl-
2,713	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-(5-metyl-2-furyl)phenyl-
2,714	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-oxazol-2-ylphenyl-
2,715	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-(2-methylthiazol-4-yl)phenyl-
2,716	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-(2-thienyl)phenyl-
2,717	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenyl-
2,718	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	1-phenyl-4-pyrazolyl-
2,719	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	1-xyclopropyl-4-pyrazolyl-
2,720	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-(metylsulfanylmetyl)phenyl-
2,721	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-(isopropylsulfanylmetyl)phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	Y	D
2,722	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-(metylsulfamoyl)phenyl-
2,723	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-sulfamoylphenyl-
2,724	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-F	4-carbamoylphenyl-
2,725	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-(1-methylpyrazol-3-yl)phenyl-
2,726	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-(5-metyltetrazol-1-yl)phenyl-
2,727	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-morpholinophenyl-
2,728	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-(3-methylpyrazol-1-yl)phenyl-
2,729	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)phenyl-
2,730	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-pyrazol-1-ylphenyl-
2,731	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-pyrol-1-ylphenyl-
2,732	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-(5-metyltetrahydrofuran-2-yl)phenyl-
2,733	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-(5-metyl-2-furyl)phenyl-
2,734	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-oxazol-2-ylphenyl-
2,735	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-(2-methylthiazol-4-yl)phenyl-
2,736	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-(2-thienyl)phenyl-
2,737	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	3-Cl	4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	Y	D
2,738	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	3-Cl	1-phenyl-4-pyrazolyl-
2,739	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	3-Cl	1-xyclopropyl-4-pyrazolyl-
2,740	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	3-Cl	4-(metylsulfanylmetyl)phenyl-
2,741	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	3-Cl	4-(isopropylsulfanylmetyl)phenyl-
2,742	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	3-Cl	4-(metylsulfamoyl)phenyl-
2,743	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	3-Cl	4-sulfamoylphenyl-
2,744	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	3-Cl	4-carbamoylphenyl-

Bảng B-2 cung cấp 744 hợp chất từ B-2,001 đến B-2,744 có công thức (I) trong đó G là -H, W là (E)-CH=CH-, X là 6-xyclopropyl và R¹, R², Y, D là như được xác định cho hợp chất số từ 2,001 đến 2,744 một cách tương ứng trong bảng 2 trên đây.

Bảng B-3 cung cấp 744 hợp chất từ B-3,001 đến B-3,744 có công thức (I) trong đó G là -(C=O)iPr, W là -CH₂-CH₂-, X là 6-xyclopropyl và R¹, R², Y, D là như được xác định cho hợp chất số từ 2,001 đến 2,744 một cách tương ứng trong bảng 2 trên đây.

Bảng B-4 cung cấp 744 hợp chất từ B-4,001 đến B-4,744 có công thức (I) trong đó G là -(C=O)iPr, W là (E)-CH=CH-, X là 6-xyclopropyl và R¹, R², Y, D là như được xác định cho hợp chất số từ 2,001 đến 2,744 một cách tương ứng trong bảng 2 trên đây.

Bảng C-1 cung cấp 744 hợp chất từ C-1,001 đến C-1,744 có công thức (I) trong đó G là -H, W là -CH₂-CH₂-, Y là 3-xyclopropyl và R¹, R², X, và D là như được xác định cho hợp chất số từ 3,001 đến 3,744 một cách tương ứng trong bảng 3 dưới đây.

Bảng 3: Các định nghĩa nhóm thế của R¹, R², X và D:

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	D
3,001	-Me	-Me	6-F	-Ph
3,002	-Me	-Me	6-F	1-metyl-3-(triflometyl)pyrazol-4-yl-
3,003	-Me	-Me	6-F	1-metyl-pyrazol-4-yl-
3,004	-Me	-Me	6-F	2-(metylsulfanyl)-4-pyridyl-
3,005	-Me	-Me	6-F	2-axetamido-4-pyridyl-
3,006	-Me	-Me	6-F	2-axetamidothiazol-5-yl-
3,007	-Me	-Me	6-F	2-amino-4-pyridyl-
3,008	-Me	-Me	6-F	2-clo-3-pyridyl-
3,009	-Me	-Me	6-F	2-clo-4-pyridyl-
3,010	-Me	-Me	6-F	2-clothiazol-5-yl-
3,011	-Me	-Me	6-F	2-xyanophenyl-
3,012	-Me	-Me	6-F	2-xyano-phenyl-
3,013	-Me	-Me	6-F	2-flo-4-pyridyl-
3,014	-Me	-Me	6-F	2-metyl-4-pyridyl-
3,015	-Me	-Me	6-F	2-metyl-triazol-4-yl-
3,016	-Me	-Me	6-F	2-tolyl-
3,017	-Me	-Me	6-F	2-triflometyl-4-pyridyl-
3,018	-Me	-Me	6-F	2-triflometyl-phenyl-
3,019	-Me	-Me	6-F	3,4-diflo-phenyl-
3,020	-Me	-Me	6-F	3,5-diflo-phenyl-
3,021	-Me	-Me	6-F	3-clo-4-flo-phenyl-
3,022	-Me	-Me	6-F	3-clo-4-pyridyl-
3,023	-Me	-Me	6-F	3-xyanophenyl-
3,024	-Me	-Me	6-F	3-xyano-phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	D
3,025	-Me	-Me	6-F	3-metyl-2-pyridyl-
3,026	-Me	-Me	6-F	3-metyl-4-amino-phenyl-
3,027	-Me	-Me	6-F	3-pyridyl-
3,028	-Me	-Me	6-F	3-tolyl-
3,029	-Me	-Me	6-F	3-triflometyl-3-pyridyl-
3,030	-Me	-Me	6-F	3-triflometyl-phenyl-
3,031	-Me	-Me	6-F	4-(dimetylamino)-phenyl-
3,032	-Me	-Me	6-F	4-(dimetylsulfamoyl)phenyl-
3,033	-Me	-Me	6-F	4-(metylamino)-phenyl-
3,034	-Me	-Me	6-F	4-(metylsulfanyl)phenyl-
3,035	-Me	-Me	6-F	4-(tert-butoxy)-phenyl-
3,036	-Me	-Me	6-F	4-(tert-butoxycacbonylamino)-3-flo-phenyl-
3,037	-Me	-Me	6-F	4-(triflometoxy)-phenyl-
3,038	-Me	-Me	6-F	4-[etyl(metyl)carbamoyl]-3-flo-phenyl-
3,039	-Me	-Me	6-F	4-axetamidophenyl-
3,040	-Me	-Me	6-F	4-amino-3-metylphenyl-
3,041	-Me	-Me	6-F	4-amino-phenyl-
3,042	-Me	-Me	6-F	4-biphenyl-
3,043	-Me	-Me	6-F	4-cacboxyphenyl-
3,044	-Me	-Me	6-F	4-clo-3-pyridyl-
3,045	-Me	-Me	6-F	4-clo-phenyl-
3,046	-Me	-Me	6-F	4-xyanophenyl-
3,047	-Me	-Me	6-F	4-xyano-phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	D
3,048	-Me	-Me	6-F	4-xyclopropylphenyl-
3,049	-Me	-Me	6-F	4-xyclopropyl-phenyl-
3,050	-Me	-Me	6-F	4-dimethylaminophenyl-
3,051	-Me	-Me	6-F	4-flo-phenyl-
3,052	-Me	-Me	6-F	4-hydroxyphenyl-
3,053	-Me	-Me	6-F	4-hydroxy-phenyl-
3,054	-Me	-Me	6-F	4-metoxycacbonylphenyl-
3,055	-Me	-Me	6-F	4-metyl-2-pyridyl-
3,056	-Me	-Me	6-F	4-metylaminophenyl-
3,057	-Me	-Me	6-F	4-metylsulfonylphenyl-
3,058	-Me	-Me	6-F	4-oxazol-5-ylphenyl-
3,059	-Me	-Me	6-F	4-pyridyl-
3,060	-Me	-Me	6-F	4-tert-butoxyphenyl-
3,061	-Me	-Me	6-F	4-tert-butylphenyl-
3,062	-Me	-Me	6-F	4-tolyl-
3,063	-Me	-Me	6-F	4-triflometyl-3-pyridyl-
3,064	-Me	-Me	6-F	4-triflometyl-phenyl-
3,065	-Me	-Me	6-F	5-metyl-1,3,4-oxadiazol-2-yl-
3,066	-Me	-Me	6-F	5-metyl-2-pyridyl-
3,067	-Me	-Me	6-F	5-metyl-3-pyridyl-
3,068	-Me	-Me	6-F	6-clo-3-pyridyl-
3,069	-Me	-Me	6-F	6-metyl-2-pyridyl-
3,070	-Me	-Me	6-F	pyrimidin-5-yl-
3,071	-Me	-Me	6-F	thiazol-2-yl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	D
3,072	-Me	-Me	6-F	thiazol-5-yl-
3,073	-Me	-Me	6-F	thiophen-3-yl-
3,074	-Me	-Me	6-Cl	-Ph
3,075	-Me	-Me	6-Cl	1-metyl-3-(triflometyl)pyrazol-4-yl-
3,076	-Me	-Me	6-Cl	1-metyl-pyrazol-4-yl-
3,077	-Me	-Me	6-Cl	2-(metylsulfanyl)-4-pyridyl-
3,078	-Me	-Me	6-Cl	2-axetamido-4-pyridyl-
3,079	-Me	-Me	6-Cl	2-axetamidothiazol-5-yl-
3,080	-Me	-Me	6-Cl	2-amino-4-pyridyl-
3,081	-Me	-Me	6-Cl	2-clo-3-pyridyl-
3,082	-Me	-Me	6-Cl	2-clo-4-pyridyl-
3,083	-Me	-Me	6-Cl	2-clothiazol-5-yl-
3,084	-Me	-Me	6-Cl	2-xyanophenyl-
3,085	-Me	-Me	6-Cl	2-xyano-phenyl-
3,086	-Me	-Me	6-Cl	2-flo-4-pyridyl-
3,087	-Me	-Me	6-Cl	2-metyl-4-pyridyl-
3,088	-Me	-Me	6-Cl	2-metyl-triazol-4-yl-
3,089	-Me	-Me	6-Cl	2-tolyl-
3,090	-Me	-Me	6-Cl	2-triflometyl-4-pyridyl-
3,091	-Me	-Me	6-Cl	2-triflometyl-phenyl-
3,092	-Me	-Me	6-Cl	3,4-diflo-phenyl-
3,093	-Me	-Me	6-Cl	3,5-diflo-phenyl-
3,094	-Me	-Me	6-Cl	3-clo-4-flo-phenyl-
3,095	-Me	-Me	6-Cl	3-clo-4-pyridyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	D
3,096	-Me	-Me	6-Cl	3-xyanophenyl-
3,097	-Me	-Me	6-Cl	3-xyano-phenyl-
3,098	-Me	-Me	6-Cl	3-metyl-2-pyridyl-
3,099	-Me	-Me	6-Cl	3-metyl-4-amino-phenyl-
3,100	-Me	-Me	6-Cl	3-pyridyl-
3,101	-Me	-Me	6-Cl	3-tolyl-
3,102	-Me	-Me	6-Cl	3-triflometyl-3-pyridyl-
3,103	-Me	-Me	6-Cl	3-triflometyl-phenyl-
3,104	-Me	-Me	6-Cl	4-(dimetylamino)-phenyl-
3,105	-Me	-Me	6-Cl	4-(dimetylsulfamoyl)phenyl-
3,106	-Me	-Me	6-Cl	4-(metylamino)-phenyl-
3,107	-Me	-Me	6-Cl	4-(metylsulfanyl)phenyl-
3,108	-Me	-Me	6-Cl	4-(tert-butoxy)-phenyl-
3,109	-Me	-Me	6-Cl	4-(tert-butoxycacbonylamino)-3-flo-phenyl-
3,110	-Me	-Me	6-Cl	4-(triflometoxy)-phenyl-
3,111	-Me	-Me	6-Cl	4-[etyl(metyl)carbamoyl]-3-flo-phenyl-
3,112	-Me	-Me	6-Cl	4-axetamidophenyl-
3,113	-Me	-Me	6-Cl	4-amino-3-metylphenyl-
3,114	-Me	-Me	6-Cl	4-amino-phenyl-
3,115	-Me	-Me	6-Cl	4-biphenyl-
3,116	-Me	-Me	6-Cl	4-cacboxyphenyl-
3,117	-Me	-Me	6-Cl	4-clo-3-pyridyl-
3,118	-Me	-Me	6-Cl	4-clo-phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	D
3,119	-Me	-Me	6-Cl	4-xyanophenyl-
3,120	-Me	-Me	6-Cl	4-xyano-phenyl-
3,121	-Me	-Me	6-Cl	4-xyclopropylphenyl-
3,122	-Me	-Me	6-Cl	4-xyclopropyl-phenyl-
3,123	-Me	-Me	6-Cl	4-dimetylaminophenyl-
3,124	-Me	-Me	6-Cl	4-flo-phenyl-
3,125	-Me	-Me	6-Cl	4-hydroxyphenyl-
3,126	-Me	-Me	6-Cl	4-hydroxy-phenyl-
3,127	-Me	-Me	6-Cl	4-metoxycacbonylphenyl-
3,128	-Me	-Me	6-Cl	4-metyl-2-pyridyl-
3,129	-Me	-Me	6-Cl	4-metylaminophenyl-
3,130	-Me	-Me	6-Cl	4-metylsulfonylphenyl-
3,131	-Me	-Me	6-Cl	4-oxazol-5-ylphenyl-
3,132	-Me	-Me	6-Cl	4-pyridyl-
3,133	-Me	-Me	6-Cl	4-tert-butoxyphenyl-
3,134	-Me	-Me	6-Cl	4-tert-butylphenyl-
3,135	-Me	-Me	6-Cl	4-tolyl-
3,136	-Me	-Me	6-Cl	4-triflometyl-3-pyridyl-
3,137	-Me	-Me	6-Cl	4-triflometyl-phenyl-
3,138	-Me	-Me	6-Cl	5-metyl-1,3,4-oxadiazol-2-yl-
3,139	-Me	-Me	6-Cl	5-metyl-2-pyridyl-
3,140	-Me	-Me	6-Cl	5-metyl-3-pyridyl-
3,141	-Me	-Me	6-Cl	6-clo-3-pyridyl-
3,142	-Me	-Me	6-Cl	6-metyl-2-pyridyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	D
3,143	-Me	-Me	6-Cl	pyrimidin-5-yl-
3,144	-Me	-Me	6-Cl	thiazol-2-yl-
3,145	-Me	-Me	6-Cl	thiazol-5-yl-
3,146	-Me	-Me	6-Cl	thiophen-3-yl-
3,147	-Me	-Cl	6-F	-Ph
3,148	-Me	-Cl	6-F	1-metyl-3-(triflometyl)pyrazol-4-yl-
3,149	-Me	-Cl	6-F	1-metyl-pyrazol-4-yl-
3,150	-Me	-Cl	6-F	2-(metylsulfanyl)-4-pyridyl-
3,151	-Me	-Cl	6-F	2-axetamido-4-pyridyl-
3,152	-Me	-Cl	6-F	2-axetamidothiazol-5-yl-
3,153	-Me	-Cl	6-F	2-amino-4-pyridyl-
3,154	-Me	-Cl	6-F	2-clo-3-pyridyl-
3,155	-Me	-Cl	6-F	2-clo-4-pyridyl-
3,156	-Me	-Cl	6-F	2-clothiazol-5-yl-
3,157	-Me	-Cl	6-F	2-xyanophenyl-
3,158	-Me	-Cl	6-F	2-xyano-phenyl-
3,159	-Me	-Cl	6-F	2-flo-4-pyridyl-
3,160	-Me	-Cl	6-F	2-metyl-4-pyridyl-
3,161	-Me	-Cl	6-F	2-metyl-triazol-4-yl-
3,162	-Me	-Cl	6-F	2-tolyl-
3,163	-Me	-Cl	6-F	2-triflometyl-4-pyridyl-
3,164	-Me	-Cl	6-F	2-triflometyl-phenyl-
3,165	-Me	-Cl	6-F	3,4-diflo-phenyl-
3,166	-Me	-Cl	6-F	3,5-diflo-phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	D
3,167	-Me	-Cl	6-F	3-clo-4-flo-phenyl-
3,168	-Me	-Cl	6-F	3-clo-4-pyridyl-
3,169	-Me	-Cl	6-F	3-xyanophenyl-
3,170	-Me	-Cl	6-F	3-xyano-phenyl-
3,171	-Me	-Cl	6-F	3-metyl-2-pyridyl-
3,172	-Me	-Cl	6-F	3-metyl-4-amino-phenyl-
3,173	-Me	-Cl	6-F	3-pyridyl-
3,174	-Me	-Cl	6-F	3-tolyl-
3,175	-Me	-Cl	6-F	3-triflometyl-3-pyridyl-
3,176	-Me	-Cl	6-F	3-triflometyl-phenyl-
3,177	-Me	-Cl	6-F	4-(dimetylamino)-phenyl-
3,178	-Me	-Cl	6-F	4-(dimetylsulfamoyl)phenyl-
3,179	-Me	-Cl	6-F	4-(metylamino)-phenyl-
3,180	-Me	-Cl	6-F	4-(metylsulfanyl)phenyl-
3,181	-Me	-Cl	6-F	4-(tert-butoxy)-phenyl-
3,182	-Me	-Cl	6-F	4-(tert-butoxycacbonylamino)-3-flo-phenyl-
3,183	-Me	-Cl	6-F	4-(triflometoxy)-phenyl-
3,184	-Me	-Cl	6-F	4-[etyl(metyl)carbamoyl]-3-flo-phenyl-
3,185	-Me	-Cl	6-F	4-axetamidophenyl-
3,186	-Me	-Cl	6-F	4-amino-3-metylphenyl-
3,187	-Me	-Cl	6-F	4-amino-phenyl-
3,188	-Me	-Cl	6-F	4-biphenyl-
3,189	-Me	-Cl	6-F	4-cacboxyphenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	D
3,190	-Me	-Cl	6-F	4-clo-3-pyridyl-
3,191	-Me	-Cl	6-F	4-clo-phenyl-
3,192	-Me	-Cl	6-F	4-xyanophenyl-
3,193	-Me	-Cl	6-F	4-xyano-phenyl-
3,194	-Me	-Cl	6-F	4-xyclopropylphenyl-
3,195	-Me	-Cl	6-F	4-xyclopropyl-phenyl-
3,196	-Me	-Cl	6-F	4-dimetylaminophenyl-
3,197	-Me	-Cl	6-F	4-flo-phenyl-
3,198	-Me	-Cl	6-F	4-hydroxyphenyl-
3,199	-Me	-Cl	6-F	4-hydroxy-phenyl-
3,200	-Me	-Cl	6-F	4-metoxycacbonylphenyl-
3,201	-Me	-Cl	6-F	4-metyl-2-pyridyl-
3,202	-Me	-Cl	6-F	4-metylaminophenyl-
3,203	-Me	-Cl	6-F	4-metylsulfonylphenyl-
3,204	-Me	-Cl	6-F	4-oxazol-5-ylphenyl-
3,205	-Me	-Cl	6-F	4-pyridyl-
3,206	-Me	-Cl	6-F	4-tert-butoxyphenyl-
3,207	-Me	-Cl	6-F	4-tert-butylphenyl-
3,208	-Me	-Cl	6-F	4-tolyl-
3,209	-Me	-Cl	6-F	4-triflometyl-3-pyridyl-
3,210	-Me	-Cl	6-F	4-triflometyl-phenyl-
3,211	-Me	-Cl	6-F	5-metyl-1,3,4-oxadiazol-2-yl-
3,212	-Me	-Cl	6-F	5-metyl-2-pyridyl-
3,213	-Me	-Cl	6-F	5-metyl-3-pyridyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	D
3,214	-Me	-Cl	6-F	6-clo-3-pyridyl-
3,215	-Me	-Cl	6-F	6-metyl-2-pyridyl-
3,216	-Me	-Cl	6-F	pyrimidin-5-yl-
3,217	-Me	-Cl	6-F	thiazol-2-yl-
3,218	-Me	-Cl	6-F	thiazol-5-yl-
3,219	-Me	-Cl	6-F	thiophen-3-yl-
3,220	-Me	-Cl	6-Cl	-Ph
3,221	-Me	-Cl	6-Cl	1-metyl-3-(triflometyl)pyrazol-4-yl-
3,222	-Me	-Cl	6-Cl	1-metyl-pyrazol-4-yl-
3,223	-Me	-Cl	6-Cl	2-(metylsulfanyl)-4-pyridyl-
3,224	-Me	-Cl	6-Cl	2-axetamido-4-pyridyl-
3,225	-Me	-Cl	6-Cl	2-axetamidothiazol-5-yl-
3,226	-Me	-Cl	6-Cl	2-amino-4-pyridyl-
3,227	-Me	-Cl	6-Cl	2-clo-3-pyridyl-
3,228	-Me	-Cl	6-Cl	2-clo-4-pyridyl-
3,229	-Me	-Cl	6-Cl	2-clothiazol-5-yl-
3,230	-Me	-Cl	6-Cl	2-xyanophenyl-
3,231	-Me	-Cl	6-Cl	2-xyano-phenyl-
3,232	-Me	-Cl	6-Cl	2-flo-4-pyridyl-
3,233	-Me	-Cl	6-Cl	2-metyl-4-pyridyl-
3,234	-Me	-Cl	6-Cl	2-metyl-triazol-4-yl-
3,235	-Me	-Cl	6-Cl	2-tolyl-
3,236	-Me	-Cl	6-Cl	2-triflometyl-4-pyridyl-
3,237	-Me	-Cl	6-Cl	2-triflometyl-phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	D
3,238	-Me	-Cl	6-Cl	3,4-diflo-phenyl-
3,239	-Me	-Cl	6-Cl	3,5-diflo-phenyl-
3,240	-Me	-Cl	6-Cl	3-clo-4-flo-phenyl-
3,241	-Me	-Cl	6-Cl	3-clo-4-pyridyl-
3,242	-Me	-Cl	6-Cl	3-xyanophenyl-
3,243	-Me	-Cl	6-Cl	3-xyano-phenyl-
3,244	-Me	-Cl	6-Cl	3-metyl-2-pyridyl-
3,245	-Me	-Cl	6-Cl	3-metyl-4-amino-phenyl-
3,246	-Me	-Cl	6-Cl	3-pyridyl-
3,247	-Me	-Cl	6-Cl	3-tolyl-
3,248	-Me	-Cl	6-Cl	3-triflometyl-3-pyridyl-
3,249	-Me	-Cl	6-Cl	3-triflometyl-phenyl-
3,250	-Me	-Cl	6-Cl	4-(dimetylamino)-phenyl-
3,251	-Me	-Cl	6-Cl	4-(dimetylsulfamoyl)phenyl-
3,252	-Me	-Cl	6-Cl	4-(metylamino)-phenyl-
3,253	-Me	-Cl	6-Cl	4-(metylsulfanyl)phenyl-
3,254	-Me	-Cl	6-Cl	4-(tert-butoxy)-phenyl-
3,255	-Me	-Cl	6-Cl	4-(tert-butoxycacbonylamino)-3-flo-phenyl-
3,256	-Me	-Cl	6-Cl	4-(triflometoxy)-phenyl-
3,257	-Me	-Cl	6-Cl	4-[etyl(metyl)carbamoyl]-3-flo-phenyl-
3,258	-Me	-Cl	6-Cl	4-axetamidophenyl-
3,259	-Me	-Cl	6-Cl	4-amino-3-metylphenyl-
3,260	-Me	-Cl	6-Cl	4-amino-phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	D
3,261	-Me	-Cl	6-Cl	4-biphenyl-
3,262	-Me	-Cl	6-Cl	4-cacboxyphenyl-
3,263	-Me	-Cl	6-Cl	4-clo-3-pyridyl-
3,264	-Me	-Cl	6-Cl	4-clo-phenyl-
3,265	-Me	-Cl	6-Cl	4-xyanophenyl-
3,266	-Me	-Cl	6-Cl	4-xyano-phenyl-
3,267	-Me	-Cl	6-Cl	4-xyclopropylphenyl-
3,268	-Me	-Cl	6-Cl	4-xyclopropyl-phenyl-
3,269	-Me	-Cl	6-Cl	4-dimetylaminophenyl-
3,270	-Me	-Cl	6-Cl	4-flo-phenyl-
3,271	-Me	-Cl	6-Cl	4-hydroxyphenyl-
3,272	-Me	-Cl	6-Cl	4-hydroxy-phenyl-
3,273	-Me	-Cl	6-Cl	4-metoxycacbonylphenyl-
3,274	-Me	-Cl	6-Cl	4-metyl-2-pyridyl-
3,275	-Me	-Cl	6-Cl	4-metylaminophenyl-
3,276	-Me	-Cl	6-Cl	4-metylsulfonylphenyl-
3,277	-Me	-Cl	6-Cl	4-oxazol-5-ylphenyl-
3,278	-Me	-Cl	6-Cl	4-pyridyl-
3,279	-Me	-Cl	6-Cl	4-tert-butoxyphenyl-
3,280	-Me	-Cl	6-Cl	4-tert-butylphenyl-
3,281	-Me	-Cl	6-Cl	4-tolyl-
3,282	-Me	-Cl	6-Cl	4-triflometyl-3-pyridyl-
3,283	-Me	-Cl	6-Cl	4-triflometyl-phenyl-
3,284	-Me	-Cl	6-Cl	5-metyl-1,3,4-oxadiazol-2-yl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	D
3,285	-Me	-Cl	6-Cl	5-metyl-2-pyridyl-
3,286	-Me	-Cl	6-Cl	5-metyl-3-pyridyl-
3,287	-Me	-Cl	6-Cl	6-clo-3-pyridyl-
3,288	-Me	-Cl	6-Cl	6-metyl-2-pyridyl-
3,289	-Me	-Cl	6-Cl	pyrimidin-5-yl-
3,290	-Me	-Cl	6-Cl	thiazol-2-yl-
3,291	-Me	-Cl	6-Cl	thiazol-5-yl-
3,292	-Me	-Cl	6-Cl	thiophen-3-yl-
3,293	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	-Ph
3,294	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	1-metyl-3-(triflometyl)pyrazol- 4-yl-
3,295	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	1-metyl-pyrazol-4-yl-
3,296	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	2-(metylsulfanyl)-4-pyridyl-
3,297	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	2-axetamido-4-pyridyl-
3,298	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	2-axetamidothiazol-5-yl-
3,299	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	2-amino-4-pyridyl-
3,300	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	2-clo-3-pyridyl-
3,301	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	2-clo-4-pyridyl-
3,302	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	2-clothiazol-5-yl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	D
3,303	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	2-xyanophenyl-
3,304	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	2-xyano-phenyl-
3,305	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	2-flo-4-pyridyl-
3,306	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	2-metyl-4-pyridyl-
3,307	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	2-metyl-triazol-4-yl-
3,308	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	2-tolyl-
3,309	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	2-triflometyl-4-pyridyl-
3,310	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	2-triflometyl-phenyl-
3,311	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3,4-diflo-phenyl-
3,312	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3,5-diflo-phenyl-
3,313	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-clo-4-flo-phenyl-
3,314	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-clo-4-pyridyl-
3,315	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-xyanophenyl-
3,316	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-xyano-phenyl-
3,317	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-metyl-2-pyridyl-
3,318	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-metyl-4-amino-phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	D
3,319	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-pyridyl-
3,320	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-tolyl-
3,321	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-triflometyl-3-pyridyl-
3,322	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	3-triflometyl-phenyl-
3,323	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-(dimethylamino)-phenyl-
3,324	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-(dimethylsulfamoyl)phenyl-
3,325	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-(methylamino)-phenyl-
3,326	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-(methylsulfanyl)phenyl-
3,327	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-(tert-butoxy)-phenyl-
3,328	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-(tert-butoxycarbonylamino)-3- flo-phenyl-
3,329	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-(triflometoxy)-phenyl-
3,330	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-[ethyl(methyl)carbamoyl]-3- flo-phenyl-
3,331	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-axetamidophenyl-
3,332	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-amino-3-methylphenyl-
3,333	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-amino-phenyl-
3,334	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-biphenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	D
3,335	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-cacboxyphenyl-
3,336	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-clo-3-pyridyl-
3,337	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-clo-phenyl-
3,338	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-xyanophenyl-
3,339	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-xyano-phenyl-
3,340	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-xyclopropylphenyl-
3,341	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-xyclopropyl-phenyl-
3,342	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-dimetylaminophenyl-
3,343	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-flo-phenyl-
3,344	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-hydroxyphenyl-
3,345	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-hydroxy-phenyl-
3,346	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-metoxycacbonylphenyl-
3,347	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-metyl-2-pyridyl-
3,348	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-metylaminophenyl-
3,349	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-metylsulfonylphenyl-
3,350	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-oxazol-5-ylphenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	D
3,351	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-pyridyl-
3,352	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-tert-butoxyphenyl-
3,353	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-tert-butylphenyl-
3,354	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-tolyl-
3,355	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-triflometyl-3-pyridyl-
3,356	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-triflometyl-phenyl-
3,357	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	5-metyl-1,3,4-oxadiazol-2-yl-
3,358	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	5-metyl-2-pyridyl-
3,359	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	5-metyl-3-pyridyl-
3,360	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	6-clo-3-pyridyl-
3,361	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	6-metyl-2-pyridyl-
3,362	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	pyrimidin-5-yl-
3,363	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	thiazol-2-yl-
3,364	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	thiazol-5-yl-
3,365	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	thiophen-3-yl-
3,366	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	-Ph

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	D
3,367	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	1-metyl-3-(triflometyl)pyrazol-4-yl-
3,368	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	1-metyl-pyrazol-4-yl-
3,369	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	2-(metylsulfanyl)-4-pyridyl-
3,370	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	2-axetamido-4-pyridyl-
3,371	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	2-axetamidothiazol-5-yl-
3,372	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	2-amino-4-pyridyl-
3,373	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	2-clo-3-pyridyl-
3,374	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	2-clo-4-pyridyl-
3,375	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	2-clothiazol-5-yl-
3,376	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	2-xyanophenyl-
3,377	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	2-xyano-phenyl-
3,378	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	2-flo-4-pyridyl-
3,379	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	2-metyl-4-pyridyl-
3,380	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	2-metyl-triazol-4-yl-
3,381	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	2-tolyl-
3,382	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	2-triflometyl-4-pyridyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	D
3,383	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	2-triflometyl-phenyl-
3,384	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3,4-diflo-phenyl-
3,385	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3,5-diflo-phenyl-
3,386	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-clo-4-flo-phenyl-
3,387	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-clo-4-pyridyl-
3,388	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-xyanophenyl-
3,389	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-xyano-phenyl-
3,390	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-metyl-2-pyridyl-
3,391	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-metyl-4-amino-phenyl-
3,392	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-pyridyl-
3,393	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-tolyl-
3,394	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-triflometyl-3-pyridyl-
3,395	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	3-triflometyl-phenyl-
3,396	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	4-(dimetyl-amino)-phenyl-
3,397	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	4-(dimetylsulfamoyl)phenyl-
3,398	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	4-(metyl-amino)-phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	D
3,399	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	4-(metylsulfanyl)phenyl-
3,400	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	4-(tert-butoxy)-phenyl-
3,401	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	4-(tert-butoxycarbonylamino)-3-fluorophenyl-
3,402	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	4-(trifluoromethoxy)-phenyl-
3,403	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	4-[ethyl(methyl)carbamoyl]-3-fluorophenyl-
3,404	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	4-acetamidophenyl-
3,405	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	4-amino-3-methylphenyl-
3,406	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	4-amino-phenyl-
3,407	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	4-biphenyl-
3,408	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	4-carboxyphenyl-
3,409	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	4-chloro-3-pyridyl-
3,410	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	4-chlorophenyl-
3,411	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	4-cyano-phenyl-
3,412	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	4-cyano-phenyl-
3,413	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	4-cyclopropylphenyl-
3,414	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	4-cyclopropyl-phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	D
3,415	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	4-dimethylaminophenyl-
3,416	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	4-fluorophenyl-
3,417	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	4-hydroxyphenyl-
3,418	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	4-hydroxyphenyl-
3,419	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	4-methoxycarbonylphenyl-
3,420	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	4-methyl-2-pyridyl-
3,421	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	4-methylaminophenyl-
3,422	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	4-methylsulfonylphenyl-
3,423	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	4-oxazol-5-ylphenyl-
3,424	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	4-pyridyl-
3,425	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	4-tert-butoxyphenyl-
3,426	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	4-tert-butylphenyl-
3,427	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	4-tolyl-
3,428	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	4-trifluoromethyl-3-pyridyl-
3,429	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	4-trifluoromethylphenyl-
3,430	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	5-methyl-1,3,4-oxadiazol-2-yl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	D
3,431	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	5-metyl-2-pyridyl-
3,432	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	5-metyl-3-pyridyl-
3,433	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	6-clo-3-pyridyl-
3,434	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	6-metyl-2-pyridyl-
3,435	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	pyrimidin-5-yl-
3,436	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	thiazol-2-yl-
3,437	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	thiazol-5-yl-
3,438	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	thiophen-3-yl-
3,439	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	-Ph
3,440	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	1-metyl-3-(triflometyl)pyrazol- 4-yl-
3,441	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	1-metyl-pyrazol-4-yl-
3,442	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	2-(metylsulfanyl)-4-pyridyl-
3,443	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	2-axetamido-4-pyridyl-
3,444	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	2-axetamidothiazol-5-yl-
3,445	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	2-amino-4-pyridyl-
3,446	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	2-clo-3-pyridyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	D
3,447	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	2-clo-4-pyridyl-
3,448	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	2-clothiazol-5-yl-
3,449	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	2-xyanophenyl-
3,450	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	2-xyano-phenyl-
3,451	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	2-flo-4-pyridyl-
3,452	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	2-metyl-4-pyridyl-
3,453	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	2-metyl-triazol-4-yl-
3,454	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	2-tolyl-
3,455	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	2-triflometyl-4-pyridyl-
3,456	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	2-triflometyl-phenyl-
3,457	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3,4-diflo-phenyl-
3,458	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3,5-diflo-phenyl-
3,459	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-clo-4-flo-phenyl-
3,460	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-clo-4-pyridyl-
3,461	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-xyanophenyl-
3,462	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-xyano-phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	D
3,463	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-metyl-2-pyridyl-
3,464	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-metyl-4-amino-phenyl-
3,465	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-pyridyl-
3,466	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-tolyl-
3,467	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-triflometyl-3-pyridyl-
3,468	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	3-triflometyl-phenyl-
3,469	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-(dimetylamino)-phenyl-
3,470	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-(dimetylsulfamoyl)phenyl-
3,471	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-(metylamino)-phenyl-
3,472	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-(metylsulfanyl)phenyl-
3,473	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-(tert-butoxy)-phenyl-
3,474	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-(tert-butoxycacbonylamino)-3- flo-phenyl-
3,475	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-(triflometoxy)-phenyl-
3,476	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-[etyl(metyl)carbamoyl]-3-flo- phenyl-
3,477	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-axetamidophenyl-
3,478	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-amino-3-metylphenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	D
3,479	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-amino-phenyl-
3,480	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-biphenyl-
3,481	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-cacboxyphenyl-
3,482	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-clo-3-pyridyl-
3,483	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-clo-phenyl-
3,484	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-xyanophenyl-
3,485	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-xyano-phenyl-
3,486	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-xyclopropylphenyl-
3,487	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-xyclopropyl-phenyl-
3,488	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-dimetylaminophenyl-
3,489	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-flo-phenyl-
3,490	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-hydroxyphenyl-
3,491	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-hydroxy-phenyl-
3,492	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-metoxycacbonylphenyl-
3,493	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-metyl-2-pyridyl-
3,494	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-metylaminophenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	D
3,495	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-metylsulfonylphenyl-
3,496	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-oxazol-5-ylphenyl-
3,497	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-pyridyl-
3,498	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-tert-butoxyphenyl-
3,499	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-tert-butylphenyl-
3,500	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-tolyl-
3,501	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-triflometyl-3-pyridyl-
3,502	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-triflometyl-phenyl-
3,503	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	5-metyl-1,3,4-oxadiazol-2-yl-
3,504	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	5-metyl-2-pyridyl-
3,505	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	5-metyl-3-pyridyl-
3,506	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	6-clo-3-pyridyl-
3,507	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	6-metyl-2-pyridyl-
3,508	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	pyrimidin-5-yl-
3,509	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	thiazol-2-yl-
3,510	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	thiazol-5-yl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	D
3,511	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	thiophen-3-yl-
3,512	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	-Ph
3,513	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	1-metyl-3-(triflometyl)pyrazol- 4-yl-
3,514	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	1-metyl-pyrazol-4-yl-
3,515	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	2-(metylsulfanyl)-4-pyridyl-
3,516	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	2-axetamido-4-pyridyl-
3,517	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	2-axetamidothiazol-5-yl-
3,518	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	2-amino-4-pyridyl-
3,519	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	2-clo-3-pyridyl-
3,520	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	2-clo-4-pyridyl-
3,521	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	2-clothiazol-5-yl-
3,522	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	2-xyanophenyl-
3,523	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	2-xyano-phenyl-
3,524	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	2-flo-4-pyridyl-
3,525	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	2-metyl-4-pyridyl-
3,526	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	2-metyl-triazol-4-yl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	D
3,527	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	2-tolyl-
3,528	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	2-triflometyl-4-pyridyl-
3,529	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	2-triflometyl-phenyl-
3,530	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3,4-diflo-phenyl-
3,531	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3,5-diflo-phenyl-
3,532	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-clo-4-flo-phenyl-
3,533	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-clo-4-pyridyl-
3,534	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-xyanophenyl-
3,535	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-xyano-phenyl-
3,536	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-metyl-2-pyridyl-
3,537	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-metyl-4-amino-phenyl-
3,538	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-pyridyl-
3,539	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-tolyl-
3,540	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-triflometyl-3-pyridyl-
3,541	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	3-triflometyl-phenyl-
3,542	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-(dimetylamino)-phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	D
3,543	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-(dimetylsulfamoyl)phenyl-
3,544	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-(metylamino)-phenyl-
3,545	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-(metylsulfanyl)phenyl-
3,546	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-(tert-butoxy)-phenyl-
3,547	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-(tert-butoxycacbonylamino)-3- flo-phenyl-
3,548	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-(triflometoxy)-phenyl-
3,549	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-[etyl(metyl)carbamoyl]-3-flo- phenyl-
3,550	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-axetamidophenyl-
3,551	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-amino-3-metylphenyl-
3,552	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-amino-phenyl-
3,553	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-biphenyl-
3,554	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-cacboxyphenyl-
3,555	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-clo-3-pyridyl-
3,556	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-clo-phenyl-
3,557	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-xyanophenyl-
3,558	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-xyano-phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	D
3,559	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-xyclopropylphenyl-
3,560	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-xyclopropyl-phenyl-
3,561	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-dimethylaminophenyl-
3,562	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-flo-phenyl-
3,563	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-hydroxyphenyl-
3,564	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-hydroxy-phenyl-
3,565	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-metoxycacbonylphenyl-
3,566	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-metyl-2-pyridyl-
3,567	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-metylaminophenyl-
3,568	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-metylsulfonylphenyl-
3,569	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-oxazol-5-ylphenyl-
3,570	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-pyridyl-
3,571	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-tert-butoxyphenyl-
3,572	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-tert-butylphenyl-
3,573	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-tolyl-
3,574	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-triflometyl-3-pyridyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	D
3,575	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-triflometyl-phenyl-
3,576	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	5-metyl-1,3,4-oxadiazol-2-yl-
3,577	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	5-metyl-2-pyridyl-
3,578	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	5-metyl-3-pyridyl-
3,579	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	6-clo-3-pyridyl-
3,580	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	6-metyl-2-pyridyl-
3,581	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	pyrimidin-5-yl-
3,582	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	thiazol-2-yl-
3,583	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	thiazol-5-yl-
3,584	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	thiophen-3-yl-
3,585	-Me	-Me	6-F	4-(1-metylpyrazol-3-yl)phenyl-
3,586	-Me	-Me	6-F	4-(5-metyltetrazol-1-yl)phenyl-
3,587	-Me	-Me	6-F	4-morpholinophenyl-
3,588	-Me	-Me	6-F	4-(3-metylpyrazol-1-yl)phenyl-
3,589	-Me	-Me	6-F	4-(3,5-dimetylpyrazol-1-yl)phenyl-
3,590	-Me	-Me	6-F	4-pyrazol-1-ylphenyl-
3,591	-Me	-Me	6-F	4-pyrol-1-ylphenyl-
3,592	-Me	-Me	6-F	4-(5-metyltetrahydrofuran-2-yl)phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	D
3,593	-Me	-Me	6-F	4-(5-metyl-2-furyl)phenyl-
3,594	-Me	-Me	6-F	4-oxazol-2-ylphenyl-
3,595	-Me	-Me	6-F	4-(2-metylthiazol-4-yl)phenyl-
3,596	-Me	-Me	6-F	4-(2-thienyl)phenyl-
3,597	-Me	-Me	6-F	4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenyl-
3,598	-Me	-Me	6-F	1-phenyl-4-pyrazolyl-
3,599	-Me	-Me	6-F	1-xyclopropyl-4-pyrazolyl-
3,600	-Me	-Me	6-F	4-(metylsulfanylmetyl)phenyl-
3,601	-Me	-Me	6-F	4-(isopropylsulfanylmetyl)phenyl-
3,602	-Me	-Me	6-F	4-(metylsulfamoyl)phenyl-
3,603	-Me	-Me	6-F	4-sulfamoylphenyl-
3,604	-Me	-Me	6-F	4-carbamoylphenyl-
3,605	-Me	-Me	6-Cl	4-(1-metylpyrazol-3-yl)phenyl-
3,606	-Me	-Me	6-Cl	4-(5-metyltetrazol-1-yl)phenyl-
3,607	-Me	-Me	6-Cl	4-morpholinophenyl-
3,608	-Me	-Me	6-Cl	4-(3-metylpyrazol-1-yl)phenyl-
3,609	-Me	-Me	6-Cl	4-(3,5-dimetylpyrazol-1-yl)phenyl-
3,610	-Me	-Me	6-Cl	4-pyrazol-1-ylphenyl-
3,611	-Me	-Me	6-Cl	4-pyrol-1-ylphenyl-
3,612	-Me	-Me	6-Cl	4-(5-metyltetrahydrofuran-2-yl)phenyl-
3,613	-Me	-Me	6-Cl	4-(5-metyl-2-furyl)phenyl-
3,614	-Me	-Me	6-Cl	4-oxazol-2-ylphenyl-
3,615	-Me	-Me	6-Cl	4-(2-metylthiazol-4-yl)phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	D
3,616	-Me	-Me	6-Cl	4-(2-thienyl)phenyl-
3,617	-Me	-Me	6-Cl	4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenyl-
3,618	-Me	-Me	6-Cl	1-phenyl-4-pyrazolyl-
3,619	-Me	-Me	6-Cl	1-xyclopropyl-4-pyrazolyl-
3,620	-Me	-Me	6-Cl	4-(metylsulfanylmetyl)phenyl-
3,621	-Me	-Me	6-Cl	4-(isopropylsulfanylmetyl)phenyl-
3,622	-Me	-Me	6-Cl	4-(metylsulfamoyl)phenyl-
3,623	-Me	-Me	6-Cl	4-sulfamoylphenyl-
3,624	-Me	-Me	6-Cl	4-carbamoylphenyl-
3,625	-Me	-Cl	6-F	4-(1-metylpyrazol-3-yl)phenyl-
3,626	-Me	-Cl	6-F	4-(5-metyltetrazol-1-yl)phenyl-
3,627	-Me	-Cl	6-F	4-morpholinophenyl-
3,628	-Me	-Cl	6-F	4-(3-metylpyrazol-1-yl)phenyl-
3,629	-Me	-Cl	6-F	4-(3,5-dimetylpyrazol-1-yl)phenyl-
3,630	-Me	-Cl	6-F	4-pyrazol-1-ylphenyl-
3,631	-Me	-Cl	6-F	4-pyrol-1-ylphenyl-
3,632	-Me	-Cl	6-F	4-(5-metyltetrahydrofuran-2-yl)phenyl-
3,633	-Me	-Cl	6-F	4-(5-metyl-2-furyl)phenyl-
3,634	-Me	-Cl	6-F	4-oxazol-2-ylphenyl-
3,635	-Me	-Cl	6-F	4-(2-metylthiazol-4-yl)phenyl-
3,636	-Me	-Cl	6-F	4-(2-thienyl)phenyl-
3,637	-Me	-Cl	6-F	4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenyl-
3,638	-Me	-Cl	6-F	1-phenyl-4-pyrazolyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	D
3,639	-Me	-Cl	6-F	1-xyclopropyl-4-pyrazolyl-
3,640	-Me	-Cl	6-F	4-(metylsulfanylmetyl)phenyl-
3,641	-Me	-Cl	6-F	4- (isopropylsulfanylmetyl)phenyl-
3,642	-Me	-Cl	6-F	4-(metylsulfamoyl)phenyl-
3,643	-Me	-Cl	6-F	4-sulfamoylphenyl-
3,644	-Me	-Cl	6-F	4-carbamoylphenyl-
3,645	-Me	-Cl	6-Cl	4-(1-metylpyrazol-3-yl)phenyl-
3,646	-Me	-Cl	6-Cl	4-(5-metyltetrazol-1-yl)phenyl-
3,647	-Me	-Cl	6-Cl	4-morpholinophenyl-
3,648	-Me	-Cl	6-Cl	4-(3-metylpyrazol-1-yl)phenyl-
3,649	-Me	-Cl	6-Cl	4-(3,5-dimetylpyrazol-1-yl)phenyl-
3,650	-Me	-Cl	6-Cl	4-pyrazol-1-ylphenyl-
3,651	-Me	-Cl	6-Cl	4-pyrol-1-ylphenyl-
3,652	-Me	-Cl	6-Cl	4-(5-metyltetrahydrofuran-2-yl)phenyl-
3,653	-Me	-Cl	6-Cl	4-(5-metyl-2-furyl)phenyl-
3,654	-Me	-Cl	6-Cl	4-oxazol-2-ylphenyl-
3,655	-Me	-Cl	6-Cl	4-(2-metylthiazol-4-yl)phenyl-
3,656	-Me	-Cl	6-Cl	4-(2-thienyl)phenyl-
3,657	-Me	-Cl	6-Cl	4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenyl-
3,658	-Me	-Cl	6-Cl	1-phenyl-4-pyrazolyl-
3,659	-Me	-Cl	6-Cl	1-xyclopropyl-4-pyrazolyl-
3,660	-Me	-Cl	6-Cl	4-(metylsulfanylmetyl)phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	D
3,661	-Me	-Cl	6-Cl	4-(isopropylsulfanylmetyl)phenyl-
3,662	-Me	-Cl	6-Cl	4-(metylsulfamoyl)phenyl-
3,663	-Me	-Cl	6-Cl	4-sulfamoylphenyl-
3,664	-Me	-Cl	6-Cl	4-carbamoylphenyl-
3,665	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-(1-methylpyrazol-3-yl)phenyl-
3,666	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-(5-metyltetrazol-1-yl)phenyl-
3,667	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-morpholinophenyl-
3,668	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-(3-methylpyrazol-1-yl)phenyl-
3,669	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)phenyl-
3,670	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-pyrazol-1-ylphenyl-
3,671	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-pyrol-1-ylphenyl-
3,672	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-(5-metyltetrahydrofuran-2-yl)phenyl-
3,673	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-(5-metyl-2-furyl)phenyl-
3,674	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-oxazol-2-ylphenyl-
3,675	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-(2-methylthiazol-4-yl)phenyl-
3,676	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-(2-thienyl)phenyl-
3,677	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	D
3,678	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	1-phenyl-4-pyrazolyl-
3,679	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	1-xyclopropyl-4-pyrazolyl-
3,680	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-(metylsulfanylmetyl)phenyl-
3,681	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4- (isopropylsulfanylmetyl)phenyl-
3,682	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-(metylsulfamoyl)phenyl-
3,683	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-sulfamoylphenyl-
3,684	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-F	4-carbamoylphenyl-
3,685	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	4-(1-metylpyrazol-3-yl)phenyl-
3,686	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	4-(5-metyltetrazol-1-yl)phenyl-
3,687	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	4-morpholinophenyl-
3,688	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	4-(3-metylpyrazol-1-yl)phenyl-
3,689	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	4-(3,5-dimetylpyrazol-1- yl)phenyl-
3,690	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	4-pyrazol-1-ylphenyl-
3,691	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	4-pyrol-1-ylphenyl-
3,692	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	4-(5-metyltetrahydrofuran-2- yl)phenyl-
3,693	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	4-(5-metyl-2-furyl)phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	D
3,694	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	4-oxazol-2-ylphenyl-
3,695	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	4-(2-methylthiazol-4-yl)phenyl-
3,696	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	4-(2-thienyl)phenyl-
3,697	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenyl-
3,698	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	1-phenyl-4-pyrazolyl-
3,699	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	1-xyclopropyl-4-pyrazolyl-
3,700	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	4-(metylsulfanylmetyl)phenyl-
3,701	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	4- (isopropylsulfanylmetyl)phenyl-
3,702	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	4-(metylsulfamoyl)phenyl-
3,703	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	4-sulfamoylphenyl-
3,704	-CH ₂ - C≡CH	-Me	6-Cl	4-carbamoylphenyl-
3,705	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-(1-methylpyrazol-3-yl)phenyl-
3,706	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-(5-metyltetrazol-1-yl)phenyl-
3,707	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-morpholinophenyl-
3,708	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-(3-methylpyrazol-1-yl)phenyl-
3,709	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-(3,5-dimethylpyrazol-1- yl)phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	D
3,710	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-pyrazol-1-ylphenyl-
3,711	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-pyrol-1-ylphenyl-
3,712	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-(5-metyltetrahydrofuran-2-yl)phenyl-
3,713	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-(5-metyl-2-furyl)phenyl-
3,714	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-oxazol-2-ylphenyl-
3,715	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-(2-metylthiazol-4-yl)phenyl-
3,716	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-(2-thienyl)phenyl-
3,717	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenyl-
3,718	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	1-phenyl-4-pyrazolyl-
3,719	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	1-xyclopropyl-4-pyrazolyl-
3,720	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-(metylsulfanylmetyl)phenyl-
3,721	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-(isopropylsulfanylmetyl)phenyl-
3,722	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-(metylsulfamoyl)phenyl-
3,723	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-sulfamoylphenyl-
3,724	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-F	4-carbamoylphenyl-
3,725	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-(1-metylpyrazol-3-yl)phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	D
3,726	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-(5-metyltetrazol-1-yl)phenyl-
3,727	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-morpholinophenyl-
3,728	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-(3-metylpyrazol-1-yl)phenyl-
3,729	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-(3,5-dimetylpyrazol-1-yl)phenyl-
3,730	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-pyrazol-1-ylphenyl-
3,731	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-pyrol-1-ylphenyl-
3,732	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-(5-metyltetrahydrofuran-2-yl)phenyl-
3,733	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-(5-metyl-2-furyl)phenyl-
3,734	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-oxazol-2-ylphenyl-
3,735	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-(2-metylthiazol-4-yl)phenyl-
3,736	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-(2-thienyl)phenyl-
3,737	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenyl-
3,738	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	1-phenyl-4-pyrazolyl-
3,739	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	1-xyclopropyl-4-pyrazolyl-
3,740	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-(metylsulfanylmetyl)phenyl-
3,741	-CH ₂ - C≡CH	-Cl	6-Cl	4-(isopropylsulfanylmetyl)phenyl-

Hợp chất số	R ¹	R ²	X	D
3,742	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	4-(metylsulfamoyl)phenyl-
3,743	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	4-sulfamoylphenyl-
3,744	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	4-carbamoylphenyl-

Bảng C-2 cung cấp 744 hợp chất từ C-2,001 đến C-2,744 có công thức (I) trong đó G là -H, W là (E)-CH=CH-, Y là 3-xyclopropyl, và R¹, R², X, Y, và D là như được xác định cho hợp chất số từ 3,001 đến 3,744 một cách tương ứng trong bảng 3 trên đây.

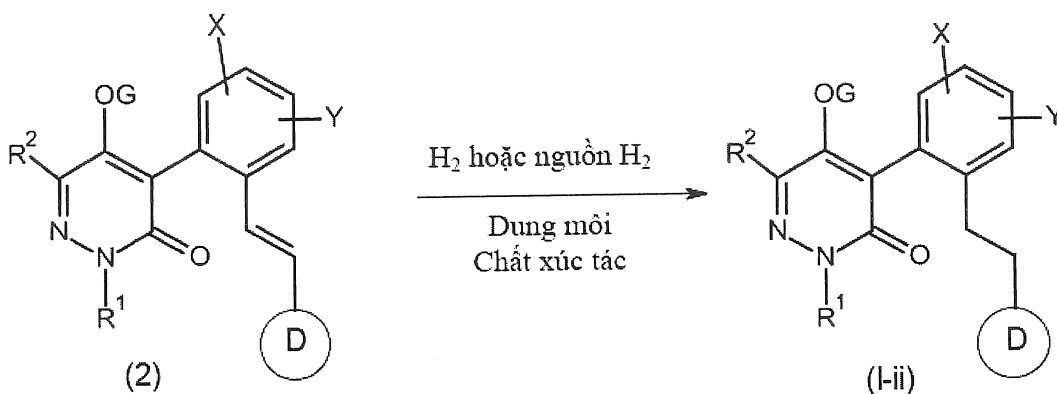
Bảng C-3 cung cấp 744 hợp chất từ C-3,001 đến C-3,744 có công thức (I) trong đó G là -(C=O)iPr, W là -CH₂-CH₂-, Y là 3-xyclopropyl, và R¹, R², X, và D là như được xác định cho hợp chất số từ 3,001 đến 3,744 một cách tương ứng trong bảng 3 trên đây.

Bảng C-4 cung cấp 744 hợp chất từ C-4,001 đến C-4,744 có công thức (I) trong đó G là -(C=O)iPr, W là (E)-CH=CH-, Y là 3-xyclopropyl, và R¹, R², X, và D là như được xác định cho hợp chất số từ 3,001 đến 3,744 một cách tương ứng trong bảng 3 trên đây.

Các hợp chất theo sáng chế có thể được điều chế theo các sơ đồ sau đây, trong đó các nhóm thế R¹, R², R³, R⁴, R⁵, R⁶, R⁸, R⁹, R¹⁰, R¹¹, R¹², R¹³, R¹⁴, R¹⁵, R¹⁶, W, D, Dp, G, X, Y, và m có (trừ khi được nêu rõ khác đi) các định nghĩa được mô tả phía trên.

Các hợp chất nhất định (I-ii) theo sáng chế có thể được điều chế từ các hợp chất (2) như thể hiện trong sơ đồ phản ứng 1. Các hợp chất (I-ii) là các hợp chất có công thức (I) trong đó W là -CH₂-CH₂-.

Sơ đồ phản ứng 1



Các hợp chất (I-ii) có thể được điều chế bằng quá trình hydro hóa có xúc tác của các hợp chất (2) bằng khí hydro trong dung môi thích hợp [chẳng hạn như tetrahydrofuran, metanol, etanol, axit axetic hoặc etyl axetat] trong sự có mặt của chất xúc tác thích hợp [chẳng hạn như Pd/C, Pd/CaCO₃, Rh/Al₂CO₃ hoặc niken xốp] ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ -10 đến 100°C.

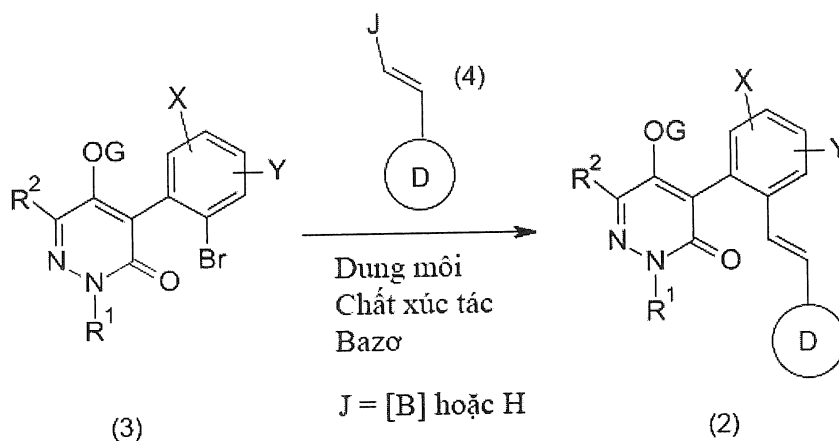
Mặt khác, các hợp chất (I-ii) cũng có thể được điều chế bằng quá trình hydro hóa chuyển xúc tác của các hợp chất (2) bằng việc xử lý với nguồn hydro thích hợp trong dung môi thích hợp trong sự có mặt của chất xúc tác thích hợp ở nhiệt độ giữa -10 và 100°C. Các ví dụ của các hệ thống thích hợp là tetrahydroxydiboron trong diclometan/nước hoặc các hỗn hợp diclometan/metanol trong sự có mặt của Pd/C, Pd(OAc)₂ hoặc Pd(OH)₂/C (*J. Am. Chem. Soc.*, 2016, 138, 6107-6110) hoặc, diethyl 1,4-dihydro-2,6-dimethyl-3,5-pyridindicarboxylat trong etanol trong sự có mặt của Pd/C (*Tetrahedron Letters*, 2009, 50, 1026).

Các hợp chất (2) có thể được điều chế từ các hợp chất (3) và các hợp chất (4) như được thể hiện trong sơ đồ phản ứng 2, theo quy trình Suzuki hoặc quy trình Heck được mô tả dưới đây. Khi dùng quy trình Suzuki, các hợp chất (4) là các hợp chất bo hữu cơ chẳng hạn như axit boronic, boronic este hoặc muối trifloborat kali. Khi dùng quy trình Heck, các hợp chất (4) là styren.

Mặt khác, các hợp chất (I-ii) cũng có thể được điều chế bằng việc khử với diimit được tạo ra tại chỗ từ chất tiền thân thích hợp trong dung môi thích hợp ở nhiệt độ giữa -10 và 200°C. Các ví dụ của các chất hoạt động thích hợp cho việc tạo ra diimit bao gồm các hydrazit arylsulfonyl được thể chẳng hạn như 2,4,6-triisopropylbenzensulfonyl hydrazit, tùy chọn trong sự có mặt của bazơ thích hợp. Các ví dụ của các bazơ thích hợp bao gồm trietylamin, diisopropyletylamin, kali cacbonat và natri cacbonat. Các dung

môi thích hợp bao gồm tetrahydrofuran, 1,4-dioxan, etyl axetat, axetonitril và dimetylformamit.

Sơ đồ phản ứng 2



Quy trình Suzuki

Các hợp chất (2) có thể được điều chế bằng cách xử lý các hợp chất (3) bằng các hợp chất (4) trong sự có mặt của bazơ thích hợp và chất xúc tác thích hợp trong dung môi thích hợp ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ 10 đến 150°C. Các ví dụ của bazơ thích hợp bao gồm kali cacbonat, kali photphat, natri cacbonat, natri bicacbonat và kali florua. Các ví dụ của các chất xúc tác thích hợp bao gồm phức 1,1' - bis(diphenylphosphino)ferocen]diclopaladi(II) diclometan $[PdCl_2(dppf).DCM]$, tetrakis(triphenylphosphin)paladi(0) $[Pd(PPh_3)_4]$, và hệ thống xúc tác được tạo thành tại chỗ từ hỗn hợp của paladi(II)axetat và triphenylphosphin. Các ví dụ của các dung môi thích hợp bao gồm nước, 1,4-dioxan, tetrahydrofuran, axetonitril và toluen. Nhiều hợp chất (4) là sẵn có thương mại [ví dụ, axit *trans*-2-(4-biphenyl)vinylboronic] hoặc có thể được tạo ra từ các phương pháp đã biết. Các ví dụ về các hợp chất (3) đặc biệt hữu dụng trong quy trình Suzuki là isobutyryl este (3-i) trong đó G là isobutyryl.

Người có trình độ trung bình trong lĩnh vực sẽ hiểu rõ rằng các điều kiện của quy trình Suzuki có khả năng phân cắt nhóm este, do vậy sơ đồ phản ứng 2 cũng có thể mô tả phản ứng trong đó nguyên liệu ban đầu (3) chứa gốc este [sao cho G là nhóm axyl], nhưng sản phẩm (2) thì không [sao cho G là hydro].

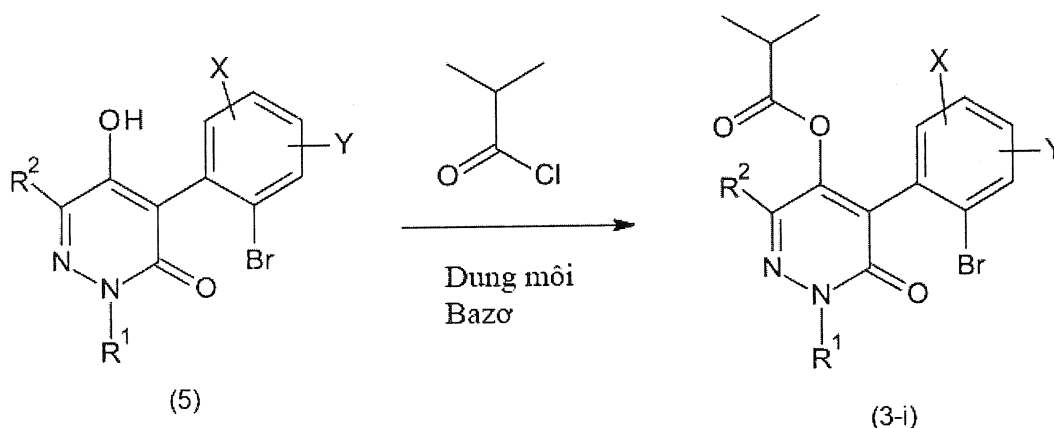
Quy trình Heck

Các hợp chất (2) có thể được điều chế bằng cách xử lý các hợp chất (3) bằng các hợp chất (4) trong sự có mặt của bazơ thích hợp và chất xúc tác thích hợp ở nhiệt độ

nằm trong khoảng từ 10 đến 150°C. Dung môi khác có thể được bao gồm tùy chọn. Các ví dụ về bazơ thích hợp bao gồm triethylamin, morpholin, *N*-metylmorpholin, diisopropyletylamin và pyridin. Các ví dụ của các chất xúc tác thích hợp bao gồm tetrakis(triphenylphosphin)paladi(0) [Pd(PPh₃)₄], hệ thống xúc tác được tạo thành tại chỗ từ hỗn hợp của paladi(II)axetat và triphenylphosphin, hệ thống xúc tác được tạo thành tại chỗ từ hỗn hợp của tris(dibenzylidenaxeton)dipaladi(0) và tri-*tert*-butylphosphonium tetrafloroborat và hệ thống xúc tác được tạo thành tại chỗ từ chất tiền xúc tác paladaxycle chẳng hạn như clo[(tri-*tert*-butylphosphin)-2-(2-aminobiphenyl)] paladi(II). Các ví dụ về dung môi khác tùy chọn bao gồm 1,4-dioxan, tetrahydrofuran, axetonitril và toluen. Nhiều hợp chất (4) là sẵn có thương mại [chẳng hạn như 4-xyanostyren] hoặc có thể được tạo ra từ các phương pháp đã biết. Các ví dụ về các hợp chất (3) đặc biệt hữu dụng trong quy trình Heck là các isobutyryl este (3-i) trong đó G là isobutyryl.

Các hợp chất (3-i) có thể được điều chế từ các hợp chất (5) như thể hiện trong sơ đồ phản ứng 3.

Sơ đồ phản ứng 3

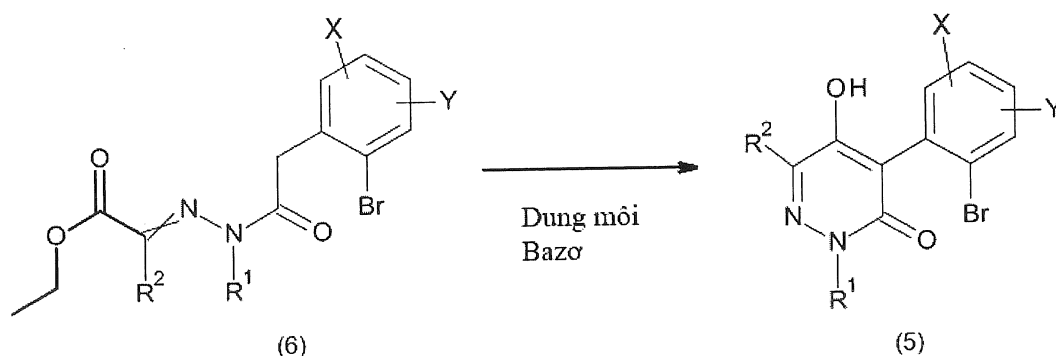


Các hợp chất (3-i) có thể được điều chế bằng cách xử lý các hợp chất (5) bằng isobutyryl clorua trong dung môi thích hợp [chẳng hạn như diclometan, axetonitril hoặc toluen] trong sự có mặt của bazơ thích hợp [chẳng hạn như triethylamin, diisopropyletylamin hoặc pyridin] ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ -10 đến 60°C. Chất xúc tác [chẳng hạn như 4-(dimetylamino)pyridin] có thể được bao gồm tùy chọn.

Các hợp chất (5) có thể được điều chế từ các hợp chất (6) như thể hiện trong sơ đồ phản ứng 4, bằng cách gia nhiệt các hợp chất (6) với bazơ (chẳng hạn như 1,8-diazabicyclo[5.4.0]undec-7-en, natri hexametyldisilazit hoặc liti hexametyldisilazit)

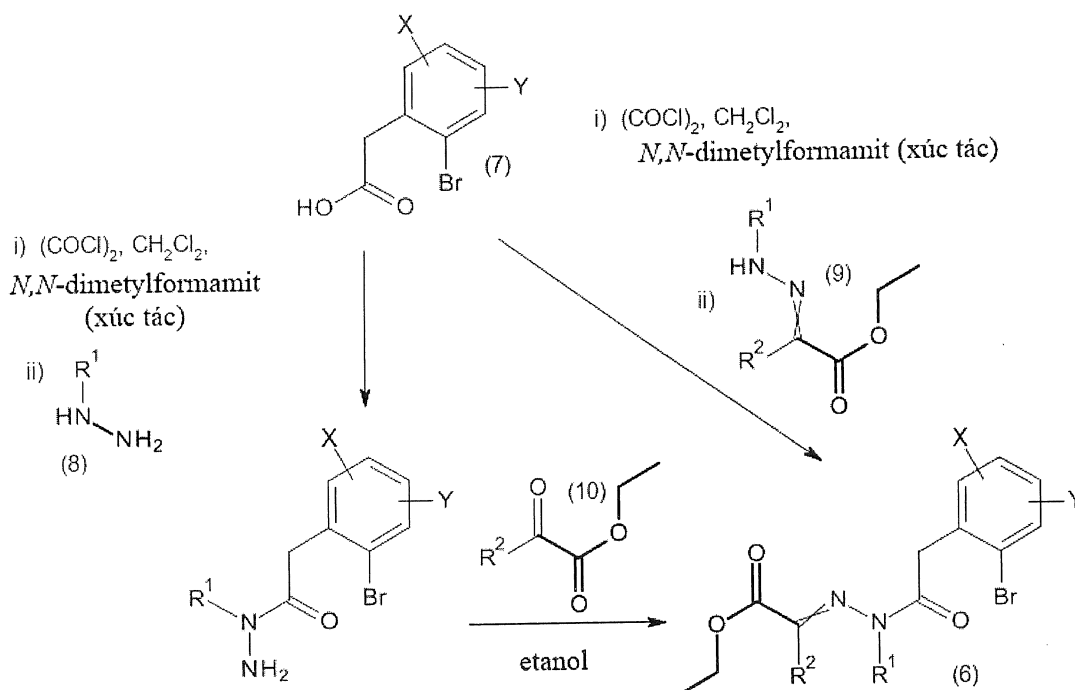
trong dung môi [chẳng hạn như axetonitril, *N,N*-dimetylformamit hoặc toluen] ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ 50 đến 200°C. Việc gia nhiệt thông thường hoặc việc gia nhiệt bằng vi sóng có thể được sử dụng.

Sơ đồ phản ứng 4



Các hợp chất (6) có thể được điều chế từ axit phenylaxetic (7) như thể hiện trong sơ đồ phản ứng 5.

Sơ đồ phản ứng 5

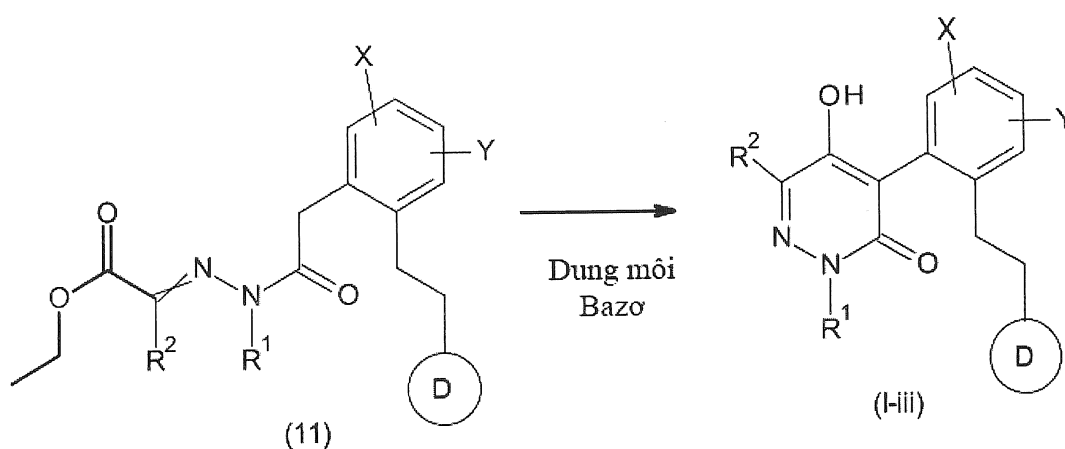


Theo sơ đồ phản ứng 5, ví dụ của các hydrazin (8) là metylhydrazin, và ví dụ của các ketoeste (10) là etyl pyruvat. Ví dụ của hydrazon (9) là etyl(2*E/Z*)-2-(metylhydrazono)propanoat, được điều chế theo các phương pháp được mô tả trong đơn sáng chế PCT WO2016/008816. Các ví dụ về axit phenylaxetic (7) là axit (2-brom-6-

flo-phenyl)axetic, mà có thể được tổng hợp theo sơ đồ phản ứng 10. Ví dụ khác về axit phenylaxetic (7) là axit (2-brom-3-clo-6-flo-phenyl)axetic, mà có thể được tổng hợp theo sơ đồ phản ứng 11.

Các hợp chất nhất định (I-iii) theo sáng chế có thể được điều chế từ các hợp chất (11) như thể hiện trong sơ đồ phản ứng 6 hoặc từ các hợp chất (I-iv) như thể hiện trong sơ đồ phản ứng 12. Các hợp chất (I-iii) là các hợp chất có công thức (I) trong đó W là -CH₂-CH₂- và G là hydro.

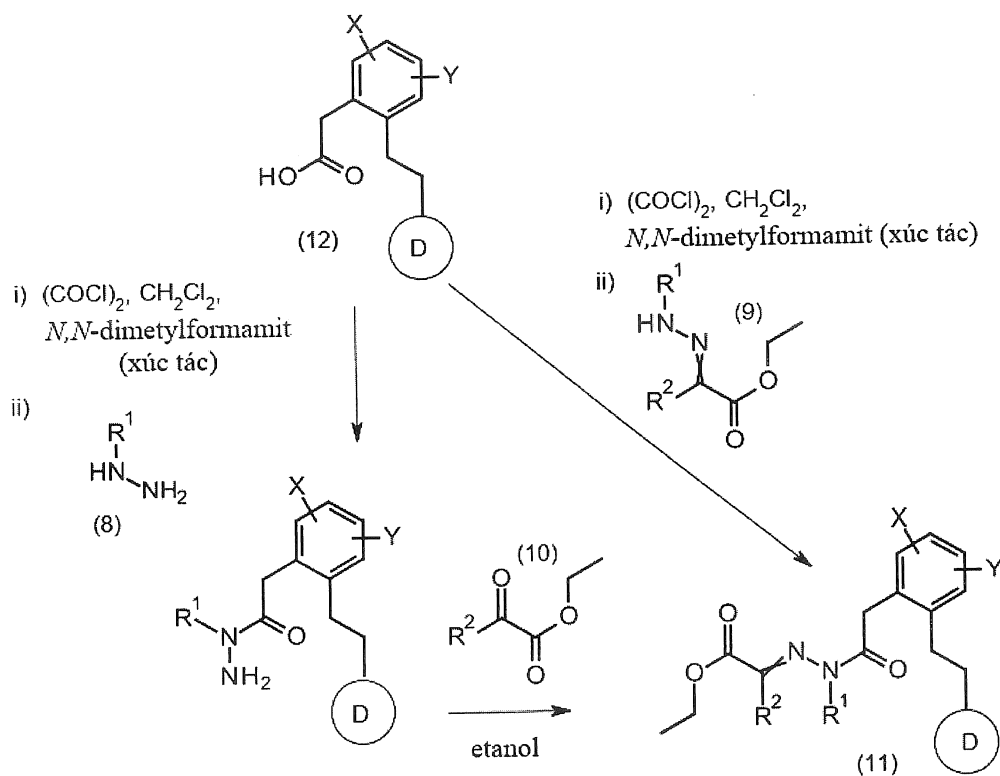
Sơ đồ phản ứng 6



Các hợp chất (I-iii) có thể được điều chế bằng cách gia nhiệt các hợp chất (11) với bazơ (chẳng hạn như 1,8-diazabicyclo[5.4.0]undec-7-en, natri hexametyldisilazit hoặc liti hexametyldisilazit) trong dung môi [chẳng hạn như axetonitril, *N,N*-dimetylformamit hoặc toluen] ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ 50 đến 200°C. Việc gia nhiệt thông thường hoặc việc gia nhiệt bằng vi sóng có thể được sử dụng.

Các hợp chất (11) có thể được điều chế từ các hợp chất (12) như được thể hiện trên sơ đồ phản ứng 7 dưới đây.

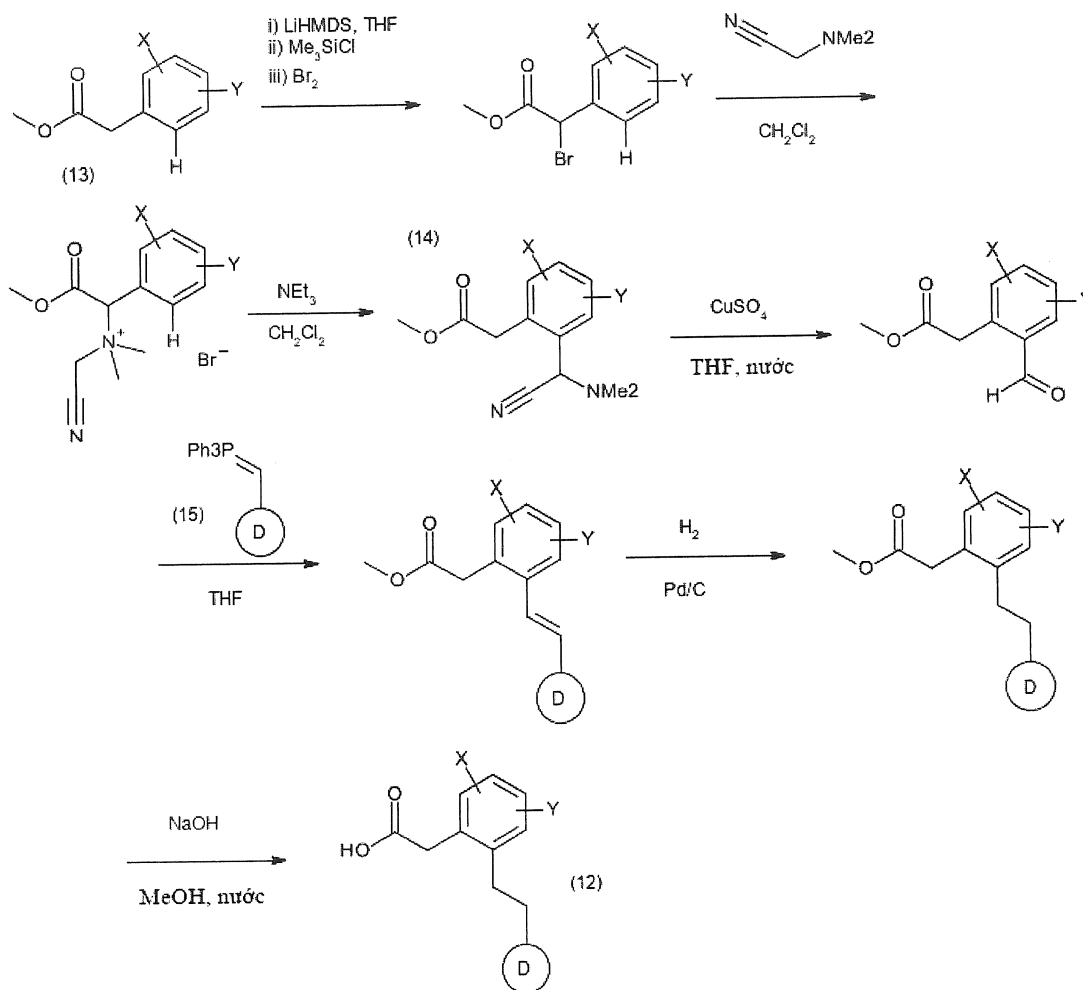
Sơ đồ phản ứng 7



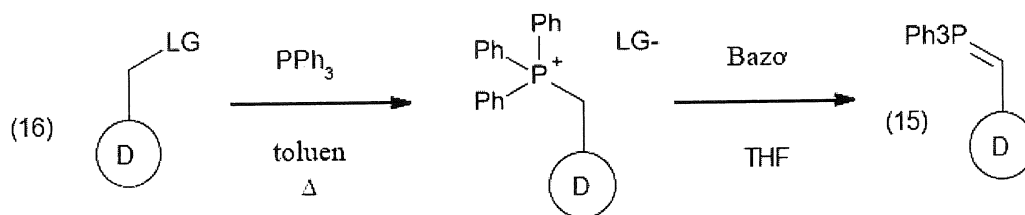
Các hợp chất (12) có thể được điều chế từ các hợp chất (13) như thể hiện trong sơ đồ phản ứng 8. Nhiều hợp chất (13) sẵn có thương mại [chẳng hạn như metyl 2-phenylaxetat và metyl 2-(2-flophenyl)axetat].

Đối với sơ đồ phản ứng 8, các phosphoran (15) có thể được tạo ra theo sơ đồ phản ứng 9.

Sơ đồ phản ứng 8

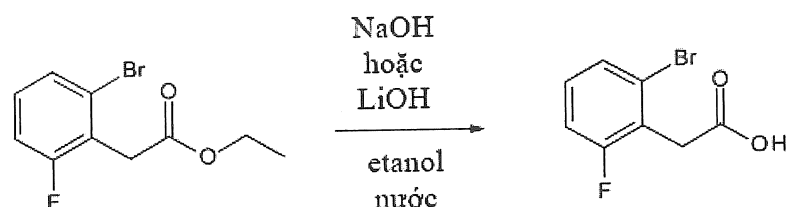


Sơ đồ phản ứng 9



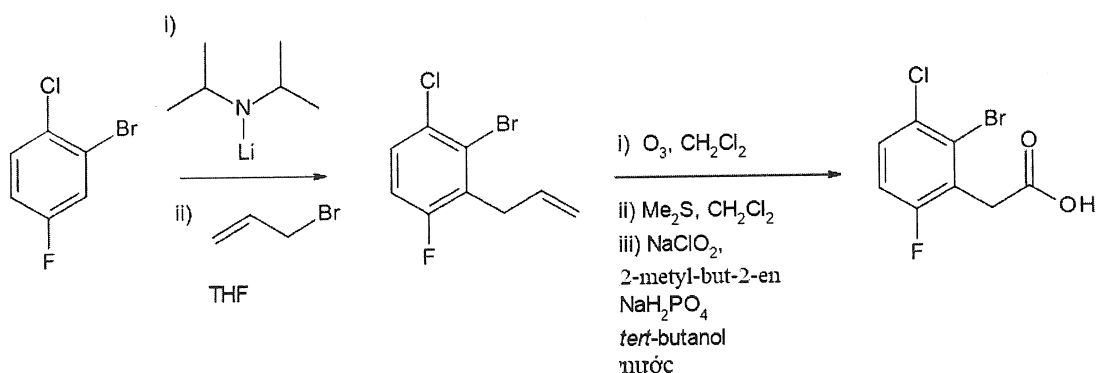
Đối với sơ đồ phản ứng 9, các ví dụ của bazơ thích hợp là natri hydrua, natri hexametyldisilazit và kali *tert*-butoxit. Các hợp chất (16) là chất ưa điện tử trong đó LG là nhóm rời chuyển [chẳng hạn như clorua, bromua, iodua, tosylat hoặc mesylat]. Nhiều hợp chất (16) sẵn có thương mại [chẳng hạn như 4-clobenzyl bromua hoặc 2-clo-5-clometylthiazol].

Sơ đồ phản ứng 10



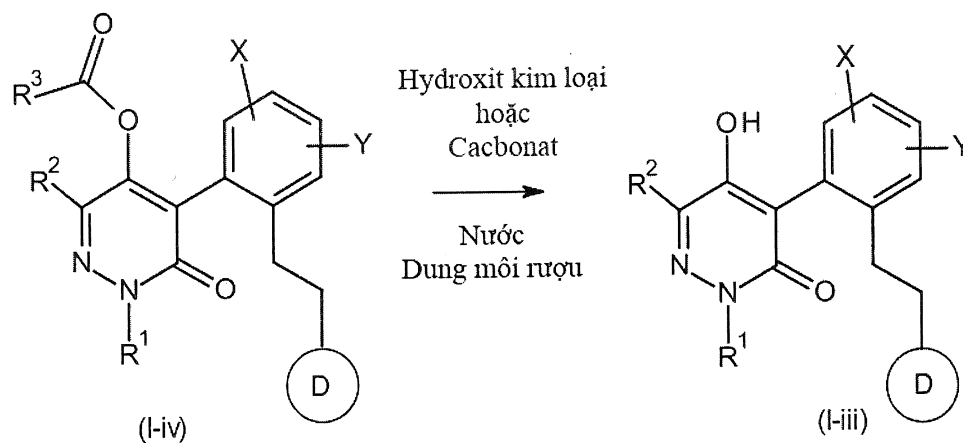
Đối với sơ đồ phản ứng 10, etyl este của axit (2-brom-6-flo-phenyl)axetic có thể được điều chế như được mô tả trong Lundgren *et al.* *JACS* 2016, 138, 13826-13829.

Sơ đồ phản ứng 11



Theo sơ đồ phản ứng 11, 2-brom-1-clo-4-flo-benzen là sẵn có thương mại.

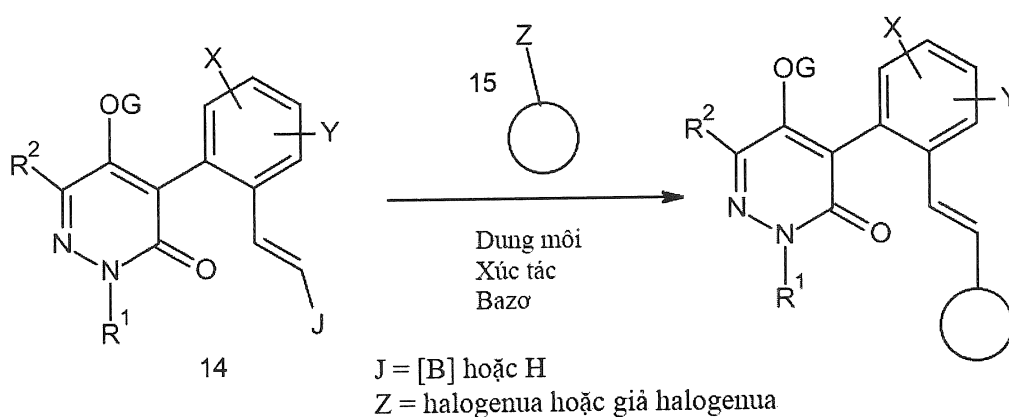
Sơ đồ phản ứng 12



Các hợp chất (I-iii) có thể được điều chế bằng việc xử lý các hợp chất (I-iv) với hydroxit kim loại [chẳng hạn như natri hydroxit, liti hydroxit hoặc kali hydroxit] trong hỗn hợp của nước và dung môi thích hợp [chẳng hạn như metanol, etanol hoặc tetrahydrofuran]; hoặc bằng việc xử lý các hợp chất (I-iv) với cacbonat kim loại [chẳng hạn như natri cacbonat hoặc kali cacbonat] trong dung môi rượu [chẳng hạn như metanol hoặc etanol] ở nhiệt độ giữa 0°C và 100°C. Các hợp chất (I-iv) là các hợp chất có công thức (I) trong đó W là -CH₂-CH₂- và G là C(O)R³.

Các hợp chất (2) có thể được điều chế từ các hợp chất (14) và các hợp chất (15) như được thể hiện trong sơ đồ phản ứng 13, theo quy trình Suzuki hoặc quy trình Heck được mô tả dưới đây. Khi dùng quy trình Suzuki, các hợp chất (14) là các hợp chất bo hữu cơ chẳng hạn như axit boronic, boronic este hoặc muối trifloborat kali và các hợp chất (15) là các hợp chất halogenua hoặc giả halogenua chẳng hạn như clorua, bromua, iodua hoặc triflat. Khi sử dụng quy trình Heck, các hợp chất (14) là các styren và các hợp chất (15) là các hợp chất halogenua hoặc giả halogenua chẳng hạn như các clorua, các bromua, các iodua hoặc các triflat.

Sơ đồ phản ứng 13



Quy trình Suzuki

Các hợp chất (2) có thể được điều chế bằng cách xử lý các hợp chất (14) bằng các hợp chất (15) trong sự có mặt của bazơ thích hợp và chất xúc tác thích hợp trong dung môi thích hợp ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ 10 đến 150°C. Các ví dụ của bazơ thích hợp bao gồm kali cacbonat, kali photphat, natri cacbonat, natri bicacbonat và kali florua. Các ví dụ về chất xúc tác thích hợp bao gồm phức hợp 1,1' - bis(diphenylphosphino)feroxen]diclopaladi(II) diclometan [PdCl₂(dppf).DCM], tetrakis(triphenylphosphin)paladi(0) [Pd(PPh₃)₄], và hệ thống xúc tác được tạo thành tại chỗ từ hỗn hợp của paladi(II)axetat và triphenylphosphin. Các ví dụ của các dung môi thích hợp bao gồm nước 1,4-dioxan, tetrahydrofuran, axetonitril và toluen. Nhiều hợp chất (15) là sẵn có thương mại hoặc có thể được tạo ra bằng các phương pháp đã biết. Các ví dụ về các hợp chất (14) đặc biệt hữu dụng trong quy trình Suzuki là isobutyryl este (14-i) trong đó G là isobutyryl.

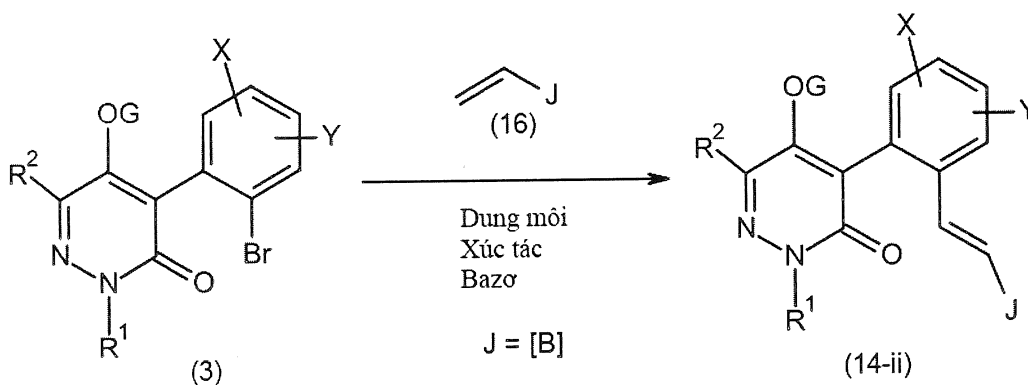
Người có trình độ trung bình trong lĩnh vực sẽ hiểu rằng các điều kiện của quy trình Suzuki có khả năng phân cắt nhóm este, do vậy sơ đồ phản ứng 13 cũng có thể mô tả phản ứng trong đó nguyên liệu ban đầu (14) chứa gốc este [sao cho G là nhóm axyl], nhưng sản phẩm (2) thì không [sao cho G là hydro].

Quy trình Heck

Các hợp chất (2) có thể được điều chế bằng cách xử lý các hợp chất (14) bằng các hợp chất (15) trong sự có mặt của bazơ thích hợp và chất xúc tác thích hợp ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ 10 đến 150°C. Dung môi khác có thể được bao gồm tùy chọn. Các ví dụ về bazơ thích hợp bao gồm triethylamin, morpholin, *N*-metylmorpholin, diisopropyletylamin và pyridin. Các ví dụ của các chất xúc tác thích hợp bao gồm tetrakis(triphenylphosphin)paladi(0) [Pd(PPh₃)₄], hệ thống xúc tác được tạo thành tại chỗ từ hỗn hợp của paladi(II)axetat và triphenylphosphin, hệ thống xúc tác được tạo thành tại chỗ từ hỗn hợp của tris(dibenzylidenaxeton)dipaladi(0) và tri-*tert*butylphosphonium tetrafloroborat và hệ thống xúc tác được tạo thành tại chỗ từ chất tiền xúc tác paladaxycle chẳng hạn như clo[(tri-*tert*-butylphosphin)-2-(2-aminobiphenyl)] paladi(II). Các ví dụ về dung môi khác tùy chọn bao gồm 1,4-dioxan, tetrahydrofuran, axetonitril và toluen. Nhiều hợp chất (15) là sẵn có thương mại hoặc có thể được tạo ra bằng các phương pháp đã biết. Các ví dụ về các hợp chất (14) đặc biệt hữu dụng trong quy trình Heck là các isobutyryl este (14-i) trong đó G là isobutyryl.

Các hợp chất (14-ii), trong đó J là các loại bo hữu cơ chẳng hạn như boronic este, có thể được điều chế từ các hợp chất (3) và các hợp chất (16) như thể hiện trong sơ đồ phản ứng 14.

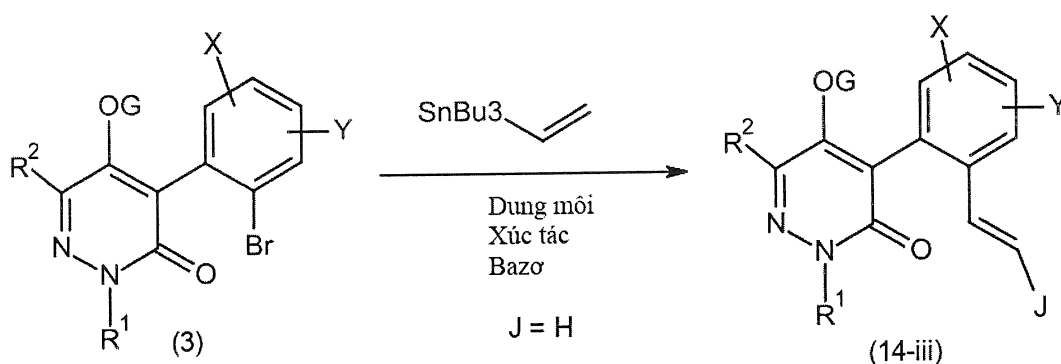
Sơ đồ phản ứng 14



Các hợp chất (14-ii) có thể được điều chế bằng cách xử lý các hợp chất (3) bằng các hợp chất (16) trong sự có mặt của bazơ thích hợp và chất xúc tác thích hợp ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ 10 đến 150°C. Dung môi khác có thể được bao gồm tùy chọn. Các ví dụ về bazơ thích hợp bao gồm triethylamin, morpholin, *N*-metylmorpholin, diisopropyletylamin và pyridin. Các ví dụ của các chất xúc tác thích hợp là tetrakis(triphenylphosphin)paladi(0) [Pd(PPh₃)₄], hệ thống xúc tác được tạo thành tại chỗ từ hỗn hợp của paladi(II)axetat và triphenylphosphin, và hệ thống xúc tác được tạo thành tại chỗ từ hỗn hợp của tris(dibenzylidenaxeton)dipaladi(0) và tri-*tert*butylphosphonium tetrafloroborat. Các ví dụ về dung môi khác tùy chọn bao gồm 1,4-dioxan, tetrahydrofuran, axetonitril và toluen. Nhiều hợp chất (16) sẵn có thương mại, chẳng hạn như MIDA este của axit vinylboronic hoặc pinacol este của axit vinylboronic, hoặc có thể được tạo ra bằng các phương pháp đã biết. Các ví dụ về các hợp chất (3) đặc biệt hữu dụng trong quy trình Heck là các isobutyryl este (3-i) trong đó G là isobutyryl.

Các hợp chất (14-iii), trong đó J là hydro, có thể được điều chế từ các hợp chất (3) như thể hiện trong sơ đồ phản ứng 15.

Sơ đồ phản ứng 15

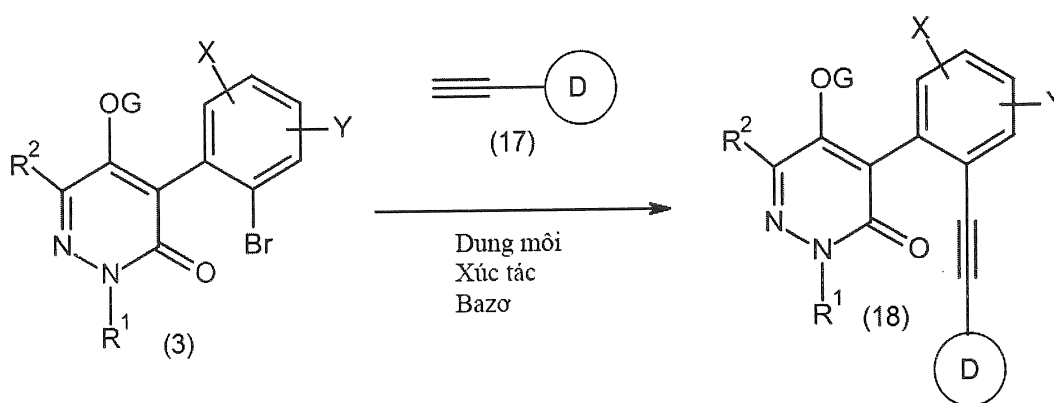


Các hợp chất (14-iii) có thể được điều chế bằng cách xử lý các hợp chất (3) bằng tributyl(vinyl)stanan, tùy chọn trong sự có mặt của bazơ thích hợp, trong sự có mặt của chất xúc tác thích hợp ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ 10 đến 150°C trong dung môi thích hợp. Các ví dụ về bazơ tùy chọn bao gồm triethylamin, morpholin, *N*-metylmorpholin, diisopropyletylamin và pyridin. Các ví dụ của các chất xúc tác thích hợp bao gồm phức 1,1'-bis(diphenylphosphino)feroxen]diclopaladi(II) diclometan [PdCl₂(dppf).DCM], tetrakis(triphenylphosphin)paladi(0) [Pd(PPh₃)₄], hệ thống xúc tác được tạo thành tại chỗ từ hỗn hợp của paladi(II)axetat và triphenylphosphin, hệ thống

xúc tác được tạo thành tại chỗ từ hỗn hợp của tris(dibenzylidenaxeton)dipaladi(0) và tri-*tert*butylphosphonium tetrafloroborat, và hệ thống xúc tác được tạo thành tại chỗ từ chất tiền xúc tác paladaxycle chẳng hạn như clo[(tri-*tert*-butylphosphin)-2-(2-aminobiphenyl)] paladi(II). Các ví dụ về dung môi thích hợp bao gồm 1,4-dioxan, tetrahydrofuran, axetonitril và toluen. Các ví dụ về các hợp chất (3) đặc biệt hữu dụng là isobutyryl este (3-i) trong đó G là isobutyryl.

Các hợp chất (18) có thể được điều chế từ các hợp chất (3) thông qua phản ứng Sonogashira như thể hiện trong sơ đồ phản ứng 16.

Sơ đồ phản ứng 16



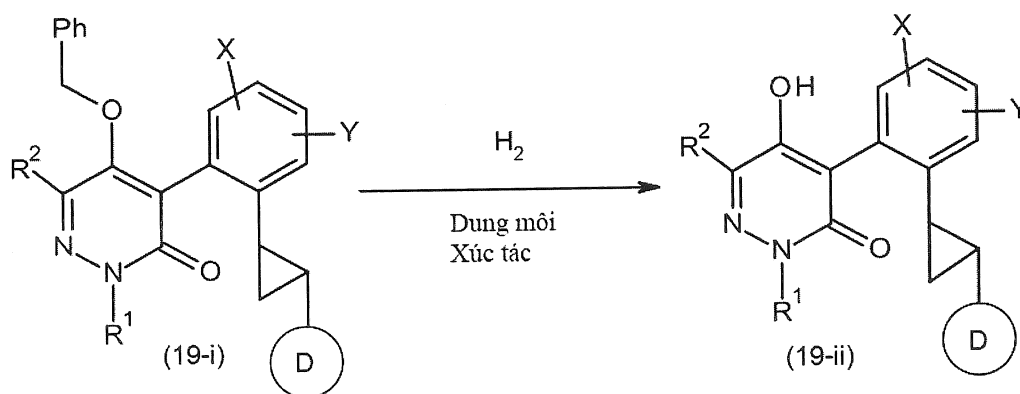
Các hợp chất (18) có thể được điều chế bằng cách xử lý các hợp chất (3) bằng các hợp chất (17) trong sự có mặt của bazơ thích hợp và (các) chất xúc tác thích hợp ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ 10 đến 150°C. Dung môi khác tùy chọn có thể được bổ sung. Các ví dụ về bazơ thích hợp bao gồm trietylamin, morpholin, *N*-metylmorpholin, diisopropylamin, diisopropyletylamin và pyridin. Các ví dụ của các chất xúc tác thích hợp bao gồm bis(triphenylphosphin)paladi(II) diclorua [Pd(PPh₃)Cl₂], hệ thống xúc tác được tạo thành tại chỗ từ hỗn hợp của paladi(II)axetat và triphenylphosphin, hệ thống xúc tác được tạo thành tại chỗ từ hỗn hợp của tris(dibenzylidenaxeton)dipaladi(0) và tri-*tert*butylphosphonium tetrafloroborat, và hệ thống xúc tác được tạo thành tại chỗ từ chất tiền xúc tác paladaxycle chẳng hạn như clo[(tri-*tert*-butylphosphin)-2-(2-aminobiphenyl)] paladi(II). Chất xúc tác đồng, chẳng hạn như đồng (I) iodua, tùy chọn cũng có thể được bổ sung. Các ví dụ của các dung môi bổ sung thích hợp là 1,4-dioxan, tetrahydrofuran, axetonitril, toluen và *N,N*-dimetylformamit. Các ví dụ về các hợp chất (3) đặc biệt hữu dụng là isobutyryl este (3-i) trong đó G là isobutyryl.

Các hợp chất (19) có thể được điều chế từ các hợp chất (3) và các hợp chất (20) như thể hiện trong sơ đồ phản ứng 17, thông qua phản ứng Suzuki, trong đó hợp chất (20) là các loại bo hữu cơ thích hợp, chẳng hạn như axit boronic, boronat este hoặc muối kali trifloborat.

159

[chẳng hạn như 4,4,5,5-tetrametyl-2-(2-phenyl-xyclopropyl)-[1,3,2]đioxaborolan] hoặc có thể được tạo ra bằng các phương pháp đã biết (xem ví dụ như phương pháp được mô tả trong Org. Process Res. Dev. 2012, 16, 87–95). Các ví dụ về các hợp chất (3) đặc biệt hữu dụng trong phản ứng Suzuki là benzyl ete (3-ii) trong đó G là benzyl.

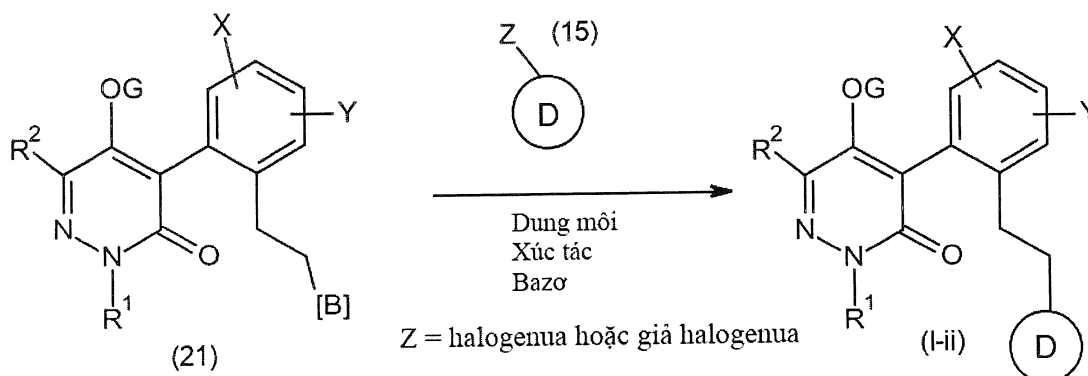
Sơ đồ phản ứng 18



Các hợp chất (19-ii) có thể được điều chế bằng quá trình hydro hóa có xúc tác của các hợp chất (19-i) bằng khí hydro trong dung môi thích hợp [chẳng hạn như tetrahydrofuran, metanol, etanol, axit axetic hoặc etyl axetat] trong sự có mặt của chất xúc tác thích hợp [chẳng hạn như Pd/C, Pd/CaCO₃, Rh/Al₂CO₃ hoặc niken xốp] ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ -10 đến 100°C.

Các hợp chất nhất định (I-ii) theo sáng chế có thể được điều chế từ các hợp chất (21) như thể hiện trong sơ đồ phản ứng 19. Các hợp chất (I-ii) là các hợp chất có công thức (I) trong đó W là -CH₂-CH₂-.

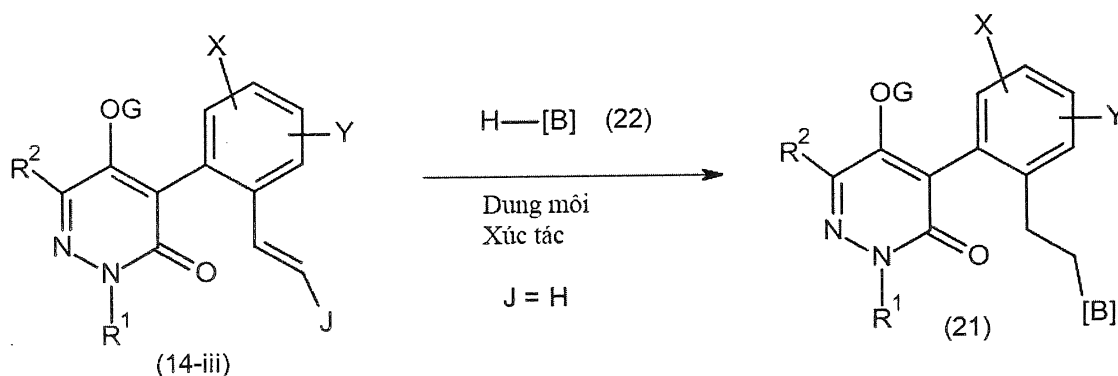
Sơ đồ phản ứng 19



Các hợp chất (I-ii) có thể được điều chế bằng việc xử lý các hợp chất (21) trong đó [B] có thể là trialkyl boran, axit alkyl boronic, alkyl boronic este hoặc muối alkyl kali trifloborat, với các hợp chất (15) trong sự có mặt của bazơ thích hợp và chất xúc tác thích hợp trong dung môi thích hợp ở nhiệt độ giữa 10 và 150°C. Các ví dụ của các bazơ thích hợp bao gồm kali cacbonat, kali phosphat, natri cacbonat, xesi cacbonat, natri bicacbonat và kali florua. Các ví dụ của các chất xúc tác thích hợp bao gồm phức 1,1'-bis(diphenylphosphino)feroxen]diclopaladi(II) diclometan [PdCl₂(dppf).DCM], [1,3-Bis(2,6-Di-3-pentylphenyl)imidazol-2-yliden](3-clopyridyl)diclopaladi(II) [Pd-PEPPSI™-IPent], hệ thống xúc tác được tạo thành tại chỗ từ chất tiền xúc tác paladaxycle chẳng hạn như clo(2-dixyclohexylphosphino-2',6'-diisopropoxy-1,1'-biphenyl)[2-(2'-amino-1,1'-biphenyl)]paladi(II) [RuPhos-Pd-G2], [Dixyclohexyl][2',4',6'-tris(1-metyletyl)[1,1'-biphenyl]-2-yl]phosphin(metansulfonato-κO)[2'-(metylamino-κN)[1,1'-biphenyl]-2-yl-κC]paladi [XPhos-Pd-G4], và [(4-(N,N-Dimetylamino)phenyl)di-tert-butyl phosphin](metansulfonato-κO)[2'-(metylamino-κN)[1,1'-biphenyl]-2-yl-κC]paladi [APhos-Pd-G4]. Các ví dụ của các dung môi thích hợp bao gồm nước 1,4-dioxan, tetrahydrofuran, axetonitril và toluen. Nhiều hợp chất (15) là sẵn có thương mại hoặc có thể được tạo ra bằng các phương pháp đã biết. Các ví dụ về các hợp chất (21) đặc biệt hữu dụng trong quy trình Suzuki là isobutyryl este (21-i) trong đó G là isobutyryl.

Người có trình độ trung bình trong lĩnh vực kỹ thuật sẽ hiểu rằng các điều kiện của quy trình Suzuki là có khả năng phân cắt các nhóm este, do đó sơ đồ phản ứng 19 cũng có thể mô tả phản ứng trong đó nguyên liệu ban đầu (21) chứa gốc este [sao cho G là nhóm axyl], nhưng sản phẩm (I-ii) thì không [sao cho G là hydro].

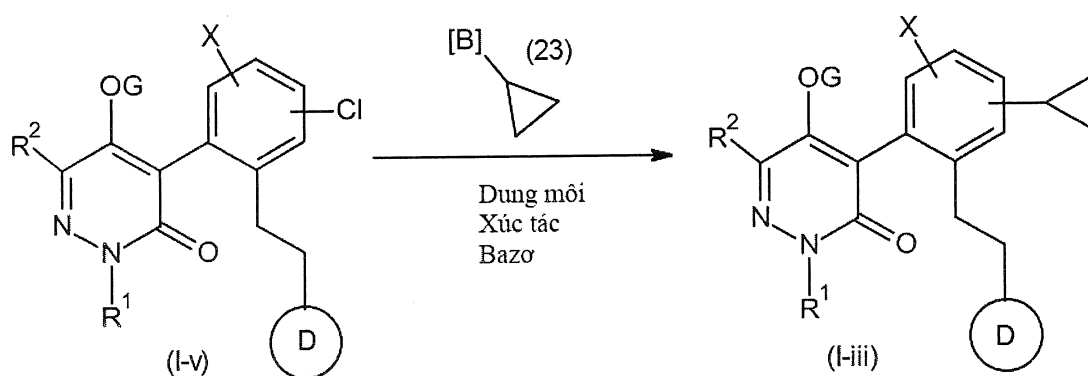
Sơ đồ phản ứng 20



Các hợp chất (21) có thể được điều chế bằng việc hydrobo hóa các alken (14-iii) sử dụng chất xúc tác hydrobo hóa thích hợp (22) trong dung môi thích hợp với sự bổ sung tùy chọn của chất xúc tác thích hợp ở nhiệt độ giữa 0°C và 100°C. Các ví dụ của các chất hydrobo hóa bao gồm boran, dicloboran, dibromboran, 4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan [pinacolboran], 1,3,2-benzodioxaborol [Catecholboran] hoặc 9-Borylbicyclo[3.3.1]nonan [9-BBN]. Các ví dụ của các dung môi thích hợp bao gồm tetrahydrofuran, 2-metyltetrahydrofuran, 1,4-dioxan, 2-metoxi-2-metyl-propan [MTBE] và dietyl ete. Các ví dụ của các chất xúc tác thích hợp bao gồm hệ thống xúc tác được tạo thành *in situ* từ bis(1,5-xyclooctadiene)diiridium(I) diclorua $[[Ir(COD)Cl]_2]$, và 4-diphenylphosphanylbutyl(diphenyl)phosphan [DPPB] [*J. Am. Chem. Soc.*, 2004, 126, 9200-9201].

Trong đó [B] là alkyl boronic este, chất này có thể được chuyển đổi thành axit boronic tương ứng bằng việc xử lý với axit metylboronic $[MeB(OH)_2]$ và axit trifloaxetic trong dung môi thích hợp chẳng hạn như diclometan [DCM] ở các nhiệt độ giữa 0 và 40°C [*Org. Lett.*, 2019, 21, 3048-3052]. Trong đó [B] là axit alkyl boronic hoặc este, chất này có thể được chuyển đổi thành muối alkyl kali trifloborat tương ứng bằng việc xử lý với kali hydrogenflorua trong dung môi thích hợp chẳng hạn như metanol hoặc axeton ở các nhiệt độ giữa 0 và 40°C.

Sơ đồ phản ứng 21



Các hợp chất (I-iii) trong đó Y là xyclopropyl có thể được điều chế bằng việc xử lý các hợp chất (I-v) với các hợp chất (23) trong đó [B] có thể là trialkyl boran, axit alkyl boronic, alkyl boronic este hoặc muối alkyl kali trifloborat, với các hợp chất trong sự có mặt của bazơ thích hợp và chất xúc tác thích hợp trong dung môi thích hợp ở nhiệt độ giữa 10 và 150°C. Các hợp chất (I-v) là các hợp chất có công thức (I) trong đó C là $-CH_2-CH_2-$, G là $C(O)R^3$ và Y là $-Cl$. Các ví dụ của các bazơ thích hợp bao gồm kali

cacbonat, kali phosphat, natri cacbonat, xesi cacbonat, natri bicacbonat và kali florua. Các ví dụ của các chất xúc tác thích hợp bao gồm phức 1,1' - bis(diphenylphosphino)feroxen]diclopaladi(II) diclometan [PdCl₂(dppf).DCM], [1,3-Bis(2,6-Di-3-pentylphenyl)imidazol-2-yliden](3-clopyridyl)diclopaladi(II) [Pd-PEPPSITM-IPent], hệ thống xúc tác được tạo thành tại chỗ từ chất tiền xúc tác paladaxycle chẳng hạn như clo(2-dixyclohexylphosphino-2',6'-diisopropoxy-1,1'-biphenyl)[2-(2'-amino-1,1'-biphenyl)]paladi(II) [RuPhos-Pd-G2], [Dixyclohexyl[2',4',6'-tris(1-metyletyl)[1,1'-biphenyl]-2-yl]phosphin](metansulfonato-κO)[2'-(metylamino-κN)[1,1'-biphenyl]-2-yl-κC]paladi [XPhos-Pd-G4], và [(4-(N,N-Dimetylamino)phenyl)di-tert-butyl phosphin](metansulfonato-κO)[2'-(metylamino-κN)[1,1'-biphenyl]-2-yl-κC]paladi [APhos-Pd-G4]. Các ví dụ của các dung môi thích hợp bao gồm nước, 1,4-dioxan, tetrahydrofuran, axetonitril và toluen. Các ví dụ về các hợp chất (I-v) đặc biệt hữu dụng trong quy trình Suzuki là các isobutyryl este (I-v) trong đó G là isobutyryl.

Người có trình độ trung bình trong lĩnh vực kỹ thuật sẽ hiểu rằng các điều kiện của quy trình Suzuki là có khả năng phân cắt các nhóm este, do đó sơ đồ phản ứng 21 cũng có thể mô tả phản ứng trong đó nguyên liệu ban đầu (I-v) chứa gốc este [sao cho G là nhóm axyl], nhưng sản phẩm (I-iii) thì không [sao cho G là hydro].

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

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

Các chế phẩm có thể được chọn từ một số dạng bào chế, nhiều trong số đó đã được biết đến từ Manual on Development and Use of FAO Specifications for Plant Protection Products, 5th Edition, 1999. Các chế phẩm này bao gồm bột rắc được (dustable powder - DP), bột hòa tan (soluble powder - SP), hạt tan trong nước (water soluble granules - SG), hạt phân tán trong nước (water dispersible granule - WG), bột thấm nước (wetable powder - WP), hạt (granule - GR) (giải phóng chậm hoặc nhanh), chất cô tan được (soluble concentrate - SL), chất lỏng có thể trộn với dầu (oil miscible liquid - OL), chất lỏng thể tích cực thấp (ultra low volume liquid - UL), chất cô nhũ tương hóa (emulsifiable concentrate - EC), chất cô phân tán được (dispersible concentrate - DC), nhũ tương (cả dầu trong nước (EW) và nước trong dầu (EO)), vi nhũ tương (ME), huyền phù đặc (suspension concentrate - SC), sol khí, huyền phù viên nang (capsule suspension - CS) và dạng bào chế xử lý hạt. Dạng bào chế được chọn trong bất kỳ trường hợp nào sẽ phụ thuộc vào mục đích cụ thể được dự tính và các đặc tính vật lý, hóa học và sinh học của hợp chất có công thức (I).

Bột rắc được (DP) có thể được điều chế bằng việc trộn lẫn hợp chất có công thức (I) với một hoặc nhiều chất pha loãng rắn (ví dụ đất sét tự nhiên, cao lanh, pyrophyllit, bentonit, alumin, montmorillonit, kizengua, đá vôi, đất diatomic, canxi phosphat, canxi và magie cacbonat, lưu huỳnh, đá vôi, bột, talc và các chất mang rắn hữu cơ và vô cơ khác) và nghiền cơ học hỗn hợp thành bột mịn.

Bột hòa tan (SP) có thể được điều chế bằng việc trộn lẫn hợp chất có công thức (I) với một hoặc nhiều muối vô cơ tan được trong nước (chẳng hạn như natri bicacbonat, natri cacbonat hoặc magie sulphat) hoặc một hoặc nhiều chất rắn hữu cơ tan được trong nước (chẳng hạn như polysacarit) và, tùy chọn, một hoặc nhiều chất làm ướt, một hoặc nhiều chất phân tán hoặc hỗn hợp của các chất này để cải thiện khả năng phân tán/độ hòa tan trong nước. Hỗn hợp sau đó được nghiền thành bột mịn. Các chế phẩm tương tự cũng có thể được tạo hạt để tạo thành hạt tan trong nước (SG).

Bột thấm nước (WP) có thể được điều chế bằng cách trộn hợp chất có công thức (I) với một hoặc nhiều chất pha loãng hoặc chất mang rắn, một hoặc nhiều chất thấm ướt và, tốt hơn là, một hoặc nhiều chất phân tán và, tùy chọn, một hoặc nhiều chất tạo huyền phù để thúc đẩy quá trình phân tán trong chất lỏng. Sau đó, hỗn hợp này được nghiền thành bột mịn. Các chế phẩm tương tự cũng có thể được tạo hạt để tạo thành hạt phân tán trong nước (WG).

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

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

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

Quá trình điều chế EW bao gồm bước thu được hợp chất có công thức (I) dưới dạng chất lỏng (nếu không phải là chất lỏng ở nhiệt độ phòng, nó có thể được làm nóng chảy ở nhiệt độ thích hợp, thường là dưới 70°C) hoặc trong dung dịch (bằng cách hòa tan nó trong dung môi thích hợp) và sau đó nhũ hóa chất lỏng hoặc dung dịch thu được

trong nước chứa một hoặc nhiều SFA, dưới lực cắt cao, để sản xuất nhũ tương. Dung môi thích hợp để sử dụng trong EW bao gồm dầu thực vật, hydrocacbon đã clo hóa (như clobenzen), dung môi thơm (như alkylbenzen hoặc alkylnaphtalen) và các dung môi hữu cơ thích hợp khác mà có độ hòa tan trong nước thấp.

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

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

Dạng bào chế sol khí bao gồm hợp chất có công thức (I) và chất đẩy thích hợp (ví dụ *n*-butan). Hợp chất có công thức (I) cũng có thể được hòa tan hoặc được phân tán trong môi trường thích hợp (ví dụ nước hoặc chất lỏng có thể trộn lẫn trong nước, chẳng hạn như *n*-propanol) để cung cấp các chế phẩm để sử dụng trong các bơm xịt không áp lực, được kích hoạt bằng tay.

Huyền phù viên nang (CS) có thể được điều chế theo cách tương tự như cách điều chế dạng bào chế EW nhưng có giai đoạn polyme hóa bổ sung sao cho thu được thể phân tán có nước của các giọt dầu, trong đó mỗi giọt dầu được bao nang bởi vỏ polyme và chứa hợp chất có công thức (I) và, tùy chọn, chất mang hoặc chất pha loãng cho nó. Vỏ polyme có thể được sản xuất bằng phản ứng đa trùng ngưng mặt phân cách

hoặc bằng quy trình tự giọt. Các chế phẩm có thể cung cấp việc giải phóng được kiểm soát của hợp chất có công thức (I) và chúng có thể được sử dụng cho việc xử lý hạt. Hợp chất có công thức (I) cũng có thể được phối chế trong chất nền polyme có thể phân hủy sinh học để tạo ra sự giải phóng chậm, có kiểm soát của hợp chất.

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

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

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

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

Các SFA thích hợp của loại lưỡng tính bao gồm các betain, các propionat và các glyxinat.

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

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

Các chất huyền phù thích hợp bao gồm các keo ưa nước (chẳng hạn như các polysacarit, polyvinylpyrrolidon hoặc natri cacboxymetylxenluloza) và các đất sét trương (chẳng hạn như bentonit hoặc attapulgit).

Chế phẩm theo sáng chế có thể còn bao gồm ít nhất một chất diệt loài gây hại bổ sung. Ví dụ, các hợp chất theo sáng chế có thể còn được sử dụng kết hợp với chất diệt cỏ khác hoặc chất điều hòa sinh trưởng thực vật. Theo phương án được ưu tiên chất diệt loài gây hại bổ sung là chất diệt cỏ và/hoặc chất an toàn với thuốc diệt cỏ. Các ví dụ cụ thể của các hợp chất đó bao gồm (trong đó "I" thể hiện hợp chất có công thức (I)): I + axetoclo; I + aciflofen (bao gồm aciflofen-natri); I + aclonifen; I + ametryn; I + amicarbazon; I + aminopyralid; I + aminotriazol; I + atrazin; I + beflubutamid-M; I + benquitrion; I + bensulfuron (bao gồm bensulfuron-metyl); I + bentazon; I + bixyclopyron; I + bilanafos; I + bispyribac-natri; I + bixlozon; I + bromacil; I + bromoxynil; I + butaclo; I + butafenacil; I + carfentrazon (bao gồm carfentrazon-etyl); I + cloransulam (bao gồm cloransulam-metyl); I + clorimuron (bao gồm clorimuron-etyl); I + clotoluron; I + closulfuron; I + xinmetylin; I + clacyfos; I + clethodim; I + clodinafop (bao gồm clodinafop-propargyl); I + clomazon; I + clopyralid; I + xyclopyranil; I + xyclopyrimorat; I + xyclosulfamuron; I + xyhalofop (bao gồm xyhalofop-butyl); I + 2,4-D (bao gồm muối cholin và este 2-etylhexyl của chúng); I + 2,4-DB; I + desmedipham; I + dicamba (bao gồm nhôm, aminopropyl, bis-aminopropylmetyl, cholin, dicloprop, diglycolamin, dimetylamin, dimetylamoni, các muối kali và natri của chúng); I + diclosulam; I + diflufenican; I + diflufenzopyr; I + dimetaclo; I + dimethenamid-P; I + diquat dibromit; I + diuron; I + epyrifenacil; I + ethalfluralin; I + ethofumesat; I + fenoxaprop (bao gồm fenoxaprop-P-etyl); I + fenoxasulfon; I + fenquitrion; I + fentrazamit; I + flazasulfuron; I + florasulam; I + florpyrauxifen (bao gồm florpyrauxifen-benzyl); I + fluazifop (bao gồm fluazifop-P-butyl); I + flucarbazon (bao gồm flucarbazon-natri); I + flufenaxet; I + flumetsulam; I +

flumioxazin; I + flometuron; I + flupyrulfuron (bao gồm flupyrulfuron-metyl-natri); I + fluroxypyr (bao gồm fluroxypyr-meptyl); I + fomesafen; I + foramsulfuron; I + glufosinat (bao gồm muối amoni của chúng); I + glyphosat (bao gồm diamoni, isopropylamoni và kali của chúng); I + halauxifen (bao gồm halauxifen-metyl); I + haloxyfop (bao gồm haloxyfop-metyl); I + hexazinon; I + hydantoxidin; I + imazamox; I + imazapic; I + imazapyr; I + imazethapyr; I + indaziflam; I + iodosulfuron (bao gồm iodosulfuron-metyl-natri); I + iofensulfuron (bao gồm iofensulfuron-natri); I + ioxynil; I + isoproturon; I + isoxaflutol; I + lancotrion; I + MCPA; I + MCPB; I + mecoprop-P; I + mesosulfuron (bao gồm mesosulfuron-metyl); I + mesotrion; I + metamitron; I + metazaclo; I + metiozolin; I + metolaclo; I + metosulam; I + metribuzin; I + metsulfuron; I + napropamit; I + nicosulfuron; I + norflurazon; I + oxadiazon; I + oxasulfuron; I + oxyflofen; I + paraquat diclorua; I + pendimethalin; I + penoxsulam; I + phenmedipham; I + picloram; I + pinoxaden; I + pretilaclo; I + primisulfuron-metyl; I + prometryn; I + propanil; I + propaquizafop; I + propyrisulfuron; I + propyzamit; I + prosulfocarb; I + prosulfuron; I + pyraclo-nil; I + pyraflufen (bao gồm pyraflufen-etyl); I + pyrasulfotol; I + pyridat; I + pyriftalid; I + pyrimisulfan; I + pyroxasulfon; I + pyroxsulam; I + quinclorac; I + quinmerac; I + quizalofop (bao gồm quizalofop-P-etyl và quizalofop-P-tefuryl); I + rimsulfuron; I + saflufenacil; I + setoxydim; I + simazin; I + S-metaloclo; I + sulfentrazon; I + sulfosulfuron; I + tebuthiuron; I + tefuryltrion; I + tembotrion; I + terbuthylazin; I + terbutryn; I + tetflupyrrolimet; I + thiencarbazon; I + thifensulfuron; I + tiafenacil; I + tolpyralat; I + topramezon; I + tralkoxydim; I + triafamon; I + triallat; I + triasulfuron; I + tribenuron (bao gồm tribenuron-metyl); I + triclopyr; I + trifloxysulfuron (bao gồm trifloxysulfuron-natri); I + trifludimoxazin; I + trifluralin; I + triflusulfuron; I + 3-(2-clo-4-flo-5-(3-metyl-2,6-dioxo-4-triflometyl-3,6-dihydropyrimidin-1(2H)-yl)phenyl)-5-metyl-4,5-dihydroisoxazol-5-axit cacboxylic etyl este; I + 4-hydroxy-1-metoxi-5-metyl-3-[4-(triflometyl)-2-pyridyl]imidazolidin-2-on; I + 4-hydroxy-1,5-dimetyl-3-[4-(triflometyl)-2-pyridyl]imidazolidin-2-on; I + 5-etoxy-4-hydroxy-1-metyl-3-[4-(triflometyl)-2-pyridyl]imidazolidin-2-on; I + 4-hydroxy-1-metyl-3-[4-(triflometyl)-2-pyridyl]imidazolidin-2-on; I + 4-hydroxy-1,5-dimetyl-3-[1-metyl-5-(triflometyl)pyrazol-3-yl]imidazolidin-2-on; I + (4R)1-(5-tert-butylisoxazol-3-yl)-4-etoxy-5-hydroxy-3-metyl-imidazolidin-2-on; I + 3-[2-(3,4-dimetoxyphenyl)-6-metyl-3-oxo-pyridazin-4-cacbonyl]bixyclo[3.2.1]octan-2,4-dion; I

+ 2-[2-(3,4-dimetoxyphenyl)-6-metyl-3-oxo-pyridazin-4-cacbonyl]-5-metyl-xyclohexan-1,3-dion; I + 2-[2-(3,4-dimetoxyphenyl)-6-metyl-3-oxo-pyridazin-4-cacbonyl]xyclohexan-1,3-dion; I + 2-[2-(3,4-dimetoxyphenyl)-6-metyl-3-oxo-pyridazin-4-cacbonyl]-5,5-dimetyl-xyclohexan-1,3-dion; I + 6-[2-(3,4-dimetoxyphenyl)-6-metyl-3-oxo-pyridazin-4-cacbonyl]-2,2,4,4-tetrametyl-xyclohexan-1,3,5-trion; I + 2-[2-(3,4-dimetoxyphenyl)-6-metyl-3-oxo-pyridazin-4-cacbonyl]-5-etyl-xyclohexan-1,3-dion; I + 2-[2-(3,4-dimetoxyphenyl)-6-metyl-3-oxo-pyridazin-4-cacbonyl]-4,4,6,6-tetrametyl-xyclohexan-1,3-dion; I + 2-[6-xyclopropyl-2-(3,4-dimetoxyphenyl)-3-oxo-pyridazin-4-cacbonyl]-5-metyl-xyclohexan-1,3-dion; I + 3-[6-xyclopropyl-2-(3,4-dimetoxyphenyl)-3-oxo-pyridazin-4-cacbonyl]bixyclo[3.2.1]octan-2,4-dion; I + 2-[6-xyclopropyl-2-(3,4-dimetoxyphenyl)-3-oxo-pyridazin-4-cacbonyl]-5,5-dimetyl-xyclohexan-1,3-dion; I + 6-[6-xyclopropyl-2-(3,4-dimetoxyphenyl)-3-oxo-pyridazin-4-cacbonyl]-2,2,4,4-tetrametyl-xyclohexan-1,3,5-trion; I + 2-[6-xyclopropyl-2-(3,4-dimetoxyphenyl)-3-oxo-pyridazin-4-cacbonyl]xyclohexan-1,3-dion; I + 4-[2-(3,4-dimetoxyphenyl)-6-metyl-3-oxo-pyridazin-4-cacbonyl]-2,2,6,6-tetrametyl-tetrahydropyran-3,5-dion; I + 4-[6-xyclopropyl-2-(3,4-dimetoxyphenyl)-3-oxo-pyridazin-4-cacbonyl]-2,2,6,6-tetrametyl-tetrahydropyran-3,5-dion; I + 4-amino-3-clo-5-flo-6-(7-flo-1H-indol-6-yl)pyridin-2-axit cacboxylic (bao gồm este hóa nông dụng của chúng, ví dụ, metyl 4-amino-3-clo-5-flo-6-(7-flo-1H-indol-6-yl)pyridin-2-cacboxylat, prop-2-ynyl 4-amino-3-clo-5-flo-6-(7-flo-1H-indol-6-yl)pyridin-2-cacboxylat và xyanometyl 4-amino-3-clo-5-flo-6-(7-flo-1H-indol-6-yl)pyridin-2-cacboxylat); I + 3-etylsulfanyl-N-(1,3,4-oxadiazol-2-yl)-5-(triflometyl)-[1,2,4]triazolo[4,3-a]pyridin-8-carboxamit; I + 3-(isopropylsulfanylmetyl)-N-(5-metyl-1,3,4-oxadiazol-2-yl)-5-(triflometyl)-[1,2,4]triazolo[4,3-a]pyridin-8-carboxamit; I + 3-(isopropylsulfonylmetyl)-N-(5-metyl-1,3,4-oxadiazol-2-yl)-5-(triflometyl)-[1,2,4]triazolo[4,3-a]pyridin-8-carboxamit; I + etyl 2-[[3-clo-5-flo-6-[3-metyl-2,6-dioxo-4-(triflometyl)pyrimidin-1-yl]-2-pyridyl]oxy]axetat; I + 6-clo-4-(2,7-dimetyl-1-naphetyl)-5-hydroxy-2-metyl-pyridazin-3-on; I + 1-[2-clo-6-(5-clopyrimidin-2-yl)oxy-phenyl]-4,4,4-triflo-butan-1-on và I + 5-[2-clo-6-(5-clopyrimidin-2-yl)oxy-phenyl]-3-(diflometyl)isoxazol.

Các đối tác trộn của hợp chất có công thức (I) có thể còn ở dạng este hoặc muối, như được đề cập ví dụ trong The Pesticide Manual, Tái bản lần thứ mười bốn, British Crop Protection Council, 2006.

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

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

Các hỗn hợp có thể được sử dụng một cách có lợi trong các dạng bào chế được đề cập ở trên (trong trường hợp "thành phần hoạt tính" đề cập đến hỗn hợp tương ứng của hợp chất có công thức (I) với đối tác trộn).

Hợp chất có công thức (I) theo sáng chế cũng có thể được kết hợp với chất an toàn chất diệt cỏ. Các hợp chất ưu tiên (trong đó "I" thể hiện hợp chất có công thức (I)) bao gồm

I + benoxacor, I + cloquintoxet (bao gồm cloquintoxet-mexyl), I + xyprosulfamid, I + diclomid, I + fencloazol (bao gồm fencloazol-etyl), I + fenclorim, I + fluxofenim, I + furilazol, I + isoxadifen (bao gồm isoxadifen-etyl), I + mefenpyr (bao gồm mefenpyr-dietyl), I + metcamifen và I + oxabetrinil.

Được đặc biệt ưu tiên là hỗn hợp của hợp chất có công thức (I) với xyprosulfamid, isoxadifen (bao gồm isoxadifen-etyl), cloquintoxet (bao gồm cloquintoxet-mexyl) và/hoặc N-(2-metoxycarbonyl)-4-[(metyl-aminocarbonyl)amino]benzensulfonamid.

Chất an toàn của hợp chất có công thức (I) cũng có thể ở dạng este hoặc muối, như đề cập ví dụ như trong The Pesticide Manual, 14th Edition (BCPC), 2006. Tham chiếu tới cloquintoxet-mexyl cũng áp dụng cho liti, natri, kali, canxi, magie, nhôm, sắt, amoni, amoni bậc bốn, muối sulfoni hoặc phosphoni của chúng như được bộc lộ trong WO 02/34048, và tham chiếu tới fencloazol-etyl cũng áp dụng cho fencloazol, v.v..

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

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

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

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

Sáng chế còn đề xuất phương pháp kiểm soát chọn lọc cỏ dại tại địa điểm có cây trồng và cỏ dại, trong đó phương pháp bao gồm việc áp dụng lên địa điểm của cỏ dại lượng kiểm soát của chế phẩm theo sáng chế. 'Kiểm soát' có nghĩa là giết chết, làm giảm hoặc làm chậm sự sinh trưởng hoặc ngăn ngừa hoặc làm giảm sự nảy mầm. Thường là các thực vật cần được kiểm soát là các thực vật không mong muốn (cỏ dại). 'Địa điểm' có nghĩa là khu vực trong đó cây trồng đang sinh trưởng hoặc sẽ sinh trưởng.

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

Thông thường thực hiện việc áp dụng bằng cách phun chế phẩm, thường là bằng thiết bị phun gắn trên máy kéo đối với các diện tích lớn hơn, nhưng các phương pháp khác chẳng hạn như rắc bụi (đối với bột), nhỏ giọt hoặc tưới cũng có thể được sử dụng.

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

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

Các cây trồng được hiểu là cũng bao gồm các cây trồng mà đã được làm cho dung nạp với các thuốc diệt cỏ hoặc các nhóm thuốc diệt cỏ (ví dụ, các chất ức chế ALS, GS, EPSPS, PPO, ACCase và HPPD) bằng cách phương pháp tạo giống thông thường hoặc bằng kỹ thuật thiết kế di truyền. Các ví dụ của cây trồng mùa vụ mà đã được làm cho dung nạp với imidazolinon, ví dụ imazamox, bằng phương pháp tạo giống thông thường là cây cải dầu mùa hè Clearfield® (cải canola). Các ví dụ của các cây trồng được làm cho có khả năng dung nạp các chất diệt cỏ bằng các phương pháp thiết kế di truyền bao gồm ví dụ, các giống ngô kháng glyphosat và glufosinat được bán trên thị trường với tên thương mại là RoundupReady® và LibertyLink®. Theo một khía cạnh được đặc biệt ưu tiên, cây trồng được thiết kế để biểu hiện quá homogentisat solanesyltransferaza như được trình bày trong, ví dụ, tài liệu đơn sáng chế WO2010/029311.

Cây trồng mùa vụ cũng được hiểu là cây trồng đã được làm cho kháng với côn trùng gây hại bằng các phương pháp thiết kế di truyền, ví dụ cây ngô Bt (kháng với sâu đục thân ngô Châu Âu), cây bông Bt (kháng với một đục quả bông) và cũng như là cây khoai tây Bt (kháng với bọ Colorado). Các ví dụ của ngô Bt là các giống ngô lai Bt 176 của NK® (Syngenta Seeds). Độc tố Bt là protein mà được tạo thành tự nhiên bởi vi khuẩn đất *Bacillus thuringiensis*. Các ví dụ của các độc tính, hoặc các thực vật chuyển gen có khả năng tổng hợp các độc tố này, được mô tả trong EP-A-451 878, EP-A-374 753, WO 93/07278, WO 95/34656, WO 03/052073 và EP-A-427 529. Các ví dụ của các thực vật chuyển gen bao gồm một hoặc nhiều gen mà mã hóa tính kháng thuốc diệt côn trùng và biểu hiện một hoặc nhiều độc tố là KnockOut® (ngô), Yield Gard® (ngô), NuCOTIN33B® (bông), Bollgard® (bông), NewLeaf® (khoai tây), NatureGard® và Protexcta®. Các cây trồng hoặc nguyên liệu hạt của chúng có thể đều kháng các chất diệt cỏ và, đồng thời, kháng côn trùng ăn (các sự kiện chuyển gen "xếp chồng"). Ví dụ, hạt có thể có khả năng biểu hiện protein Cry3 diệt côn trùng trong khi cùng lúc đó chống chịu glyphosat.

Các cây trồng cũng được hiểu là bao gồm cây trồng mà thu được bằng các phương pháp gây giống hoặc thiết kế di truyền thông thường và chứa các tính trạng sản lượng (ví dụ như độ ổn định lưu trữ được cải thiện, giá trị dinh dưỡng cao hơn và hương vị được cải thiện).

Các thực vật hữu dụng khác bao gồm cỏ bề mặt, ví dụ như trong bãi chơi gôn, bãi cỏ, công viên và lề đường, hoặc mảng cỏ phát triển thương mại, và cây cảnh chẳng hạn như cây hoa hoặc cây bụi.

Chế phẩm có thể được sử dụng để kiểm soát cây không mong muốn (gọi chung là 'cỏ dại'). Các loài cỏ dại cần được điều khiển bao gồm cả các loài một lá mầm, ví dụ *Agrostis*, *Alopecurus*, *Avena*, *Brachiaria*, *Bromus*, *Cenchrus*, *Cyperus*, *Digitaria*, *Echinochloa*, *Eleusine*, *Lolium*, *Monochoria*, *Rottboellia*, *Sagittaria*, *Scirpus*, *Setaria* và *Sorghum*, và dicotyledonous species, for example *Abutilon*, *Amaranthus*, *Ambrosia*, *Chenopodium*, *Chrysanthemum*, *Conyza*, *Galium*, *Ipomoea*, *Nasturtium*, *Sida*, *Sinapis*, *Solanum*, *Stellaria*, *Veronica*, *Viola* và *Xanthium*. Các loài cỏ dại có thể cũng bao gồm các thực vật mà có thể được coi là các cây trồng nhưng có thể được trồng phía ngoài khu vực trồng trọt ('trốn thoát'), hoặc mọc từ hạt giống còn lại từ thực vật trước đó của cây trồng khác ('tình nguyện'). Các loài tình nguyện hoặc trốn thoát có thể dung chịu với các chất diệt cỏ nhất định khác.

Nhiều khía cạnh và phương án khác nhau theo sáng chế sẽ được minh họa ở đây cụ thể hơn bằng các ví dụ. Cần hiểu rằng có thể thực hiện các cải biến chi tiết mà không vượt ra khỏi phạm vi của sáng chế.

Các chữ viết tắt thông thường dùng trong bản mô tả này bao gồm:

br = Dba rộng

^tBu = tert-butyl

d = mức đôi

dba = dibenzylidenaxeton

DCM = diclometan

DMSO = dimetylsulfoxit

DPPA = diphenylphosphoryl azit

Et₂O = dietyl ete

EtOAc = etyl axetat

h = giờ

m = đa trùng

Me = metyl

MeOH = metanol

Ph = phenyl

ⁱPr = isopropyl

rt = nhiệt độ phòng

s = mức đơn

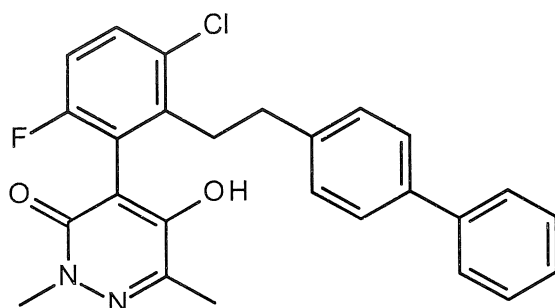
t = mức ba

THF = tetrahydrofuran

Ví dụ thực hiện sáng chế

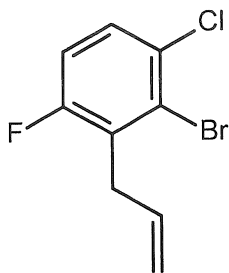
Ví dụ điều chế

Ví dụ 1 Việc điều chế của 4-[3-clo-6-flo-2-[2-(4-phenylphenyl)etyl]phenyl]-5-hydroxy-2,6-dimetyl-pyridazin-3-on (A-1,027)



1.1 3-allyl-2-brom-1-clo-4-flo-benzen

Dung dịch của liti diisopropylamit (2M trong tetrahydrofuran, 3,6 ml, 7,2 mmol) được làm mát đến -78°C trong nitơ. Dung dịch của 2-brom-1-clo-4-flo-benzen (1,0 g, 4,8 mmol) trong tetrahydrofuran được bổ sung từng giọt ở -78°C . Hỗn hợp được khuấy trong 45 phút ở cùng nhiệt độ trước khi được xử lý với allyl bromua (0,3 ml, 5,7 mmol). Phản ứng được tiếp tục ở -78°C trong 2 giờ sau đó được làm ấm đến nhiệt độ phòng. Phản ứng được làm dừng với sat. NH_4Cl (aq) và được chiết với etyl axetat. Các chất hữu cơ được phân tách và được giữ, sau đó được rửa bằng dung dịch muối. Các chất hữu cơ được làm khô trên natri sulfat và được cô dưới áp suất giảm để cho 3-allyl-2-brom-1-clo-4-flo-benzen (1,2 g, 100%) dưới dạng dầu.



^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ_{H} : 7,34-7,30 (m, 1H), 7,01-6,96 (m, 1H), 5,94-5,83 (m, 1H), 5,10-5,00 (m, 2H), 3,64-3,58 (m, 2H).

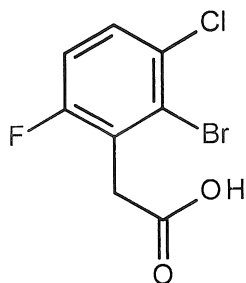
1.2 Axit 2-(2-brom-3-clo-6-flo-phenyl)axetic

Dung dịch của 3-allyl-2-brom-1-clo-4-flo-benzen (15,0 g, 60,1 mmol) trong diclometan (200 mL) trong bình 2 cổ được làm mát đến -78°C . Một bên cổ được kết nối với bể chứa dung dịch nước của KI. Ozon được tạo bọt khí qua dung dịch cho đến khi nguyên liệu ban đầu được tiêu thụ hoàn toàn (5 giờ). Khí được tạo bọt khí qua dung dịch trong 10 phút để loại bỏ ozon dư. Dimetyl sulfit (44 ml, 601 mmol) được bổ sung và hỗn hợp được làm ấm đến nhiệt độ phòng. Phản ứng được tiếp tục trong 16 giờ ở nhiệt độ phòng.

Hỗn hợp được rửa bằng dung dịch nước muối (2 x 100 mL) và lớp hữu cơ được giữ. Các chất hữu cơ được làm khô trên Na_2SO_4 , được lọc và được cô dưới áp suất giảm để cho 2-(2-brom-3-clo-6-flo-phenyl)axetaldehyt thô (15,3 g) mà được sử dụng cho bước tiếp theo mà không tinh sạch thêm.

2-(2-brom-3-clo-6-flo-phenyl)axetaldehyt thô (15,3 g, 60,8 mmol) được hòa tan trong hỗn hợp của *tert*-butanol (92 mL) và nước (46 mL) sau đó được làm mát đến 0°C . 2-metylbut-2-en (64,5 mL, 608 mmol), natri dihydro phosphat (34,6 g, 243 mmol) và natri clorit (16,5 g, 163 mmol) được bổ sung. Hỗn hợp được khuấy trong 2 giờ sau đó được pha loãng bằng dung dịch nước muối (150 mL) và axit clohydric 2M (150 mL). Hỗn hợp được chiết với etyl axetat (3 x 100 mL). Các phần chiết hữu cơ được kết hợp được rửa với dung dịch lỏng bão hòa của natri metabisulfit (100 mL) sau đó được làm khô trên Na_2SO_4 , được lọc và được cô dưới áp suất giảm để cung cấp chất rắn vàng nhạt. Chất rắn thô được hòa tan trong hỗn hợp của nước (100 mL) và NaOH 2,0M (30 mL). Dung dịch lỏng được rửa với etyl axetat (100 mL) và các phần hữu cơ được loại bỏ. Lớp nước được axit hóa bằng việc bổ sung của axit clohydric được cô (20 mL) dẫn đến việc tạo thành của huyền phù trắng. Hỗn hợp được chiết với etyl axetat (3 x 200 mL). Các

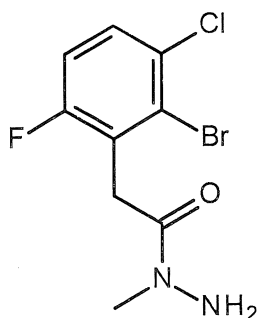
chất hữu cơ được kết hợp được rửa bằng dung dịch nước muối, được làm khô trên Na_2SO_4 , được lọc và được bay hơi để cung cấp axit 2-(2-brom-3-clo-6-flo-phenyl)axetic (8,0 g, 49%) dưới dạng chất rắn màu trắng.



^1H NMR (400 MHz, DMSO- d_6) δ_{H} : 12,79 (br.s, 1H), 7,67-7,59 (m, 1H), 7,39-7,31 (m, 1H), 3,82 (s, 2H).

1.3 2-(2-brom-3-clo-6-flo-phenyl)-*N*-metyl-axetohydrazit

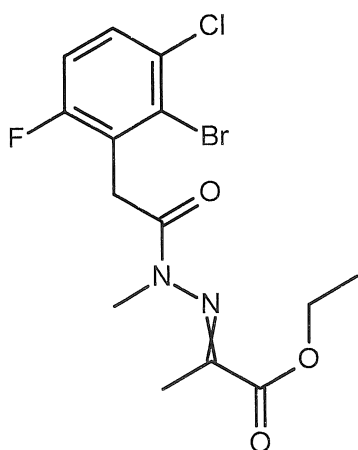
Vào dung dịch được khuấy của axit 2-(2-brom-3-clo-6-flo-phenyl)axetic (2,0 g, 7,5 mmol) trong diclometan (20 ml) ở 0°C được bổ sung *N*-(3-dimetylaminopropyl)-*N*'-etylcarbodiimit hydroclorua [EDC.HCl] (1,4 g, 9,0 mmol), được tiếp theo sau bằng việc bổ sung từng giọt của metyl hydrazin (0,4 ml, 7,5 mmol). Nhiệt độ của hỗn hợp phản ứng được duy trì ở 0°C trong 3 giờ. Phản ứng sau đó được làm dừng với nước và được chiết vào diclometan. Các chất hữu cơ được phân tách, được rửa bằng dung dịch nước muối và được làm khô trên Na_2SO_4 . Việc cô trong áp suất giảm cho 2-(2-brom-3-clo-6-flo-phenyl)-*N*-metyl-axetohydrazit thô (1,8 g, 81%) mà được sử dụng trong bước tiếp theo mà không tinh sạch thêm.



^1H NMR (400 MHz, DMSO- d_6) δ_{H} : 7,59 (dd, $J=8,9$ và $5,4$, 1H), 7,30 (t, $J=8,9$, 1H), 4,91 (s, 2H), 4,10 (br. s, 2H), 3,02 (s, 3H).

1.4 2-[[2-(2-brom-3-clo-6-flo-phenyl)-axetyl]-metyl-hydrazono]- axit propionic etyl este

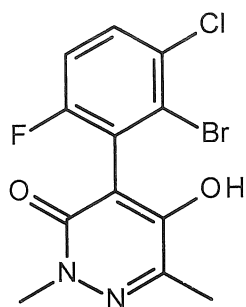
Vào dung dịch được khuấy của 2-(2-brom-3-clo-6-flo-phenyl)-*N*-metyl-axetohydrazit (1,8 g, 6,09 mmol) trong etanol (5 ml) được bổ sung etyl pyruvat (0,7 ml, 6,7 mmol) từng giọt. Phản ứng được gia nhiệt ở 80°C trong 4 giờ. Hỗn hợp phản ứng sau đó được để nguội đến nhiệt độ phòng, và được làm bay hơi trong áp suất giảm. Cặn được tinh sạch bởi phép sắc ký cột trên gel silica (rửa giải gradien etyl axetat / hexan) để cho hợp chất mong muốn 2-{[2-(2-brom-3-clo-6-flo-phenyl)-axetyl]-metyl-hydrazono}- axit propionic etyl este (1,8 g, 75%) dưới dạng chất rắn trắng ngà.



^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ_{H} : 7,40-7,35 (m, 1H), 7,04-6,98 (m, 1H), 4,32 (q, $J=7,1$, 2H), 4,24 (s, 2H), 3,41 (s, 3H), 2,32 (s, 3H), 1,36 (t, $J=7,1$, 3H).

1.5 4-(2-brom-3-clo-6-flo-phenyl)-5-hydroxy-2,6-dimetyl-pyridazin-3-on

2-{[2-(2-brom-3-clo-6-flo-phenyl)-axetyl]-metyl-hydrazono}- axit propionic etyl este (500 mg, 1,27 mmol) được hòa tan trong axetonitril (2,5 ml) và được xử lý với 1,8-diazabicyclo[5.4.0]undec-7-en [DBU] (0,47 ml, 3,2 mmol). Hỗn hợp được gia nhiệt tới 125°C sử dụng việc chiếu xạ vi sóng trong 1 giờ. Hỗn hợp phản ứng sau đó được làm bay hơi trong áp suất giảm. Cặn được hòa tan trong nước và được axit hóa đến độ pH 1 với axit clohydric 2N. Hỗn hợp được chiết với DCM, các chất hữu cơ được phân tách và được rửa bằng dung dịch nước muối. Dung dịch hữu cơ được làm khô trên Na_2SO_4 và được cô dưới áp suất giảm để cho sản phẩm thô. Phần thô được tinh sạch bởi phép sắc ký cột trên gel silica (rửa giải gradien etyl axetat / hexan) để cho 4-(2-brom-3-clo-6-flo-phenyl)-5-hydroxy-2,6-dimetyl-pyridazin-3-on (340 mg, 77,1%) dưới dạng chất rắn trắng ngà.

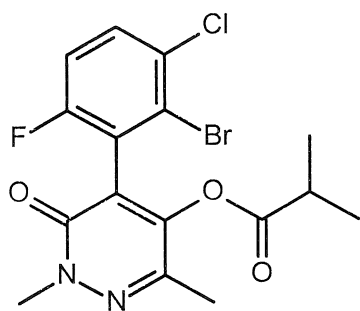


^1H NMR (400 MHz, DMSO- d_6) δ_{H} : 11,01 (s, 1H), 7,77-7,73 (m, 1H), 7,39 (t, $J=8,7$, 1H), 3,58 (s, 3H), 2,24 (s, 3H).

1.6 [5-(2-brom-3-clo-6-flo-phenyl)-1,3-dimetyl-6-oxo-pyridazin-4-yl] 2-metylpropanoat

Vào dung dịch được khuấy của 4-(2-brom-3-clo-6-flo-phenyl)-5-hydroxy-2,6-dimetyl-pyridazin-3-on (1,4 g, 4,02 mmol) trong diclometan (32 ml) ở nhiệt độ phòng được bổ sung trietylamin (1,1 ml, 8,06 mmol), 4-(dimetylamin)pyridin [DMAP] (49 mg, 0,40 mmol) và isobutyryl clorua (0,6 ml, 4,83 mmol).

Một khi việc đánh giá hoàn tất, phản ứng được pha loãng với diclometan và nước. Lớp hữu cơ được phân tách, được làm khô trên Na_2SO_4 , và được cô dưới áp suất giảm để cho sản phẩm thô. Phần thô được tinh sạch bởi phép sắc ký cột trên gel silica (rửa giải gradien etyl axetat / hexan) để cho [5-(2-brom-3-clo-6-flo-phenyl)-1,3-dimetyl-6-oxo-pyridazin-4-yl] 2-metylpropanoat (1,47 g, 87%).



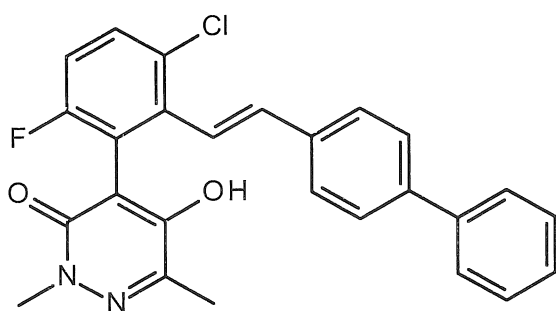
^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ_{H} : 7,51-7,47 (m, 1H), 7,10-7,05 (m, 1H), 3,82 (s, 3H), 2,60-2,55 (m, 1H), 2,25 (s, 3H), 1,02-0,98 (m, 6H).

1.7 4-[3-clo-6-flo-2-[(E)-2-(4-phenylphenyl)vinyl]phenyl]-5-hydroxy-2,6-dimetyl-pyridazin-3-on (A-2,027)

[5-(2-brom-3-clo-6-flo-phenyl)-1,3-dimetyl-6-oxo-pyridazin-4-yl] 2-metylpropanoat (0,54 g, 1,3 mmol), K_2CO_3 (0,55g, 3,9 mmol), axit *trans*-2-(4-phenylphenyl)vinylboronic (0,44 g, 2,00 mmol), $\text{PdCl}_2(\text{dppf})\cdot\text{DCM}$ (53 mg, 0,065

mmol), 1,4-dioxan (13 ml) và H₂O (3,3 mL) được kết hợp trong lọ vi sóng 20mL sau đó được gia nhiệt ở 140°C trong 30 phút dưới sự chiếu xạ vi sóng.

Hỗn hợp phản ứng được làm cô trong chân không để loại bỏ 1,4-dioxan sau đó được phân chia giữa HCl 2N (aq) và DCM. Lớp hữu cơ được phân chia và lớp nước được chiết với các phần khác của DCM (x2). Các chất hữu cơ được kết hợp được cô trong chân không để cho cặn thô mà được tinh sạch bằng phép sắc ký cột trên gel silica (rửa giải gradien etyl axetat/hexan) để cho 4-[3-clo-6-flo-2-[(E)-2-(4-phenylphenyl)vinyl]phenyl]-5-hydroxy-2,6-dimetyl-pyridazin-3-on (343 mg, 53 %, A-2,027)) dưới dạng bột vàng.



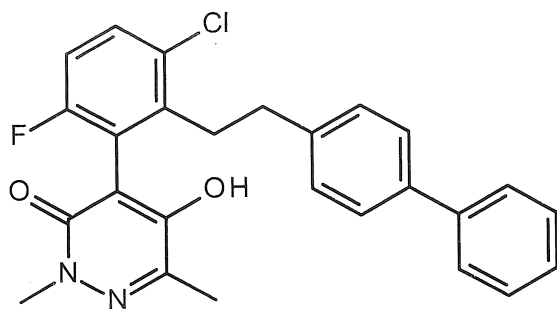
¹H NMR (400 MHz, cloroform) δ = 7,59 -

7,33 (m, 10H), 7,07 (t, J = 8,6 Hz, 1H), 7,01 (d, J = 16,4 Hz, 1H), 6,70 (d, J = 16,5 Hz, 1H), 5,63 (s, 1H), 3,73 (s, 3H), 2,28 (s, 3H)

1.8 4-(3-clo-6-flo-2-phenetyl-phenyl)-5-hydroxy-2,6-dimetyl-pyridazin-3-on (A-1,027)

Bổ sung vào bình đáy tròn 10mL 5% Pd/C (73 mg, 0,034 mmol) được tiếp theo sau bởi dung dịch 4-[3-clo-6-flo-2-[(E)-2-(4-phenylphenyl)vinyl]phenyl]-5-hydroxy-2,6-dimetyl-pyridazin-3-on (308 mg, 0,69 mmol) trong 10:1 (v/v) DCM/MeOH (4 mL). B₂(OH)₄ (325 mg, 3,45 mmol) sau đó được bổ sung và hỗn hợp phản ứng được khuấy ở nhiệt độ phòng qua đêm.

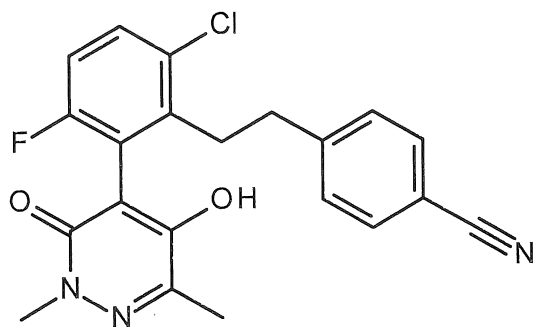
Hỗn hợp phản ứng sau đó được lọc qua Celite®, rửa giải với 10:1 (v/v) DCM/MeOH. Dịch lọc được tải khô lên trên silica và được tinh sạch bởi phép sắc ký cột trên gel silica (rửa giải gradien etyl axetat / hexan) để cho 4-[3-clo-6-flo-2-[2-(4-phenylphenyl)etyl]phenyl]-5-hydroxy-2,6-dimetyl-pyridazin-3-on (299 mg, hiệu suất 97%, A-1,027) dưới dạng dầu màu vàng mà được hóa cứng khi để yên.



^1H NMR (400 MHz, cloroform) δ = 7,57 -

7,52 (m, 2H), 7,50 - 7,40 (m, 5H), 7,37 - 7,30 (m, 1H), 7,07 (d, J = 8,2 Hz, 2H), 7,02 (t, J = 8,6 Hz, 1H), 5,47 (s, 1H), 3,75 (s, 3H), 2,88 - 2,80 (m, 3H), 2,27 (s, 3H)

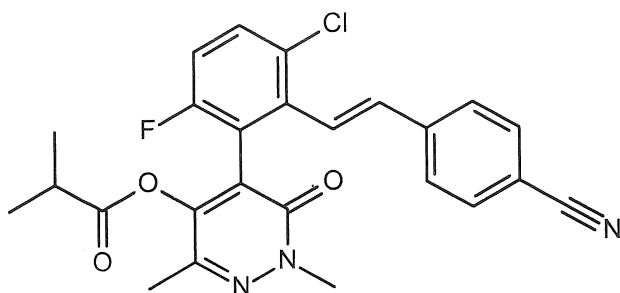
Ví dụ 2 Việc điều chế của 4-[2-[6-clo-3-flo-2-(5-hydroxy-2,6-dimetyl-3-oxo-pyridazin-4-yl)phenyl]etyl]benzonitril (A-1,036)



2.1 [5-[3-clo-2-[(E)-2-(4-xyanophenyl)vinyl]-6-flo-phenyl]-1,3-dimetyl-6-oxo-pyridazin-4-yl] 2-metylpropanoat (4,036)

[5-(2-brom-3-clo-6-flo-phenyl)-1,3-dimetyl-6-oxo-pyridazin-4-yl] 2-metylpropanoat (1,10 g, 2,63 mmol) [được điều chế như được mô tả trong Ví dụ 1] và clo[(tri-tert-butylphosphin)-2-(2-aminobiphenyl)] paladi(II) (68 mg, 0,13 mmol) được kết hợp trong toluen được khử khí (12 mL). 4-vinylbenzonitril (408 mg, 3,16 mmol) và bazơ Hunig (0,92 mL, 5,27 mmol) sau đó được bổ sung và hỗn hợp phản ứng được gia nhiệt tới 95°C trong 2,5 giờ.

Hỗn hợp phản ứng được để nguội đến nhiệt độ phòng sau đó được pha loãng với diclometan và được lọc qua celite, rửa với diclometan thêm. Dịch lọc được làm cô trong chân không sau đó được tinh sạch bởi phép sắc ký cột trên gel silica (rửa giải gradien etyl axetat / hexan) để cho [5-[3-clo-2-[(E)-2-(4-xyanophenyl)vinyl]-6-flo-phenyl]-1,3-dimetyl-6-oxo-pyridazin-4-yl] 2-metylpropanoat (781 mg, hiệu suất 64%, A-4,036) dưới dạng chất rắn màu trắng



^1H NMR (400MHz, cloroform) δ = 7,62

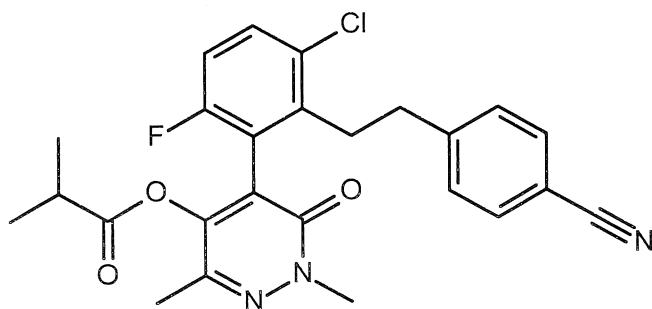
- 7,55 (m, 2H), 7,45 (dd, $J=5,0, 8,5$ Hz, 1H), 7,45 - 7,40 (m, 1H), 7,13 (d, $J=16,5$ Hz, 1H), 7,05 (t, $J=8,5$ Hz, 1H), 6,68 (d, $J=16,5$ Hz, 1H), 3,69 (s, 3H), 2,65 (spt, $J=7,0$ Hz, 1H), 2,23 (s, 3H), 1,11 (d, $J=7,0$ Hz, 3H), 1,07 (d, $J=7,0$ Hz, 3H).

2.2 [5-[3-clo-2-[2-(4-xyanophenyl)etyl]-6-flo-phenyl]-1,3-dimetyl-6-oxo-pyridazin-4-yl] 2-metylpropanoat (A-3,036)

[5-[3-clo-2-[(E)-2-(4-xyanophenyl)vinyl]-6-flo-phenyl]-1,3-dimetyl-6-oxo-pyridazin-4-yl] 2-metylpropanoat (900 mg, 1,93 mmol) được tiến hành hydro hóa xúc tác trong EtOAc (20 mL) trên chất xúc tác 5% Pd/C (50% ẩm) (0,82 g) ở 4 bar H_2 .

Sau 1,5 giờ, LC/MS thể hiện phản ứng hoàn toàn. Hỗn hợp phản ứng được lọc qua đệm Celite®, rửa với etyl axetat. Dịch lọc được cô *trong chân không* để tạo nên cặn thô.

Cặn được hấp thụ lên silica và được tinh sạch bởi phép sắc ký cột trên gel silica (rửa giải gradien etyl axetat / hexan) để cho [5-[3-clo-2-[2-(4-xyanophenyl)etyl]-6-flo-phenyl]-1,3-dimetyl-6-oxo-pyridazin-4-yl] 2-metylpropanoat (800 mg, hiệu suất 81%, A-3,036) dưới dạng chất rắn màu trắng.



^1H NMR (400 MHz, cloroform) δ =

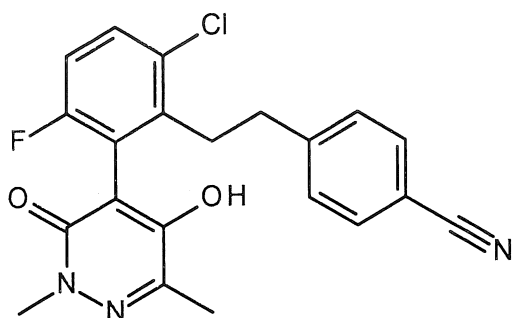
7,56 - 7,51 (m, 2H), 7,42 (dd, $J = 5,2, 8,9$ Hz, 1H), 7,26 - 7,21 (m, 2H), 7,00 (t, $J = 8,9$ Hz, 1H), 3,84 (s, 3H), 3,02 - 2,92 (m, 1H), 2,91 - 2,80 (m, 2H), 2,75 - 2,65 (m, 1H), 2,54 (spt, $J = 7,0$ Hz, 1H), 2,25 (s, 3H), 0,98 (d, $J = 7,0$ Hz, 3H), 0,95 (d, $J = 7,0$ Hz, 3H).

2.3 4-[2-[6-clo-3-flo-2-(5-hydroxy-2,6-dimetyl-3-oxo-pyridazin-4-yl)phenyl]etyl]benzonitril (A-1,036)

[[5-[3-clo-2-[2-(4-xyanophenyl)etyl]-6-flo-phenyl]-1,3-dimetyl-6-oxo-pyridazin-4-yl] 2-metylpropanoat (400 mg, 0,855 mmol) được hòa tan trong etanol (6mL). Hỗn hợp được xử lý với dung dịch của liti hydroxit (108 mg, 2,56 mmol) trong nước (2mL). Phản ứng được khuấy ở nhiệt độ phòng trong 2 giờ.

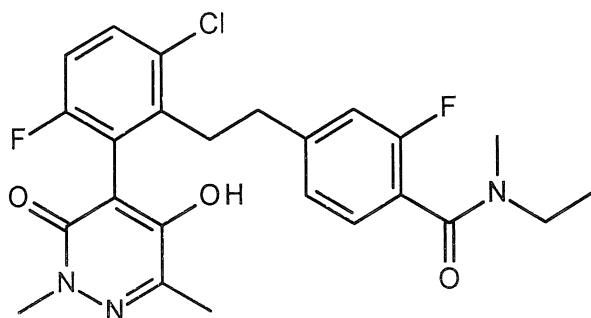
Hỗn hợp phản ứng được làm cô *trong chân không* để loại bỏ etanol. Dung dịch nước còn lại được pha loãng với nước (15mL) sau đó được axit hóa đến ~ độ pH 3 với HCl 2M và được chiết với DCM (3 x 10 mL). Các chất hữu cơ được kết hợp được làm khô qua MgSO₄, được lọc và được cô *trong chân không* để tạo nên sản phẩm thô.

Sản phẩm thô được tinh sạch bởi phép sắc ký cột trên gel silica (rửa giải gradien etyl axetat/hexan) để cho 4-[2-[6-clo-3-flo-2-(5-hydroxy-2,6-dimetyl-3-oxo-pyridazin-4-yl)phenyl]etyl]benzonitril (83 mg, hiệu suất 91%, A-1,036)) dưới dạng chất rắn màu trắng.



¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ ppm 7,46 - 7,51 (m, 2 H) 7,26 - 7,31 (m, 1 H) 7,08 (d, J=8,19 Hz, 2 H) 6,86 (t, J=8,50 Hz, 1 H) 3,63 (s, 3 H) 2,61 - 2,77 (m, 4 H) 2,24 (s, 3 H).

Ví dụ 4 Việc điều chế của 4-[2-[6-clo-3-flo-2-(5-hydroxy-2,6-dimetyl-3-oxo-pyridazin-4-yl)phenyl]etyl]-N-etyl-2-flo-N-metyl-benzamit (A-1,028)

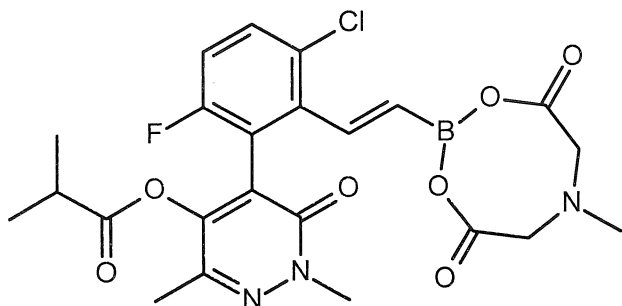


4.1 [5-[3-clo-6-flo-2-[(E)-2-(6-metyl-4,8-dioxo-1,3,6,2-dioxazaborocan-2-yl)vinyl]phenyl]-1,3-dimetyl-6-oxo-pyridazin-4-yl] 2-metylpropanoat

[5-(2-brom-3-clo-6-flo-phenyl)-1,3-dimetyl-6-oxo-pyridazin-4-yl] 2-metylpropanoat (5,00 g, 11,97 mmol, 1,0 eq), 6-metyl-2-vinyl-1,3,6,2-dioxazaborocan-4,8-dion (2,63g, 14,36 mmol, 1,2 eq) và clo[(tri-tert-butylphosphin)-2-(2-aminobiphenyl)] paladi(II) (307 mg, 0,60 mmol, 0,05 eq) được nạp vào bình đáy tròn 250 ml có lắp thiết bị sinh hàn, thanh khuấy và bình tạo bọt nitơ. THF (100mL) được bổ sung tiếp theo sau bởi N,N-diisopropyletylamin (4,2 mL, 23,94 mmol, 2,0 eq) ngược dòng nitơ và hỗn hợp được gia nhiệt để hồi lưu trong 3 giờ.

Hỗn hợp phản ứng được để nguội đến nhiệt độ phòng sau đó được pha loãng trong DCM và được lọc qua Celite®, rửa với các phần khác của DCM. Phần rửa giải sau đó được cô tới khô.

Sản phẩm thô được tinh sạch bởi phép sắc ký cột nhanh để tạo nên [5-[3-clo-6-flo-2-[(E)-2-(6-metyl-4,8-dioxo-1,3,6,2-dioxazaborocan-2-yl)vinyl]phenyl]-1,3-dimetyl-6-oxo-pyridazin-4-yl] 2-metylpropanoat (5,91 g, 11,4 mmol, hiệu suất 95%) dưới dạng chất rắn trắng đục.



^1H NMR (400 MHz, DMSO- d_6) δ =

7,63 (dd, J = 5,1, 8,9 Hz, 1H), 7,31 (t, J = 8,9 Hz, 1H), 6,65 (d, J = 18,3 Hz, 1H), 5,68 (d, J = 18,3 Hz, 1H), 4,24 (dd, J = 11,9, 17,2 Hz, 2H), 3,95 - 3,83 (m, 2H), 3,70 (s, 3H), 2,66 (spt, J = 7,0 Hz, 1H), 2,16 (s, 3H), 0,90 (d, J = 7,0 Hz, 3H), 0,89 (d, J = 7,0 Hz, 3H)

4.2 [5-[3-clo-2-[2-[4-[etyl(metyl)carbamoyl]-3-flo-phenyl]etyl]-6-flo-phenyl]-1,3-dimetyl-6-oxo-pyridazin-4-yl] 2-metylpropanoat (A-3,028)

[5-[3-clo-6-flo-2-[(E)-2-(6-metyl-4,8-dioxo-1,3,6,2-dioxazaborocan-2-yl)vinyl]phenyl]-1,3-dimetyl-6-oxo-pyridazin-4-yl] 2-metylpropanoat (500 mg, 0,96 mmol), K_3PO_4 (886 mg, 3,85 mmol) và phức 1,1-bis(diphenylphosphino)feroxen]diclopaladi(II) diclometan $[\text{PdCl}_2(\text{dppf}).\text{DCM}]$ (39 mg, 0,05 mmol) được bổ sung vào lọ vi sóng 20mL. THF (10 mL), 4-brom-N-etyl-2-

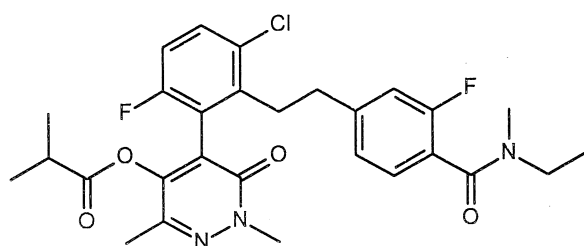
flo-N-metyl-benzamit (500 mg, 1,92 mmol) và nước (0,35 mL) được bổ sung sau đó hỗn hợp phản ứng được gia nhiệt tới 100°C trong 2 giờ dưới sự chiếu xạ vi sóng.

Hỗn hợp phản ứng được làm cô trong chân không để loại bỏ THF, sau đó được pha loãng với nước (20mL) và DCM (20mL). Lớp hữu cơ được phân chia và lớp nước được chiết với DCM (3 x 5mL). Các chất hữu cơ được kết hợp được làm khô và được cô trong chân không để cho cặn thô mà được tinh sạch bằng phép sắc ký cột trên gel silica, rửa giải với gradien xyclohexan/etyl axetat, để cho [5-[3-clo-2-[(E)-2-[4-etyl(metyl)carbamoyl]-3-flo-phenyl]vinyl]-6-flo-phenyl]-1,3-dimetyl-6-oxo-pyridazin-4-yl] 2-metylpropanoat (397 mg, hiệu suất 76%, A-4,028) dưới dạng chất rắn trắng ngà.

[5-[3-clo-2-[(E)-2-[4-etyl(metyl)carbamoyl]-3-flo-phenyl]vinyl]-6-flo-phenyl]-1,3-dimetyl-6-oxo-pyridazin-4-yl] 2-metylpropanoat (300 mg, 0,55 mmol) được tiến hành hydro hóa xúc tác trong EtOAc (6 mL) trên chất xúc tác 5% Pd/C (50% ướt) (0,12 g) ở 3 bar H₂.

Sau 5,5 giờ, LC/MS thể hiện phản ứng hoàn toàn. Hỗn hợp phản ứng được lọc qua đệm Celite®, rửa với etyl axetat/metanol. Dịch lọc được cô *trong chân không* để tạo nên cặn thô.

Cặn được hấp thụ lên silica và được tinh sạch bởi phép sắc ký cột trên gel silica (rửa giải gradien etyl axetat / hexan) để cho [5-[3-clo-2-[2-[4-etyl(metyl)carbamoyl]-3-flo-phenyl]etyl]-6-flo-phenyl]-1,3-dimetyl-6-oxo-pyridazin-4-yl] 2-metylpropanoat (285 mg, hiệu suất 95%, A-3,028) dưới dạng gồm không màu.



[NMR của hỗn hợp của các đồng phân quay] ¹H NMR (400 MHz, cloroform) δ = 7,42 (dd, J = 5,1, 8,9 Hz, 1H), [7,25 (t, J = 7,2 Hz, 0,5H), 7,21 (t, J = 7,5 Hz, 0,5H)], 6,99 (t, J = 8,9 Hz, 1H), 6,96 (dd, J = 1,2, 7,5 Hz, 1H), [6,89 (dd, J = 1,2, 6,9 Hz, 1H), 6,86 (dd, J = 1,2, 6,9 Hz, 1H)], 3,85 (s, 3H), [3,59 (q, J = 7,4 Hz, 1H), 3,24 (q, J = 7,4 Hz, 1H)], [3,08 (s, 1,5H), 2,90 (br s, 1,5H)], 2,88 - 2,78 (m, 3H), 2,75 - 2,64 (m, 1H), 2,55 (spt, J = 7,0 Hz, 1H), 2,26 (s, 3H), [1,23

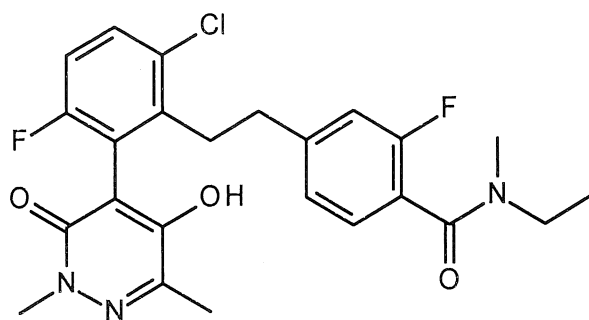
(t, J = 7,2 Hz, 1,5H), 1,10 (t, J = 7,2 Hz, 1,5H)], 0,98 (d, J = 7,0 Hz, 3H), 0,96 (d, J = 7,1 Hz, 3H)

4.3 4-[2-[6-clo-3-flo-2-(5-hydroxy-2,6-dimetyl-3-oxo-pyridazin-4-yl)phenyl]etyl]-N-etyl-2-flo-N-metyl-benzamit (A-1,028)

[5-[3-clo-2-[2-[4-[etyl(metyl)carbamoyl]-3-flo-phenyl]etyl]-6-flo-phenyl]-1,3-dimetyl-6-oxo-pyridazin-4-yl] 2-metylpropanoat (300 mg, 0,55 mmol) được hòa tan trong ethanol (3mL). Hỗn hợp được xử lý với dung dịch của liti hydroxit (69 mg, 1,65 mmol) trong nước (3mL). Phản ứng được khuấy ở nhiệt độ phòng trong 2 giờ.

Hỗn hợp phản ứng được làm cô trong chân không để loại bỏ ethanol. Dung dịch nước còn lại được pha loãng với nước (15mL) sau đó được axit hóa đến ~ độ pH 3 với HCl 2M và được chiết với DCM (3 x 10 mL). Các chất hữu cơ được kết hợp được làm khô và được cô trong chân không để tạo nên sản phẩm thô.

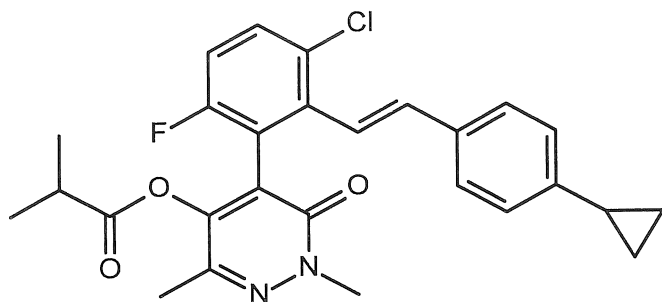
Sản phẩm thô được tinh sạch bởi phép sắc ký cột trên gel silica (rửa giải DCM / metanol gradient) để cho 4-[2-[6-clo-3-flo-2-(5-hydroxy-2,6-dimetyl-3-oxo-pyridazin-4-yl)phenyl]etyl]-N-etyl-2-flo-N-metyl-benzamit (224 mg, hiệu suất 86%, A-1,028) dưới dạng chất rắn màu trắng.



[NMR của hỗn hợp của các đồng phân

quay] ^1H NMR (400 MHz, DMSO- d_6) δ = 10,86 (br s, 1H), 7,55 - 7,49 (m, 1H), 7,25 - 7,19 (m, 2H), 6,95 - 6,89 (m, 2H), 3,61 (s, 3H), 3,46 (q, J = 7,1 Hz, 1H), 3,12 (q, J = 7,1 Hz, 1H), 2,95 (s, 1,5H), 2,78 (s, 1,5H), 2,78 - 2,63 (m, 4H), 2,26 (s, 3H), 1,11 (t, J = 7,1 Hz, 1,5H), 1,00 (t, J = 7,1 Hz, 1,5H).

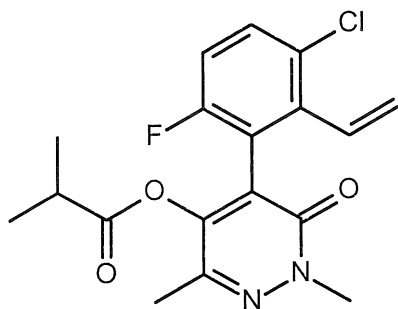
Ví dụ 5 Việc điều chế của [5-[3-clo-2-[(E)-2-(4-xyclopropylphenyl)vinyl]-6-flo-phenyl]-1,3-dimetyl-6-oxo-pyridazin-4-yl] 2-metylpropanoat (A-4,038)



5.1 [5-(3-clo-6-flo-2-vinyl-phenyl)-1,3-dimetyl-6-oxo-pyridazin-4-yl] 2-metylpropanoat

[5-(2-brom-3-clo-6-flo-phenyl)-1,3-dimetyl-6-oxo-pyridazin-4-yl] 2-metylpropanoat (4,177 g, 10,00 mmol, 1,0 eq) và tributyl(vinyl)stannan (4,384 mL, 15,00 mmol, 1,50 eq) được hòa tan trong toluen (60,00 mL) sau đó phức 1,1-bis(diphenylphosphino)feroxen]diclopaladi(II) diclometan [PdCl₂(dppf).DCM] (408 mg, 0,50 mmol, 0,05 eq) được bổ sung. Hỗn hợp phản ứng được gia nhiệt ở hồi lưu qua đêm.

Hỗn hợp phản ứng được để nguội đến nhiệt độ phòng sau đó được cô trong chân không. Sản phẩm thô sau đó được tinh sạch bởi phép sắc ký cột nhanh để tạo nên [5-(3-clo-6-flo-2-vinyl-phenyl)-1,3-dimetyl-6-oxo-pyridazin-4-yl] 2-metylpropanoat dưới dạng chất rắn trắng đục (3,02g, hiệu suất 83%).



¹H NMR (400MHz, CDCl₃) δ = 7,40 (dd, J=5,1, 8,7 Hz, 1H), 6,99 (t, J=8,7 Hz, 1H), 6,65 (dd, J=11,6, 17,6 Hz, 1H), 5,37 - 5,30 (m, 2H), 3,79 (s, 3H), 2,59 (spt, J=7,0 Hz, 1H), 2,23 (s, 3H), 1,04 (d, J=7,0 Hz, 4H), 1,03 (d, J=7,0 Hz, 1H)

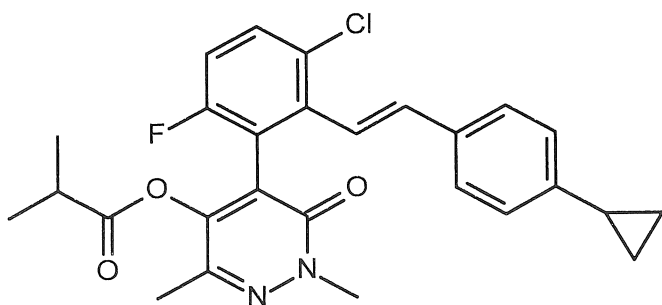
5.2 [5-[3-clo-2-[(E)-2-(4-xyclopropylphenyl)vinyl]-6-flo-phenyl]-1,3-dimetyl-6-oxo-pyridazin-4-yl] 2-metylpropanoat (A-4,038)

Hỗn hợp được khuấy của [5-(3-clo-6-flo-2-vinyl-phenyl)-1,3-dimetyl-6-oxo-pyridazin-4-yl] 2-metylpropanoat (300 mg, 1,0 eq), clo[(tri-tert-butylphosphin)-2-(2-aminobiphenyl)] paladi(II) (21 mg, 0,05 eq), 1-brom-4-xyclopropylbenzen (243 mg, 1,5

eq) và N,N-diisopropyletylamin (0,29 mL, 2,0 eq) trong toluen (5 mL) trong nitor được gia nhiệt ở hồi lưu trong 3 giờ.

Hỗn hợp phản ứng được để nguội đến nhiệt độ phòng sau đó được pha loãng với DCM và được lọc qua đệm Celite, rửa giải với các phần khác của DCM. Dịch lọc được làm cô trong chân không để cho sản phẩm thô.

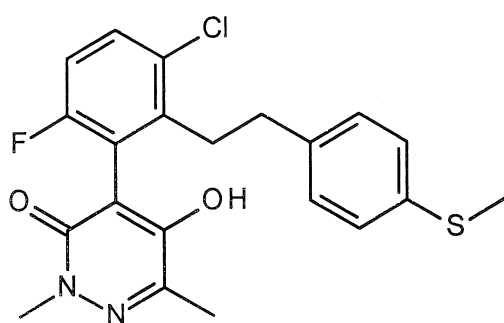
Sản phẩm thô được tinh sạch bởi phép sắc ký cột nhanh để cho [5-[3-clo-2-[(E)-2-(4-xyclopropylphenyl)vinyl]-6-flo-phenyl]-1,3-dimetyl-6-oxo-pyridazin-4-yl] 2-metylpropanoat (285 mg, hiệu suất 72%) dưới dạng gồm màu vàng nhạt.



^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ = 7,41

(dd, J = 5,1, 8,9 Hz, 1H), 7,26 - 7,22 (m, 2H), 7,02 - 6,98 (m, 2H), 6,99 (t, J = 8,9 Hz, 1H), 6,93 (d, J = 16,5 Hz, 1H), 6,59 (d, J = 16,5 Hz, 1H), 3,71 (s, 3H), 2,62 (spt, J = 7,0 Hz, 1H), 2,19 (s, 3H), 1,87 (tt, J = 5,0, 8,4 Hz, 1H), 1,07 (d, J = 7,0 Hz, 3H), 1,06 (d, J = 7,0 Hz, 1H), 0,99 - 0,93 (m, J = 2,0, 8,4 Hz, 2H), 0,73 - 0,64 (m, 2H).

Ví dụ 6 Việc điều chế của 4-[3-clo-6-flo-2-[2-(4-metylsulfanylphenyl)etyl]-phenyl]-5-hydroxy-2,6-dimetyl-pyridazin-3-on (A-1,039)

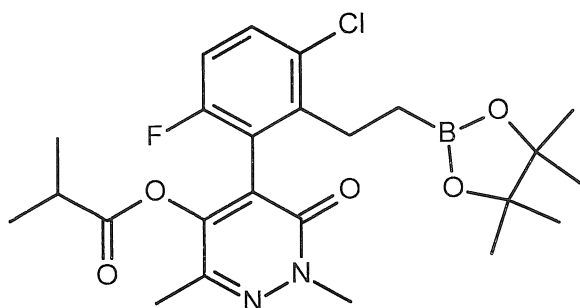


6.1 [5-[3-clo-6-flo-2-[2-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)etyl]phenyl]-1,3-dimetyl-6-oxo-pyridazin-4-yl] 2-metylpropanoat

Bình đáy tròn được làm khô trong lò sau đó được nạp với $\text{Ir}(\text{COD})\text{Cl}_2$ (299 mg, 0,45 mmol) và 4-diphenylphosphanylbutyl(diphenyl)phosphan (0380 mg, 0,89 mmol). Bình được tạo chân không và được điền đầy lại với nitor (x 3), sau đó THF (75 mL) được bổ sung và phản ứng được khuấy ở nhiệt độ phòng trong 30 phút. Dung dịch của [5-(3-

clo-6-flo-2-vinyl-phenyl)-1,3-dimetyl-6-oxo-pyridazin-4-yl] 2-metylpropanoat [được điều chế như được mô tả trong ví dụ 4] (6,7 g, 17,8 mmol) trong THF được bổ sung từng giọt và hỗn hợp được khuấy trong 10 phút, tiếp theo sau bởi việc bổ sung từng giọt của 4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan (3,02 mL, 20,8 mmol). Phản ứng được khuấy ở 60°C qua đêm.

Sau 24 giờ, phản ứng được để nguội đến nhiệt độ phòng sau đó được cô trong chân không. Sản phẩm thô được tinh sạch bởi phép sắc ký cột trên gel silica, rửa giải với gradien xyclohexan/etylaxetat, để cho [5-[3-clo-6-flo-2-[2-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)etyl]phenyl]-1,3-dimetyl-6-oxo-pyridazin-4-yl] 2-metylpropanoat (4,50 g, hiệu suất 51%) dưới dạng chất rắn màu vàng.



^1H NMR (500 MHz, cloroform) δ = 7,35

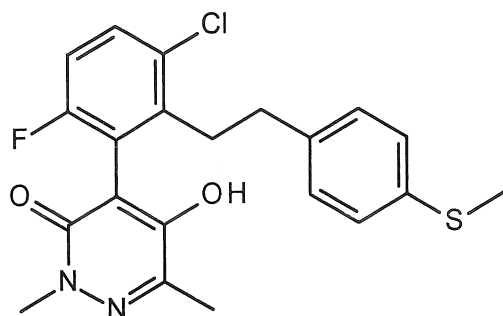
(dd, J = 5,2, 8,9 Hz, 1H), 6,90 (t, J = 8,6 Hz, 1H), 3,81 (s, 3H), 2,59 (t, J = 8,5 Hz, 2H), 2,53 (spt, J = 7,0 Hz, 1H), 2,24 (s, 3H), 1,32 - 1,16 (m, 12H), 1,08 - 1,00 (m, 2H), 0,98 (d, J = 7,0 Hz, 3H), 0,94 (d, J = 7,0 Hz, 3H).

6.2 4-[3-clo-6-flo-2-[2-(4-metylsulfanylphenyl)etyl]phenyl]-5-hydroxy-2,6-dimetyl-pyridazin-3-on (A-1,039)

[5-[3-clo-6-flo-2-[2-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)etyl]phenyl]-1,3-dimetyl-6-oxo-pyridazin-4-yl] 2-metylpropanoat (100 mg, 0,20 mmol), 1-brom-4-metylsulfanyl-benzen (62 mg, 0,30 mmol), clo(2-dixyclohexylphosphino-2',6'-diisopropoxy-1,1'-biphenyl)[2-(2'-amino-1,1'-biphenyl)]paladi(II) (24 mg, 0,03 mmol), K_2CO_3 (84 mg, 0,61 mmol), 1,4-dioxan (2 mL) và nước (0,2 mL) được kết hợp trong lọ vi sóng 5 mL. Hỗn hợp phản ứng sau đó được gia nhiệt ở 140°C trong 90 phút dưới sự chiếu xạ vi sóng.

Hỗn hợp phản ứng được để nguội đến nhiệt độ phòng sau đó được pha loãng với nước (10 mL), được axit hóa đến ~ độ pH 3 với HCl 2M và được chiết với DCM (4 x). Các chất hữu cơ được kết hợp được cô trong chân không để cho sản phẩm thô được tinh sạch bởi pha đảo ngược hướng trọng lượng HPLC để tạo nên 4-[3-clo-6-flo-2-[2-(4-

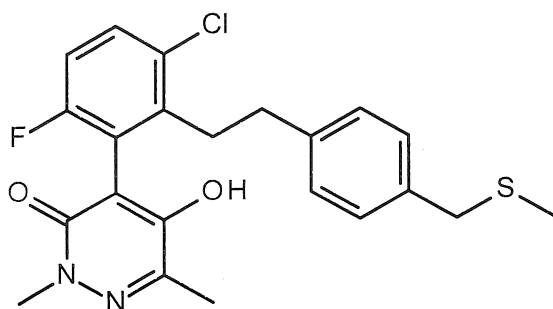
metylsulfanylphenyl)ethyl]phenyl]-5-hydroxy-2,6-dimethyl-pyridazin-3-on dưới dạng chất rắn màu trắng (22 mg, hiệu suất 22%, A-1039).



^1H NMR (400 MHz, cloroform) δ = 7,46 - 7,39

(m, 3H), 7,12 (d, J = 8,0 Hz, 2H), 6,98 (t, J = 8,6 Hz, 1H), 6,90 (d, J = 8,0 Hz, 2H), 3,73 (s, 3H), 2,84 - 2,64 (m, 4H), 2,45 (s, 3H), 2,29 (s, 3H).

Ví dụ 7 Việc điều chế của 4-[3-clo-6-flo-2-[2-[4-(metylsulfanylmetyl)phenyl]etyl]phenyl]-5-hydroxy-2,6-dimetyl-pyridazin-3-on (A-1,388)

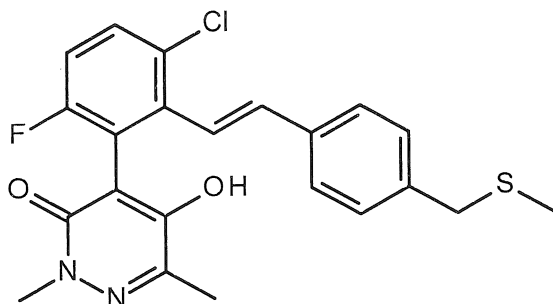


7.1 4-[3-clo-6-flo-2-[(E)-2-[4-(metylsulfanylmetyl)phenyl]vinyl]phenyl]-5-hydroxy-2,6-dimetyl-pyridazin-3-on

[5-[3-clo-6-flo-2-[(E)-2-(6-metyl-4,8-dioxo-1,3,6,2-dioxazaborocan-2-yl)vinyl]phenyl]-1,3-dimetyl-6-oxo-pyridazin-4-yl] 2-metylpropanoat (500 mg, 0,96 mmol), 1-brom-4-(metylsulfanylmetyl)benzen (324 mg, 1,44 mmol), phức 1,1-bis(diphenylphosphino)feroxen]diclopaladi(II) diclometan $[\text{PdCl}_2(\text{dppf})\cdot\text{DCM}]$ (41 mg, 0,05 mmol) và kali cacbonat (417 mg, 2,89 mmol) được bổ sung vào lọ vi sóng 10-20 ml trong môi trường nitơ. Axetonitril được khử khí (11,5 mL) và nước (2,9 mL) được bổ sung và hỗn hợp được gia nhiệt tới 150°C trong 20 phút dưới sự chiếu xạ vi sóng.

Hỗn hợp phản ứng được cô tới khô. Cặn được xử lý với nước (20 ml) và pha nước được axit hóa đến độ pH 3 bằng việc bổ sung HCl 2M dẫn đến việc tạo thành của kết tủa. DCM (20 ml) được bổ sung để hấp thu kết tủa. Dung dịch nước muối (20 ml) được bổ sung và các pha được phân tách. Pha nước được chiết với hai phần khác của

DCM sau đó các phân chiết hữu cơ được kết hợp được làm khô và được cô trực tiếp trên silica. Vật liệu thô được tinh sạch bởi phép sắc ký nhanh tự động trên gel silica, rửa giải với gradien xyclohexan/etyl axetat để cho 4-[3-clo-6-flo-2-[(E)-2-[4-(metylsulfanylmetyl)phenyl]vinyl]phenyl]-5-hydroxy-2,6-dimetyl-pyridazin-3-on (341 mg, hiệu suất 82%) dưới dạng chất rắn trắng đục.



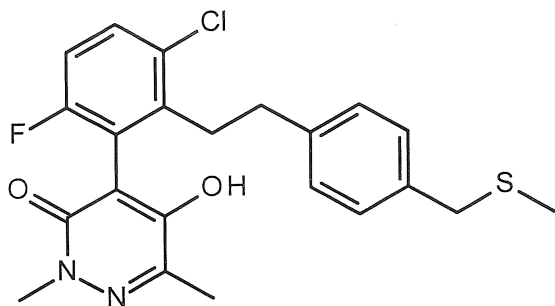
^1H NMR (500 MHz, DMSO- d_6) δ =

10,78 (br s, 1H), 7,60 (dd, J = 5,2, 8,7 Hz, 1H), 7,30 - 7,24 (m, 5H), 6,93 (d, J = 16,5 Hz, 1H), 6,56 (d, J = 16,5 Hz, 1H), 3,67 (s, 2H), 3,54 (s, 3H), 2,19 (s, 3H), 1,94 (s, 3H)

7.2 4-[3-clo-6-flo-2-[2-[4-(metylsulfanylmetyl)phenyl]etyl]phenyl]-5-hydroxy-2,6-dimetyl-pyridazin-3-on (A-1,388)

Vào dung dịch của 4-[3-clo-6-flo-2-[(E)-2-[4-(metylsulfanylmetyl)phenyl]vinyl]phenyl]-5-hydroxy-2,6-dimetyl-pyridazin-3-on (335 mg, 0,78 mmol) trong tetrahydrofuran (12 ml) trong môi trường nitơ, được bổ sung N,N-diisopropyletylamin (1,08 ml, 6,20 mmol). Hỗn hợp phản ứng được khuấy được gia nhiệt tới 70°C và 2,4,6-triisopropylbenzensulfonyl hydrazit (2,06 g, 6,21 mmol) được bổ sung từng phần qua 6 giờ sau đó hỗn hợp được gia nhiệt để hồi lưu trong 16 giờ. N,N-diisopropyletylamin (0,68 ml, 3,89 mmol) bổ sung được bổ sung vào hỗn hợp phản ứng, tiếp theo sau bởi 2,4,6-triisopropylbenzensulfonyl hydrazit (1,29 g, 3,89 mmol) và hỗn hợp được gia nhiệt để hồi lưu trong 6 giờ nữa.

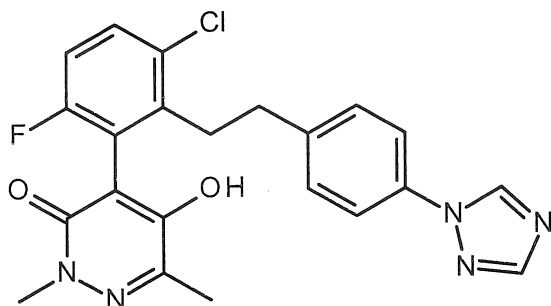
Hỗn hợp phản ứng được để nguội đến nhiệt độ phòng, sau đó được cô trực tiếp lên trên silica. Vật liệu thô được tinh sạch một phần bởi sắc ký nhanh tự động trên gel silica rửa giải với gradien xyclohexan/etyl axetat. Vật liệu thu được được tinh sạch thêm bởi pha đảo ngược hướng trọng lượng HPLC để tạo nên 4-[3-clo-6-flo-2-[2-[4-(metylsulfanylmetyl)phenyl]etyl]phenyl]-5-hydroxy-2,6-dimetyl-pyridazin-3-on dưới dạng chất rắn màu trắng (208 mg, hiệu suất 62%, A-1,388)



^1H NMR (400 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$), $\delta = 10,83$

(s,1H), 7,56-7,53 (m,1H), 7,23-7,16 (m, 3H), 6,96-6,94 (d, 2H), 3,62 (s, 2H), 3,60 (s, 3H), 2,68- 2,54 (m, 4H), 2,26 (s, 3H), 1,92 (s, 3H)

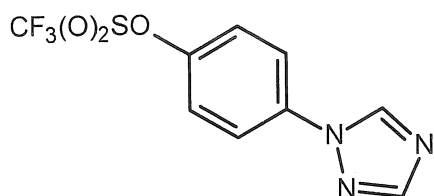
Ví dụ 8 4-[3-clo-6-flo-2-[2-[4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenyl]etyl]phenyl]-5-hydroxy-2,6-dimetyl-pyridazin-3-on (A-1,385)



8.1 [4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenyl] triflometansulfonat

4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenol (1,22 g, 7,57 mmol) được hòa tan diclometan (10 ml) trong nitor và được làm mát đến $\sim 0^\circ\text{C}$. Dung dịch của pyridin (1,22 ml, 15,1 mmol) trong diclometan (5 ml) được bổ sung từng giọt trong ~ 2 phút. Hỗn hợp được khuấy 5 phút, sau đó dung dịch của triflometansulfonic anhydrit (1,53 ml, 9,08 mmol) trong diclometan (5 ml) được bổ sung từng giọt trong ~ 2 phút. Việc làm mát được loại bỏ và hỗn hợp phản ứng được làm ấm đến nhiệt độ phòng sau đó được khuấy ở nhiệt độ phòng trong 16 giờ.

Phản ứng được làm dừng bằng việc bổ sung HCl 2M aq. (20 ml), sau đó pha hữu cơ được phân tách. Pha nước được chiết tiếp với diclometan (2 x 20 ml). Các chất hữu cơ được kết hợp được rửa với nước (20 ml), được làm khô, sau đó được cô dưới áp suất giảm để tạo chất rắn kem. Vật liệu thô được tinh sạch bởi phép sắc ký nhanh tự động trên silica rửa giải với gradien xyclohexan/etyl axetat để cho [4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenyl] triflometansulfonat dưới dạng chất rắn màu trắng (2,02 g, hiệu suất 91%).



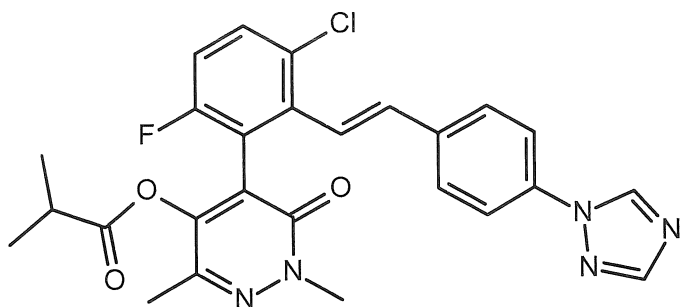
^1H NMR (400 MHz, chloroform) δ = 8,59 (s, 1H), 8,14 (s, 1H), 7,86 - 7,78 (m, 2H), 7,50 - 7,41 (m, 2H).

8.2 [5-[3-clo-6-flo-2-[(E)-2-[4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenyl]vinyl]phenyl]-1,3-dimetyl-6-oxo-pyridazin-4-yl] 2-metylpropanoat

[5-[3-clo-6-flo-2-[(E)-2-(6-metyl-4,8-dioxo-1,3,6,2-dioxazaborocan-2-yl)vinyl]phenyl]-1,3-dimetyl-6-oxo-pyridazin-4-yl] 2-metylpropanoat (500 mg, 0,96 mmol), phức 1,1-bis(diphenylphosphino)feroxen]diclopaladi(II) diclometan [$\text{PdCl}_2(\text{dppf})\cdot\text{DCM}$] (39 mg, 0,048 mmol), [4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenyl] triflometansulfonat (367 mg, 1,25 mmol) và kali phosphat (834 mg, 3,85 mmol) được bổ sung vào lọ vi sóng 10-20ml.

Tetrahydrofuran (10 ml) và nước (0,5 ml) được bổ sung, sau đó hỗn hợp phản ứng được khử khí bằng việc khuấy trong chân không sau đó điền đầy lại với nitơ (x3). Hỗn hợp phản ứng được gia nhiệt trong vi sóng ở 120°C trong 60 phút dưới sự chiếu xạ vi sóng.

Hỗn hợp phản ứng được lọc qua nút Celite®, rửa qua với EtOAc & EtOH. Dịch lọc được cô dưới áp suất giảm để tạo gồm màu nâu (840 mg). Vật liệu thô được tinh sạch bởi phép sắc ký nhanh tự động trên gel silica rửa giải với gradien xyclohexan/etyl axetat để cho gồm màu vàng nhạt (389 mg). Nguyên liệu được tinh sạch được hòa tan trong axetonitril (10 ml) và được xử lý với nhựa chống muối kim loại SiliCycle SiliaMetS® Thiol (SH) (365 mg) ở nhiệt độ phòng. Huyền phù được khuấy ở nhiệt độ phòng trong 3 giờ, sau đó được lọc để loại bỏ nhựa, rửa thêm với axetonitril. Dịch lọc được làm cô trong chân không để cung cấp [5-[3-clo-6-flo-2-[(E)-2-[4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenyl]vinyl]phenyl]-1,3-dimetyl-6-oxo-pyridazin-4-yl] 2-metylpropanoat dưới dạng gồm không màu (361 mg, hiệu suất 73%).



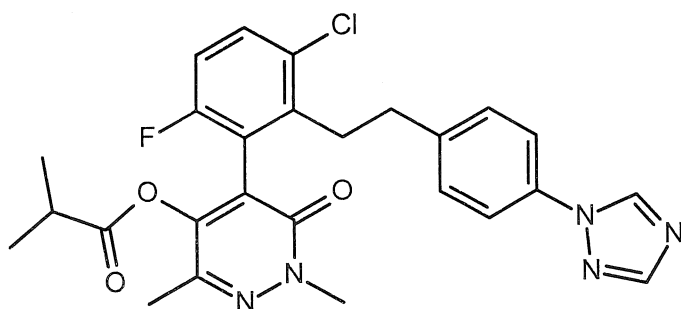
^1H NMR (400 MHz, cloroform) δ

ppm 8,55 (s, 1H), 8,11 (s, 1H), 7,60 - 7,66 (m, 2H), 7,42 - 7,53 (m, 3H), 7,01 - 7,10 (m, 2H), 6,69 (d, $J=16,5$ Hz, 1H), 3,70 (s, 3H), 2,66 (spt, $J=7,0$ Hz, 1H), 2,23 (s, 3H), 1,11 (d, $J = 7,0$ Hz, 1H), 1,08 (d, $J = 7,1$ Hz, 1H)

8.3 [5-[3-clo-6-flo-2-[2-[4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenyl]etyl]phenyl]-1,3-dimetyl-6-oxo-pyridazin-4-yl] 2-metylpropanoat (A-3,385)

[5-[3-clo-6-flo-2-[(E)-2-[4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenyl]vinyl]phenyl]-1,3-dimetyl-6-oxo-pyridazin-4-yl] 2-metylpropanoat (365 mg, 0,72 mmol) được tiến hành hydro hóa xúc tác trong EtOAc (10 mL) qua chất xúc tác 5% Pd/C (50% ướt) (0,15 g) ở 3 bar H_2 trong 24 giờ.

Hỗn hợp phản ứng được lọc qua đệm Celite®, rửa với etyl axetat. Dịch lọc được làm cô trong chân không để tạo nên cặn thô (350 mg) mà được hấp thụ lên silica và được tinh sạch bởi phép sắc ký nhanh tự động trên gel silica, rửa giải với gradien xyclohexan/etyl axetat. [5-[3-clo-6-flo-2-[2-[4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenyl]etyl]phenyl]-1,3-dimetyl-6-oxo-pyridazin-4-yl] 2-metylpropanoat (A-3,385) được thu dưới dạng gồm không màu (321 mg, hiệu suất 88%).



^1H NMR (400 MHz, cloroform) δ =

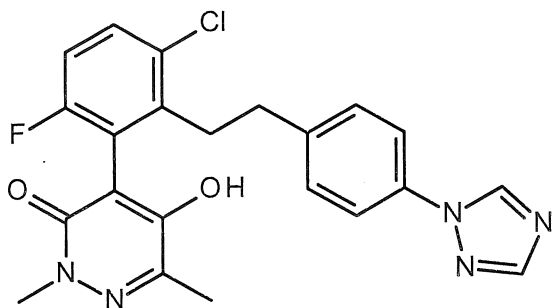
8,51 (s, 1H), 8,09 (s, 1H), 7,55 (d, $J = 8,2$ Hz, 2H), 7,43 (dd, $J = 5,2, 8,7$ Hz, 1H), 7,27 (d, $J = 8,2$ Hz, 2H), 7,00 (t, $J = 8,7$ Hz, 1H), 3,84 (s, 3H), 2,97 - 2,80 (m, 3H), 2,79 - 2,67 (m, 1H), 2,55 (spt, $J = 7,0$ Hz, 1H), 2,25 (s, 3H), 0,98 (d, $J = 7,0$ Hz, 3H), 0,96 (d, $J = 7,0$ Hz, 1H)

8.4 4-[3-clo-6-flo-2-[2-[4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenyl]etyl]phenyl]-5-hydroxy-2,6-dimetyl-pyridazin-3-on (A-1,385)

[5-[3-clo-6-flo-2-[2-[4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenyl]etyl]phenyl]-1,3-dimetyl-6-oxo-pyridazin-4-yl] 2-metylpropanoat (320 mg, 0,63 mmol) được khuấy trong etanol (5 ml) ở nhiệt độ phòng.

Dung dịch của liti hydroxit monohydrat (81 mg, 1,88 mmol) trong nước (2 ml) được bổ sung từng giọt và phản ứng được khuấy ở nhiệt độ phòng trong 1 giờ.

Dung môi etanol được loại bỏ trong áp suất giảm, sau đó cặn được pha loãng với nước (20 ml). Pha nước được axit hóa tới ~độ pH 3-4 bằng việc bổ sung HCl 2M (aq.), sau đó được chiết với EtOAc (3 x 10 ml). Các phần chiết hữu cơ được kết hợp được cô dưới áp suất giảm để cho chất rắn trắng (292 mg). Cặn thô được tinh sạch bởi phép sắc ký nhanh tự động trên silica, rửa giải với gradien xyclohexan/etyl axetat và etyl axetat/etanol để tạo nên 4-[3-clo-6-flo-2-[2-[4-(1,2,4-triazol-1-yl)phenyl]etyl]phenyl]-5-hydroxy-2,6-dimetyl-pyridazin-3-on (A-1,365) dưới dạng chất rắn màu trắng (260 mg, hiệu suất 94%).



¹H NMR (400MHz, metanol), δ ppm 9,03 (s, 1H), 8,14 (s, 1H), 7,65 - 7,70 (m, 2H), 7,51 (dd, J=5,2, 8,7 Hz, 1H), 7,20 (m, 2H), 7,11 (t, J=8,7 Hz, 1H), 3,72 (s, 3H), 2,72 - 2,89 (m, 4H), 2,32 (s, 3H)

Ví dụ 9 4-[3-xyclopropyl-6-flo-2-[2-(2-flo-4-pyridyl)etyl]phenyl]-5-hydroxy-2,6-dimetyl-pyridazin-3-on (C-1,013)

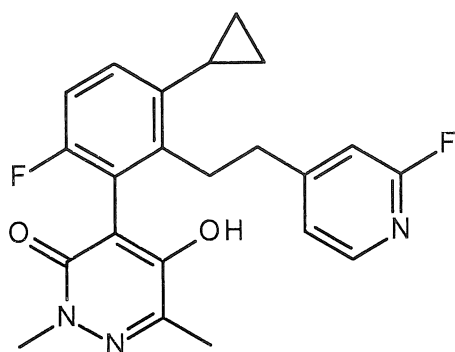
[5-[3-clo-6-flo-2-[2-(2-flo-4-pyridyl)etyl]phenyl]-1,3-dimetyl-6-oxo-pyridazin-4-yl] 2-metylpropanoat (250 mg, 0,54 mmol), trikali phosphat monohydrat (374 mg, 1,62 mmol) và RuPhos Pd G2 (42 mg, 0,05 mmol) được nạp vào lọ vi sóng 2-5 ml được trang bị với thanh khuấy. Bình phản ứng được hút chân không và được nạp lại với nito (X3). 1,4-dioxan (4 ml) được bổ sung tiếp theo sau bởi axit xyclopropylboronic (139

mg, 1,62 mmol) và nước (1 ml) (cả hai dung môi được khử khí). Hỗn hợp sau đó được gia nhiệt tới 120°C trong 1 giờ dưới sự chiếu xạ vi sóng.

Phản ứng được làm mát đến nhiệt độ phòng, trước khi bổ sung thêm xyclopropylboronic (139 mg, 1,62 mmol) và RuPhos Pd G2 (42 mg, 0,05 mmol) và phản ứng được gia nhiệt tới 120°C trong 2,5 giờ nữa.

Hỗn hợp phản ứng được làm cô trong chân không để loại bỏ dioxan. Cặn được pha loãng với nước (20 ml) và DCM (20 mL) và các lớp được phân tách. Pha nước được chiết với các phần khác của DCM (3 X 5 ml) sau đó các phần chiết hữu cơ được kết hợp được làm khô và được cô để thu được chất rắn sẫm màu (331 mg)

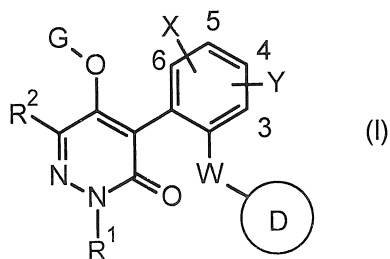
Cặn thô được tinh sạch bởi pha đảo ngược hướng trọng lượng HPLC để tạo nên 4-[3-xyclopropyl-6-fluoro-2-[2-(2-fluoro-4-pyridyl)ethyl]phenyl]-5-hydroxy-2,6-dimethylpyridazin-3-on (C-1,013) dưới dạng chất rắn màu trắng



^1H NMR (400 MHz, metanol) δ = 8,01 (d, J = 5,1 Hz, 1H), 7,13 (dd, J = 5,6, 8,3 Hz, 1H), 7,02 - 6,93 (m, 2H), 6,72 (br s, 1H), 3,72 (s, 3H), 3,02 - 2,75 (m, 4H), 2,32 (s, 3H), 1,97 - 1,87 (m, 1H), 1,02 - 0,89 (m, 2H), 0,74 - 0,61 (m, 2H)

Các hợp chất A-1,023, A-1,024, A-1,025, A-1,026, A-1,027, A-1,028, A-1,029, A-1,030, A-1,031, A-1,032, A-1,033, A-1,034, A-1,035, A-1,036, A-1,037, A-1,038, A-1,039, A-1,040, A-1,041, A-1,042, A-1,043, A-1,044, A-2,027, A-2,030, A-2,037, A-3,028, A-3,029, A-3,030, A-3,035, A-3,036, A-3,038, A-4,029, A-4,030, A-4,035, A-4,036, A-1,373, A-1,374, A-1,375, A-1,376, A-1,377, A-1,378, A-1,379, A-1,380, A-1,381, A-1,382, A-1,383, A-1,384, A-1,386, A-1,387, A-1,389, A-1,390, A-1,391 và A-1,392 được điều chế sử dụng các phương pháp thông thường như được mô tả ở trên. Bảng 4 dưới đây thể hiện cấu trúc của các hợp chất này và dữ liệu đặc điểm NMR.

Bảng 4 Các ví dụ điều chế của các hợp chất có công thức (I). Hệ thống đánh số được sử dụng để mô tả các vị trí của X và Y được thể hiện chỉ nhằm mục đích cho rõ ràng.



Hợp chất	R1	R2	G	X	Y	W	D	Chi tiết NMR
A-1,023	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH2-CH2-	4-oxazol-5-ylphenyl-	¹ H NMR (400 MHz, metanol) δ = 8,22 (s, 1H), 7,63 - 7,56 (m, 2H), 7,51 (dd, J = 5,2, 8,9 Hz, 1H), 7,45 (s, 1H), 7,14 - 7,07 (m, 3H), 3,72 (s, 3H), 2,86 - 2,66 (m, 4H), 2,32 (s, 3H).
A-1,024	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH2-CH2-	4-axetamidophenyl-	¹ H NMR (400 MHz, metanol) δ = 7,50 (dd, J = 5,3, 8,6 Hz, 1H), 7,38 (d, J = 8,4 Hz, 2H), 7,09 (t, J = 8,6 Hz, 1H), 6,94 (d, J = 8,4 Hz, 2H), 3,72 (s, 3H), 2,74 (s, 4H), 2,33 (s, 3H), 2,09 (s, 3H)
A-1,025	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH2-CH2-	4-(dimetylsulfo)phenyl-	¹ H NMR (500 MHz, DMSO-d ₆) δ = 10,86 (br s, 1H), 7,62 (d, J = 8,3 Hz, 2H), 7,53 (dd, J = 5,2, 8,8 Hz, 1H), 7,29 (d, J = 8,3 Hz, 2H), 7,22 (t, J = 8,8 Hz, 1H), 3,61 (s, 3H), 2,83 - 2,64 (m,

Hợp chất	R1	R2	G	X	Y	W	D	Chi tiết NMR
								4H), 2,57 (s, 6H), 2,26 (s, 3H)
A-1,026	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH2-CH2-	4-tert-butylphenyl-	¹ H NMR (400 MHz, DMSO-d ₆) δ = 10,86 (br s, 1H), 7,57 (dd, J = 5,1, 8,9 Hz, 1H), 7,28 (d, J = 8,3 Hz, 2H), 7,22 (t, J = 8,9 Hz, 1H), 6,93 (d, J = 8,3 Hz, 2H), 3,62 (s, 3H), 2,70 - 2,53 (m, 4H), 2,27 (s, 3H), 1,24 (s, 9H)
A-1,027	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH2-CH2-	4-biphenyl-	¹ H NMR (400 MHz, chloroform) δ = 7,57 - 7,52 (m, 2H), 7,50 - 7,40 (m, 5H), 7,37 - 7,30 (m, 1H), 7,07 (d, J = 8,2 Hz, 2H), 7,02 (t, J = 8,6 Hz, 1H), 5,47 (s, 1H), 3,75 (s, 3H), 2,88 - 2,80 (m, 3H), 2,27 (s, 3H)
A-1,028	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH2-CH2-	4-[etyl(metyl)carbamoyl]-3-flo-phenyl-	¹ H NMR (400 MHz, DMSO-d ₆) δ = 10,86 (br s, 1H), 7,55 - 7,49 (m, 1H), 7,25 - 7,19 (m, 2H), 6,95 - 6,89 (m, 2H), 3,61 (s, 3H), 3,46 (q, J = 7,1 Hz, 1H), 3,12 (q, J = 7,1 Hz, 1H), 2,95 (s, 1,5H), 2,78 (s, 1,5H), 2,78 - 2,63 (m, 4H), 2,26 (s, 3H), 1,11 (t, J = 7,1 Hz, 1,5H), 1,00 (t, J = 7,1 Hz, 1,5H)
A-1,029	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH2-CH2-	2-xyanophenyl-	¹ H NMR (400 MHz, chloroform) δ

Hợp chất	R1	R2	G	X	Y	W	D	Chi tiết NMR
								= 7,51 - 7,44 (m, 2H), 7,33 - 7,24 (m, 3H + đỉnh CHCl ₃), 6,95 (t, J = 8,6 Hz, 1H), 3,69 (s, 3H), 2,95 - 2,79 (m, 4H), 2,30 (s, 3H).
A-1,030	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH ₂ -CH ₂ -	3-xyanophenyl-	¹ H NMR (400 MHz, cloroform) δ = 7,46 (td, J = 1,4, 7,6 Hz, 1H), 7,37 (dd, J = 5,2, 8,9 Hz, 1H), 7,35 - 7,28 (m, 2H), 7,26 - 7,23 (m, 1H), 6,95 (t, J = 8,6 Hz, 1H), 3,69 (s, 3H), 2,82 - 2,63 (m, 4H), 2,28 (s, 3H).
A-1,031	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH ₂ -CH ₂ -	4-amino-3-metylphenyl-	¹ H NMR (400 MHz, cloroform) δ ppm 2,09 (s, 3 H) 2,27 (s, 3 H) 2,50 - 2,83 (m, 4 H) 3,70 (s, 3 H) 6,52 (d, J=7,83 Hz, 1 H) 6,59 - 6,73 (m, 2 H) 6,93 (t, J=8,56 Hz, 1 H) 7,38 (dd, J=8,86, 5,20 Hz, 1 H)
A-1,032	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH ₂ -CH ₂ -	4-metylsulfonyl phenyl-	¹ H NMR (400 MHz, DMSO-d ₆) δ = 10,86 (br s, 1H), 7,81 (app. d, J = 8,3 Hz, 2H), 7,56 (dd, J = 5,2, 8,6 Hz, 1H), 7,29 (app. d, J = 8,3 Hz, 2H), 7,23 (t, J = 8,6 Hz, 1H), 3,61 (s, 3H), 3,17 (s, 3H), 2,86 - 2,63 (m, 4H), 2,26 (s, 3H)

Hợp chất	R1	R2	G	X	Y	W	D	Chi tiết NMR
A-1,033	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH2-CH2-	4-dimethylamino phenyl-	¹ H NMR (400 MHz, cloroform) δ ppm 2,27 (s, 3 H) 2,62 - 2,77 (m, 3 H) 2,80 - 2,87 (m, 1 H) 2,90 (s, 6 H) 3,72 (s, 3 H) 6,59 - 6,65 (m, 2 H) 6,86 (d, J=8,68 Hz, 2 H) 6,96 (t, J=8,56 Hz, 1 H) 7,42 (dd, J=8,80, 5,14 Hz, 1 H)
A-1,034	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH2-CH2-	4-methylaminop henyl-	¹ H NMR (400 MHz, cloroform) δ ppm 2,28 (s, 3 H) 2,80 (s, 7 H) 3,73 (s, 3 H) 6,49 (d, J=8,44 Hz, 2 H) 6,81 (d, J=8,44 Hz, 2 H) 6,97 (t, J=8,56 Hz, 1 H) 7,42 (dd, J=8,80, 5,14 Hz, 1 H)
A-1,035	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH2-CH2-	4-tert-butoxyphenyl -	¹ H NMR (400 MHz, cloroform) δ = 7,28 (dd, J = 5,2, 8,9 Hz, 1H), 6,82 (s, 5H), 3,62 (s, 3H), 2,73 - 2,50 (m, 4H), 2,23 (s, 3H)
A-1,036	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH2-CH2-	4-xyanophenyl-	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ ppm 7,46 - 7,51 (m, 2 H) 7,26 - 7,31 (m, 1 H) 7,08 (d, J=8,19 Hz, 2 H) 6,86 (t, J=8,50 Hz, 1 H) 3,63 (s, 3 H) 2,61 - 2,77 (m, 4 H) 2,24 (s, 3 H)

Hợp chất	R1	R2	G	X	Y	W	D	Chi tiết NMR
A-1,037	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH2-CH2-	4-hydroxyphenyl-	¹ H NMR (400MHz, DMSO-d ₆) δ = 10,82 (br s, 1H), 9,17 (s, 1H), 7,54 (dd, J=5,2, 8,9 Hz, 1H), 7,20 (t, J=8,9 Hz, 1H), 6,82 - 6,75 (m, 2H), 6,65 - 6,60 (m, 2H), 3,61 (s, 3H), 2,69 - 2,43 (m, 4H), 2,26 (s, 3H)
A-1,038	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH2-CH2-	4-xyclopropylphenyl-	¹ H NMR (400MHz, cloroform) δ = 7,37 (dd, J=5,2, 8,8 Hz, 1H), 6,96 - 6,88 (m, 2H), 6,91 (t, J=8,8 Hz, 1H), 6,88 - 6,83 (m, 2H), 3,67 (s, 3H), 2,82 - 2,62 (m, 4H), 2,25 (s, 3H), 1,84 (tt, J=5,0, 8,5 Hz, 1H), 0,95 - 0,88 (m, 2H), 0,68 - 0,60 (m, 2H)
A-1,039	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH2-CH2-	4-(metylsulfanyl)phenyl-	¹ H NMR (400 MHz, cloroform) δ = 7,46 - 7,39 (m, 3H), 7,12 (d, J = 8,0 Hz, 2H), 6,98 (t, J = 8,6 Hz, 1H), 6,90 (d, J = 8,0 Hz, 2H), 3,73 (s, 3H), 2,84 - 2,64 (m, 4H), 2,45 (s, 3H), 2,29 (s, 3H)
A-1,040	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH2-CH2-	4-cacboxyphenyl-	¹ H NMR (400 MHz, metanol) δ = 7,88 (d, J = 8,4 Hz, 2H), 7,51 (dd, J = 5,2, 8,9 Hz, 1H), 7,11 (d, J = 8,0 Hz,

Hợp chất	R1	R2	G	X	Y	W	D	Chi tiết NMR
								1H), 7,11 (t, J = 8,5 Hz, 1H), 3,74 - 3,70 (m, 3H), 2,88 - 2,70 (m, 3H), 2,34 - 2,26 (m, 3H)
A-1,041	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH2-CH2-	4-metoxycacbonylphenyl-	1H NMR (400 MHz, cloroform) δ = 7,88 (d, J = 8,3 Hz, 2H), 7,40 (dd, J = 5,2, 8,9 Hz, 1H), 7,05 (d, J = 8,3 Hz, 2H), 6,96 (t, J = 8,9 Hz, 1H), 3,89 (s, 3H), 3,72 (s, 3H), 2,86 - 2,72 (m, 4H), 2,28 (s, 3H)
A-1,042	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH2-CH2-	4-(tert-butoxycacbonylamino)-3-flo-phenyl-	1H NMR (400 MHz, metanol) δ = 7,66 - 7,55 (m, 1H), 7,48 (br dd, J = 5,3, 8,7 Hz, 1H), 7,08 (t, J = 8,7 Hz, 1H), 6,78 - 6,71 (m, 2H), 3,72 (s, 3H), 2,82 - 2,60 (m, 4H), 2,32 (s, 3H), 1,50 (s, 9H)
A-1,043	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH2-CH2-	2-(metylsulfanyl)-4-pyridyl-	1H NMR (500 MHz, cloroform) δ ppm 2,30 (s, 3 H) 2,52 (s, 3 H) 2,69 - 2,80 (m, 1 H) 2,85 - 2,94 (m, 1 H) 2,96 - 3,09 (m, 2 H) 3,69 (s, 3 H) 6,85 (d, J=5,54 Hz, 1 H) 6,89 - 6,97 (m, 2 H) 7,35 (dd, J=8,77, 4,99 Hz, 1 H) 8,18 (d, J=5,79 Hz, 1 H)
A-1,044	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH2-CH2-	2-axetamido-4-pyridyl-	1H NMR (400 MHz, cloroform) δ ppm 8,00 (d,

Hợp chất	R1	R2	G	X	Y	W	D	Chi tiết NMR
								J=5,26 Hz, 1 H) 7,64 (br s, 1 H) 7,37 (br s, 1 H) 7,00 (br d, J=1,10 Hz, 1 H) 6,78 (dd, J=5,26, 1,34 Hz, 1 H) 3,73 (s, 3 H) 2,97 (br d, J=9,66 Hz, 1 H) 2,73 - 2,88 (m, 3 H) 2,27 (s, 4 H) 2,16 (s, 3 H)
A-2,027	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	(E) - CH=C H-	4-biphenyl-	¹ H NMR (400 MHz, chloroform) δ = 7,59 - 7,33 (m, 10H), 7,07 (t, J = 8,6 Hz, 1H), 7,01 (d, J = 16,4 Hz, 1H), 6,70 (d, J = 16,5 Hz, 1H), 5,63 (s, 1H), 3,73 (s, 3H), 2,28 (s, 3H)
A-2,030	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	(E) - CH=C H-	3-cyanophenyl-	¹ H NMR (400 MHz, chloroform) δ = 7,56 - 7,47 (m, 3H), 7,44 - 7,38 (m, 2H), 7,04 - 6,93 (m, 2H), 6,53 (d, J = 16,5 Hz, 1H), 3,64 (s, 3H), 2,25 (s, 3H).
A-2,037	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	(E) - CH=C H-	4-hydroxyphenyl-	¹ H NMR (400MHz, DMSO-d ₆) δ = 10,75 (br s, 1H), 9,67 (s, 1H), 7,58 (dd, J=5,3, 8,8 Hz, 1H), 7,23 (t, J=8,8 Hz, 1H), 7,19 - 7,13 (m, 2H), 6,75 - 6,72 (m, 2H), 6,73 (d, J=16,5 Hz, 1H), 6,48 (d, J=16,5 Hz,

Hợp chất	R1	R2	G	X	Y	W	D	Chi tiết NMR
								1H), 3,55 (s, 3H), 2,19 (s, 3H)
A-3,028	-Me	-Me	- (C=O)i Pr	6-F	3-Cl	-CH2- CH2-	4- [etyl(metyl)ca rbamoyl]-3- flo-phenyl-	1H NMR (400 MHz, cloroform) δ = 7,42 (dd, J = 5,1, 8,9 Hz, 1H), [7,25 (t, J = 7,2 Hz, 0,5H), 7,21 (t, J = 7,5 Hz, 0,5H)], 6,99 (t, J = 8,9 Hz, 1H), 6,96 (dd, J = 1,2, 7,5 Hz, 1H), [6,89 (dd, J = 1,2, 6,9 Hz, 1H), 6,86 (dd, J = 1,2, 6,9 Hz, 1H)], 3,85 (s, 3H), [3,59 (q, J = 7,4 Hz, 1H), 3,24 (q, J = 7,4 Hz, 1H)], [3,08 (s, 1,5H), 2,90 (br s, 1,5H)], 2,88 - 2,78 (m, 3H), 2,75 - 2,64 (m, 1H), 2,55 (spt, J = 7,0 Hz, 1H), 2,26 (s, 3H), 1,23 (t, J = 7,2 Hz, 1,5H), 1,10 (t, J = 7,2 Hz, 1,5H)], 0,98 (d, J = 7,0 Hz, 3H), 0,96 (d, J = 7,1 Hz, 3H)
A-3,029	-Me	-Me	- (C=O)i Pr	6-F	3-Cl	-CH2- CH2-	2- xyanophenyl-	1H NMR (400 MHz, cloroform) δ = 7,56 (dd, J = 1,1, 7,7 Hz, 1H), 7,51 - 7,46 (m, 1H), 7,43 (dd, J = 5,1, 8,8 Hz, 1H), 7,32 (d, J = 7,7 Hz, 1H), 7,30 - 7,26 (m, 1H + đỉnh CHCl ₃), 7,01 (t, J = 8,6 Hz, 1H), 3,85 (s, 3H), 3,15 - 3,05 (m, 1H), 3,04 - 2,80 (m, 3H), 2,55 (spt, J

Hợp chất	R1	R2	G	X	Y	W	D	Chi tiết NMR
								= 7,0 Hz, 1H), 2,27 (s, 3H), 0,97 (dd, J = 1,1, 7,0 Hz, 6H).
A-3,030	-Me	-Me	- (C=O)i Pr	6-F	3-Cl	-CH2-CH2-	3-xyanophenyl-	¹ H NMR (400 MHz, cloroform) δ = 7,50 - 7,46 (m, 1H), 7,46 - 7,37 (m, 3H), 7,37 - 7,31 (m, 1H), 7,00 (t, J = 8,6 Hz, 1H), 3,86 (s, 3H), 3,00 - 2,78 (m, 3H), 2,73 - 2,63 (m, 1H), 2,55 (quin, J = 7,0 Hz, 1H), 2,26 (s, 3H), 0,97 (dd, J = 7,0, 13,5 Hz, 6H).
A-3,035	-Me	-Me	- (C=O)i Pr	6-F	3-Cl	-CH2-CH2-	4-tert-butoxyphenyl -	¹ H NMR (400 MHz, cloroform) δ = 7,40 (dd, J = 5,1, 8,8 Hz, 1H), 7,03 - 6,99 (m, 2H), 6,97 (t, J = 8,8 Hz, 1H), 6,90 - 6,83 (m, 2H), 3,84 (s, 3H), 2,85 - 2,68 (m, 4H), 2,55 (spt, J = 7,0 Hz, 1H), 2,25 (s, 3H), 1,32 (s, 9H), 0,97 (d, J = 7,0 Hz, 3H), 0,97 (d, J = 7,0 Hz, 3H)
A-3,036	-Me	-Me	- (C=O)i Pr	6-F	3-Cl	-CH2-CH2-	4-xyanophenyl-	¹ H NMR (400 MHz, cloroform) δ = 7,56 - 7,51 (m, 2H), 7,42 (dd, J = 5,2, 8,9 Hz, 1H), 7,26 - 7,21 (m, 2H), 7,00 (t, J = 8,9 Hz, 1H), 3,84 (s, 3H), 3,02 - 2,92 (m, 1H), 2,91 - 2,80 (m, 2H), 2,75 - 2,65 (m, 1H), 2,54 (spt, J = 7,0

Hợp chất	R1	R2	G	X	Y	W	D	Chi tiết NMR
								Hz, 1H), 2,25 (s, 3H), 0,98 (d, J = 7,0 Hz, 3H), 0,95 (d, J = 7,0 Hz, 3H)
A-3,038	-Me	-Me	- (C=O)i Pr	6-F	3-Cl	-CH2-CH2-	4-xyclopropylphenyl-	1H NMR (400MHz, cloroform) δ = 7,41 (dd, J=5,2, 8,8 Hz, 1H), 7,04 - 7,00 (m, 2H), 6,98 - 6,94 (m, 2H), 6,97 (t, J=8,8 Hz, 1H), 3,83 (s, 3H), 2,84 - 2,67 (m, 4H), 2,53 (spt, J=7,0 Hz, 1H), 2,24 (s, 3H), 1,85 (tt, J=5,1, 8,4 Hz, 1H), 0,96 (d, J=7,0 Hz, 3H), 0,96 (d, J=7,0 Hz, 3H), 0,94 - 0,88 (m, J=1,9, 8,5 Hz, 2H), 0,68 - 0,61 (m, 2H)
A-4,029	-Me	-Me	- (C=O)i Pr	6-F	3-Cl	(E) - CH=C H-	2-xyanophenyl-	1H NMR (400 MHz, cloroform) δ = 7,70 (d, J = 8,1 Hz, 1H), 7,61 - 7,53 (m, 2H), 7,46 (dd, J = 5,1, 8,9 Hz, 1H), 7,34 (dt, J = 1,0, 7,6 Hz, 1H), 7,24 (d, J = 16,5 Hz, 1H), 7,10 - 6,97 (m, 2H), 3,76 (s, 3H), 2,65 (spt, J = 7,0 Hz, 1H), 2,26 (s, 3H), 1,08 (dd, J = 3,0, 7,0 Hz, 6H).
A-4,030	-Me	-Me	- (C=O)i Pr	6-F	3-Cl	(E) - CH=C H-	3-xyanophenyl-	1H NMR (400 MHz, cloroform) δ = 7,63 - 7,55 (m, 2H), 7,55 - 7,50 (m, 1H), 7,48 - 7,38 (m,

Hợp chất	R1	R2	G	X	Y	W	D	Chi tiết NMR
								2H), 7,12 - 7,00 (m, 2H), 6,65 (d, J = 16,5 Hz, 1H), 3,70 (s, 3H), 2,65 (spt, J = 7,0 Hz, 1H), 2,24 (s, 3H), 1,09 (dd, J = 7,0, 12,5 Hz, 6H).
A-4,035	-Me	-Me	- (C=O)i Pr	6-F	3-Cl	(E) - CH=C H-	4-tert-butoxyphenyl -	¹ H NMR (400 MHz, cloroform) δ = 7,41 (dd, J = 5,0, 8,6 Hz, 1H), 7,26 - 7,23 (m, 2H), 6,99 (t, J = 8,6 Hz, 1H), 6,94 - 6,90 (m, 1H), 6,91 (d, J = 16,5 Hz, 1H), 6,60 (d, J = 16,5 Hz, 1H), 3,71 (s, 3H), 2,63 (spt, J = 7,0 Hz, 1H), 2,22 (s, 3H), 1,35 (s, 9H), 1,08 (d, J = 7,0 Hz, 3H), 1,06 (d, J = 7,0 Hz, 1H)
A-4,036	-Me	-Me	- (C=O)i Pr	6-F	3-Cl	(E) - CH=C H-	4-xyanophenyl-	¹ H NMR (400MHz, cloroform) δ = 7,62 - 7,55 (m, 2H), 7,45 (dd, J=5,0, 8,5 Hz, 1H), 7,45 - 7,40 (m, 1H), 7,13 (d, J=16,5 Hz, 1H), 7,05 (t, J=8,5 Hz, 1H), 6,68 (d, J=16,5 Hz, 1H), 3,69 (s, 3H), 2,65 (spt, J=7,0 Hz, 1H), 2,23 (s, 3H), 1,11 (d, J=7,0 Hz, 3H), 1,07 (d, J=7,0 Hz, 3H)

Hợp chất	R1	R2	G	X	Y	W	D	Chi tiết NMR
A-1,373	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH2-CH2-	4-(1-methylpyrazol-3-yl)phenyl-	¹ H NMR (400 MHz, metanol) δ ppm 7,62 (d, J=8,3 Hz, 2H) 7,57 (d, J=2,3 Hz, 1 H) 7,48 - 7,54 (m, 1H), 7,07 - 7,17 (m, 1H), 7,03 (d, J=8,3 Hz, 2 H), 6,56 (d, J=2,3 Hz, 1 H), 3,91 (s, 3 H,) 3,73 (s, 3H), 2,63 - 2,85 (m, 4H), 2,32 (s, 3H)
A-1,374	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH2-CH2-	4-(5-metyltetrazol-1-yl)phenyl-	¹ H NMR (400 MHz, DMSO-d ₆) δ ppm 7,58 - 7,53 (m, 3H), 7,28 (d, J = 8,2 Hz, 2H), 7,23 (t, J = 8,7 Hz, 1H), 3,61 (s, 3H), 2,87 - 2,68 (m, 4H), 2,53 (s, 3H), 2,27 (s, 3H)
A-1,375	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH2-CH2-	4-morpholinophenyl-	¹ H NMR (400 MHz, DMSO-d ₆) δ ppm 7,55 (dd, J = 5,2, 8,8 Hz, 1H), 7,21 (t, J = 8,8 Hz, 1H), 6,89 - 6,80 (m, 4H), 3,73 - 3,69 (m, 4H), 3,61 (s, 3H), 3,05 - 3,00 (m, 4H), 2,69 - 2,49 (m, 4H), 2,26 (s, 3H)
A-1,376	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH2-CH2-	4-(3-methylpyrazol-1-yl)phenyl-	¹ H NMR (400 MHz, DMSO-d ₆) δ = 10,84 (s, 1H), 8,30 (d, J = 2,3 Hz, 1H), 7,65 (d, J = 8,5 Hz, 2H), 7,55 (dd, J = 5,3, 8,7 Hz, 1H), 7,22 (t, J = 8,7 Hz, 1H), 7,07 (d, J = 8,5

Hợp chất	R1	R2	G	X	Y	W	D	Chi tiết NMR
								Hz, 2H), 6,30 (d, J = 2,3 Hz, 1H), 3,61 (s, 3H), 2,76 - 2,61 (m, 4H), 2,26 (s, 3H), 2,25 (s, 3H)
A-1,377	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH2-CH2-	4-(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)phenyl-	¹ H NMR (400 MHz, DMSO-d ₆) δ = 10,84 (br s, 1H), 7,56 (dd, J = 5,3, 8,7 Hz, 1H), 7,35 (d, J = 8,3 Hz, 2H), 7,22 (t, J = 8,7 Hz, 1H), 7,12 (d, J = 8,3 Hz, 2H), 6,04 (s, 1H), 3,62 (s, 3H), 2,81 - 2,66 (m, 4H), 2,27 (s, 3H), 2,25 (s, 3H), 2,16 (s, 3H)
A-1,378	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH2-CH2-	4-pyrazol-1-ylphenyl-	¹ H NMR (400 MHz, DMSO-d ₆) δ = 10,85 (s, 1H), 8,44 (s, 1H), 7,77 - 7,65 (m, 3H), 7,56 (dd, J = 5,3, 8,7 Hz, 1H), 7,22 (t, J = 8,7 Hz, 1H), 7,11 (d, J = 8,2 Hz, 2H), 6,52 (s, 1H), 3,61 (s, 3H), 2,78 - 2,61 (m, 4H), 2,26 (s, 3H)
A-1,379	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH2-CH2-	4-pyrol-1-ylphenyl-	¹ H NMR (400 MHz, DMSO-d ₆) δ = 10,85 (s, 1H), 7,56 (dd, J = 5,2, 8,7 Hz, 1H), 7,45 (d, J = 8,4 Hz, 2H), 7,31 (t, J = 2,1 Hz, 2H), 7,22 (t, J = 8,7 Hz, 1H), 7,07 (d, J = 8,4 Hz, 2H), 6,24 (t, J = 2,1 Hz, 2H), 3,62 (s, 3H), 2,76 -

Hợp chất	R1	R2	G	X	Y	W	D	Chi tiết NMR
								2,60 (m, 4H), 2,27 (s, 3H)
A-1,380	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH2-CH2-	4-(5-metyltetrahydrofuran-2-yl)phenyl-	¹ H NMR (400 MHz, cloroform) δ = 7,42 - 7,36 (m, 1H), 7,20 - 7,14 (m, 2H), 6,96 - 6,87 (m, 3H), 4,79 - 4,71 (m, 1H), 4,16 - 4,05 (m, 1H), 2,84 - 2,62 (m, 4H), 2,27 (s, 3H), 2,29 - 2,16 (m, 1H), 2,13 - 2,02 (m, 1H), 1,92 - 1,71 (m, 1H), 1,68 - 1,49 (m, 1H), 1,33 (d, J = 6,1 Hz, 3H)
A-1,381	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH2-CH2-	4-(5-metyl-2-furyl)phenyl-	¹ H NMR (400 MHz, cloroform) δ ppm 7,44 - 7,48 (m, 2H) 7,42 (dd, J=5,2, 8,8 Hz, 1H) 6,93 - 7,00 (m, 3H) 6,47 (d, J=3,2 Hz, 1H) 6,00 - 6,05 (m, 1H) 3,72 (s, 3H) 2,68 - 2,89 (m, 4H) 2,35 (s, 3H) 2,25 (s, 3H)
A-1,382	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH2-CH2-	4-oxazol-2-ylphenyl-	¹ H NMR (400 MHz, cloroform) δ ppm 7,75 (d, J=8,2 Hz, 2H), 7,57 (s, 1H), 7,20 (dd, J=5,1, 8,8 Hz, 1H), 7,01 (d, J=8,2 Hz, 2H), 6,84 - 6,91 (m, 2H), 3,77 (s, 3H), 2,74 (td, J=5,2, 12,5 Hz, 1H) 2,58 (td, J=4,9, 12,5 Hz, 1H) 2,32 - 2,42 (m,

Hợp chất	R1	R2	G	X	Y	W	D	Chi tiết NMR
								4H) 2,11 (td, J=4,9, 12,4 Hz, 1H)
A-1,383	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH2-CH2-	4-(2-methylthiazol-4-yl)phenyl-	¹ H NMR (400 MHz, metanol) δ ppm 7,73 (d, J=8,1 Hz, 2H), 7,55 (s, 1H), 7,51 (dd, J=5,2, 8,7 Hz, 1H), 7,11 (t, J=8,7 Hz, 1H), 7,06 (d, J=8,1 Hz, 2H), 3,73 (s, 3H), 2,65 - 2,86 (m, 7H) 2,33 (s, 3H)
A-1,384	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH2-CH2-	4-(2-thienyl)phenyl-	¹ H NMR (400 MHz, metanol) δ ppm 7,54 - 7,46 (m, 3H), 7,32 (d, J = 3,8 Hz, 2H), 7,10 (t, J = 8,7 Hz, 1H), 7,06 (dd, J = 3,8, 5,1 Hz, 1H), 7,02 (d, J = 8,2 Hz, 2H), 3,72 (s, 3H), 2,84 - 2,64 (m, 4H), 2,32 (s, 3H)
A-1,386	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH2-CH2-	1-phenyl-4-pyrazolyl-	¹ H NMR (400 MHz, DMSO-d ₆) δ ppm 8,20 (s, 1H), 7,78 - 7,74 (m, 2H), 7,56 (dd, J = 5,2, 8,7 Hz, 1H), 7,49 - 7,43 (m, 2H), 7,40 (s, 1H), 7,29 - 7,25 (m, 1H), 7,22 (t, J = 8,7 Hz, 1H), 3,59 (s, 3H), 2,81 - 2,69 (m, 2H), 2,67 - 2,52 (m, 2H), 2,24 (s, 3H)
A-1,387	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH2-CH2-	1-cyclopropyl-4-pyrazolyl-	¹ H NMR (400 MHz, DMSO-d ₆) δ = 10,77 (s, 1H), 7,54 (dd, J = 5,2,

Hợp chất	R1	R2	G	X	Y	W	D	Chi tiết NMR
								8,9 Hz, 1H), 7,43 (s, 1H), 7,20 (t, J = 8,7 Hz, 1H), 7,04 (s, 1H), 3,59 (s, 3H), 3,63 - 3,55 (m, 1H), 2,70 - 2,56 (m, 2H), 2,49 - 2,35 (m, 2H), 2,25 (s, 3H), 0,98 - 0,91 (m, 2H), 0,91 - 0,84 (m, 2H)
A-1,389	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH2-CH2-	4-(isopropylsulfanylmethyl)phenyl-	¹ H NMR (400 MHz, d ₆ -DMSO), δ ppm 10,82 (br. s, 1H), 7,56 - 7,52 (m, 1H), 7,23 - 7,18 (m, 3H), 6,95 - 6,93 (d, 2H), 3,69 (s, 2H), 3,60 (s, 3H), 2,76-2,49(m, 5H), 2,26 (s, 3H), 1,17 (d, 6H)
A-1,390	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH2-CH2-	4-(methylsulfamoyl)phenyl-	¹ H NMR (500 MHz, chloroform) δ ppm 7,68 (d, J = 8,2 Hz, 2H), 7,38 (dd, J = 5,1, 8,7 Hz, 1H), 7,17 - 7,11 (m, J = 8,2 Hz, 2H), 6,96 (t, J = 8,7 Hz, 1H), 3,72 (s, 3H), 2,84 - 2,71 (m, 4H), 2,63 (s, 3H), 2,30 (s, 3H)
A-1,391	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH2-CH2-	4-sulfamoylphenyl-	¹ H NMR (500 MHz, chloroform) δ ppm 7,76 (d, J = 8,4 Hz, 2H), 7,48 (dd, J = 5,2, 8,7 Hz, 2H), 7,15 (d, J = 8,4 Hz, 2H), 7,05 (t, J = 8,7 Hz, 1H), 3,76 (s, 3H), 2,94 - 2,72 (m, 4H), 2,32 (s, 3H)

Hợp chất	R1	R2	G	X	Y	W	D	Chi tiết NMR
A-1,392	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH2-CH2-	4-carbamoylphe nyl-	¹ H NMR (400 MHz, DMSO-d ₆) δ ppm 10,83 (s, 1H), 7,87 (br s, 1H), 7,76 (d, J = 8,2 Hz, 2H), 7,55 (dd, J = 5,3, 8,7 Hz, 1H), 7,26 (br s, 1H), 7,22 (t, J = 8,7 Hz, 1H), 7,07 (d, J = 8,2 Hz, 2H), 3,61 (s, 3H), 2,75 - 2,63 (m, 4H), 2,26 (s, 3H)

B1 Hiệu quả sau nảy mầm – thử nghiệm 1

Các hạt của các giống của các loài thử nghiệm được gieo trong đất tiêu chuẩn trong các chậu:- *Solanum nigrum* (SOLNI), *Amaranthus retroflexus* (AMARE), *Setaria faberi* (SETFA), *Echinochloa crus-galli* (ECHCG), *Ipomoea hederacea* (IPOHE), *Lolium perenne* (LOLPE). Sau khi trồng 8 ngày (sau khi nảy mầm) trong điều kiện có kiểm soát trong nhà kính (ở nhiệt độ 24/16°C, ngày/đêm; 14 giờ sáng; độ ẩm 65%), các thực vật được phun bằng dung dịch phun trong nước có nguồn gốc từ dạng bào chế của thành phần hoạt tính kỹ thuật trong dung dịch axeton/nước (50:50) chứa 0,5% Tween 20 (polyoxyetylen sorbitan monolaurat, CAS RN 9005-64-5). Các hợp chất được áp dụng ở tỷ lệ 1000 g/ha. Các thực vật thử nghiệm sau đó được trồng trong nhà kính trong các điều kiện được kiểm soát trong nhà kính (ở 24/16°C, ngày/đêm; 14 giờ sáng; độ ẩm 65%) và được tưới nước ngày hai lần. Sau 13 ngày, thử nghiệm được đánh giá về phần trăm hư hại được gây ra cho thực vật. Các hoạt tính sinh học được đánh giá trên thang điểm năm (5 = 80-100%; 4 = 60-79%; 3=40-59%; 2=20-39%; 1=0-19%). Giá trị trống trong bảng là chỉ báo rằng hợp chất không được thử trên các loài đó.

Bảng 5 Kiểm soát các loài cỏ dại bằng hợp chất có công thức (I) sau khi áp dụng sau khi nảy mầm

Hợp chất	AMARE	SOLNI	SETFA	LOLPE	ECHCG	IPOHE
A-1,036	5	5	5	5	5	5

B2 Hiệu quả sau nảy mầm – thử nghiệm 2

Các hạt của các giống của các loài thử nghiệm được gieo trong đất tiêu chuẩn trong các chậu:- *Solanum nigrum* (SOLNI), *Amaranthus retroflexus* (AMARE), *Setaria faberi* (SETFA), *Echinochloa crus-galli* (ECHCG), *Ipomoea hederacea* (IPOHE), *Lolium perenne* (LOLPE). Sau khi trồng 8 ngày (sau khi nảy mầm) trong điều kiện có kiểm soát trong nhà kính (ở nhiệt độ 24/16°C, ngày/đêm; 14 giờ sáng; độ ẩm 65%), các thực vật được phun bằng dung dịch phun trong nước có nguồn gốc từ dạng bào chế của thành phần hoạt tính kỹ thuật trong dung dịch axeton/nước (50:50) chứa 0,5% Tween 20 (polyoxyetylen sorbitan monolaurat, CAS RN 9005-64-5). Các hợp chất được áp dụng ở 250 g/ha. Các thực vật thử nghiệm sau đó được trồng trong nhà kính trong các điều kiện được kiểm soát trong nhà kính (ở 24/16°C, ngày/đêm; 14 giờ sáng; độ ẩm 65%) và được tưới nước ngày hai lần. Sau 13 ngày, thử nghiệm được đánh giá về phần trăm hư hại được gây ra cho thực vật. Các hoạt tính sinh học được đánh giá trên thang điểm năm (5 = 80-100%; 4 = 60-79%; 3=40-59%; 2=20-39%; 1=0-19%). Giá trị trống trong bảng là chỉ báo rằng hợp chất không được thử trên các loài đó.

Bảng 6 Kiểm soát các loài cỏ dại bằng hợp chất có công thức (I) sau khi áp dụng sau khi nảy mầm

Hợp chất	AMARE	SOLNI	SETFA	LOLPE	ECHCG	IPOHE
A-1,024	5	5	5	5	4	5
A-1,025	5	5	5	5	5	5
A-1,026	4	4	2	1	0	0
A-1,027	5	4	5	5	5	4
A-1,028	5	5	5	5	5	5
A-1,029	4	5	4	4	2	5
A-1,030	4	5	4	5	4	5
A-1,031	5	5	4	4	4	4
A-1,032	5	5	5	5	5	5
A-1,033	5	5	5	5	4	5

Hợp chất	AMARE	SOLNI	SETFA	LOLPE	ECHCG	IPOHE
A-1,034	5	5	5	5	1	5
A-1,035	4	5	4	4	4	4
A-1,036	5	5	5	5	5	5
A-1,037	1	5	5	1	3	5
A-1,038	5	5	5	5	5	5
A-1,039	5	5	5	5	5	5
A-1,040	3	3	0	0	0	0
A-1,041	5	5	4	1	1	2
A-1,042	5	5	5	5	5	3
A-1,044	5	5	5	4	3	0
A-2,030	3	4	0	1	0	4
A-2,037	1	2	1	1	2	2
A-3,028	4	5	4	5	5	5
A-3,029	4	5	2	2	1	5
A-3,030	5	5	5	4	2	5
A-3,035	5	5	5	5	4	5
A-3,036	5	5	4	4	4	5
A-3,038	5	5	5	5	2	5
A-4,029	4	4	0	1	1	4
A-4,030	2	3	0	1	1	3
A-4,035	1	3	0	0	0	3
A-4,036	2	5	1	3	3	4
A-4,038	1	5	0	1	1	2
A-1,383	5	5	5	5	5	5
A-1,384	5	5	5	4	3	5

Hợp chất	AMARE	SOLNI	SETFA	LOLPE	ECHCG	IPOHE
A-1,385	5	5	5	5	5	5

B3 Hiệu quả sau nảy mầm – thử nghiệm 3

Các hạt của các giống của các loài thử nghiệm được gieo trong đất tiêu chuẩn trong các chậu:- *Amaranthus retroflexus* (AMARE), *Setaria faberi* (SETFA), *Echinochloa crus-galli* (ECHCG), *Ipomoea hederacea* (IPOHE), *Zea Mays* (ZEAMX), *Abutilon theophrasti* (ABUTH). Sau khi trồng 8 ngày (sau khi nảy mầm) trong điều kiện có kiểm soát trong nhà kính (ở nhiệt độ 24/16°C, ngày/đêm; 14 giờ sáng; độ ẩm 65%), các thực vật được phun bằng dung dịch phun trong nước có nguồn gốc từ dạng bào chế của thành phần hoạt tính kỹ thuật trong dung dịch axeton/nước (50:50) chứa 0,5% Tween 20 (polyoxyetylen sorbitan monolaurat, CAS RN 9005-64-5). Các hợp chất được áp dụng ở 250 g/ha. Các thực vật thử nghiệm sau đó được trồng trong nhà kính trong các điều kiện được kiểm soát trong nhà kính (ở 24/16°C, ngày/đêm; 14 giờ sáng; độ ẩm 65%) và được tưới nước ngày hai lần. Sau 13 ngày, thử nghiệm được đánh giá về phần trăm hư hại được gây ra cho thực vật. Các hoạt tính sinh học được đánh giá trên thang điểm năm (5 = 80-100%; 4 = 60-79%; 3=40-59%; 2=20-39%; 1=0-19%). Giá trị trống trong bảng là chỉ báo rằng hợp chất không được thử trên các loài đó.

Bảng 7 Kiểm soát các loài cỏ dại bằng hợp chất có công thức (I) sau khi áp dụng sau khi nảy mầm

Hợp chất	AMARE	ZEAMX	SETFA	ABUTH	ECHCG	IPOHE
A-1,380	4	2	3	3	1	3
A-1,381	4	1	2	3	0	4
A-1,382	4	5	4	4	4	5
A-3,386	4	5	4	4	5	4
C-1,013	5	4	4	4	5	4
A-1,386	4	4	4	3	4	4
A-1,387	4	4	4	4	4	4

Hợp chất	AMARE	ZEAMX	SETFA	ABUTH	ECHCG	IPOHE
A-1,388	5	4	4	5	4	4
A-1,389	4	5	5	4	5	5
A-1,390	5	1	5	4		4
A-1,391	4	1	4	2		3
A-1,392	5	2	5	4		3

B4 Hiệu quả trước khi nảy mầm – thử nghiệm 1

Các hạt của giống của loài được thử nghiệm được gieo trong đất tiêu chuẩn trong các chậu: *Solanum nigrum* (SOLNI), *Amaranthus retroflexus* (AMARE), *Setaria faberi* (SETFA), *Echinochloa crus-galli* (ECHCG), *Ipomoea hederacea* (IPOHE), *Lolium perenne* (LOLPE). Sau khi trồng một ngày (trước khi nảy mầm) trong các điều kiện được kiểm soát trong nhà kính (ở 24/16°C, ngày/đêm; 14 giờ sáng; độ ẩm 65%), các thực vật được phun với dung dịch phun trong nước có nguồn gốc từ dạng bào chế của thành phần hoạt tính kỹ thuật trong dung dịch axeton / nước (50:50) chứa 0,5% Tween 20 (polyoxyetetylen sorbitan monolaurat, CAS RN 9005-64-5). Các hợp chất được áp dụng ở 1000 g/ha. Các thực vật thử nghiệm sau đó được trồng trong nhà kính trong các điều kiện được kiểm soát (ở 24/16°C, ngày/đêm; 14 giờ sáng; độ ẩm 65%) và được tưới nước ngày hai lần. Sau 13 ngày, thử nghiệm được đánh giá về phần trăm hư hại được gây ra cho thực vật. Các hoạt tính sinh học được đánh giá trên thang điểm năm (5 = 80-100%; 4 = 60-79%; 3=40-59%; 2=20-39%; 1=0-19%). Giá trị trống trong bảng là chỉ báo rằng hợp chất không được thử trên các loài đó.

Bảng 8 Việc kiểm soát các loài cỏ dại bằng các hợp chất có công thức (I) sau khi áp dụng trước khi nảy mầm

Hợp chất	AMARE	SOLNI	SETFA	LOLPE	ECHCG	IPOHE
A-1,036	5	5	5	5	5	5

B5 Hiệu quả trước khi nảy mầm – thử nghiệm 2

Các hạt của giống của loài được thử nghiệm được gieo trong đất tiêu chuẩn trong các chậu: *Solanum nigrum* (SOLNI), *Amaranthus retroflexus* (AMARE), *Setaria faberi* (SETFA), *Echinochloa crus-galli* (ECHCG), *Ipomoea hederacea* (IPOHE), *Lolium*

perenne (LOLPE). Sau khi trồng một ngày (trước khi nảy mầm) trong các điều kiện được kiểm soát trong nhà kính (ở 24/16°C, ngày/đêm; 14 giờ sáng; độ ẩm 65%), các thực vật được phun với dung dịch phun trong nước có nguồn gốc từ dạng bào chế của thành phần hoạt tính kỹ thuật trong dung dịch axeton / nước (50:50) chứa 0,5% Tween 20 (polyoxyetelyen sorbitan monolaurat, CAS RN 9005-64-5). Các hợp chất được áp dụng ở 250 g/ha. Các thực vật thử nghiệm sau đó được trồng trong nhà kính trong các điều kiện được kiểm soát (ở 24/16°C, ngày/đêm; 14 giờ sáng; độ ẩm 65%) và được tưới nước ngày hai lần. Sau 13 ngày, thử nghiệm được đánh giá về phần trăm hư hại được gây ra cho thực vật. Các hoạt tính sinh học được đánh giá trên thang điểm năm (5 = 80-100%; 4 = 60-79%; 3=40-59%; 2=20-39%; 1=0-19%). Giá trị trống trong bảng là chỉ báo rằng hợp chất không được thử trên các loài đó.

Bảng 9 Việc kiểm soát các loài cỏ dại bằng các hợp chất có công thức (I) sau khi áp dụng trước khi nảy mầm

Hợp chất	AMARE	SOLNI	SETFA	LOLPE	ECHCG	IPOHE
A-1,024	5	5	5	4	2	0
A-1,025	5	5	5	4	5	1
A-1,026	0	0	0	0	0	0
A-1,027	5	4	3	2	1	4
A-1,028	5	5	5	5	4	5
A-1,029	3	5	1	2	5	1
A-1,030	5	5	5	4	5	0
A-1,031	3	2	1	1	2	1
A-1,032	5	5	5	5	5	2
A-1,033	1	1	2	1	0	1
A-1,034	0	2	0	0	0	0
A-1,035	4	3	3	3	1	1
A-1,036	5	5	5	5	5	5
A-1,037	1	2	0	0	2	0

Hợp chất	AMARE	SOLNI	SETFA	LOLPE	ECHCG	IPOHE
A-1,038	5	5	0	5	5	2
A-1,039	5	5	5	4	5	3
A-1,040	0	0	0	0	0	0
A-1,041	4	0	0	0	0	0
A-1,042	5	5	5	1	2	2
A-1,044	5	5	5	2	3	1
A-2,030	0	0	0	0	0	0
A-2,037	0	0	1	1	0	1
A-3,028	5	5	5	5	5	5
A-3,029	4	5	2	2	3	3
A-3,030	5	5	5	4	4	3
A-3,035	4	5	5	5	4	5
A-3,036	5	5	5	5	5	5
A-3,038	5	5	1	5	2	5
A-4,029	2	4	0	0	0	0
A-4,030	3	4	1	2	1	1
A-4,035	0	0	0	1	1	1
A-4,036	2	5	0	1	1	3
A-4,038	2	1	0	0	0	0
A-1,383	5	5	4	3	4	5
A-1,384	2	1	0	0	0	2
A-1,385	5	5	5	5	5	5

B6 Hiệu quả trước khi nảy mầm – thử nghiệm 3

Các hạt của giống của loài được thử nghiệm được gieo trong đất tiêu chuẩn trong các chậu: *Amaranthus retroflexus* (AMARE), *Setaria faberi* (SETFA), *Echinochloa crus-galli* (ECHCG), *Ipomoea hederacea* (IPOHE), *Zea Mays* (ZEAMX), *Abutilon*

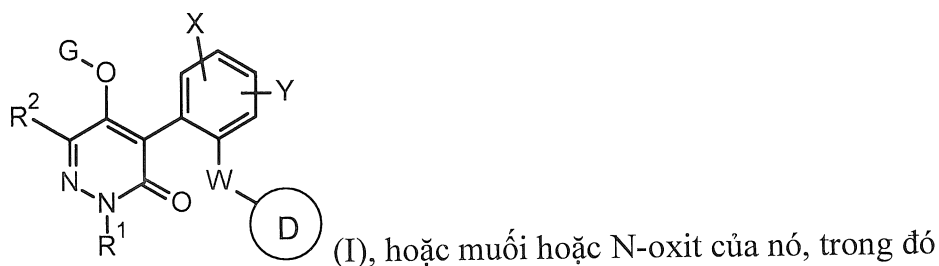
theophrasti (ABUTH). Sau khi trồng một ngày (trước khi nảy mầm) trong các điều kiện được kiểm soát trong nhà kính (ở 24/16°C, ngày/đêm; 14 giờ sáng; độ ẩm 65%), các thực vật được phun với dung dịch phun trong nước có nguồn gốc từ dạng bào chế của thành phần hoạt tính kỹ thuật trong dung dịch axeton / nước (50:50) chứa 0,5% Tween 20 (polyoxyetelyen sorbitan monolaurat, CAS RN 9005-64-5). Các hợp chất được áp dụng ở 250 g/ha. Các thực vật thử nghiệm sau đó được trồng trong nhà kính trong các điều kiện được kiểm soát (ở 24/16°C, ngày/đêm; 14 giờ sáng; độ ẩm 65%) và được tưới nước ngày hai lần. Sau 13 ngày, thử nghiệm được đánh giá về phần trăm hư hại được gây ra cho thực vật. Các hoạt tính sinh học được đánh giá trên thang điểm năm (5 = 80-100%; 4 = 60-79%; 3=40-59%; 2=20-39%; 1=0-19%). Giá trị trống trong bảng là chỉ báo rằng hợp chất không được thử trên các loài đó.

Bảng 10 Việc kiểm soát các loài cỏ dại bằng các hợp chất có công thức (I) sau khi áp dụng trước khi nảy mầm

Hợp chất	AMARE	ZEAMX	SETFA	ABUTH	ECHCG	IPOHE
A-1,380	5	2	1	4	0	4
A-1,381	3	1	0	1	0	3
A-1,382	5	4	5	4	5	5
A-3,386	5	5	5	5	5	5
C-1,013	5	4	5	5	5	5
A-1,386	2	2	5	2	5	4
A-1,387	5	4	5	4	5	5
A-1,388	5	4	5	5	5	5
A-1,389	5	4	5	3	5	5
A-1,390	5	1	5	5		5
A-1,391	5	0	5	2		2
A-1,392	5	2	5	5	5	5

YÊU CẦU BẢO HỘ

1. Hợp chất có công thức (I)



R^1 được lựa chọn từ nhóm bao gồm C_1 - C_4 alkyl, C_3 - C_6 xycloalkyl, C_3 - C_6 alkoxy, C_1 - C_2 alkoxy- C_1 - C_2 alkyl, C_2 - C_4 alkenyl, C_1 - C_4 haloalkyl, xyano- C_1 - C_4 alkyl, C_2 - C_4 haloalkenyl, C_2 - C_4 alkynyl và C_2 - C_4 haloalkynyl;

R^2 được lựa chọn từ nhóm bao gồm hydro, halogen, xyano, C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 haloalkyl, C_1 - C_6 haloalkoxy, C_1 - C_3 haloalkoxy- C_1 - C_3 alkyl-, C_1 - C_6 alkoxy, C_1 - C_3 alkoxy- C_1 - C_3 alkyl-, C_1 - C_3 alkoxy- C_1 - C_3 alkoxy- C_1 - C_3 alkyl-, C_3 - C_6 xycloalkyl, C_2 - C_6 alkenyl, C_2 - C_6 haloalkenyl, C_2 - C_6 alkynyl, C_1 - C_6 hydroxyalkyl-, C_1 - C_6 alkylcarbonyl-, $-S(O)_mC_1$ - C_6 alkyl, amino, C_1 - C_6 alkylamino, C_1 - C_6 dialkylamino, $-C(C_1$ - C_3 alkyl)=N-O- C_1 - C_3 alkyl và C_2 - C_6 haloalkynyl;

G là hydro, hoặc $C(O)R^3$;

R^3 được lựa chọn từ nhóm bao gồm C_1 - C_6 alkyl, C_2 - C_6 alkenyl, C_2 - C_6 alkynyl, C_1 - C_6 alkyl-S-, C_1 - C_6 alkoxy, $-NR^4R^5$ và phenyl tùy ý được thế bởi một hoặc nhiều R^6 ;

mỗi R^4 và R^5 một cách độc lập được lựa chọn từ nhóm bao gồm hydro, C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 alkoxy, và C_3 - C_6 xycloalkyl, hoặc R^4 và R^5 cùng nhau có thể tạo thành vòng morpholinyl; và,

mỗi R^{4a} và R^{5a} một cách độc lập được lựa chọn từ nhóm bao gồm C_1 - C_6 alkoxy, và C_3 - C_6 xycloalkyl, hoặc R^{4a} và R^{5a} cùng nhau có thể tạo thành vòng morpholinyl; và,

R^6 được lựa chọn từ nhóm bao gồm halogen, xyano, nitro, C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 haloalkyl, C_1 - C_3 alkoxy và C_1 - C_3 haloalkoxy;

mỗi X và Y một cách độc lập là hydro, C_1 - C_3 alkyl, xyclopropyl, C_1 - C_3 alkoxy, C_1 - C_3 haloalkyl, C_1 - C_3 haloalkoxy, hoặc halogen;

D là vòng heteroaryl đơn vòng được thể chứa 1, 2, hoặc 3 dị nguyên tử một cách độc lập được lựa chọn từ oxy, nitơ và lưu huỳnh, được thể trên ít nhất một nguyên tử cacbon mạch vòng với R^8 và/hoặc trên ít nhất một nguyên tử nitơ mạch vòng với R^9 ;

ít nhất một R^8 được lựa chọn từ nhóm bao gồm C_1 - C_6 haloalkylcarbonyl-, C_3 - C_6 xycloalkylcarbonyl-, $-S(O)_m$ - C_1 - C_6 haloalkyl-, $-S(O)_m$ - C_3 - C_6 xycloalkyl-, $-O-S(O)_2$ - C_1 - C_3 alkyl-, $-C_1$ - C_3 alkyl- $S(O)_m$ - C_1 - C_6 alkyl-, $-C_1$ - C_3 alkyl- $S(O)_m$ - C_1 - C_6 haloalkyl-, $-C_1$ - C_3 alkyl- $S(O)_m$ - C_3 - C_6 xycloalkyl-, xyano- C_1 - C_6 -alkyl-, $-NR^{4a}R^{5a}$, $-C(S)NR^4R^5$, $-S(O)_2NHC(O)C_1$ - C_3 alkyl-, $-S(O)_2NR^4R^5$, $-C(O)OH$, $-C(O)OC_1$ - C_6 alkyl-, $-C(O)NHS-(O)_2C_1$ - C_6 alkyl-, $-C(O)NR^4R^5$, $-NR^4C(O)NR^4R^5$, C_1 - C_6 alkylcarbonyl(C_1 - C_6 alkyl)amino-, C_1 - C_6 haloalkylcarbonylamino-, C_1 - C_6 haloalkylcarbonyl(C_1 - C_6 alkyl)amino-, C_1 - C_6 alkylsulfonylamino-, C_1 - C_6 alkylsulfonyl(C_1 - C_6 alkyl)amino-, C_1 - C_6 haloalkylsulfonylamino-, C_1 - C_6 haloalkylsulfonyl(C_1 - C_6 alkyl)amino-, C_3 - C_6 xycloalkylsulfonylamino-, C_3 - C_6 xycloalkylsulfonyl(C_1 - C_6 alkyl)amino-, hydroxyamino-, hydroxy(C_1 - C_6 alkyl)amino, C_1 - C_6 alkoxyamino, C_1 - C_6 alkoxy(C_1 - C_6 alkyl)amino, C_1 - C_6 haloalkoxyamino, C_1 - C_6 haloalkoxy(C_1 - C_6 alkyl)amino; và hệ thống vòng được lựa chọn từ nhóm bao gồm vòng phenyl, vòng heteroaryl có từ 5 đến 6 cạnh và vòng heterocyclyl có từ 3 đến 6 cạnh, trong đó hệ thống vòng đã nêu được thể bởi từ 0 đến 5 R^{16} ;

ít nhất một R^9 được lựa chọn từ nhóm bao gồm C_5 - C_6 alkyl, C_5 - C_6 haloalkyl, C_3 - C_6 -xycloalkyl, C_1 - C_3 alkoxy- C_3 alkyl-, C_3 alkoxy- C_1 - C_2 alkyl-, C_1 - C_3 haloalkoxy- C_1 - C_3 alkyl-, C_1 - C_3 alkoxy- C_1 - C_3 alkoxy- C_1 - C_3 alkyl-, C_1 - C_6 hydroxyalkyl-, $-C_1$ - C_3 alkyl- $S(O)_m$ - C_1 - C_6 alkyl-, $-C_1$ - C_3 alkyl- $S(O)_m$ - C_1 - C_6 haloalkyl-, $-C_1$ - C_3 alkyl- $S(O)_m$ - C_3 - C_6 xycloalkyl-, xyano- C_1 - C_6 -alkyl-, và hệ thống vòng được lựa chọn từ nhóm bao gồm: vòng phenyl, vòng heteroaryl có từ 5 đến 6 cạnh và vòng heterocyclyl có từ 3 đến 6 cạnh, trong đó hệ thống vòng đã nêu được thể bởi từ 0 đến 5 R^{16} ;

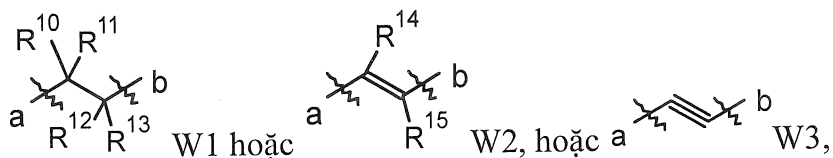
m là số nguyên 0, 1, hoặc 2;

mỗi R^{16} độc lập là halogen, xyano, C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 haloalkyl, C_1 - C_6 alkoxy hoặc C_1 - C_6 haloalkoxy;

hoặc D là vòng phenyl được thế bởi ít nhất một R^8 ;

và,

W là hoặc



trong đó:

“a” biểu thị điểm gắn với gốc phenyl-pyridazin dion/phenyl-pyridazinon,

“b” biểu thị điểm gắn với vòng D,

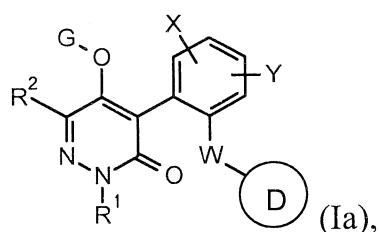
mỗi R^{10} , R^{12} , R^{14} và R^{15} một cách độc lập là hydro, C_1 - C_3 alkyl, hoặc C_1 - C_3 haloalkyl;

hoặc R^{10} và R^{12} cùng với các nguyên tử cacbon mà chúng gắn vào tạo thành vòng C_3 - C_6 cacboxycyclic; và

mỗi R^{11} và R^{13} một cách độc lập là hydro, halogen, C_1 - C_3 alkyl, hoặc C_1 - C_3 haloalkyl;

với điều kiện khi một trong số R^{11} hoặc R^{13} là halogen, C_1 - C_3 alkyl hoặc C_1 - C_3 haloalkyl, nhóm còn lại là hydro.

2. Hợp chất có công thức (Ia)



hoặc muối hoặc N-oxit của nó, trong đó

R^1 được lựa chọn từ nhóm bao gồm C_1 - C_4 alkyl, C_3 - C_6 xycloalkyl, C_3 - C_6 alkoxy, C_1 - C_2 alkoxy- C_1 - C_2 alkyl, C_2 - C_4 alkenyl, C_1 - C_4 haloalkyl, xyano- C_1 - C_4 alkyl, C_2 - C_4 haloalkenyl, C_2 - C_4 alkynyl và C_2 - C_4 haloalkynyl;

R^2 được lựa chọn từ nhóm bao gồm hydro, halogen, xyano, C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 haloalkyl, C_1 - C_6 haloalkoxy, C_1 - C_3 haloalkoxy- C_1 - C_3 alkyl-, C_1 - C_6 alkoxy, C_1 -

C₃alkoxy-C₁-C₃alkyl, C₁-C₃alkoxy-C₁-C₃alkoxy-C₁-C₃alkyl-, C₃-C₆xycloalkyl, C₂-C₆alkenyl, C₂-C₆ haloalkenyl, C₂-C₆alkynyl, C₁-C₆hydroxyalkyl-, C₁-C₆alkylcarbonyl-, -S(O)_mC₁-C₆alkyl, -NR⁴R⁵, -C(C₁-C₃alkyl)=N-O-C₁-C₃alkyl và C₂-C₆ haloalkynyl;

G là hydro, hoặc C(O)R³;

R³ được lựa chọn từ nhóm bao gồm C₁-C₆alkyl, C₂-C₆alkenyl, C₂-C₆alkynyl, C₁-C₆alkyl-S-, C₁-C₆alkoxy, -NR⁴R⁵ và phenyl tùy ý được thế bởi một hoặc nhiều R⁶;

mỗi R⁴ và R⁵ một cách độc lập được lựa chọn từ nhóm bao gồm hydro, C₁-C₆alkyl, C₁-C₆alkoxy, và C₃-C₆xycloalkyl, hoặc R⁴ và R⁵ cùng nhau có thể tạo thành vòng morpholinyl; và,

R⁶ được lựa chọn từ nhóm bao gồm halogen, xyano, nitro, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy và C₁-C₃haloalkoxy;

X là xyclopropyl;

Y là hydro, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃haloalkoxy, hoặc halogen;

D là vòng heteroaryl đơn vòng được thế hoặc không được thế chứa 1, 2, hoặc 3 dị nguyên tử độc lập được lựa chọn từ oxy, nitơ và lưu huỳnh, và trong đó khi D được thế nó được thế trên ít nhất một nguyên tử cacbon mạch vòng với R⁸ và/hoặc trên nguyên tử nitơ mạch vòng với R⁹;

mỗi R⁸ độc lập là oxy, hydroxyl, halogen, xyano, C₁-C₆alkyl, C₁-C₆haloalkyl, C₃-C₆-xycloalkyl, C₁-C₆alkoxy, C₁-C₆haloalkoxy, C₁-C₃alkoxy-C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkoxy-C₁-C₃alkyl-, C₁-C₃alkoxy-C₁-C₃alkoxy-C₁-C₃alkyl-, C₂-C₆alkenyl, C₂-C₆haloalkenyl, C₂-C₆alkynyl, C₂-C₆ haloalkynyl, C₁-C₆hydroxyalkyl-, C₁-C₆alkylcarbonyl-, C₁-C₆haloalkylcarbonyl-, C₃-C₆xycloalkylcarbonyl-, -S(O)_m-C₁-C₆haloalkyl, -S(O)_m-C₃-C₆xycloalkyl, -O-S(O)₂C₁-C₃alkyl, -C₁-C₃alkyl-S(O)_m-C₁-C₆alkyl, -C₁-C₃alkyl-S(O)_m-C₁-C₆haloalkyl, -C₁-C₃alkyl-S(O)_m-C₃-C₆xycloalkyl, xyano-C₁-C₆-alkyl-, -NR⁴R⁵, -C(S)NR⁴R⁵, -S(O)₂NHC(O)C₁-C₃alkyl, -S(O)₂NR⁴R⁵, -C(O)OH, -C(O)OC₁-C₆alkyl, -C(O)NHS-(O)₂C₁-C₆alkyl, -C(O)NR⁴R⁵, -NR⁴C(O)NR⁴R⁵, C₁-

C₆alkylcarbonyl(C₁-C₆alkyl)amino-, C₁-C₆haloalkylcarbonylamino-, C₁-C₆haloalkylcarbonyl(C₁-C₆alkyl)amino-, C₁-C₆alkylsulfonylamino-, C₁-C₆alkylsulfonyl(C₁-C₆alkyl)amino-, C₁-C₆haloalkylsulfonylamino-, C₁-C₆haloalkylsulfonyl(C₁-C₆alkyl)amino-, C₃-C₆xycloalkylsulfonylamino-, C₃-C₆xycloalkylsulfonyl(C₁-C₆alkyl)amino-, hydroxyamino-, hydroxy(C₁-C₆alkyl)amino, C₁-C₆alkoxyamino, C₁-C₆alkoxy(C₁-C₆alkyl)amino, C₁-C₆haloalkoxyamino, C₁-C₆haloalkoxy(C₁-C₆alkyl)amino; hoặc hệ thống vòng được lựa chọn từ nhóm bao gồm: vòng phenyl, vòng heteroaryl có từ 5 đến 6 cạnh và vòng heterocyclyl có từ 3 đến 6 cạnh, trong đó hệ thống vòng đã nêu được thế bởi từ 0 đến 5 R¹⁶;

m là số nguyên 0, 1, hoặc 2; và

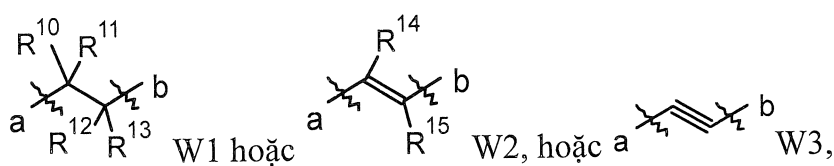
mỗi R⁹ độc lập là C₁-C₆alkyl, C₁-C₆haloalkyl, C₃-C₆-xycloalkyl, C₁-C₃alkoxy-C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkoxy-C₁-C₃alkyl-, C₁-C₃alkoxy-C₁-C₃alkoxy-C₁-C₃alkyl-, C₁-C₆hydroxyalkyl-, -C₁-C₃alkyl-S(O)_m-C₁-C₆alkyl, -C₁-C₃alkyl-S(O)_m-C₁-C₆haloalkyl, -C₁-C₃alkyl-S(O)_m-C₃-C₆xycloalkyl, xyano-C₁-C₆-alkyl-, hoặc hệ thống vòng được lựa chọn từ nhóm bao gồm: vòng phenyl, vòng heteroaryl có từ 5 đến 6 cạnh và vòng heterocyclyl có từ 3 đến 6 cạnh, trong đó hệ thống vòng đã nêu được thế bởi từ 0 đến 5 R¹⁶;

mỗi R¹⁶ độc lập là halogen, xyano, C₁-C₆alkyl, C₁-C₆haloalkyl, C₁-C₆alkoxy hoặc C₁-C₆haloalkoxy;

hoặc D là vòng phenyl được thế hoặc không được thế, và trong đó khi vòng phenyl đã nêu được thế nó được thế bởi từ 1 đến 5 R⁸;

và,

W là hoặc



trong đó

“a” biểu thị điểm gắn với gốc phenyl-pyridazin dion/phenyl-pyridazinon,

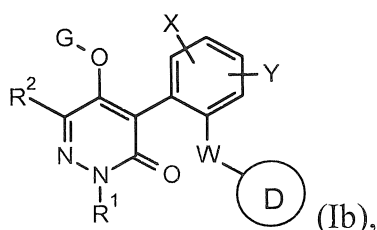
“b” biểu thị điểm gắn với vòng D,

mỗi R^{10} , R^{12} , R^{14} và R^{15} một cách độc lập là hydro, C_1 - C_3 alkyl, hoặc C_1 - C_3 haloalkyl;

hoặc R^{10} và R^{12} cùng với các nguyên tử cacbon mà chúng gắn vào tạo thành vòng C_3 - C_6 cacboxycyclic; và

mỗi R^{11} và R^{13} một cách độc lập là hydro, halogen, C_1 - C_3 alkyl, hoặc C_1 - C_3 haloalkyl, với điều kiện khi một trong số R^{11} hoặc R^{13} là halogen, C_1 - C_3 alkyl hoặc C_1 - C_3 haloalkyl, nhóm còn lại là hydro.

3. Hợp chất có công thức (Ib)



hoặc muối hoặc N-oxit của nó, trong đó

R^1 được lựa chọn từ nhóm bao gồm C_1 - C_4 alkyl, C_3 - C_6 xycloalkyl, C_3 - C_6 alkoxy, C_1 - C_2 alkoxy- C_1 - C_2 alkyl, C_2 - C_4 alkenyl, C_1 - C_4 haloalkyl, xyano- C_1 - C_4 alkyl, C_2 - C_4 haloalkenyl, C_2 - C_4 alkynyl và C_2 - C_4 haloalkynyl;

R^2 được lựa chọn từ nhóm bao gồm hydro, halogen, xyano, C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 haloalkyl, C_1 - C_6 haloalkoxy, C_1 - C_3 haloalkoxy- C_1 - C_3 alkyl-, C_1 - C_6 alkoxy, C_1 - C_3 alkoxy- C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 alkoxy- C_1 - C_3 alkoxy- C_1 - C_3 alkyl-, C_3 - C_6 xycloalkyl, C_2 - C_6 alkenyl, C_2 - C_6 haloalkenyl, C_2 - C_6 alkynyl, C_1 - C_6 hydroxyalkyl-, C_1 - C_6 alkylcacbonyl-, $-S(O)_mC_1$ - C_6 alkyl, $-NR^4R^5$, $-C(C_1-C_3alkyl)=N-O-C_1-C_3alkyl$ và C_2 - C_6 haloalkynyl;

G là hydro, hoặc $C(O)R^3$;

R^3 được lựa chọn từ nhóm bao gồm C_1 - C_6 alkyl, C_2 - C_6 alkenyl, C_2 - C_6 alkynyl, C_1 - C_6 alkyl-S-, C_1 - C_6 alkoxy, $-NR^4R^5$ và phenyl tùy ý được thế bởi một hoặc nhiều R^6 ;

mỗi R^4 và R^5 một cách độc lập được lựa chọn từ nhóm bao gồm hydro, C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 alkoxy, và C_3 - C_6 xycloalkyl, hoặc R^4 và R^5 cùng nhau có thể tạo thành vòng morpholinyl; và,

R^6 được lựa chọn từ nhóm bao gồm halogen, xyano, nitro, C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 haloalkyl, C_1 - C_3 alkoxy và C_1 - C_3 haloalkoxy.

X là hydro, C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 alkoxy, C_1 - C_3 haloalkyl, C_1 - C_3 haloalkoxy, hoặc halogen;

Y là xyclopropyl;

D là vòng heteroaryl đơn vòng được thể hoặc không được thể chứa 1, 2, hoặc 3 dị nguyên tử độc lập được lựa chọn từ oxy, nitơ và lưu huỳnh, và trong đó khi D được thể nó được thể trên ít nhất một nguyên tử cacbon mạch vòng với R^8 và/hoặc trên nguyên tử nitơ mạch vòng với R^9 ;

mỗi R^8 độc lập là oxy, hydroxyl, halogen, xyano, C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 haloalkyl, C_3 - C_6 -xycloalkyl, C_1 - C_6 alkoxy, C_1 - C_6 haloalkoxy, C_1 - C_3 alkoxy- C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 haloalkoxy- C_1 - C_3 alkyl-, C_1 - C_3 alkoxy- C_1 - C_3 alkoxy- C_1 - C_3 alkyl-, C_2 - C_6 alkenyl, C_2 - C_6 haloalkenyl, C_2 - C_6 alkynyl, C_2 - C_6 haloalkynyl, C_1 - C_6 hydroxyalkyl-, C_1 - C_6 alkylcarbonyl-, C_1 - C_6 haloalkylcarbonyl-, C_3 - C_6 xycloalkylcarbonyl-, $-S(O)_m$ - C_1 - C_6 haloalkyl, $-S(O)_m$ - C_3 - C_6 xycloalkyl, $-O-S(O)_2$ - C_1 - C_3 alkyl, $-C_1$ - C_3 alkyl- $S(O)_m$ - C_1 - C_6 alkyl, $-C_1$ - C_3 alkyl- $S(O)_m$ - C_1 - C_6 haloalkyl, $-C_1$ - C_3 alkyl- $S(O)_m$ - C_3 - C_6 xycloalkyl, xyano- C_1 - C_6 -alkyl, $-NR^4R^5$, $-C(S)NR^4R^5$, $-S(O)_2NHC(O)C_1$ - C_3 alkyl-, $-S(O)_2NR^4R^5$, $-C(O)OH$, $-C(O)OC_1$ - C_6 alkyl, $-C(O)NHS-(O)_2C_1$ - C_6 alkyl, $-C(O)NR^4R^5$, $-NR^4C(O)NR^4R^5$, C_1 - C_6 alkylcarbonyl(C_1 - C_6 alkyl)amino-, C_1 - C_6 haloalkylcarbonylamino-, C_1 - C_6 haloalkylcarbonyl(C_1 - C_6 alkyl)amino-, C_1 - C_6 alkylsulfonylamino-, C_1 - C_6 alkylsulfonyl(C_1 - C_6 alkyl)amino-, C_1 - C_6 haloalkylsulfonylamino-, C_1 - C_6 haloalkylsulfonyl(C_1 - C_6 alkyl)amino-, C_3 - C_6 xycloalkylsulfonylamino-, C_3 - C_6 xycloalkylsulfonyl(C_1 - C_6 alkyl)amino-, hydroxyamino-, hydroxy(C_1 - C_6 alkyl)amino, C_1 - C_6 alkoxyamino, C_1 - C_6 alkoxy(C_1 - C_6 alkyl)amino, C_1 - C_6 haloalkoxyamino, C_1 - C_6 haloalkoxy(C_1 - C_6 alkyl)amino; hoặc hệ thống vòng được lựa chọn từ nhóm bao gồm: vòng phenyl, vòng heteroaryl có từ 5 đến 6

cạnh và vòng heteroxyclyl có từ 3 đến 6 cạnh, trong đó hệ thống vòng đã nêu được thế bởi từ 0 đến 5 R^{16} ;

m là số nguyên 0, 1, hoặc 2; và

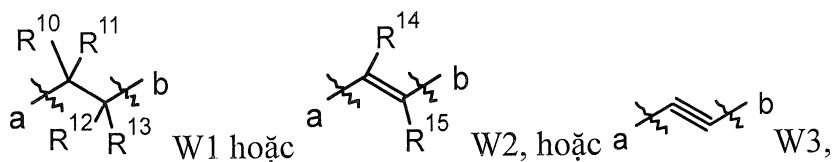
mỗi R^9 độc lập là C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 haloalkyl, C_3 - C_6 -xycloalkyl, C_1 - C_3 alkoxy- C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 haloalkoxy- C_1 - C_3 alkyl-, C_1 - C_3 alkoxy- C_1 - C_3 alkoxy- C_1 - C_3 alkyl-, C_1 - C_6 hydroxyalkyl-, $-C_1$ - C_3 alkyl- $S(O)_m$ - C_1 - C_6 alkyl, $-C_1$ - C_3 alkyl- $S(O)_m$ - C_1 - C_6 haloalkyl, $-C_1$ - C_3 alkyl- $S(O)_m$ - C_3 - C_6 xycloalkyl, xyano- C_1 - C_6 -alkyl-, hoặc hệ thống vòng được lựa chọn từ nhóm bao gồm: vòng phenyl, vòng heteroaryl có từ 5 đến 6 cạnh và vòng heteroxyclyl có từ 3 đến 6 cạnh, trong đó hệ thống vòng đã nêu được thế bởi từ 0 đến 5 R^{16} ;

mỗi R^{16} độc lập là halogen, xyano, C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 haloalkyl, C_1 - C_6 alkoxy hoặc C_1 - C_6 haloalkoxy;

hoặc D là vòng phenyl được thế hoặc không được thế, và trong đó khi vòng phenyl đã nêu được thế nó được thế bởi từ 1 đến 5 R^8 ;

và,

W là hoặc



trong đó

“a” biểu thị điểm gắn với gốc phenyl-pyridazin dion/phenyl-pyridazinon,

“b” biểu thị điểm gắn với vòng D,

mỗi R^{10} , R^{12} , R^{14} và R^{15} một cách độc lập là hydro, C_1 - C_3 alkyl, hoặc C_1 - C_3 haloalkyl;

hoặc R^{10} và R^{12} cùng với các nguyên tử cacbon mà chúng gắn vào tạo thành vòng C_3 - C_6 cacboxyclic; và

mỗi R^{11} và R^{13} một cách độc lập là hydro, halogen, C_1 - C_3 alkyl, hoặc C_1 - C_3 haloalkyl, với điều kiện khi một trong số R^{11} hoặc R^{13} là halogen, C_1 - C_3 alkyl hoặc C_1 - C_3 haloalkyl, nhóm còn lại là hydro.

4. Hợp chất theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 3, trong đó G là hydro hoặc $-C(O)R^3$, và R^3 là C_1 - C_4 alkyl, C_2 - C_3 alkenyl, C_2 - C_3 alkynyl, C_1 - C_4 alkoxy, $-NR^4R^5$ trong đó R^4 và R^5 cùng nhau tạo thành vòng morpholiny, hoặc phenyl.
5. Hợp chất theo điểm bất kỳ trong số các điểm nêu trên, trong đó G là hydro hoặc $C(O)R^3$ trong đó R^3 là isopropyl, t-butyl, metyl, etyl, propargyl, metoxy, etoxy, hoặc *tert*-butoxy.
6. Hợp chất theo điểm bất kỳ trong số các điểm 1, 3, 4, hoặc 5, trong đó X là hydro, C_1 - C_3 alkyl, halogen, hoặc C_1 haloalkyl.
7. Hợp chất theo điểm bất kỳ trong số các điểm 1, 2, 4, 5 hoặc 6, trong đó Y là hydro, C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 haloalkyl, hoặc halogen.
8. Hợp chất theo điểm bất kỳ trong số các điểm nêu trên trong đó X là *ortho* đối với gốc pyrdazinon/pyridazin-dion.
9. Hợp chất theo điểm bất kỳ trong số các điểm nêu trên trong đó Y là *ortho* đối với gốc -W-D.
10. Hợp chất theo điểm bất kỳ trong số các điểm nêu trên trong đó R^1 là metyl, etyl, n-propyl, xyclopropyl, propargyl, hoặc C_1 haloalkyl.
11. Hợp chất theo điểm bất kỳ trong số các điểm nêu trên trong đó R^2 được lựa chọn từ nhóm bao gồm hydro, halogen, C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 haloalkyl, C_1 - C_6 alkoxy, C_1 - C_3 alkoxy- C_1 - C_3 alkyl, C_3 - C_6 xycloalkyl, C_2 - C_6 alkenyl, C_2 - C_6 haloalkenyl, C_2 - C_6 alkynyl và C_2 - C_6 haloalkynyl.
12. Hợp chất theo điểm bất kỳ trong số các điểm nêu trên trong đó D là vòng heteroaryl đơn vòng được thế hoặc không được thế.
13. Hợp chất theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 11 trong đó D là vòng phenyl được thế hoặc không được thế.
14. Hợp chất theo điểm bất kỳ trong số các điểm nêu trên trong đó W là W1 và mỗi trong số R^{10} , R^{11} , R^{12} , và R^{13} là hydro.
15. Hợp chất theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 13 trong đó W là W2 và mỗi trong số R^{14} và R^{15} là hydro.
16. Hợp chất theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 13 trong đó W là W3.

17. Chế phẩm diệt cỏ bao gồm hợp chất diệt cỏ theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 16 và chất phụ gia bào chế nông dụng.
18. Chế phẩm diệt cỏ theo điểm 17, còn bao gồm ít nhất một chất diệt sinh vật gây hại bổ sung.
19. Chế phẩm diệt cỏ theo điểm 18, trong đó chất diệt sinh vật gây hại bổ sung là chất diệt cỏ hoặc chất an toàn của chất diệt cỏ.
20. Phương pháp kiểm soát sự sinh trưởng của thực vật không mong muốn, bao gồm bước áp dụng hợp chất có công thức (I), (Ia) hoặc (Ib) như được xác định theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 16, hoặc chế phẩm diệt cỏ theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 17 đến 19, cho các thực vật không mong muốn hoặc cho địa điểm của chúng.