(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) **1-0049767**

(51)[2022.01] **C07D 401/04**; C07D 491/056; A01N 43/54; A01N 43/56; A01N 43/58; A01N 43/60; A01N 43/78; A01N 43/836; A01N 43/90; A01N 47/02; A01P 13/00; C07D 235/18; C07D 401/14; C07D 403/04; C07D 405/14; C07D 409/14; C07D 413/14; C07D 417/14; A01M 21/04; A01N 43/52

(13) **B**

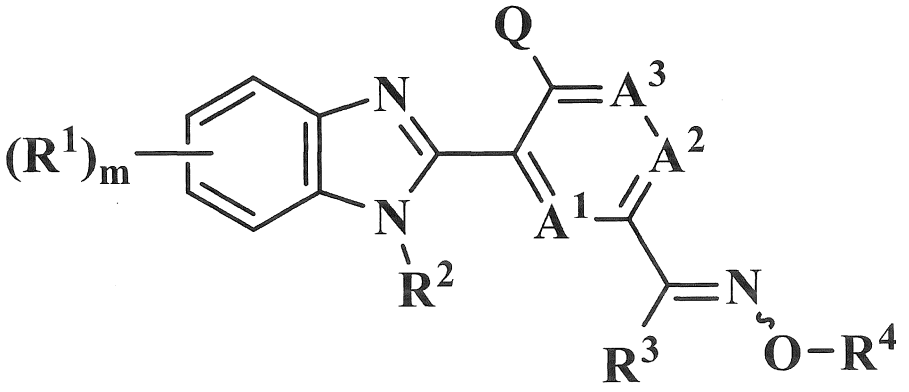
(21) 1-2023-02143
(22) 28/10/2021
(86) PCT/JP2021/039753 28/10/2021
(87) WO 2022/092180 05/05/2022
(30) 2020-181875 29/10/2020 JP
(45) 25/08/2025 449
(43) 25/07/2023 424A

(73) NIHON NOHYAKU CO., LTD. (JP)
19-8, Kyobashi 1-chome, Chuo-ku, Tokyo 1048386, Japan
(72) SANO Yusuke (JP); MORITA Tomoya (JP); OSATO Naoya (JP); NISHIMOTO Asuka (JP).
(74) Công ty Cổ phần Sở hữu công nghiệp INVESTIP (INVESTIP)

(54) HỢP CHẤT DỊ VÒNG NGƯNG TỤ CHỨA NITƠ CÓ NHÓM OXIM, THUỐC DIỆT CỎ DÙNG TRONG NÔNG NGHIỆP VÀ TRỒNG TRỌT BAO GỒM HỢP CHẤT NÀY, VÀ PHƯƠNG PHÁP SỬ DỤNG HỢP CHẤT NÀY HOẶC THUỐC DIỆT CỎ

(21) 1-2023-02143

(57) Để giải quyết cuộc khủng hoảng lương thực được dự đoán sẽ xảy ra trong tương lai gần do sự gia tăng dân số toàn cầu, có nhu cầu tạo ra một loại thuốc diệt cỏ mới vừa có tính an toàn cao cho cây trồng vừa có hoạt tính diệt cỏ ưu việt đối với cỏ dại. Vấn đề này có thể được giải quyết bằng thuốc diệt cỏ dùng trong nông nghiệp và trồng trọt bao gồm Hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1) sau đây:



hoặc muối của nó làm thành phần hoạt tính, và phương pháp sử dụng thuốc diệt cỏ.

Lĩnh vực kỹ thuật được đề cập

Sáng chế đề cập đến hợp chất dị vòng ngưng tụ chứa nitơ có nhóm oxim và muối của nó, thuốc diệt cỏ dùng trong nông nghiệp và trồng trọt bao gồm hợp chất hoặc muối của nó làm thành phần hoạt tính, và phương pháp sử dụng hợp chất hoặc muối của nó hoặc thuốc diệt cỏ.

Tình trạng kỹ thuật của sáng chế

Tài liệu sáng chế 1 mô tả một số loại hợp chất dị vòng ngưng tụ chứa nitơ có nhóm oxim mà có hoạt tính diệt côn trùng. Tuy nhiên, tài liệu này không mô tả cấu trúc cụ thể của hợp chất theo sáng chế, nó cũng không bộc lộ hoặc đề xuất bất kỳ hợp chất nào có công dụng làm các thuốc diệt cỏ.

Danh sách tài liệu viện dẫn

Tài liệu sáng chế

Tài liệu sáng chế 1: WO 2017/065183

Bản chất kỹ thuật của sáng chế

Vấn đề kỹ thuật

Một nguồn cung cấp lương thực ổn định và an toàn là điều cần thiết để giải quyết cuộc khủng hoảng lương thực được dự đoán sẽ xảy ra trong tương lai gần do sự gia tăng dân số toàn cầu. Việc cung cấp lương thực ổn định và an toàn đòi hỏi phải loại bỏ hoặc kiểm soát cỏ dại gây trở ngại cho việc canh tác và thu hoạch cây trồng một cách kinh tế và hiệu quả. Do đó, việc phát triển các loại các thuốc diệt cỏ và các chất điều hòa sinh trưởng thực vật mới có thể cung cấp các giải pháp cho vấn đề này ngày càng trở nên quan trọng. Để đáp ứng nhu cầu xã hội như vậy, sáng chế có mục đích đề xuất thuốc diệt cỏ mới có cả tính an toàn cao cho cây trồng và hoạt tính diệt cỏ tuyệt vời đối với cỏ dại. Ngoài ra, do sự lão hóa của nông dân, có nhu cầu về các loại phương pháp ứng dụng tiết kiệm lao động và tạo ra các thuốc diệt cỏ dùng trong nông nghiệp và trồng trọt phù hợp với các phương pháp ứng dụng đó.

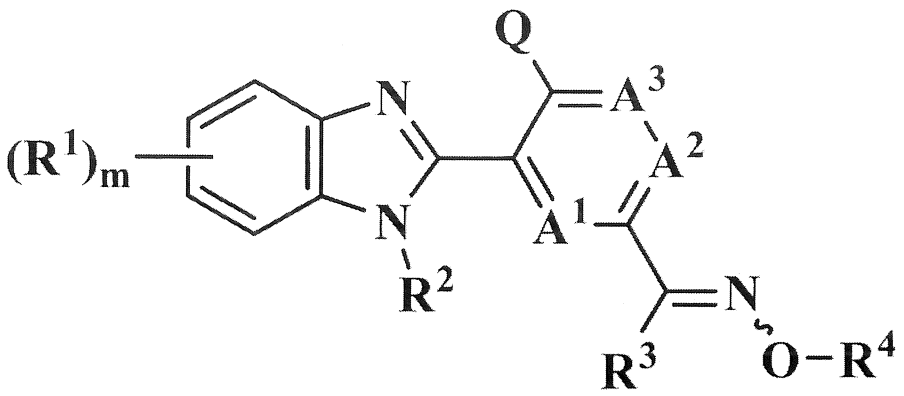
Giải pháp cho vấn đề

Các tác giả sáng chế đã tiến hành nghiên cứu chuyên sâu để phát triển thuốc diệt cỏ mới dùng trong nông nghiệp và trồng trọt. Kết quả là, các tác giả sáng chế đã phát hiện ra rằng hợp chất dị vòng ngưng tụ chứa nitơ có nhóm oxim được biểu diễn bằng công thức chung (1) của sáng chế hoặc muối của nó có công dụng làm thuốc diệt cỏ dùng trong nông nghiệp và trồng trọt. Dựa trên phát hiện này, các tác giả sáng chế đã hoàn thành sáng chế.

Nghĩa là, sáng chế bao gồm những điểm sau.

[1] Hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1):

[Công thức hóa học 1]



{trong đó

R^1 là

(a1) nguyên tử halogen;

(a2) nhóm xyano;

(a3) nhóm nitro;

(a4) nhóm formyl;

(a5) nhóm cacboxyl;

(a6) nhóm (C_1-C_6) alkyl;

(a7) nhóm (C_2-C_6) alkenyl;

(a8) nhóm (C_2-C_6) alkynyl;

(a9) nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl;

(a10) nhóm halo (C_1-C_6) alkyl;

(a11) nhóm halo (C_2-C_6) alkenyl;

(a12) nhóm halo (C_2-C_6) alkynyl;

(a13) nhóm halo (C_3-C_6) xycloalkyl;

(a14) nhóm hydroxy (C_1-C_6) alkyl;

(a15) nhóm hydroxy halo (C_1-C_6) alkyl;

(a16) nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl;

(a17) nhóm di-(C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl;

(a18) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl;

(a19) nhóm (C_1-C_6) alkoxy halo (C_1-C_6) alkyl;

(a20) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy halo (C_1-C_6) alkyl;

(a21) nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl;

(a22) nhóm (C_1-C_6) alkoxy;

(a23) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy;

(a24) nhóm (C_1-C_6) alkylthio;

(a25) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl;

(a26) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(a27) nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio;

(a28) nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl;

(a29) nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(a30) nhóm $R^8(R^9)N$ trong đó R^8 và R^9 có thể giống nhau hoặc khác nhau và mỗi ký hiệu là nguyên tử hydro, nhóm hydroxyl, nhóm amino, nhóm di-(C_1-C_6) alkylamino, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl, nhóm (C_2-C_6) alkenyl, nhóm (C_2-C_6) alkynyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_2-C_6) alkenyloxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_2-C_6) alkenyl, nhóm halo (C_2-C_6) alkynyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_3-C_6) xycloalkyl, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm xyano (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkylcacbonyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylcacbonyl, nhóm

(C_1-C_6) alkoxycacbonyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxycacbonyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfanylcacbonyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl, nhóm N-(C_1-C_6) alkylcacboxamit, nhóm N,N-di-(C_1-C_6) alkylcacboxamit, nhóm N-(C_1-C_6) alkylsulfamoyl, nhóm N,N-di-(C_1-C_6) alkylsulfamoyl, nhóm N-halo (C_1-C_6) alkylcacboxamit, nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl, nhóm di-(C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkylcacbonyl, nhóm thietanyl, nhóm 1,1-dioxothietanyl, nhóm tetrahydrofuranyl, nhóm thiazolyl, nhóm 2-oxotetrahydrofuranyl, nhóm phenyl, nhóm phenyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 5 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nhóm chỉ bao gồm nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl, hoặc nhóm phenyl (C_1-C_6) alkyl, hoặc R^8 và R^9 có thể ghép với nhau để tạo thành vòng có từ 4 đến 6 phần tử;

(a31) nhóm $R^{10}(R^{11})N$ (C_1-C_6) alkyl trong đó R^{10} và R^{11} có thể giống nhau hoặc khác nhau và mỗi ký hiệu là nguyên tử hydro, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkylcacbonyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylcacbonyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxycacbonyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, hoặc nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl, hoặc R^{10} và R^{11} có thể ghép với nhau để tạo thành vòng có từ 4 đến 6 phần tử;

(a32) nhóm (C_1-C_6) alkylthio (C_1-C_6) alkyl;

(a33) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl (C_1-C_6) alkyl;

(a34) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl (C_1-C_6) alkyl;

(a35) nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio (C_1-C_6) alkyl;

(a36) nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl (C_1-C_6) alkyl;

(a37) nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl (C_1-C_6) alkyl;

(a38) nhóm (C_1-C_6) alkylthio halo (C_1-C_6) alkyl;

(a39) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl halo (C_1-C_6) alkyl;

(a40) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl halo (C_1-C_6) alkyl;

(a41) nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio halo (C_1-C_6) alkyl;

(a42) nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl halo (C_1-C_6) alkyl;

(a43) nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl halo (C_1-C_6) alkyl;

(a44) nhóm (C_1-C_6) alkylcacbonyl;

(a45) nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl;

(a46) nhóm halo (C_1-C_6) alkylcacbonyl;

(a47) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxycacbonyl;

(a48) nhóm (C_1-C_6) alkylcacbonyloxy;

(a49) nhóm halo (C_1-C_6) alkylcacbonyloxy;

(a50) nhóm $R^{10}(R^{11})N$ cacbonyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên;

(a51) nhóm $R^{10}(R^{11})N$ cacbonyloxy trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên;

(a52) nhóm $R^{10}(R^{11})N$ sulfonyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên;

(a53) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyloxy;

(a54) nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyloxy;

(a55) nhóm (C_1-C_6) alkoxyimino (C_1-C_3) alkyl;

(a56) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxyimino (C_1-C_3) alkyl;

(a57) nhóm phenyl;

(a58) nhóm phenyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 5 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ (C_1-C_6) alkyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(a59) nhóm pyridyl;

(a60) nhóm pyridyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 4 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ (C_1-C_6) alkyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(a61) nhóm pyrazolyl;

(a62) nhóm pyrazolyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 3 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ (C_1-C_6) alkyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(a63) nhóm phenoxy;

(a64) nhóm phenoxy có, ở trên vòng, từ 1 đến 5 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ (C_1-C_6) alkyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(a65) nhóm dioxolanyl;

(a66) nhóm dioxolanyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 4 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm

formyl, nhóm cacbonyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ (C_1-C_6) alkyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(a67) nhóm dioxanyl;

(a68) nhóm dioxanyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 6 các nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm cacbonyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ (C_1-C_6) alkyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(a69) nhóm (C_1-C_6) alkylen được tạo thành cùng với một nhóm thế liền kề (R^1 khác), trong đó nhóm (C_1-C_6) alkylen có thể được thế với từ 1 đến 4 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm phenyl, và nhóm (C_1-C_6) alkyl; hoặc

(a70) nhóm metylendioxy được tạo thành cùng với một nhóm thế liền kề (R^1 khác), trong đó nhóm metylendioxy có thể được thế bằng 1 hoặc 2 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm phenyl, và nhóm (C_1-C_6) alkyl,

trong đó, khi m là số nguyên lớn hơn hoặc bằng 2, các R^1 có thể giống nhau hoặc khác nhau,

m là 0, 1, 2, 3, hoặc 4,

R^2 là

(b1) nguyên tử hydro;

(b2) nhóm (C_1-C_6) alkyl;

(b3) nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl;

(b4) nhóm (C_2-C_6) alkenyl;

(b5) nhóm (C_2-C_6) alkynyl;

(b6) nhóm halo (C_1-C_6) alkyl;

(b7) nhóm halo (C_2-C_6) alkenyl;

(b8) nhóm halo (C_2-C_6) alkynyl;

(b9) nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl;

(b10) nhóm (C_1-C_6) alkylthio (C_1-C_6) alkyl;

(b11) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl (C_1-C_6) alkyl;

(b12) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl (C_1-C_6) alkyl;

(b13) nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl;

(b14) nhóm (C_1-C_6) alkoxy;

(b15) nhóm (C_1-C_6) alkylcacbonyl;

(b16) nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl;

(b17) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy;

(b18) nhóm halo (C_1-C_6) alkylcacbonyl;

(b19) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxycacbonyl;

(b20) nhóm $R^{10}(R^{11})N$ cacbonyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên; hoặc

(b21) nhóm $R^{10}(R^{11})N$ sulfonyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên,

R^3 là

(c1) nguyên tử hydro;

(c2) nhóm halogen;

(c3) nhóm xyano;

(c4) nhóm cacboxyl;

(c5) nhóm cacboxamit;

(c6) nhóm (C_1-C_6) alkyl;

(c7) nhóm (C_2-C_6) alkenyl;

(c8) nhóm (C_2-C_6) alkynyl;

(c9) nhóm halo (C_1-C_6) alkyl;

(c10) nhóm halo (C_2-C_6) alkenyl;

(c11) nhóm halo (C_2-C_6) alkynyl;

(c12) nhóm $R^8(R^9)N$ trong đó R^8 và R^9 giống như trên;

(c13) nhóm (C_1-C_6) alkoxy;

(c14) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy;

(c15) nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl; hoặc

(c16) nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl (C_1-C_6) alkyl,

R^4 là

(d1) nguyên tử hydro;

(d2) nhóm (C_1-C_6) alkyl;

(d3) nhóm (C_2-C_6) alkenyl;

(d4) nhóm (C_2-C_6) alkynyl;

(d5) nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl;

(d6) nhóm halo (C_1-C_6) alkyl;

(d7) nhóm halo (C_2-C_6) alkenyl;

(d8) nhóm halo (C_2-C_6) alkynyl;

(d9) nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl;

(d10) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl;

(d11) nhóm (C_1-C_6) alkoxy halo (C_1-C_6) alkyl;

(d12) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy halo (C_1-C_6) alkyl;

(d13) nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl;

(d14) nhóm xyano (C_1-C_6) alkyl;

(d15) nhóm (C_1-C_6) alkylthio (C_1-C_6) alkyl;

(d16) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl (C_1-C_6) alkyl;

(d17) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl (C_1-C_6) alkyl;

(d18) nhóm cacboxyl (C_1-C_6) alkyl;

(d19) nhóm phenyl (C_1-C_6) alkyl;

(d20) nhóm phenyl (C_1-C_6) alkyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 5 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(d21) nhóm $R^{10}(R^{11})N$ alkyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên;

(d22) nhóm (C_1-C_6) alkylcacbonyl;

(d23) nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl;

(d24) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(d25) nhóm halo (C_1-C_6) alkylcacbonyl;

(d26) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxycacbonyl;

(d27) nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(d28) nhóm $R^{10}(R^{11})N$ cacbonyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên;

(d29) nhóm $R^{10}(R^{11})N$ sulfonyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên;

(d30) nhóm phenyl;

(d31) nhóm phenyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 5 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl; hoặc

(d32) nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl (C_1-C_6) alkyl,

A^1, A^2, và A^3 có thể giống nhau hoặc khác nhau và mỗi ký hiệu là CR^5 (trong đó R^5 là nguyên tử hydro, nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, hoặc nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl) hoặc nguyên tử nitơ, và

Q là

(e1) nguyên tử halogen;

(e2) nhóm xyano;

(e3) nhóm nitro;

(e4) nhóm formyl;

(e5) nhóm (C_1-C_6) alkyl;

(e6) nhóm (C_2-C_6) alkenyl;

(e7) nhóm (C_2-C_6) alkynyl;

(e8) nhóm halo (C_1-C_6) alkyl;

(e9) nhóm halo (C_2-C_6) alkenyl;

(e10) nhóm halo (C_2-C_6) alkynyl;

(e11) nhóm (C_1-C_6) alkoxy;

(e12) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy;

(e13) nhóm hydroxy (C_1-C_6) alkyl;

(e14) nhóm dihydroxy (C_1-C_6) alkyl;

(e15) nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl;

(e16) nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_2-C_6) alkenyl;

(e17) nhóm $R^8(R^9)N$ trong đó R^8 và R^9 giống như trên;

(e18) nhóm dioxolanyl;

(e19) nhóm dioxolanyl có, ở trên vòng, 1 hoặc 2 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm cacbonyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy,

nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ (C_1-C_6) alkyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(e20) nhóm dioxanyl;

(e21) nhóm dioxanyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 3 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm cacbonyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ (C_1-C_6) alkyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(e22) nhóm phenyl;

(e23) nhóm phenyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 5 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(e24) nhóm imidazolyl;

(e25) nhóm imidazolyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 3 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(e26) nhóm oxadiazolyl;

(e27) nhóm oxadiazolyl có, ở trên vòng, nhóm thế được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(e28) nhóm $S(O)_pR^6$ trong đó R^6 là nguyên tử hydro, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_2-C_6) alkenyl, nhóm (C_2-C_6) alkynyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_2-C_6) alkenyl, nhóm halo (C_2-C_6) alkynyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl, nhóm halo (C_3-C_6) xycloalkyl, nhóm phenyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxyphenyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkylphenyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm tri-(C_1-C_6) alkylsilylphenyl (C_1-C_6) alkyl, hoặc nhóm $N(R^8)R^9$ trong đó R^8 và R^9 giống như trên, và p là 0, 1, hoặc 2;

(e29) nhóm $C(O)R^7$ trong đó R^7 là nhóm hydroxyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_2-C_6) alkenyl, nhóm (C_2-C_6) alkynyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_2-C_6) alkenyl, nhóm halo (C_2-C_6) alkynyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm phenyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm phenyl (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_2-C_6) alkenyloxy, nhóm (C_2-C_6) alkynyloxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_2-C_6) alkynyloxy, nhóm phenyloxy, nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm phenyl, nhóm thiazolidinyl, hoặc nhóm $N(R^8)R^9$ trong đó R^8 và R^9 giống như trên;

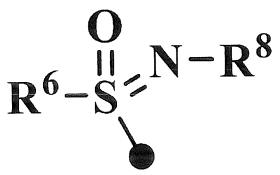
(e30) nhóm thiocacboxamit;

(e31) nhóm N-(C_1-C_6) alkylaminothiocacbonyl;

(e32) nhóm N,N-di-(C_1-C_6) alkylaminothiocacbonyl;

(e33)

[Công thức hóa học 2]



trong đó R^6 và R^8 giống như trên;

(e34) nhóm hydroxyimino (C_1-C_3) alkyl;

(e35) nhóm (C_1-C_6) alkoxyimino (C_1-C_3) alkyl;

(e36) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxyimino (C_1-C_3) alkyl;

(e37) nhóm hydrazono (C_1-C_3) alkyl;

(e38) nhóm (C_1-C_6) alkylhydrazono (C_1-C_3) alkyl;

(e39) nhóm di-(C_1-C_6) alkylhydrazono (C_1-C_3) alkyl;

(e40) nhóm phenyl (C_1-C_6) alkoxyimino (C_1-C_3) alkyl;

(e41) nhóm (C_2-C_6) alkenyloxyimino (C_1-C_3) alkyl;

(e42) nhóm di-(C_1-C_6) alkoxyphosphoryl;

(e43) nhóm di-(C_1-C_6) alkoxyphosphorylamino;

(e44) nhóm hydroxyl;

(e45) nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkoxy;

(e46) nhóm (C_1-C_6) alkoxyiminoamino (C_1-C_3) alkyl;

(e47) nhóm xyano (C_1-C_6) alkyl;

(e48) nhóm xyano (C_2-C_6) alkenyl;

(e49) nhóm dixyano (C_1-C_6) alkyl; hoặc

(e50) nhóm dixyano (C_2-C_6) alkenyl}, hoặc

muối của nó.

[2] Hợp chất hoặc muối của nó theo mục [1] nêu trên, trong đó

A^1, A^2, và A^3 giống như được nêu trong mục [1],

R^1 là

(a1) nguyên tử halogen;

(a2) nhóm xyano;

(a3) nhóm nitro;

(a4) nhóm formyl;

(a5) nhóm cacboxyl;

(a6) nhóm (C_1-C_6) alkyl;

(a7) nhóm (C_2-C_6) alkenyl;

(a8) nhóm (C_2-C_6) alkynyl;

(a9) nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl;

(a10) nhóm halo (C_1-C_6) alkyl;

(a11) nhóm halo (C_2-C_6) alkenyl;

(a12) nhóm halo (C_2-C_6) alkynyl;

(a14) nhóm hydroxy (C_1-C_6) alkyl;

(a15) nhóm hydroxy halo (C_1-C_6) alkyl;

(a16) nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl;

(a17) nhóm di-(C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl;

(a18) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl;

(a19) nhóm (C_1-C_6) alkoxy halo (C_1-C_6) alkyl;

(a20) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy halo (C_1-C_6) alkyl;

(a21) nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl;

(a22) nhóm (C_1-C_6) alkoxy;

(a23) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy;

(a24) nhóm (C_1-C_6) alkylthio;

(a25) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl;

(a26) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(a27) nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio;

(a28) nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl;

(a29) nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(a30) nhóm $R^8(R^9)N$ trong đó R^8 và R^9 có thể giống nhau hoặc khác nhau và mỗi ký hiệu là nguyên tử hydro, nhóm hydroxyl, nhóm amino, nhóm di-(C_1-C_6) alkylamino, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl, nhóm (C_2-C_6) alkenyl, nhóm (C_2-C_6) alkynyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_2-C_6) alkenyloxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_2-C_6) alkenyl, nhóm halo (C_2-C_6) alkynyl, nhóm halo (C_3-C_6) xycloalkyl, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm xyano (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkylcacbonyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylcacbonyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxycacbonyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfanylcacbonyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl, nhóm N-(C_1-C_6) alkylcacboxamit, nhóm N,N-di-(C_1-C_6) alkylcacboxamit, nhóm N-(C_1-C_6) alkylsulfamoyl, nhóm N,N-di-(C_1-C_6) alkylsulfamoyl, nhóm N-halo (C_1-C_6) alkylcacboxamit, nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl, nhóm di-(C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkylcacbonyl, nhóm thietanyl, nhóm 1,1-dioxothietanyl, nhóm tetrahydrofuranyl, nhóm thiazolyl, nhóm 2-oxotetrahydrofuranyl, nhóm phenyl, nhóm phenyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 5 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nhóm chỉ bao gồm nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, và nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, hoặc nhóm phenyl (C_1-C_6) alkyl, hoặc R^8 và R^9 có thể ghép với nhau để tạo thành vòng có từ 4 đến 6 phần tử;

(a31) nhóm $R^{10}(R^{11})N$ (C_1-C_6) alkyl trong đó R^{10} và R^{11} có thể giống nhau hoặc khác nhau và mỗi ký hiệu là nguyên tử hydro, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkylcacbonyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylcacbonyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxycacbonyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, hoặc nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl, hoặc R^{10} và R^{11} có thể ghép với nhau để tạo thành vòng có từ 4 đến 6 phần tử;

(a32) nhóm (C_1-C_6) alkylthio (C_1-C_6) alkyl;

(a33) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl (C_1-C_6) alkyl;

(a34) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl (C_1-C_6) alkyl;

(a35) nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio (C_1-C_6) alkyl;

(a36) nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl (C_1-C_6) alkyl;

(a37) nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl (C_1-C_6) alkyl;

(a44) nhóm (C_1-C_6) alkylcacbonyl;

(a45) nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl;

(a46) nhóm halo (C_1-C_6) alkylcacbonyl;

(a47) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxycacbonyl;

(a50) nhóm $R^{10}(R^{11})N$ cacbonyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên;

(a52) nhóm $R^{10}(R^{11})N$ sulfonyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên;

(a55) nhóm (C_1-C_6) alkoxyimino (C_1-C_3) alkyl;

(a56) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxyimino (C_1-C_3) alkyl;

(a57) nhóm phenyl;

(a58) nhóm phenyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 5 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ (C_1-C_6) alkyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(a59) nhóm pyridyl;

(a60) nhóm pyridyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 4 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ (C_1-C_6) alkyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(a61) nhóm pyrazolyl;

(a62) nhóm pyrazolyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 3 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ (C_1-C_6) alkyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(a63) nhóm phenoxy;

(a64) nhóm phenoxy có, ở trên vòng, từ 1 đến 5 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ (C_1-C_6) alkyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(a65) nhóm dioxolanyl;

(a66) nhóm dioxolanyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 4 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm cacbonyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ (C_1-C_6) alkyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(a67) nhóm dioxanyl;

(a68) nhóm dioxanyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 6 các nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm cacbonyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6)

alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ (C_1-C_6) alkyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(a69) nhóm (C_1-C_6) alkylen được tạo thành cùng với một nhóm thế liền kề (R^1 khác), trong đó nhóm (C_1-C_6) alkylen có thể được thế với 1 hoặc 2 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm phenyl, và nhóm (C_1-C_6) alkyl; hoặc

(a70) nhóm metylendioxy được tạo thành cùng với một nhóm thế liền kề (R^1 khác), trong đó nhóm metylendioxy có thể được thế bằng 1 hoặc 2 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm phenyl, và nhóm (C_1-C_6) alkyl,

trong đó, khi m là số nguyên lớn hơn hoặc bằng 2, các R^1 có thể giống nhau hoặc khác nhau,

m là 0, 1, 2, 3, hoặc 4,

R^2 là

(b1) nguyên tử hydro;

(b2) nhóm (C_1-C_6) alkyl;

(b3) nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl;

(b4) nhóm (C_2-C_6) alkenyl;

(b5) nhóm (C_2-C_6) alkynyl;

(b6) nhóm halo (C_1-C_6) alkyl;

(b7) nhóm halo (C_2-C_6) alkenyl;

(b8) nhóm halo (C_2-C_6) alkynyl;

(b9) nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl;

(b10) nhóm (C_1-C_6) alkylthio (C_1-C_6) alkyl;

(b11) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl (C_1-C_6) alkyl;

(b12) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl (C_1-C_6) alkyl;

(b13) nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl;

(b15) nhóm (C_1-C_6) alkylcacbonyl;

(b16) nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl;

(b18) nhóm halo (C_1-C_6) alkylcacbonyl; hoặc

(b21) nhóm $R^{10}(R^{11})N$ sulfonyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên,

R^3 là

(c1) nguyên tử hydro;

(c2) nhóm halogen;

(c3) nhóm xyano;

(c4) nhóm cacboxyl;

(c5) nhóm cacboxamit;

(c6) nhóm (C_1-C_6) alkyl;

(c9) nhóm halo (C_1-C_6) alkyl;

(c12) nhóm $R^8(R^9)N$ trong đó R^8 và R^9 giống như trên;

(c13) nhóm (C_1-C_6) alkoxy;

(c14) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy;

(c15) nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl; hoặc

(c16) nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl (C_1-C_6) alkyl,

R^4 là

(d1) nguyên tử hydro;

(d2) nhóm (C_1-C_6) alkyl;

(d3) nhóm (C_2-C_6) alkenyl;

(d4) nhóm (C_2-C_6) alkynyl;

(d5) nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl;

(d6) nhóm halo (C_1-C_6) alkyl;

(d7) nhóm halo (C_2-C_6) alkenyl;

(d8) nhóm halo (C_2-C_6) alkynyl;

(d9) nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl;

(d10) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl;

(d13) nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl;

(d14) nhóm xyano (C_1-C_6) alkyl;

(d15) nhóm (C_1-C_6) alkylthio (C_1-C_6) alkyl;

(d16) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl (C_1-C_6) alkyl;

(d17) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl (C_1-C_6) alkyl;

(d18) nhóm cacboxyl (C_1-C_6) alkyl;

(d19) nhóm phenyl (C_1-C_6) alkyl;

(d20) nhóm phenyl (C_1-C_6) alkyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 5 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(d22) nhóm (C_1-C_6) alkylcacbonyl;

(d23) nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl;

(d24) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(d25) nhóm halo (C_1-C_6) alkylcacbonyl;

(d26) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxycacbonyl;

(d27) nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(d30) nhóm phenyl;

(d31) nhóm phenyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 5 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl,

nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl; hoặc

(d32) nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl (C_1-C_6) alkyl, và

Q là

(e1) nguyên tử halogen;

(e2) nhóm xyano;

(e4) nhóm formyl;

(e5) nhóm (C_1-C_6) alkyl;

(e6) nhóm (C_2-C_6) alkenyl;

(e7) nhóm (C_2-C_6) alkynyl;

(e8) nhóm halo (C_1-C_6) alkyl;

(e11) nhóm (C_1-C_6) alkoxy;

(e12) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy;

(e13) nhóm hydroxy (C_1-C_6) alkyl;

(e14) nhóm dihydroxy (C_1-C_6) alkyl;

(e15) nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl;

(e16) nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_2-C_6) alkenyl;

(e17) nhóm $R^8(R^9)N$ trong đó R^8 và R^9 giống như trên;

(e18) nhóm dioxolanyl;

(e19) nhóm dioxolanyl có, ở trên vòng, 1 hoặc 2 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nhóm cacbonyl và nhóm (C_1-C_6) alkyl;

(e20) nhóm dioxanyl;

(e21) nhóm dioxanyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 3 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl,

nhóm cacbonyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ (C_1-C_6) alkyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(e22) nhóm phenyl;

(e23) nhóm phenyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 5 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(e24) nhóm imidazolyl;

(e25) nhóm imidazolyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 3 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(e26) nhóm oxadiazolyl;

(e27) nhóm oxadiazolyl có, ở trên vòng, nhóm thế được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(e28) nhóm $S(O)_pR^6$ trong đó R^6 là nguyên tử hydro, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_2-C_6) alkenyl, nhóm (C_2-C_6) alkynyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_2-C_6)

alkenyl, nhóm halo (C_2-C_6) alkynyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl, nhóm halo (C_3-C_6) xycloalkyl, nhóm phenyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxyphenyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkylphenyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm tri-(C_1-C_6) alkylsilylphenyl (C_1-C_6) alkyl, hoặc nhóm $N(R^8)R^9$ trong đó R^8 và R^9 giống như trên, và p là 0, 1, hoặc 2;

(e29) nhóm $C(O)R^7$ trong đó R^7 là nhóm hydroxyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_2-C_6) alkenyl, nhóm (C_2-C_6) alkynyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_2-C_6) alkenyl, nhóm halo (C_2-C_6) alkynyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm phenyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm phenyl (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_2-C_6) alkenyloxy, nhóm (C_2-C_6) alkynyloxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_2-C_6) alkynyloxy, nhóm phenyloxy, nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm phenyl, nhóm thiazolidinyl, hoặc nhóm $N(R^8)R^9$ trong đó R^8 và R^9 giống như trên;

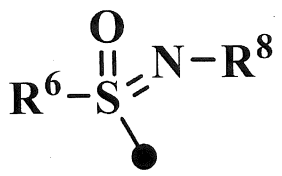
(e30) nhóm thiocacboxamit;

(e31) nhóm N-(C_1-C_6) alkylaminothiocacbonyl;

(e32) nhóm N,N-di-(C_1-C_6) alkylaminothiocacbonyl;

(e33)

[Công thức hóa học 3]



trong đó R^6 và R^8 giống như trên;

(e34) nhóm hydroxyimino (C_1-C_3) alkyl;

(e35) nhóm (C_1-C_6) alkoxyimino (C_1-C_3) alkyl;

(e36) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxyimino (C_1-C_3) alkyl;

(e37) nhóm hydrazono (C_1-C_3) alkyl;

(e38) nhóm (C_1-C_6) alkylhydrazono (C_1-C_3) alkyl;

(e39) nhóm di-(C_1-C_6) alkylhydrazono (C_1-C_3) alkyl;

(e40) nhóm phenyl (C_1-C_6) alkoxyimino (C_1-C_3) alkyl;

(e41) nhóm (C_2-C_6) alkenyloxyimino (C_1-C_3) alkyl;

(e42) nhóm di-(C_1-C_6) alkoxyphosphoryl;

(e43) nhóm di-(C_1-C_6) alkoxyphosphorylamino;

(e44) nhóm hydroxyl;

(e45) nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkoxy; hoặc

(e46) nhóm (C_1-C_6) alkoxyiminoamino (C_1-C_3) alkyl.

[3] Hợp chất hoặc muối của nó theo mục [1] hoặc [2] nêu trên, trong đó

R^1 là

(a1) nguyên tử halogen;

(a2) nhóm xyano;

(a3) nhóm nitro;

(a4) nhóm formyl;

(a5) nhóm cacboxyl;

(a6) nhóm (C_1-C_6) alkyl;

(a7) nhóm (C_2-C_6) alkenyl;

(a9) nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl;

(a10) nhóm halo (C_1-C_6) alkyl;

(a14) nhóm hydroxy (C_1-C_6) alkyl;

(a16) nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl;

(a17) nhóm di-(C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl;

(a22) nhóm (C_1-C_6) alkoxy;

(a23) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy;

(a24) nhóm (C_1-C_6) alkylthio;

(a26) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(a27) nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio;

(a28) nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl;

(a29) nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(a30) nhóm $R^8(R^9)N$ trong đó R^8 và R^9 có thể giống nhau hoặc khác nhau và mỗi ký hiệu là nguyên tử hydro, nhóm hydroxyl, nhóm amino, nhóm di-(C_1-C_6) alkylamino, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl, nhóm (C_2-C_6) alkenyl, nhóm (C_2-C_6) alkynyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_2-C_6) alkenyloxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_3-C_6) xycloalkyl, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkylcacbonyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylcacbonyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, nhóm N,N-di-(C_1-C_6) alkylsulfamoyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl, nhóm di-(C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl, nhóm thietanyl, nhóm thiazolyl, hoặc nhóm 2-oxotetrahydrofuranyl, hoặc R^8 và R^9 có thể ghép với nhau để tạo thành vòng có từ 4 đến 6 phần tử;

(a31) nhóm $R^{10}(R^{11})N$ (C_1-C_6) alkyl trong đó R^{10} và R^{11} có thể giống nhau hoặc khác nhau và mỗi ký hiệu là nguyên tử hydro hoặc nhóm (C_1-C_6) alkyl, hoặc R^{10} và R^{11} có thể ghép với nhau để tạo thành vòng có từ 4 đến 6 phần tử;

(a32) nhóm (C_1-C_6) alkylthio (C_1-C_6) alkyl;

(a33) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl (C_1-C_6) alkyl;

(a34) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl (C_1-C_6) alkyl;

(a45) nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl;

(a52) nhóm $R^{10}(R^{11})N$ sulfonyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên;

(a55) nhóm (C_1-C_6) alkoxyimino (C_1-C_3) alkyl;

(a57) nhóm phenyl;

(a58) nhóm phenyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 5 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen và nhóm (C_1-C_6) alkoxy;

(a59) nhóm pyridyl;

(a62) nhóm pyrazolyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 3 nhóm (C_1-C_6) alkyl mà có thể giống nhau hoặc khác nhau;

(a65) nhóm dioxolanyl;

(a67) nhóm dioxanyl;

(a69) nhóm (C_1-C_6) alkylen được tạo thành cùng với một nhóm thế liền kề (R^1 khác); hoặc

(a70) nhóm metylendioxy được tạo thành cùng với một nhóm thế liền kề (R^1 khác), trong đó nhóm metylendioxy có thể được thế với 1 hoặc 2 nguyên tử halogen,

trong đó, khi m là số nguyên lớn hơn hoặc bằng 2, các R^1 có thể giống nhau hoặc khác nhau,

m là 0, 1, 2, 3, hoặc 4,

R^2 là

(b1) nguyên tử hydro;

(b2) nhóm (C_1-C_6) alkyl;

(b3) nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl;

(b5) nhóm (C_2-C_6) alkynyl;

(b6) nhóm halo (C_1-C_6) alkyl; hoặc

(b9) nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl,

R^3 là

(c1) nguyên tử hydro;

(c3) nhóm xyano;

(c5) nhóm cacboxamit;

(c6) nhóm (C_1-C_6) alkyl;

(c12) nhóm $R^8(R^9)N$ trong đó R^8 và R^9 giống như trên;

(c13) nhóm (C_1-C_6) alkoxy; hoặc

(c16) nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl (C_1-C_6) alkyl,

R^4 là

(d1) nguyên tử hydro;

(d2) nhóm (C_1-C_6) alkyl;

(d3) nhóm (C_2-C_6) alkenyl;

(d4) nhóm (C_2-C_6) alkynyl;

(d6) nhóm halo (C_1-C_6) alkyl;

(d9) nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl;

(d13) nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl;

(d14) nhóm xyano (C_1-C_6) alkyl;

(d15) nhóm (C_1-C_6) alkylthio (C_1-C_6) alkyl;

(d16) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl (C_1-C_6) alkyl;

(d17) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl (C_1-C_6) alkyl;

(d18) nhóm cacboxyl (C_1-C_6) alkyl;

(d19) nhóm phenyl (C_1-C_6) alkyl;

(d20) nhóm phenyl (C_1-C_6) alkyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 5 nguyên tử halogen mà có thể giống nhau hoặc khác nhau;

(d22) nhóm (C_1-C_6) alkylcacbonyl;

(d23) nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl;

(d24) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(d30) nhóm phenyl; hoặc

(d32) nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl (C_1-C_6) alkyl,

A^1, A^2, và A^3 có thể giống nhau hoặc khác nhau và mỗi ký hiệu là CR^5 (trong đó R^5 là nguyên tử hydro, nguyên tử halogen, nhóm (C_1-C_6) alkyl, hoặc nhóm $R^{10}(R^{11})N$ trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên) hoặc nguyên tử nitơ, và

Q là

(e1) nguyên tử halogen;

(e2) nhóm xyano;

(e4) nhóm formyl;

(e5) nhóm (C_1-C_6) alkyl;

(e6) nhóm (C_2-C_6) alkenyl;

(e8) nhóm halo (C_1-C_6) alkyl;

(e11) nhóm (C_1-C_6) alkoxy;

(e13) nhóm hydroxy (C_1-C_6) alkyl;

(e14) nhóm dihydroxy (C_1-C_6) alkyl;

(e16) nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_2-C_6) alkenyl;

(e17) nhóm $R^8(R^9)N$ trong đó R^8 và R^9 giống như trên;

(e18) nhóm dioxolanyl;

(e19) nhóm dioxolanyl có, ở trên vòng, 1 hoặc 2 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nhóm cacbonyl và nhóm (C_1-C_6) alkyl;

(e20) nhóm dioxanyl;

(e22) nhóm phenyl;

(e24) nhóm imidazolyl;

(e27) nhóm oxadiazolyl có, ở trên vòng, nhóm (C_1-C_6) alkyl;

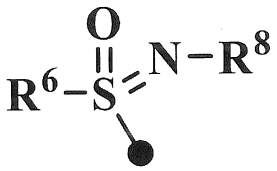
(e28) nhóm $S(O)_pR^6$ trong đó R^6 là nguyên tử hydro, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm phenyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxyphenyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkylphenyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm tri-(C_1-C_6) alkylsilylphenyl (C_1-C_6) alkyl, hoặc nhóm $N(R^8)R^9$ trong đó R^8 và R^9 giống như trên, và p là 0, 1, hoặc 2;

(e29) nhóm $C(O)R^7$ trong đó R^7 là nhóm hydroxyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm phenyl (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_2-C_6) alkynyloxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkoxy, nhóm phenyloxy, nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm thiazolidinyl, hoặc nhóm $N(R^8)R^9$ trong đó R^8 và R^9 giống như trên;

(e31) nhóm N-(C_1-C_6) alkylaminothiocacbonyl;

(e33)

[Công thức hóa học 4]



trong đó R^6 và R^8 giống như trên;

(e35) nhóm (C_1-C_6) alkoxyimino (C_1-C_3) alkyl;

(e36) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxyimino (C_1-C_3) alkyl;

(e37) nhóm hydrazono (C_1-C_3) alkyl;

(e40) nhóm phenyl (C_1-C_6) alkoxyimino (C_1-C_3) alkyl;

(e41) nhóm (C_2-C_6) alkenyloxyimino (C_1-C_3) alkyl;

(e42) nhóm di-(C_1-C_6) alkoxyphosphoryl;

(e43) nhóm di-(C_1-C_6) alkoxyphosphorylamino;

(e44) nhóm hydroxyl; hoặc

(e45) nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkoxy.

[4] Hợp chất hoặc muối của nó theo mục [1] nêu trên, trong đó A^1 là nguyên tử nitơ, và A^2 và A^3 có thể giống nhau hoặc khác nhau và là các CR^5.

[5] Hợp chất hoặc muối của nó theo mục [2] nêu trên, trong đó A^1 là nguyên tử nitơ, và A^2 và A^3 có thể giống nhau hoặc khác nhau và là các CR^5.

[6] Hợp chất hoặc muối của nó theo mục [3] nêu trên, trong đó A^1 là nguyên tử nitơ, và A^2 và A^3 có thể giống nhau hoặc khác nhau và là các CR^5.

[7] Hợp chất hoặc muối của nó theo mục [2] nêu trên, trong đó A^1, A^2, và A^3 có thể giống nhau hoặc khác nhau và là các CR^5.

[8] Hợp chất hoặc muối của nó theo mục [3] nêu trên, trong đó A^1, A^2, và A^3 có thể giống nhau hoặc khác nhau và là các CR^5.

[9] Hợp chất hoặc muối của nó theo mục [3] nêu trên, trong đó A^1 và A^3 có thể giống nhau hoặc khác nhau và là các CR^5, và A^2 là nguyên tử nitơ.

[10] Hợp chất hoặc muối của nó theo mục [3] nêu trên, trong đó A^1 và A^2 có thể giống nhau hoặc khác nhau và là các CR^5, và A^3 là nguyên tử nitơ.

[11] Hợp chất hoặc muối của nó theo mục [3] nêu trên, trong đó A^1 và A^3 là các nguyên tử nitơ, và A^2 là CR^5.

[12] Hợp chất hoặc muối của nó theo mục [2] nêu trên, trong đó A^1 và A^2 là các nguyên tử nitơ, và A^3 là CR^5.

[13] Hợp chất hoặc muối của nó theo mục [3] nêu trên, trong đó A^1 và A^2 là các nguyên tử nitơ, và A^3 là CR^5.

[14] Hợp chất hoặc muối của nó theo mục [3] nêu trên, trong đó A^1 là CR^5, và A^2 và A^3 là các nguyên tử nitơ.

[15] Thuốc diệt cỏ dùng trong nông nghiệp và trồng trọt bao gồm hợp chất hoặc muối của nó theo mục bất kỳ trong số các mục từ [1] đến [14] nêu trên làm thành phần hoạt tính.

[16] Phương pháp sử dụng thuốc diệt cỏ dùng trong nông nghiệp và trồng trọt, bao gồm xử lý cỏ dại, đất, ruộng lúa hoặc môi trường phát triển với một lượng hiệu quả thuốc diệt cỏ dùng trong nông nghiệp và trồng trọt theo mục [15] nêu trên.

[17] Phương pháp kiểm soát cỏ dại, bao gồm xử lý cỏ dại, đất, ruộng lúa hoặc môi trường phát triển với một lượng hiệu quả thuốc diệt cỏ dùng trong nông nghiệp và trồng trọt theo mục [15] nêu trên.

Hiệu quả có lợi của sáng chế

Hợp chất dị vòng ngưng tụ chứa nitơ có nhóm oxim của sáng chế hoặc muối của nó là thuốc diệt cỏ dùng trong nông nghiệp và trồng trọt có hiệu quả cao.

Mô tả chi tiết sáng chế

Trong các định nghĩa về công thức chung (1) biểu diễn hợp chất của sáng chế, "halo" dùng để chỉ "nguyên tử halogen" và là nguyên tử clo, nguyên tử brom, nguyên tử iod, hoặc nguyên tử flo.

"Nhóm (C_1-C_6) alkyl" dùng để chỉ nhóm alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon, ví dụ, nhóm metyl, nhóm etyl, nhóm n-propyl, nhóm isopropyl, nhóm n-butyl, nhóm isobutyl, nhóm sec-butyl, nhóm tert-butyl, nhóm n-pentyl, nhóm isopentyl, nhóm tert-pentyl, nhóm neopentyl, nhóm 2,3-dimetylpropyl, nhóm 1-etylpropyl, nhóm 1-metylbutyl, nhóm 2-metylbutyl, nhóm n-hexyl, nhóm isohexyl, nhóm 2-hexyl, nhóm 3-hexyl, nhóm 2-metylpentyl, nhóm 3-metylpentyl, nhóm 1,1,2-trimetyl propyl, nhóm 3,3-dimetylbutyl hoặc tương tự.

"Nhóm (C_2-C_6) alkenyl" dùng để chỉ nhóm alkenyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh từ 2 đến 6 nguyên tử cacbon, ví dụ, nhóm vinyl, nhóm allyl, nhóm isopropenyl, nhóm 1-butenyl, nhóm 2-butenyl, nhóm 2-metyl-2-propenyl, nhóm 1-metyl-2-propenyl, nhóm 2-metyl-1-propenyl, nhóm pentenyl, nhóm 1-hexenyl, nhóm 3,3-dimetyl-1-butenyl hoặc tương tự. "Nhóm (C_2-C_6) alkynyl" dùng để chỉ nhóm alkynyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh từ 2 đến 6 nguyên tử cacbon, ví dụ, nhóm etynyl, nhóm 1-propynyl, nhóm 2-propynyl, nhóm 1-butynyl, nhóm 2-butynyl, nhóm 3-butynyl, nhóm 3-metyl-1-propynyl, nhóm 2-metyl-3-propynyl, nhóm pentynyl, nhóm 1-hexynyl, nhóm 3-metyl-1-butynyl, nhóm 3,3-dimetyl-1-butynyl hoặc tương tự.

"Nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl" dùng để chỉ nhóm alkyl vòng từ 3 đến 6 nguyên tử cacbon, ví dụ, nhóm xyclopropyl, nhóm xyclobutyl, nhóm xyclopentyl, nhóm xyclohexyl hoặc tương tự. "Nhóm (C_1-C_6) alkoxy" dùng để chỉ nhóm alkoxy mạch thẳng hoặc mạch nhánh từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon, ví dụ, nhóm metoxy, nhóm etoxy, nhóm n-propoxy, nhóm isopropoxy, nhóm n-butoxy, nhóm sec-butoxy, nhóm tert-butoxy, nhóm n-pentyloxy, nhóm isopentyloxy, nhóm tert-pentyloxy, nhóm neopentyloxy, nhóm 2,3-dimetylpropyloxy, nhóm 1-etylpropyloxy, nhóm 1-metylbutyloxy, nhóm n-hexyloxy, nhóm isohexyloxy, nhóm 1,1,2-trimetylpropyloxy hoặc tương tự. "Nhóm (C_2-C_6) alkenyloxy" dùng để chỉ nhóm alkenyloxy mạch thẳng hoặc mạch nhánh từ 2 đến 6 nguyên tử cacbon, ví dụ, nhóm propenyloxy, nhóm butenyloxy, nhóm pentenyloxy, nhóm hexenyloxy hoặc tương tự. "Nhóm (C_2-C_6) alkynyloxy" dùng để chỉ nhóm alkynyloxy mạch thẳng hoặc mạch nhánh từ 2 đến 6 nguyên tử cacbon, ví dụ, nhóm propynyloxy, nhóm butynyloxy, nhóm pentynyloxy, nhóm hexynyloxy hoặc tương tự.

"Nhóm (C_1-C_6) alkylthio" dùng để chỉ nhóm alkylthio mạch thẳng hoặc mạch nhánh từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon, ví dụ, nhóm metylthio, nhóm etylthio, nhóm n-propylthio, nhóm isopropylthio, nhóm n-butylthio, nhóm sec-butylthio, nhóm tert-butylthio, nhóm n-pentylthio, nhóm isopentylthio, nhóm tert-pentylthio, nhóm neopentylthio, nhóm 2,3-dimetylpropylthio, nhóm 1-etylpropylthio, nhóm 1-metylbutylthio, nhóm n-hexylthio, nhóm isohexylthio, nhóm 1,1,2-trimetylpropylthio hoặc tương tự.

"Nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl" dùng để chỉ nhóm alkylsulfinyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon, ví dụ, nhóm metylsulfinyl, nhóm etylsulfinyl, nhóm n-propylsulfinyl, nhóm isopropylsulfinyl, nhóm n-butylsulfinyl, nhóm sec-butylsulfinyl, nhóm tert-butylsulfinyl, nhóm n-pentylsulfinyl, nhóm isopentylsulfinyl, nhóm tert-pentylsulfinyl, nhóm neopentylsulfinyl, nhóm 2,3-dimetylpropylsulfinyl, nhóm 1-etylpropylsulfinyl, nhóm 1-metylbutylsulfinyl, nhóm n-hexylsulfinyl, nhóm isohexylsulfinyl, nhóm 1,1,2-trimetylpropylsulfinyl hoặc tương tự.

"Nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl" dùng để chỉ nhóm alkylsulfonyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon, ví dụ, nhóm metylsulfonyl, nhóm etylsulfonyl, nhóm n-propylsulfonyl, nhóm isopropylsulfonyl, nhóm n-butylsulfonyl, nhóm sec-butylsulfonyl, nhóm tert-butylsulfonyl, nhóm n-pentylsulfonyl, nhóm isopentylsulfonyl, nhóm tert-pentylsulfonyl, nhóm neopentylsulfonyl, nhóm 2,3-dimetylpropylsulfonyl, nhóm 1-etylpropylsulfonyl, nhóm 1-metylbutylsulfonyl, nhóm n-hexylsulfonyl, nhóm isohexylsulfonyl, nhóm 1,1,2-trimetylpropylsulfonyl hoặc tương tự.

"Nhóm (C_1-C_6) alkylcacbonyl" dùng để chỉ nhóm alkylcacbonyl từ 2 đến 7 nguyên tử cacbon, ví dụ, nhóm alkylcacbonyl mà trong đó nhóm alkyl là nhóm (C_1-C_6) alkyl như được định nghĩa ở trên, chẳng hạn như nhóm axetyl, nhóm propanoyl, nhóm butanoyl, nhóm 2-metylpropanoyl, nhóm pentanoyl, nhóm 2-metylbutanoyl, nhóm 3-metylbutanoyl, nhóm pivaloyl, nhóm hexanoyl, hoặc tương tự.

"Nhóm (C_1-C_6) alkylcacbonyloxy" dùng để chỉ nhóm alkylcacbonyloxy từ 2 đến 7 nguyên tử cacbon, ví dụ, nhóm alkylcacbonyloxy mà trong đó nhóm alkyl là nhóm (C_1-C_6) alkyl như được định nghĩa ở trên, chẳng hạn như nhóm axetyloxy, nhóm

propanoyloxy, nhóm butanoyloxy, nhóm 2-metylpropanoyloxy, nhóm pentanoyloxy, nhóm 2-metylbutanoyloxy, nhóm 3-metylbutanoyloxy, nhóm pivaloyloxy, nhóm hexanoyloxy, hoặc tương tự.

"Nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyloxy" dùng để chỉ nhóm alkylsulfonyloxy mạch thẳng hoặc mạch nhánh từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon, ví dụ, nhóm metylsulfonyloxy, nhóm etylsulfonyloxy, nhóm n-propylsulfonyloxy, nhóm isopropylsulfonyloxy, nhóm n-butylsulfonyloxy, nhóm sec-butylsulfonyloxy, nhóm tert-butylsulfonyloxy, nhóm n-pentylsulfonyloxy, nhóm isopentylsulfonyloxy, nhóm tert-pentylsulfonyloxy, nhóm neopentylsulfonyloxy, nhóm 2,3-dimetylpropylsulfonyloxy, nhóm 1-etylpropylsulfonyloxy, nhóm 1-metylbutylsulfonyloxy, nhóm n-hexylsulfonyloxy, nhóm isohexylsulfonyloxy, nhóm 1,1,2-trimetylpropylsulfonyloxy hoặc tương tự.

"Nhóm N-(C_1-C_6) alkylcacboxamit" dùng để chỉ nhóm alkylcacboxamit từ 2 đến 7 nguyên tử cacbon mà trong đó nhóm alkyl là nhóm alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon, ví dụ, nhóm N-metylcacboxamit, nhóm N-etylcacboxamit, nhóm N-n-propylcacboxamit, nhóm N-isopropylcacboxamit, nhóm N-n-butylcacboxamit, nhóm N-isobutylcacboxamit, nhóm N-sec-butylcacboxamit, nhóm N-tert-butylcacboxamit, nhóm N-n-pentylcacboxamit, nhóm N-isopentylcacboxamit, nhóm N-tert-pentylcacboxamit, nhóm N-neopentylcacboxamit, nhóm N-n-hexylcacboxamit, nhóm N-isohexylcacboxamit, hoặc tương tự.

"Nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl" dùng để chỉ nhóm alkoxycacbonyl từ 2 đến 7 nguyên tử cacbon, ví dụ, nhóm alkoxycacbonyl mà trong đó nhóm alkoxy là nhóm (C_1-C_6) alkoxy như được định nghĩa ở trên, chẳng hạn như nhóm metoxycacbonyl, nhóm etoxycacbonyl, nhóm n-propoxycacbonyl, nhóm isopropoxycacbonyl, nhóm n-butoxycacbonyl, nhóm isobutoxycacbonyl, nhóm sec-butoxycacbonyl, nhóm tert-butoxycacbonyl, nhóm pentyloxycacbonyl, hoặc tương tự.

"Nhóm N-(C_1-C_6) alkylsulfamoyl" dùng để chỉ nhóm N-alkylsulfamoyl từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon, ví dụ, nhóm N-metylsulfamoyl, nhóm N-etylsulfamoyl, nhóm N-n-propylsulfamoyl, nhóm N-isopropylsulfamoyl, nhóm N-n-butylsulfamoyl, nhóm N-isobutylsulfamoyl, nhóm N-sec-butylsulfamoyl, nhóm N-tert-butylsulfamoyl, nhóm N-n-pentylsulfamoyl, nhóm N-isopentylsulfamoyl, nhóm N-tert-pentylsulfamoyl, nhóm N-neopentylsulfamoyl, nhóm N-(2,3-dimetylpropyl)sulfamoyl, nhóm

N-(1-etylpropyl)sulfamoyl, nhóm N-(1-metylbutyl)sulfamoyl, nhóm N-(2-metylbutyl)sulfamoyl, nhóm N-n-hexylsulfamoyl, nhóm N-isohexylsulfamoyl, nhóm N-(2-hexyl)sulfamoyl, nhóm N-(3-hexyl)sulfamoyl, nhóm N-(2-metylpentyl)sulfamoyl, nhóm N-(3-metylpentyl)sulfamoyl, nhóm N-(1,1,2-trimetylpropyl)sulfamoyl, nhóm N-(3,3-dimetylbutyl)sulfamoyl, hoặc tương tự.

"Nhóm (C_1-C_6) alkylsulfanylcacbonyl" dùng để chỉ nhóm alkylsulfanylcacbonyl từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon, ví dụ, nhóm metylsulfanylcacbonyl, nhóm etylsulfanylcacbonyl, nhóm n-propylsulfanylcacbonyl, nhóm isopropylsulfanylcacbonyl, nhóm n-butylsulfanylcacbonyl, nhóm isobutylsulfanylcacbonyl, nhóm sec-butylsulfanylcacbonyl, nhóm tert-butylsulfanylcacbonyl, nhóm 2,3-dimetylpropylsulfanylcacbonyl, hoặc tương tự.

"Nhóm (C_1-C_6) alkyl", "nhóm (C_2-C_6) alkenyl", "nhóm (C_2-C_6) alkynyl", "nhóm (C_1-C_6) alkoxy", "nhóm (C_1-C_6) alkylthio", "nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl", "nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl", "nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl", "nhóm (C_1-C_6) alkylcacbonyl", "nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl", "nhóm (C_1-C_6) alkylcacbonyloxy", "nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyloxy", v.v. được đề cập ở trên có thể được thế với một hoặc nhiều nguyên tử halogen tại (các) vị trí có thể thế được, và trong trường hợp mà bất kỳ nhóm nào trong số các nhóm được mô tả ở trên được thế với hai hoặc nhiều nguyên tử halogen, các nguyên tử halogen có thể giống nhau hoặc khác nhau.

Các nhóm được đề cập ở trên được thế với một hoặc nhiều nguyên tử halogen được biểu thị là "nhóm halo (C_1-C_6) alkyl", "nhóm halo (C_2-C_6) alkenyl", "nhóm halo (C_2-C_6) alkynyl", "nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy", "nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio", "nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl", "nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl", "nhóm halo (C_3-C_6) xycloalkyl", "nhóm halo (C_1-C_6) alkylcacbonyl", "nhóm halo (C_1-C_6) alkoxycacbonyl", "nhóm halo (C_1-C_6) alkylcacbonyloxy", "nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyloxy" v.v.

Các cách biểu thị "(C_1-C_6)", "(C_2-C_6)", "(C_3-C_6)", v.v. mỗi ký hiệu là phạm vi số lượng nguyên tử cacbon trong mỗi nhóm. Định nghĩa tương tự cũng đúng đối với các nhóm mà trong đó hai hoặc nhiều nhóm được đề cập ở trên được ghép cặp với nhau, và ví dụ, "nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl" nghĩa là nhóm alkoxy mạch thẳng hoặc

mạch nhánh từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon được liên kết với nhóm alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon.

Các ví dụ về các muối của hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1) của sáng chế bao gồm các muối axit vô cơ, chẳng hạn như hydroclorua, sulfat, nitrat và phosphat; các muối axit hữu cơ, chẳng hạn như axetat, fumarat, maleat, oxalat, metansulfonat, benzensulfonat và p-toluensulfonat; và các muối với các bazơ hữu cơ hoặc vô cơ chẳng hạn như ion natri, ion kali, ion canxi và ion trimetylamoni.

Hợp chất dị vòng ngưng tụ chứa nitơ được biểu diễn bằng công thức chung (1) của sáng chế và muối của nó có thể có một hoặc nhiều tâm bất đối xứng trong công thức cấu tạo và có thể tồn tại dưới dạng hai hoặc nhiều loại đồng phân quang học hoặc đồng phân không đối quang. Tất cả các đồng phân quang học và các hỗn hợp của các đồng phân ở bất kỳ tỷ lệ nào cũng được bao gồm trong sáng chế. Ngoài ra, hợp chất dị vòng ngưng tụ chứa nitơ được biểu diễn bằng công thức chung (1) của sáng chế và muối của nó có thể tồn tại dưới dạng hai loại đồng phân hình học do liên kết đôi cacbon-cacbon và liên kết đôi cacbon-nitơ trong công thức cấu tạo. Tất cả các đồng phân hình học và các hỗn hợp của các đồng phân ở bất kỳ tỷ lệ nào cũng được bao gồm trong sáng chế. Nói cách khác, nhóm oxim trong hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1) của sáng chế có thể ở dưới dạng đồng phân E (entgegen), đồng phân Z (zusammen), hoặc hỗn hợp của các đồng phân này.

Các phương án ưu tiên của hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1) của sáng chế được trình bày dưới đây.

R^1 ưu tiên là nhóm trong số (a1), (a2), (a3), (a4), (a5), (a6), (a7), (a8), (a9), (a10), (a11), (a12), (a14), (a15), (a16), (a17), (a18), (a19), (a20), (a21), (a22), (a23), (a24), (a25), (a26), (a27), (a28), (a29), (a30), (a31), (a32), (a33), (a34), (a35), (a36), (a37), (a44), (a45), (a46), (a47), (a50), (a52), (a55), (a56), (a57), (a58), (a59), (a60), (a61), (a62), (a63), (a64), (a65), (a66), (a67), (a68), (a69), hoặc (a70) nêu trên, và ưu tiên hơn là nhóm trong số (a1), (a2), (a3), (a4), (a5), (a6), (a7), (a9), (a10), (a14), (a16), (a17), (a22), (a23), (a24), (a26), (a27), (a28), (a29), (a30), (a31), (a32), (a33), (a34), (a45), (a52), (a55), (a57), (a58), (a59), (a62), (a65), (a67), (a69), hoặc (a70) nêu trên.

m ưu tiên là 0, 1, 2, 3, hoặc 4.

R^2 ưu tiên là nhóm trong số (b1), (b2), (b3), (b4), (b5), (b6), (b7), (b8), (b9), (b10), (b11), (b12), (b13), (b15), (b16), (b18), hoặc (b21) nêu trên, và ưu tiên hơn là nhóm trong số (b1), (b2), (b3), (b5), (b6), hoặc (b9) nêu trên.

R^3 ưu tiên là nhóm trong số (c1), (c2), (c3), (c4), (c5), (c6), (c9), (c12), (c13), (c14), (c15), hoặc (c16) nêu trên, và ưu tiên hơn là nhóm trong số (c1), (c3), (c5), (c6), (c12), (c13), hoặc (c16) nêu trên.

R^4 ưu tiên là nhóm trong số (d1), (d2), (d3), (d4), (d5), (d6), (d7), (d8), (d9), (d10), (d13), (d14), (d15), (d16), (d17), (d18), (d19), (d20), (d22), (d23), (d24), (d25), (d26), (d27), (d30), (d31), hoặc (d32) nêu trên, và ưu tiên hơn là nhóm trong số (d1), (d2), (d3), (d4), (d6), (d9), (d13), (d14), (d15), (d16), (d17), (d18), (d19), (d20), (d22), (d23), (d24), (d30), hoặc (d32) nêu trên.

A^1, A^2, và A^3 đều ưu tiên là CR^5 (trong đó R^5 là nguyên tử hydro, nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, hoặc nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl) hoặc nguyên tử nitơ. Ưu tiên hơn là, A^1, A^2, và A^3 đều là CR^5 (trong đó R^5 là nguyên tử hydro, nguyên tử halogen, nhóm (C_1-C_6) alkyl, hoặc nhóm $R^{10}(R^{11})N$ trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên) hoặc nguyên tử nitơ.

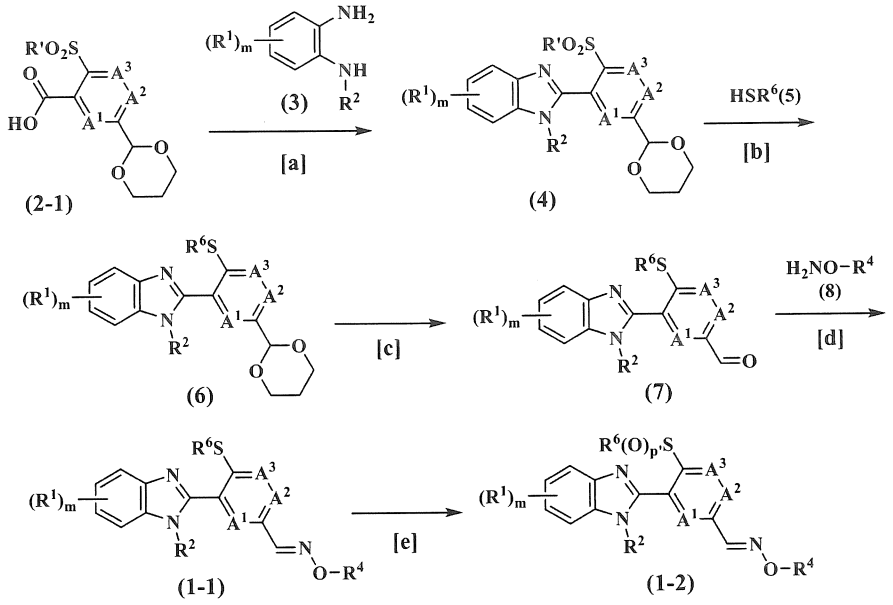
A^1, A^2, và A^3 có thể giống nhau hoặc khác nhau.

Q ưu tiên là nhóm trong số (e1), (e2), (e4), (e5), (e6), (e7), (e8), (e11), (e12), (e13), (e14), (e15), (e16), (e17), (e18), (e19), (e20), (e21), (e22), (e23), (e24), (e25), (e26), (e27), (e28), (e29), (e30), (e31), (e32), (e33), (e34), (e35), (e36), (e37), (e38), (e39), (e40), (e41), (e42), (e43), (e44), (e45), hoặc (e46) nêu trên, và ưu tiên hơn là nhóm trong số (e1), (e2), (e4), (e5), (e6), (e8), (e11), (e13), (e14), (e16), (e17), (e18), (e19), (e20), (e22), (e24), (e27), (e28), (e29), (e31), (e33), (e35), (e36), (e37), (e40), (e41), (e42), (e43), (e44), hoặc (e45) nêu trên.

Các hợp chất của sáng chế có thể được sản xuất theo, ví dụ, các phương pháp sản xuất được mô tả dưới đây, mà là các ví dụ không giới hạn của sáng chế.

Phương pháp sản xuất 1

[Công thức hóa học 5]



Trong công thức này, A^1, A^2, A^3, R^1, R^2, R^4, R^6, và m giống như trên, p' là 1 hoặc 2, và R' là (C_1-C_4) nhóm alkyl chẳng hạn như nhóm metyl hoặc nhóm etyl.

Các hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-1) và (1-2) của sáng chế có thể được sản xuất từ hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (2-1) thông qua các bước [a], [b], [c], [d], và [e] được mô tả dưới đây. Phương pháp sản xuất hợp chất khởi đầu được biểu diễn bằng công thức chung (2-1) sẽ được mô tả sau.

Phương pháp sản xuất tại bước [a]

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (4) có thể được sản xuất bằng cách ngưng tụ hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (2-1) với hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (3) trong sự có mặt của bazơ, tác nhân ngưng tụ, và dung môi trơ và khử nước hợp chất amit thu được trong sự có mặt của axit và dung môi trơ.

Các ví dụ về tác nhân ngưng tụ mà có thể được sử dụng trong phản ứng ngưng tụ này bao gồm các tác nhân phản ứng hoạt hóa axit chẳng hạn như phosgen, phospho triclorua, phospho oxyclorua, oxalyl clorua, và thionyl clorua; các cacbodiimit chẳng hạn như N,N'-dixyclohexylcacbodiimit (DCC) và 1-(3-dimetylaminopropyl)-3-etylcacbodiimit (EDCI); và các tác nhân phản ứng khác chẳng hạn như phospho pentoxit, axit polyphosphoric, N,N'-cacbonyldiimidazol, 2-clopyridin-1-metoiodua (Tác nhân phản ứng Mukaiyama), 2-etoxy-N-etoxycacbonyl-1,2-dihydroquinolin (EEDQ), triphenylphosphin/cacbon tetraclorua, bromtripyrrolidinophosphoni hexaflophosphat (BROP),

O-(1H-benzotriazol-1-yloxy)tris(dimetylamino)phosphoni hexaflophosphat (BOP), N,N,N',N'-bis(tetrametylen)clouroni tetrafloborat, O-(1H-benzotriazol-1-yl)-N,N,N',N'-tetrametyluroni hexaflophosphat (HBTU), O-(1H-benzotriazol-1-yl)-N,N,N',N'-bis(tetrametylen)uroni hexaflophosphat, O-(1H-benzotriazol-1-yl)-N,N,N',N'-tetrametyluroni tetrafloborat (TBTU), O-(1H-benzotriazol-1-yl)-N,N,N',N'-bis(tetrametylen)uroni tetrafloborat, O-(7-azabenzotriazol-1-yl)-N,N,N',N'-tetrametyluroni hexaflophosphat (HATU), 1-hydroxybenzotriazol (HOBt), propylphosphonic anhydrit (T_3P), và 4-(4,6-dimetoxy-1,3,5-triazin-2-yl)-4-metylmorpholinium salt (DMT-MM). Một trong số các tác nhân ngưng tụ này có thể được sử dụng một mình, và đồng thời hai hoặc nhiều trong số chúng có thể được sử dụng dưới dạng hỗn hợp. Lượng tác nhân ngưng tụ sử dụng được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,5 đến 5 lần lượng mol so với hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (2-1).

Các ví dụ về bazơ mà có thể được sử dụng trong phản ứng ngưng tụ này bao gồm các cacbonat chẳng hạn như liti cacbonat, liti hydro cacbonat, natri cacbonat, natri hydro cacbonat, kali cacbonat, kali hydro cacbonat, canxi cacbonat và magie cacbonat; các axetat chẳng hạn như liti axetat, natri axetat và kali axetat; và các bazơ hữu cơ chẳng hạn như pyridin, picolin, lutidin, trietylamin, tributylamin và N,N-diisopropyletylamin. Lượng bazơ sử dụng được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,5 đến 5 lần lượng mol so với hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (2-1). Trong một số trường hợp, bazơ cũng có thể được sử dụng làm dung môi.

Dung môi trơ sử dụng trong phản ứng ngưng tụ này có thể là bất kỳ dung môi nào mà không ức chế phản ứng một cách rõ rệt, và các ví dụ bao gồm các hydrocacbon no mạch thẳng hoặc mạch vòng chẳng hạn như pentan, hexan, và xyclohexan; các ete mạch thẳng hoặc mạch vòng chẳng hạn như dietyl ete, tetrahydrofuran (THF), và dioxan; các hydrocacbon thơm chẳng hạn như benzen, toluen, và xylen; các hydrocacbon được halogen hóa chẳng hạn như metylen clorua, cloroform, và cacbon tetraclorua; các nitril chẳng hạn như axetonitril và isopropylnitril; và các dung môi phân cực chẳng hạn như N,N-dimetylformamit, N,N-dimetylaxetamit, dimetyl sulfoxit, và 1,3-dimetyl-2-imidazolidinon. Một trong số các dung môi trơ này có thể được sử dụng một mình, và đồng thời hai hoặc nhiều trong số chúng có thể được sử dụng dưới

dạng hỗn hợp. Lượng dung môi trơ sử dụng không bị giới hạn cụ thể miễn là nó đủ để hòa tan các tác nhân phản ứng, và được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,5 L đến 100 L so với 1 mol hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (2-1). Trong trường hợp mà bazơ được sử dụng cũng là dung môi, thì không cần phải sử dụng dung môi khác.

Vì phản ứng ngưng tụ này là phản ứng đẳng mol của các hợp chất, nên về cơ bản chúng được sử dụng với lượng đẳng mol, nhưng một trong số chúng có thể được sử dụng với lượng dư. Nhiệt độ phản ứng thường nằm trong phạm vi từ khoảng 0°C đến điểm sôi của dung môi sử dụng. Thời gian phản ứng thay đổi theo quy mô phản ứng, nhiệt độ phản ứng và tương tự và không giống nhau trong mọi trường hợp, nhưng về cơ bản được chọn sao cho phù hợp trong phạm vi từ vài phút đến 48 giờ.

Sau khi phản ứng kết thúc, hợp chất mong muốn được phân lập ra khỏi hỗn hợp sau phản ứng bằng phương pháp thông thường. Khi cần, có thể sử dụng phương pháp kết tinh lại, sắc ký cột, v.v. để tinh chế hợp chất mong muốn. Hỗn hợp sau phản ứng có thể được sử dụng trực tiếp trong phản ứng khử nước tiếp theo mà không cần phân lập hợp chất mong muốn.

Các ví dụ về axit sử dụng trong phản ứng khử nước này bao gồm các axit vô cơ chẳng hạn như axit clohydric, axit sulfuric và axit nitric; các axit hữu cơ chẳng hạn như axit formic, axit axetic, axit propionic, axit trifloaxetic và axit benzoic; các axit sulfonic chẳng hạn như axit metansulfonic, axit triflometansulfonic và axit p-toluensulfonic; và axit phosphoric. Lượng axit sử dụng được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,01 đến 10 lần lượng mol so với hợp chất amit. Trong một số trường hợp, axit cũng có thể được sử dụng làm dung môi.

Dung môi trơ sử dụng trong phản ứng khử nước này có thể là bất kỳ dung môi nào mà không ức chế tiến trình của phản ứng một cách rõ rệt, và các ví dụ bao gồm các hydrocacbon thơm chẳng hạn như benzen, toluen và xylen; các hydrocacbon được halogen hóa chẳng hạn như metylen clorua, cloroform và cacbon tetraclorua; các hydrocacbon thơm được halogen hóa chẳng hạn như clobenzen và diclobenzen; các ete mạch thẳng hoặc mạch vòng chẳng hạn như dietyl ete, metyl tert-butyl ete, dioxan và tetrahydrofuran; các este chẳng hạn như etyl axetat; các amit chẳng hạn như N,N-dimetylformamit và N,N-dimetylaxetamit; các keton chẳng hạn như axeton và

metyl etyl keton; và các dung môi phân cực chẳng hạn như dimetyl sulfoxit và 1,3-dimetyl-2-imidazolidinon. Một trong số các dung môi trơ này có thể được sử dụng một mình, và đồng thời hai hoặc nhiều trong số chúng có thể được sử dụng dưới dạng hỗn hợp. Lượng dung môi trơ sử dụng không bị giới hạn cụ thể miễn là nó đủ để hòa tan các tác nhân phản ứng, và được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,5 L đến 100 L so với 1 mol hợp chất amit thu được từ phản ứng ngưng tụ. Trong trường hợp mà axit được sử dụng cũng là dung môi, thì không cần phải sử dụng dung môi khác.

Nhiệt độ phản ứng có thể nằm trong phạm vi từ nhiệt độ phòng đến điểm sôi của dung môi trơ được sử dụng. Thời gian phản ứng thay đổi theo quy mô phản ứng và nhiệt độ phản ứng, nhưng về cơ bản được chọn sao cho phù hợp trong phạm vi từ vài phút đến 48 giờ.

Sau khi phản ứng kết thúc, hợp chất mong muốn được phân lập ra khỏi hỗn hợp sau phản ứng bằng phương pháp thông thường. Khi cần, có thể sử dụng phương pháp kết tinh lại, sắc ký cột, v.v. để tinh chế hợp chất mong muốn. Hỗn hợp sau phản ứng có thể được sử dụng trực tiếp trong bước tiếp theo mà không cần phân lập hợp chất mong muốn.

Phương pháp sản xuất tại bước [b]

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (6) có thể được sản xuất bằng cho phản ứng hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (4) với hợp chất thiol được biểu diễn bằng công thức chung HSR^6 (5) trong sự có mặt của bazơ và dung môi trơ.

Các ví dụ về bazơ được sử dụng trong phản ứng này bao gồm bazơ vô cơ chẳng hạn như natri hydroxit, kali hydroxit, natri cacbonat, kali cacbonat, natri hydro cacbonat và kali hydro cacbonat; các axetat chẳng hạn như natri axetat và kali axetat; các alkoxit của kim loại kiềm chẳng hạn như kali t-butoxit, natri metoxit và natri etoxit; các amin bậc ba chẳng hạn như trietylamin, N,N-diisopropyletylamin và 1,8-diazabixyclo[5,4,0]undec-7-en; và các hợp chất thơm chứa nitơ chẳng hạn như pyridin và N,N-dimetyl-4-aminopyridin. Lượng bazơ được sử dụng thường nằm trong phạm vi từ 1 đến 10 lần lượng mol so với hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (4). Trong trường hợp mà muối kiềm của hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (5) được sử dụng, thì không cần phải sử dụng bazơ.

Dung môi trơ được sử dụng trong phản ứng này có thể là bất kỳ dung môi nào mà không ức chế tiến trình của phản ứng một cách rõ rệt, và các ví dụ bao gồm các hydrocacbon thơm chẳng hạn như benzen, toluen và xylen; các hydrocacbon được halogen hóa chẳng hạn như metylen clorua, cloroform và cacbon tetraclorua; các hydrocacbon thơm được halogen hóa chẳng hạn như clobenzen và diclobenzen; các ete mạch thẳng hoặc mạch vòng chẳng hạn như dietyl ete, metyl tert-butyl ete, dioxan và tetrahydrofuran; các este chẳng hạn như etyl axetat; các amit chẳng hạn như N,N-dimetylformamit và N,N-dimetylaxetamit; các keton chẳng hạn như axeton và metyl etyl keton; và các dung môi phân cực chẳng hạn như dimetyl sulfoxit và 1,3-dimetyl-2-imidazolidinon. Một trong số các dung môi trơ này có thể được sử dụng một mình, và đồng thời hai hoặc nhiều trong số chúng có thể được sử dụng dưới dạng hỗn hợp. Lượng dung môi trơ sử dụng không bị giới hạn cụ thể miễn là nó đủ để hòa tan các tác nhân phản ứng, và được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,5 L đến 100 L so với 1 mol hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (4).

Vì phản ứng này là phản ứng đẳng mol của các chất phản ứng, hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (4) và hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (5) về cơ bản được sử dụng với lượng đẳng mol, nhưng một trong số chúng có thể được sử dụng với lượng dư. Nhiệt độ phản ứng có thể nằm trong phạm vi từ -20°C đến điểm sôi của dung môi trơ được sử dụng. Thời gian phản ứng thay đổi theo quy mô phản ứng và nhiệt độ phản ứng, nhưng về cơ bản nằm trong phạm vi từ vài phút đến 48 giờ. Sau khi phản ứng kết thúc, hợp chất mong muốn được phân lập ra khỏi hỗn hợp sau phản ứng bằng phương pháp thông thường. Khi cần, có thể sử dụng phương pháp kết tinh lại, sắc ký cột, v.v. để tinh chế hợp chất mong muốn. Hỗn hợp sau phản ứng có thể được sử dụng trực tiếp trong bước tiếp theo mà không cần phân lập hợp chất mong muốn.

Phương pháp sản xuất tại bước [c]

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (7) có thể được sản xuất bằng cách khử bảo vệ hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (6) trong sự có mặt của axit và dung môi trơ.

Các ví dụ về axit sử dụng trong phản ứng này bao gồm các axit vô cơ chẳng hạn như axit clohydric, axit sulfuric và axit nitric; các axit hữu cơ chẳng hạn như axit

formic, axit axetic, axit propionic, axit trifloaxetic và axit benzoic; các axit sulfonic chẳng hạn như axit metansulfonic, axit triflometansulfonic và axit p-toluensulfonic; và axit phosphoric. Lượng axit sử dụng được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,01 đến 10 lần lượng mol so với hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (6). Trong một số trường hợp, axit cũng có thể được sử dụng làm dung môi.

Dung môi trơ được sử dụng trong phản ứng này có thể là bất kỳ dung môi nào mà không ức chế tiến trình của phản ứng một cách rõ rệt, và các ví dụ bao gồm các hydrocacbon thơm chẳng hạn như benzen, toluen và xylen; các hydrocacbon được halogen hóa chẳng hạn như metylen clorua, cloroform và cacbon tetraclorua; các hydrocacbon thơm được halogen hóa chẳng hạn như clobenzen và diclobenzen; các ete mạch thẳng hoặc mạch vòng chẳng hạn như dietyl ete, metyl tert-butyl ete, dioxan và tetrahydrofuran; các este chẳng hạn như etyl axetat; các amit chẳng hạn như N,N-dimetylformamit và N,N-dimetylaxetamit; các keton chẳng hạn như axeton và metyl etyl keton; và các dung môi phân cực chẳng hạn như dimetyl sulfoxit, 1,3-dimetyl-2-imidazolidinon, và nước. Một trong số các dung môi trơ này có thể được sử dụng một mình, và đồng thời hai hoặc nhiều trong số chúng có thể được sử dụng dưới dạng hỗn hợp. Lượng dung môi trơ sử dụng không bị giới hạn cụ thể miễn là nó đủ để hòa tan các tác nhân phản ứng, và được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,5 L đến 100 L so với 1 mol hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (6). Trong trường hợp mà axit được sử dụng cũng là dung môi, thì không cần phải sử dụng dung môi khác.

Nhiệt độ phản ứng có thể nằm trong phạm vi từ nhiệt độ phòng đến điểm sôi của dung môi trơ được sử dụng. Thời gian phản ứng thay đổi theo quy mô phản ứng và nhiệt độ phản ứng, nhưng về cơ bản nằm trong phạm vi từ vài phút đến 48 giờ.

Sau khi phản ứng kết thúc, hợp chất mong muốn được phân lập ra khỏi hỗn hợp sau phản ứng bằng phương pháp thông thường. Khi cần, có thể sử dụng phương pháp kết tinh lại, sắc ký cột, v.v. để tinh chế hợp chất mong muốn. Hỗn hợp sau phản ứng có thể được sử dụng trực tiếp trong bước tiếp theo mà không cần phân lập hợp chất mong muốn.

Phương pháp sản xuất tại bước [d]

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-1) của sáng chế có thể được sản xuất bằng cho phản ứng hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (7) với hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (8) theo phương pháp được mô tả trong tài liệu ORGANIC FUNCTIONAL GROUP PREPARATIONS III 2nd edition ACADEMIC PRESS, INC. Sau khi phản ứng kết thúc, hợp chất mong muốn được phân lập ra khỏi hỗn hợp sau phản ứng bằng phương pháp thông thường. Khi cần, có thể sử dụng phương pháp kết tinh lại, sắc ký cột, v.v. để tinh chế hợp chất mong muốn. Hỗn hợp sau phản ứng có thể được sử dụng trực tiếp trong bước tiếp theo mà không cần phân lập hợp chất mong muốn.

Phương pháp sản xuất tại bước [e]

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-2) có thể được sản xuất bằng cho phản ứng hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-1) với tác nhân oxy hóa trong dung môi trơ.

Các ví dụ về tác nhân oxy hóa được sử dụng trong phản ứng này bao gồm các peoxit chẳng hạn như dung dịch hydro peoxit, axit peoxybenzoic và axit m-clopeoxybenzoic. Lượng tác nhân oxy hóa sử dụng được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 1 đến 5 lần lượng mol so với hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-1).

Dung môi trơ được sử dụng trong phản ứng này có thể là bất kỳ dung môi nào mà không ức chế phản ứng một cách rõ rệt, và các ví dụ bao gồm các ete mạch thẳng hoặc mạch vòng chẳng hạn như dietyl ete, tetrahydrofuran và dioxan; các hydrocacbon thơm chẳng hạn như benzen, toluen và xylen; các hydrocacbon được halogen hóa chẳng hạn như metylen clorua, cloroform và cacbon tetraclorua; các hydrocacbon thơm được halogen hóa chẳng hạn như clobenzen và diclobenzen; các nitril chẳng hạn như axetonitril; các este chẳng hạn như etyl axetat; các axit hữu cơ chẳng hạn như axit formic và axit axetic; và các dung môi phân cực chẳng hạn như N,N-dimetylformamit, N,N-dimetylaxetamit, 1,3-dimetyl-2-imidazolidinon và nước. Một trong số các dung môi trơ này có thể được sử dụng một mình, và đồng thời hai hoặc nhiều trong số chúng có thể được sử dụng dưới dạng hỗn hợp. Lượng dung môi trơ sử dụng không bị giới hạn cụ thể miễn là nó đủ để hòa tan các tác nhân phản ứng, và được chọn một

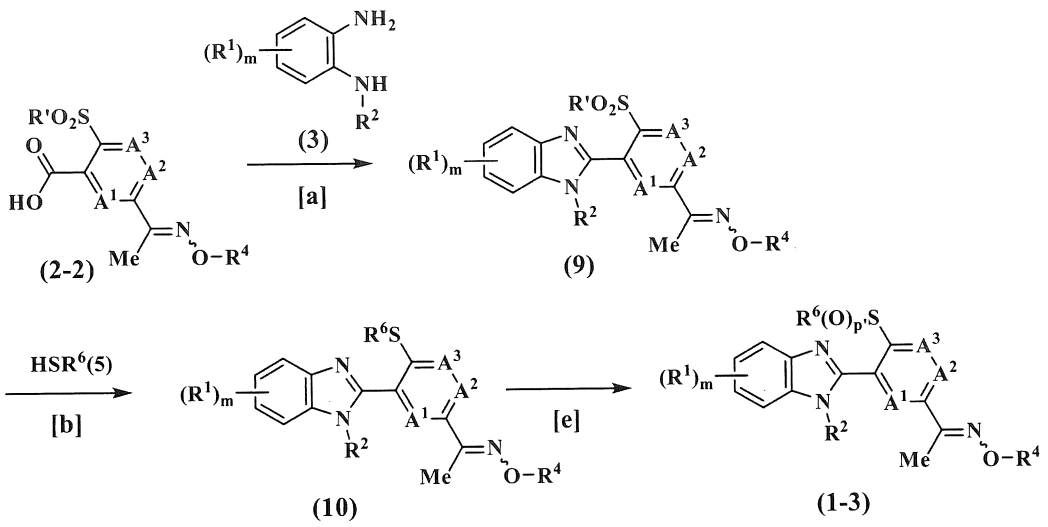
cách phù hợp trong phạm vi từ 0,5 L đến 100 L so với 1 mol hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-1).

Nhiệt độ phản ứng trong phản ứng này được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ -10°C đến nhiệt độ hồi lưu của dung môi trơ được sử dụng. Thời gian phản ứng thay đổi theo quy mô phản ứng, nhiệt độ phản ứng và tương tự và không giống nhau trong mọi trường hợp, nhưng về cơ bản được chọn sao cho phù hợp trong phạm vi từ vài phút đến 48 giờ.

Sau khi phản ứng kết thúc, hợp chất mong muốn được phân lập ra khỏi hỗn hợp sau phản ứng bằng phương pháp thông thường. Khi cần, có thể sử dụng phương pháp kết tinh lại, sắc ký cột, v.v. để tinh chế hợp chất mong muốn.

Phương pháp sản xuất 2

[Công thức hóa học 6]

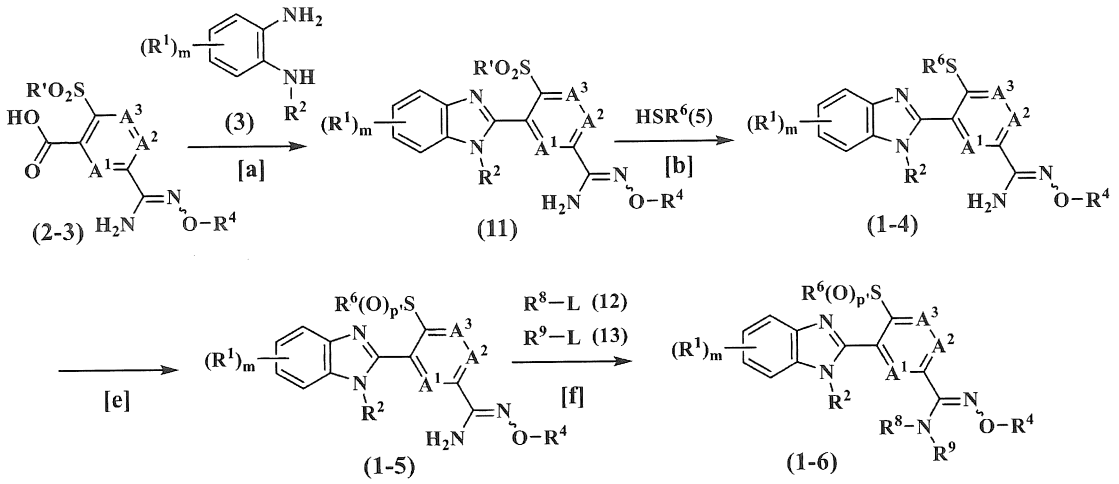


Trong công thức này, A^1, A^2, A^3, R^1, R^2, R^4, R^6, và m giống như trên, p' là 1 hoặc 2, và R' là (C_1-C_4) nhóm alkyl chẳng hạn như nhóm metyl hoặc nhóm etyl.

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-3) của sáng chế có thể được sản xuất từ hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (2-2) thông qua các bước [a], [b], và [e] của phương pháp sản xuất 1 nêu trên. Phương pháp sản xuất hợp chất khởi đầu được biểu diễn bằng công thức chung (2-2) sẽ được mô tả sau.

Phương pháp sản xuất 3

[Công thức hóa học 7]



Trong công thức này, A^1, A^2, A^3, R^1, R^2, R^4, R^6, R^8, R^9, và m giống như trên, p' là 1 hoặc 2, R' là nhóm (C_1-C_4) alkyl chẳng hạn như nhóm metyl hoặc nhóm etyl, và L là nhóm rời đi chẳng hạn như brom hoặc clo.

Các hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-4), (1-5), và (1-6) của sáng chế có thể được sản xuất từ hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (2-3) thông qua bước [f] được mô tả dưới đây và các bước [a], [b], và [e] của phương pháp sản xuất 1 nêu trên. Phương pháp sản xuất hợp chất khởi đầu được biểu diễn bằng công thức chung (2-3) sẽ được mô tả sau.[0001]

Phương pháp sản xuất tại bước [f]

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-6) có thể được sản xuất bằng cho phản ứng hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-5) với hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (12) hoặc (13) trong sự có mặt của bazơ và dung môi trơ.

Các ví dụ về bazơ mà có thể được sử dụng in sáng chế bao gồm alkyl liti các hợp chất chẳng hạn như metyl liti, n-butyl liti, sec-butyl liti, và tert-butyl liti; các hợp chất cơ kim chẳng hạn như liti hexametyldisilazan và natri hexametyldisilazan; các hydroxit chẳng hạn như liti hydroxit, natri hydroxit, kali hydroxit và canxi hydroxit; các cacbonat chẳng hạn như liti cacbonat, liti hydro cacbonat, natri cacbonat, natri hydro cacbonat, kali cacbonat, kali hydro cacbonat, canxi cacbonat và magie cacbonat; các axetat chẳng hạn như liti axetat, natri axetat và kali axetat; các alkoxit chẳng hạn

như natri metoxit, natri etoxit, natri tert-butoxit và kali tert-butoxit; các hydrua kim loại chẳng hạn như natri hydrua và kali hydrua; và các bazơ hữu cơ chẳng hạn như pyridin, picolin, lutidin, trietylamin, tributylamin và N,N-diisopropyletylamin. Lượng bazơ được sử dụng thường nằm trong phạm vi từ 1 đến 10 lần lượng mol so với hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-5).

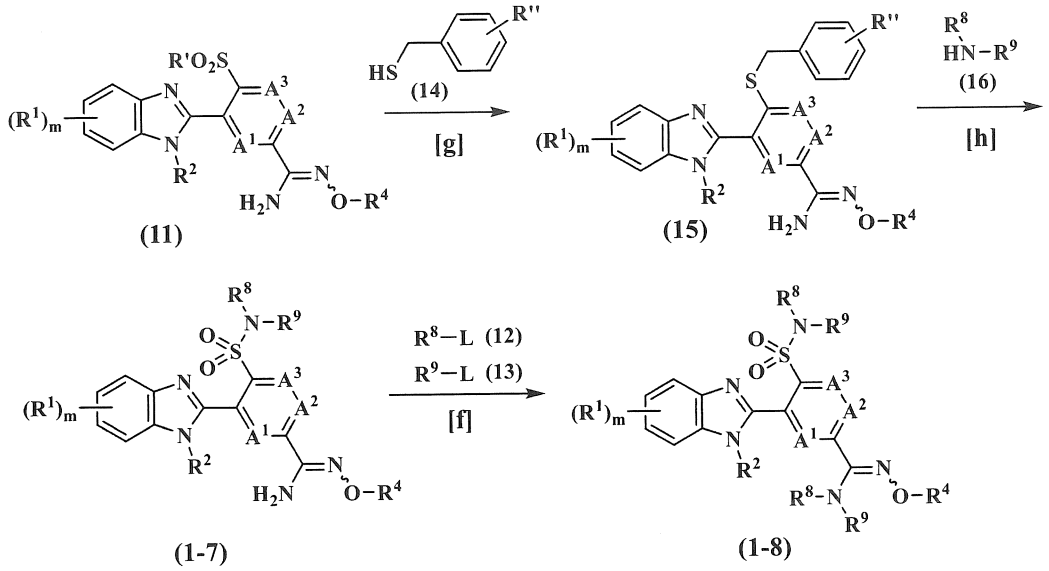
Dung môi trơ được sử dụng trong phản ứng này có thể là bất kỳ dung môi nào mà không ức chế phản ứng một cách rõ rệt, và các ví dụ bao gồm các hydrocacbon no mạch thẳng hoặc mạch vòng chẳng hạn như pentan, hexan, và xyclohexan; các ete mạch thẳng hoặc mạch vòng chẳng hạn như dietyl ete, tetrahydrofuran (THF), và dioxan; và các hydrocacbon thơm chẳng hạn như benzen, toluen, và xylen. Một trong số các dung môi trơ này có thể được sử dụng một mình, và đồng thời hai hoặc nhiều trong số chúng có thể được sử dụng dưới dạng hỗn hợp. Lượng dung môi trơ sử dụng không bị giới hạn cụ thể miễn là nó đủ để hòa tan các tác nhân phản ứng, và được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,5 L đến 100 L so với 1 mol hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-5).

Vì phản ứng này là phản ứng đẳng mol của các hợp chất, nên về cơ bản chúng được sử dụng với lượng đẳng mol, nhưng một trong số chúng có thể được sử dụng với lượng dư. Nhiệt độ phản ứng thường nằm trong phạm vi từ khoảng -78°C đến điểm sôi của dung môi sử dụng. Thời gian phản ứng thay đổi theo quy mô phản ứng, nhiệt độ phản ứng và tương tự và không giống nhau trong mọi trường hợp, nhưng về cơ bản được chọn sao cho phù hợp trong phạm vi từ vài phút đến 48 giờ.

Sau khi phản ứng kết thúc, hợp chất mong muốn được phân lập ra khỏi hỗn hợp sau phản ứng bằng phương pháp thông thường. Khi cần, có thể sử dụng phương pháp kết tinh lại, sắc ký cột, v.v. để tinh chế hợp chất mong muốn.

Phương pháp sản xuất 4

[Công thức hóa học 8]



Trong công thức này, A^1, A^2, A^3, R^1, R^2, R^4, R^8, R^9, và m giống như trên, và R' là nhóm (C_1-C_4) alkyl chẳng hạn như nhóm metyl hoặc nhóm etyl, R'' là nhóm (C_4-C_6) alkyl bậc ba chẳng hạn như nhóm tert-butyl hoặc nhóm tri-(C_1-C_3) alkylsilyl chẳng hạn như trimetylsilyl, nhóm và L là nhóm rời đi chẳng hạn như brom hoặc clo.

Các hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-7) và (1-8) của sáng chế có thể được sản xuất từ hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (11) thông qua các bước [g] và [h] được mô tả dưới đây, và bước [f] của phương pháp sản xuất 3 nêu trên.

Phương pháp sản xuất tại bước [g]

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (15) có thể được sản xuất bằng cho phản ứng hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (11) với hợp chất benzylthiol được biểu diễn bằng công thức chung (14) trong sự có mặt của bazơ và dung môi trơ.

Các ví dụ về bazơ được sử dụng trong phản ứng này bao gồm bazơ vô cơ chẳng hạn như natri hydroxit, kali hydroxit, natri cacbonat, kali cacbonat, natri hydro cacbonat và kali hydro cacbonat; các axetat chẳng hạn như natri axetat và kali axetat; các alkoxit của kim loại kiềm chẳng hạn như kali t-butoxit, natri metoxit và natri etoxit; các amin bậc ba chẳng hạn như trietylamin, N,N-diisopropyletylamin và 1,8-diazabixyclo[5,4,0]undec-7-en; và các hợp chất thơm chứa nitơ chẳng hạn như pyridin và N,N-dimetyl-4-aminopyridin. Lượng bazơ được sử dụng thường nằm trong phạm vi từ 1 đến 10 lần lượng mol so với hợp chất được biểu diễn bằng công thức

chung (11). Trong trường hợp mà muối kiềm của hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (14) được sử dụng, thì không cần phải sử dụng bazơ.

Dung môi trơ được sử dụng trong phản ứng này có thể là bất kỳ dung môi nào mà không ức chế tiến trình của phản ứng một cách rõ rệt, và các ví dụ bao gồm các hydrocacbon thơm chẳng hạn như benzen, toluen và xylen; các hydrocacbon được halogen hóa chẳng hạn như metylen clorua, cloroform và cacbon tetraclorua; các hydrocacbon thơm được halogen hóa chẳng hạn như clobenzen và diclobenzen; các ete mạch thẳng hoặc mạch vòng chẳng hạn như dietyl ete, metyl tert-butyl ete, dioxan và tetrahydrofuran; các este chẳng hạn như etyl axetat; các amit chẳng hạn như N,N-dimetylformamit và N,N-dimetylaxetamit; các keton chẳng hạn như axeton và metyl etyl keton; và các dung môi phân cực chẳng hạn như dimetyl sulfoxit, 1,3-dimetyl-2-imidazolidinon, và nước. Một trong số các dung môi trơ này có thể được sử dụng một mình, và đồng thời hai hoặc nhiều trong số chúng có thể được sử dụng dưới dạng hỗn hợp. Lượng dung môi trơ sử dụng không bị giới hạn cụ thể miễn là nó đủ để hòa tan các tác nhân phản ứng, và được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,5 L đến 100 L so với 1 mol hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (11).

Vì phản ứng này là phản ứng đẳng mol của các hợp chất, hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (11) và hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (14) về cơ bản được sử dụng với lượng đẳng mol, nhưng một trong số chúng có thể được sử dụng với lượng dư. Nhiệt độ phản ứng có thể nằm trong phạm vi từ -20°C đến điểm sôi của dung môi trơ được sử dụng. Thời gian phản ứng thay đổi theo quy mô phản ứng và nhiệt độ phản ứng, nhưng về cơ bản nằm trong phạm vi từ vài phút đến 48 giờ.

Sau khi phản ứng kết thúc, hợp chất mong muốn được phân lập ra khỏi hỗn hợp sau phản ứng bằng phương pháp thông thường. Khi cần, có thể sử dụng phương pháp kết tinh lại, sắc ký cột, v.v. để tinh chế hợp chất mong muốn. Hỗn hợp sau phản ứng có thể được sử dụng trực tiếp trong bước tiếp theo mà không cần phân lập hợp chất mong muốn.

Phương pháp sản xuất tại bước [h]

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (15) được phản ứng với tác nhân halogen hóa trong sự có mặt của dung môi trơ để tạo ra hợp chất được closulfonylat hóa. Hợp chất được closulfonylat hóa này sau đó được amin hóa với hợp chất được

biểu diễn bằng công thức chung (16) trong sự có mặt hoặc vắng mặt của dung môi trơ và bazơ để tạo ra hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-7).

Các ví dụ về tác nhân halogen hóa được sử dụng trong phản ứng closulfonylat hóa này bao gồm thionyl clorua, clo, sulfuryl clorua, 1,3-diclo-5,5-dimetylhydantoin, và N-closucxinimit. Lượng tác nhân halogen hóa sử dụng được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,5 đến 5 lần lượng mol so với hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (15).

Dung môi trơ được sử dụng trong phản ứng closulfonylat hóa này có thể là bất kỳ dung môi nào mà không ức chế tiến trình của phản ứng một cách rõ rệt, và các ví dụ bao gồm các hydrocacbon được halogen hóa chẳng hạn như metylen clorua, cloroform, và cacbon tetraclorua; các hydrocacbon thơm được halogen hóa chẳng hạn như clobenzen và diclobenzen; các nitril chẳng hạn như axetonitril và propionitril; các axit hữu cơ chẳng hạn như axit axetic và axit propionic; và nước. Một trong số các dung môi trơ này có thể được sử dụng một mình, và đồng thời hai hoặc nhiều trong số chúng có thể được sử dụng dưới dạng hỗn hợp. Lượng dung môi trơ sử dụng không bị giới hạn cụ thể miễn là nó đủ để hòa tan các tác nhân phản ứng, và được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,5 L đến 100 L so với 1 mol hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (15).

Vì phản ứng closulfonyl này là phản ứng đẳng mol của các chất phản ứng, nên về cơ bản chúng được sử dụng với lượng đẳng mol, nhưng một trong số chúng có thể được sử dụng với lượng dư. Nhiệt độ phản ứng có thể nằm trong phạm vi từ nhiệt độ phòng đến điểm sôi của dung môi trơ được sử dụng. Thời gian phản ứng thay đổi theo quy mô phản ứng và nhiệt độ phản ứng, nhưng về cơ bản nằm trong phạm vi từ vài phút đến 48 giờ.

Sau khi phản ứng kết thúc, khi sản phẩm được closulfonylat hóa ổn định, sản phẩm được phân lập ra khỏi hỗn hợp sau phản ứng bằng phương pháp thông thường. Khi cần, có thể sử dụng phương pháp kết tinh lại, sắc ký cột, v.v. để tinh chế sản phẩm. Khi sản phẩm được closulfonylat hóa không ổn định, hỗn hợp sau phản ứng được sử dụng trực tiếp trong phản ứng tiếp theo mà không cần phải tinh chế.

Các ví dụ về bazơ được sử dụng trong phản ứng amin hóa này bao gồm bazơ vô cơ chẳng hạn như natri hydroxit, kali hydroxit, natri cacbonat, kali cacbonat, natri

hydro cacbonat và kali hydro cacbonat; các axetat chẳng hạn như natri axetat và kali axetat; các alkoxit của kim loại kiềm chẳng hạn như kali t-butoxit, natri metoxit và natri etoxit; các amin bậc ba chẳng hạn như trietylamin, N,N-diisopropyletylamin và 1,8-diazabixyclo[5,4,0]undec-7-en; và các hợp chất thơm chứa nitơ chẳng hạn như pyridin và N,N-dimetyl-4-aminopyridin. Lượng bazơ được sử dụng thường nằm trong phạm vi từ 1 đến 10 lần lượng mol so với hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (15).

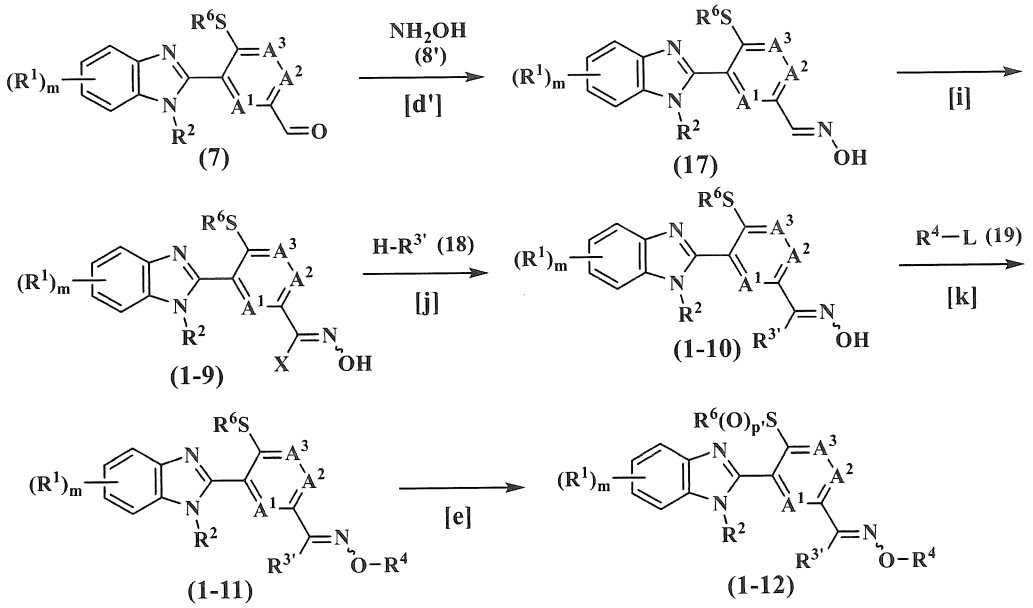
Dung môi trơ được sử dụng trong phản ứng amin hóa này có thể là bất kỳ dung môi nào mà không ức chế tiến trình của phản ứng một cách rõ rệt, và các ví dụ bao gồm các hydrocacbon thơm chẳng hạn như benzen, toluen và xylen; các hydrocacbon được halogen hóa chẳng hạn như metylen clorua, cloroform và cacbon tetraclorua; các hydrocacbon thơm được halogen hóa chẳng hạn như clobenzen và diclobenzen; các ete mạch thẳng hoặc mạch vòng chẳng hạn như dietyl ete, metyl tert-butyl ete, dioxan và tetrahydrofuran; các rượu chẳng hạn như rượu metanol, etanol, propanol, và isopropyl; các amit chẳng hạn như N,N-dimetylformamit và N,N-dimetylaxetamit; và các dung môi phân cực chẳng hạn như dimetyl sulfoxit và 1,3-dimetyl-2-imidazolidinon. Một trong số các dung môi trơ này có thể được sử dụng một mình, và đồng thời hai hoặc nhiều trong số chúng có thể được sử dụng dưới dạng hỗn hợp. Lượng dung môi trơ sử dụng không bị giới hạn cụ thể miễn là nó đủ để hòa tan các tác nhân phản ứng, và được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,5 L đến 100 L so với 1 mol hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (15).

Vì phản ứng amin hóa này là phản ứng đẳng mol của các hợp chất, nên về cơ bản chúng được sử dụng với lượng đẳng mol, nhưng một trong số chúng có thể được sử dụng với lượng dư. Nhiệt độ phản ứng có thể nằm trong phạm vi từ nhiệt độ phòng đến điểm sôi của dung môi trơ được sử dụng. Thời gian phản ứng thay đổi theo quy mô phản ứng và nhiệt độ phản ứng, nhưng về cơ bản nằm trong phạm vi từ vài phút đến 48 giờ.

Sau khi phản ứng kết thúc, hợp chất mong muốn được phân lập ra khỏi hỗn hợp sau phản ứng bằng phương pháp thông thường. Khi cần, có thể sử dụng phương pháp kết tinh lại, sắc ký cột, v.v. để tinh chế hợp chất mong muốn.

Phương pháp sản xuất 5

[Công thức hóa học 9]



Trong công thức này, A^1, A^2, A^3, R^1, R^2, R^4, R^6, và m là như nêu trên, p' là 1 hoặc 2, $R^{3'}$ là nhóm (C_1-C_6) alkoxy hoặc nhóm $R^8(R^9)N$ trong đó R^8 và R^9 giống như trên, X là nguyên tử halogen chẳng hạn như flo, clo, brom, hoặc iod, và L là nhóm rời đi chẳng hạn như brom hoặc clo.

Các hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-9), (1-10), (1-11), và (1-12) của sáng chế có thể được sản xuất từ hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (7) thông qua các bước [d'], [i], [j], và [k] được mô tả dưới đây và bước [e] của phương pháp sản xuất 1 nêu trên.

Phương pháp sản xuất tại bước [d']

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (17) của sáng chế có thể được sản xuất bằng cho phản ứng hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (7) với hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (8') theo phương pháp được mô tả trong tài liệu ORGANIC FUNCTIONAL GROUP PREPARATIONS III 2nd edition ACADEMIC PRESS, INC. Sau khi phản ứng kết thúc, hợp chất mong muốn được phân lập ra khỏi hỗn hợp sau phản ứng bằng phương pháp thông thường. Khi cần, có thể sử dụng phương pháp kết tinh lại, sắc ký cột, v.v. để tinh chế hợp chất mong muốn. Hỗn hợp sau phản ứng có thể được sử dụng trực tiếp trong bước tiếp theo mà không cần phân lập hợp chất mong muốn.

Phương pháp sản xuất tại bước [i]

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-9) có thể được sản xuất bằng cho phản ứng hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (17) với tác nhân halogen hóa trong sự có mặt hoặc vắng mặt của dung môi trơ và bazơ.

Dung môi trơ được sử dụng trong phản ứng này có thể là bất kỳ dung môi nào mà không ức chế phản ứng một cách rõ rệt, và các ví dụ bao gồm các rượu chẳng hạn như metanol và etanol; các hydrocacbon thơm chẳng hạn như benzen, toluen, và xylen; các keton chẳng hạn như axeton, metyl etyl keton, và metyl isobutyl keton; các hydrocacbon được halogen hóa chẳng hạn như cloroform và diclometan; các este chẳng hạn như etyl axetat và metyl axetat; các ete mạch thẳng hoặc mạch vòng chẳng hạn như tetrahydrofuran, dietyl ete, metyl t-butyl ete, 1,2-dimetoxyetan, và dioxan; các nitril chẳng hạn như axetonitril; và các dung môi phân cực chẳng hạn như N,N-dimetylformamit, N-metylpyrrolidon, dimetyl sulfoxit, và nước. Một trong số các dung môi trơ này có thể được sử dụng một mình, và đồng thời hai hoặc nhiều trong số chúng có thể được sử dụng dưới dạng hỗn hợp. Lượng dung môi trơ sử dụng không bị giới hạn cụ thể miễn là nó đủ để hòa tan các tác nhân phản ứng, và được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,5 L đến 100 L so với 1 mol hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (17).

Các ví dụ về bazơ mà có thể được sử dụng trong phản ứng này bao gồm các hydrua kim loại kiềm chẳng hạn như natri hydrua; các hydroxit kim loại kiềm chẳng hạn như natri hydroxit và kali hydroxit; các cacbonat kim loại kiềm chẳng hạn như natri cacbonat và kali cacbonat; các muối vô cơ; và các bazơ hữu cơ chẳng hạn như pyridin, DBU (1,8-diazabixyclo[5,4,0]undec-7-en), và trietylamin. Lượng bazơ được sử dụng được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ lượng đẳng mol đến lượng mol dư so với hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (17).

Các ví dụ về tác nhân halogen hóa mà có thể được sử dụng trong phản ứng này bao gồm Các N-halosucxinimit chẳng hạn như N-closucxinimit và N-bromsucxinimit; các muối hypohalogen của kim loại kiềm chẳng hạn như natri hypoclorit; các este của axit hypohalogen chẳng hạn như tert-butyl hypoclorit; các halogen đơn giản chẳng hạn như khí clo; và sulfuryl clorua. Lượng tác nhân halogen hóa sử dụng được chọn một

cách phù hợp trong phạm vi từ lượng đẳng mol đến lượng mol dư so với hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (17).

Nhiệt độ phản ứng được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ -50°C đến điểm sôi của dung môi trơ được sử dụng, và ưu tiên nằm trong phạm vi từ nhiệt độ phòng đến 80°C. Thời gian phản ứng thay đổi theo quy mô phản ứng và nhiệt độ phản ứng, nhưng về cơ bản nằm trong phạm vi từ vài phút đến 48 giờ. Sau khi phản ứng kết thúc, khi hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-9) ổn định, hợp chất được phân lập ra khỏi hỗn hợp sau phản ứng bằng phương pháp thông thường. Khi cần, có thể sử dụng phương pháp kết tinh lại, sắc ký cột, v.v. để tinh chế hợp chất. Hỗn hợp sau phản ứng có thể được sử dụng trực tiếp trong phản ứng tiếp theo mà không cần phân lập hợp chất. Khi hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-9) không ổn định, hỗn hợp sau phản ứng được sử dụng trực tiếp trong phản ứng tiếp theo mà không cần phải tinh chế.

Phương pháp sản xuất tại bước [j]

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-10) có thể được sản xuất bằng cho phản ứng hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-9) với hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (18) trong sự có mặt hoặc vắng mặt của dung môi trơ và bazơ.

Các ví dụ về bazơ được sử dụng trong phản ứng này bao gồm bazơ vô cơ chẳng hạn như natri hydroxit, kali hydroxit, natri cacbonat, kali cacbonat, natri hydro cacbonat và kali hydro cacbonat; các axetat chẳng hạn như natri axetat và kali axetat; các alkoxit của kim loại kiềm chẳng hạn như kali t-butoxit, natri metoxit và natri etoxit; các amin bậc ba chẳng hạn như trietylamin, N,N-diisopropyletylamin và 1,8-diazabixyclo[5,4,0]undec-7-en; và các hợp chất thơm chứa nitơ chẳng hạn như pyridin và N,N-dimetyl-4-aminopyridin. Lượng bazơ được sử dụng thường nằm trong phạm vi từ 1 đến 10 lần lượng mol so với hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-9). Trong trường hợp mà muối kiềm của hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (18) được sử dụng, thì không cần phải sử dụng bazơ.

Dung môi trơ được sử dụng trong phản ứng này có thể là bất kỳ dung môi nào mà không ức chế tiến trình của phản ứng một cách rõ rệt, và các ví dụ bao gồm các hydrocacbon thơm chẳng hạn như benzen, toluen và xylen; các hydrocacbon được

halogen hóa chẳng hạn như metylen clorua, cloroform và cacbon tetraclorua; các hydrocacbon thơm được halogen hóa chẳng hạn như clobenzen và diclobenzen; các ete mạch thẳng hoặc mạch vòng chẳng hạn như dietyl ete, metyl tert-butyl ete, dioxan và tetrahydrofuran; các este chẳng hạn như etyl axetat; các amit chẳng hạn như N,N-dimetylformamit và N,N-dimetylaxetamit; các keton chẳng hạn như axeton và metyl etyl keton; và các dung môi phân cực chẳng hạn như dimetyl sulfoxit và 1,3-dimetyl-2-imidazolidinon. Một trong số các dung môi trơ này có thể được sử dụng một mình, và đồng thời hai hoặc nhiều trong số chúng có thể được sử dụng dưới dạng hỗn hợp. Lượng dung môi trơ sử dụng không bị giới hạn cụ thể miễn là nó đủ để hòa tan các tác nhân phản ứng, và được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,5 L đến 100 L so với 1 mol hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-9).

Vì phản ứng này là phản ứng đẳng mol của các hợp chất, hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-9) và hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (18) về cơ bản được sử dụng với lượng đẳng mol, nhưng một trong số chúng có thể được sử dụng với lượng dư. Nhiệt độ phản ứng có thể nằm trong phạm vi từ -20°C đến điểm sôi của dung môi trơ được sử dụng. Thời gian phản ứng thay đổi theo quy mô phản ứng và nhiệt độ phản ứng, nhưng về cơ bản nằm trong phạm vi từ vài phút đến 48 giờ.

Sau khi phản ứng kết thúc, hợp chất mong muốn được phân lập ra khỏi hỗn hợp sau phản ứng bằng phương pháp thông thường. Khi cần, có thể sử dụng phương pháp kết tinh lại, sắc ký cột, v.v. để tinh chế hợp chất mong muốn. Hỗn hợp sau phản ứng có thể được sử dụng trực tiếp trong bước tiếp theo mà không cần phân lập hợp chất mong muốn.

Phương pháp sản xuất tại bước [k]

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-11) có thể được sản xuất bằng cho phản ứng hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-10) với công thức chung (19) trong sự có mặt của dung môi trơ và bazơ.

Các ví dụ về bazơ được sử dụng trong phản ứng này bao gồm bazơ vô cơ chẳng hạn như natri hydroxit, kali hydroxit, natri cacbonat, kali cacbonat, natri hydro cacbonat và kali hydro cacbonat; các axetat chẳng hạn như natri axetat và kali axetat; các alkoxit của kim loại kiềm chẳng hạn như kali t-butoxit, natri metoxit và natri etoxit; các amin bậc ba chẳng hạn như trietylamin, N,N-diisopropyletylamin và

1,8-diazabixyclo[5,4,0]undec-7-en; và các hợp chất thơm chứa nitơ chẳng hạn như pyridin và N,N-dimetyl-4-aminopyridin. Lượng bazơ được sử dụng thường nằm trong phạm vi từ 1 đến 10 lần lượng mol so với hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-10).

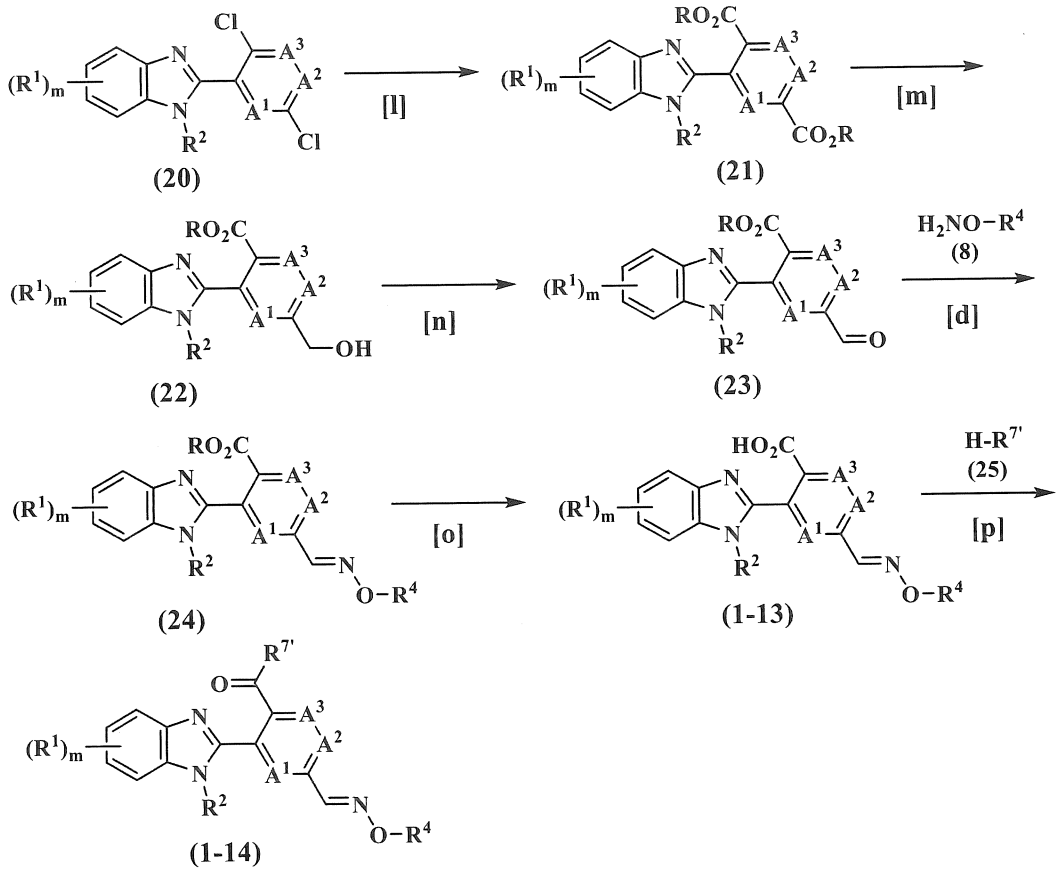
Dung môi trơ được sử dụng trong phản ứng này có thể là bất kỳ dung môi nào mà không ức chế tiến trình của phản ứng một cách rõ rệt, và các ví dụ bao gồm các hydrocacbon thơm chẳng hạn như benzen, toluen và xylen; các hydrocacbon được halogen hóa chẳng hạn như metylen clorua, cloroform và cacbon tetraclorua; các hydrocacbon thơm được halogen hóa chẳng hạn như clobenzen và diclobenzen; các ete mạch thẳng hoặc mạch vòng chẳng hạn như dietyl ete, metyl tert-butyl ete, dioxan và tetrahydrofuran; các este chẳng hạn như etyl axetat; các amit chẳng hạn như N,N-dimetylformamit và N,N-dimetylaxetamit; các keton chẳng hạn như axeton và metyl etyl keton; và các dung môi phân cực chẳng hạn như dimetyl sulfoxit và 1,3-dimetyl-2-imidazolidinon. Một trong số các dung môi trơ này có thể được sử dụng một mình, và đồng thời hai hoặc nhiều trong số chúng có thể được sử dụng dưới dạng hỗn hợp. Lượng dung môi trơ sử dụng không bị giới hạn cụ thể miễn là nó đủ để hòa tan các tác nhân phản ứng, và được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,5 L đến 100 L so với 1 mol hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-10).

Vì phản ứng này là phản ứng đẳng mol của các hợp chất, hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-10) và hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (19) về cơ bản được sử dụng với lượng đẳng mol, nhưng một trong số chúng có thể được sử dụng với lượng dư. Nhiệt độ phản ứng có thể nằm trong phạm vi từ -20°C đến điểm sôi của dung môi trơ được sử dụng. Thời gian phản ứng thay đổi theo quy mô phản ứng và nhiệt độ phản ứng, nhưng về cơ bản nằm trong phạm vi từ vài phút đến 48 giờ.

Sau khi phản ứng kết thúc, hợp chất mong muốn được phân lập ra khỏi hỗn hợp sau phản ứng bằng phương pháp thông thường. Khi cần, có thể sử dụng phương pháp kết tinh lại, sắc ký cột, v.v. để tinh chế hợp chất mong muốn.

Phương pháp sản xuất 6

[Công thức hóa học 10]



Trong công thức này, A^1, A^2, A^3, R^1, R^2, R^4, và m giống như trên, $R^{7'}$ là nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_2-C_6) alkynyloxy, hoặc nhóm $R^8(R^9)N$ trong đó R^8 và R^9 giống như trên, và R là nhóm (C_1-C_4) alkyl chẳng hạn như nhóm metyl hoặc nhóm etyl.

Các hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-13) và (1-14) của sáng chế có thể được sản xuất từ hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (20) thông qua các bước [l], [m], [n], [o], và [p] được mô tả dưới đây và bước [d] của phương pháp sản xuất 1 nêu trên. Hợp chất khởi đầu được biểu diễn bằng công thức chung (20) có thể được sản xuất bằng phương pháp được mô tả trong tài liệu WO 2013/018928.

Phương pháp sản xuất tại bước [l]

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (21), mà có các nhóm este được đưa vào tại Các vị trí C-3 và C-6, có thể được tổng hợp từ hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (20) theo phương pháp được mô tả trong tài liệu JP 2005-272338 (Phản ứng Heck). Sau khi phản ứng kết thúc, hợp chất mong muốn được phân lập ra khỏi hỗn hợp sau phản ứng bằng phương pháp thông thường. Khi cần, có thể sử dụng phương pháp kết tinh lại, sắc ký cột, v.v. để tinh chế hợp chất mong muốn.

Hỗn hợp sau phản ứng có thể được sử dụng trực tiếp trong bước tiếp theo mà không cần phân lập hợp chất mong muốn.

Phương pháp sản xuất tại bước [m]

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (22) có thể được sản xuất bằng cách khử hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (21) với tác nhân khử trong sự có mặt của dung môi trơ.

Các ví dụ về tác nhân khử mà có thể được sử dụng trong phản ứng này bao gồm natri borohydrua, natri xyanoborohydrua, natri bis(2-metoxyetoxy)alumin hydrua, hydro/paladi cacbon, và hydro/Raney niken. Lượng tác nhân khử được sử dụng thường nằm trong phạm vi từ 0,5 đến 10 lần lượng mol so với hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (21).

Dung môi trơ được sử dụng trong phản ứng này có thể là bất kỳ dung môi nào mà không ức chế phản ứng một cách rõ rệt, và các ví dụ bao gồm các rượu chẳng hạn như metanol, etanol, propanol, butanol, và 2-propanol; các ete mạch thẳng hoặc mạch vòng chẳng hạn như dietyl ete, tetrahydrofuran (THF), và dioxan; và axits chẳng hạn như axit axetic và axit propionic. Một trong số các dung môi trơ này có thể được sử dụng một mình, và đồng thời hai hoặc nhiều trong số chúng có thể được sử dụng dưới dạng hỗn hợp. Lượng dung môi trơ sử dụng không bị giới hạn cụ thể miễn là nó đủ để hòa tan các tác nhân phản ứng, và được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,5 L đến 100 L so với 1 mol hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (21).

Nhiệt độ phản ứng trong phản ứng này thường nằm trong phạm vi từ khoảng 0°C đến điểm sôi của dung môi sử dụng. Thời gian phản ứng thay đổi theo quy mô phản ứng, nhiệt độ phản ứng và tương tự và không giống nhau trong mọi trường hợp, nhưng thường được chọn sao cho phù hợp trong phạm vi từ vài phút đến 48 giờ.

Sau khi phản ứng kết thúc, hợp chất mong muốn được phân lập ra khỏi hỗn hợp sau phản ứng bằng phương pháp thông thường. Khi cần, có thể sử dụng phương pháp kết tinh lại, sắc ký cột, v.v. để tinh chế hợp chất mong muốn. Hỗn hợp sau phản ứng có thể được sử dụng trực tiếp trong bước tiếp theo mà không cần phân lập hợp chất mong muốn.

Phương pháp sản xuất tại bước [n]

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (23) có thể được sản xuất bằng cách oxy hóa hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (22) với tác nhân oxy hóa trong sự có mặt của dung môi trơ.

Các ví dụ về tác nhân oxy hóa mà có thể được sử dụng trong phản ứng này bao gồm mangan dioxit, axit cromic, xeri amoni nitrat (CAN), bạc cacbonat, pyridin- axit sulfuric khan, và DMSO (dimetyl sulfoxit) được hoạt hóa. Tác nhân oxy hóa được sử dụng theo các phương pháp thường được sử dụng để chuyển hóa các rượu thành các aldehyt hoặc các keton, mà được mô tả trong các tài liệu đã biết (ví dụ, xem tài liệu "New Lecture of Experimental Chemistry", tập 15 (I), trang 71-84, 120-123, 804-843, 923, 1004-1006 (1977), được biên tập bởi Hiệp hội hóa học Nhật Bản, được xuất bản bởi Maruzen Publishing Co., Ltd.; và tài liệu Chem. Bull. 30(5), trang 1921-1924 (1982)).

Dung môi trơ được sử dụng trong phản ứng này có thể là bất kỳ dung môi nào mà không ức chế tiến trình của phản ứng một cách rõ rệt, và các ví dụ bao gồm các hydrocacbon thơm chẳng hạn như benzen, toluen và xylen; các hydrocacbon được halogen hóa chẳng hạn như metylen clorua, cloroform và cacbon tetraclorua; các hydrocacbon thơm được halogen hóa chẳng hạn như clobenzen và diclobenzen; các ete mạch thẳng hoặc mạch vòng chẳng hạn như dietyl ete, metyl tert-butyl ete, dioxan và tetrahydrofuran; các este chẳng hạn như etyl axetat; các amit chẳng hạn như N,N-dimetylformamit và N,N-dimetylaxetamit; các keton chẳng hạn như axeton và metyl etyl keton; và các dung môi phân cực chẳng hạn như dimetyl sulfoxit, 1,3-dimetyl-2-imidazolidinon, và nước. Một trong số các dung môi trơ này có thể được sử dụng một mình, và đồng thời hai hoặc nhiều trong số chúng có thể được sử dụng dưới dạng hỗn hợp. Lượng dung môi trơ sử dụng không bị giới hạn cụ thể miễn là nó đủ để hòa tan các tác nhân phản ứng, và được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,5 L đến 100 L so với 1 mol hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (22).

Phương pháp sản xuất tại bước [o]

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-13) có thể được sản xuất bằng cách thủy phân hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (24) trong sự có mặt của bazơ, nước và dung môi trơ.

Các ví dụ về bazơ mà có thể được sử dụng trong phản ứng này bao gồm các hydroxit chẳng hạn như liti hydroxit, natri hydroxit, kali hydroxit, và canxi hydroxit, và các bazơ hữu cơ.

Dung môi trơ được sử dụng trong phản ứng này có thể là bất kỳ dung môi nào mà không ức chế phản ứng một cách rõ rệt, và các ví dụ bao gồm các hydrocacbon no mạch thẳng hoặc mạch vòng chẳng hạn như pentan, hexan, và xyclohexan; các ete mạch thẳng hoặc mạch vòng chẳng hạn như dietyl ete, tetrahydrofuran (THF), và dioxan; các hydrocacbon thơm chẳng hạn như benzen, toluen, và xylen; và các dung môi không phân cực khác. Một trong số các dung môi trơ này có thể được sử dụng một mình, và đồng thời hai hoặc nhiều trong số chúng có thể được sử dụng dưới dạng hỗn hợp. Lượng dung môi trơ sử dụng không bị giới hạn cụ thể miễn là nó đủ để hòa tan các tác nhân phản ứng, và được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,5 L đến 100 L so với 1 mol hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (24).

Nhiệt độ phản ứng thường nằm trong phạm vi từ khoảng 0°C đến điểm sôi của dung môi sử dụng. Thời gian phản ứng thay đổi theo quy mô phản ứng, nhiệt độ phản ứng và tương tự và không giống nhau trong mọi trường hợp, nhưng về cơ bản được chọn sao cho phù hợp trong phạm vi từ vài phút đến 48 giờ. Sau khi phản ứng kết thúc, hợp chất mong muốn được phân lập ra khỏi hỗn hợp sau phản ứng bằng phương pháp thông thường. Khi cần, có thể sử dụng phương pháp kết tinh lại, sắc ký cột, v.v. để tinh chế hợp chất mong muốn. Hỗn hợp sau phản ứng có thể được sử dụng trực tiếp trong bước tiếp theo mà không cần phân lập hợp chất mong muốn.

Phương pháp sản xuất tại bước [p]

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-14) có thể được sản xuất bằng cho phản ứng hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-13) và hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (25) với tác nhân ngưng tụ trong sự có mặt của bazơ và dung môi trơ.

Các ví dụ về tác nhân ngưng tụ mà có thể được sử dụng trong phản ứng ngưng tụ này bao gồm các tác nhân phản ứng hoạt hóa axit chẳng hạn như phosgen, phospho triclorua, phospho oxyclorua, oxalyl clorua, và thionyl clorua; các cacbodiimit chẳng hạn như N,N'-dixyclohexylcacbodiimit (DCC) và 1-(3-dimetylaminopropyl)-3-etylcacbodiimit (EDCI); và các tác nhân phản ứng khác

chẳng hạn như phospho pentoxit, axit polyphosphoric, N,N'-cacbonyldiimidazol, 2-clopyridin-1-metoiodua (Tác nhân phản ứng Mukaiyama), 2-etoxy-N-etoxycacbonyl-1,2-dihydroquinolin (EEDQ), triphenylphosphin/cacbon tetraclorua, bromtripyrrolidinophosphoni hexaflophosphat (BROP), O-(1H-benzotriazol-1-yloxy)tris(dimetylamino)phosphoni hexaflophosphat (BOP), N,N,N',N'-bis(tetrametylen)clouroni tetrafloborat, O-(1H-benzotriazol-1-yl)-N,N,N',N'-tetrametyluroni hexaflophosphat (HBTU), O-(1H-benzotriazol-1-yl)-N,N,N',N'-bis(tetrametylen)uroni hexaflophosphat, O-(1H-benzotriazol-1-yl)-N,N,N',N'-tetrametyluroni tetrafloborat (TBTU), O-(1H-benzotriazol-1-yl)-N,N,N',N'-bis(tetrametylen)uroni tetrafloborat, O-(7-azabenzotriazol-1-yl)-N,N,N',N'-tetrametyluroni hexaflophosphat (HATU), 1-hydroxybenzotriazol (HOBt), propylphosphonic anhydrit (T_3P), và muối 4-(4,6-dimetoxy-1,3,5-triazin-2-yl)-4-metylmorpholinium (DMT-MM). Một trong số các tác nhân ngưng tụ này có thể được sử dụng một mình, và đồng thời hai hoặc nhiều trong số chúng có thể được sử dụng dưới dạng hỗn hợp. Lượng tác nhân ngưng tụ sử dụng được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,5 đến 5 lần lượng mol so với hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-13).

Các ví dụ về bazơ mà có thể được sử dụng trong phản ứng ngưng tụ này bao gồm các cacbonat chẳng hạn như liti cacbonat, liti hydro cacbonat, natri cacbonat, natri hydro cacbonat, kali cacbonat, kali hydro cacbonat, canxi cacbonat và magie cacbonat; các axetat chẳng hạn như liti axetat, natri axetat và kali axetat; và các bazơ hữu cơ chẳng hạn như pyridin, picolin, lutidin, trietylamin, tributylamin và N,N-diisopropyletylamin. Lượng bazơ được sử dụng được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,5 đến 5 lần lượng mol so với hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-13). Trong một số trường hợp, bazơ cũng có thể được sử dụng làm dung môi.

Dung môi trơ sử dụng trong phản ứng ngưng tụ này có thể là bất kỳ dung môi nào mà không ức chế phản ứng một cách rõ rệt, và các ví dụ bao gồm các hydrocacbon no mạch thẳng hoặc mạch vòng chẳng hạn như pentan, hexan, và xyclohexan; các ete mạch thẳng hoặc mạch vòng chẳng hạn như dietyl ete, tetrahydrofuran (THF), và dioxan; các hydrocacbon thơm chẳng hạn như benzen, toluen, và xylen; các

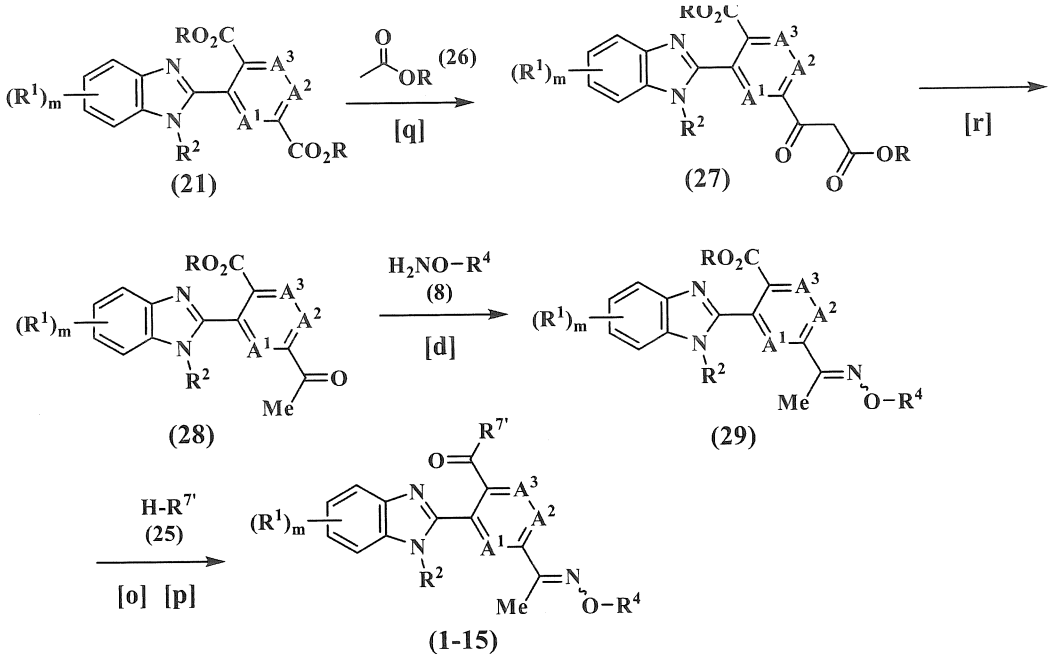
hydrocacbon được halogen hóa chẳng hạn như metylen clorua, cloroform, và cacbon tetraclorua; các nitril chẳng hạn như axetonitril và isopropylnitril; và các dung môi phân cực chẳng hạn như N,N-dimetylformamit, N,N-dimetylaxetamit, dimetyl sulfoxit, và 1,3-dimetyl-2-imidazolidinon. Một trong số các dung môi trơ này có thể được sử dụng một mình, và đồng thời hai hoặc nhiều trong số chúng có thể được sử dụng dưới dạng hỗn hợp. Trong trường hợp mà bazơ được sử dụng cũng là dung môi, thì không cần phải sử dụng dung môi khác. Lượng dung môi trơ sử dụng không bị giới hạn cụ thể miễn là nó đủ để hòa tan các tác nhân phản ứng, và được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,5 L đến 100 L so với 1 mol hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-13).

Vì phản ứng ngưng tụ này là phản ứng đẳng mol của các hợp chất, nên về cơ bản chúng được sử dụng với lượng đẳng mol, nhưng một trong số chúng có thể được sử dụng với lượng dư. Nhiệt độ phản ứng thường nằm trong phạm vi từ khoảng 0°C đến điểm sôi của dung môi sử dụng. Thời gian phản ứng thay đổi theo quy mô phản ứng, nhiệt độ phản ứng và tương tự và không giống nhau trong mọi trường hợp, nhưng về cơ bản được chọn sao cho phù hợp trong phạm vi từ vài phút đến 48 giờ.

Sau khi phản ứng kết thúc, hợp chất mong muốn được phân lập ra khỏi hỗn hợp sau phản ứng bằng phương pháp thông thường. Khi cần, có thể sử dụng phương pháp kết tinh lại, sắc ký cột, v.v. để tinh chế hợp chất mong muốn.

Phương pháp sản xuất 7

[Công thức hóa học 11]



Trong công thức này, A^1, A^2, A^3, R^1, R^2, R^4, và m giống như trên, $R^{7'}$ là nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_2-C_6) alkynyloxy, hoặc nhóm $R^8(R^9)N$ trong đó R^8 và R^9 giống như trên, và R là nhóm (C_1-C_4) alkyl chẳng hạn như nhóm metyl hoặc nhóm etyl.

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-15) của sáng chế có thể được sản xuất từ hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (21) thông qua các bước [q] và [r] được mô tả dưới đây, bước [d] của phương pháp sản xuất 1 nêu trên, và các bước [o] và [p] của phương pháp sản xuất 6 nêu trên.

Phương pháp sản xuất tại bước [q]

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (27) có thể được sản xuất bằng quá trình ngưng tụ Claisen (Org. React. 1942, 1, 266) của este của axit cacboxylic thơm được biểu diễn bằng công thức chung (21) và este của axit axetic được biểu diễn bằng công thức chung (26).

Phương pháp sản xuất tại bước [r]

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (28) có thể được sản xuất bằng cách khử cacboxyl hóa hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (27) trong sự có mặt của axit và dung môi trơ.

Các ví dụ về axit sử dụng trong phản ứng này bao gồm các axit vô cơ chẳng hạn như axit clohydric, axit sulfuric và axit nitric; các axit hữu cơ chẳng hạn như axit

formic, axit axetic, axit propionic, axit trifloaxetic và axit benzoic; các axit sulfonic chẳng hạn như axit metansulfonic, axit triflometansulfonic và axit p-toluensulfonic; và axit phosphoric. Lượng axit sử dụng được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,01 đến 10 lần lượng mol so với hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (27). Trong một số trường hợp, axit cũng có thể được sử dụng làm dung môi.

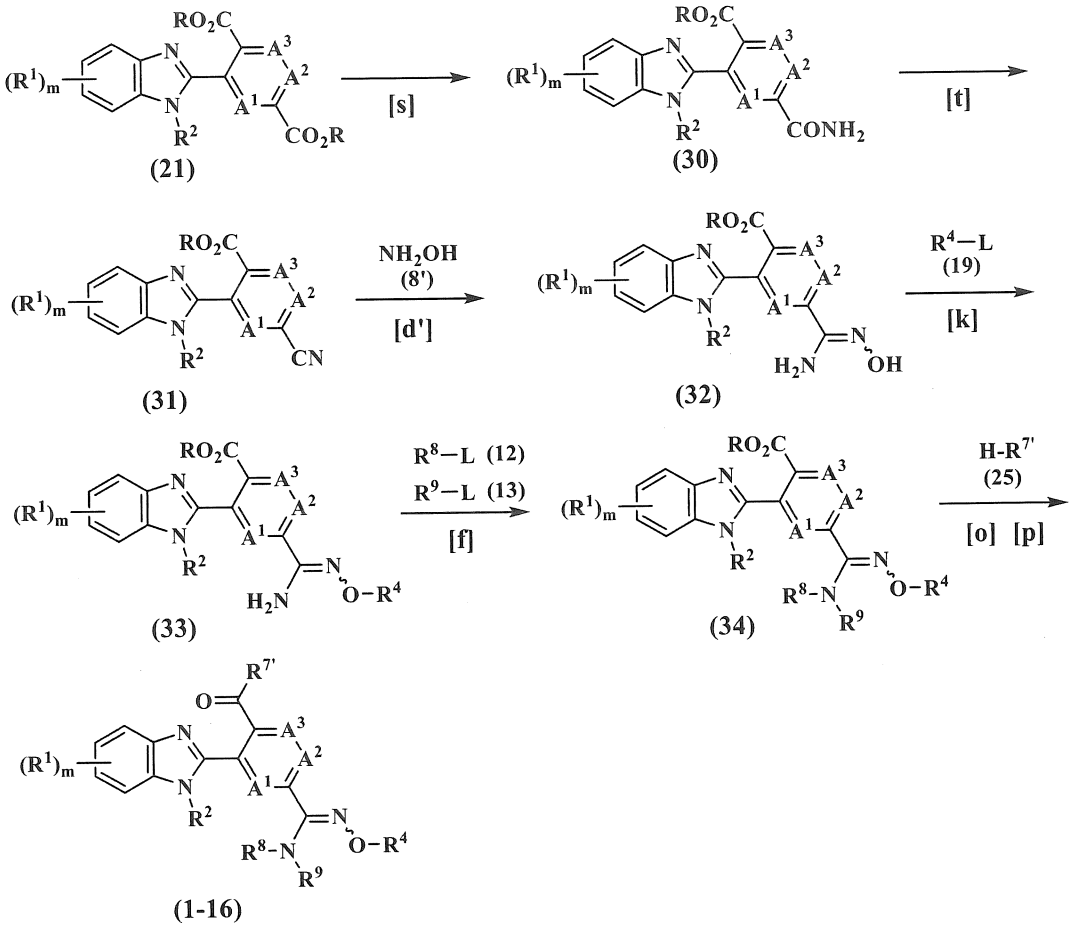
Dung môi trơ được sử dụng trong phản ứng này có thể là bất kỳ dung môi nào mà không ức chế tiến trình của phản ứng một cách rõ rệt, và các ví dụ bao gồm các hydrocacbon no mạch thẳng hoặc mạch vòng chẳng hạn như pentan, hexan, và xyclohexan; các hydrocacbon thơm chẳng hạn như benzen, toluen, và xylen; các hydrocacbon thơm được halogen hóa chẳng hạn như clobenzen và diclobenzen; các ete mạch thẳng hoặc mạch vòng chẳng hạn như dietyl ete, metyl tert-butyl ete, dioxan, và tetrahydrofuran; các nitril chẳng hạn như axetonitril và propionitril; các dung môi phân cực không proton chẳng hạn như N,N-dimetylformamit, N,N-dimetylaxetamit, dimetyl sulfoxit, và 1,3-dimetyl-2-imidazolidinon; các rượu chẳng hạn như metanol, etanol, propanol, butanol, và 2-propanol; và nước. Một trong số các dung môi trơ này có thể được sử dụng một mình, và đồng thời hai hoặc nhiều trong số chúng có thể được sử dụng dưới dạng hỗn hợp. Lượng dung môi trơ sử dụng không bị giới hạn cụ thể miễn là nó đủ để hòa tan các tác nhân phản ứng, và được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,5 L đến 100 L so với 1 mol hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (27).

Nhiệt độ phản ứng trong phản ứng này thường nằm trong phạm vi từ khoảng 0°C đến điểm sôi của dung môi sử dụng. Thời gian phản ứng thay đổi theo quy mô phản ứng, nhiệt độ phản ứng và tương tự và không giống nhau trong mọi trường hợp, nhưng thường được chọn sao cho phù hợp trong phạm vi từ vài phút đến 48 giờ.

Sau khi phản ứng kết thúc, hợp chất mong muốn được phân lập ra khỏi hỗn hợp sau phản ứng bằng phương pháp thông thường. Khi cần, có thể sử dụng phương pháp kết tinh lại, sắc ký cột, v.v. để tinh chế hợp chất mong muốn.

Phương pháp sản xuất 8

[Công thức hóa học 12]



Trong công thức này, A^1, A^2, A^3, R^1, R^2, R^4, R^8, R^9, và m giống như trên, $R^{7'}$ là nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_2-C_6) alkynyloxy, hoặc nhóm $R^8(R^9)N$ trong đó R^8 và R^9 giống như trên, R là nhóm (C_1-C_4) alkyl chẳng hạn như nhóm metyl hoặc nhóm etyl, và L là nhóm rời đi chẳng hạn như brom hoặc clo.

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-16) của sáng chế có thể được sản xuất từ hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (21) thông qua các bước [s] và [t] được mô tả dưới đây, bước [f] của phương pháp sản xuất 3 nêu trên, các bước [d'] và [k] của phương pháp sản xuất 5 nêu trên, và các bước [o] và [p] của phương pháp sản xuất 6 nêu trên.

Phương pháp sản xuất tại bước [s]

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (30) có thể được sản xuất bằng cho phản ứng hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (21) với amoniac trong sự có mặt hoặc vắng mặt của dung môi trơ và bazơ.

Bazơ được sử dụng trong phản ứng này có thể là bazơ vô cơ hoặc bazơ hữu cơ. Các ví dụ về bazơ vô cơ bao gồm các hydroxit kim loại kiềm chẳng hạn như natri hydroxit và kali hydroxit; các hydrua kim loại kiềm chẳng hạn như natri hydrua và kali hydrua; các alkoxit của kim loại kiềm chẳng hạn như natri etoxit và kali t-butoxit; và các cacbonat chẳng hạn như natri cacbonat, kali cacbonat, và natri hydro cacbonat. Các ví dụ về bazơ hữu cơ bao gồm trietylamin, pyridin, và DBU. Lượng bazơ được sử dụng được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,01 đến 10 lần lượng mol so với hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (21).

Dung môi trơ được sử dụng trong phản ứng này có thể là bất kỳ dung môi nào mà không ức chế tiến trình của phản ứng một cách rõ rệt, và các ví dụ bao gồm các hydrocacbon thơm chẳng hạn như benzen, toluen và xylen; các hydrocacbon béo được halogen hóa chẳng hạn như metylen clorua, cloroform và cacbon tetraclorua; các hydrocacbon thơm được halogen hóa chẳng hạn như clobenzen và diclobenzen; các ete mạch thẳng hoặc mạch vòng chẳng hạn như dietyl ete, dioxan và tetrahydrofuran; các este chẳng hạn như etyl axetat; các amit chẳng hạn như N,N-dimetylformamit và N,N-dimetylaxetamit; và các dung môi khác chẳng hạn như dimetyl sulfoxit, 1,3-dimetyl-2-imidazolidinon, axeton, metyl etyl keton, và nước. Một trong số các dung môi trơ này có thể được sử dụng một mình, và đồng thời hai hoặc nhiều trong số chúng có thể được sử dụng dưới dạng hỗn hợp. Lượng dung môi trơ sử dụng không bị giới hạn cụ thể miễn là nó đủ để hòa tan các tác nhân phản ứng, và được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,5 L đến 100 L so với 1 mol hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (21).

Nhiệt độ phản ứng trong phản ứng này thường nằm trong phạm vi từ khoảng 0°C đến điểm sôi của dung môi sử dụng. Thời gian phản ứng thay đổi theo quy mô phản ứng, nhiệt độ phản ứng và tương tự và không giống nhau trong mọi trường hợp, nhưng thường được chọn sao cho phù hợp trong phạm vi từ vài phút đến 48 giờ.

Sau khi phản ứng kết thúc, hợp chất mong muốn được phân lập ra khỏi hỗn hợp sau phản ứng bằng phương pháp thông thường. Khi cần, có thể sử dụng phương pháp kết tinh lại, sắc ký cột, v.v. để tinh chế hợp chất mong muốn. Ngoài ra, sản phẩm thô có thể được đưa vào bước tiếp theo mà không cần phải tinh chế.

Phương pháp sản xuất tại bước [t]

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (31) có thể được sản xuất bằng cho phản ứng hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (30) với tác nhân khử nước trong sự có mặt hoặc vắng mặt của dung môi trơ và bazơ.

Các ví dụ về tác nhân khử nước được sử dụng trong phản ứng này bao gồm trifloaxetic anhydrit, phospho oxyclorua, và phospho pentoxit. Lượng tác nhân khử nước sử dụng được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 1 đến 10 lần lượng mol so với hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (30).

Bazơ được sử dụng trong phản ứng này có thể là bazơ vô cơ hoặc bazơ hữu cơ. Các ví dụ về bazơ vô cơ bao gồm các hydroxit kim loại kiềm chẳng hạn như natri hydroxit và kali hydroxit; các hydrua kim loại kiềm chẳng hạn như natri hydrua và kali hydrua; các alkoxit của kim loại kiềm chẳng hạn như natri etoxit và kali t-butoxit; và các cacbonat chẳng hạn như natri cacbonat, kali cacbonat, và natri hydro cacbonat. Các ví dụ về bazơ hữu cơ bao gồm trietylamin, pyridin, và DBU. Lượng bazơ được sử dụng được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,01 đến 10 lần lượng mol so với hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (30).

Dung môi trơ được sử dụng trong phản ứng này có thể là bất kỳ dung môi nào mà không ức chế tiến trình của phản ứng một cách rõ rệt, và các ví dụ bao gồm các hydrocacbon thơm chẳng hạn như benzen, toluen và xylen; các hydrocacbon béo được halogen hóa chẳng hạn như metylen clorua, cloroform và cacbon tetraclorua; các hydrocacbon thơm được halogen hóa chẳng hạn như clobenzen và diclobenzen; các ete mạch thẳng hoặc mạch vòng chẳng hạn như dietyl ete, dioxan và tetrahydrofuran; các este chẳng hạn như etyl axetat; các amit chẳng hạn như N,N-dimetylformamit và N,N-dimetylaxetamit; và các dung môi khác chẳng hạn như dimetyl sulfoxit, 1,3-dimetyl-2-imidazolidinon, axeton và metyl etyl keton. Một trong số các dung môi trơ này có thể được sử dụng một mình, và đồng thời hai hoặc nhiều trong số chúng có thể được sử dụng dưới dạng hỗn hợp. Lượng dung môi trơ sử dụng không bị giới hạn cụ thể miễn là nó đủ để hòa tan các tác nhân phản ứng, và được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,5 L đến 100 L so với 1 mol hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (30).

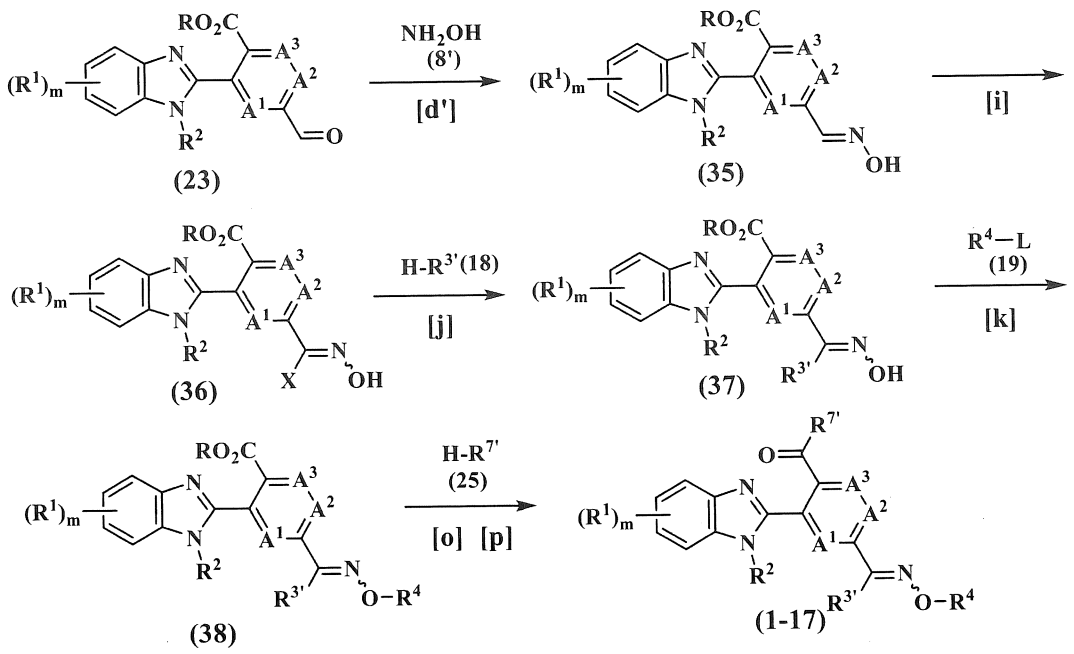
Nhiệt độ phản ứng trong phản ứng này thường nằm trong phạm vi từ khoảng 0°C đến điểm sôi của dung môi sử dụng. Thời gian phản ứng thay đổi theo quy mô phản

ứng, nhiệt độ phản ứng và tương tự và không giống nhau trong mọi trường hợp, nhưng thường được chọn sao cho phù hợp trong phạm vi từ vài phút đến 48 giờ.

Sau khi phản ứng kết thúc, hợp chất mong muốn được phân lập ra khỏi hỗn hợp sau phản ứng bằng phương pháp thông thường. Khi cần, có thể sử dụng phương pháp kết tinh lại, sắc ký cột, v.v. để tinh chế hợp chất mong muốn.

Phương pháp sản xuất 9

[Công thức hóa học 13]

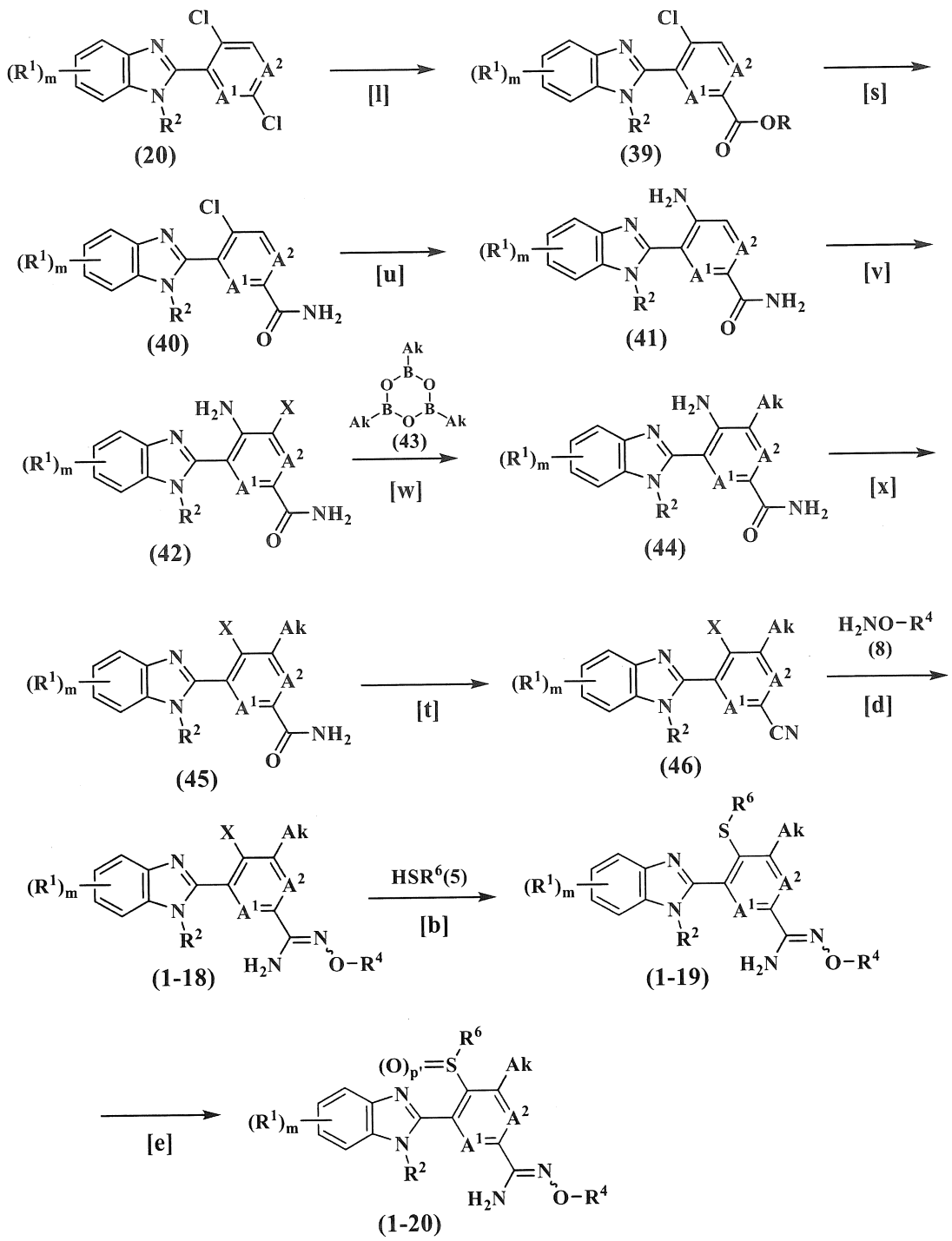


Trong công thức này, A^1, A^2, A^3, R^1, R^2, R^4, và m giống như trên, $R^{3'}$ là nhóm (C_1-C_6) alkoxy hoặc nhóm $R^8(R^9)N$ trong đó R^8 và R^9 giống như trên, $R^{7'}$ là nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_2-C_6) alkynyloxy, hoặc nhóm $R^8(R^9)N$ trong đó R^8 và R^9 giống như trên, R là nhóm (C_1-C_4) alkyl chẳng hạn như nhóm metyl hoặc nhóm etyl, X là nguyên tử halogen chẳng hạn như flo, clo, brom, hoặc iod, và L là nhóm rời đi chẳng hạn như brom hoặc clo.

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-17) của sáng chế có thể được sản xuất từ hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (23) thông qua các bước [d'], [i], [j], và [k] của phương pháp sản xuất 5 nêu trên và các bước [o] và [p] của phương pháp sản xuất 6 nêu trên.

Phương pháp sản xuất 10

[Công thức hóa học 14]



Trong công thức này, A^1, A^2, R^1, R^2, R^4, R^6, và m giống như trên, p' là 1 hoặc 2, R là nhóm (C_1-C_4) alkyl chẳng hạn như nhóm metyl hoặc nhóm etyl, Ak là nhóm (C_1-C_6) alkyl, và X là nguyên tử halogen chẳng hạn như flo, clo, brom, hoặc iod.

Các hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-18), (1-19), và (1-20) của sáng chế có thể được sản xuất từ hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (20) thông qua các bước [u], [v], [w], và [x] được mô tả dưới đây, các bước [b], [d], và [e] của phương pháp sản xuất 1 nêu trên, bước [l] của phương pháp sản xuất 6 nêu trên, và các bước [s] và [t] của phương pháp sản xuất 8 nêu trên.

Phương pháp sản xuất tại bước [u]

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (41) có thể được sản xuất bằng cho phản ứng hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (40) với natri azua trong dung môi trơ và khử hợp chất thu được với tác nhân khử.

Dung môi trơ được sử dụng trong phản ứng này có thể là bất kỳ dung môi nào mà không ức chế tiến trình của phản ứng một cách rõ rệt, và các ví dụ bao gồm các hydrocacbon thơm chẳng hạn như benzen, toluen, và xylen; các hydrocacbon béo được halogen hóa chẳng hạn như metylen clorua, cloroform, và cacbon tetraclorua; các rượu chẳng hạn như metanol và etanol; các hydrocacbon thơm được halogen hóa chẳng hạn như clobenzen và diclobenzen; các ete mạch thẳng hoặc mạch vòng chẳng hạn như dietyl ete, dioxan, và tetrahydrofuran; các amit chẳng hạn như N,N-dimetylformamit và N,N-dimetylaxetamit; và các dung môi khác chẳng hạn như dimetyl sulfoxit, 1,3-dimetyl-2-imidazolidinon, N-metyl-2-pyrrolidon, và nước. Một trong số các dung môi trơ này có thể được sử dụng một mình, và đồng thời hai hoặc nhiều trong số chúng có thể được sử dụng dưới dạng hỗn hợp. Lượng dung môi trơ sử dụng không bị giới hạn cụ thể miễn là nó đủ để hòa tan các tác nhân phản ứng, và được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,5 L đến 100 L so với 1 mol hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (40).

Các ví dụ về tác nhân khử được sử dụng trong phản ứng này bao gồm triphenylphosphin, natri borohydrua, hydro/paladi cacbon, và hydro/Raney niken. Lượng tác nhân khử được sử dụng thường nằm trong phạm vi từ 0,5 đến 10 lần lượng mol so với hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (40).

Nhiệt độ phản ứng trong phản ứng này thường nằm trong phạm vi từ khoảng 0°C đến điểm sôi của dung môi sử dụng. Thời gian phản ứng thay đổi theo quy mô phản ứng, nhiệt độ phản ứng và tương tự và không giống nhau trong mọi trường hợp, nhưng thường được chọn sao cho phù hợp trong phạm vi từ vài phút đến 48 giờ.

Sau khi phản ứng kết thúc, hợp chất mong muốn được phân lập ra khỏi hỗn hợp sau phản ứng bằng phương pháp thông thường. Khi cần, có thể sử dụng phương pháp kết tinh lại, sắc ký cột, v.v. để tinh chế hợp chất mong muốn.

Bước [v]

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (42) có thể được sản xuất bằng cách halogen hóa hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (41) với tác nhân halogen hóa trong sự có mặt của dung môi trơ.

Dung môi trơ được sử dụng trong phản ứng này có thể là bất kỳ dung môi nào mà không ức chế phản ứng một cách rõ rệt, và các ví dụ bao gồm các rượu chẳng hạn như metanol, etanol, propanol, butanol và 2-propanol; các ete mạch thẳng hoặc mạch vòng chẳng hạn như dietyl ete, tetrahydrofuran và dioxan; các hydrocacbon thơm chẳng hạn như benzen, toluen và xylen; các este chẳng hạn như etyl axetat; và các dung môi phân cực chẳng hạn như N,N-dimetylformamit, N,N-dimetylaxetamit, 1,3-dimetyl-2-imidazolidinon, nước và axit axetic. Một trong số các dung môi trơ này có thể được sử dụng một mình, và đồng thời hai hoặc nhiều trong số chúng có thể được sử dụng dưới dạng hỗn hợp. Lượng dung môi trơ sử dụng không bị giới hạn cụ thể miễn là nó đủ để hòa tan các tác nhân phản ứng, và được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,5 L đến 100 L so với 1 mol hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (41).

Các ví dụ về tác nhân halogen hóa bao gồm các phân tử halogen chẳng hạn như phân tử clo, brom, hoặc iod; các sucxinimit được halogen hóa chẳng hạn như NCS và NBS; các hydantoin được halogen hóa chẳng hạn như DIH; và sulfuryl clorua. Lượng tác nhân halogen hóa sử dụng được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,5 đến 10 lần lượng mol so với hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (41).

Nhiệt độ phản ứng trong phản ứng này được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ -30°C đến nhiệt độ hồi lưu của dung môi trơ được sử dụng. Thời gian phản ứng thay đổi theo quy mô phản ứng, nhiệt độ phản ứng và tương tự và không giống nhau trong mọi trường hợp, nhưng về cơ bản được chọn sao cho phù hợp trong phạm vi từ vài phút đến 48 giờ.

Sau khi phản ứng kết thúc, hợp chất mong muốn được phân lập ra khỏi hỗn hợp sau phản ứng bằng phương pháp thông thường. Khi cần, có thể sử dụng phương pháp kết tinh lại, sắc ký cột, v.v. để tinh chế hợp chất mong muốn. Hỗn hợp sau phản ứng có thể được sử dụng trực tiếp trong bước tiếp theo mà không cần phân lập hợp chất mong muốn.

Phương pháp sản xuất tại bước [w]

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (44) có thể được sản xuất bằng cho phản ứng hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (42) với hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (43) trong sự có mặt của xúc tác kim loại, bazơ, và dung môi trơ.

Các ví dụ về xúc tác kim loại mà có thể được sử dụng trong phản ứng này bao gồm xúc tác paladi, xúc tác niken, xúc tác sắt, xúc tác rutheni, xúc tác platin, xúc tác rhodi và xúc tác iridi. Xúc tác kim loại như này có thể được sử dụng ở dưới dạng "kim loại", "kim loại được hỗ trợ", "muối kim loại chẳng hạn như clorua kim loại, bromua kim loại, iodua kim loại, nitrat kim loại, sulfat kim loại, cacbonat kim loại, oxalat kim loại, axetat kim loại và oxit kim loại", hoặc "hợp chất phức chẳng hạn như phức olefin, phức phosphin, phức amin, phức ammin và phức axetylaxetonat". Ưu tiên xúc tác paladi.

Các ví dụ về xúc tác paladi bao gồm các kim loại paladi chẳng hạn như paladi đen và paladi dạng xốp; và các kim loại paladi được hỗ trợ chẳng hạn như paladi/alumina, paladi/cacbon, paladi/silica và paladi/zeolit loại Y. Cũng bao gồm các muối kim loại paladi chẳng hạn như paladi clorua, paladi bromua, paladi iodua và paladi axetat. Các ví dụ khác về xúc tác paladi bao gồm paladi phức các hợp chất chẳng hạn như π-allylpaladi clorua dime, paladi axetylaxetonat, diclobis(axetonitril)paladi, diclobis(benzonitril)paladi, bis(dibenzylidenaxeton)paladi, tris(dibenzylidenaxeton)dipaladi, tris(dibenzylidenaxeton)dipaladi (sản phẩm cộng cloroform), diclodiamin paladi, diclobis(triphenylphosphin)paladi, diclobis(trixyclohexylphosphin)paladi, tetrakis(triphenylphosphin)paladi, diclo[1,2-bis(diphenylphosphino)etan]paladi, diclo[1,3-bis(diphenylphosphino)propan]paladi, diclo[1,4-bis(diphenylphosphino)butan]paladi,

diclo[1,1'-bis(diphenylphosphino)ferroxen]paladi và phức [(diphenylphosphino)ferroxen]diclopaladi-diclometan. Lượng xúc tác kim loại sử dụng được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,001 đến 0,5 lần lượng mol so với hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (42).

Các xúc tác paladi này có thể được sử dụng một mình hoặc kết hợp với phosphin bậc ba. Các ví dụ về phosphin bậc ba mà có thể được sử dụng kết hợp với xúc tác paladi bao gồm triphenylphosphin, trimetylphosphin, trietylphosphin, tributylphosphin, tri(tert-butyl)phosphin, trixyclohexylphosphin, tri-o-tolylphosphin, trioctylphosphin, 9,9-dimetyl-4,5-bis(diphenylphosphino)xanSau đó, 2-(di-tert-butylphosphino)biphenyl, 2-(dixyclohexylphosphino)biphenyl, 1,2-bis(diphenylphosphino)etan, 1,3-bis(diphenylphosphino)propan, 1,4-bis(diphenylphosphino)butan, 1,1'-bis(diphenylphosphino)ferroxen, (R)-(+)-2,2'-bis(diphenylphosphino)-1,1'-binaphtyl, (S)-(-)-2,2'-bis(diphenylphosphino)-1,1'-binaphtyl và (±)-2,2'-bis(diphenylphosphino)-1,1'-binaphtyl. Lượng phosphin bậc ba sử dụng được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,5 đến 10 lần lượng mol so với xúc tác kim loại.

Các ví dụ về bazơ mà có thể được sử dụng trong phản ứng này bao gồm bazơ vô cơ chẳng hạn như natri hydroxit, kali hydroxit, natri cacbonat, kali cacbonat, xesi cacbonat, natri hydro cacbonat và kali hydro cacbonat; các hydrua kim loại kiềm chẳng hạn như natri hydrua và kali hydrua; và các alkoxit chẳng hạn như natri metoxit, natri etoxit và kali tert-butoxit. Lượng bazơ được sử dụng thường nằm trong phạm vi từ khoảng 1 đến 5 lần lượng mol so với hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (42).

Dung môi trơ được sử dụng trong phản ứng này có thể là bất kỳ dung môi nào mà không ức chế phản ứng một cách rõ rệt, và các ví dụ bao gồm các rượu chẳng hạn như metanol, etanol, propanol, butanol và 2-propanol; các ete mạch thẳng hoặc mạch vòng chẳng hạn như dietyl ete, tetrahydrofuran, dioxan và 1,2-dimetoxyetan (DME); các hydrocacbon thơm chẳng hạn như benzen, toluen và xylen; các hydrocacbon được halogen hóa chẳng hạn như metylen clorua, cloroform và cacbon tetraclorua; các hydrocacbon thơm được halogen hóa chẳng hạn như clobenzen và diclobenzen; các

nitril chẳng hạn như axetonitril; các este chẳng hạn như etyl axetat; các dung môi phân cực chẳng hạn như N,N-dimetylformamit, N,N-dimetylaxetamit, dimetyl sulfoxit và 1,3-dimetyl-2-imidazolidinon; và nước. Một trong số các dung môi trơ này có thể được sử dụng một mình, và đồng thời hai hoặc nhiều trong số chúng có thể được sử dụng dưới dạng hỗn hợp. Lượng dung môi trơ sử dụng không bị giới hạn cụ thể miễn là nó đủ để hòa tan các tác nhân phản ứng, và được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,5 L đến 100 L so với 1 mol hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (42).

Vì phản ứng này là phản ứng đẳng mol của các hợp chất, nên về cơ bản chúng được sử dụng với lượng đẳng mol, nhưng một trong số chúng có thể được sử dụng với lượng dư.

Nhiệt độ phản ứng trong phản ứng này thường nằm trong phạm vi từ khoảng 0°C đến điểm sôi của dung môi sử dụng. Thời gian phản ứng thay đổi theo quy mô phản ứng, nhiệt độ phản ứng và tương tự, nhưng về cơ bản được chọn sao cho phù hợp trong phạm vi từ vài phút đến 48 giờ. Phản ứng này có thể được tiến hành dưới khí quyển khí trơ chẳng hạn như khí nitơ và khí agon.

Sau khi phản ứng kết thúc, hợp chất mong muốn được phân lập ra khỏi hỗn hợp sau phản ứng bằng phương pháp thông thường. Khi cần, có thể sử dụng phương pháp kết tinh lại, sắc ký cột, v.v. để tinh chế hợp chất mong muốn. Hỗn hợp sau phản ứng có thể được sử dụng trực tiếp trong bước tiếp theo mà không cần phân lập hợp chất mong muốn.

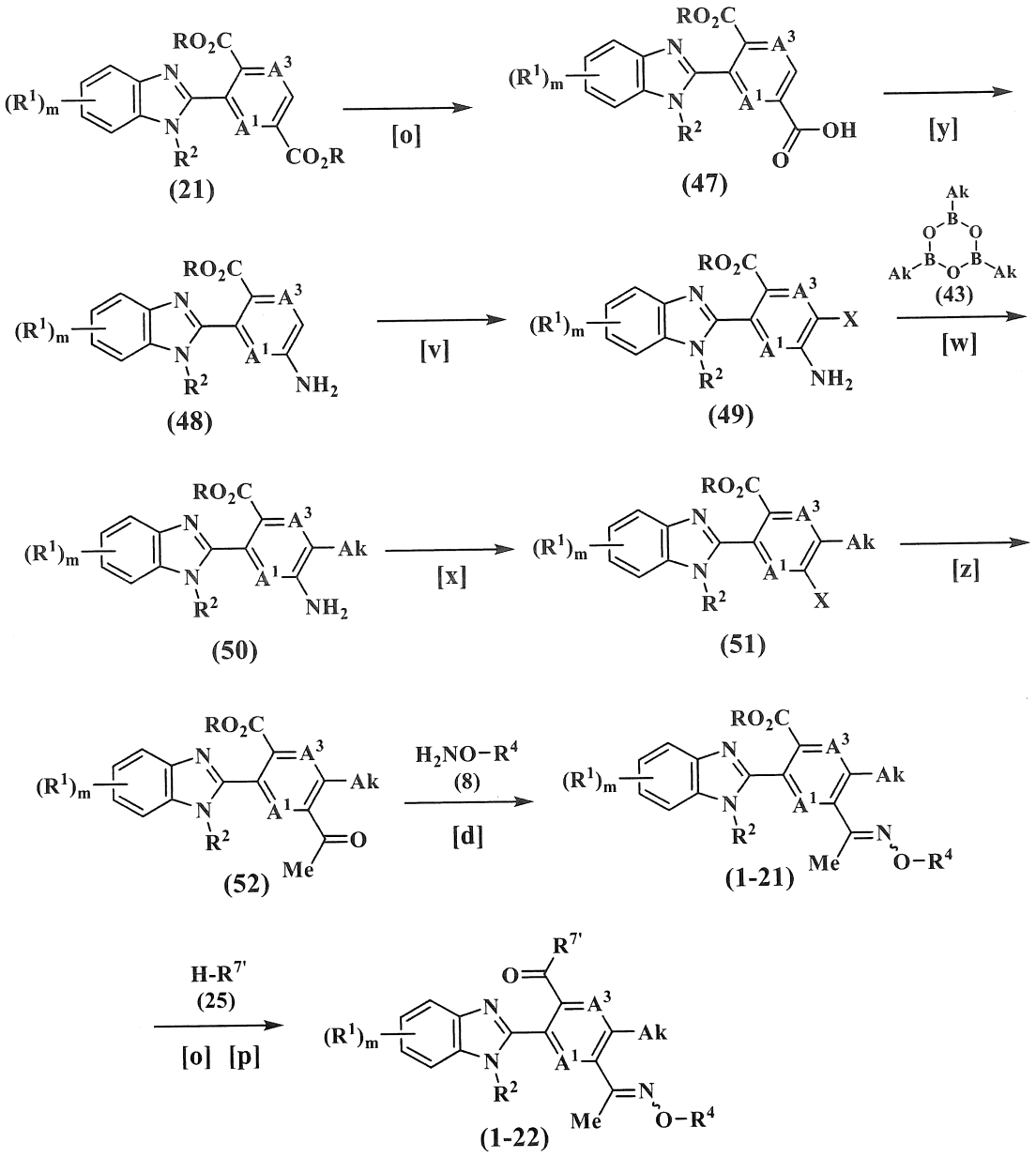
Phương pháp sản xuất tại bước [x]

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (45) có thể được sản xuất bằng cách chuyển đổi nhóm amino của hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (44) thành nguyên tử halogen theo phương pháp được mô tả trong tài liệu Chem. Rev. 1988, 88, 765, nghĩa là, phản ứng Sandmeyer.

Sau khi phản ứng kết thúc, hợp chất mong muốn được phân lập ra khỏi hỗn hợp sau phản ứng bằng phương pháp thông thường. Khi cần, có thể sử dụng phương pháp kết tinh lại, sắc ký cột, v.v. để tinh chế hợp chất mong muốn.

Phương pháp sản xuất 11

[Công thức hóa học 15]



Trong công thức này, A^1, A^3, R^1, R^2, R^4, và m giống như trên, $R^{7'}$ là nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_2-C_6) alkynyloxy, hoặc nhóm $R^8(R^9)N$ trong đó R^8 và R^9 giống như trên, R là nhóm (C_1-C_4) alkyl chẳng hạn như nhóm metyl hoặc nhóm etyl, Ak là nhóm (C_1-C_6) alkyl, và X là nguyên tử halogen chẳng hạn như flo, clo, brom, hoặc iod.

Các hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-21) và (1-22) của sáng chế có thể được sản xuất từ hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (21) thông qua các bước [y] và [z] được mô tả dưới đây, bước [d] của phương pháp sản xuất 1 nêu

trên, các bước [o] và [p] của phương pháp sản xuất 6 nêu trên, và các bước [v], [w], và [x] của phương pháp sản xuất 10 nêu trên.

Phương pháp sản xuất tại bước [y]

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (48) có thể được sản xuất bằng phản ứng tái sắp xếp Curtius, nghĩa là, phản ứng hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (47) với amit của axit diphenylphosphoric trong sự có mặt của rượu butyl bậc ba theo phương pháp được mô tả trong tài liệu J. A. Chem. Soc. 1972, 94, 6203-6205, sau đó xử lý hợp chất thu được trong sự có mặt của axit và dung môi trơ.

Các ví dụ về axit mà có thể được sử dụng trong phản ứng này bao gồm các axit vô cơ chẳng hạn như axit clohydric, axit sulfuric và axit nitric; các axit hữu cơ chẳng hạn như axit formic, axit axetic, axit propionic, axit trifloaxetic và axit benzoic; và các axit sulfonic chẳng hạn như axit metansulfonic và axit triflometansulfonic. Lượng axit sử dụng thường được chọn trong phạm vi từ 1 đến 10 lần lượng mol so với hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (47). Trong một số trường hợp, axit cũng có thể được sử dụng làm dung môi.

Dung môi trơ được sử dụng trong phản ứng này có thể là bất kỳ dung môi nào mà không ức chế tiến trình của phản ứng một cách rõ rệt, và các ví dụ bao gồm các hydrocacbon thơm chẳng hạn như benzen, toluen và xylen; các hydrocacbon được halogen hóa chẳng hạn như metylen clorua, cloroform và cacbon tetraclorua; các hydrocacbon thơm được halogen hóa chẳng hạn như clobenzen và diclobenzen; các ete mạch thẳng hoặc mạch vòng chẳng hạn như dietyl ete, metyl tert-butyl ete, dioxan và tetrahydrofuran; các este chẳng hạn như etyl axetat; các amit chẳng hạn như N,N-dimetylformamit và N,N-dimetylaxetamit; các keton chẳng hạn như axeton và metyl etyl keton; và các dung môi phân cực chẳng hạn như dimetyl sulfoxit và 1,3-dimetyl-2-imidazolidinon. Một trong số các dung môi trơ này có thể được sử dụng một mình, và đồng thời hai hoặc nhiều trong số chúng có thể được sử dụng dưới dạng hỗn hợp. Lượng dung môi trơ sử dụng không bị giới hạn cụ thể miễn là nó đủ để hòa tan các tác nhân phản ứng, và được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,5 L đến 100 L so với 1 mol hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (47).

Nhiệt độ phản ứng thường nằm trong phạm vi từ -10°C đến điểm sôi của dung môi trơ được sử dụng. Thời gian phản ứng thay đổi theo quy mô phản ứng và nhiệt độ phản ứng, nhưng thường nằm trong phạm vi từ vài phút đến 48 giờ.

Sau khi phản ứng kết thúc, hợp chất mong muốn được phân lập ra khỏi hỗn hợp sau phản ứng bằng phương pháp thông thường. Khi cần, có thể sử dụng phương pháp kết tinh lại, sắc ký cột, v.v. để tinh chế hợp chất mong muốn. Hỗn hợp sau phản ứng có thể được sử dụng trực tiếp trong bước tiếp theo mà không cần phân lập hợp chất mong muốn.

Phương pháp sản xuất tại bước [z]

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (52) có thể được sản xuất bằng phản ứng của hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (51) với tributyl(1-etoxyvinyl)tin trong sự có mặt của xúc tác paladi và dung môi trơ, sau đó xử lý axit.

Các ví dụ về xúc tác paladi mà có thể được sử dụng trong phản ứng này bao gồm bis(triphenylphosphin)paladi(II) clorua, paladi(II) axetat, paladi(II) clorua, tetrakis(triphenylphosphin)paladi(0), và bis(tri-t-butylphosphin)paladi(0). Lượng xúc tác paladi sử dụng được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,001 đến 0,5 lần lượng mol so với hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (51).

Dung môi trơ được sử dụng trong phản ứng này có thể là bất kỳ dung môi nào mà không ức chế tiến trình của phản ứng một cách rõ rệt, và các ví dụ bao gồm các hydrocacbon thơm chẳng hạn như benzen, toluen và xylen; các hydrocacbon được halogen hóa chẳng hạn như metylen clorua, cloroform và cacbon tetraclorua; các hydrocacbon thơm được halogen hóa chẳng hạn như clobenzen và diclobenzen; các ete mạch thẳng hoặc mạch vòng chẳng hạn như dietyl ete, metyl tert-butyl ete, dioxan và tetrahydrofuran; các este chẳng hạn như etyl axetat; các amit chẳng hạn như N,N-dimetylformamit và N,N-dimetylaxetamit; các keton chẳng hạn như axeton và metyl etyl keton; các rượu chẳng hạn như metanol, etanol, propanol, butanol, và 2-propanol; và các dung môi phân cực chẳng hạn như dimetyl sulfoxit và 1,3-dimetyl-2-imidazolidinon. Một trong số các dung môi trơ này có thể được sử dụng một mình, và đồng thời hai hoặc nhiều trong số chúng có thể được sử dụng dưới dạng hỗn hợp. Lượng dung môi trơ sử dụng không bị giới hạn cụ thể miễn là nó đủ để hòa

tan các tác nhân phản ứng, và được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,5 L đến 100 L so với 1 mol hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (51).

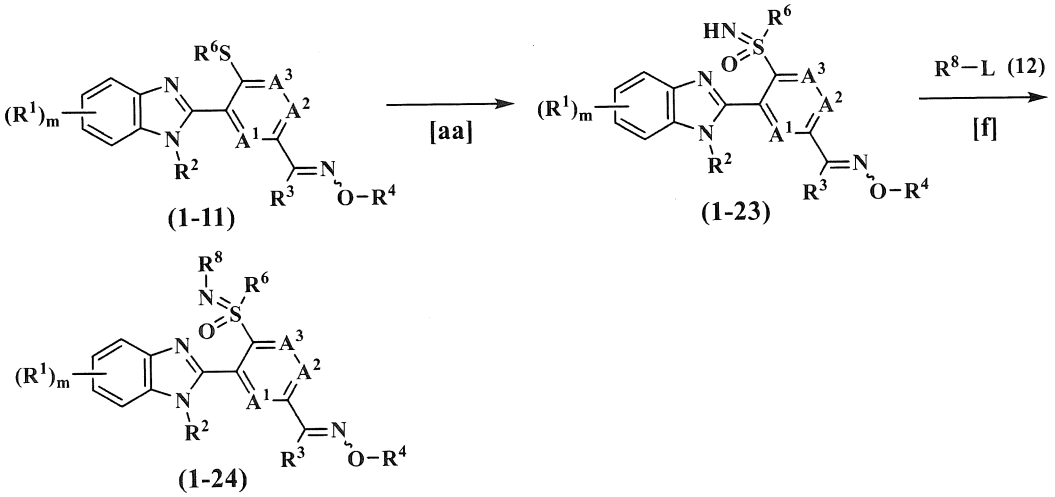
Các ví dụ về axit mà có thể được sử dụng trong phản ứng này bao gồm các axit vô cơ chẳng hạn như axit clohydric, axit sulfuric và axit nitric; các axit hữu cơ chẳng hạn như axit formic, axit axetic, axit propionic, axit trifloaxetic và axit benzoic; và các axit sulfonic chẳng hạn như axit metansulfonic và axit triflometansulfonic. Lượng axit sử dụng thường được chọn sao cho phù hợp trong phạm vi từ 1 đến 10 lần lượng mol so với hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (51).

Nhiệt độ phản ứng thường nằm trong phạm vi từ 0°C đến điểm sôi của dung môi trơ được sử dụng. Thời gian phản ứng thay đổi theo quy mô phản ứng và nhiệt độ phản ứng, nhưng thường nằm trong phạm vi từ vài phút đến 48 giờ.

Sau khi phản ứng kết thúc, hợp chất mong muốn được phân lập ra khỏi hỗn hợp sau phản ứng bằng phương pháp thông thường. Khi cần, có thể sử dụng phương pháp kết tinh lại, sắc ký cột, v.v. để tinh chế hợp chất mong muốn. Hỗn hợp sau phản ứng có thể được sử dụng trực tiếp trong bước tiếp theo mà không cần phân lập hợp chất mong muốn.

Phương pháp sản xuất 12

[Công thức hóa học 16]



Trong công thức này, A^1, A^2, A^3, R^1, R^2, R^3, R^4, R^6, R^8, và m giống như trên, và L là nhóm rời đi chẳng hạn như brom hoặc clo.

Các hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-23) và (1-24) của sáng chế có thể được sản xuất từ hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-11) thông qua bước [aa] được mô tả dưới đây và bước [f] của phương pháp sản xuất 3 nêu trên.

Phương pháp sản xuất tại bước [aa]

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-23) có thể được sản xuất bằng cho phản ứng hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-11) với nguồn nitơ trong sự có mặt của dung môi trơ và tác nhân phản ứng iod hóa trị cao.

Các ví dụ về nguồn nitơ mà có thể được sử dụng trong phản ứng này bao gồm amoniac, amoni cacbamat, và amoni cacbonat. Lượng nguồn nitơ sử dụng thường được chọn sao cho phù hợp trong phạm vi từ 1 đến 10 lần lượng mol so với hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-11).

Các ví dụ về tác nhân phản ứng iod hóa trị cao mà có thể được sử dụng trong phản ứng này bao gồm diaxetoxyiodbenzen. Lượng tác nhân phản ứng iod hóa trị cao sử dụng thường được chọn sao cho phù hợp trong phạm vi từ 1 đến 10 lần lượng mol so với hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-11).

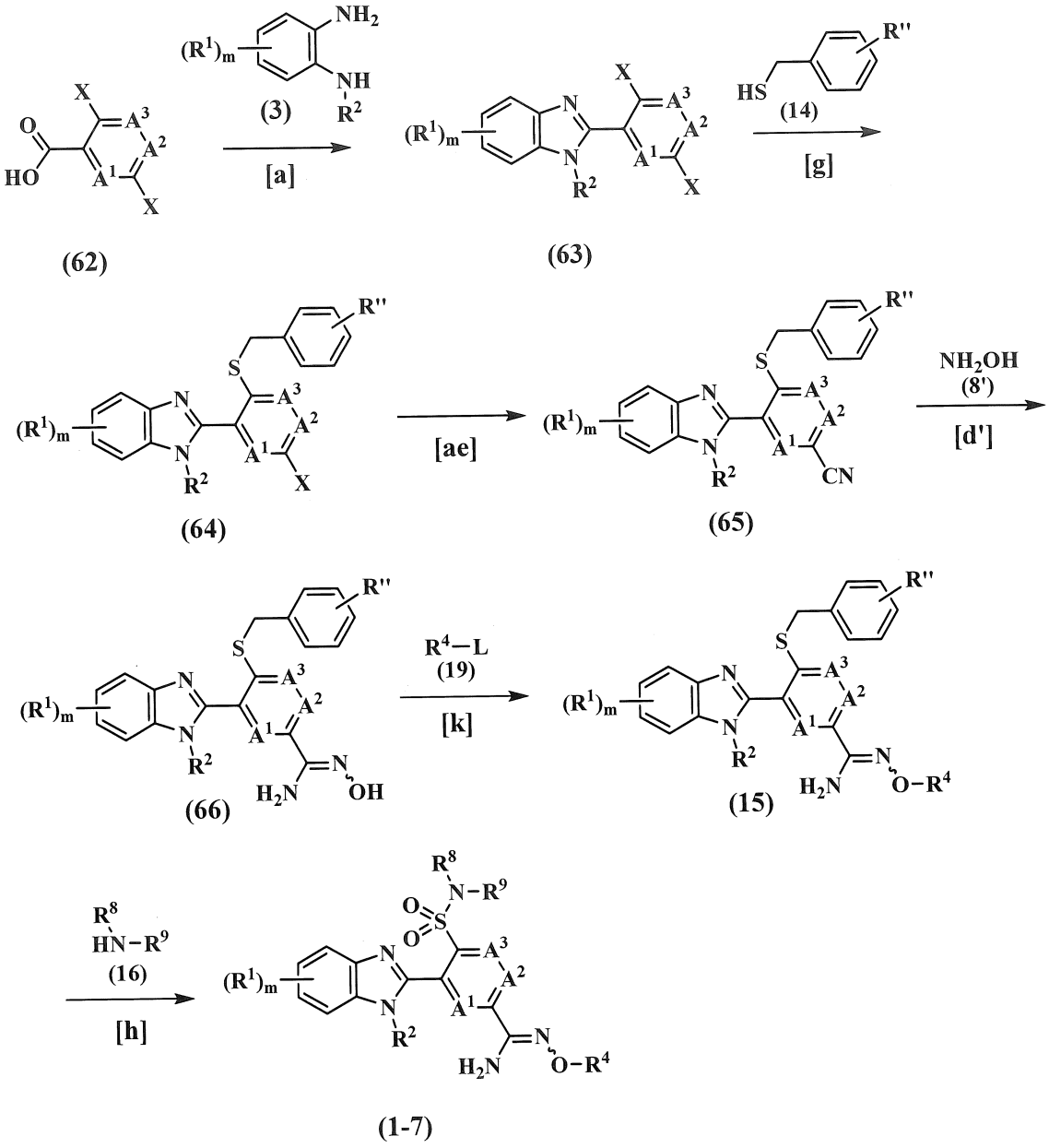
Dung môi trơ được sử dụng trong phản ứng này có thể là bất kỳ dung môi nào mà không ức chế tiến trình của phản ứng một cách rõ rệt, và các ví dụ bao gồm các hydrocacbon thơm chẳng hạn như benzen, toluen và xylen; các hydrocacbon được halogen hóa chẳng hạn như metylen clorua, cloroform và cacbon tetraclorua; các hydrocacbon thơm được halogen hóa chẳng hạn như clobenzen và diclobenzen; các ete mạch thẳng hoặc mạch vòng chẳng hạn như dietyl ete, metyl tert-butyl ete, dioxan và tetrahydrofuran; các este chẳng hạn như etyl axetat; các amit chẳng hạn như N,N-dimetylformamit và N,N-dimetylaxetamit; các keton chẳng hạn như axeton và metyl etyl keton; các rượu chẳng hạn như metanol, etanol, propanol, butanol, và 2-propanol; và các dung môi phân cực chẳng hạn như axetonitril, dimetyl sulfoxit, và 1,3-dimetyl-2-imidazolidinon. Một trong số các dung môi trơ này có thể được sử dụng một mình, và đồng thời hai hoặc nhiều trong số chúng có thể được sử dụng dưới dạng hỗn hợp. Lượng dung môi trơ sử dụng không bị giới hạn cụ thể miễn là nó đủ để hòa tan các tác nhân phản ứng, và được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,5 L đến 100 L so với 1 mol hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-11).

Nhiệt độ phản ứng thường nằm trong phạm vi từ 0°C đến điểm sôi của dung môi trơ được sử dụng. Thời gian phản ứng thay đổi theo quy mô phản ứng và nhiệt độ phản ứng, nhưng thường nằm trong phạm vi từ vài phút đến 48 giờ.

Sau khi phản ứng kết thúc, hợp chất mong muốn được phân lập ra khỏi hỗn hợp sau phản ứng bằng phương pháp thông thường. Khi cần, có thể sử dụng phương pháp kết tinh lại, sắc ký cột, v.v. để tinh chế hợp chất mong muốn.

Phương pháp sản xuất 13

[Công thức hóa học 17]



Trong công thức này, A^1, A^2, A^3, R^1, R^2, R^4, R^8, R^9, và m giống như trên, R'' là nhóm (C_4-C_6) alkyl bậc ba chẳng hạn như nhóm tert-butyl hoặc nhóm tri-(C_1-C_3)

alkylsilyl chẳng hạn như nhóm trimetylsilyl, X là nguyên tử halogen chẳng hạn như flo, clo, brom, hoặc iod, và L là nhóm rời đi chẳng hạn như brom hoặc clo.

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-7) của sáng chế có thể được sản xuất từ hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (62) thông qua bước [ae] được mô tả dưới đây, bước [a] của phương pháp sản xuất 1 nêu trên, các bước [g] và [h] của phương pháp sản xuất 4 nêu trên, và các bước [d'] và [k] của phương pháp sản xuất 5 nêu trên.

Phương pháp sản xuất tại bước [ae]

Bước này là để cho phản ứng hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (64) với tác nhân xyanua hóa trong sự có mặt hoặc vắng mặt của xúc tác kim loại và trong sự có mặt của bazơ và dung môi trơ để sản xuất hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (65).

Các ví dụ về tác nhân xyanua hóa mà có thể được sử dụng trong phản ứng này bao gồm natri xyanua, kali xyanua, trimetylsilyl xyanua, và kẽm xyanua. Lượng tác nhân xyanua hóa được sử dụng thường nằm trong phạm vi từ khoảng 1 đến 10 lần lượng mol so với hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (64).

Các ví dụ về bazơ mà có thể được sử dụng trong phản ứng này bao gồm các cacbonat chẳng hạn như liti cacbonat, liti hydro cacbonat, natri cacbonat, natri hydro cacbonat, kali cacbonat, kali hydro cacbonat, canxi cacbonat và magie cacbonat; các axetat chẳng hạn như liti axetat, natri axetat và kali axetat; và các bazơ hữu cơ chẳng hạn như pyridin, picolin, lutidin, trietylamin, tributylamin, N,N-diisopropyletylamin, và 1,4-diazabixyclo[2,2,2]octan. Lượng bazơ được sử dụng thường nằm trong phạm vi từ khoảng 1 đến 5 lần lượng mol so với hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (64).

Các ví dụ về xúc tác kim loại mà có thể được sử dụng trong phản ứng này bao gồm xúc tác paladi, xúc tác niken, xúc tác sắt, xúc tác rutheni, xúc tác platin, xúc tác rhodi và xúc tác iridi. Xúc tác kim loại như này có thể được sử dụng ở dưới dạng "kim loại", "kim loại được hỗ trợ", "muối kim loại chẳng hạn như clorua kim loại, bromua kim loại, iodua kim loại, nitrat kim loại, sulfat kim loại, cacbonat kim loại, oxalat kim loại, axetat kim loại và oxit kim loại", hoặc "hợp chất phức chẳng hạn như phức olefin,

phức phosphin, phức amin, phức ammin và phức axetylaxetonat". Ưu tiên là xúc tác paladi.

Các ví dụ về xúc tác paladi bao gồm các kim loại paladi chẳng hạn như paladi đen và paladi dạng xốp; và các kim loại paladi được hỗ trợ chẳng hạn như paladi/alumina, paladi/cacbon, paladi/silica và paladi/zeolit loại Y. Cũng bao gồm các muối kim loại paladi chẳng hạn như paladi clorua, paladi bromua, paladi iodua và paladi axetat. Các ví dụ khác về xúc tác paladi bao gồm paladi phức các hợp chất chẳng hạn như π-allylpaladi clorua dime, paladi axetylaxetonat, diclobis(axetonitril)paladi, diclobis(benzonitril)paladi, bis(dibenzylidenaxeton)paladi, tris(dibenzylidenaxeton)dipaladi, tris(dibenzylidenaxeton)dipaladi (sản phẩm cộng cloroform), diclodiamin paladi, diclobis(triphenylphosphin)paladi, diclobis(trixyclohexylphosphin)paladi, tetrakis(triphenylphosphin)paladi, diclo[1,2-bis(diphenylphosphino)etan]paladi, diclo[1,3-bis(diphenylphosphino)propan]paladi, diclo[1,4-bis(diphenylphosphino)butan]paladi, diclo[1,1'-bis(diphenylphosphino)ferroxen]paladi và phức [(diphenylphosphino)ferroxen]diclopaladi-diclometan. Lượng xúc tác kim loại sử dụng được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,001 đến 0,5 lần lượng mol so với hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (64).

Các xúc tác paladi này có thể được sử dụng một mình hoặc kết hợp với phosphin bậc ba. Các ví dụ về phosphin bậc ba mà có thể được sử dụng kết hợp với xúc tác paladi bao gồm triphenylphosphin, trimetylphosphin, trietylphosphin, tributylphosphin, tri(tert-butyl)phosphin, trixyclohexylphosphin, tri-o-tolylphosphin, trioctylphosphin, 9,9-dimetyl-4,5-bis(diphenylphosphino)xanSau đó, 2-(di-tert-butylphosphino)biphenyl, 2-(dixyclohexylphosphino)biphenyl, 1,2-bis(diphenylphosphino)etan, 1,3-bis(diphenylphosphino)propan, 1,4-bis(diphenylphosphino)butan, 1,1'-bis(diphenylphosphino)ferroxen, (R)-(+)-2,2'-bis(diphenylphosphino)-1,1'-binaphtyl, (S)-(-)-2,2'-bis(diphenylphosphino)-1,1'-binaphtyl và (±)-2,2'-bis(diphenylphosphino)-1,1'-binaphtyl. Lượng phosphin bậc ba sử dụng được

chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,5 đến 10 lần lượng mol so với xúc tác kim loại.

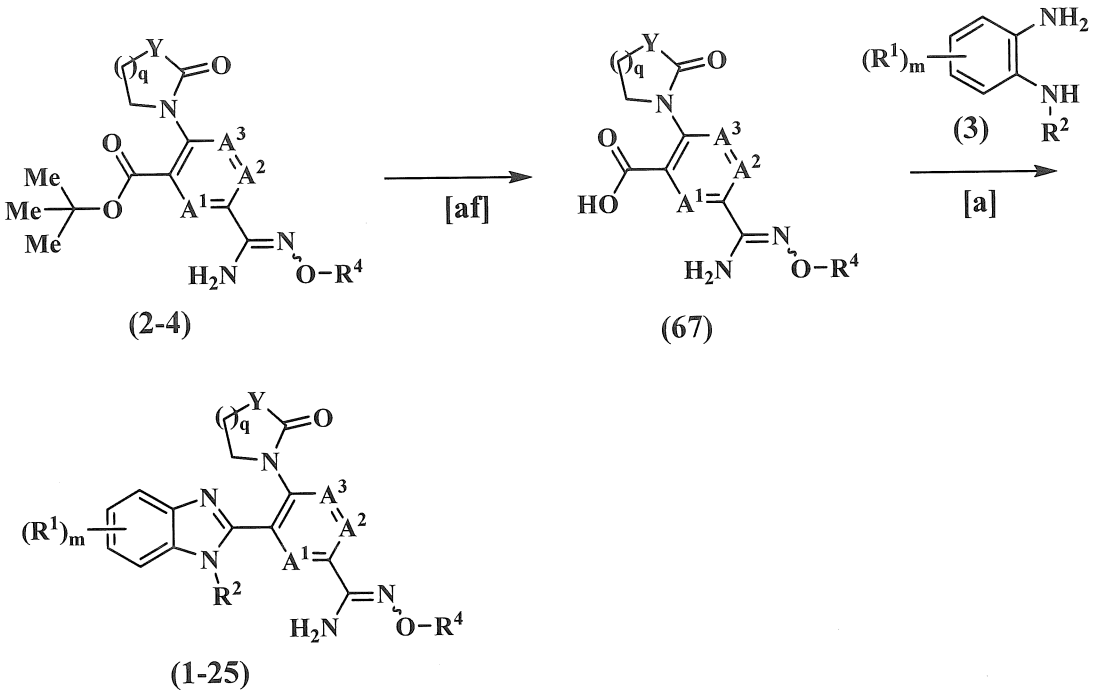
Dung môi trơ được sử dụng trong phản ứng này có thể là bất kỳ dung môi nào mà không ức chế phản ứng một cách rõ rệt, và các ví dụ bao gồm các rượu chẳng hạn như metanol, etanol, propanol, butanol, và 2-propanol; các hydrocacbon no mạch thẳng hoặc mạch vòng chẳng hạn như pentan, hexan, và xyclohexan; các hydrocacbon thơm chẳng hạn như benzen, toluen, và xylen; các hydrocacbon được halogen hóa chẳng hạn như metylen clorua, cloroform, và cacbon tetraclorua; các hydrocacbon thơm được halogen hóa chẳng hạn như clobenzen và diclobenzen; các ete mạch thẳng hoặc mạch vòng chẳng hạn như dietyl ete, metyl tert-butyl ete, dioxan, tetrahydrofuran, và xyclopentyl metyl ete; các este chẳng hạn như etyl axetat; các nitril chẳng hạn như axetonitril và propionitril; các amit chẳng hạn như N,N-dimetylformamit và N,N-dimetylaxetamit; các keton chẳng hạn như axeton và metyl etyl keton; các dung môi phân cực chẳng hạn như dimetyl sulfoxit và 1,3-dimetyl-2-imidazolidinon; và nước. Một trong số các dung môi trơ này có thể được sử dụng một mình, và đồng thời hai hoặc nhiều trong số chúng có thể được sử dụng dưới dạng hỗn hợp. Lượng dung môi trơ sử dụng không bị giới hạn cụ thể miễn là nó đủ để hòa tan các tác nhân phản ứng, và được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,5 L đến 100 L so với 1 mol hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (64).

Nhiệt độ phản ứng trong phản ứng này thường nằm trong phạm vi từ khoảng 0°C đến điểm sôi của dung môi sử dụng. Thời gian phản ứng thay đổi theo quy mô phản ứng, nhiệt độ phản ứng và tương tự và không giống nhau trong mọi trường hợp, nhưng về cơ bản được chọn sao cho phù hợp trong phạm vi từ vài phút đến 48 giờ.

Sau khi phản ứng kết thúc, hợp chất mong muốn được phân lập ra khỏi hỗn hợp sau phản ứng bằng phương pháp thông thường. Khi cần, có thể sử dụng phương pháp kết tinh lại, sắc ký cột, v.v. để tinh chế hợp chất mong muốn. Hỗn hợp sau phản ứng có thể được sử dụng trực tiếp trong phản ứng tiếp theo mà không cần phân lập hợp chất mong muốn.

Phương pháp sản xuất 14

[Công thức hóa học 18]



Trong công thức này, A^1, A^2, A^3, R^1, R^2, R^4, và m giống như trên, Y là nguyên tử cacbon, nguyên tử oxy, nguyên tử lưu huỳnh, hoặc nguyên tử nitơ được thế tùy chọn với nhóm (C_1-C_4) alkyl chẳng hạn như nhóm metyl hoặc nhóm etyl, và q là 1 hoặc 2.

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-25) của sáng chế có thể được sản xuất từ hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (2-4) thông qua bước [af] được mô tả dưới đây và bước [a] của phương pháp sản xuất 1 nêu trên. Phương pháp sản xuất hợp chất khởi đầu được biểu diễn bằng công thức chung (2-4) sẽ được mô tả sau.

Phương pháp sản xuất tại bước [af]

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (67) có thể được sản xuất bằng cách thủy phân hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (2-4) trong sự có mặt của axit và dung môi trơ.

Các ví dụ về axit sử dụng trong phản ứng này bao gồm các axit vô cơ chẳng hạn như axit clohydric, axit sulfuric và axit nitric; các axit hữu cơ chẳng hạn như axit formic, axit axetic, axit propionic, axit trifloaxetic và axit benzoic; các axit sulfonic chẳng hạn như axit metansulfonic, axit triflometansulfonic và axit p-toluensulfonic; và axit phosphoric. Lượng axit sử dụng được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,01 đến 10 lần lượng mol so với hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (2-4). Trong một số trường hợp, axit cũng có thể được sử dụng làm dung môi.

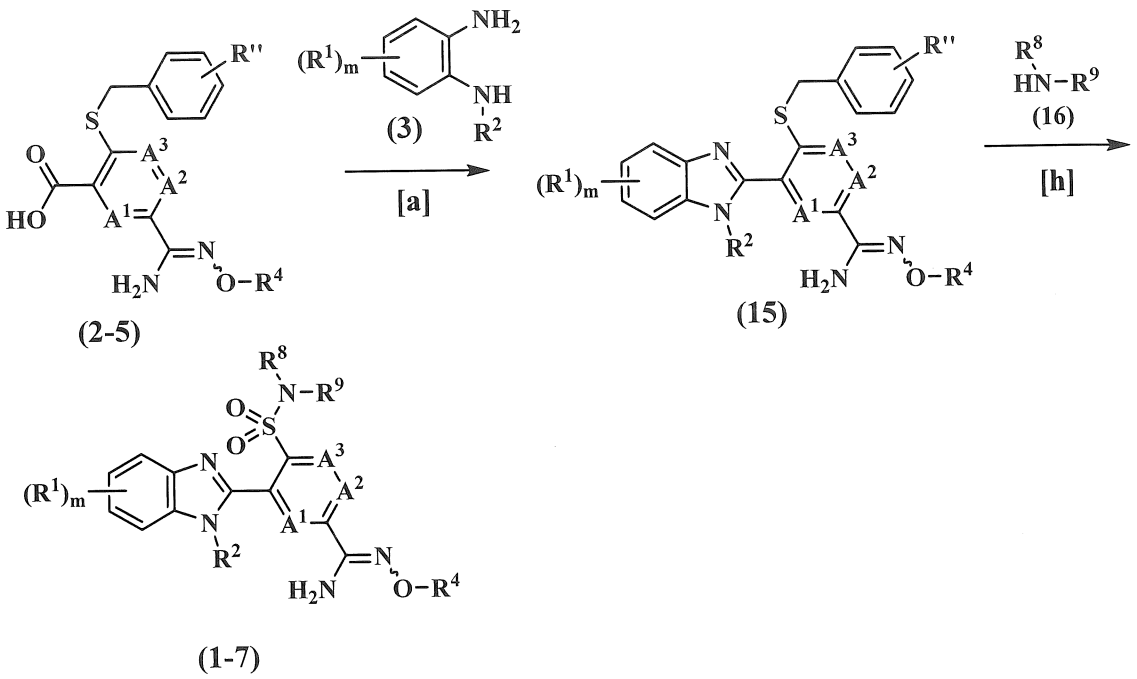
Dung môi trơ được sử dụng trong phản ứng này có thể là bất kỳ dung môi nào mà không ức chế tiến trình của phản ứng một cách rõ rệt, và các ví dụ bao gồm các hydrocacbon thơm chẳng hạn như benzen, toluen và xylen; các hydrocacbon được halogen hóa chẳng hạn như metylen clorua, cloroform và cacbon tetraclorua; các hydrocacbon thơm được halogen hóa chẳng hạn như clobenzen và diclobenzen; các ete mạch thẳng hoặc mạch vòng chẳng hạn như dietyl ete, metyl tert-butyl ete, dioxan và tetrahydrofuran; các este chẳng hạn như etyl axetat; các amit chẳng hạn như N,N-dimetylformamit và N,N-dimetylaxetamit; các keton chẳng hạn như axeton và metyl etyl keton; và các dung môi phân cực chẳng hạn như dimetyl sulfoxit và 1,3-dimetyl-2-imidazolidinon. Một trong số các dung môi trơ này có thể được sử dụng một mình, và đồng thời hai hoặc nhiều trong số chúng có thể được sử dụng dưới dạng hỗn hợp. Lượng dung môi trơ sử dụng không bị giới hạn cụ thể miễn là nó đủ để hòa tan các tác nhân phản ứng, và được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,5 L đến 100 L so với 1 mol hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (2-4). Trong trường hợp mà axit được sử dụng cũng là dung môi, thì không cần phải sử dụng dung môi khác.

Nhiệt độ phản ứng có thể nằm trong phạm vi từ nhiệt độ phòng đến điểm sôi của dung môi trơ được sử dụng. Thời gian phản ứng thay đổi theo quy mô phản ứng và nhiệt độ phản ứng, nhưng về cơ bản được chọn sao cho phù hợp trong phạm vi từ vài phút đến 48 giờ.

Sau khi phản ứng kết thúc, hợp chất mong muốn được phân lập ra khỏi hỗn hợp sau phản ứng bằng phương pháp thông thường. Khi cần, có thể sử dụng phương pháp kết tinh lại, sắc ký cột, v.v. để tinh chế hợp chất mong muốn. Hỗn hợp sau phản ứng có thể được sử dụng trực tiếp trong bước tiếp theo mà không cần phân lập hợp chất mong muốn.

Phương pháp sản xuất 15

[Công thức hóa học 19]

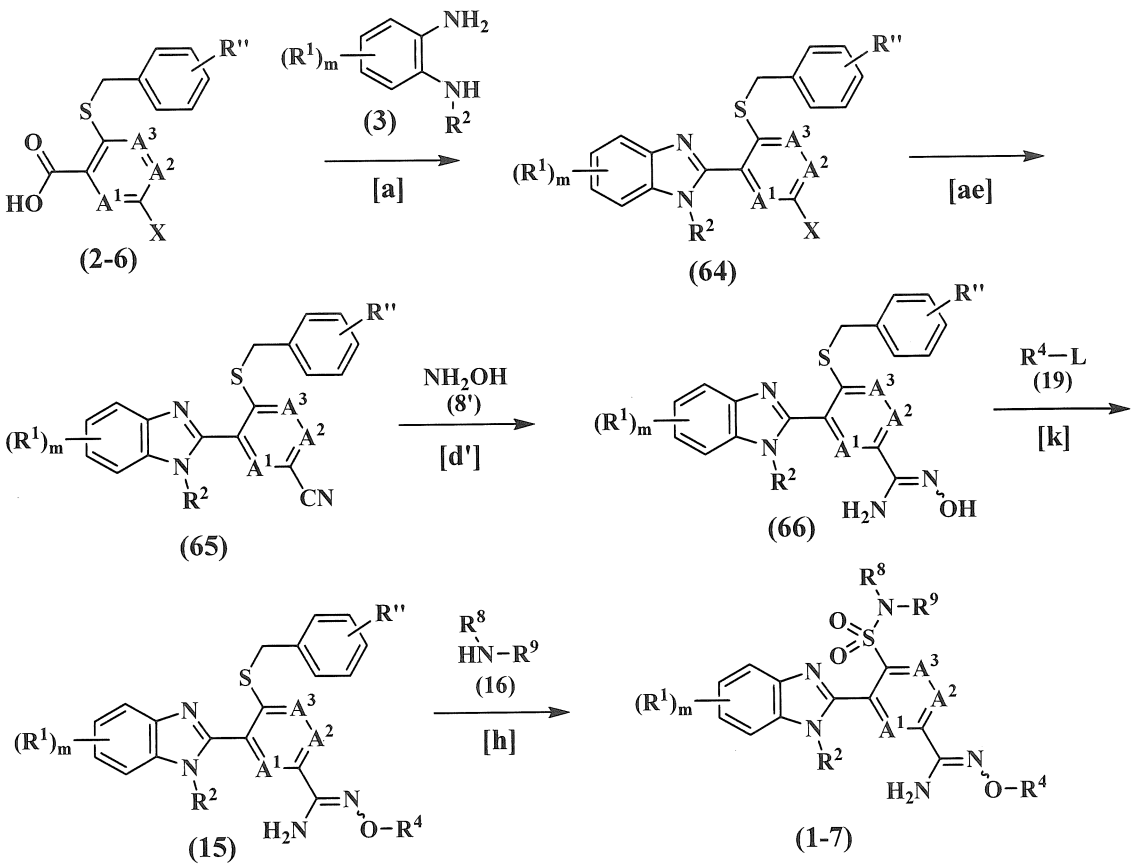


Trong công thức này, A^1, A^2, A^3, R^1, R^2, R^4, R^8, R^9, và m giống như trên, và R'' là nhóm (C_4-C_6) alkyl bậc ba chẳng hạn như nhóm tert-butyl hoặc nhóm tri-(C_1-C_3) alkylsilyl chẳng hạn như nhóm trimetylsilyl.

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-7) của sáng chế có thể được sản xuất từ hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (2-5) thông qua bước [a] của phương pháp sản xuất 1 nêu trên và bước [h] của phương pháp sản xuất 4 nêu trên. Phương pháp sản xuất hợp chất khởi đầu được biểu diễn bằng công thức chung (2-5) sẽ được mô tả sau.

Phương pháp sản xuất 16

[Công thức hóa học 20]

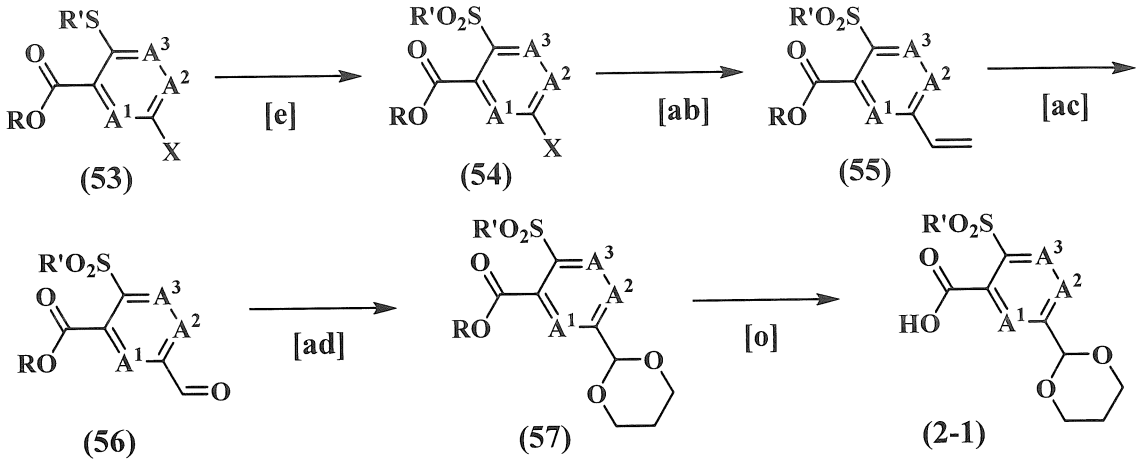


Trong công thức này, A^1, A^2, A^3, R^1, R^2, R^4, R^8, R^9, và m giống như trên, R'' là nhóm (C_4-C_6) alkyl bậc ba chẳng hạn như nhóm tert-butyl hoặc nhóm tri-(C_1-C_3) alkylsilyl chẳng hạn như nhóm trimetylsilyl, X là nguyên tử halogen chẳng hạn như flo, clo, brom, hoặc iod, và L là nhóm rời đi chẳng hạn như brom hoặc clo.

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1-7) của sáng chế có thể được sản xuất từ hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (2-6) thông qua bước [a] của phương pháp sản xuất 1 nêu trên, bước [h] của phương pháp sản xuất 4 nêu trên, các bước [d'] và [k] của phương pháp sản xuất 5 nêu trên, và bước [ae] của phương pháp sản xuất 4 nêu trên. Phương pháp sản xuất hợp chất khởi đầu được biểu diễn bằng công thức chung (2-6) sẽ được mô tả sau.

Phương pháp sản xuất hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (2-1)

[Công thức hóa học 21]



Trong công thức này, A^1, A^2, và A^3 giống như trên, R và R' mỗi ký hiệu là nhóm (C_1-C_4) alkyl chẳng hạn như nhóm metyl hoặc nhóm etyl, và X là nguyên tử halogen chẳng hạn như flo, clo, brom, hoặc iod.

Hợp chất khởi đầu của phương pháp sản xuất 1, được biểu diễn bằng công thức chung (2-1), có thể được sản xuất từ hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (53) thông qua các bước [ab], [ac], và [ad] được mô tả dưới đây, bước [e] của phương pháp sản xuất 1 nêu trên, và bước [o] của phương pháp sản xuất 6 nêu trên.

Phương pháp sản xuất tại bước [ab]

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (55) có thể được sản xuất bằng cho phản ứng hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (54) với hợp chất kim loại vinyl trong sự có mặt của dung môi trơ, xúc tác kim loại, và bazơ.

Các ví dụ về xúc tác kim loại mà có thể được sử dụng trong phản ứng này bao gồm xúc tác paladi, xúc tác niken, xúc tác sắt, xúc tác rutheni, xúc tác platin, xúc tác rhodi và xúc tác iridi. Xúc tác kim loại như này có thể được sử dụng ở dưới dạng "kim loại", "kim loại được hỗ trợ", "muối kim loại chẳng hạn như clorua kim loại, bromua kim loại, iodua kim loại, nitrat kim loại, sulfat kim loại, cacbonat kim loại, oxalat kim loại, axetat kim loại và oxit kim loại", hoặc "hợp chất phức chẳng hạn như phức olefin, phức phosphin, phức amin, phức ammin và phức axetylaxetonat". Ưu tiên là xúc tác paladi.

Các ví dụ về xúc tác paladi bao gồm các kim loại paladi chẳng hạn như paladi đen và paladi dạng xốp; và các kim loại paladi được hỗ trợ chẳng hạn như paladi/alumina, paladi/cacbon, paladi/silica và paladi/zeolit loại Y. Cũng bao gồm các

muối kim loại paladi chẳng hạn như paladi clorua, paladi bromua, paladi iodua và paladi axetat. Các ví dụ khác về xúc tác paladi bao gồm paladi phức các hợp chất chẳng hạn như π-allylpaladi clorua dime, paladi axetylaxetonat, diclobis(axetonitril)paladi, diclobis(benzonitril)paladi, bis(dibenzylidenaxeton)paladi, tris(dibenzylidenaxeton)dipaladi, tris(dibenzylidenaxeton)dipaladi (sản phẩm cộng cloroform), diclodiamin paladi, diclobis(triphenylphosphin)paladi, diclobis(trixyclohexylphosphin)paladi, tetrakis(triphenylphosphin)paladi, diclo[1,2-bis(diphenylphosphino)etan]paladi, diclo[1,3-bis(diphenylphosphino)propan]paladi, diclo[1,4-bis(diphenylphosphino)butan]paladi, diclo[1,1'-bis(diphenylphosphino)ferroxen]paladi và phức [(diphenylphosphino)ferroxen]diclopaladi-diclometan. Lượng xúc tác paladi sử dụng được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,001 đến 0,5 lần lượng mol so với hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (54).

Các xúc tác paladi này có thể được sử dụng một mình hoặc kết hợp với phosphin bậc ba. Các ví dụ về phosphin bậc ba mà có thể được sử dụng kết hợp với xúc tác paladi bao gồm triphenylphosphin, trimetylphosphin, trietylphosphin, tributylphosphin, tri(tert-butyl)phosphin, trixyclohexylphosphin, tri-o-tolylphosphin, trioctylphosphin, 9,9-dimetyl-4,5-bis(diphenylphosphino)xanSau đó, 2-(di-tert-butylphosphino)biphenyl, 2-(dixyclohexylphosphino)biphenyl, 1,2-bis(diphenylphosphino)etan, 1,3-bis(diphenylphosphino)propan, 1,4-bis(diphenylphosphino)butan, 1,1'-bis(diphenylphosphino)ferroxen, (R)-(+)-2,2'-bis(diphenylphosphino)-1,1'-binaphtyl, (S)-(-)-2,2'-bis(diphenylphosphino)-1,1'-binaphtyl và (±)-2,2'-bis(diphenylphosphino)-1,1'-binaphtyl. Lượng phosphin bậc ba sử dụng được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,5 đến 10 lần lượng mol so với xúc tác paladi.

Các ví dụ về hợp chất kim loại vinyl mà có thể được sử dụng trong phản ứng này bao gồm vinylmagie bromua, vinylmagie clorua, vinyzinc clorua, tributylvinyltin, kali vinyltrifloborat, axit vinylboronic, vinylboronic anhydrit, este của 2-metyl-2,4-pentandiol với axit vinylboronic, este của pinacol với axit vinylboronic và

trietoxyvinylsilan. Ưu tiên axit vinylboronic. Lượng hợp chất kim loại vinyl sử dụng được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,8 đến 3 lần lượng mol so với hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (54).

Các ví dụ về bazơ mà có thể được sử dụng trong phản ứng này bao gồm bazơ vô cơ chẳng hạn như natri hydroxit, kali hydroxit, natri cacbonat, kali cacbonat, xesi cacbonat, natri hydro cacbonat và kali hydro cacbonat; các hydrua kim loại kiềm chẳng hạn như natri hydrua và kali hydrua; và các alkoxit chẳng hạn như natri metoxit, natri etoxit và kali tert-butoxit. Lượng bazơ được sử dụng thường nằm trong phạm vi từ khoảng 1 đến 5 lần lượng mol so với hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (54).

Dung môi trơ được sử dụng trong phản ứng này có thể là bất kỳ dung môi nào mà không ức chế phản ứng một cách rõ rệt, và các ví dụ bao gồm các rượu chẳng hạn như metanol, etanol, propanol, butanol và 2-propanol; các ete mạch thẳng hoặc mạch vòng chẳng hạn như dietyl ete, tetrahydrofuran, dioxan và 1,2-dimetoxyetan (DME); các hydrocacbon thơm chẳng hạn như benzen, toluen và xylen; các hydrocacbon được halogen hóa chẳng hạn như metylen clorua, cloroform và cacbon tetraclorua; các hydrocacbon thơm được halogen hóa chẳng hạn như clobenzen và diclobenzen; các nitril chẳng hạn như axetonitril; các este chẳng hạn như etyl axetat; các dung môi phân cực chẳng hạn như N,N-dimetylformamit, N,N-dimetylaxetamit, dimetyl sulfoxit và 1,3-dimetyl-2-imidazolidinon; và nước. Một trong số các dung môi trơ này có thể được sử dụng một mình, và đồng thời hai hoặc nhiều trong số chúng có thể được sử dụng dưới dạng hỗn hợp. Lượng dung môi trơ sử dụng không bị giới hạn cụ thể miễn là nó đủ để hòa tan các tác nhân phản ứng, và được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,5 L đến 100 L so với 1 mol hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (54).

Nhiệt độ phản ứng trong phản ứng này thường nằm trong phạm vi từ khoảng 0°C đến điểm sôi của dung môi sử dụng. Thời gian phản ứng thay đổi theo quy mô phản ứng, nhiệt độ phản ứng và tương tự, nhưng về cơ bản được chọn sao cho phù hợp trong phạm vi từ vài phút đến 48 giờ. Phản ứng này có thể được tiến hành dưới khí quyển khí trơ chẳng hạn như khí nitơ và khí agon. Sau khi phản ứng kết thúc, hợp chất mong muốn được phân lập ra khỏi hỗn hợp sau phản ứng bằng phương pháp thông

thường. Khi cần, có thể sử dụng phương pháp kết tinh lại, sắc ký cột, v.v. để tinh chế hợp chất mong muốn. Hỗn hợp sau phản ứng có thể được sử dụng trực tiếp trong bước tiếp theo mà không cần phân lập hợp chất mong muốn.

Phương pháp sản xuất tại bước [ac]

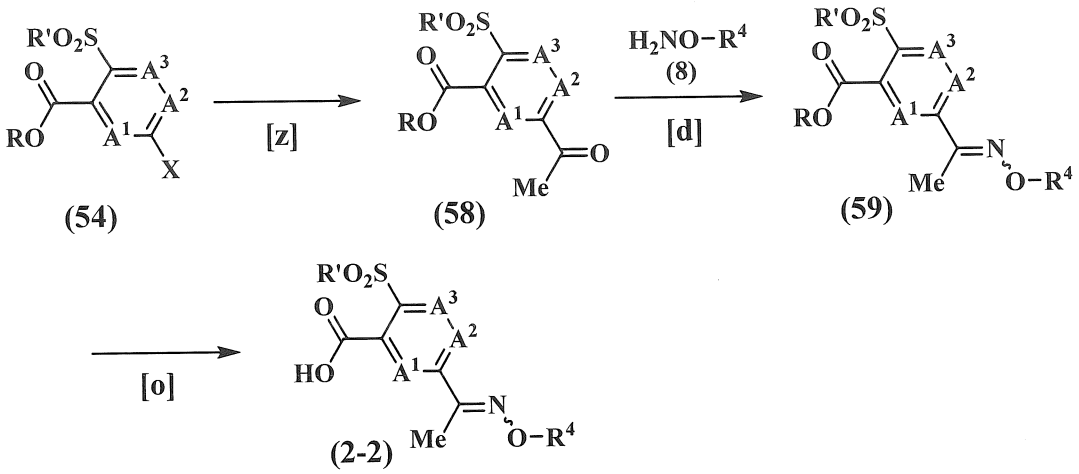
Hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (55) is made into a diol trong sự có mặt của osmi tetroxit và tác nhân oxy hóa theo phương pháp được mô tả trong tài liệu "Lecture of Experimental Chemistry", ấn bản thứ 4, tập 23, Organic Chemistry V: Oxidation Reaction (được xuất bản bởi Maruzen Publishing Co., Ltd.). Sau đó, diol được phản ứng với hợp chất axit tuần hoàn trong sự có mặt của dung môi trơ theo phương pháp được mô tả trong tài liệu "New Lecture of Experimental Chemistry", tập 15, Oxidation and Reduction I-1 (được xuất bản bởi Maruzen Publishing Co., Ltd.) để tạo ra hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (56) của sáng chế. Sau khi phản ứng kết thúc, hợp chất mong muốn được phân lập ra khỏi hỗn hợp sau phản ứng bằng phương pháp thông thường. Khi cần, có thể sử dụng phương pháp kết tinh lại, sắc ký cột, v.v. để tinh chế hợp chất mong muốn. Hỗn hợp sau phản ứng có thể được sử dụng trực tiếp trong bước tiếp theo mà không cần phân lập hợp chất mong muốn.

Phương pháp sản xuất tại bước [ad]

Nhóm formyl của hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (56) được chuyển hóa thành nhóm axetal vòng theo phương pháp được mô tả trong tài liệu Greene's Productive Groups in Organic Synthesis (ấn bản thứ 4) để tạo ra hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (57) của sáng chế. Sau khi phản ứng kết thúc, hợp chất mong muốn được phân lập ra khỏi hỗn hợp sau phản ứng bằng phương pháp thông thường. Khi cần, có thể sử dụng phương pháp kết tinh lại, sắc ký cột, v.v. để tinh chế hợp chất mong muốn. Hỗn hợp sau phản ứng có thể được sử dụng trực tiếp trong bước tiếp theo mà không cần phân lập hợp chất mong muốn.

Phương pháp sản xuất hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (2-2)

[Công thức hóa học 22]

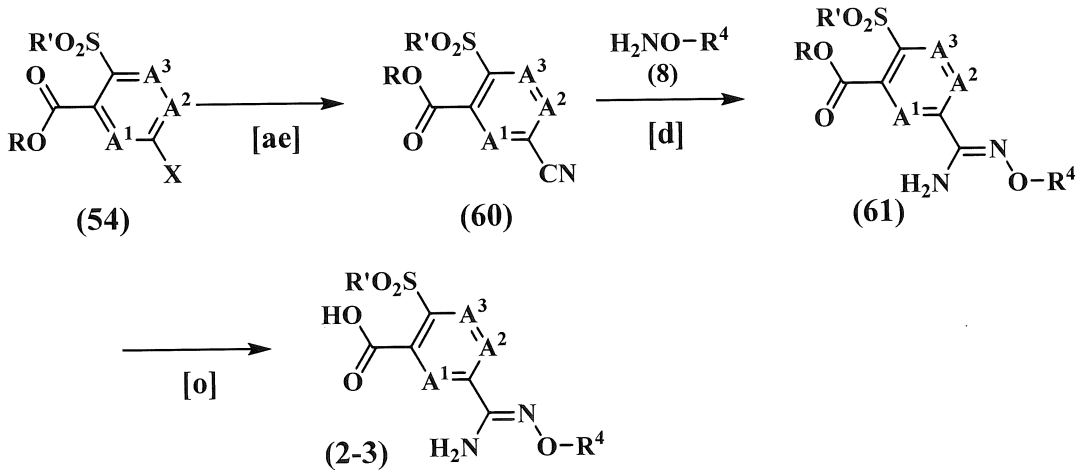


Trong công thức này, A^1, A^2, A^3, và R^4 giống như trên, R và R' mỗi ký hiệu là nhóm (C_1-C_4) alkyl chẳng hạn như nhóm metyl hoặc nhóm etyl, và X là nguyên tử halogen chẳng hạn như flo, clo, brom, hoặc iod.

Hợp chất khởi đầu của phương pháp sản xuất 2, được biểu diễn bằng công thức chung (2-2), có thể được sản xuất từ hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (54) thông qua bước [d] của phương pháp sản xuất 1 nêu trên, bước [o] của phương pháp sản xuất 6 nêu trên, và bước [z] của phương pháp sản xuất 11 nêu trên.

Phương pháp sản xuất hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (2-3)

[Công thức hóa học 23]



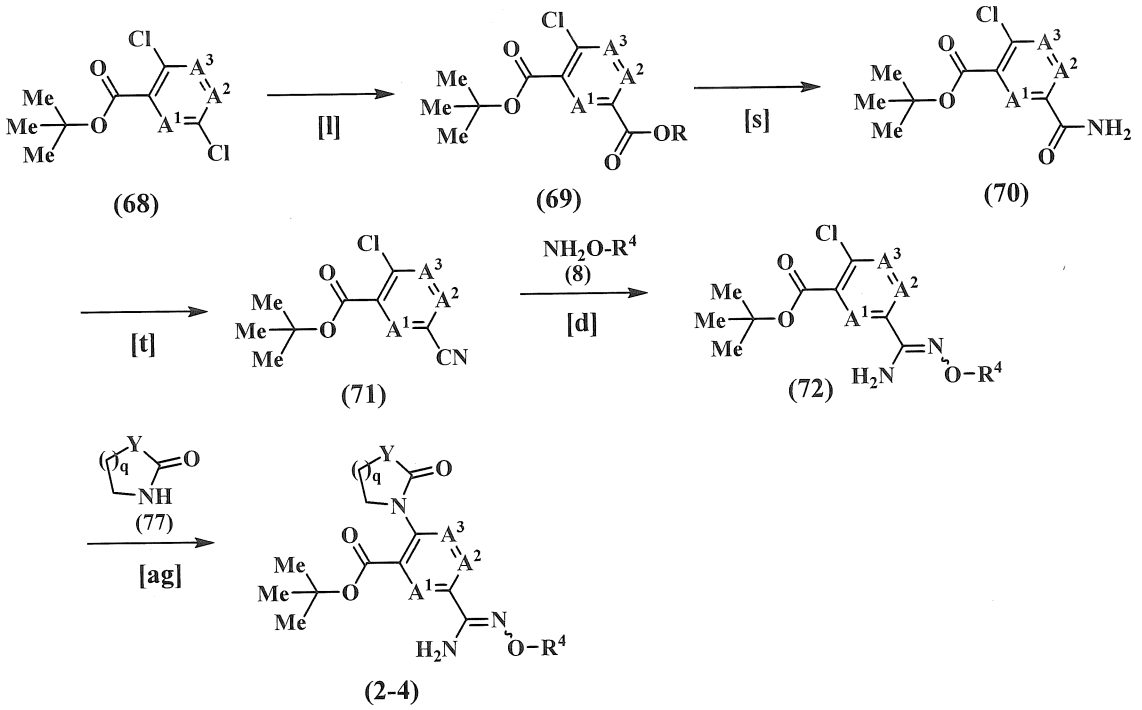
Trong công thức này, A^1, A^2, A^3, và R^4 giống như trên, R và R' mỗi ký hiệu là nhóm (C_1-C_4) alkyl chẳng hạn như nhóm metyl hoặc nhóm etyl, và X là nguyên tử halogen chẳng hạn như flo, clo, brom, hoặc iod.

Hợp chất khởi đầu của phương pháp sản xuất 3, được biểu diễn bằng công thức chung (2-3), có thể được sản xuất từ hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung

(54) thông qua bước [d] của phương pháp sản xuất 1 nêu trên, bước [o] của phương pháp sản xuất 6 nêu trên, và bước [ae] của phương pháp sản xuất 13 nêu trên.

Phương pháp sản xuất hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (2-4)

[Công thức hóa học 24]



Trong công thức này, A^1, A^2, A^3, và R^4 giống như trên, R là nhóm (C_1-C_4) alkyl chẳng hạn như nhóm metyl hoặc nhóm etyl, Y là nguyên tử cacbon, nguyên tử oxy, nguyên tử lưu huỳnh, hoặc nguyên tử nitơ được thế tùy chọn với nhóm (C_1-C_4) alkyl chẳng hạn như nhóm metyl hoặc nhóm etyl, và q là 1 hoặc 2.

Hợp chất khởi đầu của phương pháp sản xuất 14, được biểu diễn bằng công thức chung (2-4), có thể được sản xuất từ hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (68) thông qua bước [ag] được mô tả dưới đây, bước [d] của phương pháp sản xuất 1 nêu trên, bước [l] của phương pháp sản xuất 6 nêu trên, và các bước [s] và [t] của phương pháp sản xuất 8 nêu trên.

Phương pháp sản xuất tại bước [ag]

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (2-4) có thể được sản xuất bằng cho phản ứng hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (72) với hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (77) trong sự có mặt của xúc tác kim loại, bazơ và dung môi trơ.

Các ví dụ về xúc tác kim loại mà có thể được sử dụng trong phản ứng này bao gồm xúc tác paladi, xúc tác niken, xúc tác sắt, xúc tác rutheni, xúc tác platin, xúc tác rhodi và xúc tác iridi. Xúc tác kim loại như này có thể được sử dụng ở dưới dạng "kim loại", "kim loại được hỗ trợ", "muối kim loại chẳng hạn như clorua kim loại, bromua kim loại, iodua kim loại, nitrat kim loại, sulfat kim loại, cacbonat kim loại, oxalat kim loại, axetat kim loại và oxit kim loại", hoặc "hợp chất phức chẳng hạn như phức olefin, phức phosphin, phức amin, phức ammin và phức axetylaxetonat". Ưu tiên là xúc tác paladi.[0002]

Các ví dụ về xúc tác paladi bao gồm các kim loại paladi chẳng hạn như paladi đen và paladi dạng xốp; và các kim loại paladi được hỗ trợ chẳng hạn như paladi/alumina, paladi/cacbon, paladi/silica và paladi/zeolit loại Y. Cũng bao gồm các muối kim loại paladi chẳng hạn như paladi clorua, paladi bromua, paladi iodua và paladi axetat. Các ví dụ khác về xúc tác paladi bao gồm paladi phức các hợp chất chẳng hạn như π-allylpaladi clorua dime, paladi axetylaxetonat, diclobis(axetonitril)paladi, diclobis(benzonitril)paladi, bis(dibenzylidenaxeton)paladi, tris(dibenzylidenaxeton)dipaladi, tris(dibenzylidenaxeton)dipaladi (sản phẩm cộng cloroform), diclodiamin paladi, diclobis(triphenylphosphin)paladi, diclobis(trixyclohexylphosphin)paladi, tetrakis(triphenylphosphin)paladi, diclo[1,2-bis(diphenylphosphino)etan]paladi, diclo[1,3-bis(diphenylphosphino)propan]paladi, diclo[1,4-bis(diphenylphosphino)butan]paladi, diclo[1,1'-bis(diphenylphosphino)ferroxen]paladi và phức [(diphenylphosphino)ferroxen]diclopaladi-diclometan. Lượng xúc tác kim loại sử dụng được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,001 đến 0,5 lần lượng mol so với hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (72).

Các xúc tác paladi này có thể được sử dụng một mình hoặc kết hợp với phosphin bậc ba. Các ví dụ về phosphin bậc ba mà có thể được sử dụng kết hợp với xúc tác paladi bao gồm triphenylphosphin, trimetylphosphin, trietylphosphin, tributylphosphin, tri(tert-butyl)phosphin, trixyclohexylphosphin, tri-o-tolylphosphin, trioctylphosphin, 9,9-dimetyl-4,5-bis(diphenylphosphino)xanSau đó, 2-(di-tert-butylphosphino)biphenyl, 2-(dixyclohexylphosphino)biphenyl, 1,2-bis(diphenylphosphino)etan,

1,3-bis(diphenylphosphino)propan, 1,4-bis(diphenylphosphino)butan, 1,1'-bis(diphenylphosphino)ferroxen, (R)-(+)-2,2'-bis(diphenylphosphino)-1,1'-binaphtyl, (S)-(-)-2,2'-bis(diphenylphosphino)-1,1'-binaphtyl và (±)-2,2'-bis(diphenylphosphino)-1,1'-binaphtyl. Lượng phosphin bậc ba sử dụng được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,5 đến 10 lần lượng mol so với xúc tác kim loại.

Các ví dụ về bazơ mà có thể được sử dụng trong phản ứng này bao gồm bazơ vô cơ chẳng hạn như natri hydroxit, kali hydroxit, natri cacbonat, kali cacbonat, xesi cacbonat, natri hydro cacbonat và kali hydro cacbonat; các hydrua kim loại kiềm chẳng hạn như natri hydrua và kali hydrua; và các alkoxit chẳng hạn như natri metoxit, natri etoxit và kali tert-butoxit. Lượng bazơ được sử dụng thường nằm trong phạm vi từ khoảng 1 đến 5 lần lượng mol so với hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (72).

Dung môi trơ được sử dụng trong phản ứng này có thể là bất kỳ dung môi nào mà không ức chế phản ứng một cách rõ rệt, và các ví dụ bao gồm các rượu chẳng hạn như metanol, etanol, propanol, butanol và 2-propanol; các ete mạch thẳng hoặc mạch vòng chẳng hạn như dietyl ete, tetrahydrofuran, dioxan và 1,2-dimetoxyetan (DME); các hydrocacbon thơm chẳng hạn như benzen, toluen và xylen; các hydrocacbon được halogen hóa chẳng hạn như metylen clorua, cloroform và cacbon tetraclorua; các hydrocacbon thơm được halogen hóa chẳng hạn như clobenzen và diclobenzen; các nitril chẳng hạn như axetonitril; các este chẳng hạn như etyl axetat; các dung môi phân cực chẳng hạn như N,N-dimetylformamit, N,N-dimetylaxetamit, dimetyl sulfoxit và 1,3-dimetyl-2-imidazolidinon; và nước. Một trong số các dung môi trơ này có thể được sử dụng một mình, và đồng thời hai hoặc nhiều trong số chúng có thể được sử dụng dưới dạng hỗn hợp. Lượng dung môi trơ sử dụng không bị giới hạn cụ thể miễn là nó đủ để hòa tan các tác nhân phản ứng, và được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,5 L đến 100 L so với 1 mol hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (72).

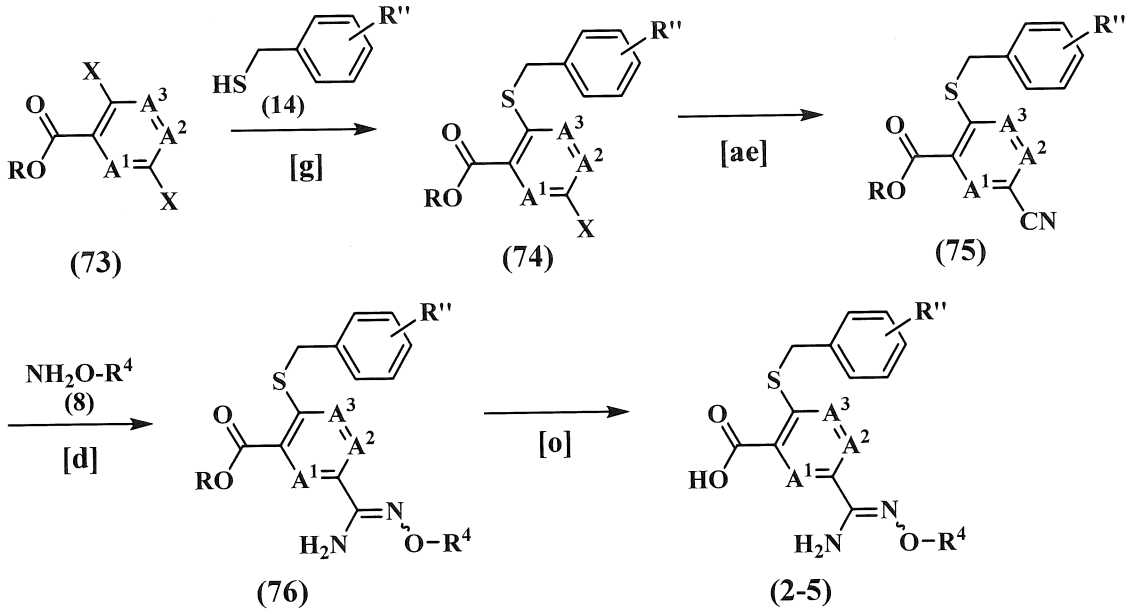
Vì phản ứng này là phản ứng đẳng mol của các hợp chất, nên về cơ bản chúng được sử dụng với lượng đẳng mol, nhưng một trong số chúng có thể được sử dụng với lượng dư.

Nhiệt độ phản ứng trong phản ứng này thường nằm trong phạm vi từ khoảng 0°C đến điểm sôi của dung môi sử dụng. Thời gian phản ứng thay đổi theo quy mô phản ứng, nhiệt độ phản ứng và tương tự, nhưng về cơ bản được chọn sao cho phù hợp trong phạm vi từ vài phút đến 48 giờ. Phản ứng này có thể được tiến hành dưới khí quyển khí trơ chẳng hạn như khí nitơ và khí agon.

Sau khi phản ứng kết thúc, hợp chất mong muốn được phân lập ra khỏi hỗn hợp sau phản ứng bằng phương pháp thông thường. Khi cần, có thể sử dụng phương pháp kết tinh lại, sắc ký cột, v.v. để tinh chế hợp chất mong muốn. Hỗn hợp sau phản ứng có thể được sử dụng trực tiếp trong bước tiếp theo mà không cần phân lập hợp chất mong muốn.

Phương pháp sản xuất hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (2-5)

[Công thức hóa học 25]

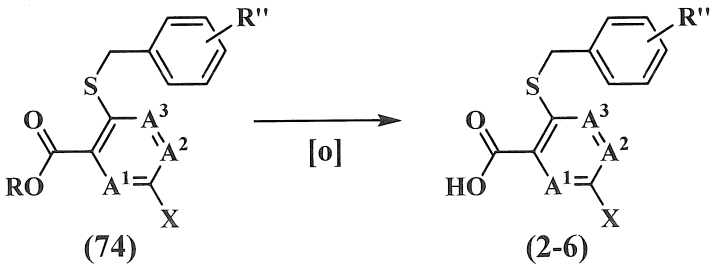


Trong công thức này, A^1, A^2, A^3, và R^4 giống như trên, R là nhóm (C_1-C_4) alkyl chẳng hạn như nhóm metyl hoặc nhóm etyl, R" là nhóm (C_4-C_6) alkyl bậc ba chẳng hạn như nhóm tert-butyl hoặc nhóm tri-(C_1-C_3) alkylsilyl chẳng hạn như nhóm trimetylsilyl, và X là nguyên tử halogen chẳng hạn như flo, clo, brom, hoặc iod.

Hợp chất khởi đầu của phương pháp sản xuất 15, được biểu diễn bằng công thức chung (2-5), có thể được sản xuất từ hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (73) thông qua bước [g] của phương pháp sản xuất 4 nêu trên, bước [d] của phương pháp sản xuất 5 nêu trên, bước [o] của phương pháp sản xuất 6 nêu trên, và bước [ae] của phương pháp sản xuất 13 nêu trên.

Phương pháp sản xuất hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (2-6)

[Công thức hóa học 26]



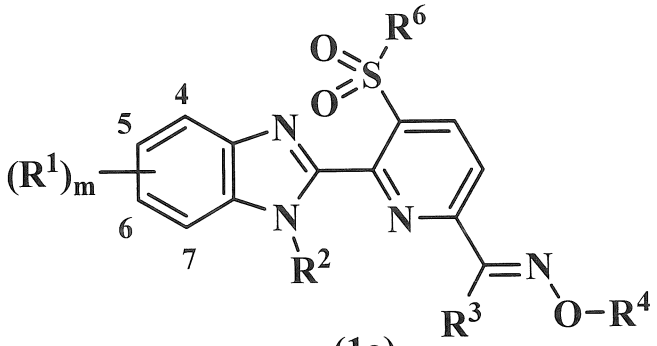
Trong công thức này, A^1, A^2, và A^3 giống như trên, R là nhóm (C_1-C_4) alkyl chẳng hạn như nhóm metyl hoặc nhóm etyl, R'' là nhóm (C_4-C_6) alkyl bậc ba chẳng hạn như nhóm tert-butyl hoặc nhóm tri-(C_1-C_3) alkylsilyl chẳng hạn như nhóm trimetylsilyl, và X là nguyên tử halogen chẳng hạn như flo, clo, brom, hoặc iod.

Hợp chất khởi đầu của phương pháp sản xuất 16, được biểu diễn bằng công thức chung (2-6), có thể được sản xuất từ hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (74) thông qua bước [o] của phương pháp sản xuất 6 nêu trên.

Các ví dụ đại diện về hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1) của sáng chế được trình bày trong các bảng từ 1 đến 8, nhưng sáng chế không bị giới hạn ở đó.

Các ví dụ cụ thể về hợp chất của sáng chế được trình bày dưới đây. Trong các bảng dưới đây, Me là viết tắt của nhóm metyl, Et là viết tắt của nhóm etyl, i-Pr là viết tắt của nhóm isopropyl, n-Pr là viết tắt của nhóm n-propyl, c-Pr là viết tắt của nhóm xyclopropyl, n-Bu là viết tắt của nhóm n-butyl, i-Bu là viết tắt của nhóm isobutyl, c-Bu là viết tắt của nhóm xyclobutyl, t-Bu là viết tắt của nhóm tert-butyl, Ac là viết tắt của nhóm axetyl, Ph là viết tắt của nhóm phenyl, Bn là viết tắt của nhóm benzyl, và TMS là viết tắt của nhóm trimetylsilyl. Được trình bày trong cột "Giá trị tính chất vật lý" là điểm nóng chảy (°C), chỉ số khúc xạ (n_D), hoặc "^{1}H-NMR". Số trong ngoặc đơn cho chỉ số khúc xạ là nhiệt độ đo (°C). Dữ liệu ^{1}H-NMR được trình bày trong bảng 10.

[Công thức hóa học 27]



(1a)

Các số vị trí trong bảng biểu thị các số được chỉ định trong công thức chung (1a).

[Bảng 1-1]

Bảng 1

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^6	Giá trị tính chất vật lý
1-1	H	H	H	Et	Et	
1-2	H	H	H	i-Pr	Et	
1-3	H	H	H	CH_2CF_3	Et	167-168
1-4	H	Me	H	Et	Et	
1-5	H	Me	H	i-Pr	Et	
1-6	H	Me	H	CH_2CF_3	Et	NMR
1-7	H	Me	Me	Et	Me	NMR
1-8	H	Me	Me	i-Pr	Me	
1-9	H	Me	Me	CH_2CF_3	Me	
1-10	H	Me	NH_2	H	Me	NMR
1-11	H	Me	NH_2	Et	Me	78-80
1-12	H	Me	NH_2	n-Pr	Me	131-132
1-13	H	Me	NH_2	i-Pr	Me	178-180
1-14	H	Me	NH_2	CH_2CF_3	Me	
1-15	H	Me	NH_2	Et	NHMe	97-98
1-16	H	Me	NH_2	n-Pr	NHMe	NMR
1-17	H	Me	NH_2	i-Pr	NHMe	98-99
1-18	H	Me	NH_2	CH_2CF_3	NHMe	170-171
1-19	H	Me	$NHCOCF_3$	Et	Me	78-80
1-20	H	Me	$NHCOCF_3$	i-Pr	Me	
1-21	H	Me	$NHCOCF_3$	CH_2CF_3	Me	
1-22	H	Me	NHMe	Et	Me	NMR
1-23	H	Me	NHMe	i-Pr	Me	
1-24	H	Me	NHMe	CH_2CF_3	Me	
1-25	H	Et	H	i-Pr	Et	
1-26	H	Et	H	CH_2CF_3	Et	NMR
1-27	H	i-Pr	H	Et	Et	
1-28	H	i-Pr	H	i-Pr	Et	
1-29	H	i-Pr	H	CH_2CF_3	Et	NMR
1-30	H	$CH_2C{\equiv}CH$	H	Et	Et	

[Bảng 1-2]

Bảng 1 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^6	Giá trị tính chất vật lý
1-31	H	$CH_2C{\equiv}CH$	H	i-Pr	Et	
1-32	H	$CH_2C{\equiv}CH$	H	CH_2CF_3	Et	NMR
1-33	H	CH_2CF_3	H	Et	Et	
1-34	H	CH_2CF_3	H	i-Pr	Et	
1-35	H	CH_2CF_3	H	CH_2CF_3	Et	NMR
1-36	H	CH_2OCH_3	H	Et	Et	
1-37	H	CH_2OCH_3	H	i-Pr	Et	
1-38	H	CH_2OCH_3	H	CH_2CF_3	Et	NMR
1-39	4-Br	Me	H	Et	Et	NMR
1-40	4-Br	Me	H	i-Pr	Et	
1-41	4-Br	Me	H	CH_2CF_3	Et	NMR
1-42	4-Br	Me	Me	Et	Et	
1-43	4-Br	Me	Me	i-Pr	Et	
1-44	4-Br	Me	Me	CH_2CF_3	Et	
1-45	4-Br	Me	NH_2	Et	Et	
1-46	4-Br	Me	NH_2	i-Pr	Et	
1-47	4-Br	Me	NH_2	CH_2CF_3	Et	
1-48	4-Me	Me	H	Et	Et	
1-49	4-Me	Me	H	i-Pr	Et	
1-50	4-Me	Me	H	CH_2CF_3	Et	
1-51	4-Me	Me	Me	Et	Me	NMR
1-52	4-Me	Me	Me	i-Pr	Me	
1-53	4-Me	Me	Me	CH_2CF_3	Me	
1-54	4-Me	Me	NH_2	Et	Me	170-171
1-55	4-Me	Me	NH_2	i-Pr	Me	
1-56	4-Me	Me	NH_2	CH_2CF_3	Me	
1-57	4-Me	Me	NH_2	Et	NHMe	187-188
1-58	4-Et	Me	NH_2	Et	Me	214-215
1-59	4-Et	Me	NH_2	i-Pr	Me	
1-60	4-Et	Me	NH_2	CH_2CF_3	Me	

[Bảng 1-3]

Bảng 1 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^6	Giá trị tính chất vật lý
1-61	4-Et	Me	NH_2	Et	NHMe	NMR
1-62	5-F	Me	H	Et	Me	
1-63	5-F	Me	Me	Et	Me	NMR
1-64	5-F	Me	NH_2	Et	Me	155-156
1-65	5-F	Me	NH_2	n-Pr	Me	110-111
1-66	5-F	Me	NH_2	Et	NHMe	NMR
1-67	5-F	Me	NH_2	n-Pr	NHMe	NMR
1-68	5-Cl	Me	H	Et	Me	
1-69	5-Cl	Me	Me	Et	Me	143-144
1-70	5-Cl	Me	NH_2	Me	Me	218-221
1-71	5-Cl	Me	NH_2	Et	Me	176-177
1-72	5-Cl	Me	H	i-Pr	Me	
1-73	5-Cl	Me	Me	i-Pr	Me	
1-74	5-Cl	Me	NH_2	i-Pr	Me	172-173
1-75	5-Cl	Me	NH_2	Me	NHMe	190-191
1-76	5-Cl	Me	NH_2	Et	NHMe	203-204
1-77	5-Cl	Me	NH_2	i-Pr	NHMe	190-191
1-78	5-Cl	Me	NH_2	CH_2CF_3	NHMe	
1-79	5-Cl	Me	NH_2	Et	NMe_2	
1-80	5-Cl	Me	NH_2	i-Pr	NMe_2	154-156
1-81	5-Br	H	H	Et	Et	
1-82	5-Br	H	H	i-Pr	Et	
1-83	5-Br	H	H	CH_2CF_3	Et	187-188
1-84	5-Br	Me	H	Et	Et	152-153
1-85	5-Br	Me	H	i-Pr	Et	
1-86	5-Br	Me	H	CH_2CF_3	Et	NMR
1-87	5-Br	Me	Me	Et	Me	171-172
1-88	5-Br	Me	Me	i-Pr	Me	
1-89	5-Br	Me	Me	CH_2CF_3	Me	
1-90	5-Br	Me	NH_2	Et	Me	151-152

[Bảng 1-4]

Bảng 1 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^6	Giá trị tính chất vật lý
1-91	5-Br	Me	NH_2	i-Pr	Me	
1-92	5-Br	Me	NH_2	CH_2CF_3	Me	
1-93	5-Br	Me	NH_2	Et	NHMe	
1-94	5-Br	Me	NH_2	i-Pr	NHMe	
1-95	5-Br	Me	NH_2	CH_2CF_3	NHMe	
1-96	5-Me	H	H	Et	Me	
1-97	5-Me	H	Me	Et	Me	
1-98	5-Me	H	NH_2	Et	Me	226-227
1-99	5-Me	Me	H	Me	Me	
1-100	5-Me	Me	Me	Me	Me	
1-101	5-Me	Me	NH_2	H	Me	NMR
1-102	5-Me	Me	NH_2	Me	Me	170-171
1-103	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	Me	171-172
1-104	5-Me	Me	NH_2	n-Pr	Me	188-189
1-105	5-Me	Me	NH_2	CH_2CF_3	Me	
1-106	5-Me	Me	H	Et	Me	
1-107	5-Me	Me	Me	Et	Me	144-145
1-108	5-Me	Me	NH_2	Et	Me	80-83
1-109	5-Me	Me	$NHCOCF_3$	Et	Me	95-97
1-110	5-Me	Me	NH_2	$CH_2CH_2OCH_3$	Me	143-144
1-111	5-Me	Me	NH_2	Et	Et	NMR
1-112	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	Et	
1-113	5-Me	Me	NH_2	CH_2CF_3	Et	
1-114	5-Me	Me	NH_2	Me	NHMe	165-167
1-115	5-Me	Me	NH_2	Et	NHMe	196-197
1-116	5-Me	Me	NH_2	Et	NMe_2	NMR
1-117	5-Me	Me	NH_2	n-Pr	NHMe	161-162
1-118	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	NHMe	172-173
1-119	5-Me	Me	NH_2	CH_2CF_3	NHMe	
1-120	5-Me	Me	CN	H	Me	267-268

[Bảng 1-5]

Bảng 1 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^6	Giá trị tính chất vật lý
1-121	5-Me	Me	CN	Et	Me	202-203
1-122	5-Me	Me	CN	i-Pr	Me	
1-123	5-Me	Me	CN	CH_2CF_3	Me	
1-124	5-Me	Et	NH_2	Et	Me	79-80
1-125	5-Me	Et	NH_2	Et	NHMe	153-154
1-126	5-Me	n-Pr	NH_2	Et	Me	157-158
1-127	5-Me	i-Pr	NH_2	Et	Me	216-217
1-128	5-Me	c-Pr	NH_2	Et	Me	NMR
1-129	5-Et	Me	H	Me	Me	
1-130	5-Et	Me	Me	Me	Me	
1-131	5-Et	Me	NH_2	Me	Me	76
1-132	5-Et	Me	NH_2	Me	NHMe	98
1-133	5-Et	Me	H	Et	Me	
1-134	5-Et	Me	Me	Et	Me	NMR
1-135	5-Et	Me	NH_2	Et	Me	137-138
1-136	5-Et	Me	NH_2	Et	NHMe	166-167
1-137	5-Et	Me	H	Et	Me	
1-138	5-Et	Me	Me	Et	Me	
1-139	5-Et	Me	NH_2	i-Pr	Me	80-81
1-140	5-Et	Me	NH_2	i-Pr	NHMe	73-74
1-141	$5\text{-}CH{=}CH_2$	Me	H	Et	Et	NMR
1-142	$5\text{-}CH{=}CH_2$	Me	Me	Et	Me	
1-143	$5\text{-}CH{=}CH_2$	Me	NH_2	Et	Me	NMR
1-144	5-C≡CH	Me	H	Et	Me	
1-145	5-C≡CH	Me	Me	Et	Me	
1-146	5-C≡CH	Me	NH_2	Et	Me	
1-147	5-c-Pr	Me	H	Et	Me	
1-148	5-c-Pr	Me	Me	Et	Me	NMR
1-149	5-c-Pr	Me	NH_2	Et	Me	
1-150	5-n-Pr	Me	H	Et	Me	

[Bảng 1-6]

Bảng 1 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^6	Giá trị tính chất vật lý
1-151	5-n-Pr	Me	Me	Et	Me	NMR
1-152	5-n-Pr	Me	NH_2	Et	Me	
1-153	5-i-Pr	Me	H	Et	Me	
1-154	5-i-Pr	Me	Me	Et	Me	NMR
1-155	5-i-Pr	Me	NH_2	Et	Me	65-66
1-156	5-i-Pr	Me	NH_2	Et	NHMe	65-66
1-157	5-n-pentyl	Me	Me	Et	Me	NMR
1-158	5-t-Bu	Me	Me	Et	Me	NMR
1-159	5-CH_2OH	Me	H	Et	Me	
1-160	5-CH_2OH	Me	Me	Et	Me	112-113
1-161	5-CH_2OH	Me	NH_2	Et	Me	178-179
1-162	5-CH_2OCH_3	Me	H	Et	Me	
1-163	5-CH_2OCH_3	Me	Me	Et	Me	123-124
1-164	5-CH_2OCH_3	Me	NH_2	Et	Me	NMR
1-165	5-CH_2SCH_3	Me	Me	Et	Me	NMR
1-166	5-CH_2SOCH_3	Me	Me	Et	Me	NMR
1-167	5-$CH_2SO_2CH_3$	Me	Me	Et	Me	NMR
1-168	5-CH_2SCH_3	Me	NH_2	Et	Me	
1-169	5-CH_2SOCH_3	Me	NH_2	Et	Me	
1-170	5-$CH_2SO_2CH_3$	Me	NH_2	Et	Me	
1-171	5-CH_2NHCH_3	Me	Me	Et	Me	NMR
1-172	5-$CH_2N(CH_3)_2$	Me	Me	Et	Me	NMR
1-173	5-$CH_2N(CH_2CH_3)_2$	Me	Me	Et	Me	NMR
1-174	5-CH_2F	Me	Me	Et	Me	109-110
1-175	5-CH_2Cl	Me	Me	Et	Me	NMR
1-176	5-CHF_2	Me	H	Et	Me	
1-177	5-CHF_2	Me	Me	Et	Me	178-179
1-178	5-CHF_2	Me	NH_2	H	Me	259-260
1-179	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	Me	81-82
1-180	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	Me	172-173

[Bảng 1-7]

Bảng 1 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^6	Giá trị tính chất vật lý
1-181	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	Me	205-206
1-182	5-CHF_2	Me	NH_2	CH_2CF_3	Me	
1-183	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	Et	87-88
1-184	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	n-Pr	NMR
1-185	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	i-Pr	185-186
1-186	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	NHMe	175-176
1-187	5-CHF_2	Me	NH_2	Ac	Me	195-196
1-188	5-CHF_2	Me	NH_2	$CH_2C{\equiv}CH$	Me	142-143
1-189	5-CHF_2	Me	NH_2	CH_2CF_3	Me	184-185
1-190	5-CHF_2	Me	NH_2	$CH_2CH{=}CH_2$	Me	164-165
1-191	5-CHF_2	Me	NH_2	CH_2CHF_2	Me	161-162
1-192	5-CHF_2	Me	NH_2	CH_2CN	Me	227-228
1-193	5-CHF_2	Me	NH_2	CH_2-c-Pr	Me	206-207
1-194	5-CHF_2	Me	NH_2	CH_2SCH_3	Me	161-162
1-195	5-CHF_2	Me	NH_2	CH_2SOCH_3	Me	47-48
1-196	5-CHF_2	Me	NH_2	$CH_2SO_2CH_3$	Me	79-80
1-197	5-CHF_2	Me	NH_2	CO_2Me	Me	224-225
1-198	5-CHF_2	Me	NH_2	Ph	Me	187-188
1-199	5-CHF_2	Me	NH_2	SO_2Me	Me	225-226
1-200	5-CF_3	Me	Me	Et	Me	132-133
1-201	5-CF_3	Me	Me	i-Pr	Me	
1-202	5-CF_3	Me	Me	CH_2CF_3	Me	
1-203	5-CF_3	Me	Me	Et	NHMe	217-218
1-204	5-CF_3	Me	NH_2	Me	Me	108
1-205	5-CF_3	Me	NH_2	Et	Me	149-150
1-206	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	Me	NMR
1-207	5-CF_3	Me	NH_2	CH_2CF_3	Me	
1-208	5-CF_3	Me	NH_2	$CH_2C(CH_3){=}CH_2$	Me	168-169
1-209	5-CF_3	Me	NH_2	Me	NHMe	212-213
1-210	5-CF_3	Me	NH_2	Et	NHMe	173-174

[Bảng 1-8]

Bảng 1 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^6	Giá trị tính chất vật lý
1-211	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	NHMe	103-104
1-212	5-CF_3	Me	NH_2	CH_2CF_3	NHMe	
1-213	5-CF_3	Me	NH_2	Et	NMe_2	
1-214	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	NMe_2	171-173
1-215	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	NHOMe	103-105
1-216	5-CF_3	Me	NHMe	Et	Me	154-155
1-217	5-CF_3	Me	NHMe	Et	NHMe	204-205
1-218	5-CF_3	Me	NHMe	i-Pr	Me	
1-219	5-CF_3	Me	NHMe	i-Pr	NHMe	
1-220	5-CF_3	Me	NMe_2	Et	Me	150-151
1-221	5-CF_3	Me	NMe_2	Et	NHMe	183-184
1-222	5-CF_3	Me	NMe_2	i-Pr	Me	
1-223	5-CF_3	Me	NMe_2	i-Pr	NHMe	
1-224	5-OMe	Me	H	Et	Me	
1-225	5-OMe	Me	Me	Et	Me	NMR
1-226	5-OMe	Me	NH_2	Et	Me	115-118
1-227	5-OMe	Me	NH_2	Et	NHMe	186-188
1-228	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	Me	168-170
1-229	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	NHMe	159
1-230	5-OEt	Me	H	Et	Me	
1-231	5-OEt	Me	Me	Et	Me	
1-232	5-OEt	Me	NH_2	Et	Me	
1-233	5-OEt	Me	NH_2	Et	NHMe	232
1-234	5-O-i-Pr	Me	NH_2	Et	Me	104-106
1-235	5-$OCHF_2$	Me	H	Et	Me	
1-236	5-$OCHF_2$	Me	Me	Et	Me	
1-237	5-$OCHF_2$	Me	NH_2	Et	Me	140
1-238	5-$OCHF_2$	Me	NH_2	i-Pr	Me	121-122
1-239	5-$OCHF_2$	Me	NH_2	Et	NHMe	151-153
1-240	5-$OCHF_2$	Me	NH_2	i-Pr	NHMe	96

[Bảng 1-9]

Bảng 1 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^6	Giá trị tính chất vật lý
1-241	5-OCF_3	Me	H	Et	Et	51-52
1-242	5-OCF_3	Me	H	CH_2CF_3	Et	39-40
1-243	5-OCF_3	Me	H	CH_2CHF_2	Et	50-51
1-244	5-OCF_3	Me	Me	Et	Et	
1-245	5-OCF_3	Me	NH_2	Et	Me	87-88
1-246	5-NO_2	Me	Me	Et	Me	174-175
1-247	5-NH_2	Me	Me	Et	Me	NMR
1-248	5-NHAc	Me	Me	Et	Me	NMR
1-249	5-SMe	Me	NH_2	Et	Me	NMR
1-250	5-SOMe	Me	NH_2	Et	Me	
1-251	5-SO_2Me	Me	NH_2	Et	Me	
1-252	5-SEt	Me	Me	Et	Me	NMR
1-253	5-SOEt	Me	Me	Et	Me	
1-254	5-SO_2Et	Me	Me	Et	Me	
1-255	5-SCF_3	Me	H	Me	Et	NMR
1-256	5-SCF_3	Me	H	Et	Me	73-74
1-257	5-SCF_3	Me	H	Et	Et	NMR
1-258	5-SCF_3	Me	H	Et	i-Pr	157-158
1-259	5-SCF_3	Me	H	Et	n-Pr	102-103
1-260	5-SCF_3	Me	H	$CH_2CF_2CF_3$	Et	45-46
1-261	5-SCF_3	Me	H	$CH_2CF_2CHF_2$	Et	NMR
1-262	5-SCF_3	Me	H	CH_2CF_3	Et	NMR
1-263	5-SCF_3	Me	H	CH_2CHF_2	Et	NMR
1-264	5-SCF_3	Me	H	i-Pr	Et	139-140
1-265	5-SCF_3	Me	Me	Et	Me	101-102
1-266	5-SCF_3	Me	Me	i-Pr	Me	
1-267	5-SCF_3	Me	NH_2	Et	Me	
1-268	5-SCF_3	Me	NH_2	i-Pr	Me	
1-269	5-$SOCF_3$	Me	H	Et	Me	80-81
1-270	5-$SOCF_3$	Me	H	Et	Et	NMR

[Bảng 1-10]

Bảng 1 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^6	Giá trị tính chất vật lý
1-271	5-$SOCF_3$	Me	H	$CH_2CF_2CF_3$	Et	52-53
1-272	5-$SOCF_3$	Me	H	CH_2CF_3	Et	NMR
1-273	5-$SOCF_3$	Me	H	CH_2CHF_2	Et	NMR
1-274	5-$SOCF_3$	Me	H	i-Pr	Et	52-53
1-275	5-$SOCF_3$	Me	Me	Et	Me	NMR
1-276	5-$SOCF_3$	Me	Me	i-Pr	Me	
1-277	5-$SOCF_3$	Me	NH_2	Et	Me	
1-278	5-$SOCF_3$	Me	NH_2	i-Pr	Me	
1-279	5-SO_2CF_3	Me	H	Et	Me	84-85
1-280	5-SO_2CF_3	Me	H	Et	Et	NMR
1-281	5-SO_2CF_3	Me	H	$CH_2CF_2CF_3$	Et	59-60
1-282	5-SO_2CF_3	Me	H	$CH_2CF_2CHF_2$	Et	NMR
1-283	5-SO_2CF_3	Me	H	CH_2CF_3	Et	NMR
1-284	5-SO_2CF_3	Me	H	CH_2CHF_2	Et	NMR
1-285	5-SO_2CF_3	Me	H	i-Bu	Et	NMR
1-286	5-SO_2CF_3	Me	H	i-Pr	Et	50-51
1-287	5-SO_2CF_3	Me	H	n-Bu	Et	NMR
1-288	5-SO_2CF_3	Me	H	n-Pr	Et	NMR
1-289	5-SO_2CF_3	Me	Me	Et	Me	NMR
1-290*	5-SO_2CF_3	Me	Me	Et	Me	1,5424(22,1°C)
1-291	5-SO_2CF_3	Me	Me	Et	Et	NMR
1-292	5-SO_2CF_3	Me	Me	Et	NH_2	247-249
1-293	5-SO_2CF_3	Me	Me	Et	NHAc	208-210
1-294	5-SO_2CF_3	Me	Me	Et	NHMe	200-203
1-295	5-SO_2CF_3	Me	Me	Et	NMe_2	1,3568(20,0°C)
1-296	5-SO_2CF_3	Me	Me	Et	$NHCH_2CHF_2$	1,4270(21,4°C)
1-297	5-SO_2CF_3	Me	Me	i-Pr	Et	
1-298	5-SO_2CF_3	Me	Me	CH_2CF_3	Et	NMR
1-299	5-SO_2CF_3	Me	Me	CH_2CHF_2	Et	157-158
1-300	5-SO_2CF_3	Me	NH_2	H	Me	252-255

Ký hiệu "*" bên cạnh số hợp chất biểu thị đồng phân Z.

[Bảng 1-11]

Bảng 1 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^6	Giá trị tính chất vật lý
1-301	5-SO_2CF_3	Me	NH_2	Et	Me	1,4292(21,6°C)
1-302	5-SO_2CF_3	Me	NH_2	i-Pr	Me	
1-303	5-SO_2NMe_2	Me	Me	Et	Me	
1-304	5-CHO	Me	Me	Et	Me	190-191
1-305	5-CHO	Me	NH_2	Et	Me	242-243
1-306	5-CN	Me	Me	Et	Me	119-120
1-307	5-COMe	Me	Me	Et	Me	
1-308	5-CO_2H	Me	Me	Et	Me	265-266
1-309	5-CO_2Me	Me	Me	Et	Me	162-163
1-310	5-CO_2Me	Me	NH_2	Et	Me	198-199
1-311	5-CO_2Et	Me	NH_2	Et	Me	190-191
1-312	5-CONHMe	Me	Me	Et	Me	
1-313	5-CH=N-OMe	Me	Me	Et	Me	176-177
1-314	5-$CH(OCH_3)_2$	Me	Me	Et	Me	NMR
1-315	5-dioxan-2-yl	Me	Me	Et	Me	92-93
1-316	5-dioxolan-2-yl	Me	Me	Et	Me	NMR
1-317	5-Ph	Me	Me	Et	Me	NMR
1-318	5-(4-F-Ph)	Me	Me	Et	Me	168-169
1-319	5-(4-OMe-Ph)	Me	Me	Et	Me	88-89
1-320	5-(pyridin-3-yl)	Me	Me	Et	Me	NMR
1-321	5-(1-Me-1H-pyrazol-5-yl)	Me	Me	Et	Me	NMR
1-322	6-F	Me	H	Et	Et	1,4237(24,4°C)
1-323	6-F	Me	H	i-Pr	Et	1,4289(24,2°C)
1-324	6-F	Me	H	CH_2CF_3	Et	1,4664(24,0°C)
1-325	6-Cl	Me	H	Et	Et	1,4198(24,8°C)
1-326	6-Cl	Me	H	i-Pr	Et	1,4025(24,8°C)
1-327	6-Cl	Me	H	CH_2CF_3	Et	1,4707(24,7°C)
1-328	6-Br	Me	H	Et	Et	90-91
1-329	6-Me	Me	H	Et	Et	1,4235(24,5°C)
1-330	6-$CH=CH_2$	Me	H	Et	Et	1,3319(24,5°C)

[Bảng 1-12]

Bảng 1 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^6	Giá trị tính chất vật lý
1-331	6-SEt	Me	H	Et	Et	1,4222(23,1°C)
1-332	6-SOEt	Me	H	Et	Et	
1-333	6-SO_2Et	Me	H	Et	Et	1,3353(24,7°C)
1-334	7-Br	Me	H	Et	Et	139-140
1-335	7-Br	Me	H	CH_2CF_3	Et	148-150
1-336	7-Me	Me	H	Et	Et	139-140
1-337	7-Me	Me	H	CH_2CF_3	Et	117-118
1-338	7-Me	Me	H	i-Pr	Et	NMR
1-339	4-Et-5-Cl	Me	NH_2	Et	NHMe	
1-340	4,6-di-F	Me	H	Et	Et	59-60
1-341	4,6-di-F	Me	H	CH_2CF_3	Et	64-65
1-342	5,6-di-Me	Me	NH_2	Et	Me	216-218
1-343	4,6-di-Cl-5-OMe	Me	NH_2	Et	NHMe	159-161
1-344	4,6-di-Cl-5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	NHMe	177
1-345	4,6,7-tri-Cl-5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	NHMe	228-229
1-346		Me	H	Et	Et	49-50
1-347		Me	H	CH_2CF_3	Et	61-62
1-348		Me	H	CH_2CHF_2	Et	55-56
1-349		H	Me	Et	Me	252-253
1-350		Me	Me	Et	Me	161-162
1-351	H	Me	NH_2	n-Bu	Me	
1-352	H	Me	NH_2	i-Bu	Me	

Vòng tròn đậm màu đen biểu thị liên kết với vòng benzimidazol, và số biểu thị vị trí liên kết.

[Bảng 1-13]

Bảng 1 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^6	Giá trị tính chất vật lý
1-353	H	Me	NH_2	n-Bu	NHMe	
1-354	H	Me	NH_2	i-Bu	NHMe	
1-355	4-Cl	Me	NH_2	Et	Me	198-199
1-356	4-Cl	Me	NH_2	Et	NHMe	186-187
1-357	4-CF_3	Me	NH_2	Et	Me	
1-358	4-CF_3	Me	NH_2	Et	NHMe	
1-359	4-OMe	Me	NH_2	Me	Me	168-169
1-360	4-OMe	Me	NH_2	Et	Me	160-161
1-361	4-OMe	Me	NH_2	i-Pr	Me	188-190
1-362	4-OMe	Me	NH_2	Me	NHMe	173-174
1-363	4-OMe	Me	NH_2	Et	NHMe	176-177
1-364	4-OMe	Me	NH_2	i-Pr	NHMe	185-186
1-365	5-Cl	Me	NH_2	Me	NMe_2	106-108
1-366	5-I	Me	NH_2	Et	Me	
1-367	5-I	Me	NH_2	Et	NHMe	
1-368	5-Me	Me	NH_2	$CH_2CH_2OCH_3$	NHMe	154-155
1-369	5-Me	Me	NH_2	n-Bu	Me	167-168
1-370	5-Me	Me	NH_2	i-Bu	Me	170-171
1-371	5-Me	Me	NH_2	n-Bu	NHMe	
1-372	5-Me	Me	NH_2	i-Bu	NHMe	
1-373	5-Me	Me	NH_2	CH_2CF_3	Me	66-67
1-374	5-Me	Me	NH_2	CH_2CF_3	NHMe	
1-375	5-Me	Me	NH_2	c-Pr	Me	
1-376	5-Me	Me	NH_2	c-Pr	NHMe	
1-377	5-c-Pr	Me	NH_2	Et	Me	
1-378	5-c-Pr	Me	NH_2	Et	NHMe	
1-379	5-OMe	Me	NH_2	Me	NHMe	182-185
1-380	5-OMe	Me	NH_2	Me	Me	181-182
1-381	5-$OCHF_2$	Me	NH_2	Me	Me	
1-382	5-$OCHF_2$	Me	NH_2	Me	NHMe	181-182

[Bảng 1-14]

Bảng 1 (Tiếp tục)

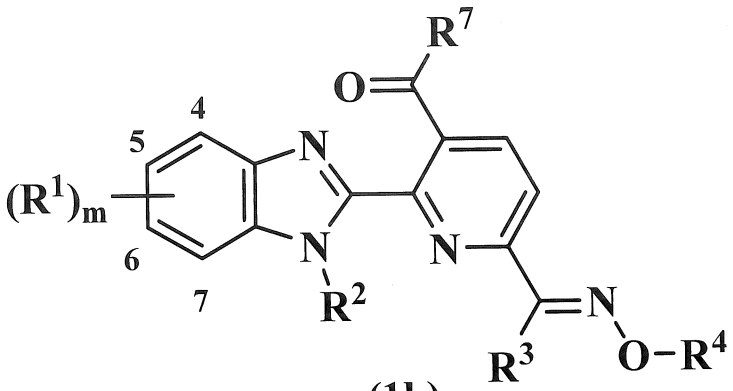
Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^6	Giá trị tính chất vật lý
1-383	5-CF_3	Me	NH_2	c-Pr	Me	
1-384	5-CF_3	Me	NH_2	c-Pr	NHMe	
1-385	4,5-di-Me	Me	NH_2	Et	Me	
1-386	4,5-di-Me	Me	NH_2	Et	NHMe	
1-387	5-NO_2	Me	NH_2	Et	Me	238-239
1-388	H	Me	NH_2	Et	Me	
1-389	H	Me	NH_2	Et	NHMe	
1-390	4,5-diMe	Me	NH_2	Et	Me	NMR
1-391	H	Me	NH_2	Me	Me	84-85
1-392	H	Me	NH_2	Me	NHMe	94-96
1-393	4-CF_3	Me	NH_2	Me	Me	245-246
1-394	4-CF_3	Me	NH_2	Et	Me	224-225
1-395	4-CF_3	Me	NH_2	Me	NHMe	NMR
1-396	4-CF_3	Me	NH_2	Et	NHMe	NMR
1-397	5-Me	Me	NH_2	$CH_2CH{=}CH_2$	NHMe	170-171
1-398	5-F	Me	NH_2	Me	NHMe	NMR
1-399	5-F	Me	NH_2	Me	Me	NMR
1-400	H	Me	NH_2	Et	N(Me) Ac	219-220
1-401	H	Me	NH_2	Et	NMe_2	NMR
1-402	5-OMe	Me	NH_2	Me	NMe_2	154-156
1-403	5-CF_3	Me	NH_2	CH_2CO_2Me	Me	NMR
1-404	5-CHF_2	Me	NH_2	n-Pr	Me	
1-405	H	Me	NH_2	n-Bu	Me	
1-406	5-OMe	Me	NH_2	n-Pr	Me	
1-407	5-CF_3	Me	NH_2	n-Pr	Me	
1-408	5-F	Me	NH_2	i-Pr	Me	
1-409	5-Cl	Me	NH_2	n-Pr	Me	
1-410	5-Et	Me	NH_2	n-Pr	Me	
1-411	5-Br	Me	NH_2	Me	Me	
1-412	5-F	Me	NH_2	i-Pr	NHMe	
1-413	5-OMe	Me	NH_2	n-Pr	NHMe	

[Bảng 1-15]

Bảng 1 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^6	Giá trị tính chất vật lý
1-414	5-Et	Me	NH_2	n-Pr	NHMe	
1-415	5-CF_3	Me	NH_2	n-Pr	NHMe	
1-416	5-Cl	Me	NH_2	n-Pr	NHMe	
1-417	5-i-Pr	Me	NH_2	n-Pr	NHMe	
1-418	5-CHF_2	Me	NH_2	n-Pr	NHMe	
1-419	5-i-Pr	Me	NH_2	i-Pr	NHMe	
1-420	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	NHMe	
1-421	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	NHMe	
1-422	5-i-Pr	Me	NH_2	Me	NHMe	
1-423	5-Br	Me	NH_2	i-Pr	Me	
1-424	5-Br	Me	NH_2	n-Pr	Me	

[0003][Công thức hóa học 28]



(1b)

Các số vị trí trong bảng biểu thị các số được chỉ định trong công thức chung (1b).

[0004][Bảng 2-1]

Bảng 2

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^7	Giá trị tính chất vật lý
2-1	H	Me	H	Et	OMe	109-110
2-2	H	Me	Me	Et	OH	239-241
2-3	H	Me	Me	Et	OMe	111-113
2-4	H	Me	Me	Et	OEt	80-83
2-5	H	Me	Me	Et	NMe_2	136-138
2-6	H	Me	NH_2	H	OMe	232-233
2-7	H	Me	NH_2	Me	OMe	172-173
2-8	H	Me	NH_2	Et	OMe	
2-9	4-CO_2Me	Me	Me	Et	OMe	
2-10	4-CO_2Me	Me	NH_2	Et	OMe	177-178
2-11	4-CO_2Me	Me	NH_2	CH_2CF_3	OMe	77-78
2-12	5-Cl	Me	NH_2	H	OMe	256-258
2-13	5-Cl	Me	NH_2	Et	OH	277
2-14	5-Cl	Me	H	Et	OMe	
2-15	5-Cl	Me	Me	Et	OMe	
2-16	5-Cl	Me	NH_2	Et	OMe	175-176
2-17	5-Cl	Me	NH_2	Et	OEt	
2-18	5-Cl	Me	NH_2	Et	NH-t-Bu	81
2-19	5-Cl	Me	NH_2	Et	NMe_2	
2-20	5-Cl	Me	NH_2	i-Pr	OH	223-225
2-21	5-Cl	Me	NH_2	i-Pr	OMe	156
2-22	5-Cl	Me	NH_2	i-Pr	OEt	
2-23	5-Cl	Me	NH_2	i-Pr	NH-t-Bu	85-87
2-24	5-Cl	Me	NH_2	i-Pr	NMe_2	
2-25	5-Br	Me	H	Et	OMe	119-120
2-26	5-Br	Me	Me	Et	OMe	
2-27	5-Br	Me	NH_2	Et	OMe	
2-28	5-Me	Me	Me	Et	Me	135-138
2-29	5-Me	Me	Me	Et	CH_2CO_2Me	169-171
2-30	5-Me	Me	Me	Et	OH	252-253

[Bảng 2-2]

Bảng 2 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^7	Giá trị tính chất vật lý
2-31	5-Me	Me	Me	Et	OMe	142-144
2-32	5-Me	Me	Me	Et	OEt	121-122
2-33	5-Me	Me	Me	Et	NMe_2	199-201
2-34	5-Me	Me	NH_2	Et	H	206-207
2-35	5-Me	Me	NH_2	Et	Me	NMR
2-36	5-Me	Me	NH_2	Et	OMe	137-138
2-37	5-Me	Me	NH_2	Et	OEt	108-109
2-38	5-Me	Me	NH_2	Et	O-i-Pr	
2-39	5-CF_3	Me	H	Et	OEt	
2-40	5-CF_3	Me	Me	Et	OEt	
2-41	5-CF_3	Me	NH_2	H	OMe	241-242
2-42	5-CF_3	Me	NH_2	Me	OMe	170-171
2-43	5-CF_3	Me	NH_2	Et	OH	121-122
2-44	5-CF_3	Me	NH_2	Et	OMe	153-154
2-45	5-CF_3	Me	NH_2	Et	OEt	119-120
2-46	5-CF_3	Me	NH_2	Et	O-i-Pr	NMR
2-47	5-CF_3	Me	NH_2	Et	OCH_2CO_2Me	99-100
2-48	5-CF_3	Me	NH_2	Et	NHMe	153-154
2-49	5-CF_3	Me	NH_2	Et	NHEt	178-179
2-50	5-CF_3	Me	NH_2	Et	NH-i-Pr	182-183
2-51	5-CF_3	Me	NH_2	Et	NH-t-Bu	107-108
2-52	5-CF_3	Me	NH_2	Et	NMe_2	NMR
2-53	5-CF_3	Me	NH_2	n-Pr	OH	202-203
2-54	5-CF_3	Me	NH_2	n-Pr	OMe	145-146
2-55	5-CF_3	Me	NH_2	n-Pr	NHMe	178-179
2-56	5-CF_3	Me	NH_2	n-Pr	NHEt	136-137
2-57	5-CF_3	Me	NH_2	n-Pr	NH-i-Pr	180-181
2-58	5-CF_3	Me	NH_2	n-Pr	NH-t-Bu	NMR
2-59	5-CF_3	Me	NH_2	n-Pr	OEt	110-111
2-60	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	OH	256-257

[Bảng 2-3]

Bảng 2 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^7	Giá trị tính chất vật lý
2-61	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	OMe	108-109
2-62	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	OEt	NMR
2-63	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	O-i-Pr	NMR
2-64	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	OCH_2CO_2Me	108-109
2-65	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	NHMe	NMR
2-66	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	NHEt	91-92
2-67	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	NH-i-Pr	87-88
2-68	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	NH-t-Bu	72-73
2-69	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	NMe_2	NMR
2-70	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	N(Me)OMe	138-139
2-71	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	SEt	NMR
2-72	5-CF_3	Me	NH_2	CH_2CF_3	OMe	150-151
2-73	5-CF_3	Me	NH_2	CH_2CF_3	OEt	NMR
2-74	5-CF_3	Me	NHAc	Et	OEt	131-132
2-75	5-SMe	Me	NH_2	Et	OMe	
2-76	5-SOMe	Me	NH_2	Et	OMe	
2-77	5-SO_2Me	Me	NH_2	Et	OMe	180-181
2-78	5-SMe	Me	NH_2	CH_2CF_3	OMe	
2-79	5-SOMe	Me	NH_2	CH_2CF_3	OMe	
2-80	5-SO_2Me	Me	NH_2	CH_2CF_3	OMe	230-231
2-81	5-SCF_3	Me	H	Et	OH	195-196
2-82	5-SCF_3	Me	H	Et	OMe	NMR
2-83	5-SCF_3	Me	H	Et	OEt	NMR
2-84	5-SCF_3	Me	H	Et	O-n-Pr	NMR
2-85	5-SCF_3	Me	H	Et	O-i-Pr	NMR
2-86	5-SCF_3	Me	H	Et	O-t-Bu	85-86
2-87	5-SCF_3	Me	H	Et	$OCH_2C{\equiv}CH$	151-152
2-88	5-SCF_3	Me	H	Et	NH_2	233-234
2-89	5-SCF_3	Me	H	Et	NHMe	169-170
2-90	5-SCF_3	Me	H	Et	NHEt	140-141

[Bảng 2-4]

Bảng 2 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^7	Giá trị tính chất vật lý
2-91	5-SCF_3	Me	H	Et	NH-i-Pr	142-143
2-92	5-SCF_3	Me	H	Et	NH-c-Pr	175-176
2-93	5-SCF_3	Me	H	Et	$NHCH_2CF_3$	160-161
2-94	5-SCF_3	Me	H	Et	$NHCH_2CHF_2$	162-163
2-95	5-SCF_3	Me	H	Et	NMe_2	118-119
2-96	5-SCF_3	Me	H	Et	NEt_2	109-110
2-97	5-SCF_3	Me	H	Et	N(Me)Et	114-115
2-98	5-SCF_3	Me	H	Et	N(Me)-i-Pr	153-154
2-99	5-SCF_3	Me	H	Et	$NHSO_2NMe_2$	173-175
2-100	5-SCF_3	Me	H	Et	pyrrolidin-1-yl	72-73
2-101	5-SCF_3	Me	H	CH_2CF_3	OMe	92-93
2-102	5-SCF_3	Me	Me	H	OMe	NMR
2-103	5-SCF_3	Me	Me	Me	OMe	NMR
2-104	5-SCF_3	Me	Me	Et	OH	164-165
2-105	5-SCF_3	Me	Me	Et	OMe	121-122
2-106*	5-SCF_3	Me	Me	Et	OMe	NMR
2-107	5-SCF_3	Me	Me	Et	OEt	106-107
2-108	5-SCF_3	Me	Me	Et	NHMe	161-162
2-109	5-SCF_3	Me	Me	Et	NMe_2	159-160
2-110	5-SCF_3	Me	Me	i-Pr	OMe	NMR
2-111	5-SCF_3	Me	Me	t-Bu	OMe	NMR
2-112	5-SCF_3	Me	Me	CH_2CF_3	OMe	159-160
2-113	5-SCF_3	Me	Me	$CH_2CH{=}CH_2$	OMe	NMR
2-114	5-SCF_3	Me	Me	CH_2CHF_2	OMe	NMR
2-115	5-SCF_3	Me	Me	CH_2CO_2H	OMe	
2-116	5-SCF_3	Me	Me	Bn	OMe	NMR
2-117	5-SCF_3	Me	Me	CH_2(4-Cl-Ph)	OMe	NMR
2-118	5-SCF_3	Me	Me	$CH(CH_3)Ph$	OMe	
2-119	5-SCF_3	Me	Me	CH_2CH_2(4-Cl-Ph)	OMe	NMR
2-120	5-SCF_3	Me	$CH_2CO_2CH_3$	Et	OMe	1,4963(20,1°C)

Ký hiệu "*" bên cạnh số hợp chất biểu thị đồng phân Z.

[Bảng 2-5]

Bảng 2 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^7	Giá trị tính chất vật lý
2-121	5-SCF_3	Me	NH_2	H	OMe	199-200
2-122	5-SCF_3	Me	NH_2	Me	OMe	59-60
2-123	5-SCF_3	Me	NH_2	Et	OMe	46-47
2-124	5-SCF_3	Me	NH_2	Et	OEt	
2-125	5-SCF_3	Me	NH_2	i-Pr	OMe	
2-126	5-SCF_3	Me	NH_2	n-Pr	OMe	NMR
2-127	5-SCF_3	Me	NH_2	n-Bu	OMe	NMR
2-128	5-SCF_3	Me	NH_2	n-Bu	O-n-Bu	92-93
2-129	5-SCF_3	Me	NH_2	CH_2CF_3	OMe	145-146
2-130	5-SCF_3	Me	NH_2	CH_2CF_3	OEt	
2-131	5-SCF_3	Me	NH_2	CH_2CF_3	NMe_2	
2-132	5-SCF_3	Me	NH_2	Bn	OBn	NMR
2-133	5-SCF_3	Me	NH_2	Bn	OMe	NMR
2-134	5-SCF_3	Me	NHMe	H	OMe	NMR
2-135	5-SCF_3	Me	NHMe	Et	OMe	NMR
2-136	5-SCF_3	Me	NMe_2	Et	OMe	NMR
2-137	5-SCF_3	Me	OMe	H	OMe	224-226
2-138	5-SCF_3	Me	OMe	Et	OMe	108-109
2-139	5-$SOCF_3$	Me	H	Et	OH	
2-140	5-$SOCF_3$	Me	H	Et	OMe	
2-141	5-$SOCF_3$	Me	H	Et	OEt	
2-142	5-$SOCF_3$	Me	H	Et	O-n-Pr	
2-143	5-$SOCF_3$	Me	H	Et	O-i-Pr	
2-144	5-$SOCF_3$	Me	H	Et	O-t-Bu	
2-145	5-$SOCF_3$	Me	H	Et	$OCH_2C{\equiv}CH$	
2-146	5-$SOCF_3$	Me	H	Et	NH_2	
2-147	5-$SOCF_3$	Me	H	Et	NHMe	NMR
2-148	5-$SOCF_3$	Me	H	Et	NHEt	
2-149	5-$SOCF_3$	Me	H	Et	NH-i-Pr	
2-150	5-$SOCF_3$	Me	H	Et	NH-c-Pr	

[Bảng 2-6]

Bảng 2 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^7	Giá trị tính chất vật lý
2-151	5-$SOCF_3$	Me	H	Et	$NHCH_2CF_3$	
2-152	5-$SOCF_3$	Me	H	Et	$NHCH_2CHF_2$	
2-153	5-$SOCF_3$	Me	H	Et	NMe_2	
2-154	5-$SOCF_3$	Me	H	Et	NEt_2	
2-155	5-$SOCF_3$	Me	H	Et	N(Me)Et	
2-156	5-$SOCF_3$	Me	H	Et	N(Me)-i-Pr	
2-157	5-$SOCF_3$	Me	H	Et	$NHSO_2NMe_2$	
2-158	5-$SOCF_3$	Me	H	Et	pyrrolidin-1-yl	
2-159	5-$SOCF_3$	Me	H	CH_2CF_3	OMe	NMR
2-160	5-$SOCF_3$	Me	Me	H	OMe	
2-161	5-$SOCF_3$	Me	Me	Me	OMe	
2-162	5-$SOCF_3$	Me	Me	Et	OH	
2-163	5-$SOCF_3$	Me	Me	Et	OMe	166-167
2-164	5-$SOCF_3$	Me	Me	Et	OEt	
2-165	5-$SOCF_3$	Me	Me	Et	NHMe	NMR
2-166	5-$SOCF_3$	Me	Me	Et	NMe_2	
2-167	5-$SOCF_3$	Me	Me	i-Pr	OMe	
2-168	5-$SOCF_3$	Me	Me	t-Bu	OMe	
2-169	5-$SOCF_3$	Me	Me	CH_2CF_3	OMe	
2-170	5-$SOCF_3$	Me	Me	$CH_2CH{=}CH_2$	OMe	
2-171	5-$SOCF_3$	Me	Me	CH_2CHF_2	OMe	
2-172	5-$SOCF_3$	Me	Me	CH_2CO_2H	OMe	
2-173	5-$SOCF_3$	Me	Me	Bn	OMe	
2-174	5-$SOCF_3$	Me	Me	CH_2(4-Cl-Ph)	OMe	
2-175	5-$SOCF_3$	Me	Me	$CH(CH_3)Ph$	OMe	
2-176	5-$SOCF_3$	Me	Me	CH_2CH_2(4-Cl-Ph)	OMe	
2-177	5-$SOCF_3$	Me	$CH_2CO_2CH_3$	Et	OMe	
2-178	5-$SOCF_3$	Me	NH_2	H	OMe	
2-179	5-$SOCF_3$	Me	NH_2	Me	OMe	
2-180	5-$SOCF_3$	Me	NH_2	Et	OMe	

[Bảng 2-7]

Bảng 2 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^7	Giá trị tính chất vật lý
2-181	5-$SOCF_3$	Me	NH_2	Et	OEt	NMR
2-182	5-$SOCF_3$	Me	NH_2	i-Pr	OMe	
2-183	5-$SOCF_3$	Me	NH_2	n-Pr	OMe	
2-184	5-$SOCF_3$	Me	NH_2	n-Bu	OMe	
2-185	5-$SOCF_3$	Me	NH_2	n-Bu	O-n-Bu	
2-186	5-$SOCF_3$	Me	NH_2	CH_2CF_3	OMe	
2-187	5-$SOCF_3$	Me	NH_2	CH_2CF_3	OEt	
2-188	5-$SOCF_3$	Me	NH_2	CH_2CF_3	NMe_2	
2-189	5-$SOCF_3$	Me	NH_2	Bn	OBn	
2-190	5-$SOCF_3$	Me	NH_2	Bn	OMe	
2-191	5-$SOCF_3$	Me	NHMe	H	OMe	
2-192	5-$SOCF_3$	Me	NHMe	Et	OMe	
2-193	5-$SOCF_3$	Me	NMe_2	Et	OMe	
2-194	5-$SOCF_3$	Me	OMe	H	OMe	
2-195	5-$SOCF_3$	Me	OMe	Et	OMe	
2-196	5-SO_2CF_3	Me	H	Et	OH	
2-197	5-SO_2CF_3	Me	H	Et	OMe	
2-198	5-SO_2CF_3	Me	H	Et	OEt	
2-199	5-SO_2CF_3	Me	H	Et	O-n-Pr	
2-200	5-SO_2CF_3	Me	H	Et	O-i-Pr	
2-201	5-SO_2CF_3	Me	H	Et	O-t-Bu	
2-202	5-SO_2CF_3	Me	H	Et	$OCH_2C{\equiv}CH$	
2-203	5-SO_2CF_3	Me	H	Et	NH_2	
2-204	5-SO_2CF_3	Me	H	Et	NHMe	203-204
2-205	5-SO_2CF_3	Me	H	Et	NHEt	
2-206	5-SO_2CF_3	Me	H	Et	NH-i-Pr	
2-207	5-SO_2CF_3	Me	H	Et	NH-c-Pr	
2-208	5-SO_2CF_3	Me	H	Et	$NHCH_2CF_3$	
2-209	5-SO_2CF_3	Me	H	Et	$NHCH_2CHF_2$	
2-210	5-SO_2CF_3	Me	H	Et	NMe_2	

[Bảng 2-8]

Bảng 2 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^7	Giá trị tính chất vật lý
2-211	5-SO_2CF_3	Me	H	Et	NEt_2	
2-212	5-SO_2CF_3	Me	H	Et	N(Me)Et	
2-213	5-SO_2CF_3	Me	H	Et	N(Me)-i-Pr	
2-214	5-SO_2CF_3	Me	H	Et	$NHSO_2NMe_2$	
2-215	5-SO_2CF_3	Me	H	Et	pyrrolidin-1-yl	
2-216	5-SO_2CF_3	Me	H	CH_2CF_3	OMe	NMR
2-217	5-SO_2CF_3	Me	Me	H	OMe	
2-218	5-SO_2CF_3	Me	Me	Me	OMe	
2-219	5-SO_2CF_3	Me	Me	Et	OH	249-250
2-220	5-SO_2CF_3	Me	Me	Et	OMe	88-89
2-221	5-SO_2CF_3	Me	Me	Et	OEt	NMR
2-222	5-SO_2CF_3	Me	Me	Et	Me	179-180
2-223	5-SO_2CF_3	Me	Me	Et	NH_2	239-240
2-224	5-SO_2CF_3	Me	Me	Et	NHAc	181-184
2-225	5-SO_2CF_3	Me	Me	Et	NHMe	199-200
2-226	5-SO_2CF_3	Me	Me	Et	NMe_2	191-193
2-227	5-SO_2CF_3	Me	Me	Et	N(Me)OMe	141-143
2-228	5-SO_2CF_3	Me	Me	i-Pr	OMe	
2-229	5-SO_2CF_3	Me	Me	i-Pr	OEt	
2-230	5-SO_2CF_3	Me	Me	t-Bu	OMe	
2-231	5-SO_2CF_3	Me	Me	CH_2CF_3	OMe	186-187
2-232	5-SO_2CF_3	Me	Me	$CH_2CH{=}CH_2$	OMe	
2-233	5-SO_2CF_3	Me	Me	CH_2CHF_2	OMe	
2-234	5-SO_2CF_3	Me	Me	CH_2CO_2H	OMe	
2-235	5-SO_2CF_3	Me	Me	Bn	OMe	
2-236	5-SO_2CF_3	Me	Me	CH_2(4-Cl-Ph)	OMe	
2-237	5-SO_2CF_3	Me	Me	$CH(CH_3)Ph$	OMe	
2-238	5-SO_2CF_3	Me	Me	CH_2CH_2(4-Cl-Ph)	OMe	
2-239	5-SO_2CF_3	Me	$CH_2CO_2CH_3$	Et	OMe	
2-240	5-SO_2CF_3	Me	NH_2	H	OMe	

[Bảng 2-9]

Bảng 2 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^7	Giá trị tính chất vật lý
2-241	5-SO_2CF_3	Me	NH_2	Me	OMe	
2-242	5-SO_2CF_3	Me	NH_2	Et	OMe	
2-243	5-SO_2CF_3	Me	NH_2	Et	OEt	NMR
2-244	5-SO_2CF_3	Me	NH_2	i-Pr	OMe	
2-245	5-SO_2CF_3	Me	NH_2	n-Pr	OMe	
2-246	5-SO_2CF_3	Me	NH_2	n-Bu	OMe	
2-247	5-SO_2CF_3	Me	NH_2	n-Bu	O-n-Bu	
2-248	5-SO_2CF_3	Me	NH_2	CH_2CF_3	OMe	
2-249	5-SO_2CF_3	Me	NH_2	CH_2CF_3	OEt	137-138
2-250	5-SO_2CF_3	Me	NH_2	CH_2CF_3	NMe_2	207-208
2-251	5-SO_2CF_3	Me	NH_2	Bn	OBn	
2-252	5-SO_2CF_3	Me	NH_2	Bn	OMe	
2-253	5-SO_2CF_3	Me	NHMe	H	OMe	
2-254	5-SO_2CF_3	Me	NHMe	Et	OMe	
2-255	5-SO_2CF_3	Me	NMe_2	Et	OMe	
2-256	5-SO_2CF_3	Me	OMe	H	OMe	
2-257	5-SO_2CF_3	Me	OMe	Et	OMe	
2-258	5-Me-6-Br	Me	Me	Et	Me	192-193
2-259	5,7-di-Br	Me	H	Et	OMe	127-128
2-260	5,7-di-Cl	Me	H	Et	OMe	NMR
2-261	5-Me-6,7-di-Br	Me	Me	Et	Me	221-224
2-262	H	Me	NH_2	i-Pr	OMe	NMR
2-263	H	Me	NH_2	i-Pr	OH	183-184
2-264	H	Me	NH_2	i-Pr	NHEt	
2-265	H	Me	NH_2	i-Pr	NEt_2	
2-266	H	Me	NH_2	i-Pr	$NHCH_2CF_3$	188-189
2-267	H	Me	NH_2	i-Pr	pyrrolidin-1-yl	
2-268	H	Me	NH_2	i-Pr	N(Me)OMe	
2-269	H	Me	NH_2	CH_2CF_3	OH	NMR
2-270	H	Me	NH_2	CH_2CF_3	OMe	NMR

[Bảng 2-10]

Bảng 2 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^7	Giá trị tính chất vật lý
2-271	H	Me	NH_2	CH_2CF_3	NHEt	
2-272	H	Me	NH_2	CH_2CF_3	NEt_2	
2-273	H	Me	NH_2	CH_2CF_3	$NHCH_2CF_3$	
2-274	H	Me	NH_2	CH_2CF_3	pyrrolidin-1-yl	
2-275	H	Me	NH_2	CH_2CF_3	N(Me)OMe	NMR
2-276	5-Me	Me	NH_2	Et	NMe_2	175-176
2-277	5-Me	Me	NH_2	Et	NEt_2	161-162
2-278	5-Me	Me	NH_2	Et	NH(thietan-3-yl)	199-200
2-279	5-Me	Me	NH_2	Et	NHEt	
2-280	5-Me	Me	NH_2	Et	NH(1,1-dioxothietan-3-yl)	
2-281	5-Me	Me	NH_2	Et	$NHCH_2CF_3$	194-195
2-282	5-Me	Me	NH_2	CH_2CF_3	OH	NMR
2-283	5-Me	Me	NH_2	CH_2CF_3	OMe	NMR
2-284	5-Me	Me	NH_2	CH_2CF_3	$NHCH_2CF_3$	
2-285	5-Me	Me	NH_2	CH_2CF_3	NEt_2	NMR
2-286	5-Me	Me	NH_2	CH_2CF_3	NHEt	NMR
2-287	5-Me	Me	NH_2	CH_2CF_3	pyrrolidin-1-yl	
2-288	5-Me	Me	NH_2	CH_2CF_3	N(Me)OMe	NMR
2-289	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	$NHNH_2$	NMR
2-290	5-CF_3	Me	NH_2	Me	NHEt	193-194
2-291	5-CF_3	Me	NH_2	Me	NH_2	233-234
2-292	5-CF_3	Me	NH_2	Me	OH	161-162
2-293	5-CF_3	Me	NH_2	Me	OPh	69-70
2-294	5-CF_3	Me	NH_2	Me	O-c-Bu	NMR
2-295	5-CF_3	Me	NH_2	Et	NH-c-Pr	
2-296	5-CF_3	Me	NH_2	Et	NHPh	
2-297	5-CF_3	Me	NH_2	Et	NH(4-OMePh)	
2-298	5-CF_3	Me	NH_2	Et	NH(4-CF_3Ph)	
2-299	5-CF_3	Me	NH_2	Et	$NHCH_2CH_2Cl$	
2-300	5-CF_3	Me	NH_2	Et	NHOMe	

[Bảng 2-11]

Bảng 2 (Tiếp tục)

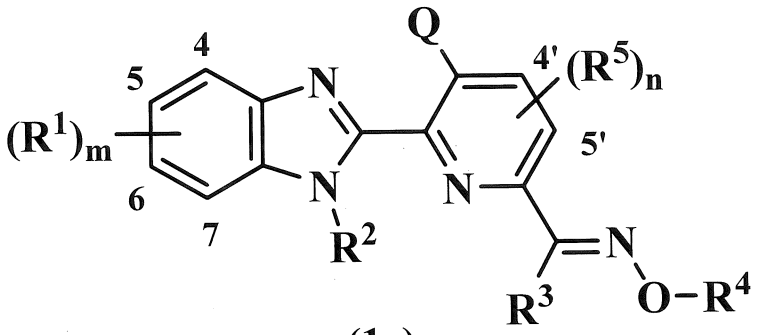
Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^7	Giá trị tính chất vật lý
2-301	5-CF_3	Me	NH_2	Et	NH(thietan-3-yl)	
2-302	5-CF_3	Me	NH_2	Et	$NHCH_2CF_3$	NMR
2-303	5-CF_3	Me	NH_2	Et	$NHCH_2CN$	
2-304	5-CF_3	Me	NH_2	Et	NHOEt	NMR
2-305	5-CF_3	Me	NH_2	Et	NHO-i-Pr	NMR
2-306	5-CF_3	Me	NH_2	Et	NHO-n-Pr	NMR
2-307	5-CF_3	Me	NH_2	Et	$NHCH_2CHF_2$	
2-308	5-CF_3	Me	NH_2	Et	NH(3,3-difloxyclobutan)	NMR
2-309	5-CF_3	Me	NH_2	Et	NMe_2	
2-310	5-CF_3	Me	NH_2	Et	NEt_2	NMR
2-311	5-CF_3	Me	NH_2	Et	$N(Me)CH_2C{\equiv}CH$	NMR
2-312	5-CF_3	Me	NH_2	Et	$NH(CH_2C{\equiv}CH)$	NMR
2-313	5-CF_3	Me	NH_2	Et	$NHOCH_2CH{=}CH_2$	NMR
2-314	5-CF_3	Me	NH_2	Et	N(Me)Et	NMR
2-315	5-CF_3	Me	NH_2	Et	N(Me)-i-Pr	NMR
2-316	5-CF_3	Me	NH_2	Et	N(Et)-i-Pr	NMR
2-317	5-CF_3	Me	NH_2	Et	N(Me)OMe	NMR
2-318	5-CF_3	Me	NH_2	Et	NH(tetrahydrofuran-3-yl)	
2-319	5-CF_3	Me	NH_2	Et	pyrrolidin-1-yl	NMR
2-320	5-CF_3	Me	NH_2	Et	3-pyrrolin-1-yl	
2-321	5-CF_3	Me	NH_2	Et	morphorin-4-yl	NMR
2-322	5-CF_3	Me	NH_2	Et	3,3,4,4-tetraflopyrrolidin-1-yl	NMR
2-323	5-CF_3	Me	NH_2	Et	thiazolidin-3-yl	NMR
2-324	5-CF_3	Me	NH_2	Et	NH(thiazol-2-yl)	NMR
2-325	5-CF_3	Me	NH_2	Et	$NHCH_2CHF_2$	NMR
2-326	5-CF_3	Me	NH_2	Et	$NHNMe_2$	NMR
2-327	5-Me	Me	NH_2	CH_2CF_3	$NHCH_2CH_2F$	NMR
2-328	5-Me	Me	NH_2	CH_2CF_3	$NHCH_2CHF_2$	NMR
2-329	5-Me	Me	NH_2	CH_2CF_3	NH-c-Pr	NMR
2-330	5-Me	Me	NH_2	CH_2CF_3	NHCH(Me)-c-Pr	NMR

[Bảng 2-12]

Bảng 2 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^7	Giá trị tính chất vật lý
2-331	5-Me	Me	NH_2	CH_2CF_3	$NHCH_2CH{=}CH_2$	NMR
2-332	5-Me	Me	NH_2	CH_2CF_3	$NHCH_2CH_2OMe$	NMR
2-333	5-Me	Me	NH_2	CH_2CF_3	NH-oxolane-2-one-3-yl	NMR
2-334	5-Me	Me	NH_2	CH_2CF_3	NH[(1R)-2-metoxy-1-metyletyl]	NMR
2-335	5-Me	Me	NH_2	CH_2CF_3	$NHCH_2CH(OMe)_2$	NMR
2-336	5-Me	Me	NH_2	CH_2CF_3	NHOMe	NMR
2-337	5-Me	Me	NH_2	CH_2CF_3	NHOEt	NMR
2-338	5-Me	Me	NH_2	CH_2CF_3	$NHOCH_2CH{=}CH_2$	NMR
2-339	5-Me	Me	NH_2	CH_2CF_3	N(Me)Et	NMR
2-340	5-Me	Me	NH_2	CH_2CF_3	N(Me)-i-Pr	NMR
2-341	5-Me	Me	NH_2	CH_2CF_3	N(Et)-i-Pr	NMR
2-342	5-Me	Me	NH_2	CH_2CF_3	3,3,4,4-tetraflopyrrolidin-1-yl	NMR
2-343	5-Me	Me	NH_2	CH_2CF_3	$N(Me)CH_2C{\equiv}CH$	NMR
2-344	5-Me	Me	NH_2	CH_2CF_3	N(Me)OH	NMR
2-345	5-CF_3	Me	NH_2	Me	N(Me)OMe	NMR
2-346	5-Me	Me	NH_2	Et	N(Me)OMe	NMR

[Công thức hóa học 29]



(1c)

Các số vị trí trong bảng biểu thị các số được chỉ định trong công thức chung (1c).

[Bảng 3-1]

Bảng 3

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
3-1	H	Me	Me	Et	H	H	
3-2	H	Me	Me	Et	H	Cl	116-118
3-3	H	Me	Me	Et	H	C(Me)=N-OEt	142-143
3-4	H	Me	Me	CH_2CF_3	H	H	145-146
3-5	H	Me	Me	CH_2CF_3	H	Cl	
3-6	5-Me	Me	Me	H	H	Cl	212-213
3-7	5-Me	Me	Me	Et	H	F	
3-8	5-Me	Me	Me	Et	H	Cl	133-135
3-9	5-Me	Me	Me	Et	H	OMe	130-131
3-10	5-Me	Me	Me	Et	H	OEt	153-155
3-11	5-Me	Me	Me	Et	H	SMe	87-89
3-12	5-Me	Me	Me	Et	H	SOMe	202-203
3-13	5-Me	Me	Me	Et	H	$C(OEt)=CH_2$	90-93
3-14	5-Me	Me	$CONH_2$	Et	H	OEt	224-225
3-15	5-Me	Me	NH_2	Me	H	SCH_2(4-t-BuPh)	NMR
3-16	5-Me	Me	NH_2	Et	H	F	87-88
3-17	5-Me	Me	NH_2	Et	H	Cl	131-132
3-18	5-Me	Me	NH_2	Et	H	CN	235-237
3-19	5-Me	Me	NH_2	Et	H	CF_3	NMR
3-20	5-Me	Me	NH_2	Et	H	CH_2OH	134-136
3-21	5-Me	Me	NH_2	Et	H	$CH(OH)CH_3$	NMR
3-22	5-Me	Me	NH_2	Et	H	$CH(OH)CH_2OH$	NMR
3-23	5-Me	Me	NH_2	Et	H	$CH=CH_2$	NMR
3-24	5-Me	Me	NH_2	Et	H	$C(Me)=CH_2$	NMR
3-25	5-Me	Me	NH_2	Et	H	CH=N-NHMe	84-85
3-26	5-Me	Me	NH_2	Et	H	CH=N-OMe	212-213
3-27	5-Me	Me	NH_2	Et	H	SCF_3	116-117
3-28	5-Me	Me	NH_2	Et	H	SCH_2(4-t-BuPh)	116-117
3-29	5-Me	Me	NH_2	Et	H	SMe	165-166
3-30	5-Me	Me	NH_2	Et	H	SOMe	

[Bảng 3-2]

Bảng 3 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
3-31	5-Me	Me	NH_2	Et	H	SEt	119-120
3-32	5-Me	Me	NH_2	Et	H	SOEt	
3-33	5-Me	Me	NH_2	Et	H	SO(=NH)Me	NMR
3-34	5-Me	Me	NH_2	Et	H	2,2-di-Me-1,3-dioxolan-4-yl	NMR
3-35	5-Me	Me	NH_2	Et	H	2-oxo-1,3-dioxolan-4-yl	NMR
3-36	5-Me	Me	NH_2	Et	H	1,3-dioxan-2-yl	NMR
3-37	5-Me	Me	NH_2	Et	H	1,3-dioxolan-2-yl	NMR
3-38	5-Me	Me	NH_2	Et	H	Me	
3-39	5-Me	Me	NH_2	Et	H	5-Me-1,2,4-oxadiazol-3-yl	147-148
3-40	5-Me	Me	NH_2	Et	H	1H-imidazol-2-yl	243-244
3-41	5-Me	Me	NH_2	Et	4'-Me	Cl	200-201
3-42	5-Me	Me	NH_2	Et	4'-Me	CO_2Me	
3-43	5-Me	Me	NH_2	Et	4'-Me	SO_2Me	251-252
3-44	5-Me	Me	NH_2	Et	4'-Me	SO_2NHMe	NMR
3-45	5-Et	Me	NH_2	Me	H	SCH_2(4-t-BuPh)	NMR
3-46	5-Et	Me	NH_2	Et	4'-Me	SO_2Me	
3-47	5-Et	Me	NH_2	Et	4'-Me	SO_2NHMe	NMR
3-48	5-CHF_2	Me	Me	Et	H	SMe	201-202
3-49	5-CHF_2	Me	Me	Et	H	SOMe	
3-50	5-CHF_2	Me	Me	Et	H	SO(=NH)Me	100-101
3-51	5-CHF_2	Me	Me	Et	H	SO(=NMe)Me	NMR
3-52	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H	SEt	141-142
3-53	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H	SOEt	
3-54	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H	S-n-Pr	NMR
3-55	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H	SO-n-Pr	
3-56	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H	S-i-Pr	NMR
3-57	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H	SO-i-Pr	
3-58	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H	SCH_2(4-t-BuPh)	NMR
3-59	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H	SCH_2(4-t-BuPh)	NMR
3-60	5-CF_3	Me	NH_2	Et	4'-Br	SO_2NHMe	205-206

[Bảng 3-3]

Bảng 3 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
3-61	5-CF_3	Me	NH_2	Et	4'-Et	Cl	NMR
3-62	5-CF_3	Me	NH_2	Et	4'-Et	SMe	NMR
3-63	5-CF_3	Me	NH_2	Et	4'-Et	SOMe	208-209
3-64	5-CF_3	Me	NH_2	Et	4'-Et	SO_2Me	201-202
3-65	5-CF_3	Me	NH_2	Et	4'-Me	Cl	144-145
3-66	5-CF_3	Me	NH_2	Et	4'-Me	Br	128-129
3-67	5-CF_3	Me	NH_2	Et	4'-Me	CO_2Et	139-140
3-68	5-CF_3	Me	NH_2	Et	4'-Me	SMe	NMR
3-69	5-CF_3	Me	NH_2	Et	4'-Me	SOMe	NMR
3-70	5-CF_3	Me	NH_2	Et	4'-Me	SO_2Me	246-247
3-71	5-CF_3	Me	NH_2	Et	4'-Me	SO_2NHMe	102-103
3-72	5-CF_3	Me	NH_2	Et	4'-NH_2	SO_2NHMe	NMR
3-73	5-CF_3	Me	NH_2	Et	4'-NHMe	SO_2NHMe	134-135
3-74	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H	SCH_2(4-t-BuPh)	NMR
3-75	5-CF_3	Me	NHMe	Et	H	SCH_2(4-t-BuPh)	NMR
3-76	5-CF_3	Me	NMe_2	Et	H	SCH_2(4-t-BuPh)	NMR
3-77	5-$OCHF_2$	Me	NH_2	Et	H	SO_2NHMe	
3-78	5-$OCHF_2$	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2NHMe	
3-79	5-$OCHF_2$	Me	NH_2	Et	H	SCH_2(4-t-BuPh)	142
3-80	5-$OCHF_2$	Me	NH_2	i-Pr	H	SCH_2(4-t-BuPh)	154-157
3-81	5-SCF_3	Me	H	Et	H	CN	135-136
3-82	5-SCF_3	Me	H	Et	H	SMe	116-117
3-83	5-SCF_3	Me	H	Et	H	SOMe	202-203
3-84	5-SCF_3	Me	H	CH_2CF_3	H	CH_2OH	NMR
3-85	5-SCF_3	Me	H	CH_2CF_3	H	SEt	134-135
3-86*	5-SCF_3	Me	H	CH_2CF_3	H	SEt	106-107
3-87	5-SCF_3	Me	H	CH_2CF_3	H	SOEt	
3-88	5-SCF_3	Me	Me	Me	H	C(Me)=N-OMe	
3-89	5-SCF_3	Me	Me	Et	H	H	130-131
3-90	5-SCF_3	Me	Me	Et	H	C(Me)=N-OEt	NMR

Ký hiệu "*" bên cạnh số hợp chất biểu thị đồng phân Z.

[Bảng 3-4]

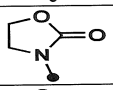
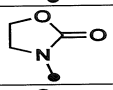
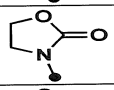
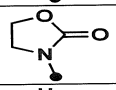
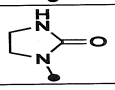
Bảng 3 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
3-91	5-SCF_3	Me	Me	Et	5'-Me	CO_2Et	1,3386 (22,2°C)
3-92*	5-SCF_3	Me	Me	Et	5'-Me	CO_2Et	139-141
3-93	5-SCF_3	Me	Me	i-Pr	H	C(Me)=N-O-i-Pr	NMR
3-94	5-SCF_3	Me	Me	t-Bu	H	C(Me)=N-O-t-Bu	NMR
3-95	5-SCF_3	Me	Me	Bn	H	C(Me)=N-OBn	NMR
3-96	5-SCF_3	Me	Me	CH_2CF_3	H	C(Me)=N-OCH_2CF_3	NMR
3-97	5-SCF_3	Me	Me	CH_2CHF_2	H	C(Me)=N-OCH_2CHF_2	NMR
3-98	5-SCF_3	Me	Me	$CH_2CH=CH_2$	H	C(Me)=N-$OCH_2CH=CH_2$	NMR
3-99	5-$SOCF_3$	Me	Me	Et	H	H	104-106
3-100	5-SO_2CF_3	Me	Me	Et	H	H	138-140
3-101	5-SO_2CF_3	Me	Me	Et	H	OMe	1,3913 (19,8°C)
3-102	5-SO_2CF_3	Me	Me	Et	H	SH	139-141
3-103	5-SO_2CF_3	Me	Me	Et	H	SMe	107-110
3-104	5-SO_2CF_3	Me	Me	Et	H	SOMe	
3-105	5-SO_2CF_3	Me	Me	Et	H	SCH_2CF_3	70-75
3-106	5-SO_2CF_3	Me	Me	Et	H	$SOCH_2CF_3$	
3-107	5-SO_2CF_3	Me	Me	Et	H	SBn	170-173
3-108	5-SO_2CF_3	Me	Me	Et	H	SCH_2(4-OMePh)	223-224
3-109	5-SO_2CF_3	Me	Me	Et	H	SCH_2(4-t-BuPh)	186-187
3-110	5-SO_2CF_3	Me	Me	Et	H	SCH_2(4-TMSPh)	172-175
3-111	5-SO_2CF_3	Me	Me	Et	H	NH_2	258-259
3-112	5-SO_2CF_3	Me	Me	Et	H	NHAc	189-190
3-113	5-SO_2CF_3	Me	Me	Et	H	NAc_2	NMR
3-114	5-Ph	Me	H	Et	H	Ph	NMR
3-115	5,6-di-Me	Me	NH_2	Et	H	H	187-189
3-116	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H	C(=S)NHEt	123-124

Ký hiệu "*" bên cạnh số hợp chất biểu thị đồng phân Z.

[Bảng 3-5]

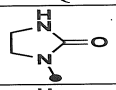
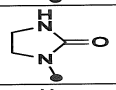
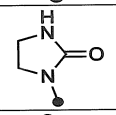
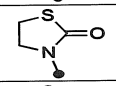
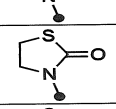
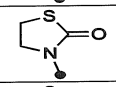
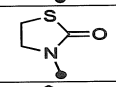
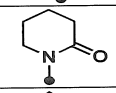
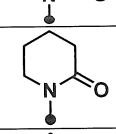
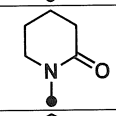
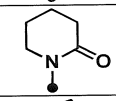
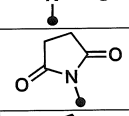
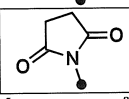
Bảng 3 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
3-117	H	Me	NH_2	Me	H	SCH_2(4-t-BuPh)	NMR
3-118	H	Me	NH_2	Et	H	SCH_2(4-t-BuPh)	98-99
3-119	5-$OCHF_2$	Me	NH_2	Me	H	SCH_2(4-t-BuPh)	181-182
3-120	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H	Cl	NMR
3-121	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H	$P(=O)(OMe)_2$	NMR
3-122	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H	$NHP(=O)(OEt)_2$	NMR
3-123	5-Me	Me	NH_2	Et	H	NHAc	NMR
3-124	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H	$NHSO_2Me$	182-183
3-125	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		
3-126	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		NMR
3-127	5-CF_3	Me	NH_2	iPr	H		
3-128	5-Me	Me	NH_2	Et	H		NMR
3-129	H	Me	NH_2	Et	H		NMR
3-130	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		NMR
3-131	5-CF_3	Me	NH_2	iPr	H		
3-132	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
3-133	H	Me	NH_2	Et	H		
3-134	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		130-131

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Bảng 3-6]

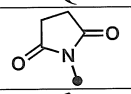
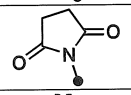
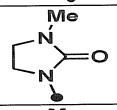
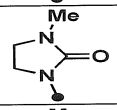
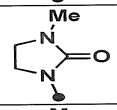
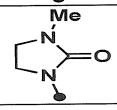
Bảng 3 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
3-135	5-CF_3	Me	NH_2	iPr	H		
3-136	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
3-137	H	Me	NH_2	Et	H		
3-138	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		NMR
3-139	5-CF_3	Me	NH_2	iPr	H		
3-140	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
3-141	H	Me	NH_2	Et	H		
3-142	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
3-143	5-CF_3	Me	NH_2	iPr	H		
3-144	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
3-145	H	Me	NH_2	Et	H		
3-146	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
3-147	5-CF_3	Me	NH_2	iPr	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Bảng 3-7]

Bảng 3 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
3-148	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
3-149	H	Me	NH_2	Et	H		
3-150	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
3-151	5-CF_3	Me	NH_2	iPr	H		
3-152	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
3-153	H	Me	NH_2	Et	H		
3-154	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H	N(Me)SO_2Me	
3-155	5-CF_3	Me	NH_2	iPr	H	N(Me)SO_2Me	
3-156	5-Me	Me	NH_2	Et	H	N(Me)SO_2Me	
3-157	H	Me	NH_2	Et	H	N(Me)SO_2Me	
3-158	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H	N(Et)SO_2Me	
3-159	5-CF_3	Me	NH_2	iPr	H	N(Et)SO_2Me	
3-160	5-Me	Me	NH_2	Et	H	N(Et)SO_2Me	
3-161	H	Me	NH_2	Et	H	N(Et)SO_2Me	
3-162	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H	N(Me)CO_2Me	
3-163	5-CF_3	Me	NH_2	iPr	H	N(Me)CO_2Me	
3-164	5-Me	Me	NH_2	Et	H	N(Me)CO_2Me	

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

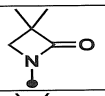
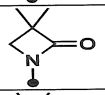
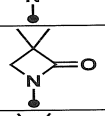
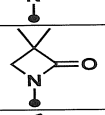
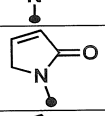
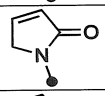
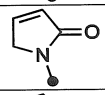
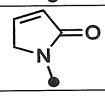
[Bảng 3-8]

Bảng 3 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
3-165	H	Me	NH_2	Et	H	$N(Me)CO_2Me$	
3-166	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H	$N(Et)CO_2Me$	
3-167	5-CF_3	Me	NH_2	iPr	H	$N(Et)CO_2Me$	
3-168	5-Me	Me	NH_2	Et	H	$N(Et)CO_2Me$	
3-169	H	Me	NH_2	Et	H	$N(Et)CO_2Me$	
3-170	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H	$NHCO_2Me$	
3-171	5-CF_3	Me	NH_2	iPr	H	$NHCO_2Me$	
3-172	5-Me	Me	NH_2	Et	H	$NHCO_2Me$	
3-173	H	Me	NH_2	Et	H	$NHCO_2Me$	
3-174	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H	$NHCO_2Et$	
3-175	5-CF_3	Me	NH_2	iPr	H	$NHCO_2Et$	
3-176	5-Me	Me	NH_2	Et	H	$NHCO_2Et$	
3-177	H	Me	NH_2	Et	H	$NHCO_2Et$	
3-178	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H	N(Me)Ac	
3-179	5-CF_3	Me	NH_2	iPr	H	N(Me)Ac	
3-180	5-Me	Me	NH_2	Et	H	N(Me)Ac	
3-181	H	Me	NH_2	Et	H	N(Me)Ac	
3-182	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H	N(Et)Ac	
3-183	5-CF_3	Me	NH_2	iPr	H	N(Et)Ac	
3-184	5-Me	Me	NH_2	Et	H	N(Et)Ac	
3-185	H	Me	NH_2	Et	H	N(Et)Ac	
3-186	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H	$N(NH_2)CO_2Me$	
3-187	5-CF_3	Me	NH_2	iPr	H	$N(NH_2)CO_2Me$	
3-188	5-Me	Me	NH_2	Et	H	$N(NH_2)CO_2Me$	
3-189	H	Me	NH_2	Et	H	$N(NH_2)CO_2Me$	

[Bảng 3-9]

Bảng 3 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
3-190	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
3-191	5-CF_3	Me	NH_2	iPr	H		
3-192	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
3-193	H	Me	NH_2	Et	H		
3-194	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
3-195	5-CF_3	Me	NH_2	iPr	H		
3-196	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
3-197	H	Me	NH_2	Et	H		
3-198	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H	NHC(=O)NHMe	
3-199	5-CF_3	Me	NH_2	iPr	H	NHC(=O)NHMe	
3-200	5-Me	Me	NH_2	Et	H	NHC(=O)NHMe	
3-201	H	Me	NH_2	Et	H	NHC(=O)NHMe	
3-202	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H	NHC(=O)NMe_2	
3-203	5-CF_3	Me	NH_2	iPr	H	NHC(=O)NMe_2	
3-204	5-Me	Me	NH_2	Et	H	NHC(=O)NMe_2	
3-205	H	Me	NH_2	Et	H	NHC(=O)NMe_2	
3-206	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H	N(Me)C(=O)NHMe	
3-207	5-CF_3	Me	NH_2	iPr	H	N(Me)C(=O)NHMe	
3-208	5-Me	Me	NH_2	Et	H	N(Me)C(=O)NHMe	
3-209	H	Me	NH_2	Et	H	N(Me)C(=O)NHMe	

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Bảng 3-10]

Bảng 3 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
3-210	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H	N(Me)C(=O)NMe_2	
3-211	5-CF_3	Me	NH_2	iPr	H	N(Me)C(=O)NMe_2	
3-212	5-Me	Me	NH_2	Et	H	N(Me)C(=O)NMe_2	
3-213	H	Me	NH_2	Et	H	N(Me)C(=O)NMe_2	
3-214	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H	NHC(=O)CH_2OMe	
3-215	5-CF_3	Me	NH_2	iPr	H	NHC(=O)CH_2OMe	
3-216	5-Me	Me	NH_2	Et	H	NHC(=O)CH_2OMe	
3-217	H	Me	NH_2	Et	H	NHC(=O)CH_2OMe	
3-218	H	Me	NH_2	Me	4'-Me	CO_2Me	
3-219	H	Me	NH_2	Me	4'-Me	SO_2Me	
3-220	H	Me	NH_2	Me	4'-Me	SO_2NHMe	
3-221	H	Me	NH_2	Et	4'-Me	CO_2Me	
3-222	H	Me	NH_2	Et	4'-Me	SO_2Me	
3-223	H	Me	NH_2	Et	4'-Me	SO_2NHMe	
3-224	H	Me	NH_2	i-Pr	4'-Me	CO_2Me	
3-225	H	Me	NH_2	i-Pr	4'-Me	SO_2Me	
3-226	H	Me	NH_2	i-Pr	4'-Me	SO_2NHMe	
3-227	5-Me	Me	NH_2	Me	4'-Me	CO_2Me	
3-228	5-Me	Me	NH_2	Me	4'-Me	SO_2Me	
3-229	5-Me	Me	NH_2	Me	4'-Me	SO_2NHMe	
3-230	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	4'-Me	CO_2Me	
3-231	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	4'-Me	SO_2Me	
3-232	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	4'-Me	SO_2NHMe	
3-233	5-OMe	Me	NH_2	Me	4'-Me	CO_2Me	
3-234	5-OMe	Me	NH_2	Me	4'-Me	SO_2Me	
3-235	5-OMe	Me	NH_2	Me	4'-Me	SO_2NHMe	
3-236	5-OMe	Me	NH_2	Et	4'-Me	CO_2Me	
3-237	5-OMe	Me	NH_2	Et	4'-Me	SO_2Me	
3-238	5-OMe	Me	NH_2	Et	4'-Me	SO_2NHMe	
3-239	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	4'-Me	CO_2Me	
3-240	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	4'-Me	SO_2Me	
3-241	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	4'-Me	SO_2NHMe	

[Bảng 3-11]

Bảng 3 (Tiếp tục)

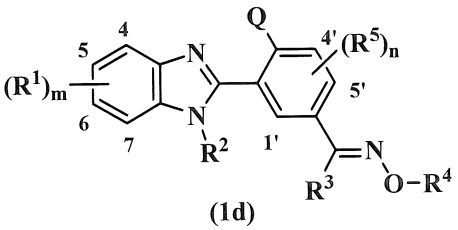
Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
3-242	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	4'-Me	CO_2Me	
3-243	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	4'-Me	SO_2Me	
3-244	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	4'-Me	SO_2NHMe	
3-245	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	4'-Me	CO_2Me	
3-246	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	4'-Me	SO_2Me	
3-247	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	4'-Me	SO_2NHMe	
3-248	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	4'-Me	CO_2Me	
3-249	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	4'-Me	SO_2Me	
3-250	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	4'-Me	SO_2NHMe	
3-251	5-CF_3	Me	NH_2	Me	4'-Me	CO_2Me	
3-252	5-CF_3	Me	NH_2	Me	4'-Me	SO_2Me	
3-253	5-CF_3	Me	NH_2	Me	4'-Me	SO_2NHMe	
3-254	5-CF_3	Me	NH_2	Et	4'-Me	CO_2Me	
3-255	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	4'-Me	CO_2Me	
3-256	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	4'-Me	SO_2Me	
3-257	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	4'-Me	SO_2NHMe	
3-258	H	Me	Me	Me	4'-Me	CO_2Me	
3-259	H	Me	Me	Me	4'-Me	SO_2Me	
3-260	H	Me	Me	Me	4'-Me	SO_2NHMe	
3-261	H	Me	Me	Et	4'-Me	CO_2Me	
3-262	H	Me	Me	Et	4'-Me	SO_2Me	
3-263	H	Me	Me	Et	4'-Me	SO_2NHMe	
3-264	H	Me	Me	i-Pr	4'-Me	CO_2Me	
3-265	H	Me	Me	i-Pr	4'-Me	SO_2Me	
3-266	H	Me	Me	i-Pr	4'-Me	SO_2NHMe	
3-267	5-Me	Me	Me	Me	4'-Me	CO_2Me	
3-268	5-Me	Me	Me	Me	4'-Me	SO_2Me	
3-269	5-Me	Me	Me	Me	4'-Me	SO_2NHMe	
3-270	5-Me	Me	Me	Et	4'-Me	CO_2Me	
3-271	5-Me	Me	Me	Et	4'-Me	SO_2Me	
3-272	5-Me	Me	Me	Et	4'-Me	SO_2NHMe	

[Bảng 3-12]

Bảng 3 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
3-273	5-Me	Me	Me	i-Pr	4'-Me	CO_2Me	
3-274	5-Me	Me	Me	i-Pr	4'-Me	SO_2Me	
3-275	5-Me	Me	Me	i-Pr	4'-Me	SO_2NHMe	
3-276	5-OMe	Me	Me	Me	4'-Me	CO_2Me	
3-277	5-OMe	Me	Me	Me	4'-Me	SO_2Me	
3-278	5-OMe	Me	Me	Me	4'-Me	SO_2NHMe	
3-279	5-OMe	Me	Me	Et	4'-Me	CO_2Me	
3-280	5-OMe	Me	Me	Et	4'-Me	SO_2Me	
3-281	5-OMe	Me	Me	Et	4'-Me	SO_2NHMe	
3-282	5-OMe	Me	Me	i-Pr	4'-Me	CO_2Me	
3-283	5-OMe	Me	Me	i-Pr	4'-Me	SO_2Me	
3-284	5-OMe	Me	Me	i-Pr	4'-Me	SO_2NHMe	
3-285	5-CHF_2	Me	Me	Me	4'-Me	CO_2Me	
3-286	5-CHF_2	Me	Me	Me	4'-Me	SO_2Me	
3-287	5-CHF_2	Me	Me	Me	4'-Me	SO_2NHMe	
3-288	5-CHF_2	Me	Me	Et	4'-Me	CO_2Me	
3-289	5-CHF_2	Me	Me	Et	4'-Me	SO_2Me	
3-290	5-CHF_2	Me	Me	Et	4'-Me	SO_2NHMe	
3-291	5-CHF_2	Me	Me	i-Pr	4'-Me	CO_2Me	
3-292	5-CHF_2	Me	Me	i-Pr	4'-Me	SO_2Me	
3-293	5-CHF_2	Me	Me	i-Pr	4'-Me	SO_2NHMe	
3-294	5-CF_3	Me	Me	Me	4'-Me	CO_2Me	
3-295	5-CF_3	Me	Me	Me	4'-Me	SO_2Me	
3-296	5-CF_3	Me	Me	Me	4'-Me	SO_2NHMe	
3-297	5-CF_3	Me	Me	Et	4'-Me	CO_2Me	
3-298	5-CF_3	Me	Me	Et	4'-Me	SO_2Me	
3-299	5-CF_3	Me	Me	Et	4'-Me	SO_2NHMe	
3-300	5-CF_3	Me	Me	i-Pr	4'-Me	CO_2Me	
3-301	5-CF_3	Me	Me	i-Pr	4'-Me	SO_2Me	
3-302	5-CF_3	Me	Me	i-Pr	4'-Me	SO_2NHMe	

[Công thức hóa học 30]



(1d)

Các số vị trí trong bảng biểu thị các số được chỉ định trong công thức chung (1d).

[Bảng 4-1]

Bảng 4

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
4-1	H	Me	NH_2	Me	H	CO_2Me	
4-2	H	Me	NH_2	Me	H	SO_2Me	
4-3	H	Me	NH_2	Me	H	SO_2NHMe	
4-4	H	Me	NH_2	Et	H	CO_2Me	
4-5	H	Me	NH_2	Et	H	SO_2Me	
4-6	H	Me	NH_2	Et	H	SO_2NHMe	
4-7	H	Me	NH_2	i-Pr	H	CO_2Me	
4-8	H	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2Me	
4-9	H	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2NHMe	
4-10	5-Me	Me	NH_2	Me	H	CO_2Me	
4-11	5-Me	Me	NH_2	Me	H	SO_2Me	
4-12	5-Me	Me	NH_2	Me	H	SO_2NHMe	
4-13	5-Me	Me	NH_2	Et	H	CO_2Me	
4-14	5-Me	Me	NH_2	Et	H	$CONMe_2$	212-213
4-15	5-Me	Me	NH_2	Et	H	SO_2Me	72-73
4-16	5-Me	Me	NH_2	Et	H	SO_2NHMe	NMR
4-17	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H	CO_2Me	
4-18	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2Me	
4-19	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2NHMe	
4-20	5-Me	Me	NH_2	Et	4'-Me	Br	224-226
4-21	5-Me	Me	NH_2	Et	4'-Me	CO_2H	
4-22	5-Me	Me	NH_2	Et	4'-Me	CO_2Me	1,3869(21,0°C)
4-23	5-OMe	Me	NH_2	Me	H	CO_2Me	
4-24	5-OMe	Me	NH_2	Me	H	SO_2Me	
4-25	5-OMe	Me	NH_2	Me	H	SO_2NHMe	
4-26	5-OMe	Me	NH_2	Et	H	CO_2Me	
4-27	5-OMe	Me	NH_2	Et	H	SO_2Me	
4-28	5-OMe	Me	NH_2	Et	H	SO_2NHMe	
4-29	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H	CO_2Me	
4-30	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2Me	

[Bảng 4-2]

Bảng 4 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
4-31	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2NHMe	
4-32	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H	CO_2Me	
4-33	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H	SO_2Me	
4-34	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H	SO_2NHMe	
4-35	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H	CO_2Me	
4-36	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H	SO_2Me	
4-37	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H	SO_2NHMe	
4-38	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H	CO_2Me	
4-39	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2Me	
4-40	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2NHMe	
4-41	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H	CO_2Me	
4-42	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H	SO_2Me	
4-43	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H	SO_2NHMe	
4-44	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H	CO_2Me	
4-45	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H	SO_2Me	
4-46	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H	SO_2NHMe	NMR
4-47	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H	CO_2Me	
4-48	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2Me	
4-49	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2NHMe	118-119
4-50	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2NMe_2	NMR
4-51	H	Me	Me	Me	H	CO_2Me	
4-52	H	Me	Me	Me	H	SO_2Me	
4-53	H	Me	Me	Me	H	SO_2NHMe	
4-54	H	Me	Me	Et	H	CO_2Me	120-121
4-55	H	Me	Me	Et	H	SO_2Me	
4-56	H	Me	Me	Et	H	SO_2NHMe	
4-57	H	Me	Me	i-Pr	H	CO_2Me	
4-58	H	Me	Me	i-Pr	H	SO_2Me	
4-59	H	Me	Me	i-Pr	H	SO_2NHMe	
4-60	H	Me	Me	CH_2CF_3	H	$C(Me)=N-OCH_2CF_3$	NMR

[Bảng 4-3]

Bảng 4 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
4-61	H	Me	Me	CH_2CF_3	H	CO_2Me	133-134
4-62*	H	Me	Me	CH_2CF_3	H	CO_2Me	NMR
4-63	5-Me	Me	Me	Me	H	CO_2Me	
4-64	5-Me	Me	Me	Me	H	SO_2Me	
4-65	5-Me	Me	Me	Me	H	SO_2NHMe	
4-66	5-Me	Me	Me	Et	H	CO_2Me	
4-67	5-Me	Me	Me	Et	H	SMe	NMR
4-68	5-Me	Me	Me	Et	H	SO_2Me	NMR
4-69	5-Me	Me	Me	Et	H	SO_2NHMe	
4-70	5-Me	Me	Me	i-Pr	H	CO_2Me	
4-71	5-Me	Me	Me	i-Pr	H	SO_2Me	
4-72	5-Me	Me	Me	i-Pr	H	SO_2NHMe	
4-73	5-OMe	Me	Me	Me	H	CO_2Me	
4-74	5-OMe	Me	Me	Me	H	SO_2Me	
4-75	5-OMe	Me	Me	Me	H	SO_2NHMe	
4-76	5-OMe	Me	Me	Et	H	CO_2Me	
4-77	5-OMe	Me	Me	Et	H	SO_2Me	
4-78	5-OMe	Me	Me	Et	H	SO_2NHMe	
4-79	5-OMe	Me	Me	i-Pr	H	CO_2Me	
4-80	5-OMe	Me	Me	i-Pr	H	SO_2Me	
4-81	5-OMe	Me	Me	i-Pr	H	SO_2NHMe	
4-82	5-CHF_2	Me	Me	Me	H	CO_2Me	
4-83	5-CHF_2	Me	Me	Me	H	SO_2Me	
4-84	5-CHF_2	Me	Me	Me	H	SO_2NHMe	
4-85	5-CHF_2	Me	Me	Et	H	CO_2Me	
4-86	5-CHF_2	Me	Me	Et	H	SO_2Me	
4-87	5-CHF_2	Me	Me	Et	H	SO_2NHMe	
4-88	5-CHF_2	Me	Me	i-Pr	H	CO_2Me	
4-89	5-CHF_2	Me	Me	i-Pr	H	SO_2Me	
4-90	5-CHF_2	Me	Me	i-Pr	H	SO_2NHMe	

Ký hiệu "*" bên cạnh số hợp chất biểu thị đồng phân Z.

[Bảng 4-4]

Bảng 4 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
4-91	5-CF_3	Me	Me	Me	H	CO_2Me	
4-92	5-CF_3	Me	Me	Me	H	SO_2Me	
4-93	5-CF_3	Me	Me	Me	H	SO_2NHMe	
4-94	5-CF_3	Me	Me	Et	H	CO_2Me	
4-95	5-CF_3	Me	Me	Et	H	SO_2Me	
4-96	5-CF_3	Me	Me	Et	H	SO_2NHMe	
4-97	5-CF_3	Me	Me	i-Pr	H	CO_2Me	
4-98	5-CF_3	Me	Me	i-Pr	H	SO_2Me	
4-99	5-CF_3	Me	Me	i-Pr	H	SO_2NHMe	
4-100	5-SCF_3	Me	Me	Et	H	Me	NMR
4-101*	5-SCF_3	Me	Me	Et	H	Me	NMR
4-102	5-SCF_3	Me	Me	Et	H	OH	134-135
4-103	5-SCF_3	Me	Me	Et	H	OCH_2OMe	72-73
4-104*	5-SCF_3	Me	Me	Et	H	OCH_2OMe	NMR
4-105	5-SCF_3	Me	Me	Et	4'-Me	Br	166
4-106*	5-SCF_3	Me	Me	Et	4'-Me	Br	1,6285(24,2°C)
4-107	5-SCF_3	Me	Me	Et	1'-Me	CO_2Me	112-115
4-108	5-SCF_3	Me	Me	Et	4'-Me	CO_2Me	1,3494(26,7°C)
4-109*	5-SCF_3	Me	Me	Et	4'-Me	CO_2Me	NMR
4-110	5-Br	Me	Me	CH_2CF_3	H	CO_2Me	129-130
4-111	5-I	Me	Me	Et	H	CO_2Me	NMR
4-112	5-SO_2NH_2	Me	Me	Et	H	CO_2Me	177-178
4-113	5-SO_2NMe_2	Me	Me	Et	H	CO_2Me	NMR
4-114	6-Br	Me	Me	CH_2CF_3	H	CO_2Me	147-148
4-115	6-SO_2NH_2	Me	Me	Et	H	CO_2Me	89-90
4-116	5,6-di-Br	Me	Me	CH_2CF_3	H	CO_2Me	173-174
4-117	5-SCF_3	Me	H	Et	H	SO_2Et	1,4796(20,0°C)
4-118	5-SCF_3	Me	H	CH_2CHF_2	H	SO_2Et	1,4029(20,1°C)
4-119	5-SCF_3	Me	H	CH_2CF_3	H	SO_2Et	1,4292(20,1°C)
4-120	5-SO_2CF_3	Me	H	CH_2CHF_2	H	SO_2Et	47-48

Ký hiệu "*" bên cạnh số hợp chất biểu thị đồng phân Z.

[Bảng 4-5]

Bảng 4 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
4-121	5-SO_2CF_3	Me	H	CH_2CF_3	H	SO_2Et	58-59
4-122	H	Me	NH_2	Me	4'-Me	CO_2Me	
4-123	H	Me	NH_2	Me	4'-Me	SO_2Me	
4-124	H	Me	NH_2	Me	4'-Me	SO_2NHMe	
4-125	H	Me	NH_2	Et	4'-Me	CO_2Me	
4-126	H	Me	NH_2	Et	4'-Me	SO_2Me	
4-127	H	Me	NH_2	Et	4'-Me	SO_2NHMe	
4-128	H	Me	NH_2	i-Pr	4'-Me	CO_2Me	
4-129	H	Me	NH_2	i-Pr	4'-Me	SO_2Me	
4-130	H	Me	NH_2	i-Pr	4'-Me	SO_2NHMe	
4-131	5-Me	Me	NH_2	Me	4'-Me	CO_2Me	
4-132	5-Me	Me	NH_2	Me	4'-Me	SO_2Me	
4-133	5-Me	Me	NH_2	Me	4'-Me	SO_2NHMe	
4-134	5-Me	Me	NH_2	Et	4'-Me	SO_2Me	
4-135	5-Me	Me	NH_2	Et	4'-Me	SO_2NHMe	
4-136	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	4'-Me	CO_2Me	
4-137	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	4'-Me	SO_2Me	
4-138	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	4'-Me	SO_2NHMe	
4-139	5-OMe	Me	NH_2	Me	4'-Me	CO_2Me	
4-140	5-OMe	Me	NH_2	Me	4'-Me	SO_2Me	
4-141	5-OMe	Me	NH_2	Me	4'-Me	SO_2NHMe	
4-142	5-OMe	Me	NH_2	Et	4'-Me	CO_2Me	
4-143	5-OMe	Me	NH_2	Et	4'-Me	SO_2Me	
4-144	5-OMe	Me	NH_2	Et	4'-Me	SO_2NHMe	
4-145	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	4'-Me	CO_2Me	
4-146	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	4'-Me	SO_2Me	
4-147	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	4'-Me	SO_2NHMe	
4-148	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	4'-Me	CO_2Me	
4-149	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	4'-Me	SO_2Me	
4-150	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	4'-Me	SO_2NHMe	

[Bảng 4-6]

Bảng 4 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
4-151	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	4'-Me	CO_2Me	
4-152	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	4'-Me	SO_2Me	
4-153	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	4'-Me	SO_2NHMe	
4-154	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	4'-Me	CO_2Me	
4-155	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	4'-Me	SO_2Me	
4-156	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	4'-Me	SO_2NHMe	
4-157	5-CF_3	Me	NH_2	Me	4'-Me	CO_2Me	
4-158	5-CF_3	Me	NH_2	Me	4'-Me	SO_2Me	
4-159	5-CF_3	Me	NH_2	Me	4'-Me	SO_2NHMe	
4-160	5-CF_3	Me	NH_2	Et	4'-Me	CO_2Me	
4-161	5-CF_3	Me	NH_2	Et	4'-Me	SO_2Me	
4-162	5-CF_3	Me	NH_2	Et	4'-Me	SO_2NHMe	
4-163	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	4'-Me	CO_2Me	
4-164	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	4'-Me	SO_2Me	
4-165	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	4'-Me	SO_2NHMe	
4-166	H	Me	Me	Me	4'-Me	CO_2Me	
4-167	H	Me	Me	Me	4'-Me	SO_2Me	
4-168	H	Me	Me	Me	4'-Me	SO_2NHMe	
4-169	H	Me	Me	Et	4'-Me	CO_2Me	
4-170	H	Me	Me	Et	4'-Me	SO_2Me	
4-171	H	Me	Me	Et	4'-Me	SO_2NHMe	
4-172	H	Me	Me	i-Pr	4'-Me	CO_2Me	
4-173	H	Me	Me	i-Pr	4'-Me	SO_2Me	
4-174	H	Me	Me	i-Pr	4'-Me	SO_2NHMe	
4-175	5-Me	Me	Me	Me	4'-Me	CO_2Me	
4-176	5-Me	Me	Me	Me	4'-Me	SO_2Me	
4-177	5-Me	Me	Me	Me	4'-Me	SO_2NHMe	
4-178	5-Me	Me	Me	Et	4'-Me	CO_2Me	
4-179	5-Me	Me	Me	Et	4'-Me	SO_2Me	
4-180	5-Me	Me	Me	Et	4'-Me	SO_2NHMe	

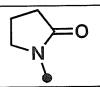
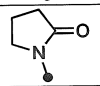
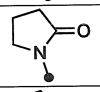
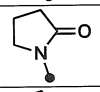
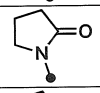
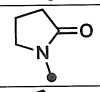
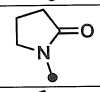
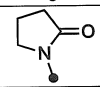
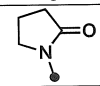
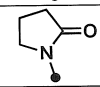
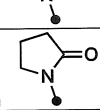
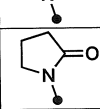
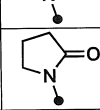
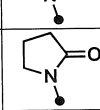
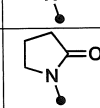
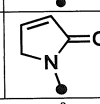
[Bảng 4-7]

Bảng 4 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
4-181	5-Me	Me	Me	i-Pr	4'-Me	CO_2Me	
4-182	5-Me	Me	Me	i-Pr	4'-Me	SO_2Me	
4-183	5-Me	Me	Me	i-Pr	4'-Me	SO_2NHMe	
4-184	5-OMe	Me	Me	Me	4'-Me	CO_2Me	
4-185	5-OMe	Me	Me	Me	4'-Me	SO_2Me	
4-186	5-OMe	Me	Me	Me	4'-Me	SO_2NHMe	
4-187	5-OMe	Me	Me	Et	4'-Me	CO_2Me	
4-188	5-OMe	Me	Me	Et	4'-Me	SO_2Me	
4-189	5-OMe	Me	Me	Et	4'-Me	SO_2NHMe	
4-190	5-OMe	Me	Me	i-Pr	4'-Me	CO_2Me	
4-191	5-OMe	Me	Me	i-Pr	4'-Me	SO_2Me	
4-192	5-OMe	Me	Me	i-Pr	4'-Me	SO_2NHMe	
4-193	5-CHF_2	Me	Me	Me	4'-Me	CO_2Me	
4-194	5-CHF_2	Me	Me	Me	4'-Me	SO_2Me	
4-195	5-CHF_2	Me	Me	Me	4'-Me	SO_2NHMe	
4-196	5-CHF_2	Me	Me	Et	4'-Me	CO_2Me	
4-197	5-CHF_2	Me	Me	Et	4'-Me	SO_2Me	
4-198	5-CHF_2	Me	Me	Et	4'-Me	SO_2NHMe	
4-199	5-CHF_2	Me	Me	i-Pr	4'-Me	CO_2Me	
4-200	5-CHF_2	Me	Me	i-Pr	4'-Me	SO_2Me	
4-201	5-CHF_2	Me	Me	i-Pr	4'-Me	SO_2NHMe	
4-202	5-CF_3	Me	Me	Me	4'-Me	CO_2Me	
4-203	5-CF_3	Me	Me	Me	4'-Me	SO_2Me	
4-204	5-CF_3	Me	Me	Me	4'-Me	SO_2NHMe	
4-205	5-CF_3	Me	Me	Et	4'-Me	CO_2Me	
4-206	5-CF_3	Me	Me	Et	4'-Me	SO_2Me	
4-207	5-CF_3	Me	Me	Et	4'-Me	SO_2NHMe	
4-208	5-CF_3	Me	Me	i-Pr	4'-Me	CO_2Me	
4-209	5-CF_3	Me	Me	i-Pr	4'-Me	SO_2Me	
4-210	5-CF_3	Me	Me	i-Pr	4'-Me	SO_2NHMe	

[Bảng 4-8]

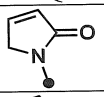
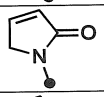
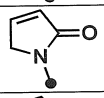
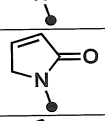
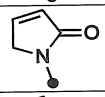
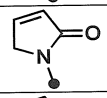
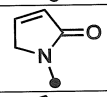
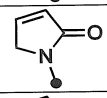
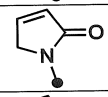
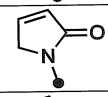
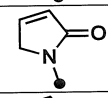
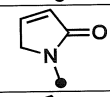
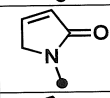
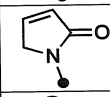
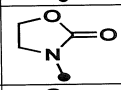
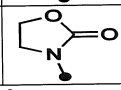
Bảng 4 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
4-211	H	Me	NH_2	Me	H		
4-212	H	Me	NH_2	Et	H		
4-213	H	Me	NH_2	i-Pr	H		
4-214	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
4-215	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
4-216	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
4-217	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
4-218	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
4-219	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
4-220	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		
4-221	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		
4-222	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		
4-223	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		
4-224	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
4-225	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		
4-226	H	Me	NH_2	Me	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Bảng 4-9]

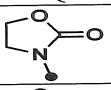
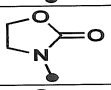
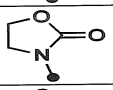
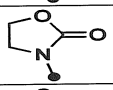
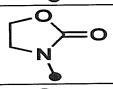
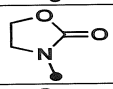
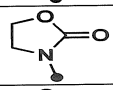
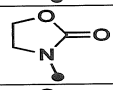
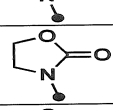
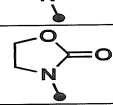
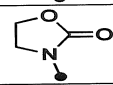
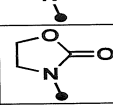
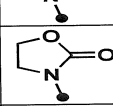
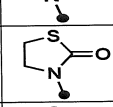
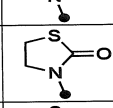
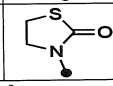
Bảng 4 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
4-227	H	Me	NH_2	Et	H		
4-228	H	Me	NH_2	i-Pr	H		
4-229	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
4-230	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
4-231	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
4-232	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
4-233	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
4-234	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
4-235	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		
4-236	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		
4-237	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		
4-238	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		
4-239	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
4-240	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		
4-241	H	Me	NH_2	Me	H		
4-242	H	Me	NH_2	Et	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Bảng 4-10]

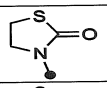
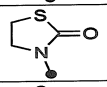
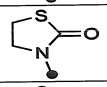
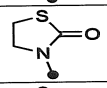
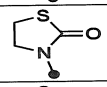
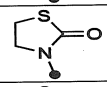
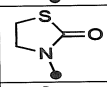
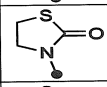
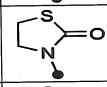
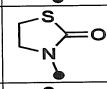
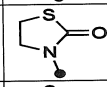
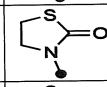
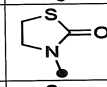
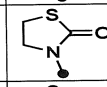
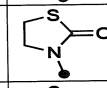
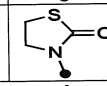
Bảng 4 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
4-243	H	Me	NH_2	i-Pr	H		
4-244	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
4-245	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
4-246	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
4-247	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
4-248	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
4-249	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
4-250	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		
4-251	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		
4-252	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		
4-253	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		
4-254	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
4-255	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		
4-256	H	Me	NH_2	Me	H		
4-257	H	Me	NH_2	Et	H		
4-258	H	Me	NH_2	i-Pr	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Bảng 4-11]

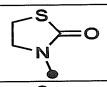
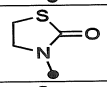
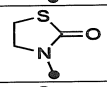
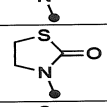
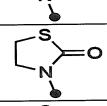
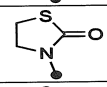
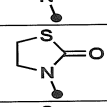
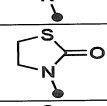
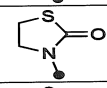
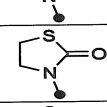
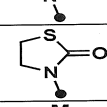
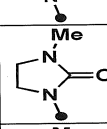
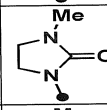
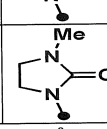
Bảng 4 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
4-259	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
4-260	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
4-261	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
4-262	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
4-263	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
4-264	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
4-265	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		
4-266	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		
4-267	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		
4-268	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		
4-269	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
4-270	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		
4-271	H	Me	NH_2	Me	H		
4-272	H	Me	NH_2	Et	H		
4-273	H	Me	NH_2	i-Pr	H		
4-274	5-Me	Me	NH_2	Me	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Bảng 4-12]

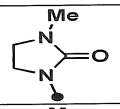
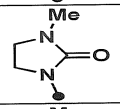
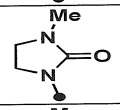
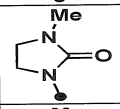
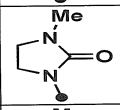
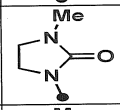
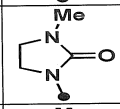
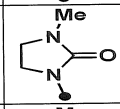
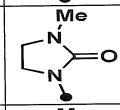
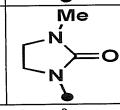
Bảng 4 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
4-275	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
4-276	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
4-277	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
4-278	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
4-279	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
4-280	$5\text{-}CHF_2$	Me	NH_2	Me	H		
4-281	$5\text{-}CHF_2$	Me	NH_2	Et	H		
4-282	$5\text{-}CHF_2$	Me	NH_2	i-Pr	H		
4-283	$5\text{-}CF_3$	Me	NH_2	Me	H		
4-284	$5\text{-}CF_3$	Me	NH_2	Et	H		
4-285	$5\text{-}CF_3$	Me	NH_2	i-Pr	H		
4-286	H	Me	NH_2	Me	H		
4-287	H	Me	NH_2	Et	H		
4-288	H	Me	NH_2	i-Pr	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Bảng 4-13]

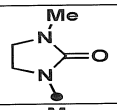
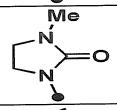
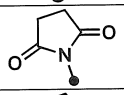
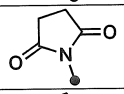
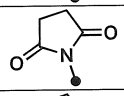
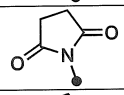
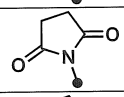
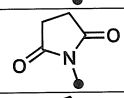
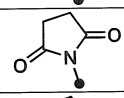
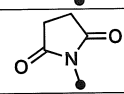
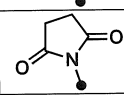
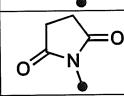
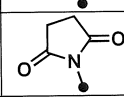
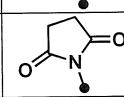
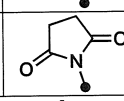
Bảng 4 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
4-289	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
4-290	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
4-291	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
4-292	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
4-293	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
4-294	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
4-295	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		
4-296	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		
4-297	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		
4-298	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Bảng 4-14]

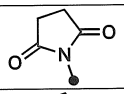
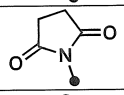
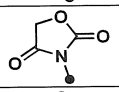
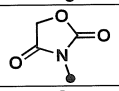
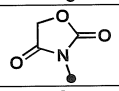
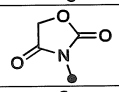
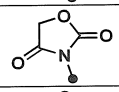
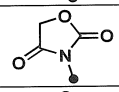
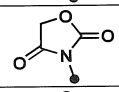
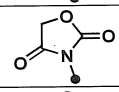
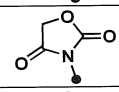
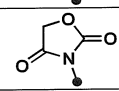
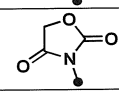
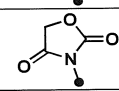
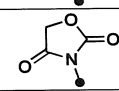
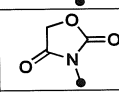
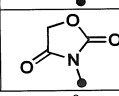
Bảng 4 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
4-299	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
4-300	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		
4-301	H	Me	NH_2	Me	H		
4-302	H	Me	NH_2	Et	H		
4-303	H	Me	NH_2	i-Pr	H		
4-304	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
4-305	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
4-306	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
4-307	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
4-308	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
4-309	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
4-310	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		
4-311	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		
4-312	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		
4-313	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

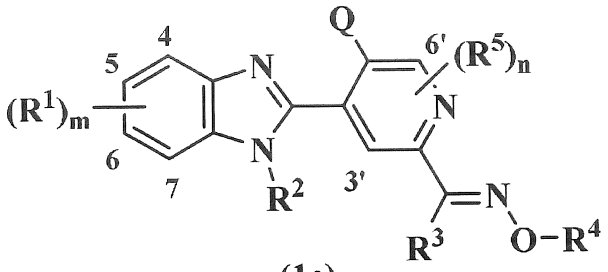
[Bảng 4-15]

Bảng 4 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
4-314	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
4-315	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		
4-316	H	Me	NH_2	Me	H		
4-317	H	Me	NH_2	Et	H		
4-318	H	Me	NH_2	i-Pr	H		
4-319	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
4-320	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
4-321	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
4-322	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
4-323	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
4-324	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
4-325	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		
4-326	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		
4-327	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		
4-328	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		
4-329	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
4-330	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Công thức hóa học 31]



(1e)

Các số vị trí trong bảng biểu thị các số được chỉ định trong công thức chung (1e).

[Bảng 5-1]

Bảng 5

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
5-1	H	Me	NH_2	Me	H	CO_2Me	
5-2	H	Me	NH_2	Me	H	SO_2Me	
5-3	H	Me	NH_2	Me	H	SO_2NHMe	
5-4	H	Me	NH_2	Et	H	CO_2Me	
5-5	H	Me	NH_2	Et	H	SO_2Me	
5-6	H	Me	NH_2	Et	H	SO_2NHMe	
5-7	H	Me	NH_2	i-Pr	H	CO_2Me	
5-8	H	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2Me	
5-9	H	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2NHMe	
5-10	5-Me	Me	NH_2	Me	H	CO_2Me	
5-11	5-Me	Me	NH_2	Me	H	SO_2Me	
5-12	5-Me	Me	NH_2	Me	H	SO_2NHMe	
5-13	5-Me	Me	NH_2	Et	H	Cl	130-131
5-14	5-Me	Me	NH_2	Et	H	CO_2Me	
5-15	5-Me	Me	NH_2	Et	H	SMe	133-134
5-16	5-Me	Me	NH_2	Et	H	SO_2Me	181-182
5-17	5-Me	Me	NH_2	Et	H	SO_2NHMe	
5-18	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H	CO_2Me	
5-19	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2Me	
5-20	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2NHMe	
5-21	5-OMe	Me	NH_2	Me	H	CO_2Me	
5-22	5-OMe	Me	NH_2	Me	H	SO_2Me	
5-23	5-OMe	Me	NH_2	Me	H	SO_2NHMe	
5-24	5-OMe	Me	NH_2	Et	H	CO_2Me	
5-25	5-OMe	Me	NH_2	Et	H	SO_2Me	
5-26	5-OMe	Me	NH_2	Et	H	SO_2NHMe	
5-27	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H	CO_2Me	
5-28	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2Me	
5-29	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2NHMe	
5-30	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H	CO_2Me	

[Bảng 5-2]

Bảng 5 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
5-31	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H	SO_2Me	
5-32	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H	SO_2NHMe	
5-33	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H	CO_2Me	
5-34	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H	SO_2Me	
5-35	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H	SO_2NHMe	
5-36	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H	CO_2Me	
5-37	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2Me	
5-38	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2NHMe	
5-39	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H	CO_2Me	
5-40	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H	SO_2Me	
5-41	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H	SO_2NHMe	
5-42	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H	CO_2Me	
5-43	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H	SO_2Me	
5-44	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H	SO_2NHMe	
5-45	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H	CO_2Me	
5-46	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2Me	
5-47	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2NHMe	
5-48	H	Me	Me	Me	H	CO_2Me	
5-49	H	Me	Me	Me	H	SO_2Me	
5-50	H	Me	Me	Me	H	SO_2NHMe	
5-51	H	Me	Me	Et	H	CO_2Me	
5-52	H	Me	Me	Et	H	SO_2Me	
5-53	H	Me	Me	Et	H	SO_2NHMe	
5-54	H	Me	Me	i-Pr	H	CO_2Me	
5-55	H	Me	Me	i-Pr	H	SO_2Me	
5-56	H	Me	Me	i-Pr	H	SO_2NHMe	
5-57	5-Me	Me	Me	Me	H	CO_2Me	
5-58	5-Me	Me	Me	Me	H	SO_2Me	
5-59	5-Me	Me	Me	Me	H	SO_2NHMe	
5-60	5-Me	Me	Me	Et	H	CO_2Me	

[Bảng 5-3]

Bảng 5 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
5-61	5-Me	Me	Me	Et	H	SO_2Me	183-184
5-62	5-Me	Me	Me	Et	H	SO_2NHMe	
5-63	5-Me	Me	Me	i-Pr	H	CO_2Me	
5-64	5-Me	Me	Me	i-Pr	H	SO_2Me	
5-65	5-Me	Me	Me	i-Pr	H	SO_2NHMe	
5-66	5-OMe	Me	Me	Me	H	CO_2Me	
5-67	5-OMe	Me	Me	Me	H	SO_2Me	
5-68	5-OMe	Me	Me	Me	H	SO_2NHMe	
5-69	5-OMe	Me	Me	Et	H	CO_2Me	
5-70	5-OMe	Me	Me	Et	H	SO_2Me	
5-71	5-OMe	Me	Me	Et	H	SO_2NHMe	
5-72	5-OMe	Me	Me	i-Pr	H	CO_2Me	
5-73	5-OMe	Me	Me	i-Pr	H	SO_2Me	
5-74	5-OMe	Me	Me	i-Pr	H	SO_2NHMe	
5-75	5-CHF_2	Me	Me	Me	H	CO_2Me	
5-76	5-CHF_2	Me	Me	Me	H	SO_2Me	
5-77	5-CHF_2	Me	Me	Me	H	SO_2NHMe	
5-78	5-CHF_2	Me	Me	Et	H	CO_2Me	
5-79	5-CHF_2	Me	Me	Et	H	SO_2Me	
5-80	5-CHF_2	Me	Me	Et	H	SO_2NHMe	
5-81	5-CHF_2	Me	Me	i-Pr	H	CO_2Me	
5-82	5-CHF_2	Me	Me	i-Pr	H	SO_2Me	
5-83	5-CHF_2	Me	Me	i-Pr	H	SO_2NHMe	
5-84	5-CF_3	Me	Me	Me	H	CO_2Me	
5-85	5-CF_3	Me	Me	Me	H	SO_2Me	
5-86	5-CF_3	Me	Me	Me	H	SO_2NHMe	
5-87	5-CF_3	Me	Me	Et	H	CO_2Me	
5-88	5-CF_3	Me	Me	Et	H	SO_2Me	
5-89	5-CF_3	Me	Me	Et	H	SO_2NHMe	
5-90	5-CF_3	Me	Me	i-Pr	H	CO_2Me	

[Bảng 5-4]

Bảng 5 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
5-91	5-CF_3	Me	Me	i-Pr	H	SO_2Me	
5-92	5-CF_3	Me	Me	i-Pr	H	SO_2NHMe	
5-93	5-SCF_3	Me	Me	Me	H	C(Me)=N-OMe	141-143
5-94	5-SCF_3	Me	Me	Et	H	SEt	113-115
5-95	5-SCF_3	Me	H	Et	H	CO_2H	240-246
5-96	5-SCF_3	Me	H	Et	H	CO_2Me	178-180
5-97	5-SCF_3	Me	H	Et	H	CONHMe	187-190
5-98	5-SCF_3	Me	H	Et	H	$CONMe_2$	172-175
5-99	5-SCF_3	Me	H	CH_2CF_3	H	CO_2Me	149-152
5-100	5-SO_2CF_3	Me	H	CH_2CF_3	H	CO_2Me	155-160
5-101	H	Me	NH_2	Me	6'-Me	CO_2Me	
5-102	H	Me	NH_2	Me	6'-Me	SO_2Me	
5-103	H	Me	NH_2	Me	6'-Me	SO_2NHMe	
5-104	H	Me	NH_2	Et	6'-Me	CO_2Me	
5-105	H	Me	NH_2	Et	6'-Me	SO_2Me	
5-106	H	Me	NH_2	Et	6'-Me	SO_2NHMe	
5-107	H	Me	NH_2	i-Pr	6'-Me	CO_2Me	
5-108	H	Me	NH_2	i-Pr	6'-Me	SO_2Me	
5-109	H	Me	NH_2	i-Pr	6'-Me	SO_2NHMe	
5-110	5-Me	Me	NH_2	Me	6'-Me	CO_2Me	
5-111	5-Me	Me	NH_2	Me	6'-Me	SO_2Me	
5-112	5-Me	Me	NH_2	Me	6'-Me	SO_2NHMe	
5-113	5-Me	Me	NH_2	Et	6'-Me	CO_2Me	
5-114	5-Me	Me	NH_2	Et	6'-Me	SO_2Me	
5-115	5-Me	Me	NH_2	Et	6'-Me	SO_2NHMe	
5-116	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	6'-Me	CO_2Me	
5-117	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	6'-Me	SO_2Me	
5-118	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	6'-Me	SO_2NHMe	
5-119	5-OMe	Me	NH_2	Me	6'-Me	CO_2Me	
5-120	5-OMe	Me	NH_2	Me	6'-Me	SO_2Me	

[Bảng 5-5]

Bảng 5 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
5-121	5-OMe	Me	NH_2	Me	6'-Me	SO_2NHMe	
5-122	5-OMe	Me	NH_2	Et	6'-Me	CO_2Me	
5-123	5-OMe	Me	NH_2	Et	6'-Me	SO_2Me	
5-124	5-OMe	Me	NH_2	Et	6'-Me	SO_2NHMe	
5-125	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	6'-Me	CO_2Me	
5-126	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	6'-Me	SO_2Me	
5-127	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	6'-Me	SO_2NHMe	
5-128	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	6'-Me	CO_2Me	
5-129	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	6'-Me	SO_2Me	
5-130	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	6'-Me	SO_2NHMe	
5-131	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	6'-Me	CO_2Me	
5-132	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	6'-Me	SO_2Me	
5-133	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	6'-Me	SO_2NHMe	
5-134	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	6'-Me	CO_2Me	
5-135	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	6'-Me	SO_2Me	
5-136	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	6'-Me	SO_2NHMe	
5-137	5-CF_3	Me	NH_2	Me	6'-Me	CO_2Me	
5-138	5-CF_3	Me	NH_2	Me	6'-Me	SO_2Me	
5-139	5-CF_3	Me	NH_2	Me	6'-Me	SO_2NHMe	
5-140	5-CF_3	Me	NH_2	Et	6'-Me	CO_2Me	
5-141	5-CF_3	Me	NH_2	Et	6'-Me	SO_2Me	
5-142	5-CF_3	Me	NH_2	Et	6'-Me	SO_2NHMe	
5-143	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	6'-Me	CO_2Me	
5-144	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	6'-Me	SO_2Me	
5-145	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	6'-Me	SO_2NHMe	
5-146	H	Me	Me	Me	6'-Me	CO_2Me	
5-147	H	Me	Me	Me	6'-Me	SO_2Me	
5-148	H	Me	Me	Me	6'-Me	SO_2NHMe	
5-149	H	Me	Me	Et	6'-Me	CO_2Me	
5-150	H	Me	Me	Et	6'-Me	SO_2Me	

[Bảng 5-6]

Bảng 5 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
5-151	H	Me	Me	Et	6'-Me	SO_2NHMe	
5-152	H	Me	Me	i-Pr	6'-Me	CO_2Me	
5-153	H	Me	Me	i-Pr	6'-Me	SO_2Me	
5-154	H	Me	Me	i-Pr	6'-Me	SO_2NHMe	
5-155	5-Me	Me	Me	Me	6'-Me	CO_2Me	
5-156	5-Me	Me	Me	Me	6'-Me	SO_2Me	
5-157	5-Me	Me	Me	Me	6'-Me	SO_2NHMe	
5-158	5-Me	Me	Me	Et	6'-Me	CO_2Me	
5-159	5-Me	Me	Me	Et	6'-Me	SO_2Me	
5-160	5-Me	Me	Me	Et	6'-Me	SO_2NHMe	
5-161	5-Me	Me	Me	i-Pr	6'-Me	CO_2Me	
5-162	5-Me	Me	Me	i-Pr	6'-Me	SO_2Me	
5-163	5-Me	Me	Me	i-Pr	6'-Me	SO_2NHMe	
5-164	5-OMe	Me	Me	Me	6'-Me	CO_2Me	
5-165	5-OMe	Me	Me	Me	6'-Me	SO_2Me	
5-166	5-OMe	Me	Me	Me	6'-Me	SO_2NHMe	
5-167	5-OMe	Me	Me	Et	6'-Me	CO_2Me	
5-168	5-OMe	Me	Me	Et	6'-Me	SO_2Me	
5-169	5-OMe	Me	Me	Et	6'-Me	SO_2NHMe	
5-170	5-OMe	Me	Me	i-Pr	6'-Me	CO_2Me	
5-171	5-OMe	Me	Me	i-Pr	6'-Me	SO_2Me	
5-172	5-OMe	Me	Me	i-Pr	6'-Me	SO_2NHMe	
5-173	5-CHF_2	Me	Me	Me	6'-Me	CO_2Me	
5-174	5-CHF_2	Me	Me	Me	6'-Me	SO_2Me	
5-175	5-CHF_2	Me	Me	Me	6'-Me	SO_2NHMe	
5-176	5-CHF_2	Me	Me	Et	6'-Me	CO_2Me	
5-177	5-CHF_2	Me	Me	Et	6'-Me	SO_2Me	
5-178	5-CHF_2	Me	Me	Et	6'-Me	SO_2NHMe	
5-179	5-CHF_2	Me	Me	i-Pr	6'-Me	CO_2Me	
5-180	5-CHF_2	Me	Me	i-Pr	6'-Me	SO_2Me	

[Bảng 5-7]

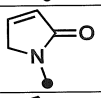
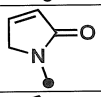
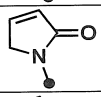
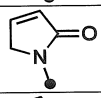
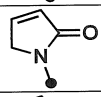
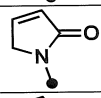
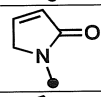
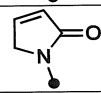
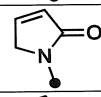
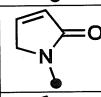
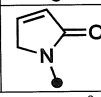
Bảng 5 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
5-181	5-CHF_2	Me	Me	i-Pr	6'-Me	SO_2NHMe	
5-182	5-CF_3	Me	Me	Me	6'-Me	CO_2Me	
5-183	5-CF_3	Me	Me	Me	6'-Me	SO_2Me	
5-184	5-CF_3	Me	Me	Me	6'-Me	SO_2NHMe	
5-185	5-CF_3	Me	Me	Et	6'-Me	CO_2Me	
5-186	5-CF_3	Me	Me	Et	6'-Me	SO_2Me	
5-187	5-CF_3	Me	Me	Et	6'-Me	SO_2NHMe	
5-188	5-CF_3	Me	Me	i-Pr	6'-Me	CO_2Me	
5-189	5-CF_3	Me	Me	i-Pr	6'-Me	SO_2Me	
5-190	5-CF_3	Me	Me	i-Pr	6'-Me	SO_2NHMe	
5-191	H	Me	NH_2	Me	H		
5-192	H	Me	NH_2	Et	H		
5-193	H	Me	NH_2	i-Pr	H		
5-194	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
5-195	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
5-196	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
5-197	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
5-198	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
5-199	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
5-200	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Bảng 5-8]

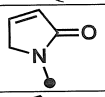
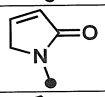
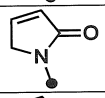
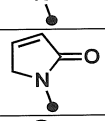
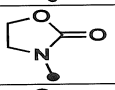
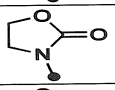
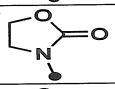
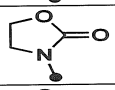
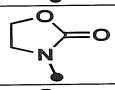
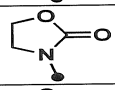
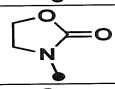
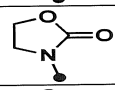
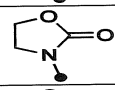
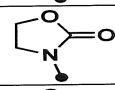
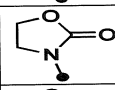
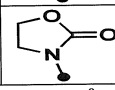
Bảng 5 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
5-201	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		
5-202	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		
5-203	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		
5-204	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
5-205	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		
5-206	H	Me	NH_2	Me	H		
5-207	H	Me	NH_2	Et	H		
5-208	H	Me	NH_2	i-Pr	H		
5-209	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
5-210	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
5-211	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
5-212	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
5-213	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
5-214	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
5-215	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		
5-216	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Bảng 5-9]

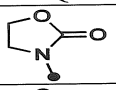
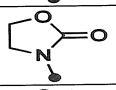
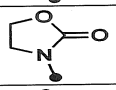
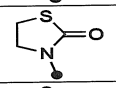
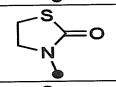
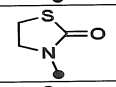
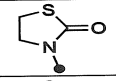
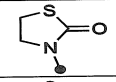
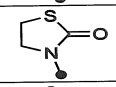
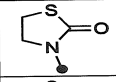
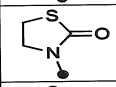
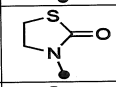
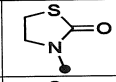
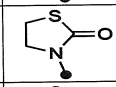
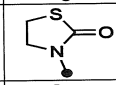
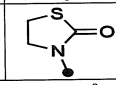
Bảng 5 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
5-217	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		
5-218	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		
5-219	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
5-220	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		
5-221	H	Me	NH_2	Me	H		
5-222	H	Me	NH_2	Et	H		
5-223	H	Me	NH_2	i-Pr	H		
5-224	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
5-225	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
5-226	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
5-227	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
5-228	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
5-229	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
5-230	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		
5-231	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		
5-232	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Bảng 5-10]

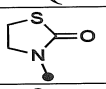
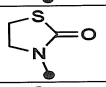
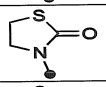
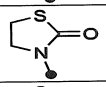
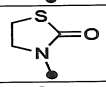
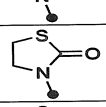
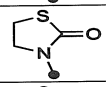
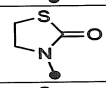
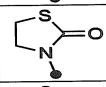
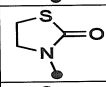
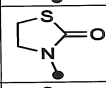
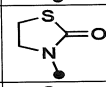
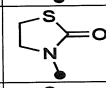
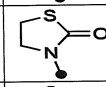
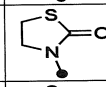
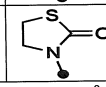
Bảng 5 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
5-233	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		
5-234	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
5-235	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		
5-236	H	Me	NH_2	Me	H		
5-237	H	Me	NH_2	Et	H		
5-238	H	Me	NH_2	i-Pr	H		
5-239	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
5-240	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
5-241	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
5-242	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
5-243	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
5-244	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
5-245	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		
5-246	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		
5-247	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		
5-248	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Bảng 5-11]

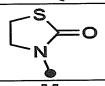
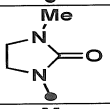
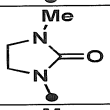
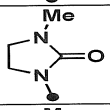
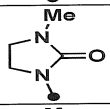
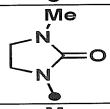
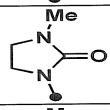
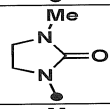
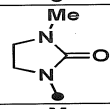
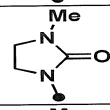
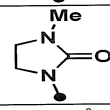
Bảng 5 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
5-249	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
5-250	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		
5-251	H	Me	NH_2	Me	H		
5-252	H	Me	NH_2	Et	H		
5-253	H	Me	NH_2	i-Pr	H		
5-254	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
5-255	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
5-256	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
5-257	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
5-258	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
5-259	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
5-260	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		
5-261	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		
5-262	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		
5-263	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		
5-264	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Bảng 5-12]

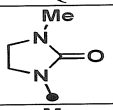
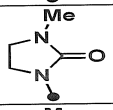
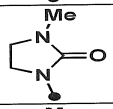
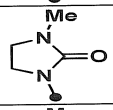
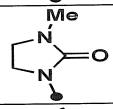
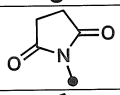
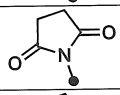
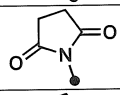
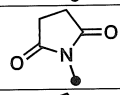
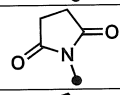
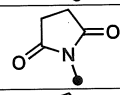
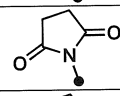
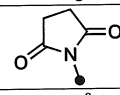
Bảng 5 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
5-265	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		
5-266	H	Me	NH_2	Me	H		
5-267	H	Me	NH_2	Et	H		
5-268	H	Me	NH_2	i-Pr	H		
5-269	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
5-270	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
5-271	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
5-272	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
5-273	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
5-274	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
5-275	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Bảng 5-13]

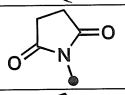
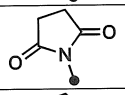
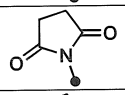
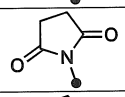
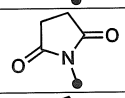
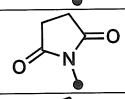
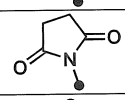
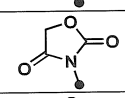
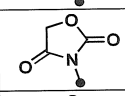
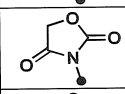
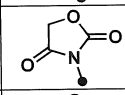
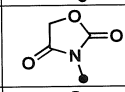
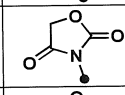
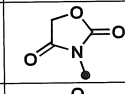
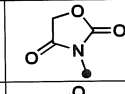
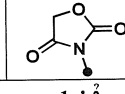
Bảng 5 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
5-276	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		
5-277	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		
5-278	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		
5-279	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
5-280	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		
5-281	H	Me	NH_2	Me	H		
5-282	H	Me	NH_2	Et	H		
5-283	H	Me	NH_2	i-Pr	H		
5-284	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
5-285	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
5-286	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
5-287	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
5-288	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Bảng 5-14]

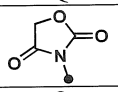
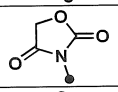
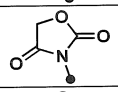
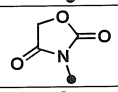
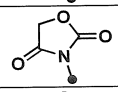
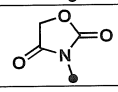
Bảng 5 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
5-289	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
5-290	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		
5-291	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		
5-292	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		
5-293	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		
5-294	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
5-295	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		
5-296	H	Me	NH_2	Me	H		
5-297	H	Me	NH_2	Et	H		
5-298	H	Me	NH_2	i-Pr	H		
5-299	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
5-300	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
5-301	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
5-302	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
5-303	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
5-304	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

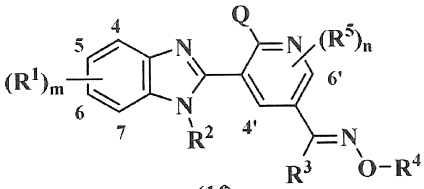
[Bảng 5-15]

Bảng 5 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
5-305	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		
5-306	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		
5-307	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		
5-308	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		
5-309	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
5-310	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Công thức hóa học 32]



(1f)

Các số vị trí trong bảng biểu thị các số được chỉ định trong công thức chung (1f).

[Bảng 6-1]

Bảng 6

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
6-1	H	Me	NH_2	Me	H	CO_2Me	
6-2	H	Me	NH_2	Me	H	SO_2Me	
6-3	H	Me	NH_2	Me	H	SO_2NHMe	
6-4	H	Me	NH_2	Et	H	CO_2Me	
6-5	H	Me	NH_2	Et	H	SO_2Me	
6-6	H	Me	NH_2	Et	H	SO_2NHMe	
6-7	H	Me	NH_2	i-Pr	H	CO_2Me	
6-8	H	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2Me	
6-9	H	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2NHMe	
6-10	5-Me	Me	NH_2	Me	H	CO_2Me	
6-11	5-Me	Me	NH_2	Me	H	SO_2Me	
6-12	5-Me	Me	NH_2	Me	H	SO_2NHMe	
6-13	5-Me	Me	NH_2	Et	H	CO_2Me	
6-14	5-Me	Me	NH_2	Et	H	CO_2Et	197-198
6-15	5-Me	Me	NH_2	Et	H	SO_2Me	238-239
6-16	5-Me	Me	NH_2	Et	H	SO_2NHMe	
6-17	5-Me	Me	NH_2	Et	H	$C(NH_2)=N-OEt$	94-95
6-18	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H	CO_2Me	
6-19	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2Me	
6-20	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2NHMe	
6-21	5-OMe	Me	NH_2	Me	H	CO_2Me	
6-22	5-OMe	Me	NH_2	Me	H	SO_2Me	
6-23	5-OMe	Me	NH_2	Me	H	SO_2NHMe	
6-24	5-OMe	Me	NH_2	Et	H	CO_2Me	
6-25	5-OMe	Me	NH_2	Et	H	SO_2Me	
6-26	5-OMe	Me	NH_2	Et	H	SO_2NHMe	
6-27	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H	CO_2Me	
6-28	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2Me	
6-29	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2NHMe	
6-30	$5-CHF_2$	Me	NH_2	Me	H	CO_2Me	

[Bảng 6-2]

Bảng 6 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
6-31	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H	SO_2Me	
6-32	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H	SO_2NHMe	
6-33	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H	CO_2Me	
6-34	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H	SO_2Me	
6-35	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H	SO_2NHMe	
6-36	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H	CO_2Me	
6-37	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2Me	
6-38	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2NHMe	
6-39	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H	CO_2Me	
6-40	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H	SO_2Me	
6-41	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H	SO_2NHMe	
6-42	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H	CO_2Me	
6-43	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H	SO_2Me	
6-44	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H	SO_2NHMe	
6-45	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H	CO_2Me	
6-46	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2Me	
6-47	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2NHMe	
6-48	H	Me	Me	Me	H	CO_2Me	
6-49	H	Me	Me	Me	H	SO_2Me	
6-50	H	Me	Me	Me	H	SO_2NHMe	
6-51	H	Me	Me	Et	H	CO_2Me	
6-52	H	Me	Me	Et	H	SO_2Me	
6-53	H	Me	Me	Et	H	SO_2NHMe	
6-54	H	Me	Me	i-Pr	H	CO_2Me	
6-55	H	Me	Me	i-Pr	H	SO_2Me	
6-56	H	Me	Me	i-Pr	H	SO_2NHMe	
6-57	5-Me	Me	Me	Me	H	CO_2Me	
6-58	5-Me	Me	Me	Me	H	SO_2Me	
6-59	5-Me	Me	Me	Me	H	SO_2NHMe	
6-60	5-Me	Me	Me	Et	H	CO_2Me	

[Bảng 6-3]

Bảng 6 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
6-61	5-Me	Me	Me	Et	H	SO_2Me	
6-62	5-Me	Me	Me	Et	H	SO_2NHMe	
6-63	5-Me	Me	Me	i-Pr	H	CO_2Me	
6-64	5-Me	Me	Me	i-Pr	H	SO_2Me	
6-65	5-Me	Me	Me	i-Pr	H	SO_2NHMe	
6-66	5-OMe	Me	Me	Me	H	CO_2Me	
6-67	5-OMe	Me	Me	Me	H	SO_2Me	
6-68	5-OMe	Me	Me	Me	H	SO_2NHMe	
6-69	5-OMe	Me	Me	Et	H	CO_2Me	
6-70	5-OMe	Me	Me	Et	H	SO_2Me	
6-71	5-OMe	Me	Me	Et	H	SO_2NHMe	
6-72	5-OMe	Me	Me	i-Pr	H	CO_2Me	
6-73	5-OMe	Me	Me	i-Pr	H	SO_2Me	
6-74	5-OMe	Me	Me	i-Pr	H	SO_2NHMe	
6-75	5-CHF_2	Me	Me	Me	H	CO_2Me	
6-76	5-CHF_2	Me	Me	Me	H	SO_2Me	
6-77	5-CHF_2	Me	Me	Me	H	SO_2NHMe	
6-78	5-CHF_2	Me	Me	Et	H	CO_2Me	
6-79	5-CHF_2	Me	Me	Et	H	SO_2Me	
6-80	5-CHF_2	Me	Me	Et	H	SO_2NHMe	
6-81	5-CHF_2	Me	Me	i-Pr	H	CO_2Me	
6-82	5-CHF_2	Me	Me	i-Pr	H	SO_2Me	
6-83	5-CHF_2	Me	Me	i-Pr	H	SO_2NHMe	
6-84	5-CF_3	Me	Me	Me	H	CO_2Me	
6-85	5-CF_3	Me	Me	Me	H	SO_2Me	
6-86	5-CF_3	Me	Me	Me	H	SO_2NHMe	
6-87	5-CF_3	Me	Me	Et	H	CO_2Me	
6-88	5-CF_3	Me	Me	Et	H	SO_2Me	
6-89	5-CF_3	Me	Me	Et	H	SO_2NHMe	189-190
6-90	5-CF_3	Me	Me	i-Pr	H	CO_2Me	
6-91	5-CF_3	Me	Me	i-Pr	H	SO_2Me	
6-92	5-CF_3	Me	Me	i-Pr	H	SO_2NHMe	

[Bảng 6-4]

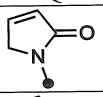
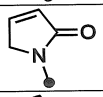
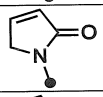
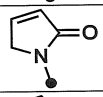
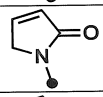
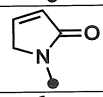
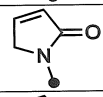
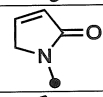
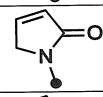
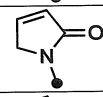
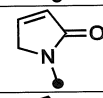
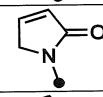
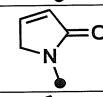
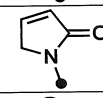
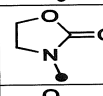
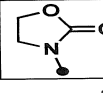
Bảng 6 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
6-93	H	Me	NH_2	Me	H		
6-94	H	Me	NH_2	Et	H		
6-95	H	Me	NH_2	i-Pr	H		
6-96	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
6-97	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
6-98	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
6-99	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
6-100	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
6-101	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
6-102	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		
6-103	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		
6-104	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		
6-105	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		
6-106	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
6-107	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		
6-108	H	Me	NH_2	Me	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Bảng 6-5]

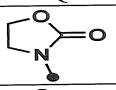
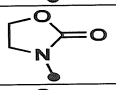
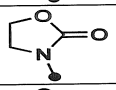
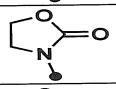
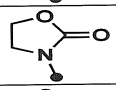
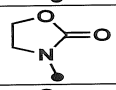
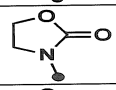
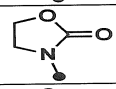
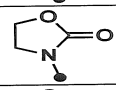
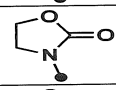
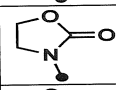
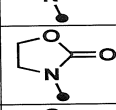
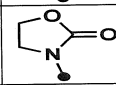
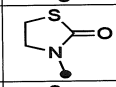
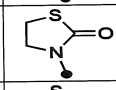
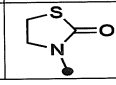
Bảng 6 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
6-109	H	Me	NH_2	Et	H		
6-110	H	Me	NH_2	i-Pr	H		
6-111	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
6-112	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
6-113	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
6-114	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
6-115	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
6-116	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
6-117	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		
6-118	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		
6-119	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		
6-120	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		
6-121	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
6-122	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		
6-123	H	Me	NH_2	Me	H		
6-124	H	Me	NH_2	Et	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Bảng 6-6]

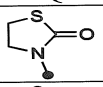
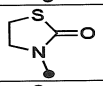
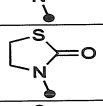
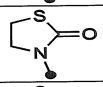
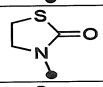
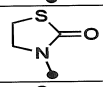
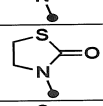
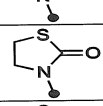
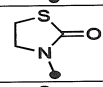
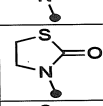
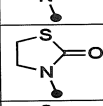
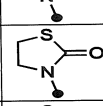
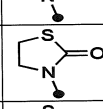
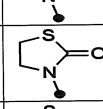
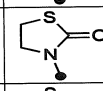
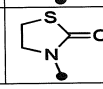
Bảng 6 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
6-125	H	Me	NH_2	i-Pr	H		
6-126	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
6-127	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
6-128	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
6-129	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
6-130	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
6-131	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
6-132	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		
6-133	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		
6-134	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		
6-135	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		
6-136	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
6-137	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		
6-138	H	Me	NH_2	Me	H		
6-139	H	Me	NH_2	Et	H		
6-140	H	Me	NH_2	i-Pr	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Bảng 6-7]

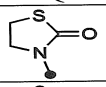
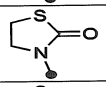
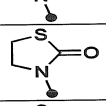
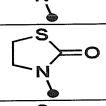
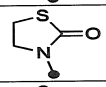
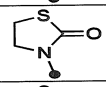
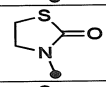
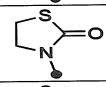
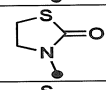
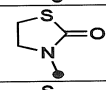
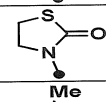
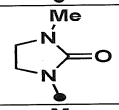
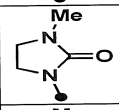
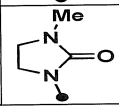
Bảng 6 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
6-141	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
6-142	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
6-143	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
6-144	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
6-145	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
6-146	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
6-147	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		
6-148	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		
6-149	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		
6-150	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		
6-151	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
6-152	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		
6-153	H	Me	NH_2	Me	H		
6-154	H	Me	NH_2	Et	H		
6-155	H	Me	NH_2	i-Pr	H		
6-156	5-Me	Me	NH_2	Me	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Bảng 6-8]

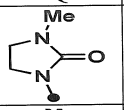
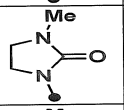
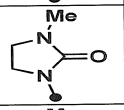
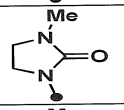
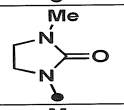
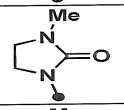
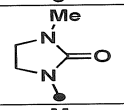
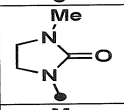
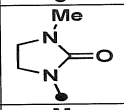
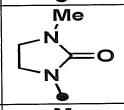
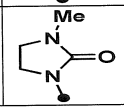
Bảng 6 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
6-157	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
6-158	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
6-159	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
6-160	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
6-161	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
6-162	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		
6-163	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		
6-164	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		
6-165	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		
6-166	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
6-167	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		
6-168	H	Me	NH_2	Me	H		
6-169	H	Me	NH_2	Et	H		
6-170	H	Me	NH_2	i-Pr	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Bảng 6-9]

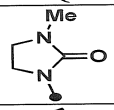
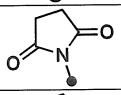
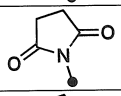
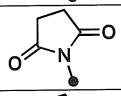
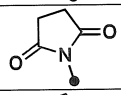
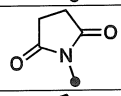
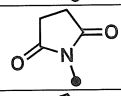
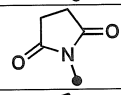
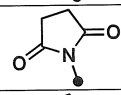
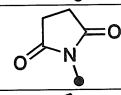
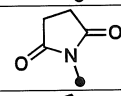
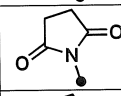
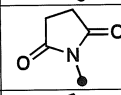
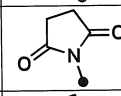
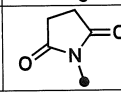
Bảng 6 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
6-171	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
6-172	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
6-173	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
6-174	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
6-175	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
6-176	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
6-177	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		
6-178	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		
6-179	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		
6-180	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		
6-181	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Bảng 6-10]

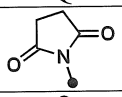
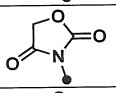
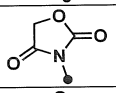
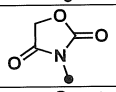
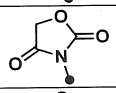
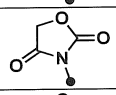
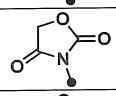
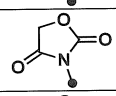
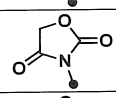
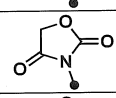
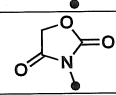
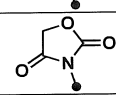
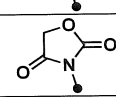
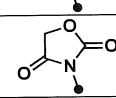
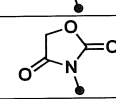
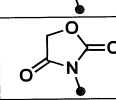
Bảng 6 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
6-182	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		
6-183	H	Me	NH_2	Me	H		
6-184	H	Me	NH_2	Et	H		
6-185	H	Me	NH_2	i-Pr	H		
6-186	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
6-187	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
6-188	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
6-189	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
6-190	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
6-191	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
6-192	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		
6-193	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		
6-194	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		
6-195	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		
6-196	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

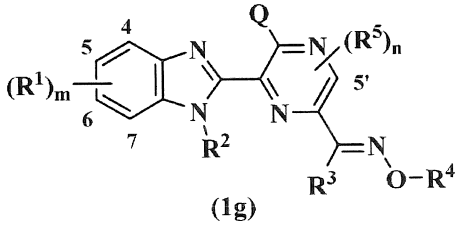
[Bảng 6-11]

Bảng 6 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
6-197	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		
6-198	H	Me	NH_2	Me	H		
6-199	H	Me	NH_2	Et	H		
6-200	H	Me	NH_2	i-Pr	H		
6-201	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
6-202	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
6-203	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
6-204	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
6-205	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
6-206	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
6-207	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		
6-208	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		
6-209	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		
6-210	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		
6-211	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
6-212	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Công thức hóa học 33]



(1g)

Các số vị trí trong bảng biểu thị các số được chỉ định trong công thức chung (1g).

[Bảng 7-1]

Bảng 7

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
7-1	H	Me	NH_2	Me	H	CO_2Me	
7-2	H	Me	NH_2	Me	H	SO_2Me	
7-3	H	Me	NH_2	Me	H	SO_2NHMe	
7-4	H	Me	NH_2	Et	H	CO_2Me	
7-5	H	Me	NH_2	Et	H	SO_2Me	
7-6	H	Me	NH_2	Et	H	SO_2NHMe	242-244
7-7	H	Me	NH_2	Et	H	NHMe	139-140
7-8	H	Me	NH_2	i-Pr	H	CO_2Me	
7-9	H	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2Me	
7-10	H	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2NHMe	
7-11	5-Me	Me	NH_2	Me	H	CO_2Me	
7-12	5-Me	Me	NH_2	Me	H	SO_2Me	
7-13	5-Me	Me	NH_2	Me	H	SO_2NHMe	
7-14	5-Me	Me	NH_2	Et	H	CO_2Me	
7-15	5-Me	Me	NH_2	Et	H	SCH_2(4-t-BuPh)	194-195
7-16	5-Me	Me	NH_2	Et	H	SO_2Me	
7-17	5-Me	Me	NH_2	Et	H	SO_2NHMe	202-203
7-18	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H	CO_2Me	
7-19	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2Me	
7-20	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2NHMe	
7-21	5-OMe	Me	NH_2	Me	H	CO_2Me	
7-22	5-OMe	Me	NH_2	Me	H	SO_2Me	
7-23	5-OMe	Me	NH_2	Me	H	SO_2NHMe	
7-24	5-OMe	Me	NH_2	Et	H	CO_2Me	
7-25	5-OMe	Me	NH_2	Et	H	SO_2Me	
7-26	5-OMe	Me	NH_2	Et	H	SO_2NHMe	
7-27	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H	CO_2Me	
7-28	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2Me	
7-29	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2NHMe	
7-30	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H	CO_2Me	

[Bảng 7-2]

Bảng 7 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
7-31	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H	SO_2Me	
7-32	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H	SO_2NHMe	
7-33	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H	CO_2Me	
7-34	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H	SO_2Me	
7-35	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H	SO_2NHMe	
7-36	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H	CO_2Me	
7-37	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2Me	
7-38	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2NHMe	
7-39	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H	CO_2Me	
7-40	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H	SO_2Me	
7-41	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H	SO_2NHMe	
7-42	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H	Cl	166-167
7-43	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H	CO_2Me	
7-44	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H	SCH_2(4-t-BuPh)	180-181
7-45	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H	SO_2Me	
7-46	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H	SO_2NHMe	244-246
7-47	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H	NHMe	145-148
7-48	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H	NMe_2	NMR
7-49	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H	CO_2Me	
7-50	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2Me	
7-51	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2NHMe	
7-52	H	Me	Me	Me	H	CO_2Me	
7-53	H	Me	Me	Me	H	SO_2Me	
7-54	H	Me	Me	Me	H	SO_2NHMe	
7-55	H	Me	Me	Et	H	CO_2Me	
7-56	H	Me	Me	Et	H	SO_2Me	
7-57	H	Me	Me	Et	H	SO_2NHMe	
7-58	H	Me	Me	Et	H	NHMe	
7-59	H	Me	Me	i-Pr	H	CO_2Me	
7-60	H	Me	Me	i-Pr	H	SO_2Me	

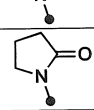
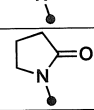
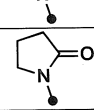
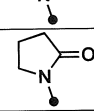
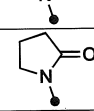
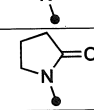
[Bảng 7-3]

Bảng 7 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
7-61	H	Me	Me	i-Pr	H	SO_2NHMe	
7-62	5-Me	Me	Me	Me	H	CO_2Me	
7-63	5-Me	Me	Me	Me	H	SO_2Me	
7-64	5-Me	Me	Me	Me	H	SO_2NHMe	
7-65	5-Me	Me	Me	Et	H	CO_2Me	
7-66	5-Me	Me	Me	Et	H	SO_2Me	
7-67	5-Me	Me	Me	Et	H	SO_2NHMe	
7-68	5-Me	Me	Me	i-Pr	H	CO_2Me	
7-69	5-Me	Me	Me	i-Pr	H	SO_2Me	
7-70	5-Me	Me	Me	i-Pr	H	SO_2NHMe	
7-71	5-OMe	Me	Me	Me	H	CO_2Me	
7-72	5-OMe	Me	Me	Me	H	SO_2Me	
7-73	5-OMe	Me	Me	Me	H	SO_2NHMe	
7-74	5-OMe	Me	Me	Et	H	CO_2Me	
7-75	5-OMe	Me	Me	Et	H	SO_2Me	
7-76	5-OMe	Me	Me	Et	H	SO_2NHMe	
7-77	5-OMe	Me	Me	i-Pr	H	CO_2Me	
7-78	5-OMe	Me	Me	i-Pr	H	SO_2Me	
7-79	5-OMe	Me	Me	i-Pr	H	SO_2NHMe	
7-80	5-CHF_2	Me	Me	Me	H	CO_2Me	
7-81	5-CHF_2	Me	Me	Me	H	SO_2Me	
7-82	5-CHF_2	Me	Me	Me	H	SO_2NHMe	
7-83	5-CHF_2	Me	Me	Et	H	CO_2Me	
7-84	5-CHF_2	Me	Me	Et	H	SO_2Me	
7-85	5-CHF_2	Me	Me	Et	H	SO_2NHMe	
7-86	5-CHF_2	Me	Me	i-Pr	H	CO_2Me	
7-87	5-CHF_2	Me	Me	i-Pr	H	SO_2Me	
7-88	5-CHF_2	Me	Me	i-Pr	H	SO_2NHMe	
7-89	5-CF_3	Me	Me	Me	H	CO_2Me	
7-90	5-CF_3	Me	Me	Me	H	SO_2Me	

[Bảng 7-4]

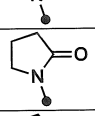
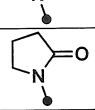
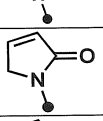
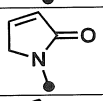
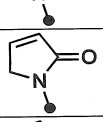
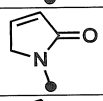
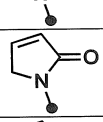
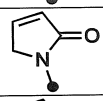
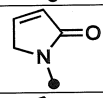
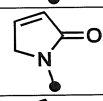
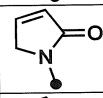
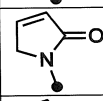
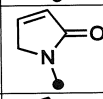
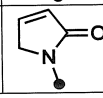
Bảng 7 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
7-91	5-CF_3	Me	Me	Me	H	SO_2NHMe	
7-92	5-CF_3	Me	Me	Et	H	CO_2Me	
7-93	5-CF_3	Me	Me	Et	H	SO_2Me	
7-94	5-CF_3	Me	Me	Et	H	SO_2NHMe	
7-95	5-CF_3	Me	Me	Et	H	NHMe	
7-96	5-CF_3	Me	Me	i-Pr	H	CO_2Me	
7-97	5-CF_3	Me	Me	i-Pr	H	SO_2Me	
7-98	5-CF_3	Me	Me	i-Pr	H	SO_2NHMe	
7-99	5-SCF_3	Me	H	Et	H	CO_2Me	134-135
7-100	H	Me	NH_2	Me	H		
7-101	H	Me	NH_2	Et	H		
7-102	H	Me	NH_2	i-Pr	H		
7-103	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
7-104	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
7-105	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
7-106	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
7-107	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
7-108	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
7-109	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		
7-110	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Bảng 7-5]

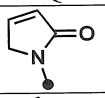
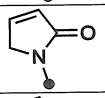
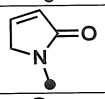
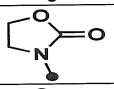
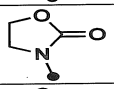
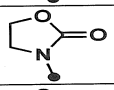
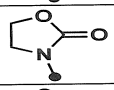
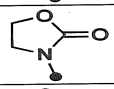
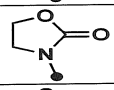
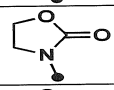
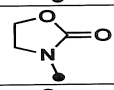
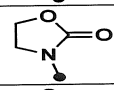
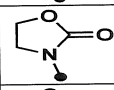
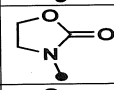
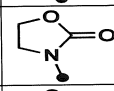
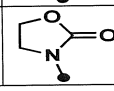
Bảng 7 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
7-111	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		
7-112	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		
7-113	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
7-114	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		
7-115	H	Me	NH_2	Me	H		
7-116	H	Me	NH_2	Et	H		
7-117	H	Me	NH_2	i-Pr	H		
7-118	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
7-119	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
7-120	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
7-121	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
7-122	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
7-123	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
7-124	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		
7-125	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		
7-126	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Bảng 7-6]

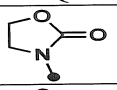
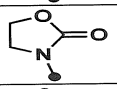
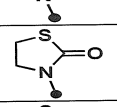
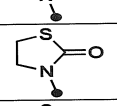
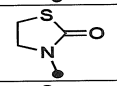
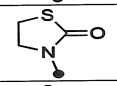
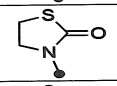
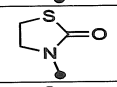
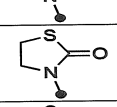
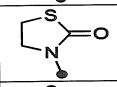
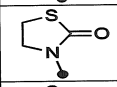
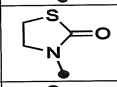
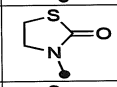
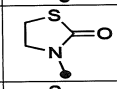
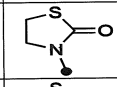
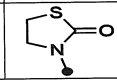
Bảng 7 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
7-127	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		
7-128	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
7-129	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		
7-130	H	Me	NH_2	Me	H		
7-131	H	Me	NH_2	Et	H		
7-132	H	Me	NH_2	i-Pr	H		
7-133	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
7-134	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
7-135	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
7-136	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
7-137	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
7-138	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
7-139	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		
7-140	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		
7-141	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		
7-142	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Bảng 7-7]

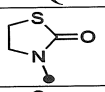
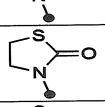
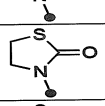
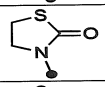
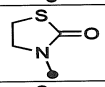
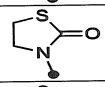
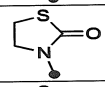
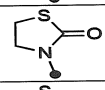
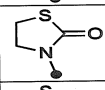
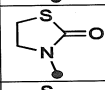
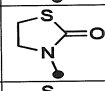
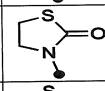
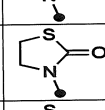
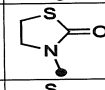
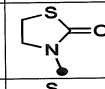
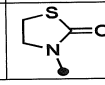
Bảng 7 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
7-143	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
7-144	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		
7-145	H	Me	NH_2	Me	H		
7-146	H	Me	NH_2	Et	H		
7-147	H	Me	NH_2	i-Pr	H		
7-148	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
7-149	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
7-150	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
7-151	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
7-152	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
7-153	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
7-154	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		
7-155	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		
7-156	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		
7-157	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		
7-158	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Bảng 7-8]

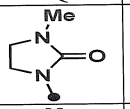
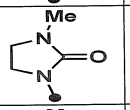
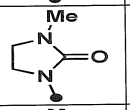
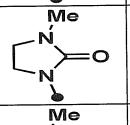
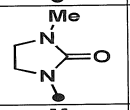
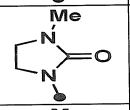
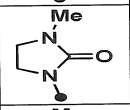
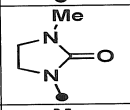
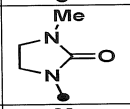
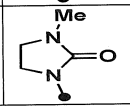
Bảng 7 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
7-159	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		
7-160	H	Me	NH_2	Me	H		
7-161	H	Me	NH_2	Et	H		
7-162	H	Me	NH_2	i-Pr	H		
7-163	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
7-164	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
7-165	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
7-166	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
7-167	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
7-168	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
7-169	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		
7-170	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		
7-171	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		
7-172	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		
7-173	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
7-174	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Bảng 7-9]

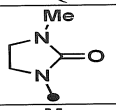
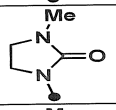
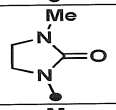
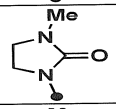
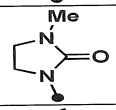
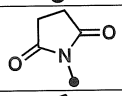
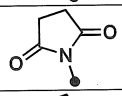
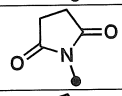
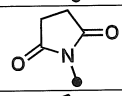
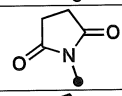
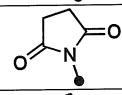
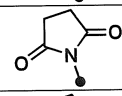
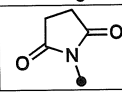
Bảng 7 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
7-175	H	Me	NH_2	Me	H		
7-176	H	Me	NH_2	Et	H		
7-177	H	Me	NH_2	i-Pr	H		
7-178	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
7-179	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
7-180	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
7-181	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
7-182	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
7-183	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
7-184	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Bảng 7-10]

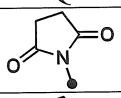
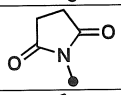
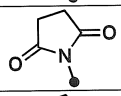
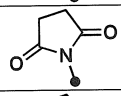
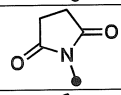
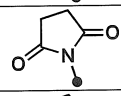
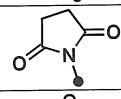
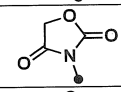
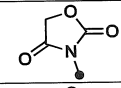
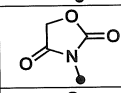
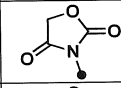
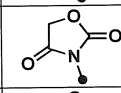
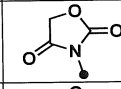
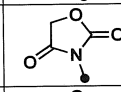
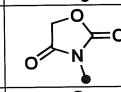
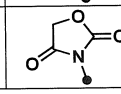
Bảng 7 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
7-185	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		
7-186	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		
7-187	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		
7-188	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
7-189	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		
7-190	H	Me	NH_2	Me	H		
7-191	H	Me	NH_2	Et	H		
7-192	H	Me	NH_2	i-Pr	H		
7-193	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
7-194	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
7-195	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
7-196	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
7-197	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Bảng 7-11]

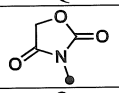
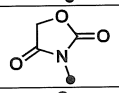
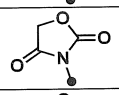
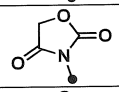
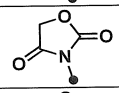
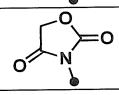
Bảng 7 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
7-198	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
7-199	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		
7-200	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		
7-201	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		
7-202	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		
7-203	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
7-204	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		
7-205	H	Me	NH_2	Me	H		
7-206	H	Me	NH_2	Et	H		
7-207	H	Me	NH_2	i-Pr	H		
7-208	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
7-209	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
7-210	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
7-211	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
7-212	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
7-213	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

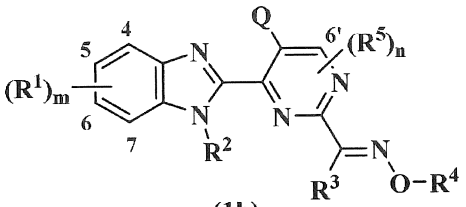
[Bảng 7-12]

Bảng 7 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
7-214	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		
7-215	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		
7-216	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		
7-217	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		
7-218	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
7-219	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Công thức hóa học 34]



(1h)

Các số vị trí trong bảng biểu thị các số được chỉ định trong công thức chung (1h).

[Bảng 8-1]

Bảng 8

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
8-1	H	Me	NH_2	Me	H	CO_2Me	
8-2	H	Me	NH_2	Me	H	SO_2Me	
8-3	H	Me	NH_2	Me	H	SO_2NHMe	
8-4	H	Me	NH_2	Et	H	CO_2Me	
8-5	H	Me	NH_2	Et	H	SO_2Me	
8-6	H	Me	NH_2	Et	H	SO_2NHMe	222-223
8-7	H	Me	NH_2	i-Pr	H	CO_2Me	
8-8	H	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2Me	
8-9	H	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2NHMe	204-205
8-10	5-Me	Me	NH_2	Me	H	CO_2Me	
8-11	5-Me	Me	NH_2	Me	H	SO_2Me	
8-12	5-Me	Me	NH_2	Me	H	SO_2NHMe	
8-13	5-Me	Me	NH_2	Et	H	CO_2Me	
8-14	5-Me	Me	NH_2	Et	H	SO_2Me	
8-15	5-Me	Me	NH_2	Et	H	SO_2NHMe	
8-16	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H	CO_2Me	
8-17	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2Me	
8-18	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2NHMe	
8-19	5-OMe	Me	NH_2	Me	H	CO_2Me	
8-20	5-OMe	Me	NH_2	Me	H	SO_2Me	
8-21	5-OMe	Me	NH_2	Me	H	SO_2NHMe	
8-22	5-OMe	Me	NH_2	Et	H	CO_2Me	
8-23	5-OMe	Me	NH_2	Et	H	SO_2Me	
8-24	5-OMe	Me	NH_2	Et	H	SO_2NHMe	
8-25	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H	CO_2Me	
8-26	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2Me	
8-27	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2NHMe	
8-28	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H	CO_2Me	
8-29	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H	SO_2Me	
8-30	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H	SO_2NHMe	

[Bảng 8-2]

Bảng 8 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
8-31	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H	CO_2Me	
8-32	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H	SO_2Me	
8-33	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H	SO_2NHMe	
8-34	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H	CO_2Me	
8-35	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2Me	
8-36	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2NHMe	
8-37	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H	CO_2Me	
8-38	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H	SO_2Me	
8-39	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H	SO_2NHMe	
8-40	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H	CO_2Me	
8-41	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H	SO_2Me	
8-42	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H	SO_2NHMe	198-199
8-43	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H	CO_2Me	
8-44	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H	CO_2Et	134-135
8-45	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2Me	
8-46	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2NHMe	
8-47	H	Me	Me	Me	H	CO_2Me	
8-48	H	Me	Me	Me	H	SO_2Me	
8-49	H	Me	Me	Me	H	SO_2NHMe	
8-50	H	Me	Me	Et	H	CO_2Me	
8-51	H	Me	Me	Et	H	SO_2Me	
8-52	H	Me	Me	Et	H	SO_2NHMe	
8-53	H	Me	Me	i-Pr	H	CO_2Me	
8-54	H	Me	Me	i-Pr	H	SO_2Me	
8-55	H	Me	Me	i-Pr	H	SO_2NHMe	
8-56	5-Me	Me	Me	Me	H	CO_2Me	
8-57	5-Me	Me	Me	Me	H	SO_2Me	
8-58	5-Me	Me	Me	Me	H	SO_2NHMe	
8-59	5-Me	Me	Me	Et	H	CO_2Me	
8-60	5-Me	Me	Me	Et	H	SO_2Me	

[Bảng 8-3]

Bảng 8 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
8-61	5-Me	Me	Me	Et	H	SO_2NHMe	
8-62	5-Me	Me	Me	i-Pr	H	CO_2Me	
8-63	5-Me	Me	Me	i-Pr	H	SO_2Me	
8-64	5-Me	Me	Me	i-Pr	H	SO_2NHMe	
8-65	5-OMe	Me	Me	Me	H	CO_2Me	
8-66	5-OMe	Me	Me	Me	H	SO_2Me	
8-67	5-OMe	Me	Me	Me	H	SO_2NHMe	
8-68	5-OMe	Me	Me	Et	H	CO_2Me	
8-69	5-OMe	Me	Me	Et	H	SO_2Me	
8-70	5-OMe	Me	Me	Et	H	SO_2NHMe	
8-71	5-OMe	Me	Me	i-Pr	H	CO_2Me	
8-72	5-OMe	Me	Me	i-Pr	H	SO_2Me	
8-73	5-OMe	Me	Me	i-Pr	H	SO_2NHMe	
8-74	5-CHF_2	Me	Me	Me	H	CO_2Me	
8-75	5-CHF_2	Me	Me	Me	H	SO_2Me	
8-76	5-CHF_2	Me	Me	Me	H	SO_2NHMe	
8-77	5-CHF_2	Me	Me	Et	H	CO_2Me	
8-78	5-CHF_2	Me	Me	Et	H	SO_2Me	
8-79	5-CHF_2	Me	Me	Et	H	SO_2NHMe	
8-80	5-CHF_2	Me	Me	i-Pr	H	CO_2Me	
8-81	5-CHF_2	Me	Me	i-Pr	H	SO_2Me	
8-82	5-CHF_2	Me	Me	i-Pr	H	SO_2NHMe	
8-83	5-CF_3	Me	Me	Me	H	CO_2Me	
8-84	5-CF_3	Me	Me	Me	H	SO_2Me	
8-85	5-CF_3	Me	Me	Me	H	SO_2NHMe	
8-86	5-CF_3	Me	Me	Et	H	CO_2Me	
8-87	5-CF_3	Me	Me	Et	H	SO_2Me	
8-88	5-CF_3	Me	Me	Et	H	SO_2NHMe	
8-89	5-CF_3	Me	Me	i-Pr	H	CO_2Me	
8-90	5-CF_3	Me	Me	i-Pr	H	SO_2Me	

[Bảng 8-4]

Bảng 8 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
8-91	5-CF_3	Me	Me	i-Pr	H	SO_2NHMe	
8-92	H	Me	NH_2	Me	6'-Me	CO_2Me	
8-93	H	Me	NH_2	Me	6'-Me	SO_2Me	
8-94	H	Me	NH_2	Me	6'-Me	SO_2NHMe	
8-95	H	Me	NH_2	Et	6'-Me	CO_2Me	
8-96	H	Me	NH_2	Et	6'-Me	SO_2Me	
8-97	H	Me	NH_2	Et	6'-Me	SO_2NHMe	
8-98	H	Me	NH_2	i-Pr	6'-Me	CO_2Me	
8-99	H	Me	NH_2	i-Pr	6'-Me	SO_2Me	
8-100	H	Me	NH_2	i-Pr	6'-Me	SO_2NHMe	
8-101	5-Me	Me	NH_2	Me	6'-Me	CO_2Me	
8-102	5-Me	Me	NH_2	Me	6'-Me	SO_2Me	
8-103	5-Me	Me	NH_2	Me	6'-Me	SO_2NHMe	
8-104	5-Me	Me	NH_2	Et	6'-Me	CO_2Me	
8-105	5-Me	Me	NH_2	Et	6'-Me	SO_2Me	
8-106	5-Me	Me	NH_2	Et	6'-Me	SO_2NHMe	
8-107	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	6'-Me	CO_2Me	
8-108	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	6'-Me	SO_2Me	
8-109	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	6'-Me	SO_2NHMe	
8-110	5-OMe	Me	NH_2	Me	6'-Me	CO_2Me	
8-111	5-OMe	Me	NH_2	Me	6'-Me	SO_2Me	
8-112	5-OMe	Me	NH_2	Me	6'-Me	SO_2NHMe	
8-113	5-OMe	Me	NH_2	Et	6'-Me	CO_2Me	
8-114	5-OMe	Me	NH_2	Et	6'-Me	SO_2Me	
8-115	5-OMe	Me	NH_2	Et	6'-Me	SO_2NHMe	
8-116	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	6'-Me	CO_2Me	
8-117	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	6'-Me	SO_2Me	
8-118	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	6'-Me	SO_2NHMe	
8-119	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	6'-Me	CO_2Me	
8-120	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	6'-Me	SO_2Me	

[Bảng 8-5]

Bảng 8 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
8-121	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	6'-Me	SO_2NHMe	
8-122	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	6'-Me	CO_2Me	
8-123	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	6'-Me	SO_2Me	
8-124	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	6'-Me	SO_2NHMe	
8-125	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	6'-Me	CO_2Me	
8-126	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	6'-Me	SO_2Me	
8-127	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	6'-Me	SO_2NHMe	
8-128	5-CF_3	Me	NH_2	Me	6'-Me	CO_2Me	
8-129	5-CF_3	Me	NH_2	Me	6'-Me	SO_2Me	
8-130	5-CF_3	Me	NH_2	Me	6'-Me	SO_2NHMe	
8-131	5-CF_3	Me	NH_2	Et	6'-Me	CO_2Me	
8-132	5-CF_3	Me	NH_2	Et	6'-Me	SO_2Me	
8-133	5-CF_3	Me	NH_2	Et	6'-Me	SO_2NHMe	
8-134	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	6'-Me	CO_2Me	
8-135	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	6'-Me	SO_2Me	
8-136	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	6'-Me	SO_2NHMe	
8-137	H	Me	Me	Me	6'-Me	CO_2Me	
8-138	H	Me	Me	Me	6'-Me	SO_2Me	
8-139	H	Me	Me	Me	6'-Me	SO_2NHMe	
8-140	H	Me	Me	Et	6'-Me	CO_2Me	
8-141	H	Me	Me	Et	6'-Me	SO_2Me	
8-142	H	Me	Me	Et	6'-Me	SO_2NHMe	
8-143	H	Me	Me	i-Pr	6'-Me	CO_2Me	
8-144	H	Me	Me	i-Pr	6'-Me	SO_2Me	
8-145	H	Me	Me	i-Pr	6'-Me	SO_2NHMe	
8-146	5-Me	Me	Me	Me	6'-Me	CO_2Me	
8-147	5-Me	Me	Me	Me	6'-Me	SO_2Me	
8-148	5-Me	Me	Me	Me	6'-Me	SO_2NHMe	
8-149	5-Me	Me	Me	Et	6'-Me	CO_2Me	
8-150	5-Me	Me	Me	Et	6'-Me	SO_2Me	

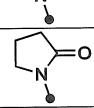
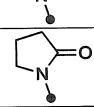
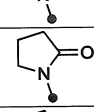
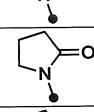
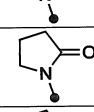
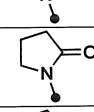
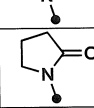
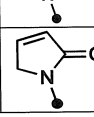
[Bảng 8-6]

Bảng 8 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
8-151	5-Me	Me	Me	Et	6'-Me	SO_2NHMe	
8-152	5-Me	Me	Me	i-Pr	6'-Me	CO_2Me	
8-153	5-Me	Me	Me	i-Pr	6'-Me	SO_2Me	
8-154	5-Me	Me	Me	i-Pr	6'-Me	SO_2NHMe	
8-155	5-OMe	Me	Me	Me	6'-Me	CO_2Me	
8-156	5-OMe	Me	Me	Me	6'-Me	SO_2Me	
8-157	5-OMe	Me	Me	Me	6'-Me	SO_2NHMe	
8-158	5-OMe	Me	Me	Et	6'-Me	CO_2Me	
8-159	5-OMe	Me	Me	Et	6'-Me	SO_2Me	
8-160	5-OMe	Me	Me	Et	6'-Me	SO_2NHMe	
8-161	5-OMe	Me	Me	i-Pr	6'-Me	CO_2Me	
8-162	5-OMe	Me	Me	i-Pr	6'-Me	SO_2Me	
8-163	5-OMe	Me	Me	i-Pr	6'-Me	SO_2NHMe	
8-164	5-CHF_2	Me	Me	Me	6'-Me	CO_2Me	
8-165	5-CHF_2	Me	Me	Me	6'-Me	SO_2Me	
8-166	5-CHF_2	Me	Me	Me	6'-Me	SO_2NHMe	
8-167	5-CHF_2	Me	Me	Et	6'-Me	CO_2Me	
8-168	5-CHF_2	Me	Me	Et	6'-Me	SO_2Me	
8-169	5-CHF_2	Me	Me	Et	6'-Me	SO_2NHMe	
8-170	5-CHF_2	Me	Me	i-Pr	6'-Me	CO_2Me	
8-171	5-CHF_2	Me	Me	i-Pr	6'-Me	SO_2Me	
8-172	5-CHF_2	Me	Me	i-Pr	6'-Me	SO_2NHMe	
8-173	5-CF_3	Me	Me	Me	6'-Me	CO_2Me	
8-174	5-CF_3	Me	Me	Me	6'-Me	SO_2Me	
8-175	5-CF_3	Me	Me	Me	6'-Me	SO_2NHMe	
8-176	5-CF_3	Me	Me	Et	6'-Me	CO_2Me	
8-177	5-CF_3	Me	Me	Et	6'-Me	SO_2Me	
8-178	5-CF_3	Me	Me	Et	6'-Me	SO_2NHMe	
8-179	5-CF_3	Me	Me	i-Pr	6'-Me	CO_2Me	
8-180	5-CF_3	Me	Me	i-Pr	6'-Me	SO_2Me	
8-181	5-CF_3	Me	Me	i-Pr	6'-Me	SO_2NHMe	

[Bảng 8-7]

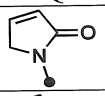
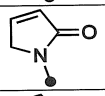
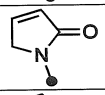
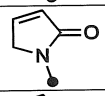
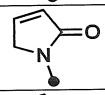
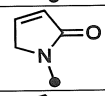
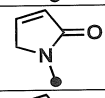
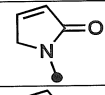
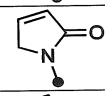
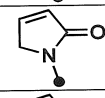
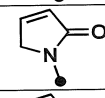
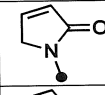
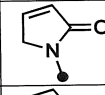
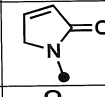
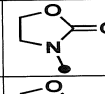
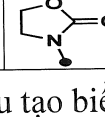
Bảng 8 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
8-182	H	Me	NH_2	Me	H		
8-183	H	Me	NH_2	Et	H		
8-184	H	Me	NH_2	i-Pr	H		
8-185	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
8-186	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
8-187	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
8-188	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
8-189	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
8-190	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
8-191	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		
8-192	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		
8-193	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		
8-194	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		
8-195	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
8-196	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		
8-197	H	Me	NH_2	Me	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Bảng 8-8]

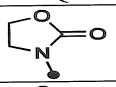
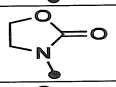
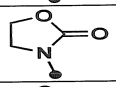
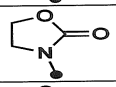
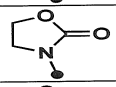
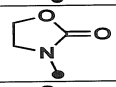
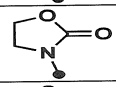
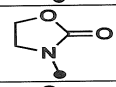
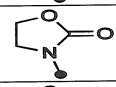
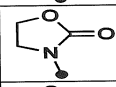
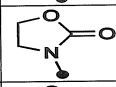
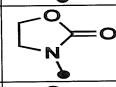
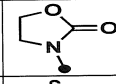
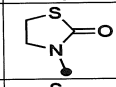
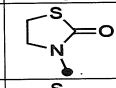
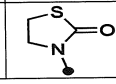
Bảng 8 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
8-198	H	Me	NH_2	Et	H		
8-199	H	Me	NH_2	i-Pr	H		
8-200	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
8-201	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
8-202	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
8-203	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
8-204	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
8-205	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
8-206	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		
8-207	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		
8-208	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		
8-209	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		
8-210	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
8-211	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		
8-212	H	Me	NH_2	Me	H		
8-213	H	Me	NH_2	Et	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Bảng 8-9]

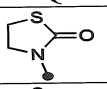
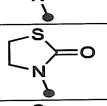
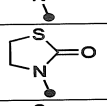
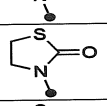
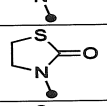
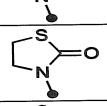
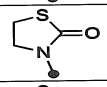
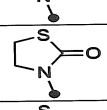
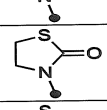
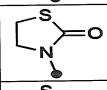
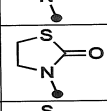
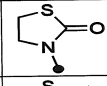
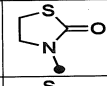
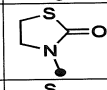
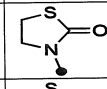
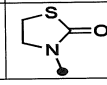
Bảng 8 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
8-214	H	Me	NH_2	i-Pr	H		
8-215	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
8-216	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
8-217	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
8-218	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
8-219	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
8-220	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
8-221	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		
8-222	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		
8-223	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		
8-224	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		
8-225	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
8-226	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		
8-227	H	Me	NH_2	Me	H		
8-228	H	Me	NH_2	Et	H		
8-229	H	Me	NH_2	i-Pr	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Bảng 8-10]

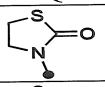
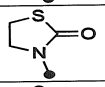
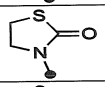
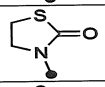
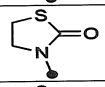
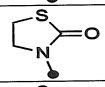
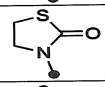
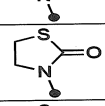
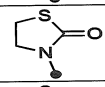
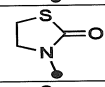
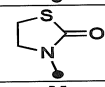
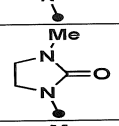
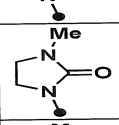
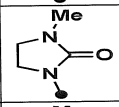
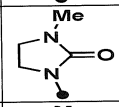
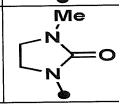
Bảng 8 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
8-230	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
8-231	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
8-232	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
8-233	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
8-234	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
8-235	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
8-236	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		
8-237	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		
8-238	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		
8-239	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		
8-240	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
8-241	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		
8-242	H	Me	NH_2	Me	H		
8-243	H	Me	NH_2	Et	H		
8-244	H	Me	NH_2	i-Pr	H		
8-245	5-Me	Me	NH_2	Me	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Bảng 8-11]

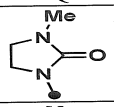
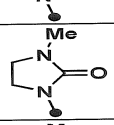
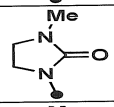
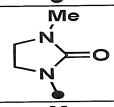
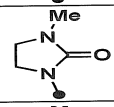
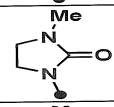
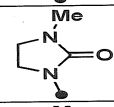
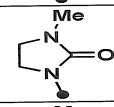
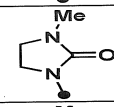
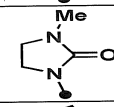
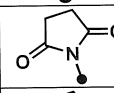
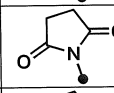
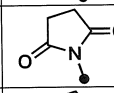
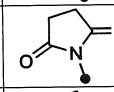
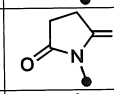
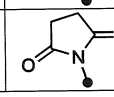
Bảng 8 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
8-246	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
8-247	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
8-248	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
8-249	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
8-250	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
8-251	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		
8-252	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		
8-253	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		
8-254	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		
8-255	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
8-256	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		
8-257	H	Me	NH_2	Me	H		
8-258	H	Me	NH_2	Et	H		
8-259	H	Me	NH_2	i-Pr	H		
8-260	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
8-261	5-Me	Me	NH_2	Et	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Bảng 8-12]

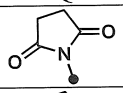
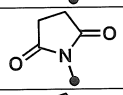
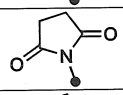
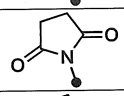
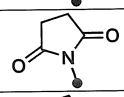
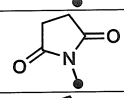
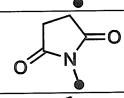
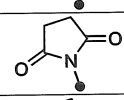
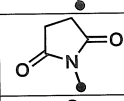
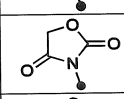
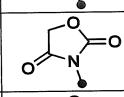
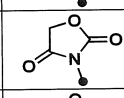
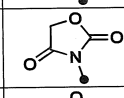
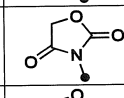
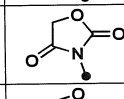
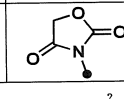
Bảng 8 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
8-262	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
8-263	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
8-264	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
8-265	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
8-266	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		
8-267	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		
8-268	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		
8-269	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		
8-270	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
8-271	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		
8-272	H	Me	NH_2	Me	H		
8-273	H	Me	NH_2	Et	H		
8-274	H	Me	NH_2	i-Pr	H		
8-275	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
8-276	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
8-277	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Bảng 8-13]

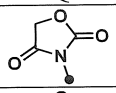
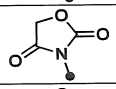
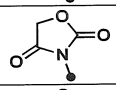
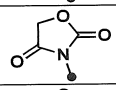
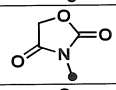
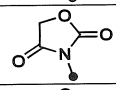
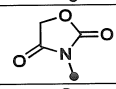
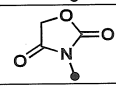
Bảng 8 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
8-278	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
8-279	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
8-280	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
8-281	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		
8-282	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		
8-283	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		
8-284	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		
8-285	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
8-286	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		
8-287	H	Me	NH_2	Me	H		
8-288	H	Me	NH_2	Et	H		
8-289	H	Me	NH_2	i-Pr	H		
8-290	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
8-291	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
8-292	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
8-293	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

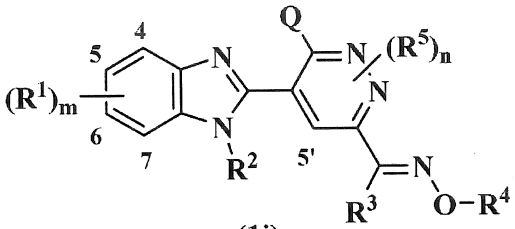
[Bảng 8-14]

Bảng 8 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
8-294	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
8-295	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
8-296	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		
8-297	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		
8-298	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		
8-299	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		
8-300	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
8-301	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Công thức hóa học 35]



(1i)

Các số vị trí trong bảng biểu thị các số được chỉ định trong công thức chung (1i).

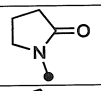
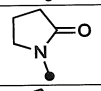
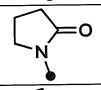
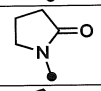
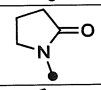
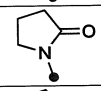
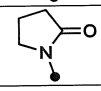
[0005][Bảng 9-1]

Bảng 9

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
9-1	H	Me	NH_2	Me	H	CO_2Me	
9-2	H	Me	NH_2	Me	H	SO_2Me	
9-3	H	Me	NH_2	Me	H	SO_2NHMe	
9-4	H	Me	NH_2	Et	H	CO_2Me	
9-5	H	Me	NH_2	Et	H	SCH_2(4-t-BuPh)	NMR
9-6	H	Me	NH_2	Et	H	SO_2Me	
9-7	H	Me	NH_2	Et	H	SO_2NHMe	
9-8	H	Me	NH_2	i-Pr	H	Cl	NMR
9-9	H	Me	NH_2	i-Pr	H	CO_2Me	
9-10	H	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2Me	
9-11	H	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2NHMe	NMR
9-12	5-Me	Me	NH_2	Me	H	CO_2Me	
9-13	5-Me	Me	NH_2	Me	H	SO_2Me	
9-14	5-Me	Me	NH_2	Me	H	SO_2NHMe	
9-15	5-Me	Me	NH_2	Et	H	CO_2Me	
9-16	5-Me	Me	NH_2	Et	H	SO_2Me	
9-17	5-Me	Me	NH_2	Et	H	SO_2NHMe	
9-18	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H	CO_2Me	
9-19	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2Me	
9-20	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2NHMe	
9-21	5-OMe	Me	NH_2	Me	H	CO_2Me	
9-22	5-OMe	Me	NH_2	Me	H	SO_2Me	
9-23	5-OMe	Me	NH_2	Me	H	SO_2NHMe	
9-24	5-OMe	Me	NH_2	Et	H	CO_2Me	
9-25	5-OMe	Me	NH_2	Et	H	SO_2Me	
9-26	5-OMe	Me	NH_2	Et	H	SO_2NHMe	
9-27	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H	CO_2Me	
9-28	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2Me	
9-29	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2NHMe	
9-30	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H	CO_2Me	

[Bảng 9-2]

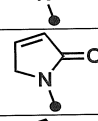
Bảng 9 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
9-31	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H	SO_2Me	
9-32	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H	SO_2NHMe	
9-33	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H	CO_2Me	
9-34	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H	SO_2Me	
9-35	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H	SO_2NHMe	
9-36	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H	CO_2Me	
9-37	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2Me	
9-38	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2NHMe	
9-39	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H	CO_2Me	
9-40	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H	SO_2Me	
9-41	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H	SO_2NHMe	
9-42	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H	CO_2Me	
9-43	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H	SO_2Me	
9-44	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H	SO_2NHMe	
9-45	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H	CO_2Me	
9-46	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2Me	
9-47	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H	SO_2NHMe	
9-48	H	Me	NH_2	Me	H		
9-49	H	Me	NH_2	Et	H		
9-50	H	Me	NH_2	i-Pr	H		
9-51	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
9-52	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
9-53	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
9-54	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

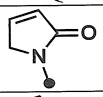
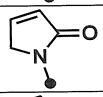
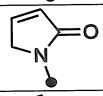
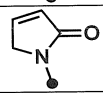
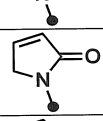
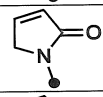
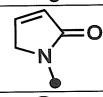
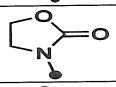
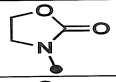
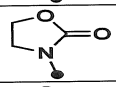
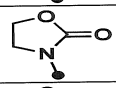
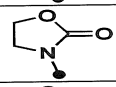
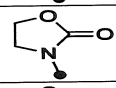
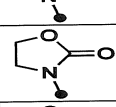
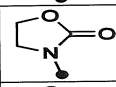
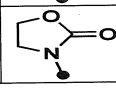
[Bảng 9-3]

Bảng 9 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
9-55	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
9-56	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
9-57	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		
9-58	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		
9-59	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		
9-60	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		
9-61	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
9-62	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		
9-63	H	Me	NH_2	Me	H		
9-64	H	Me	NH_2	Et	H		
9-65	H	Me	NH_2	i-Pr	H		
9-66	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
9-67	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
9-68	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
9-69	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
9-70	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

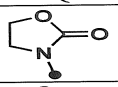
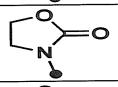
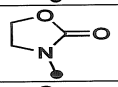
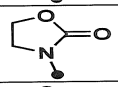
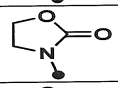
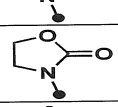
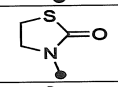
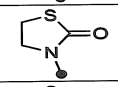
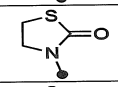
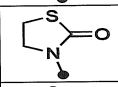
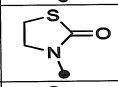
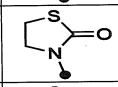
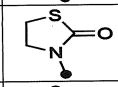
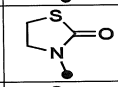
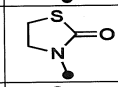
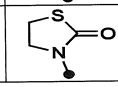
[Bảng 9-4]

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
9-71	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
9-72	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		
9-73	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		
9-74	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		
9-75	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		
9-76	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
9-77	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		
9-78	H	Me	NH_2	Me	H		
9-79	H	Me	NH_2	Et	H		
9-80	H	Me	NH_2	i-Pr	H		
9-81	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
9-82	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
9-83	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
9-84	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
9-85	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
9-86	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Bảng 9-5]

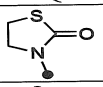
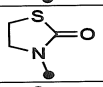
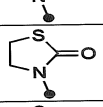
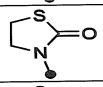
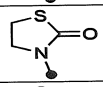
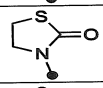
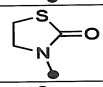
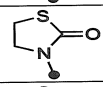
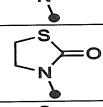
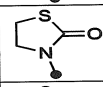
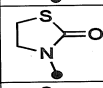
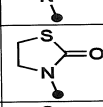
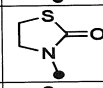
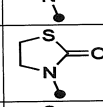
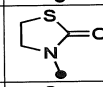
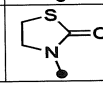
Bảng 9 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
9-87	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		
9-88	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		
9-89	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		
9-90	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		
9-91	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
9-92	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		
9-93	H	Me	NH_2	Me	H		
9-94	H	Me	NH_2	Et	H		
9-95	H	Me	NH_2	i-Pr	H		
9-96	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
9-97	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
9-98	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
9-99	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
9-100	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
9-101	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
9-102	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Bảng 9-6]

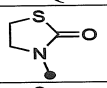
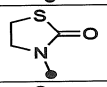
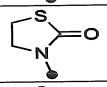
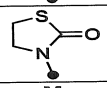
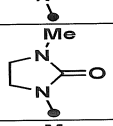
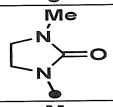
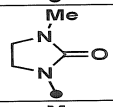
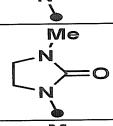
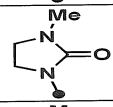
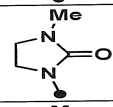
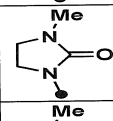
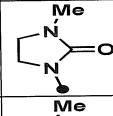
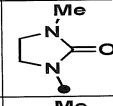
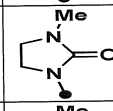
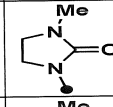
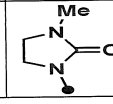
Bảng 9 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
9-103	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		
9-104	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		
9-105	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		
9-106	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
9-107	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		
9-108	H	Me	NH_2	Me	H		
9-109	H	Me	NH_2	Et	H		
9-110	H	Me	NH_2	i-Pr	H		
9-111	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
9-112	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
9-113	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
9-114	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
9-115	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
9-116	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
9-117	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		
9-118	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Bảng 9-7]

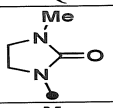
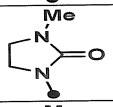
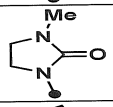
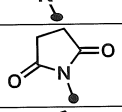
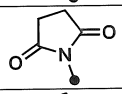
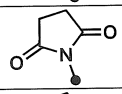
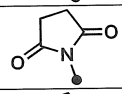
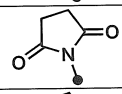
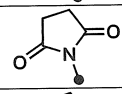
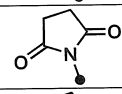
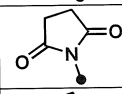
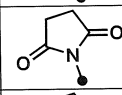
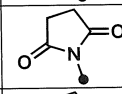
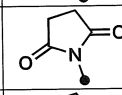
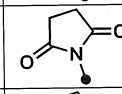
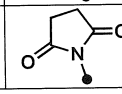
Bảng 9 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
9-119	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		
9-120	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		
9-121	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
9-122	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		
9-123	H	Me	NH_2	Me	H		
9-124	H	Me	NH_2	Et	H		
9-125	H	Me	NH_2	i-Pr	H		
9-126	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
9-127	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
9-128	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
9-129	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
9-130	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
9-131	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
9-132	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		
9-133	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		
9-134	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Bảng 9-8]

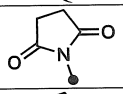
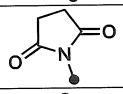
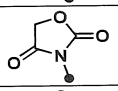
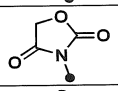
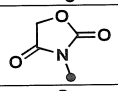
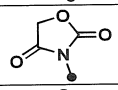
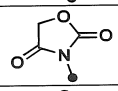
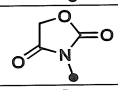
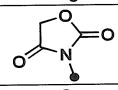
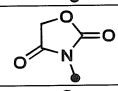
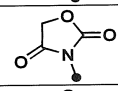
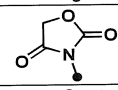
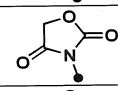
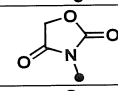
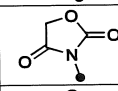
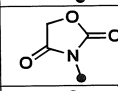
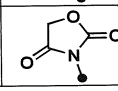
Bảng 9 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
9-135	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		
9-136	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
9-137	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		
9-138	H	Me	NH_2	Me	H		
9-139	H	Me	NH_2	Et	H		
9-140	H	Me	NH_2	i-Pr	H		
9-141	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
9-142	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
9-143	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
9-144	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
9-145	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
9-146	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
9-147	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		
9-148	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		
9-149	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		
9-150	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Bảng 9-9]

Bảng 9 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
9-151	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
9-152	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		
9-153	H	Me	NH_2	Me	H		
9-154	H	Me	NH_2	Et	H		
9-155	H	Me	NH_2	i-Pr	H		
9-156	5-Me	Me	NH_2	Me	H		
9-157	5-Me	Me	NH_2	Et	H		
9-158	5-Me	Me	NH_2	i-Pr	H		
9-159	5-OMe	Me	NH_2	Me	H		
9-160	5-OMe	Me	NH_2	Et	H		
9-161	5-OMe	Me	NH_2	i-Pr	H		
9-162	5-CHF_2	Me	NH_2	Me	H		
9-163	5-CHF_2	Me	NH_2	Et	H		
9-164	5-CHF_2	Me	NH_2	i-Pr	H		
9-165	5-CF_3	Me	NH_2	Me	H		
9-166	5-CF_3	Me	NH_2	Et	H		
9-167	5-CF_3	Me	NH_2	i-Pr	H		

Vòng tròn đậm màu đen trong công thức cấu tạo biểu thị vị trí liên kết.

[Bảng 9-10]

Bảng 9 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
9-168	H	Me	Me	Me	H	CO_2Me	
9-169	H	Me	Me	Me	H	SO_2Me	
9-170	H	Me	Me	Me	H	SO_2NHMe	
9-171	H	Me	Me	Et	H	CO_2Me	
9-172	H	Me	Me	Et	H	SO_2Me	
9-173	H	Me	Me	Et	H	SO_2NHMe	
9-174	H	Me	Me	i-Pr	H	CO_2Me	
9-175	H	Me	Me	i-Pr	H	SO_2Me	
9-176	H	Me	Me	i-Pr	H	SO_2NHMe	
9-177	5-Me	Me	Me	Me	H	CO_2Me	
9-178	5-Me	Me	Me	Me	H	SO_2Me	
9-179	5-Me	Me	Me	Me	H	SO_2NHMe	
9-180	5-Me	Me	Me	Et	H	CO_2Me	
9-181	5-Me	Me	Me	Et	H	SO_2Me	
9-182	5-Me	Me	Me	Et	H	SO_2NHMe	
9-183	5-Me	Me	Me	i-Pr	H	CO_2Me	
9-184	5-Me	Me	Me	i-Pr	H	SO_2Me	
9-185	5-Me	Me	Me	i-Pr	H	SO_2NHMe	
9-186	5-OMe	Me	Me	Me	H	CO_2Me	
9-187	5-OMe	Me	Me	Me	H	SO_2Me	
9-188	5-OMe	Me	Me	Me	H	SO_2NHMe	
9-189	5-OMe	Me	Me	Et	H	CO_2Me	
9-190	5-OMe	Me	Me	Et	H	SO_2Me	
9-191	5-OMe	Me	Me	Et	H	SO_2NHMe	
9-192	5-OMe	Me	Me	i-Pr	H	CO_2Me	
9-193	5-OMe	Me	Me	i-Pr	H	SO_2Me	
9-194	5-OMe	Me	Me	i-Pr	H	SO_2NHMe	
9-195	5-CHF_2	Me	Me	Me	H	CO_2Me	
9-196	5-CHF_2	Me	Me	Me	H	SO_2Me	
9-197	5-CHF_2	Me	Me	Me	H	SO_2NHMe	
9-198	5-CHF_2	Me	Me	Et	H	CO_2Me	
9-199	5-CHF_2	Me	Me	Et	H	SO_2Me	

[Bảng 9-11]

Bảng 9 (Tiếp tục)

Hợp chất số	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Q	Giá trị tính chất vật lý
9-200	5-CHF_2	Me	Me	Et	H	SO_2NHMe	
9-201	5-CHF_2	Me	Me	i-Pr	H	CO_2Me	
9-202	5-CHF_2	Me	Me	i-Pr	H	SO_2Me	
9-203	5-CHF_2	Me	Me	i-Pr	H	SO_2NHMe	
9-204	5-CF_3	Me	Me	Me	H	CO_2Me	
9-205	5-CF_3	Me	Me	Me	H	SO_2Me	
9-206	5-CF_3	Me	Me	Me	H	SO_2NHMe	
9-207	5-CF_3	Me	Me	Et	H	CO_2Me	
9-208	5-CF_3	Me	Me	Et	H	SO_2Me	
9-209	5-CF_3	Me	Me	Et	H	SO_2NHMe	
9-210	5-CF_3	Me	Me	i-Pr	H	CO_2Me	
9-211	5-CF_3	Me	Me	i-Pr	H	SO_2Me	
9-212	5-CF_3	Me	Me	i-Pr	H	SO_2NHMe	

[Bảng 10-1]

Bảng 10

Hợp chất số	Dữ liệu ^{1}H-NMR ($CDCl_3$/TMS, ppm)
1-6	δ 8,51(d, 1H), 8,33(s, 1H), 8,16(s, 1H), 7,78(dd, 1H), 7,46(dd, 1H), 7,39(ddd, 1H), 7,33(ddd, 1H), 4,63(q, 2H), 3,84(q, 2H), 3,76(s, 3H), 1,34(t, 3H)
1-7	δ 8,47(d, 1H), 8,26(d, 1H), 7,79(d, 1H), 7,47(d, 1H), 7,39(dt, 1H), 7,33(dt, 1H), 4,34(q, 2H), 3,79(s, 3H), 3,63(s, 3H), 2,29(s, 3H), 1,38(t, 3H)
1-10	δ 8,53(d, 1H), 8,22(d, 1H), 7,81(dd, 1H), 7,49(d, 1H), 7,42(dt, 1H), 7,36(dt, 1H), 5,53(s, 2H), 3,76(s, 3H), 3,57(s, 3H)
1-16	δ 8,45(d, 1H), 8,24(d, 1H), 8,03(q, 1H), 7,78(d, 1H), 7,48(d, 1H), 7,41(t, 1H), 7,35(t, 1H), 5,45 (s, 2H), 4,15(t, 2H), 3,91(s, 3H), 2,80(d, 3H), 1,78(sext, 2H), 1,00(t, 3H)
1-22	δ 8,50(d, 1H), 8,21(d, 1H), 7,79(d, 1H), 7,47(dd, 1H), 7,40(dt, 1H), 7,34(dt, 1H),5,59 (s, 1H), 4,15(q, 2H), 3,74(s, 3H), 3,56(s, 3H), 3,08(d, 3H), 1,34(t, 3H)
1-26	δ 8,52(d, 1H), 8,32(s, 1H), 8,16(d, 1H), 7,78(d, 1H), 7,49(dd, 1H), 7,38(dd, 1H), 7,32(dd, 1H), 4,64(q, 2H), 4,22(q, 2H), 3,93(q, 2H), 1,44(t, 3H), 1,36(t, 3H)
1-29	δ 8,49(d, 1H), 8,29(s, 1H), 8,16(d, 1H), 7,77(d, 1H), 7,66(d, 1H), 7,32(dd, 1H), 7,30(dd, 1H), 4,64(q, 2H), 4,45(sep, 2H), 3,84(q, 2H), 1,65(d, 6H), 1,34(t, 3H)
1-32	δ 8,53(d, 1H), 8,34(s, 1H), 8,17(d, 1H), 7,80(d, 1H), 7,64(dd, 1H), 7,42(dd, 1H), 7,36(dd, 1H), 4,95(d, 2H), 4,64(q, 2H), 3,94(q, 2H), 2,35(t, 1H), 1,37(t, 3H)
1-35	δ 8,55(d, 1H), 8,32(s, 1H), 8,17(d, 1H), 7,82(d, 1H), 7,53(d, 1H), 7,45(dd, 1H), 7,39(dd, 1H), 4,92(q, 2H), 4,64(q, 2H), 3,91(q, 2H), 1,37(t, 3H)
1-38	δ 8,52(d, 1H), 8,30(s, 1H), 8,15(d, 1H), 7,79(d, 1H), 7,64(d, 1H), 7,41(dd, 1H), 7,36(dd, 1H), 5,58(s, 2H), 4,63(q, 2H), 3,93(q, 2H), 3,24(s, 3H), 1,37(t, 3H)
1-39	δ 8,47(d, 1H), 8,19(s, 1H), 8,17(d, 1H), 7,51(d, 1H), 7,40(d, 1H), 7,24(dd, 1H), 4,35(q, 2H), 3,97(q, 2H), 3,79(s, 3H), 1,39(t, 3H), 1,38(t, 3H)
1-41	δ 8,52(d, 1H), 8,32(s, 1H), 8,15(d, 1H), 7,52(d, 1H), 7,41(d, 1H), 7,26(dd, 1H), 4,64(q, 2H), 4,00(q, 2H), 3,80(s, 3H), 1,40(t, 3H)
1-51	δ 8,47(d, 1H), 8,24(d, 1H), 7,32-7,25(m, 2H), 7,13(dd, 1H), 4,35(q, 2H), 3,79(s, 3H), 3,69(s, 3H), 2,66(s, 3H), 2,29(s, 3H), 1,38(s, 3H)
1-61	δ 8,47(d, 1H), 8,45(q, 1H), 8,23(d, 1H), 7,33(d, 1H), 7,32(t, 1H), 7,18(d, 1H), 5,45 (s, 2H), 4,24(q, 2H), 3,92(s, 3H), 3,05(q, 2H), 2,81(d, 3H), 1,39(t, 3H), 1,37(t, 3H)
1-63	δ 8,47(d, 1H), 8,27(d, 1H), 7,45(dd, 1H), 7,39(dd, 1H), 7,16(ddd, 1H), 4,35(q, 2H), 3,78(s, 3H), 3,61(s, 3H), 2,30(s, 3H), 1,37(t, 3H)
1-66	δ 8,45(d, 1H), 8,25(d, 1H), 7,79(d, 1H), 7,45(dd, 1H), 7,40(dd, 1H), 7,18(q, 1H), 5,44(s, 2H), 4,24(t, 2H), 3,89(s, 3H), 2,80(d, 3H), 1,37(t, 3H)
1-67	δ 8,45(d, 1H), 8,25(d, 1H), 7,79(d, 1H), 7,45(dd, 1H), 7,40(dd, 1H), 7,18(q, 1H), 5,45(s, 2H), 4,15(t, 2H), 3,89(s, 3H), 2,80(d, 3H), 1,78(sq, 2H), 1,01(t, 4H)

[Bảng 10-2]

Bảng 10 (Tiếp tục)

Hợp chất số	Dữ liệu ^{1}H-NMR ($CDCl_3$/TMS, ppm)
1-86	δ 8,51(d, 1H), 8,32(s, 1H), 8,18(d, 1H), 7,93(d, 1H), 7,49(dd, 1H), 7,34(d, 1H), 4,64(q, 2H), 3,81(q, 2H), 3,74(s, 3H), 1,34(t, 3H)
1-101	δ 8,53(d, 1H), 8,24(d, 1H), 7,58(d, 1H), 7,36(d, 1H), 7,23(d, 1H), 6,57(s, 1H), 5,54(s, 2H), 3,73(s, 3H), 3,59(s, 3H), 2,53(s, 3H)
1-111	δ 8,43(d, 1H), 8,30(d, 1H), 7,57(d, 1H), 7,33(d, 1H), 7,21(dd, 1H), 5,46(s, 2H), 4,23(q, 2H), 3,78(q, 2H), 3,70(s, 3H), 2,51(s, 3H), 1,36(t, 3H), 1,32(t, 3H)
1-116	δ 8,35(d, 1H), 8,27(d, 1H), 7,56(d, 1H), 7,32(d, 1H), 7,20(dd, 1H), 5,45(s, 2H), 4,22(q, 2H), 3,62(s, 3H), 2,70(s, 6H), 2,51(s, 3H), 1,35(t, 3H)
1-128	δ 8,48(d, 1H), 8,29(d, 1H), 7,63(d, 1H), 7,54(s, 1H), 7,20(dd, 1H), 5,48(s, 2H), 4,23(q, 2H), 3,59(s, 3H), 3,39(m, 1H), 1,36(t, 3H), 0,92(m, 2H), 0,82(m, 2H)
1-134	δ 8,46(d, 1H), 8,24(d, 1H), 7,60(s, 1H), 7,37(d, 1H), 7,24(dd, 1H), 4,35(q, 2H), 3,77(s, 3H), 3,66(s, 3H), 2,81(q, 2H), 2,29(s, 3H), 1,38(t, 3H), 1,32(t, 3H)
1-141	δ 8,44(d, 1H), 8,19(s, 1H), 8,18(d, 1H), 7,84(bs, 1H), 7,52(dd, 1H), 7,39(d, 1H), 6,88(dd, 1H), 5,78(d, 1H), 5,26(d, 1H), 4,35(q, 2H), 3,76(q, 2H), 3,71(s, 3H), 1,37(t, 3H), 1,33(t, 3H)
1-143	δ 8,49(d, 1H), 8,31(d, 1H), 7,79(d, 1H), 7,51(dd, 1H), 7,40(d, 1H), 6,88(dd, 1H), 5,79(dd, 1H), 5,47(bs, 2H), 5,25(dd, 1H), 4,24(q, 2H), 3,72(s, 3H), 3,57(s, 3H), 1,36(t, 3H)
1-148	δ 10,13(s, 1H), 8,48(d, 1H), 8,32(s, 1H), 8,30(d, 1H), 7,99(dd, 1H), 7,58(d, 1H), 4,36(q, 1H), 3,83(s, 3H), 3,74(s, 4H), 3,62(s, 3H), 2,30(s, 3H), 1,38(t, 3H)
1-151	δ 8,46(d, 1H), 8,23(d, 1H), 7,57(s, 1H), 7,36(d, 1H), 7,22(dd, 1H), 4,35(q, 2H), 3,77(s, 3H), 3,65(s, 3H), 2,75(t, 3H), 2,29(s, 3H), 1,72(sext, 2H), 1,39(t, 3H), 0,98(t, 3H)
1-154	δ 8,46(d, 1H), 8,24(d, 1H), 7,62(s, 1H), 7,38(d, 1H), 7,28(dd, 1H), 4,35(q, 2H), 3,76(s, 3H), 3,65(s, 3H), 3,08(sep, 1H), 2,28(s, 3H), 1,33(d, 6H)
1-157	δ 8,46(d, 1H), 8,24(d, 1H), 7,57(s, 1H), 7,36(d, 1H), 7,23(dd, 1H), 4,35(q, 2H), 3,77(s, 3H), 3,66(s, 3H), 2,75(t, 2H), 2,29(s, 3H), 1,70(quin, 2H), 1,43-1,33(m, 4H), 0,91(t, 3H)
1-158	δ 8,47(d, 1H), 8,25(d, 1H), 7,78(d, 1H), 7,48(dd, 1H), 7,39(d, 1H), 4,34(q, 2H), 3,77(s, 3H), 3,67(s, 3H), 2,28(s, 3H), 1,42(s, 9H)
1-164	δ 8,49(d, 1H), 8,31(d, 1H), 7,75(s, 1H), 7,75(d, 1H), 7,40(dd, 1H), 5,47(s, 2H), 4,62(s, 2H), 4,24(q, 2H), 3,74(s, 3H), 3,57(s, 3H), 3,43(s, 3H), 1,36(t, 3H)
1-165	δ 8,47(d, 1H), 8,26(d, 1H), 7,68(s, 1H), 7,42(d, 1H), 7,38(dd, 1H), 4,35(q, 2H), 3,85(s, 2H), 3,78(s, 3H), 3,65(s, 3H), 2,30(s, 3H), 2,05(s, 3H), 1,38(t, 3H)
1-166	δ 8,47(d, 1H), 8,28(d, 1H), 7,72(d, 1H), 7,48(d, 1H), 7,33(dd, 1H), 4,36(q, 2H), 4,28(d, 1H), 4,09(d, 1H), 3,80(s, 3H), 3,63(s, 3H), 2,51(s, 3H), 2,29(s, 3H), 1,38(s, 3H)
1-167	δ 8,48(d, 1H), 8,28(d, 1H), 7,83(d, 1H), 7,51(dd, 1H), 7,46(d, 1H), 4,42(s, 2H), 4,36(q, 2H), 3,81(s, 3H), 3,64(s, 3H), 2,79(s, 3H), 2,29(s, 3H), 1,39(t, 3H)

[Bảng 10-3]

Bảng 10 (Tiếp tục)

Hợp chất số	Dữ liệu ^{1}H-NMR ($CDCl_3$/TMS, ppm)
1-171	δ 8,46(d, 1H), 8,25(d, 1H), 7,74(d, 1H), 7,43(d, 1H), 7,39(dd, 1H), 4,35(q, 2H), 3,94(s, 1H), 3,78(s, 3H), 3,64(s, 3H), 3,49(s, 2H), 2,51(s, 3H), 2,30(s, 3H), 1,39(t, 3H)
1-172	δ 8,47(d, 1H), 8,25(d, 1H), 7,69(d, 1H), 7,41(d, 1H), 7,38(dd, 1H), 4,35(q, 2H), 3,79(s, 3H), 3,65(s, 3H), 3,58(s, 3H), 2,30(s, 6H), 2,30(s, 2H), 1,37(t, 3H)
1-173	δ 8,48(d, 1H), 8,24(d, 1H), 7,72(d, 1H), 7,42(d, 1H), 7,40(d, 1H), 4,35(q, 2H), 3,78(s, 3H), 3,75(s, 2H), 3,66(s, 3H), 2,60(q, 4H), 2,30(s, 3H), 1,38(t, 3H), 1,09(s, 6H)
1-175	δ 8,47(d, 1H), 8,27(d, 1H), 7,81(s, 1H), 7,46(bs, 2H), 4,78(s, 2H), 4,34(q, 2H), 3,79(s, 3H), 3,62(s, 3H), 2,29(s, 3H), 1,38(t, 3H)
1-184	δ 8,46(d, 1H), 8,33(d, 1H), 7,94(d, 1H), 7,57(dd, 1H), 7,54(dd, 1H), 6,82(t, 1H), 5,46(s, 2H), 4,24(q, 2H), 3,75(s, 3H), 1,78(td, 2H), 1,37(t, 3H), 1,07(t, 3H)
1-206	δ 8,50(d, 1H), 8,36(d, 1H), 8,09(s, 1H), 7,66(d, 1H), 7,56(dd, 1H), 5,43(s, 2H), 4,44(m, 1H), 3,77(s, 3H), 3,56(s, 3H), 1,34(d, 6H)
1-225	δ 8,47(d, 1H), 8,24(d, 1H), 7,35(d, 1H), 7,24(d, 1H), 7,04(dd, 1H), 4,35(q, 2H), 3,90(s, 3H), 3,77(s, 3H), 3,66(s, 3H), 2,30(s, 3H), 1,38(t, 3H)
1-247	δ 8,44(d, 1H), 8,22(d, 1H), 7,24(d, 1H), 7,06(d, 1H), 6,82(dd, 1H), 4,34(q, 2H), 3,73(s, 3H), 3,63(s, 3H), 2,29(s, 3H), 1,38(t, 3H)
1-248	δ 8,45(d, 1H), 8,24(d, 1H), 8,02(d, 1H), 7,67(bs, 1H), 7,40(dd, 1H), 7,33(d, 1H), 4,35(q, 2H), 3,75(s, 3H), 3,63(s, 3H), 2,30(s, 3H), 2,18(s, 3H), 1,38(t, 3H)
1-249	δ 8,50(d, 1H), 8,32(d, 1H), 7,73(d, 1H), 7,39(dd, 2H), 5,47(bs, 2H), 4,24(q, 2H), 3,72(s, 3H), 3,57(s, 3H), 2,57(s, 3H), 1,36(t, 3H)
1-252	δ 8,46(d, 1H), 8,26(d, 1H), 7,83(d, 1H), 7,45(dd, 1H), 7,39(d, 1H), 4,35(q, 2H), 3,78(s, 3H), 3,63(s, 3H), 2,97(q, 2H), 2,30(s, 3H), 1,38(t, 3H), 1,32(t, 3H)
1-255	δ 8,48(d, 1H), 8,19(d, 1H), 8,18(s, 1H), 8,12(d, 1H), 7,66(dd, 1H), 7,49(d, 1H), 4,10(s, 3H), 3,80(q, 2H), 3,77(s, 3H), 1,35(t, 3H)
1-257	δ 8,47(d, 1H), 8,20(d, 1H), 8,19(s, 1H), 8,12(d, 1H), 7,66(dd, 1H), 7,49(d, 1H), 4,35(q, 2H), 3,80(q, 2H), 3,77(s, 3H), 1,38(t, 3H), 1,35(t, 3H)
1-261	δ 8,52(d, 1H), 8,29(s, 1H), 8,19(d, 1H), 8,12(s, 1H), 7,67(dd, 1H), 7,50(d, 1H), 5,92(tt, 1H), 4,69(t, 2H), 3,82(q, 2H), 3,77(s, 3H), 1,35(t, 3H)
1-262	δ 8,52(d, 1H), 8,32(s, 1H), 8,19(d, 1H), 8,12(s, 1H), 7,67(dd, 1H), 7,50(d, 1H), 4,64(q, 2H), 3,82(q, 2H), 3,78(s, 3H), 1,35(t, 3H)
1-263	δ 8,51(d, 1H), 8,29(s, 1H), 8,17(d, 1H), 8,11(s, 1H), 7,66(dd, 1H), 7,49(d, 1H), 6,07(tt, 1H), 4,46(td, 2H), 3,81(q, 2H), 3,77(s, 3H), 1,35(t, 3H)
1-270	δ 8,48(d, 1H), 8,27(s, 1H), 8,23(d, 1H), 8,19(s, 1H), 7,80(dd, 1H), 7,68(d, 1H), 4,35(q, 2H), 3,81(s, 3H), 3,79(q, 2H), 1,38(t, 3H), 1,36(t, 3H)

[Bảng 10-4]

Bảng 10 (Tiếp tục)

Hợp chất số	Dữ liệu ^{1}H-NMR ($CDCl_3$/TMS, ppm)
1-272	δ 8,53(d, 1H), 8,32(s, 1H), 8,27(s, 1H), 8,21(d, 1H), 7,80(dd, 1H), 7,68(d, 1H), 4,64(q, 2H), 3,82(s, 3H), 3,81(q, 2H), 1,36(t, 3H)
1-273	δ 8,52(d, 1H), 8,29(s, 1H), 8,27(s, 1H), 8,20(d, 1H), 7,80(dd, 1H), 7,68(d, 1H), 6,07(tt, 1H), 4,47(td, 2H), 3,81(s, 3H), 3,80(q, 2H), 1,36(t, 3H)
1-275	δ 8,49(d, 1H), 8,31(d, 1H), 8,28(s, 1H), 7,81(d, 1H), 7,69(d, 1H), 4,36 (q, 2H), 3,85(s, 3H), 3,61(s, 3H), 2,30(s, 3H), 1,38(t, 3H)
1-280	δ 8,52(d, 1H), 8,49(dd, 1H), 8,25(d, 1H), 8,19(s, 1H), 8,03(dd, 1H), 7,70(d, 1H), 4,36(q, 2H), 3,83(s, 3H), 3,78(q, 2H), 1,38(t, 3H), 1,37(t, 3H)
1-282	δ 8,54(d, 1H), 8,53(s, 1H), 8,30(s, 1H), 8,22(d, 1H), 8,04(dd, 1H), 7,70(d, 1H), 5,91(tt, 1H), 4,70(t, 2H), 3,84(s, 3H), 3,79(q, 2H), 1,37(t, 3H)
1-283	δ 8,54(d, 1H), 8,53(s, 1H), 8,32(s, 1H), 8,23(d, 1H), 8,03(dd, 1H), 7,70(d, 1H), 4,64(q, 3H), 3,84(s, 3H), 3,79(q, 2H), 1,37(t, 3H)
1-284	δ 8,53(d, 1H), 8,52(s, 1H), 8,29(s, 1H), 8,22(d, 1H), 8,03(dd, 1H), 7,70(d, 1H), 6,07(tt, 1H), 4,48(td, 2H), 3,83(s, 3H), 3,79(q, 2H), 1,37(t, 3H)
1-285	δ 8,52(s, 1H), 8,48(d, 1H), 8,22(d, 1H), 8,20(s, 1H), 8,03(dd, 1H), 7,69(d, 1H), 4,07(d, 2H), 3,83(s, 3H), 3,77(q, 2H), 2,09(m, 1H), 1,36(t, 3H), 0,99(d, 6H)
1-287	δ 8,52(s, 1H), 8,48(d, 1H), 8,23(d, 1H), 8,19(s, 1H), 8,03(dd, 1H), 7,69(d, 1H), 4,30(t, 2H), 3,83(s, 3H), 3,77(q, 2H), 1,75(quin, 2H), 1,45(td, 2H), 1,36(t, 3H), 0,98(t, 3H)
1-288	δ 8,52(s, 1H), 8,48(d, 1H), 8,23(d, 1H), 8,20(s, 1H), 8,03(dd, 1H), 7,69(d, 1H), 4,26(t, 2H), 3,83(s, 3H), 3,77(q, 2H), 1,78(td, 2H), 1,36(t, 3H), 1,00(t, 3H)
1-289	δ 8,53(d, 1H), 8,49(d, 1H), 8,33(d, 1H), 8,03(dd, 1H), 7,70(d, 1H), 4,36(q, 2H), 3,86(s, 3H), 3,61(s, 3H), 2,30(s, 3H), 1,38(t, 3H)
1-291	δ 8,53(s, 1H), 8,44(d, 1H), 8,33(d, 1H), 8,04(dd, 1H), 7,70(d, 1H), 4,36(q, 2H), 3,85(s, 3H), 3,81(q, 2H), 2,29(s, 3H), 1,38(t, 3H), 1,36(t, 3H)
1-298	δ 8,43(s, 1H), 8,49(d, 1H), 8,30(d, 1H), 8,04(dd, 1H), 7,71(d, 1H), 4,66(q, 2H), 3,85(s, 3H), 3,81(q, 2H), 2,37(s, 3H), 1,37(t, 3H)
1-314	δ 8,47(d, 1H), 8,25(d, 1H), 7,89(d, 1H), 7,50(dd, 1H), 7,46(d, 1H), 5,55(s, 1H), 4,35(q, 2H), 3,79(s, 3H), 3,64(s, 3H), 3,38(s, 6H), 2,29(s, 3H),1,38(t, 3H)
1-316	δ 10,1(s, 1H), 8,49(d, 1H), 8,30(s, 1H), 8,30(d, 1H), 7,99(d, 1H), 7,59(d, 1H), 4,36(q, 2H), 3,83(s, 3H), 3,74(s, 4H), 3,62(s, 3H), 2,31(s, 3H), 1,39(t, 3H)
1-317	δ 8,47(d, 1H), 8,26(d, 1H), 7,99(s, 1H), 7,70-7,63(m, 3H), 7,53(d, 1H), 7,47(t, 2H), 7,35(dt, 1H), 4,36(q, 2H), 3,81(s, 3H), 3,66(s, 3H), 2,30(s, 3H), 1,38(t, 3H)

[Bảng 10-5]

Bảng 10 (Tiếp tục)

Hợp chất số	Dữ liệu ^{1}H-NMR ($CDCl_3$/TMS, ppm)
1-320	δ 8,94(d, 1H), 8,60(dd, 1H), 8,48(d, 1H), 8,29(d, 1H), 7,99(d, 1H), 7,96(dt, 1H), 7,47(ddt, 2H), 7,39(dd, 1H), 4,36(q, 2H), 3,83(s, 3H), 3,66(s, 3H), 2,31(s, 3H), 1,39(t, 3H)
1-321	δ 8,48(d, 1H), 8,28(d, 1H), 7,82(s, 1H), 7,54(d, 1H), 7,54(s, 1H), 7,44(dd, 1H), 6,36(d, 1H), 4,36(q, 2H), 3,94(s, 3H), 3,83(s, 3H), 3,64(s, 3H), 2,30(s, 3H), 1,39(t, 3H)
1-338	δ 8,44(d, 1H), 8,18(d, 1H), 8,18(s, 1H), 7,58(d, 1H), 7,17(t, 1H), 7,06(d, 1H), 4,57(seq, 1H), 3,92(s, 3H), 3,74(q, 2H), 2,78(s, 3H), 1,35(d, 6H), 1,32(t, 3H)
1-390	δ 8,51 - 8,47 (m, 1H), 8,31 - 8,27 (m ,1H), 7,20 - 7,18 (m, 2H), 5,47 (s, 2H), 4,27 - 4,20 (m, 2H), 3,72 - 3,57 (m, 3H), 2,58 (d,3H), 2,43 (s, 3H), 1,38 - 1,33 (m, 3H)
1-395	δ 8,48(d, 1H), 8,26(d, 1H), 7,67(m, 3H), 7,48(d, 1H), 5,44(s, 2H), 4,01(s, 3H), 3,97(s, 3H), 2,82(d, 3H)
1-396	δ 8,47(d, 1H), 8,26(d, 1H), 7,67(m, 3H), 7,48(d, 1H), 5,43(s, 2H), 4,24(q, 2H), 3,97(s, 3H), 2,82(d, 3H), 1,37(t, 2H)
1-398	δ 8,45(d, 1H), 8,24(d, 1H), 7,80(q, 1H), 7,45(dd, 1H), 7,39(m, 1H), 7,17(m, 1H), 5,45(s, 2H), 4,00(s, 3H), 3,89(s, 3H), 2,79(d, 3H)
1-399	δ 8,21(d, 1H), 8,32(d, 1H), 7,46(dd, 1H), 7,39(dd, 1H), 7,17(ddd, 1H), 5,47(s, 2H), 4,00(s, 3H), 3,73(s, 3H), 3,56(s, 3H)
1-401	δ 8,37 - 8,27 (m, 1H), 7,80 - 7,77 (m, 1H), 5,48 - 5,43 (m, 1H), 3,64 - 3,64 (m, 1H), 2,71 - 2,71 (m, 3H), 1,35 (t, 3H)
1-403	δ 8,47 (d, 1H), 8,25(d, 1H), 8,08(s, 1H), 7,65(d, 1H), 7,54(d, 1H), 5,66(s, 2H), 4,65(s, 2H), 3,76(s, 3H), 3,69(s, 3H), 3,52(s, 3H)

[Bảng 10-6]

Bảng 10 (Tiếp tục)

Hợp chất số	Dữ liệu ^{1}H-NMR ($CDCl_3$/TMS, ppm)
2-35	δ 8,13(d 1H), 7,95(d, 1H), 7,59(d, 1H), 7,34(dd, 1H), 7,21(d, 1H), 5,48(s, 2H), 4,22(q, 2H), 4,03(s, 3H), 2,50(s, 3H), 2,30(s, 3H), 1,37(t, 3H)
2-46	δ 8,30(d, 1H), 8,22(d, 1H), 8,07(t, 1H), 7,62(dd, 1H), 7,53(d, 1H), 5,48(brs, 2H), 5,05(quin, 1H), 4,23(q, 2H), 3,82(s, 3H), 1,36(t, 3H), 1,01(d, 6H)
2-52	δ 8,62(d, 1H), 8,15(d, 1H), 7,77(d, 1H), 7,59(dd, 1H), 7,50(d, 1H), 5,47(brs, 2H), 4,23(q, 2H), 4,08(s, 3H), 3,10(s, 3H), 2,99(s, 3H), 2,80(s, 3H), 1,37(t, 3H)
2-58	δ 8,28(d, 1H), 8,20(d, 1H), 8,06(s, 1H), 8,01(s, 1H), 7,66(dd, 1H), 7,56(d, 1H), 5,45(s, 2H), 3,83(s, 3H), 1,24(s, 9H), 1,77-1,79(m, 2H), 1,30-1,25(m, 2H), 1,24(s, 9H), 1,00(t, 3H)
2-62	δ 8,30(d, 1H), 8,23(d, 1H), 8,08(s, 1H), 7,62(dd, 1H), 7,53(d, 1H), 5,44(brs, 2H), 4,42(quin, 1H), 4,18(q, 2H), 3,84(s, 3H), 1,34(d, 6H), 1,02(t, 3H)
2-63	δ 8,29(d, 1H), 8,23(d, 1H), 8,07(s, 1H), 7,62(dd, 1H), 7,52(d, 1H), 5,45(brs, 2H), 5,05(quin, 1H), 4,42(quin, 1H), 3,82(s, 3H), 1,34(d, 6H), 1,01(d, 6H)
2-65	δ 8,93(d, 1H), 8,23(d, 1H), 8,15(d, 1H), 8,09(s, 1H), 7,66(d, 1H), 7,56(d, 1H), 5,38(s, 2H), 4,41(quin, 1H), 3,85(s, 3H), 2,90(s, 3H), 1,34(d, 6H)
2-69	δ 8,17(d, 1H), 8,07(s, 1H), 7,92(d, 1H), 7,58(d, 1H), 7,50(d, 1H), 5,45(s, 2H), 4,42(quin, 1H), 4,09(s, 3H), 3,45(s, 3H), 3,28(s, 3H), 1,35(d, 6H)
2-71	δ 8,22(d, 1H), 8,14(d, 1H), 8,07(s, 1H), 7,61(dd, 1H), 7,53(d, 1H), 5,44(s, 2H), 4,41(quin, 1H), 3,91(s, 3H), 2,97(t, 2H), 1,34(d, 6H), 1,25(t, 3H)
2-73	δ 8,30(d, 1H), 8,22(d, 1H), 8,08(s, 1H), 7,62(dd, 1H), 7,53(d, 1H), 5,47(s, 2H), 4,22(q, 2H), 4,19(q, 2H), 3,84(s, 3H), 1,36 (t, 3H)
2-82	δ 8,24(d 1H), 8,20(s, 1H), 8,12(d, 1H), 8,07(d, 1H), 7,63(dd, 1H), 7,47(d, 1H), 4,32(q, 2H), 3,91(s, 3H), 3,79(s, 3H), 1,37(t, 3H)
2-83	δ 8,28(d 1H), 8,21(s, 1H), 8,12(d, 1H), 8,08(d, 1H), 7,63(dd, 1H), 7,47(d, 1H), 4,33(q, 2H), 4,20(q, 2H), 3,87(s, 3H), 1,37(t, 3H), 1,02(t, 3H)
2-84	δ 8,28(d 1H), 8,20(s, 1H), 8,12(d, 1H), 8,08(d, 1H), 7,63(dd, 1H), 7,47(d, 1H), 4,32(q, 2H), 4,10(t, 2H), 3,88(s, 3H), 1,37(td, 2H), 1,36(t, 3H), 0,67(t, 3H)
2-85	δ 8,28(d 1H), 8,20(s, 1H), 8,11(d, 1H), 8,08(d, 1H), 7,63(dd, 1H), 7,47(d, 1H), 5,07(sep, 1H), 4,33(q, 2H), 3,85(s, 3H), 1,37(t, 3H), 1,01(d, 6H)
2-102	δ 8,51(bs, 1H), 8,18(d, 1H), 8,15(d, 1H), 8,03(d, 1H), 7,64(dd, 1H), 7,50(d, 1H), 3,98(s, 3H), 3,79(s, 3H), 2,34(s, 3H)
2-103	δ 8,18(d, 1H), 8,15(d, 1H), 8,13(d, 1H), 7,63(dd, 1H), 7,49(d, 1H), 4,10(s, 3H), 3,97(s, 3H), 3,80(s, 3H), 2,31(s, 3H)

[Bảng 10-7]

Bảng 10 (Tiếp tục)

Hợp chất số	Dữ liệu ^{1}H-NMR ($CDCl_3$/TMS, ppm)
2-106	δ 8,20(d 1H), 8,17(d, 1H), 8,13(d, 1H), 7,63(dd, 1H), 7,49(d, 1H), 4,21(q, 2H), 4,01(s, 3H), 3,80(s, 3H), 2,32(s, 3H), 1,31(t, 3H)
2-110	δ 8,16(d, 2H), 8,13(d, 1H), 7,63(dd, 1H), 7,49(d, 1H), 4,54(sep, 1H), 3,98(s, 3H), 3,78(s, 3H), 2,31(s, 3H), 1,36(d, 6H)
2-111	δ 8,16(d, 2H), 8,13(d, 1H), 7,63(dd, 1H), 7,48(d, 1H), 3,98(s, 3H), 3,78(s, 3H), 2,29(s, 3H), 1,40(s, 9H)
2-113	δ 8,17(d, 1H), 8,14(d, 1H), 8,13(d, 1H), 7,63(dd, 1H), 7,48(d, 1H), 6,08(ddt, 1H), 5,37(dd, 1H), 5,28(dd, 1H), 4,78(ddd, 2H), 3,97(s, 3H), 3,78(s, 3H), 2,35(s, 3H)
2-114	δ 8,19(d, 1H), 8,13(d, 1H), 8,11(d, 1H), 7,64(dd, 1H), 7,49(d, 1H), 6,09(tt, 1H), 4,45(dt, 2H), 3,98(s, 3H), 3,80(s, 3H), 2,37(s, 3H)
2-116	δ 8,16(d, 1H), 8,13(d, 1H), 8,13(d, 1H), 7,63(dd, 1H), 7,48(d, 1H), 7,45-7,30(m, 5H), 5,32(s, 2H), 3,96(s, 3H), 3,78(s, 3H), 2,36(s, 3H)
2-117	δ 8,17(d, 1H), 8,13(d, 1H), 8,10(d, 1H), 7,63(dd, 1H), 7,48(d, 1H), 7,36(s, 4H), 5,27(s, 2H), 3,96(s, 3H), 3,78(s, 3H), 2,35(s, 3H)
2-119	δ 8,22(d, 1H), 8,19(d, 1H), 8,12(d, 1H), 7,67(dd, 1H), 7,51(d, 1H), 7,28(dd, 2H), 7,19(dd, 2H), 4,47(t, 2H), 3,95(s, 3H), 3,80(s, 3H), 3,05(t, 2H), 2,28(s, 3H)
2-126	δ 8,27(d, 1H), 8,21(d, 1H), 8,14(s, 1H), 7,64(dd, 1H), 7,48(d, 1H), 5,47(s, 2H), 4,13(t, 2H), 3,85(s, 1H), 3,77(s, 1H)1,77(quin, 2H), 1,00(t, 3H)
2-127	δ 8,27(d, 1H), 8,21(d, 1H), 8,14(s, 1H), 7,64(d, 1H), 7,48(dd, 1H), 5,47(s, 2H), 4,18(t, 2H), 3,85(s, 3H), 3,77(s, 3H), 1,74(quin, 2H), 1,46(sext, 2H), 0,97(t, 3H)
2-132	δ 8,32(d, 1H), 8,20(d, 1H), 8,09(s, 1H), 7,60(d, 1H), 7,46-7,08(m, 6H), 6,95(d, 2H),5,51 (s, 2H),5,14 (s, 3H), 3,63(s, 3H)
2-133	δ 8,26(d, 1H), 8,20(d, 1H), 8,13(s, 1H), 7,64(d, 1H), 7,49-7,30(m, 6H), 5,52(s, 2H), 5,20 (s, 2H), 3,84(s, 3H), 3,77(s, 3H)
2-134	δ 8,27(d, 1H), 8,02(s, 1H), 7,99(d, 1H), 7,66(dt, 1H), 7,52-7,47(m, 2H), 3,89(s, 3H), 3,78(s, 3H), 3,10(d, 3H)
2-135	δ 8,19(d, 1H), 8,12(d, 1H), 8,04(d, 1H), 7,57(dd, 1H), 7,36(d, 1H), 4,26(q, 2H), 3,76(s, 3H), 3,59(s, 3H)
2-136	δ 8,25(d, 1H), 8,11(d, 1H), 7,62(d, 1H), 7,55(d, 1H), 7,47(d, 1H), 3,96(s, 3H), 3,90(q, 2H), 3,80(s, 3H), 2,74(s, 6H), 1,11(t, 3H)

[Bảng 10-8]

Bảng 10 (Tiếp tục)

Hợp chất số	Dữ liệu ^{1}H-NMR ($CDCl_3$/TMS, ppm)
2-147	δ 8,66(m, 1H), 8,31(d, 1H), 8,28(s, 1H), 8,16(s, 1H), 8,05(d, 1H), 7,81(d, 1H), 7,69(d, 1H), 4,32(q, 2H), 3,93(s, 3H), 2,91(d, 3H), 1,37(t, 3H)
2-159	δ 8,32(s, 1H), 8,29(d, 1H), 8,23(s, 1H), 8,08(d, 1H), 7,83(dd, 1H), 7,68(d, 1H), 4,61(q, 2H), 3,97(s, 3H), 3,81(s, 3H)
2-165	δ 8,72(br-d 1H), 8,28(s, 1H), 8,24(d, 1H), 8,13(d, 1H), 7,82(d, 1H), 7,70(d, 1H), 4,32(q, 2H), 3,96(s, 3H), 2,93(d, 3H), 2,30(s, 3H), 1,37(t, 3H)
2-181	δ 8,33(d 1H), 8,25(d, 1H), 8,23(d, 1H), 8,75(dd, 1H), 7,68(d, 1H), 5,48(s, 2H), 4,23(q, 2H), 4,19(q, 2H), 3,86(s, 3H), 1,36(t, 3H), 1,01(t, 3H)
2-216	δ 8,53(s, 1H), 8,31(s, 1H), 8,31(d, 1H), 8,11(d, 1H), 8,01(dd, 1H), 7,69(d, 1H), 4,63(q, 2H), 3,98(s, 3H), 3,83(s, 3H)
2-221	δ 8,51(d 1H), 8,25(d, 1H), 8,20(d, 1H), 8,01(dd, 1H), 7,69(d, 1H), 4,34(q, 2H), 4,23(q, 3H), 3,98(s, 3H), 2,31(s, 3H), 1,38(t, 3H), 1,08(t, 3H)
2-243	δ 8,53(d, 1H), 8,35(d, 1H), 8,27(s, 1H), 8,02(dd, 1H), 7,69(d, 1H), 5,46(s, 2H), 4,24(q, 2H), 4,21(q, 2H), 3,87(s, 3H), 1,37(t, 3H), 1,07(t, 3H)
2-260	δ 8,30(d, 1H), 8,19(s, 1H), 8,10(d, 1H), 7,22(d, 1H), 7,19(dd, 1H), 4,33(q, 2H), 4,09(s, 3H), 3,78(s, 3H), 1,37(t, 3H)
2-262	δ 8,21(q, 2H), 7,81(d, 1H), 7,45(d, 1H), 7,40-7,29(m, 2H), 5,46(s, 2H), 4,14(sept, 1H), 3,88(s, 3H), 3,74(s, 3H), 1,34(d, 6H)
2-269	δ 8,32 - 8,29 (m, 1H), 8,05 - 8,02 (m, 1H), 7,67 (dd, 2H), 7,38 - 7,25 (m, 2H), 6,49 - 6,44 m, 2H), 4,65 (q, 2H), 3,88 - 3,86 (m, 3H)
2-270	δ 8,26 - 8,12 (m, 2H), 7,82 - 7,79 (m, 1H), 7,45 - 7,29 (m, 5H), 5,62 (s, 2H), 4,55 - 4,47 (m, 2H), 3,88 - 3,74 (m, 6H)
2-275	δ 8,08 - 8,05 (m, 1H), 7,93 - 7,91 (m, 1H), 7,57 - 7,52 (m, 1H), 7,17 (d, 1H), 5,65 - 5,58 (s, 2H), 4,52 (ddd, 2H), 4,05 (s, 3H), 2,80 (s, 6H), 2,48 (s, 3H)
2-283	δ 8,24 - 8,22 (m, 1H), 8,13 - 8,10 (m, 1H), 7,58 (s, 1H), 7,34 - 7,31 (m, 1H), 5,61 (s, 2H), 4,51 (q, 2H), 3,87 - 3,86 (m, 3H), 3,75 - 3,74 (m, 3H), 2,51 - 2,50 (m, 3H)
2-285	δ 8,07 - 8,04 (m, 1H), 7,77 - 7,75 (m, 1H), 7,48 (s, 1H), 7,16 (dd, 1H), 5,66 - 5,55 (m, 2H), 4,54 - 4,47 (m, 2H), 3,98 (s, 3H), 3,34 - 3,27 (m, 3H), 2,49 - 2,48 (m, 3H), 1,11 - 1,06 (m, 3H)

[Bảng 10-9]

Bảng 10 (Tiếp tục)

Hợp chất số	Dữ liệu ^{1}H-NMR ($CDCl_3$/TMS, ppm)
2-286	δ 9,40 - 9,36 (m, 1H), 8,47 - 8,44 (m, 1H), 8,15 - 8,12 (m, 1H), 7,58 (s, 1H), 7,37 - 7,34 (m, 1H), 5,60 - 5,54 (s, 2H), 4,55 - 4,47 (m, 2H), 3,78 - 3,77 (m, 3H), 3,37 - 3,29 (m, 2H), 2,54 - 2,53 (m, 3H), 1,09 (t, 3H)
2-288	δ 8,08 - 8,05 (m, 1H), 7,93 - 7,91 (m, 1H), 7,57 - 7,52 (m, 1H), 7,17 (d, 1H), 5,65 - 5,58 (s, 2H), 4,52 (ddd, 3H), 4,05 (s, 3H), 2,80 (s, 3H), 2,48 (s, 3H)
2-289	δ 10,54(s, 1H), 8,52(d, 1H), 8,26(d, 1H), 8,17-8,10(m, 2H), 7,66(dd, 1H), 7,55(dd, 1H), 5,37(s, 2H), 4,41(quin, 1H), 3,90(s, 3H), 1,34(d, 6H)
2-294	δ 8,33(d, 1H), 8,23(d, 1H), 8,12(s, 1H), 7,64(d, 1H), 7,55(d, 1H), 5,49(s, 2H), 5,03(sep,1H), 3,99(s, 3H), 3,84(s, 3H), 2,25-2,14(m, 2H), 1,83-1,70(m, 2H), 1,62-1,49(m, 2H)
2-302	δ 10,20 (s, 1H), 8,47 - 8,44 (m, 1H), 8,26 - 8,23 (m, 1H), 8,08 (s, 1H), 7,68 (dd, 1H), 7,59 - 7,56 (m, 1H), 5,45 - 5,41 (s, 2H), 4,24 (q, 2H), 3,91 - 3,90 (m, 3H), 1,37 (t, 3H)
2-304	δ 12,35 - 12,31 (m, 1H), 8,37 - 8,32 (m, 1H), 8,22 - 8,19 (m, 1H), 8,11 (s, 1H), 7,70 - 7,67 (m, 1H), 7,59 - 7,56 (m, 1H), 5,44 - 5,39 (s, 2H), 4,23 (q, 2H), 3,91 (s, 3H);
2-305	δ 12,11 (s, 1H), 8,41 - 8,36 (m, 1H), 8,24 - 8,21 (m, 1H), 8,08 (s, 1H), 7,70 - 7,65 (m, 1H), 7,59 - 7,55 (m, 1H), 5,44 - 5,40 (s, 2H), 4,27 - 4,20 (m, 3H), 3,91 (s, 3H), 1,37 (t, 3H);
2-306	δ 12,25 (s, 1H), 8,38 - 8,35 (m, 1H), 8,23 - 8,20 (m, 1H), 8,10 (s, 1H), 7,70 - 7,67 (m, 1H), 7,59 - 7,56 (m, 1H), 5,44 - 5,39 (s, 2H), 4,23 (q, 2H), 3,95 - 3,90 (m, 6H), 1,72 - 1,66 (m, 1H), 1,37 (t, 3H), 1,00 - 0,93 (m, 3H)
2-308	δ 9,84 - 9,80 (m, 1H), 8,42 - 8,39 (m, 1H), 8,25 - 8,22 (m, 1H), 8,09 (s, 1H), 7,69 (dd, 1H), 7,60 - 7,57 (m, 1H), 5,43 (s, 2H), 4,26 - 4,20 (m, 3H), 3,89 - 3,88 (m, 3H), 3,05 - 2,93 (m, 2H), 2,58 - 2,45 (m, 2H), 1,37 (t, 3H)
2-310	δ 8,16 - 8,13 (m, 1H), 7,97 (s, 1H), 7,77 - 7,75 (m, 1H), 7,59 (dd, 1H), 7,52 - 7,48 (m, 1H), 5,49 - 5,45 (s, 2H), 4,22 (q, 2H), 4,05 - 4,04 (m, 3H), 3,57 - 3,51 (m, 2H), 3,36 (q, 2H), 1,37 (t, 3H), 1,23 - 1,12 (m, 3H)

[Bảng 10-10]

Bảng 10 (Tiếp tục)

Hợp chất số	Dữ liệu ^{1}H-NMR ($CDCl_3$/TMS, ppm)
2-311	δ 8,17 (m, 1H), 7,90 - 7,88 (m, 1H), 7,59 (m, 1H), 7,52 - 7,48 (m, 1H), 5,48 (s, 2H), 4,38 (d, 3H), 4,26 - 4,20 (m, 3H), 3,17 (s, 2H), 3,06 (s, 3H), 1,39 - 1,35 (m, 9H)
2-312	δ 9,66 - 9,61 (m, 1H), 8,42 - 8,39 (m, 1H), 8,23 - 8,21 (m, 1H), 8,13 (s, 1H), 7,67 (dd, 1H), 7,58 - 7,55 (m, 1H), 5,45 - 5,41 (m, 2H), 4,23 (q, 2H), 3,88 (s, 3H), 2,13 (t, 1H), 1,37 (t, 3H)
2-313	δ 12,31 - 12,28 (m, 1H), 8,40 - 8,36 (m, 1H), 8,24 - 8,21 (m, 1H), 8,12 (s, 1H), 7,68 (dd, 1H), 7,59 - 7,56 (m, 1H), 6,01 - 5,91 (m, 1H), 5,41 (s, 2H), 5,27 - 5,14 (m, 2H), 4,49 - 4,44 (m, 2H), 4,23 (q, 2H), 3,92 - 3,90 (m, 3H)
2-314	δ 8,15 (m, 1H), 8,00 (d, 1H), 7,77 - 7,74 (m, 1H), 7,61 - 7,57 (m, 1H), 7,52 - 7,48 (m, 1H), 5,49 - 5,45 (m, 2H), 4,23 (q, 2H), 4,06 (d, 3H), 3,58 - 3,53 (m, 1H), 2,99 - 2,98 (m, 3H), 1,39 - 1,35 (m, 3H), 1,26 - 1,18 (m, 3H)
2-315	δ 8,16 - 8,13 (m, 1H), 7,97 (m, 1H), 7,73 (m, 1H), 7,60 - 7,48 (m, 2H), 5,49 - 5,47 (s, 2H), 4,93 - 4,85 (m, 1H), 4,26 - 4,19 (m, 2H), 4,11 (s, 3H), 4,06 (d, 3H), 1,37 (t, 3H), 1,37 (t, 6H)
2-316	δ 8,16 - 8,13 (m, 1H), 7,96 (m, 1H), 7,80 - 7,71 (m, 1H), 7,60 - 7,57 (m, 1H), 7,52 - 7,48 (m, 1H), 5,50 - 5,44 (s, 2H), 4,26 - 4,19 (m, 2H), 4,05 - 4,03 (m, 3H), 1,41 - 1,07 (m, 12H)
2-317	δ 8,17 - 8,15 (m, 1H), 8,07 (m, 1H), 7,96 - 7,90 (m, 1H), 7,61 - 7,49 (m, 2H), 5,47 (s, 2H), 4,23 (q, 2H), 3,49 - 3,44 (m, 3H), 3,30 - 3,29 (m, 3H), 1,37 (t, 3H)
2-319	δ 8,17 - 8,14 (m, 1H), 8,00 (m, 1H), 7,81 - 7,79 (m, 1H), 7,61 - 7,48 (m, 2H), 5,48 - 5,45 (s, 2H), 4,13 (m, 2H), 3,60 (t, 2H), 3,43 (t, 2H), 1,58 - 1,57 (m, 12H), 1,37 (t, 3H), 0,88 (t, 1H)
2-321	δ 8,17 - 8,14 (m, 1H), 8,04 - 8,01 (m, 1H), 7,76 - 7,74 (m, 1H), 7,61 (m, 1H), 7,53 - 7,50 (m, 1H), 5,48 - 5,43 (s, 2H), 4,24 - 4,10 (m, 6H), 3,93 - 3,83 (m, 4H), 3,50 - 3,40 (m, 2H), 2,96 - 2,95 (m, 1H), 2,89 - 2,88 (m, 1H), 1,39 - 1,35 (m, 3H)

[Bảng 10-11]

Bảng 10 (Tiếp tục)

Hợp chất số	Dữ liệu ^{1}H-NMR ($CDCl_3$/TMS, ppm)
2-322	δ 8,20 - 8,18 (m, 1H), 7,95 (s, 1H), 7,80 - 7,77 (m, 1H), 7,61 (m, 1H), 7,54 - 7,51 (m, 1H), 5,47 - 5,42 (s, 2H), 4,25 - 4,17 (m, 9H), 1,37 (t, 3H);
2-323	δ 8,18 - 8,16 (m, 1H), 8,03 - 7,99 (m, 1H), 7,82 (m, 1H), 7,60 (m, 1H), 7,53 - 7,49 (m, 1H), 5,48 - 5,44 (s, 2H), 4,26 - 4,20 (m, 2H), 4,12 (d, 3H), 3,19 - 3,14 (m, 2H), 1,37 (t, 3H)
2-324	δ 14,30 - 14,22 (m, 1H), 8,61 - 8,58 (m, 1H), 8,34 - 8,26 (m, 2H), 7,68 (dd, 1H), 7,59 - 7,50 (m, 2H), 6,99 - 6,98 (m, 1H), 5,46 - 5,41 (s, 2H), 4,25 (q, 2H), 3,98 - 3,97 (m, 3H), 1,38 (t, 3H)
2-325	δ 9,72 - 9,67 (m, 1H), 8,41 - 8,38 (m, 1H), 8,24 - 8,22 (m, 1H), 8,10 (s, 1H), 7,67 (dd, 1H), 7,58 - 7,55 (m, 1H), 5,45 - 5,41 (s, 2H), 4,24 (q, 2H), 3,91 - 3,90 (m, 3H), 3,81 - 3,70 (m, 2H), 1,37 (t, 3H)
2-326	δ 9,28 (s, 1H), 8,32 - 8,29 (m, 1H), 8,23 - 8,20 (m, 1H), 8,07 (s, 1H), 7,67 (dd, 1H), 7,59 - 7,51 (m, 1H), 5,48 - 5,42 (s, 2H), 4,26 - 4,20 (m, 2H), 3,88 - 3,87 (m, 6H), 1,37 (t, 3H)
2-327	δ 10,14 - 10,09 (m, 1H), 8,47 - 8,44 (m, 1H), 8,15 - 8,12 (m, 1H), 7,60 (s, 1H), 7,37 - 7,34 (m, 1H), 5,58 - 5,54 (s, 2H), 4,56 - 4,48 (m, 2H), 3,83 - 3,82 (m, 3H), 3,65 (ddd, 2H)
2-328	δ 10,49 (t, 1H), 8,48 - 8,46 (m, 1H), 8,15 - 8,13 (m, 1H), 7,60 (s, 1H), 7,38 - 7,35 (m, 1H), 6,00 - 5,69 (m, 1H), 5,61 - 5,57 (s, 1H), 4,55 - 4,48 (m, 2H), 3,85 - 3,84 (m, 3H), 3,79 - 3,68 (m, 2H), 2,54 - 2,53 (m, 3H)
2-329	δ 9,71 - 9,69 (m, 1H), 8,50 - 8,47 (m, 1H), 8,15 - 8,12 (m, 1H), 7,58 (s, 1H), 7,37 - 7,34 (m, 1H), 5,61 - 5,50 (s, 2H), 4,51 (q, 2H), 3,78 - 3,77 (m, 3H), 2,90 - 2,84 (m, 1H), 2,55 - 2,54 (m, 3H), 0,77 - 0,71 (m, 3H), 0,48 - 0,43 (m, 2H)
2-330	δ 8,97 - 8,93 (m, 1H), 8,43 - 8,41 (m, 1H), 8,16 - 8,13 (m, 1H), 7,57 - 7,57 (m, 1H), 7,36 - 7,33 (m, 1H), 5,58 - 5,52 (s, 2H), 4,51 (q, 2H), 3,75 - 3,74 (m, 3H), 3,43 - 3,37 (m, 1H), 2,53 - 2,52 (m, 3H), 1,09 - 1,06 (m, 3H), 0,72 - 0,64 (m, 1H), 0,41 - 0,35 (m, 1H), 0,17 - 0,11 (m, 3H)

[Bảng 10-12]

Bảng 10 (Tiếp tục)

Hợp chất số	Dữ liệu ^{1}H-NMR ($CDCl_3$/TMS, ppm)
2-331	δ 9,68 (t, 3H), 8,48 - 8,45 (m, 1H), 8,15 - 8,12 (m, 1H), 7,56 (s, 1H), 7,37 - 7,34 (m, 1H), 7,25 (d, 1H), 5,82 - 5,72 (m, 1H), 5,57 - 5,54 (s, 2H), 5,19 - 5,06 (m, 2H), 4,51 (q, 2H), 3,97 - 3,92 (m, 2H), 3,79 (s, 3H), 2,53 (s, 3H)
2-332	δ 9,33 - 9,28 (m, 1H), 8,44 - 8,41 (m, 1H), 8,14 - 8,11 (m, 1H), 7,61 - 7,60 (m, 1H), 7,36 - 7,33 (m, 1H), 7,23 (d, 1H), 5,62 - 5,52 (s, 2H), 4,55 - 4,47 (m, 2H), 3,78 (s, 3H), 3,53 - 3,48 (m, 2H), 3,38 (t, 2H), 3,17 (s, 3H), 2,54 - 2,52 (m, 3H)
2-333	δ 10,83 (d, 1H), 8,52 - 8,48 (m, 1H), 8,15 - 8,12 (m, 1H), 7,62 - 7,61 (m, 1H), 7,38 - 7,34 (m, 1H), 7,25 (d, 1H), 5,57 - 5,52 (m, 2H), 4,70 - 4,62 (m, 1H), 4,56 - 4,46 (m, 3H), 4,32 - 4,24 (m, 1H), 3,87 - 3,86 (m, 3H), 2,80 - 2,72 (m, 1H), 2,54 - 2,52 (m, 3H), 2,30 - 2,17 (m, 1H)
2-334	δ 8,99 (d, 1H), 8,42 - 8,40 (m, 1H), 8,15 - 8,12 (m, 1H), 7,59 - 7,58 (m, 1H), 7,36 - 7,33 (m, 1H), 7,23 (d, 1H), 5,62 - 5,55 (s, 2H), 4,51 (q, 2H), 4,20 - 4,09 (m, 1H), 3,77 - 3,76 (m, 3H), 3,24 - 3,20 (m, 3H), 3,15 (s, 3H), 2,53 (s, 3H), 1,10 - 1,08 (m, 3H)
2-335	δ 9,30 (t, 1H), 8,45 - 8,42 (m, 1H), 8,15 - 8,12 (m, 1H), 7,61 (s, 1H), 7,36 - 7,33 (m, 1H), 7,22 (d, 1H), 5,57 (s, 2H), 4,51 (q, 2H), 4,32 (t, 1H), 3,79 - 3,79 (m, 3H), 3,49 - 3,45 (m, 2H), 3,23 - 3,22 (m, 6H), 2,53 - 2,52 (m, 3H)
2-336	δ 13,34 - 13,25 (m, 1H), 8,42 - 8,38 (m, 1H), 8,13 - 8,10 (m, 1H), 7,62 (s, 1H), 7,38 - 7,35 (m, 1H), 7,27 (d, 1H), 5,55 (s, 2H), 4,52 (q, 2H), 2,54 - 2,53 (m, 3H)
2-337	δ 13,15 - 13,15 (m, 1H), 8,45 - 8,41 (m, 1H), 8,13 - 8,11 (m, 1H), 7,60 (s, 1H), 7,38 - 7,35 (m, 1H), 7,26 (d, 1H), 5,60 - 5,55 (s, 2H), 4,52 (q, 2H), 4,09 - 4,01 (m, 2H), 3,85 (s, 3H), 2,53 (s, 3H), 1,33 - 1,28 (m, 3H)
2-338	δ 13,18 - 13,06 (m, 1H), 8,47 - 8,42 (m, 1H), 8,15 - 8,12 (m, 1H), 7,60 (s, 1H), 7,38 - 7,35 (m, 1H), 7,26 (d, 1H), 6,02 - 5,91 (m, 1H), 5,60 - 5,51 (s, 2H), 5,23 - 5,13 (m, 2H), 4,55 - 4,44 (m, 4H), 3,84 (s, 3H), 2,54 (s, 3H)

[Bảng 10-13]

Bảng 10 (Tiếp tục)

Hợp chất số	Dữ liệu ^{1}H-NMR ($CDCl_3$/TMS, ppm)
2-339	δ 8,07 - 8,04 (m, 1H), 7,78 - 7,74 (m, 1H), 7,52 - 7,49 (m, 1H), 7,29 (dd, 1H), 7,18 - 7,15 (m, 1H), 5,66 - 5,61 (s, 2H), 4,51 (q, 2H), 4,00 (d, 3H), 2,49 - 2,48 (m, 3H), 1,24 - 1,19 (m, 3H)
2-340	δ 8,06 - 8,03 (m, 1H), 7,76 - 7,71 (m, 1H), 7,49 (d, 1H), 7,29 (dd, 1H), 7,16 (dd, 1H), 5,66 - 5,55 (s, 2H), 4,51 (ddd, 2H), 4,01 - 3,98 (m, 3H), 2,49 - 2,47 (m, 3H), 1,27 - 1,20 (m, 6H)
2-341	δ 8,07 - 8,04 (m, 1H), 7,80 - 7,72 (m, 1H), 7,48 (d, 1H), 7,18 - 7,14 (m, 1H), 5,61 - 5,55 (s, 2H), 4,61 - 4,47 (m, 3H), 3,98 (d, 3H), 3,89 - 3,79 (m, 1H), 2,49 - 2,47 (m, 3H), 1,30 - 1,25 (m, 3H)
2-342	δ 8,10 - 8,07 (m, 1H), 7,79 - 7,76 (m, 1H), 7,46 (s, 1H), 7,33 - 7,29 (m, 1H), 7,19 (dd, 2H), 5,59 (s, 2H), 4,52 (q, 2H), 4,15 - 4,11 (m, 7H), 2,49 (s, 3H)
2-343	δ 8,07 (dd, 1H), 7,89 - 7,78 (m, 1H), 7,51 (m, 1H), 7,17 (dd, 1H), 5,65 - 5,54 (s, 2H), 4,51 (q, 2H), 4,04 - 4,03 (m, 3H), 2,49 - 2,47 (m, 3H), 2,23 - 2,18 (m, 1H)
2-344	δ 8,15 - 8,05 (m, 1H), 7,96 - 7,86 (m, 1H), 7,53 - 7,51 (m, 1H), 7,40 - 7,35 (m, 1H), 7,28 - 7,23 (m, 1H), 5,59 - 5,53 (s, 2H), 4,55 - 4,47 (m, 2H), 4,00 (d, 3H), 2,53 - 2,51 (m, 3H)
2-345	δ 8,17 - 8,14 (m, 1H), 8,08 - 8,05 (m, 1H), 7,96 - 7,93 (m, 1H), 7,60 - 7,57 (m, 1H), 7,53 - 7,49 (m, 1H), 5,50 - 5,46 (s, 2H), 4,00 - 3,99 (m, 3H), 3,49 - 3,45 (m, 3H), 3,30 - 3,29 (m, 3H), 3,22 (s, 2H), 2,81 - 2,80 (m, 3H)
2-346	δ 8,12 - 8,09 (m, 1H), 7,91 (d, 1H), 7,57 - 7,49 (m, 1H), 7,34 - 7,28 (m, 1H), 7,19 - 7,15 (m, 1H), 5,44 (s, 2H), 4,23 (q, 2H), 3,97 (d, 3H), 3,24 - 3,23 (m, 3H), 2,47 - 2,46 (m, 3H), 1,37 (t, 3H)
3-15	δ 7,95 (d, 1H), 7,76 (d, 1H), 7,64 (d, 1H), 7,29 (d, 2H), 7,26 (d, 1H), 7,22 (dd, 2H), 7,18 (dd, 1H), 5,44 (s, 2H), 4,10 (s, 2H), 3,95 (s, 3H), 3,77 (s, 3H), 2,50 (s, 3H), 1,28 (s, 9H)
3-19	δ 8,25(d, 1H), 8,15(d, 1H), 7,66(s, 1H), 7,33(d, 1H), 7,22(d, 1H), 5,47(s, 2H), 4,23(q, 2H), 3,71(s, 3H), 2,52(s, 1H), 1,36(t, 3H)
3-21	δ 8,07(d, 1H), 7,95(d, 1H), 7,61(s, 1H), 7,36(d, 1H), 7,22(d, 1H), 5,47(s, 2H), 4,91(q, 1H), 4,21(q, 2H), 4,01(s, 3H), 2,52(s, 3H), 1,55(d, 3H), 1,36(t, 3H)

[Bảng 10-14]

Bảng 10 (Tiếp tục)

3-22	δ 8,09(d, 1H), 8,03(d, 1H), 7,61(s, 1H), 7,37(d, 1H), 7,24(d, 1H), 6,31(s, 1H), 5,46(s, 2H), 4,95(t, 1H), 4,22(q, 2H), 4,04(dd, 1H), 4,02(s, 3H), 3,83(dd, 1H), 3,67(s, 1H), 2,52(s, 3H), 1,36(t, 3H),
3-23	δ 8,07(s, 2H), 7,65(s, 1H), 7,33(d, 1H), 7,20(dd, 1H), 7,17(dd, 1H), 5,87(d, 1H), 5,48(s, 2H), 5,43(d, 1H), 4,21(q, 2H), 3,82(s, 3H), 2,52(s, 3H), 1,36(t, 3H),
3-24	δ 8,06(d, 1H), 7,77(d, 1H), 7,63(s, 1H), 7,30(d, 1H), 7,18(d, 1H), 5,50(s, 2H), 5,08(d, 2H), 4,20(q, 2H), 3,72(s, 3H), 2,51(s, 3H), 1,35(t, 3H)
3-33	δ 8,54(d, 1H), 8,27(d, 1H), 7,58(d, 1H), 7,34(d, 1H), 7,22(d, 1H), 5,47(s, 2H), 4,24(q, 2H), 3,71(s, 3H), 3,59(d, 3H), 2,75(s, 1H), 2,51(s, 3H), 1,36(t, 3H)
3-34	δ 8,17(d, 1H), 8,11(d, 1H), 7,62(s, 1H), 7,34(d, 1H), 7,21(d, 1H), 5,55(t, 1H), 5,47(s, 2H), 4,70(dd, 1H), 4,22(q, 2H), 3,92(s, 3H), 3,80(dd, 1H), 2,53(s, 3H), 1,59(s, 3H), 1,42(s, 3H), 1,36(t, 3H),
3-35	δ 8,21(d, 1H), 8,11(d, 1H), 7,64(s, 1H), 7,33(d, 1H), 7,20(d, 1H), 6,23(s, 1H), 5,48(s, 2H), 4,21(q, 2H), 4,11(dd, 2H), 3,87(dd, 2H), 3,81(s, 3H), 2,53(s, 3H), 2,15(m, 2H), 1,35(t, 3H)
3-36	δ 8,14(d, 1H), 8,11(d, 1H), 7,65(s, 1H), 7,32(d, 1H), 7,20(d, 1H), 6,40(s, 1H), 5,49(s, 2H), 4,21(q, 2H), 4,08(m, 2H), 3,95(m, 2H), 3,82(s, 3H), 2,52(s, 3H), 1,36(t, 3H)
3-37	δ 8,14(d, 1H), 8,11(d, 1H), 8,65(s, 1H), 7,32(d, 1H), 7,20(d, 1H), 6,40(s, 1H), 5,49(s, 2H), 4,21(q, 2H), 4,08(m, 2H), 3,95(m, 2H), 3,82(s, 3H), 2,52(s, 3H), 1,36(t, 3H)
3-44	δ 8,02(s 1H), 7,59(d, 1H), 7,54(d, 1H), 7,33(dd, 1H), 7,21(d, 1H), 5,43(s, 2H), 4,23(q, 2H), 3,74(s, 3H), 2,85(d, 3H), 2,84(s, 3H), 2,50(s, 3H), 1,36(t, 3H)
3-45	δ 7,95 (d, 1H), 7,77 (d, 1H), 7,67 (d, 1H), 7,32 (d, 1H), 7,28 (dd, 2H),7,23 (dd, 2H), 7,21 (dd, 1H), 5,43 (s, 2H), 4,11 (s, 2H), 3,95 (s, 3H), 3,77 (s, 3H), 2,80 (q, 2H), 1,30 (t, 3H), 1,28 (s, 9H)
3-47	δ 8,02(s 1H), 7,63(d, 1H), 7,56(d, 1H), 7,36(dd, 1H), 7,21(d, 1H), 5,42(s, 2H), 4,23(q, 2H), 3,75(s, 3H), 2,86(d, 3H), 2,85(s, 3H), 2,80(q, 2H), 1,36(t, 3H), 1,31(t, 3H)
3-51	δ 8,52(d, 1H), 8,25(d, 1H), 7,94(s, 1H), 7,54(s, 2H), 6,81(t, 1H), 4,36(q, 2H), 3,80(s, 3H), 3,63(s, 3H), 2,30(s, 3H), 2,04(s, 3H), 1,31(t, 3H)

[Bảng 10-15]

Bảng 10 (Tiếp tục)

Hợp chất số	Dữ liệu ^{1}H-NMR ($CDCl_3$/TMS, ppm)
3-54	δ 8,03(d, 1H), 8,02(s, 1H), 7,75(d, 1H), 7,56(d, 1H), 7,52(d, 1H), 6,81(t, 1H), 5,44(s, 2H), 4,20(q, 2H), 3,89(s, 3H), 2,90(t, 2H), 1,68(sext, 2H), 1,35(t, 3H), 1,01(t, 3H)
3-56	δ 8,05(d, 1H), 8,03(s, 1H), 7,82(d, 1H), 7,56(d, 1H), 7,51(d, 1H), 6,81(t, 1H), 5,44(s, 2H), 4,20(q, 2H), 3,85(s, 3H), 3,50(sep, 1H), 1,35(t, 3H), 1,30(d, 6H)
3-58	δ 8,16 (s, 1H), 8,00 (d, 1H), 7,80 (d, 1H), 7,61 (dd, 1H), 7,50 (d, 1H), 7,28 (dd, 2H), 7,22 (dd, 2H), 5,42 (s, 2H), 4,13 (s, 2H), 3,96 (s, 3H), 3,82 (s, 3H), 1,28 (s, 9H)
3-59	δ 8,16(s 1H), 8,01(d, 1H), 7,79(dd, 1H), 7,61(dd, 1H), 7,50(d, 1H), 7,29(d, 2H), 7,22(d, 2H), 5,41(s, 2H), 4,19(q, 2H), 4,13(s, 2H), 3,82(s, 3H), 1,34(t, 3H), 1,28(s, 9H)
3-61	δ 8,16(s 1H), 8,05(d, 1H), 7,64(dd, 1H), 7,54(d, 1H), 5,44(s, 2H), 4,21(q, 2H), 3,80(s, 3H), 2,91(q, 2H), 1,36(t, 3H), 1,35(t, 3H)
3-62	δ 8,13(s 1H), 8,03(d, 1H), 7,62(dd, 1H), 7,52(d, 1H), 5,45(s, 2H), 4,21(q, 2H), 3,70(s, 3H), 3,04(q, 2H), 2,18(s, 3H), 1,36(t, 3H), 1,35(t, 3H)
3-68	δ 8,13(s 1H), 8,02(d, 1H), 7,62(dd, 1H), 7,52(d, 1H), 5,45(s, 2H), 4,20(q, 2H), 3,72(s, 3H), 2,66(s, 3H), 2,18(s, 3H), 1,36(t, 3H)
3-69	δ 8,10(s 1H), 8,02(d, 1H), 7,64(dd, 1H), 7,55(d, 1H), 5,46(s, 2H), 4,24(q, 2H), 3,97(s, 3H), 2,37(s, 3H), 2,89(s, 3H), 1,37(t, 3H)
3-72	δ 8,05(s 1H), 7,63(d, 1H), 7,54(d, 1H), 7,39(s, 1H), 7,18(d, 1H), 5,40(s, 2H), 4,18(q, 2H), 3,79(s, 3H), 2,86(d, 3H), 2,85(s, 3H), 1,34(t, 3H)
3-74	δ 8,16(s 1H), 8,02(d, 1H), 7,79(dd, 1H), 7,61(dd, 1H), 7,50(d, 1H), 7,29(d, 2H), 7,22(d, 2H), 5,38(s, 2H), 4,38(sep, 1H), 4,12(s, 2H), 3,82(s, 3H), 1,32(d, 6H), 1,28(s, 9H)
3-75	δ 8,16(s, 1H), 7,80(m, 2H), 7,60(dd, 1H), 7,50(d, 1H), 7,13-7,21(m, 4H), 5,42(s, 2H), 4,13-4,10(m, 2H), 3,85(s, 3H), 3,00(d, 3H), 2,04(s, 2H), 1,32(t, 3H), 1,28(s, 9H)
3-76	δ 8,16(s, 1H), 7,81(s, 2H), 7,61(dd, 1H), 7,50(d, 1H), 7,30-7,22(m, 4H), 5,46(s, 2H), 4,16-4,09(m, 2H), 3,84(s, 3H), 3,00(s, 2H), 2,81(s, 3H), 2,80(s, 3H), 2,04(s, 9H), 1,37-1,30(m, 3H)
3-84	δ 8,32(s 1H), 8,18(d, 1H), 7,93(d, 1H), 7,91(d, 1H), 7,69(dd, 1H), 7,54(d, 1H), 6,81(t, 1H), 4,66(d, 2H), 4,61(q, 2H), 4,17(s, 3H), 2,17(s, 3H)
3-90	δ 8,14(s 1H), 8,10(d, 1H), 7,88(d, 1H), 7,62(dd, 1H), 7,46(d, 1H), 4,32(q, 2H), 3,93(q, 2H), 3,91(s, 3H), 2,31(s, 3H), 1,99(s, 3H), 1,37(t, 3H), 1,00(t, 3H)

[Bảng 10-16]

Bảng 10 (Tiếp tục)

Hợp chất số	Dữ liệu ^{1}H-NMR ($CDCl_3$/TMS, ppm)
3-93	δ 8,11(d, 1H), 8,10(d, 1H), 7,86(d, 1H), 7,60(dd, 1H), 7,44(d, 1H), 4,52(sep, 1H), 4,02(sep, 1H), 3,89(s, 3H), 2,30(s, 3H), 2,03(s, 3H), 1,35(d, 6H), 0,94(d, 6H)
3-94	δ 8,12(d, 1H), 8,10(d, 1H), 7,85(d, 1H), 7,59(dd, 1H), 7,42(d, 1H), 3,86(s, 3H), 2,28(s, 3H), 2,08(s, 3H), 1,41(s, 9H), 0,91(s, 9H)
3-95	δ 8,13(d, 1H), 8,06(d, 1H), 7,84(d, 1H), 7,62(dd, 1H), 7,46-7,10(m, 11H), 5,30(s, 2H), 4,94(s, 2H), 3,81(s, 3H), 2,34(s, 3H), 2,07(s, 3H)
3-96	δ 8,14(s 1H), 8,07(d, 1H), 7,90(d, 1H), 7,64(dd, 1H), 7,49(d, 1H), 4,63(q, 2H), 4,33(q, 2H), 4,00(s, 3H), 2,39(s, 3H), 2,04(s, 3H)
3-97	δ 8,14(d, 1H), 8,06(d, 1H), 7,88(d, 1H), 7,65(dd, 1H), 7,49(d, 1H), 6,09(tt, 1H), 5,66(tt, 1H), 4,44(dt, 2H), 4,13(dt, 2H), 3,99(s, 3H), 2,37(s, 3H), 2,04(s, 3H)
3-98	δ 8,13(d, 1H), 8,08(d, 1H), 7,87(d, 1H), 7,62(dd, 1H), 7,46(d, 1H), 6,08(ddt, 1H), 5,63(ddt, 1H), 5,37(dd, 1H), 5,27(dd, 1H), 5,03(dd, 1H), 4,89(dd, 1H), 4,77(dt, 2H), 4,39(dt, 2H), 3,91(s, 3H), 2,34(s, 3H), 2,06(s, 3H)
3-113	δ 8,50(s, 1H), 8,24(d, 1H), 7,98(d, 1H), 7,67(d, 1H), 7,66(d, 1H), 4,35(q, 2H), 4,11(s, 3H), 2,37(s, 3H), 2,34(s, 6H), 1,39(t, 3H)
3-114	δ 8,31(s, 1H), 8,12(d, 1H), 7,99(s, 1H), 7,93(d, 1H), 7,72-7,16(m, 12H), 4,31 (q, 2H), 3,36(s, 3H), 1,38 (t, 3H)
3-117	δ 7,96 (d, 1H), 7,89 (d, 1H), 7,77 (d, 1H), 7,42 (dd, 1H), 7,36 (ddd, 1H),7,31 (ddd, 1H), 7,22-7,29 (m, 4H), 5,44 (s, 2H), 4,11 (s, 2H), 3,95 (s, 3H), 3,79 (s, 3H), 1,28 (s, 9H)
3-120	δ 8,60 (s, 1H), 8,26 (s, 1H), 8,03 - 7,96 (m, 1H), 7,65 - 7,59 (m, 2H), 7,43 (t, 1H), 7,19 - 7,16 (m, 2H), 4,16 (s, 3H), 3,64 - 3,63 (m, 3H), 3,34 - 3,29 (m, 2H), 1,97 - 1,88 (m, 1H), 1,01 - 0,98 (m, 3H)
3-121	δ 8,35 - 8,21 (m, 2H), 8,11 - 8,09 (m, 1H), 7,65 - 7,39 (m, 3H), 5,47 (s, 2H),4,25-4,21 (m, 2H), 3,78 - 3,71 (m, 9H), 1,38 - 1,34 (m, 3H)
3-122	δ 11,04 - 10,99 (m, 1H), 8,13 - 8,11 (m, 1H), 8,02 - 7,93 (m, 2H), 5,38 - 5,33 (s, 2H), 4,33 - 4,32 (m, 3H), 4,29 - 4,09 (m, 4H), 1,39 - 133 (m, 6H)
3-123	δ 12,7(s, 1H), 9,10(d, 1H), 8,04(s, 1H), 7,61(d, 1H), 7,36(dd, 1H), 7,24(d, 1H), 5,39(s, 2H), 4,24(s, 3H), 4,21(q, 2H), 2,54(s, 3H), 2,32(s, 3H), 1,37(t, 3H)
3-126	δ 8,17(d, 1H), 8,01(s, 1H), 7,72(d, 1H), 7,58(d, 1H), 7,53(d, 1H), 5,45(s, 2H), 4,21(q, 2H), 4,01(m, 2H), 3,95(s, 3H), 2,21(m, 4H), 1,36(t, 3H)

[Bảng 10-17]

Bảng 10 (Tiếp tục)

Hợp chất số	Dữ liệu ^{1}H-NMR ($CDCl_3$/TMS, ppm)
3-128	δ 8,12(d, 1H), 7,72(d, 1H), 7,52(s, 1H), 7,30(d, 1H), 7,15(dd, 1H), 5,46(s, 2H), 4,20(q, 2H), 3,93(t, 2H), 3,87(s, 3H), 2,50(s, 3H), 2,24(m, 2H), 2,16(m, 2H), 1,35(t, 3H)
3-129	δ 8,15(d, 1H), 7,75(dd, 1H), 7,73(d, 1H), 7,44(dd, 1H), 7,31(m, 2H), 5,47(s, 2H), 4,20(q, 2H), 3,94(t, 2H), 2,24(m, 2H), 2,17(m, 2H), 1,35(t, 2H)
3-130	δ 8,19(d, 1H), 8,04(s, 1H), 7,79(d, 1H), 7,60(dd, 1H), 7,53(d, 1H), 5,45(s, 2H), 4,52(t, 2H), 4,24(t, 2H), 4,22(q, 2H), 3,96(s, 3H), 1,36(t, 3H)
3-138	δ 8,09(d, 1H), 8,01(s, 1H), 7,94(d, 1H), 7,55(dd, 1H), 7,40(d, 1H), 5,46(s, 2H), 4,19(q, 2H), 3,75(s, 3H), 3,24(t, 2H), 3,00(t, 2H), 1,34(t, 3H)
4-16	δ 8,17(d, 1H), 7,87(dd, 1H), 7,84(d, 1H), 7,54(s, 1H), 7,30(s, 1H), 7,19(d, 1H), 6,82(q, 1H), 4,83(s, 2H), 4,17(q, 2H), 3,68(s, 3H), 2,71(t, 3H), 2,51(s, 3H), 1,33(t, 3H)
4-46	δ 8,19(d, 1H), 8,06(s, 1H), 7,92(dd, 1H), 7,88(d, 1H), 7,63(dd, 1H), 7,52(d, 1H), 6,41(q, 1H), 4,84(s, 2H), 4,18(q, 2H), 3,74(s, 3H), 2,72(d, 3H), 1,33(t, 3H)
4-50	δ 8,08(d, 1H), 8,04(s, 1H), 8,02(dd, 1H), 7,82(d, 1H), 7,60(dd, 1H), 7,49(d, 1H), 4,80(s, 2H), 4,34(m, 1H), 3,63(s, 3H), 2,62(s, 6H), 1,28(d, 6H)
4-60	δ 8,45(m, 3H), 7,58(d, 1H), 7,35(m, 3H), 4,56(q, 2H), 4,23(q, 2H), 3,55(s, 3H), 2,31(s, 3H), 1,85(s, 3H)
4-62	δ 8,15(d, 1H), 7,80(dd, 1H), 7,67(dd, 1H), 7,58(d, 1H), 7,41(dd, 1H), 7,32(m, 2H), 4,40(q, 2H), 3,70(s, 3H), 3,61(s, 3H), 2,24(s, 3H)
4-67	δ 7,78(dd, 1H), 7,72(d, 1H), 7,62(d, 1H), 7,33(d, 1H), 7,28(d, 1H), 7,15(dd, 1H), 4,22(q, 2H), 3,63(s, 3H), 2,51(s, 3H), 2,37(s, 3H), 2,21(s, 3H), 1,32(t, 3H)
4-68	δ 8,20(d, 1H), 7,99(dd, 1H), 7,86(d, 1H), 7,58(d, 1H), 7,35(d, 1H), 7,18(d, 1H), 4,26(q, 2H), 3,59(s, 3H), 3,23(s, 3H), 2,52(s, 3H), 2,25(s, 3H), 1,32(t, 3H)
4-100	δ 8,15(d, 1H), 7,75(dd, 1H), 7,70(d, 1H), 7,62(dd, 1H), 7,44(d, 1H), 7,36(d, 1H), 4,42(q, 2H), 3,65(s, 3H), 2,27(s, 3H), 2,23(s, 3H), 1,32(t, 3H)
4-101	δ 8,16(d, 1H), 7,63(m, 3H), 7,45(d, 1H), 7,40(d, 1H), 4,11(q, 2H), 3,68(s, 3H), 2,31(s, 3H), 2,21(s, 3H), 1,25(t, 3H)
4-104	δ 8,14(d, 1H), 7,83(dd, 1H), 7,78(d, 1H), 7,61(dd, 1H), 7,44(d, 1H), 7,32(d, 1H), 5,18(s, 2H), 4,11(q, 2H), 3,73(s, 3H), 3,39(s, 3H), 2,22(s, 3H), 1,26(t, 3H)
4-109	δ 8,11(dd, 1H), 7,61(dd, 1H), 7,53(d, 1H), 7,48(d, 1H), 7,43(d, 1H), 4,11(q, 2H), 3,75(s, 3H), 3,62(s, 3H), 2,51(s, 3H), 2,22(s, 3H), 1,24(t, 3H)

[Bảng 10-18]

Bảng 10 (Tiếp tục)

Hợp chất số	Dữ liệu ^{1}H-NMR ($CDCl_3$/TMS, ppm)
4-111	δ 8,13(m, 2H), 7,91(dd, 1H), 7,84(d, 1H), 7,58(dd, 1H), 7,16(d, 1H), 4,25(q, 2H), 3,70(s, 3H), 3,52(s, 3H), 2,24(s, 3H), 1,32(t, 3H)
4-113	δ 8,17(d, 1H), 7,95(dd, 1H), 7,89(m, 2H), 7,71(dd, 1H), 7,51(d, 1H), 4,25(q, 2H), 3,75(s, 3H), 3,62(s, 3H), 2,73(s, 6H), 2,25(s, 3H), 1,33(t, 3H)
7-48	δ 8,81 (s, 1H), 8,09 (s, 1H), 7,60 (dd, 1H), 7,51 (d, 1H), 5,27 (s, 2H), 4,18 (q, 2H), 3,95 (s, 3H), 2,91 (s, 6H), 1,34 (t, 3H)
9-5	δ 7,79(dd, 1H), 7,36(m, 4H), 7,27(m, 4H), 4,84(s, 2H), 4,64(d, 1H), 4,52(d, 1H), 4,16(m, 1H), 3,53(s, 3H), 1,18(d, 3H), 1,03(d, 3H)
9-8	δ 7,83(dd, 1H), 7,40(m, 4H), 5,01(s, 2H), 4,17(m, 1H), 3,63(s, 3H), 1,18(d, 1H), 1,04(d, 1H)
9-11	δ 7,79(dd, 1H), 7,40(m, 4H), 5,78(q, 1H), 4,62(s, 2H), 4,25(m, 1H), 3,59(s, 3H), 2,90(d, 3H), 1,18(d, 3H), 1,10(d, 3H)

Các ví dụ về các thực vật có lợi mà hợp chất dị vòng ngưng tụ chứa nitơ của sáng chế hoặc muối của nó có thể được sử dụng bao gồm, nhưng không bị giới hạn cụ thể, các loại ngũ cốc (ví dụ, lúa, lúa mạch, lúa mỳ, lúa mạch đen, yến mạch, ngô, v.v.), các cây họ đậu (ví dụ, đậu nành, đậu azuki, đậu tằm, đậu xanh, đậu tây, đậu phộng, v.v.), cây ăn quả và trái cây (ví dụ, táo, cam quýt, lê, nho, đào, mận, anh đào, quả óc chó, hạt dẻ, hạnh nhân, chuối, v.v.), lá và rau xanh (ví dụ, cải bắp, cà chua, rau chân vịt, súp lơ xanh, rau diếp, hành tây, hành (hẹ và hành xứ Wales), ớt xanh, cà tím, dâu tây, hồ tiêu, đậu bắp, hẹ Trung Quốc, v.v.), rau củ (ví dụ, cà rốt, khoai tây, khoai lang, khoai sọ, củ cải Nhật, củ cải, rễ sen, rễ cây ngưu bàng, tỏi, hành Trung Quốc, v.v.), cây công nghiệp (ví dụ, bông, cây gai dầu, củ cải, hoa bia, mía, củ cải đường, ô liu, cao su, cà phê, thuốc lá, trà, v.v.), các loại bầu (ví dụ, bí ngô Nhật Bản, dưa chuột, dưa hấu, dưa ngọt phương Đông, dưa gang, v.v.), cỏ chăn nuôi (ví dụ, cỏ vườn, cao lương, cỏ đuôi mèo, cỏ ba lá, cỏ linh lăng, v.v.), cỏ bãi (ví dụ, cỏ bãi, cỏ cong, v.v.), các cây gia vị và rau thơm và cây cảnh trang trí (ví dụ, hoa oải hương, hương thảo, húng tây, rau mùi tây, tiêu, gừng, v.v.), các loại cây hoa cảnh (ví dụ, hoa cúc, hoa hồng, cẩm chướng, phong lan, hoa tulip, lily, v.v.), các loài cây trong vườn (ví dụ, cây bạch quả, cây anh đào, ô rô bà Nhật Bản, v.v.) và các loài cây trong rừng (ví dụ, Abies sachalinensis, Picea jezoensis, thông, tuyết tùng vàng, tuyết tùng Nhật Bản, bách hinoki, bạch đàn, v.v.).[0006]

"Các thực vật" được đề cập ở trên cũng bao gồm các thực vật có khả năng chịu thuốc diệt cỏ bằng kỹ thuật gây giống truyền thống hoặc kỹ thuật tái tổ hợp gen. Các ví dụ về khả năng chịu thuốc diệt cỏ bao gồm khả năng chịu các chất ức chế HPPD, chẳng hạn như isoxaflutol; các chất ức chế ALS, chẳng hạn như imazethapyr và thifensulfuron-metyl; các chất ức chế EPSP synthaza, chẳng hạn như glyphosat; các chất ức chế glutamin synthetaza, như glufosinat; các chất ức chế axetyl-CoA cacboxylaza, chẳng hạn như setoxydim; hoặc các thuốc diệt cỏ khác, chẳng hạn như bromxynil, dicamba và 2,4-D.

Các ví dụ về các thực vật có khả năng chịu thuốc diệt cỏ bằng kỹ thuật gây giống truyền thống bao gồm các loài hạt cải dầu, lúa mỳ, hoa hướng dương và lúa chịu được các thuốc diệt cỏ ức chế-ALS họ imidazolinon chẳng hạn như imazethapyr. Loại gạo này được bán dưới tên thương mại là Clearfield (nhãn hiệu đã được đăng ký). Cũng bao gồm các loài đậu nành có khả năng chịu các thuốc diệt cỏ ức chế-ALS họ sulfonyl ure chẳng hạn như thifensulfuron-metyl bằng kỹ thuật gây giống truyền thống, và được bán dưới tên thương mại là Đậu nành STS. Cũng bao gồm các loài thực vật có khả năng chịu các chất ức chế axetyl-CoA cacboxylaza chẳng hạn như các thuốc diệt cỏ trion oxim và các thuốc diệt cỏ axit aryloxy phenoxy propionic bằng kỹ thuật gây giống truyền thống, ví dụ, ngô SR và tương tự.

Các thực vật có khả năng chịu các chất ức chế axetyl-CoA cacboxylaza được mô tả trong tài liệu Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 87, 7175-7179 (1990), và tương tự. Ngoài ra, các đột biến axetyl-CoA cacboxylaza kháng với các chất ức chế axetyl-CoA cacboxylaza được báo cáo trong tài liệu Weed Science, 53, 728-746 (2005), và tương tự, và bằng cách đưa gen của đột biến axetyl-CoA cacboxylaza vào các thực vật bằng kỹ thuật tái tổ hợp gen, hoặc đưa một đột biến kháng thuốc vào trong axetyl-CoA cacboxylaza của thực vật, có thể tạo ra các thực vật chịu được các chất ức chế axetyl-CoA cacboxylaza. Ngoài ra, bằng cách đưa axit nucleic gây ra đột biến thay thế cặp bazơ vào trong các tế bào thực vật (ví dụ điển hình kỹ thuật này là kỹ thuật gắn kết khảm (Gura T. 1999. Repairing the Genome's Spelling Mistakes. Science 285: 316-318.)) cho phép đột biến thay thế tại vị trí đặc hiệu trong các axit amin được mã hóa bằng gen axetyl-CoA cacboxylaza, gen ALS hoặc các gen tương tự của thực vật, có thể tạo ra các loài thực vật chịu được các chất ức chế axetyl-CoA cacboxylaza, các

chất ức chế ALS hoặc các chất tương tự. Hợp chất dị vòng ngưng tụ chứa nitơ của sáng chế hoặc muối của nó cũng có thể được sử dụng cho các thực vật này. Hợp chất của sáng chế không gây thiệt hại cho những cây hữu ích này.

Các ví dụ về cỏ dại mà có thể được kiểm soát bởi hợp chất dị vòng ngưng tụ chứa nitơ của sáng chế hoặc muối của nó bao gồm các chi hai lá mầm chẳng hạn như *Ipomoea*, *Lindernia*, *Sesbania*, *Abutilon*, *Matricaria*, *Rorippa*, *Urtica*, *Lamium*, *Xanthium*, *Sinapis*, *Rotala*, *Veronica*, *Papaver*, *Chenopodium*, *Trifolium*, *Portulaca*, *Viola*, *Pharbitis*, *Galeopsis*, *Datura*, *Solanum*, *Capsella*, *Cirsium*, *Sonchus*, *Galinsoga*, *Stellaria*, *Senecio*, *Amaranthus*, *Ambrosia*, *Kochia*, *Lamium*, *Leipidium*, *Polygonum*, *Galium*, *Centaurea*, và *Artemisia*.[0007]

Các ví dụ về cỏ dại mà có thể được kiểm soát bởi hợp chất dị vòng ngưng tụ chứa nitơ của sáng chế hoặc muối của nó bao gồm các chi một lá mầm chẳng hạn như *Poa*, *Bolboschoenus, Festuca, Setaria, Eleusine, Sagittaria, Agropyron, Ischaemum, Cyperus, Avena, Bromus, Panicum, Cynodon, Monochoria, Alopecurus, Paspalum, Commelina, Fimbristylis, Lolium, Brachiaria, Agrostis, Eleocharis, Echinochloa esculenta, Scirpus, Schoenoplectus, Digitaria*, và *Sorghum*.

Các ví dụ khác về cỏ dại mà có thể được kiểm soát bởi hợp chất dị vòng ngưng tụ chứa nitơ của sáng chế hoặc muối của nó bao gồm loài *Spirogyra*, *Amaranthus retroflexus*, *Amaranthus viridis*, *Setaria faberi*, *Leersia japonica*, *Leptochloa chinensis*, *Lindernia angustifolia*, *Lindernia procumbens*, *Dopatrium junceum*, *Ipomoea hederacea*, *Lindernia dubia*, *Sida spinosa*, *Polygonum pensylvanicum*, *Sesbania exaltata*, *Geranium carolinense*, *Chenopodium ambrosioides*, *Conyza bonariensis*, *Setaria italica*, *Amaranthus powellii*, *Polygonum cuspidatum*, *Abutilon theophrasti*, *Matricaria perforata*, *Polygonum longisetum*, *Veronica polita*, *Echinochloa crus-galli*, *Amaranthus lividus*, *Solanum nigrum*, *Schoenoplectus juncoides* (Roxb.) Palla, *Bromus catharticus*, *Murdannia keisak*, *Bolboschoenus fluviatilis*, *Scirpus maritimus*, *Bromus tectorum*, *Sagittaria pygmaea* Miq, *Rumex obtusifolius*, *Leersia oryzoides* (L.) Sw., *Setaria viridis*, *Cassia obtusifolia*, *Conyza sumatrensis*, *Veronica persica*, *Spirodela polyrhiza*, *Xanthium canadens*, *Coreopsis lanceolata*, *Panicum dichotomiflorum*, *Asclepias syriaca*, *Euphorbia maculata*, *Plantago asiatica*, *Rudbeckia laciniata*, *Amaranthus palmeri*, *Avena sativa*, *Xanthium strumarium*, *Avena*

sterilis, *Eleusine indica*, *Sagittaria trifolia*, *Erodium cicutarium*, *Cerastium glomeratum*, *Matricaria matricarioides*, *Matricaria chamomilla*, *Vicia angustifolia*, *Bromus secalinus*, *Avena fatua*, *Rotala indica* Koehne, *Rumex japonicus*, *Paspalum distichum*, *Bromus remotiflorus*, *Cyperus esculentus*, *Galium kinuta*, *Setaria glauca*, *Pueraria lobata*, *Eleocharis kuroguwai* Ohwi, *Sagittaria trifolia* Caerulea, *Ambrosia trifida*, *Hydrilla verticillata*, *Bolboschoenus maritimus* (L.) Palla, *Chrysanthemum segetum*, *Cyperus iria*, *Monochoria vaginalis*, *Echinochloa colona*, *Alisma plantago-aquatica*, *Oryza sativa*, *Polygonum lapathifolium*, *Eleusine coracana*, *Schoenoplectus nipponicus*, *Cyperus malaccensis*, *Agropyron repens*, *Sorghum vulgare*, *Apera spica-venti*, *Chenopodium album*, *Trifolium repens*, *Datura stramonium*, *Equisetum arvense*, *Poa annua*, *Bromus japonicus*, *Alopecurus aequalis*, *Portulaca oleracea*, *Solidago altissima*, *Sorghum halepense*, *Brassica juncea*, *Taraxacum officinale*, *Convolvulus arvensis*, *Oenanthe javanica*, *Polygonum convolvulus*, *Echinochloa oryzicola* Vasing, *Ischaemum rugosum*, *Veronica arvensis*, *Cyperus difformis* L., *Amaranthus rudis*, *Phleum pratense*, *Ludwigia prostrata* Roxburgh, *Commelina communis*, *Panicum texanum*, *Euphorbia helioscopia*, *Festuca parvigluma*, *Rumex crispus*, *Capsella bursa-pastoris*, *Euphorbia pseudochamaesyce*, *Brachiaria plantaginea*, *Lolium multiflorum*, *Cirsium japonicum*, *Alopecurus myosuroides*, *Sinapis arvensis*, *Senecio vulgaris*, *Galinsoga ciliata*, *Amaranthus tricolor*, *Stellaria media*, *Cyperus papyrus*, *Cyperus rotundus*, *Amaranthus spinosus*, *Polygonum persicaria*, *Senecio cannabifolius*, *Papaver rhoeas*, *Helianthus annuus*, *Lamium purpureum*, *Kyllinga gracillima*, *Ammannia multiflora*, *Erigeron canadensis*, *Potamogeton distinctus* A. Benn, *Amaranthus tuberculatus*, *Viola arvensis*, *Cirsium purpuratum*, *Ambrosia artemisiifolia*, *Schoenoplectus tabernaemontani*, *Veronica hederaefolia*, *Alopecurus myosuroides*, *Desmodium tortuosum*, *Plantago lanceolata*, *Alisma canaliculatum* A. Br. et Bouche, *Kochia scoparia*, *Lolium rigidum*, *Ammannia coccinea*, *Lolium perenne*, *Scirpus juncoides* Roxburgh, *Lamium amplexicaule*, *Najas graminea*, *Amaranthus hybridus*, *Eleocharis acicularis* L., *Portulaca grandiflora*, *Ipomoea lacunosa*, *Ipomoea purpurea*, *Ipomoea hederacea* var. *integriuscula*, *Commelina bengharensis*, *Monochoria korsakowii*, *Cyperus serotinus* Rottboel, *Elatine triandra* Schk, *Digitaria ciliaris*, *Digitaria sanguinalis*, *Sorghum bicolor*, *Galium aparine*, *Artemisia princeps*, *Viola tricolor*, *Raphanus raphanistrum*, *Myosotis*

arvensis, *Alisma canaliculatum*, và *Cyperus flaccidus*. Hợp chất dị vòng ngưng tụ chứa nitơ của sáng chế hoặc muối của nó ức chế sự phát triển của các loại cỏ dại này.

Khi hợp chất dị vòng ngưng tụ chứa nitơ của sáng chế hoặc muối của nó được sử dụng, thường được phối chế thành dạng thuận tiện cho việc áp dụng, mà được điều chế bằng phương pháp thông thường để điều chế các chế phẩm phối chế chất nông dược.

Nghĩa là, hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1) của sáng chế hoặc muối của nó và chất mang bất hoạt thích hợp, và nếu cần tá chất, được trộn với tỷ lệ thích hợp, và thông qua bước hòa tan, phân tách, tạo huyền phù, trộn, ngâm tẩm, hấp phụ và/hoặc kết dính, được phối chế thành dạng thích hợp cho ứng dụng, chẳng hạn như dạng cô đặc tạo huyền phù được, dạng cô đặc nhũ hóa được, dạng cô đặc tan được, dạng bột thấm ướt được, dạng hạt phân tán được trong nước, dạng hạt, dạng bụi, dạng viên nén và dạng gói.

Chế phẩm (thuốc diệt cỏ dùng trong nông nghiệp và trồng trọt) của sáng chế có thể tùy chọn chứa chất phụ gia thường được sử dụng cho các chế phẩm phối chế chất nông dược hoặc thuốc diệt cỏ dùng trong nông nghiệp và trồng trọt ngoài thành phần hoạt chất. Các ví dụ về chất phụ gia bao gồm các chất mang chẳng hạn như các chất mang rắn hoặc lỏng, các chất hoạt động bề mặt, các chất phân tán, các tác nhân làm ướt, các chất liên kết, các chất kết dính, các chất làm đặc, các chất màu, các chất làm lan rộng, các tác nhân kết dính/lan rộng, các tác nhân chống đông, các tác nhân chống vón cục, các chất phân hủy và các chất ổn định. Nếu cần, các chất bảo quản, các phân đoạn thực vật, v.v. cũng có thể được sử dụng làm chất phụ gia. Một trong những chất phụ gia này có thể được sử dụng một mình, và đồng thời hai hoặc nhiều trong số chúng có thể được sử dụng kết hợp.

Các ví dụ về chất mang rắn bao gồm các khoáng chất tự nhiên, chẳng hạn như thạch anh, đất sét, kaolinit, pyrophyllit, sericit, talc, bentonit, đất sét axit, attapulgit, zeolit và diatomit; muối vô cơ, chẳng hạn như canxi cacbonat, amoni sulfat, natri sulfat và kali clorua; chất mang chất rắn hữu cơ, chẳng hạn như axit silicic tổng hợp, silicat tổng hợp, tinh bột, xenlulo và bột thực vật (ví dụ, mùn cưa, vỏ dừa, lõi ngô, thân cây thuốc lá, v.v.); chất mang chất dẻo, chẳng hạn như polyetylen, polypropylen và polyvinylidene clorua; phân urê; vật liệu vô cơ rỗng; vật liệu nhựa rỗng; và silica dạng

khói (carbon trắng). Một trong các chất mang rắn này có thể được sử dụng một mình, và đồng thời hai hoặc nhiều trong số chúng có thể được sử dụng kết hợp.

Các ví dụ về chất mang lỏng bao gồm các rượu mà bao gồm các rượu monohydric, chẳng hạn như metanol, etanol, propanol, isopropanol và butanol, và các rượu polyhydric, chẳng hạn như etylen glycol, dietylen glycol, propylen glycol, hexylen glycol, polyetylen glycol, polypropylen glycol và glyxerin; các hợp chất polyol, chẳng hạn như propylen glycol ete; các keton, chẳng hạn như axeton, metyl etyl keton, metyl isobutyl keton, diisobutyl keton và xyclohexanon; etes, chẳng hạn như etyl ete, dioxan, etylen glycol monoetyl ete, dipropyl ete và tetrahydrofuran; các hydrocacbon béo, chẳng hạn như paraffin thông thường, naphten, isoparaffin, kerosen và dầu khoáng; các hydrocacbon thơm, chẳng hạn như benzen, toluen, xylen, dung môi naphta và alkyl naphtalen; các hydrocacbon được halogen hóa, chẳng hạn như diclometan, cloroform và cacbon tetraclorua; các este, chẳng hạn như etyl axetat, diisopropyl phtalat, dibutyl phtalat, dioctyl phtalat và dimetyl adipat; các lacton, chẳng hạn như gamma-butyrolacton; các amit, chẳng hạn như N,N-dimetylformamit, N,N-dietylformamit, N,N-dimetylaxetamit và N-alkyl pyrrolidinon; các nitril, chẳng hạn như axetonitril; các hợp chất của lưu huỳnh, chẳng hạn như dimetyl sulfoxit; dầu thực vật, chẳng hạn như dầu đậu nành, dầu hạt cải, dầu hạt bông và dầu thầu dầu; và nước. Một trong số các chất mang lỏng này có thể được sử dụng một mình, và đồng thời hai hoặc nhiều trong số chúng có thể được sử dụng kết hợp.

Các chất hoạt động bề mặt ví dụ được sử dụng làm chất phân tán, tác nhân làm ướt, chất làm lan rộng, tác nhân kết dính/lan rộng, v.v. bao gồm các chất hoạt động bề mặt không có ion, chẳng hạn như este của axit béo sorbitan, este của axit béo polyoxyetylen, este của axit béo sucroza, este của axit béo polyoxyetylen, este của axit nhựa polyoxyetylen, dieste của axit béo polyoxyetylen, polyoxyetylen alkyl ete, polyoxyetylen alkyl aryl ete, polyoxyetylen alkyl phenyl ete, polyoxyetylen dialkyl phenyl ete, các chất ngưng tụ từ polyoxyetylen alkyl phenyl ete-formaldehyt, các copolyme khối polyoxyetylen-polyoxypropylen, các copolyme khối polystyren-polyoxyetylen, ete copolyme khối alkyl polyoxyetylen-polypropylen, polyoxyetylen alkylamin, amit của axit béo polyoxyetylen, bis(phenyl ete)của axit béo polyoxyetylen, polyalkylen benzyl phenyl ete, polyoxyalkylen styryl phenyl ete,

axetylen diol, axetylen diol được bổ sung polyoxyalkylen, silicon loại polyoxyetylen ete, silicon loại este, các chất hoạt động bề mặt gốc flo, dầu thầu dầu polyoxyetylen và dầu thầu dầu được hydro hóa polyoxyetylen; các chất hoạt động bề mặt anion, chẳng hạn như các alkyl sulfat, các polyoxyetylen alkyl ete sulfat, các polyoxyetylen alkyl phenyl ete sulfat, các polyoxyetylen styryl phenyl ete sulfat, các alkylbenzen sulfonat, các alkylaryl sulfonat, các lignosulfonat, các alkyl sulfosucxinat, các naphtalen sulfonat, các alkylnaphtalen sulfonat, các chất ngưng tụ từ các muối của axit naphtalensulfonic-formaldehyt, các chất ngưng tụ từ các muối của axit alkylnaphtalensulfonic-formaldehyt, các muối axit béo, các muối của axit polycacboxylic, các polyacrylat, các sarcosinat của axit béo N-metyl, các resinat, các polyoxyetylen alkyl ete phosphat và các polyoxyetylen alkyl phenyl ete phosphat; các chất hoạt động bề mặt cation bao gồm các muối alkyl amin, chẳng hạn như lauryl amin hydroclorua, stearyl amin hydroclorua, oleyl amin hydroclorua, stearyl amin axetat, stearyl aminopropyl amin axetat, alkyl trimetyl amoni clorua và alkyl dimetyl benzalkonium clorua; và các chất hoạt động bề mặt lưỡng tính, chẳng hạn như các chất hoạt động bề mặt lưỡng tính loại amino axit hoặc các chất hoạt động bề mặt lưỡng tính loại betain. Một trọng các chất hoạt động bề mặt này có thể được sử dụng một mình, và đồng thời hai hoặc nhiều trong số chúng có thể được sử dụng kết hợp.

Các ví dụ về chất liên kết hoặc chất kết dính bao gồm cacboxymetyl xenluloza hoặc muối của chúng, dextrin, tinh bột tan được, gôm xanthan, gôm guar, sucroza, polyvinyl pyrrolidon, gôm Ả rập, rượu polyvinyl, polyvinyl axetat, natri polyacrylat, polyetylen glycol với trọng lượng phân tử trung bình là 6.000 đến 20.000, polyetylen oxit có trọng lượng phân tử trung bình từ 100.000 to 5.000.000, photpholipit (ví dụ, cephalin, lexithin, v.v.), bột xenlulo, dextrin, tinh bột biến tính, hợp chất chelat của axit polyaminocacboxylic, polyvinyl pyrrolidon liên kết chéo, các copolyme axit maleic-styren, các copolyme axit (met)acrylic, một nửa este của polyme rượu polyhydric và anhydrit dicacboxylic, polystyren sulfonat tan được trong nước, parafin, terpen, nhựa polyamit, polyacrylat, polyoxyetylen, sáp, polyvinyl ankyl ete, các chất ngưng tụ từ alkylphenol-fomanđehit và các nhũ tương nhựa tổng hợp.

Các ví dụ về chất làm đặc bao gồm các polyme tan được trong nước, chẳng hạn như gôm xantan, gôm guar, gôm diutan, cacboxymetyl xenluloza, polyvinyl pyrrolidon,

các polyme cacboxyvinyl, các polyme acrylic, hợp chất tinh bột và các polysaccarit; và bột mịn vô cơ, chẳng hạn như bentonit cao cấp và silica bốc khói (cacbon trắng).

Các ví dụ về chất tạo màu bao gồm các bột màu vô cơ, chẳng hạn như oxit sắt, oxit titan và xanh Prussian; và thuốc nhuộm hữu cơ, chẳng hạn như thuốc nhuộm alizarin, thuốc nhuộm azo và thuốc nhuộm phtaloxyanin kim loại.

Các ví dụ về tác nhân chống đông bao gồm rượu polyhydric, chẳng hạn như etylen glycol, dietylen glycol, propylen glycol và glyxerin.

Các ví dụ về tá chất đóng vai trò ngăn chặn sự vón cục hoặc tạo điều kiện phân hủy bao gồm polysaccarit (tinh bột, axit alginic, mannoza, galactoza, v.v.), polyvinyl pyrrolidon, silica bốc khói (carbon trắng), gôm este, nhựa dầu mỏ, natri tripolyphosphat, natri hexametaphotphat, stearat kim loại, bột xenlulo, dextrin, các copolyme metacrylat, polyvinyl pyrrolidon, hợp chất chelat của axit polyaminocacboxylic, các copolyme maleic anhydrit -isobutylen- styren được sulfo hóa và các copolyme ghép tinh bột-polyacrylonitril.

Các ví dụ về chất ổn định bao gồm chất hút ẩm, chẳng hạn như zeolit, vôi sống và magie oxit; chất chống oxy hóa, chẳng hạn như hợp chất phenol, hợp chất amin, hợp chất lưu huỳnh và hợp chất axit photphoric; và các chất hấp thụ tia cực tím, chẳng hạn như các hợp chất axit salixylic và các hợp chất benzophenon.

Các ví dụ về chất bảo quản bao gồm kali sorbat và 1,2-benzothiazolin-3-on.

Hơn nữa, các tá chất khác bao gồm các tác nhân lan truyền chức năng, các chất tăng cường hoạt tính chẳng hạn như các chất ức chế chuyển hóa (piperonyl butoxit, v.v.), các tác nhân chống đông (propylen glycol, v.v.), các chất chống oxy hóa (BHT, v.v.) và các chất hấp thụ tia cực tím cũng có thể được sử dụng nếu cần.

Lượng hợp chất thành phần hoạt tính trong thuốc diệt cỏ dùng trong nông nghiệp và trồng trọt của sáng chế có thể được điều chỉnh khi cần, và về cơ bản, lượng hợp chất thành phần hoạt tính được chọn một cách phù hợp trong phạm vi từ 0,01 đến 90 phần theo trọng lượng trong 100 phần theo trọng lượng của thuốc diệt cỏ dùng trong nông nghiệp và trồng trọt. Ví dụ, trong trường hợp mà thuốc diệt cỏ dùng trong nông nghiệp và trồng trọt là có dạng bụi, dạng hạt, dạng cô đặc có thể nhũ hóa được hoặc dạng bột thấm ướt được, thì lượng hợp chất thành phần hoạt tính phù hợp là từ 0,01

đến 50 phần theo trọng lượng (0,01 đến 50% theo trọng lượng so với tổng trọng lượng của thuốc diệt cỏ dùng trong nông nghiệp và trồng trọt).

Tỷ lệ áp dụng hợp chất dị vòng ngưng tụ chứa nitơ của sáng chế hoặc muối của nó có thể thay đổi tùy theo các yếu tố khác nhau, ví dụ, mục đích, loài cỏ mục tiêu, điều kiện phát triển của cây trồng, xu hướng nhiễm cỏ, thời tiết, điều kiện môi trường, chế phẩm phối chế, phương pháp áp dụng, vị trí áp dụng, thời gian áp dụng, v.v., nhưng về cơ bản, tỷ lệ áp dụng của hợp chất hoạt chất được lựa chọn thích hợp từ khoảng 0,001 g đến 10 kg, tốt nhất là 0,01 g đến 1 kg trên 10 mẫu Anh tùy thuộc vào mục đích.

Để kiểm soát cỏ dại, thuốc diệt cỏ dùng trong nông nghiệp và trồng trọt bao gồm hợp chất dị vòng ngưng tụ chứa nitơ của sáng chế hoặc muối của nó làm thành phần hoạt tính, có hoặc không pha loãng hoặc tạo huyền phù một cách thích hợp trong nước v.v., được áp dụng trực tiếp lên tán cỏ dại với lượng hiệu quả để kiểm soát cỏ dại. Ngoài áp dụng lên tán lá, có thể thực hiện xử lý hạt giống cho các loại cây hữu ích, chẳng hạn như nhúng, phủ bụi và phủ canxi peoxit. Ngoài ra, cũng có thể thực hiện cử lý đất hoặc môi trường phát triển, và các ví dụ về phương pháp xử lý này bao gồm đưa vào trong toàn bộ đất, xử lý theo hàng trồng, đưa vào trong đất nền, xử lý cây con cắm, xử lý hố trồng, xử lý gốc cây, bón thúc, xử lý hộp ươm lúa, và áp dụng ngâm ngập nước.

Các phương pháp xử lý hạt giống ví dụ bao gồm nhúng hạt vào dung dịch pha loãng hoặc chưa pha loãng của chế phẩm phối chế dạng lỏng hoặc dạng rắn để các chất nông dược thẩm thấu vào hạt; trộn hoặc phủ bụi hạt bằng chế phẩm phối chế dạng rắn hoặc dạng lỏng để chế phẩm phối chế bám dính trên bề mặt hạt; phủ hạt bằng hỗn hợp chế phẩm phối chế dạng rắn hoặc dạng lỏng và chất mang kết dính chẳng hạn như nhựa và polyme; và áp dụng chế phẩm phối chế dạng rắn hoặc dạng lỏng cho vùng lân cận của hạt giống cùng lúc với việc gieo hạt.

Thuật ngữ "hạt giống" trong xử lý hạt giống dùng để chỉ thể thực vật đang ở giai đoạn đầu của quá trình trồng trọt và được sử dụng để nhân giống cây trồng hữu ích. Ngoài cái gọi là hạt giống, các ví dụ này bao gồm cả thể thực vật dùng để nhân giống sinh dưỡng, chẳng hạn như củ, củ, khoai tây giống, củ hành, chồi mầm, thân dạng đĩa và thân dùng để cắt.

Thuật ngữ "đất" hoặc "môi trường phát triển" theo phương pháp của sáng chế sử dụng thuốc diệt cỏ dùng trong nông nghiệp hoặc trồng trọt đề cập đến môi trường hỗ trợ cho việc canh tác cây trồng, cụ thể là môi trường hỗ trợ cho phép cây trồng mọc rễ trong đó, và các vật liệu không bị giới hạn cụ thể miễn là chúng cho phép thực vật phát triển. Ví dụ về môi trường hỗ trợ bao gồm những gì được gọi là đất, thảm cây con và nước, và các ví dụ cụ thể về vật liệu bao gồm cát, đá bọt, vermiculit, diatomit, agar, chất dạng gel, chất có trọng lượng phân tử cao, len đá, bông thủy tinh, gỗ vụn và vỏ cây.

Trong trường hợp áp dụng cho hộp ươm lúa, loại công thức có thể khác nhau tùy thuộc vào việc ứng dụng được thực hiện tại thời điểm gieo hạt, trong thời kỳ hồi xanh, tại thời điểm cấy hoặc tương tự. Ví dụ, có thể sử dụng bụi, hạt phân tán trong nước, hạt hoặc tương tự. Chế phẩm phối chế như vậy có thể được áp dụng bằng cách đưa vào trong đất ươm. Ví dụ, bụi, hạt phân tán trong nước, hạt nhỏ, hoặc tương tự có thể được đưa vào trong đất nền, đất che phủ hoặc toàn bộ đất ươm. Một cách đơn giản, đất ươm và chế phẩm phối chế như vậy có thể được tạo lớp xen kẽ.

Khi áp dụng cho ruộng lúa, chế phẩm phối chế dạng rắn chẳng hạn như dạng tảng, dạng gói, dạng hạt và dạng hạt phân tán được trong nước, hoặc dạng lỏng, chẳng hạn như dạng cô đặc có thể nhũ hóa được và chảy được, thường được áp dụng cho các cánh đồng lúa nước. Trong thời kỳ gieo cấy lúa, có thể bón hoặc bơm chế phẩm phối chế phù hợp vào đất, ở dạng nguyên bản hoặc sau khi trộn với phân bón. Ngoài ra, dạng cô đặc có thể nhũ hóa được, chảy được hoặc tương tự có thể được áp dụng vào nguồn nước được cung cấp cho các cánh đồng lúa, chẳng hạn như đầu vào nước và thiết bị tưới tiêu. Trong trường hợp này, việc xử lý có thể được thực hiện bằng việc cung cấp nước và do đó giúp tiết kiệm lao động. Trong trường hợp sử dụng thiết bị phun thuốc, đó có thể là bất kỳ thiết bị nào thường được sử dụng, ví dụ như máy phun dạng cần được gắn trên máy kéo, máy bay trực thăng có người lái, máy bay trực thăng điều khiển bằng sóng vô tuyến, thuyền điều khiển bằng sóng vô tuyến, máy bay không người lái, máy phun thuốc một lần, máy phun điện (thủ công hoặc tự động), máy phun chạy điện mang theo, máy phun chạy điện đeo lưng và máy phun vận hành bằng tay.

Để mở rộng phạm vi của cỏ dại mục tiêu và thời gian thích hợp để kiểm soát cỏ dại, hoặc để giảm liều lượng, hợp chất dị vòng ngưng tụ chứa nitơ của sáng chế hoặc

muối của nó có thể được sử dụng sau khi được trộn với với các thuốc diệt cỏ, chất điều hòa sinh trưởng thực vật, chất làm giảm độc tố thực vật (còn gọi là chất an toàn), chất điều hòa đất, phân bón, và/hoặc tương tự khác. Ngoài ra, hợp chất của sáng chế hoặc muối của nó có thể được sử dụng sau khi được trộn với thuốc trừ sâu nông nghiệp hoặc trồng trọt, thuốc diệt ve, thuốc diệt tuyến trùng, thuốc diệt vi khuẩn, thuốc trừ sâu sinh học và/hoặc thuốc tương tự tùy thuộc vào tình huống. Các ví dụ không giới hạn về các hợp chất điển hình được mô tả dưới đây.

Các thuốc diệt cỏ ví dụ được sử dụng cho các mục đích tương tự như trên bao gồm 1-naphtylaxetamit, 2,4-PA, 2,3,6-TBA, 2,4,5-T, 2,4,5-TB, 2,4-D, 2,4-DB, 2,4-DEB, 2,4-DEP, 3,4-DA, 3,4-DB, 3,4-DP, 4-CPA, 4-CPB, 4-CPP, MCP, MCPA, MCPA-thioetyl, MCPB, ioxynil, aclonifen, azafenidin, axifofen, aziprotryn, azimsulfuron, asulam, axetoclo, atrazin, atraton, anisuron, anilofos, aviglyxin, axit abscisic, amicacbazon, amidosulfuron, amitrol, aminoxyclopyraclo, aminopyralit, amibuzin, amiprophos-metyl, ametridion, ametryn, alaclo, allidoclo, alloxydim, alorac, iofensulfuron, isouron, isocacbamit, isoxaclotol, isoxapyrifop, isoxaflutol, isoxaben, isoxil, isonoruron, isoproturon, isopropalin, isopolinat, isomethiozin, inabenfit, ipazin, ipfencacbazon, iprymidam, imazaquin, imazapic, imazapyr, imazametapyr, imazametabenz, imazametabenz-metyl, imazamox, imazethapyr, imazosulfuron, indaziflam, indanofan, axit indolebutyric, uniconazol-P, eglinazin, esprocarb, ethametsulfuron, ethametsulfuron-metyl, ethalfluralin, ethiolat, etyclozat-etyl, ethidimuron, etinofen, ethephon, etoxysulfuron, etoxyfen, etnipromid, ethofumesat, etobenzanit, epyrifenaxil, epronaz, erbon, endothal, oxadiazon, oxadiargyl, oxaziclomefon, oxasulfuron, oxapyrazon, oxyfluorfen, oryzalin, orthosulfamuron, orbencarb, cafenstrol, cambendiclo, carbasulam, carfentrazon, carfentrazon-etyl, karbutilat, carbetamit, cacboxazol, quizalofop, quizalofop-P, quizalofop-etyl, xylaclo, quinoclamin, quinonamid, quinclorac, quinmerac, cumyluron, clacyfos, cliodat, glyphosat, glufosinat, glufosinat-P, credazin, clethodim, cloxyfonac, clodinafop, clodinafop-propargyl, clotoluron, clopyralid, cloproxydim, cloprop, clobromuron, clofop, clomazon, clometoxynil, clometoxyfen, clomeprop, cloazifop, cloazin, cloransulam, cloanocryl, cloamben, cloransulam-metyl, cloidazon, cloimuron, cloimuron-etyl, closulfuron, clothal, clothiamid, clonitrofen, clofenac, clofenprop, clobufam, cloflurazol, cloflurenol, cloprocarb, clopropham, clomequat, cloeturon,

cloxynil, cloxuron, clopon, saflufenaxil, xyanazin, xyanatryn, di-allat, diuron, diethamquat, dioxopyritrion, dicamba, xycluron, xycloat, xycloxydim, diclosulam, xyclosulfamuron, xyclopyranil, xyclopyrimorat, dicloprop, dicloprop-P, diclobenil, diclofop, diclofop-metyl, diclomat, dicloalure, diquat, xisanilit, disul, siduron, dithiopyr, dinitramin, xinidon-etyl, dinosam, cinosulfuron, dinoseb, dinoterb, dinofenat, dinoprop, xyhalofop-butyl, xypyrafluon, diphenamit, difenoxuron, difenopenten, difenzoquat, xybutryn, xyprazin, xyprazol, diflufenican, diflufenzopyr, dipropetryn, xypromid, xyperquat, gibberellin, simazin, dimexano, dimesulfazet, dimetaclo, dimidazon, dimetametryn, dimethenamit, simetryn, simeton, dimepiperat, dimefuron, xinmetylin, swep, sulglycapin, sulcotrion, sulfallat, sulfentrazon, sulfosulfuron, sulfometuron, sulfometuron-metyl, secbumeton, setoxydim, sebuthylazin, terbaxil, daimuron, dazomet, dalapon, thiazafluron, thiazopyr, tiafenaxil, thiencacbazon, thiencacbazon-metyl, tiocacbazil, tioclorim, thiobencarb, thidiazimin, thidiazuron, thifensulfuron, thifensulfuron-metyl, desmedipham, desmetryn, tetflupyrolimet, tetrafluron, thenylclo, tebutam, tebuthiuron, terbumeton, tepraloxydim, tefuryltrion, tembotrion, delaclo, terbaxil, terbucarb, terbuclo, terbuthylazin, terbutryn, topramezon, tralkoxydim, triaziflam, triasulfuron, triafamon, tri-allat, trietazin, tricamba, triclopyr, tridiphan, tritac, tritosulfuron, tripyrasulfon, trifludimoxazin, triflusulfuron, triflusulfuron-metyl, trifluralin, trifloxysulfuron, tripropindan, tribenuron-metyl, tribenuron, trifop, trifopsim, trimeturon, tolpyralat, naptalam, naproanilit, napropamit, nicosulfuron, nitralin, nitrofen, nitrofluorfen, nipyraclofen, neburon, norflurazon, noruron, barban, paclobutrazol, paraquat, parafluron, haloxydin, halauxifen, haloxyfop, haloxyfop-P, haloxyfop-metyl, halosafen, halosulfuron, halosulfuron-metyl, bixlozon, picloram, picolinafen, bixyclopyron, bispyribac, bispyribac-natri, pydanon, pinoxaden, bipyrazon, bifenox, piperophos, hymexazol, pyraclonil, pyrasulfotol, pyrazoxyfen, pyrazosulfuron, pyrazosulfuron-etyl, pyrazolat, bilanafos, pyraflufen-etyl, pyriclor, pyridafol, pyrithiobac, pyrithiobac-natri, pyridat, pyriftalid, pyributicarb, pyribenzoxim, pyrimisulfan, primisulfuron, pyriminobac-metyl, pyroxasulfon, pyroxsulam, fenasulam, phenisopham, fenuron, fenoxasulfone, fenoxaprop, fenoxaprop-P, fenoxaprop-etyl, phenothiol, fenoprop, phenobenzuron, fenquinotrion, fenthiaprop, fenteracol, fentrazamit, fenpyrazon, phenmedipham, phenmedipham-etyl, butaclo, butafenacil, butamifos, buthiuron, buthidazol, butylate, buturon, butenaclo,

butroxydim, butralin, flazasulfuron, flamprop, furyloxyfen, prynaclo, primisulfuron-metyl, fluazifop, fluazifop-P, fluazifop-butyl, fluazolat, fluroxypyr, fluothiuron, fluometuron, floglycofen, flurocloidon, flodifen, flonitrofen, flomidin, flucacbazon, flucacbazon-natri, flucloalin, fluxetosulfuron, fluthiaxet, fluthiaxet-metyl, flupyrsulfuron, flufenacet, flufenican, flufenpyr, flupropaxil, flupropanat, flupoxam, flumioxazin, flumiclorac, flumiclorac-pentyl, flumipropyn, flumezin, fluometuron, flumetsulam, fluridon, flurtamon, fluroxypyr, pretilaclo, proxan, proglinazin, procyazin, prodiamin, prosulfalin, prosulfuron, prosulfocarb, propaquizafop, propaclo, propazin, propanil, propyzamit, propisoclo, prohydrojasmon, propyrisulfuron, propham, profluazol, profluralin, prohexadion-canxi, propoxycacbazon, propoxycacbazon-natri, profoxydim, bromaxil, brompyrazon, prometryn, prometon, bromxynil, bromfenoxim, brombutit, brombonil, florasulam, florpyrauxifen, hexacloaxeton, hexazinon, pethoxamid, benazolin, penoxsulam, pebulat, beflubutamit, beflubutamit-M, vernolat, perfluidon, bencacbazon, benquitrion, benzadox, benzipram, benzylaminopurin, benzthiazuron, benzfendizon, bensulit, bensulfuron-metyl, benzoylprop, benzobixyclon, benzofenap, benzoflo, bentazon, pentanoclo, benthiocarb, pendimetalin, pentoxazon, benfluralin, benfuresat, fosamin, fomesafen, foramsulfuron, forclofenuron, maleic hydrazua, mecoprop, mecoprop-P, medinoterb, mesosulfuron, mesosulfuron-metyl, mesotrion, mesoprazin, metoprotryn, metazaclo, metazol, metazosulfuron, metabenzthiazuron, metamitron, metamifop, metam, metalpropalin, methiuron, methiozolin, methiobencarb, metyldymron, metoxuron, metosulam, metsulfuron, metsulfuron-metyl, metflurazon, metobromuron, metobenzuron, metometon, metolaclo, metribuzin, mepiquat-clorua, mefenacet, mefluidit, monalit, monisouron, monuron, axit monocloaxetic, monolinuron, molinat, morfamquat, iodsulfuron, iodsulfuron-metyl-natri, iodbonil, iodmetan, lactofen, lancotrion, linuron, rimisoxafen, rimsulfuron, lenaxil, rhodetanil, canxi peoxit và metyl bromua. Thuốc trừ sâu sinh học khả dụng như các thuốc diệt cỏ, chẳng hạn như Xanthomonas campestris, cũng có thể được sử dụng sau khi được trộn với với hợp chất của sáng chế hoặc muối của nó.[0008]

Các ví dụ về chất giảm độc tố thực vật (chất an toàn) bao gồm 1,8-naphtalic anhydrit, isoxadifen-etyl, furilazol, xyprosulfamit, xyometrinil, diclomid, dimepiperat,

thiencacbazon-metyl, fencloazon-etyl, fenclorim, fluxofenim, flurazol, benoxacor, metcamifen, và mefenpyr-dietyl.

Các ví dụ khác về thuốc trừ sâu sinh học bao gồm các loài săn mồi tự nhiên chẳng hạn như *Encarsia formosa*, *Aphidius colemani*, *Aphidoletes aphidimyza*, *Diglyphus isaea*, *Dacnusa sibirica*, *Phytoseiulus persimilis*, *Amblyseius cucumeris* và *Orius sauteri*; thuốc trừ sâu vi sinh như *Beauveria brongniartii*; và pheromon chẳng hạn như (Z) -10-tetradexenyl axetat, (E, Z)-4,10-tetradecadienyl axetat, (Z)-8-dodexenyl axetat, (Z)-11-tetradexenyl axetat, (Z) -13- icosen-10-on và 14-metyl-1-octadexen.

Ví dụ thực hiện sáng chế

Sau đây, các ví dụ đại diện liên quan đến sáng chế được thể hiện, nhưng sáng chế không bị giới hạn ở đó.

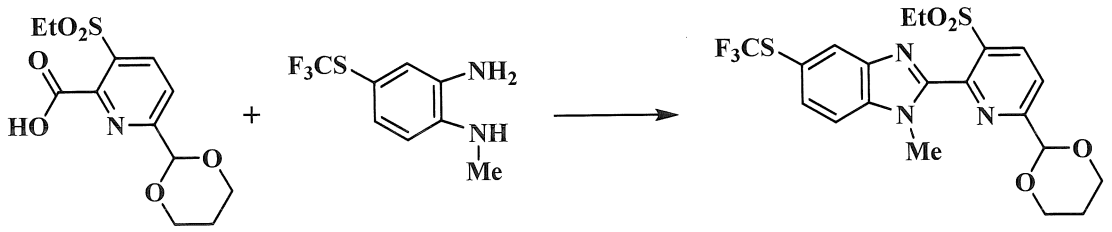
Ví dụ điều chế 1

Điều chế
(E)-(5-metylthio)-6-(1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl)-2-pyridincacboxaldehyt O-etyl oxim (Hợp chất số 3-82),
(E)-(5-metylsulfinyl)-6-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]-2-pyridincacboxaldehyt O-etyl oxim (Hợp chất số 3-83), và
(E)-(5-metylsulfonyl)-6-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]-2-pyridincacboxaldehyt O-etyl oxim (Hợp chất số 1-256)

Ví dụ điều chế 1-1

Điều chế
2-[6-(1,3-dioxan-2-yl)-3-etylsulfonylpyridin-2-yl]-1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol

[Công thức hóa học 36]



Bổ sung N^1-metyl-4-(triflometylthio)benzen-1,2-diamin (0,37 g, 1,7 mmol), 1-hydroxybenzotriazol monohydrat (0,23 g, 1,7 mmol), và 1-(3-dimetylaminopropyl)-3-etylcacbodiimit hydroclorua (0,35 g, 1,8 mmol) ở nhiệt độ phòng vào dung dịch pyridin (5,0 mL) của axit 6-(1,3-dioxan-2-yl)-3-etylsulfonylpyridin-2-cacboxylic (0,50 g, 1,7 mmol), và hỗn hợp được khuấy qua đêm. Sau khi kết thúc phản ứng, hỗn hợp phản ứng được cô đặc trong môi trường chân không. Bổ sung etyl axetat và axit clohydric 0,5 M phần còn sót lại, và thực hiện quá trình chiết xuất. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không. Bổ sung axit axetic (5,0 mL) vào phần còn sót lại, và hỗn hợp được khuấy ở 120°C trong một giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, hỗn hợp phản ứng được cô đặc trong môi trường chân không. Bổ sung etyl axetat và dung dịch nước natri hydro cacbonat bão hòa vào phần còn sót lại, và thực hiện quá trình chiết xuất. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được làm khô trong môi trường chân không. Phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra

2-[6-(1,3-dioxan-2-yl)-3-etylsulfonylpyridin-2-yl]-1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol (0,71 g, 1,5 mmol).

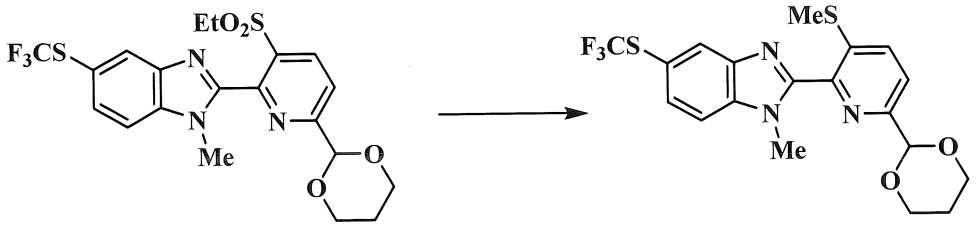
Hiệu suất: 88%

Tính chất vật lý: Điểm nóng chảy: 185 đến 186°C

Ví dụ điều chế 1-2

Điều chế 2-[6-(1,3-dioxan-2-yl)-3-metylthiopyridin-2-yl]-1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol

[Công thức hóa học 37]



Bổ sung muối natri của metanthiol (58 mg, 0,82 mmol) ở nhiệt độ phòng vào dung dịch N,N-dimetylformamit (4 mL) của

2-[6-(1,3-dioxan-2-yl)-3-etylsulfonylpyridin-2-yl]-1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol (0,20 g, 0,41 mmol), và hỗn hợp được khuấy trong một giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung dung dịch nước amoni clorua bão hòa, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được làm khô trong môi trường chân không. Phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra

2-[6-(1,3-dioxan-2-yl)-3-metylthiopyridin-2-yl]-1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol (0,18 g, 0,41 mmol).

Hiệu suất: 100%

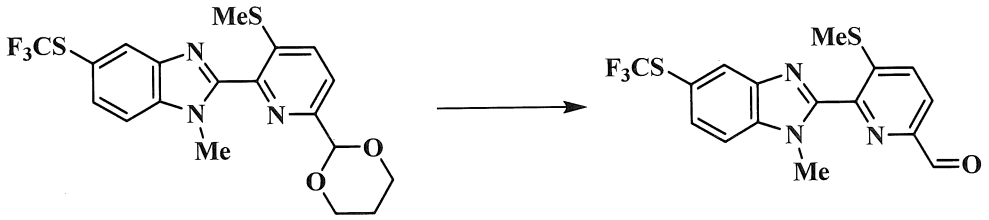
Tính chất vật lý: Điểm nóng chảy: 42 đến 43°C

Ví dụ điều chế 1-3

Điều chế

5-metylthio-6-(1-metyl-5-((triflometyl)thio)-benzimidazol-2-yl)-2-pyridincacboxaldehyt

[Công thức hóa học 38]



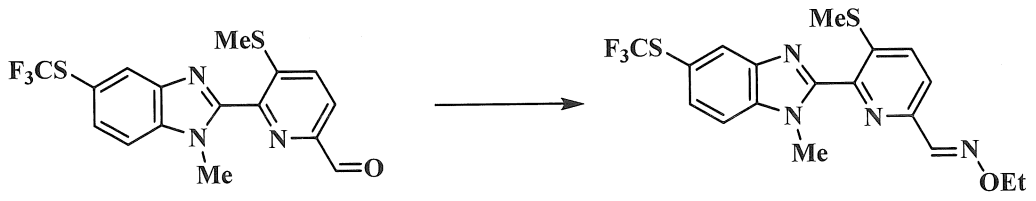
Bổ sung monohydrat của axit p-toluensulfonic (78 mg, 0,41 mmol) ở nhiệt độ phòng vào dung dịch axit trifloaxetic:nước (2:1) (5 mL) của 2-[6-(1,3-dioxan-2-yl)-3-metylthiopyridin-2-yl]-1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol (0,18 g, 0,41 mmol), và hỗn hợp được gia nhiệt dưới điều kiện hồi lưu trong 3 giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, hỗn hợp phản ứng được làm khô trong môi trường chân không. Bổ sung dung dịch nước natri hydro cacbonat bão hòa, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được làm khô trong môi trường chân không để cho ra 5-metylthio-6-(1-metyl-5-((triflometyl)thio)-benzimidazol-2-yl)-2-pyridincacboxaldehyt (0,16 g, 0,41 mmol).

Hiệu suất: 100%

Ví dụ điều chế 1-4

Điều chế
(E)-(5-metylthio)-6-(1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl)-2-pyridincacboxal dehyt O-etyl oxim (Hợp chất số 3-82)

[Công thức hóa học 39]



Lần lượt bổ sung O-etylhydroxylamin hydroclorua (60 mg, 0,62 mmol) và pyridin (49 μL, 0,62 mmol) ở nhiệt độ phòng vào dung dịch cloroform (2 mL) của 5-metylthio-6-(1-metyl-5-((triflometyl)thio)-benzimidazol-2-yl)-2-pyridincacboxaldehyt (160 mg, 0,41 mmol), và hỗn hợp được khuấy qua đêm. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung axit clohydric 1 M, và thực hiện quá trình chiết xuất cloroform. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được làm khô trong môi trường chân không. Phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra (E)-(5-metylthio)-6-(1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl)-2-pyridincacboxal dehyt O-etyl oxim (202 mg, 0,41 mmol).

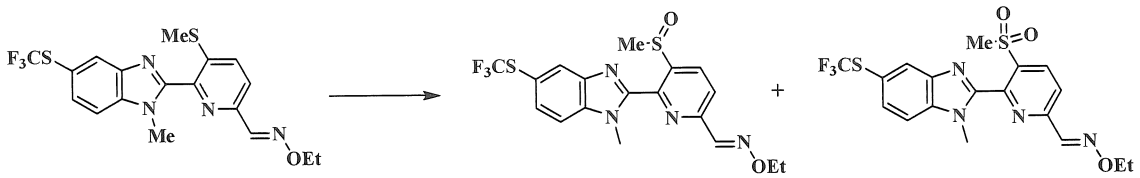
Hiệu suất: 100%

Tính chất vật lý: Điểm nóng chảy: 116 đến 117°C

Ví dụ điều chế 1-5

Điều chế
(E)-(5-metylsulfinyl)-6-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]-2-pyridincacboxaldehyt O-etyl oxim (Hợp chất số 3-83) và
(E)-(5-metylsulfonyl)-6-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]-2-pyridincacboxaldehyt O-etyl oxim (Hợp chất số 1-256)

[Công thức hóa học 40]



Bổ sung axit m-clopeoxybenzoic (0,10 g, 0,38 mmol) ở nhiệt độ phòng vào dung dịch etyl axetat (4,0 mL) của (E)-(5-metylthio)-6-(1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl)-2-pyridincacboxaldehyt O-etyl oxim (0,16 g, 0,38 mmol), và hỗn hợp được khuấy trong 2 giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, dung dịch nước natri hydro cacbonat bão hòa và dung dịch nước natri thiosulfat bão hòa, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được rửa với dung dịch nước natri clorua bão hòa, được làm khô qua magie sulfat khan, và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không. Phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra (E)-(5-metylsulfinyl)-6-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]-2-pyridincacboxaldehyt O-etyl oxim (0,12 g, 0,26 mmol) và (E)-(5-metylsulfonyl)-6-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]-2-pyridincacboxaldehyt O-etyl oxim (0,014 g, 0,031 mmol).

Hợp chất số 3-83

Hiệu suất: 70%

Tính chất vật lý: Điểm nóng chảy: 202 đến 203°C

Hợp chất số 1-256

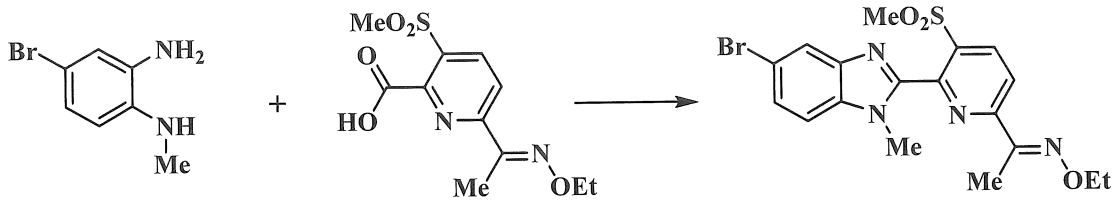
Hiệu suất: 8%

Tính chất vật lý: Điểm nóng chảy: 73 đến 74°C

Ví dụ điều chế 2

Điều chế 1-[6-(5-brom-1-metylbenzimidazol-2-yl)-5-[metylsulfonylpyridin-2-yl]-(E)-N-etoxyetanimin (Hợp chất số 1-87)

[Công thức hóa học 41]



Bổ sung 4-brom-N[1]-metylbenzen-1,2-diamin (1,4 g, 4,9 mmol), 1-hydroxybenzotriazol monohydrat (0,75 g, 4,9 mmol), và 1-(3-dimetylaminopropyl)-3-etylcacbodiimit hydroclorua (1,2 g, 6,3 mmol) vào dung dịch pyridin (12 mL) của axit 6-[(E)-N-etoxy-C-metylcacbonimidoyl]-3-metylsulfonylpyridin-2-cacboxylic (0,93 g, 4,6 mmol), và hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ phòng qua đêm. Sau khi kết thúc phản ứng, hỗn hợp phản ứng được cô đặc trong môi trường chân không. Bổ sung nước vào phần còn sót lại, và chất rắn sinh ra được thu bằng quá trình lọc và được rửa với nước. Dịch lọc được chiết xuất với etyl axetat. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không.

Bổ sung axit axetic (12 mL) vào chất rắn thu được và phần còn sót lại, và hỗn hợp được gia nhiệt dưới điều kiện hồi lưu ở 120°C trong 7 giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, hỗn hợp phản ứng được cô đặc trong môi trường chân không. Bổ sung metyl tert-butyl ete và hexan vào phần còn sót lại, và thu kết tủa bằng quá trình lọc để cho ra 1-[6-(5-brom-1-metylbenzimidazol-2-yl)-5-[metylsulfonylpyridin-2-yl]-(E)-N-etoxyet animin (1,3 g, 2,9 mmol).

Hiệu suất: 63%

Tính chất vật lý: Điểm nóng chảy: 171 đến 172°C

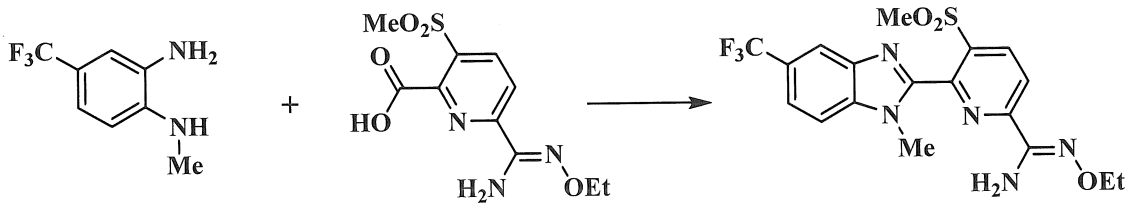
Ví dụ điều chế 3

Điều chế
N'-etoxy-5-metylsulfonyl-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacb oxamidin (Hợp chất số 1-205),
N'-etoxy-N-metyl-5-metylsulfonyl-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl]pyridi n-2-cacboxamidin (Hợp chất số 1-216), và
N'-etoxy-N,N-dimetyl-5-metylsulfonyl-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl]p yridin-2-cacboxamidin (Hợp chất số 1-220)

Ví dụ điều chế 3-1

Điều chế N'-etoxy-5-metylsulfonyl-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacboxamidin (Hợp chất số 1-205)

[Công thức hóa học 42]



Bổ sung N^1-metylbenzen-4-triflometyl-1,2-diamin (0,25 g, 1,3 mmol), N,N-dimetyl-4-aminopyridin (0,16 g, 1,3 mmol), và 1-(3-dimetylaminopropyl)-3-etylcacbodiimit hydroclorua (0,38 g, 2,0 mmol) ở nhiệt độ phòng vào dung dịch pyridin (2,0 mL) của axit 6-[(Z)-N-etoxy-C-aminocacbonimidoyl]-3-metylsulfonyl-pyridin-2-cacboxylic (0,40 g, 1,3 mmol), và hỗn hợp được khuấy qua đêm. Sau khi kết thúc phản ứng, hỗn hợp phản ứng được cô đặc trong môi trường chân không. Bổ sung etyl axetat và axit clohydric 0,5 M vào phần còn sót lại, và thực hiện quá trình chiết xuất. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không. Bổ sung axit axetic (10 mL) vào phần còn sót lại, và hỗn hợp được khuấy ở 120°C trong một giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, hỗn hợp phản ứng được cô đặc trong môi trường chân không. Bổ sung etyl axetat và dung dịch nước natri hydro cacbonat bão hòa vào phần còn sót lại, và thực hiện quá trình chiết xuất. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được làm khô trong môi trường chân không. Phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra N'-etoxy-5-metylsulfonyl- 6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl] pyridin-2-cacboxamidin (0,26 g, 0,58 mmol).

Hiệu suất: 43%

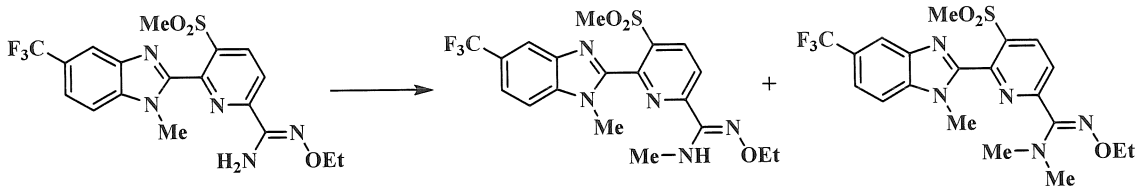
Tính chất vật lý: Điểm nóng chảy: 149 đến 150°C

Ví dụ điều chế 3-2

Điều chế N'-etoxy-N-metyl-5-metylsulfonyl-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl]pyridi

n-2-cacboxamidin (Hợp chất số 1-216) và N'-etoxy-N,N-dimetyl-5-metylsulfonyl-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacboxamidin (Hợp chất số 1-220)

[Công thức hóa học 43]



Bổ sung natri hydrua 60% (0,22 g, 5,4 mmol) dưới bể đá lạnh vào dung dịch N,N-dimetylformamit (9 mL) của N'-etoxy-5-metylsulfonyl-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacboxamidin (0,8 g, 1,8 mmol), và hỗn hợp được khuấy trong 5 phút. Bổ sung metyl iodua (0,26 g, 1,8 mmol), và hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ phòng trong 4 giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung dung dịch nước amoni clorua bão hòa, và thực hiện quá trình chiết xuất. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được làm khô trong môi trường chân không. Phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra N'-etoxy-N-metyl-5-metylsulfonyl-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacboxamidin (0,079 g, 0,018 mmol) và N'-etoxy-N,N-dimetyl-5-metylsulfonyl-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacboxamidin (0,065 g, 0,013 mmol).

Hợp chất số 1-216

Hiệu suất: 10%

Tính chất vật lý: Điểm nóng chảy: 154 đến 155°C

Hợp chất số 1-220

Hiệu suất: 7%

Tính chất vật lý: Điểm nóng chảy: 150 đến 151°C

Ví dụ điều chế 4

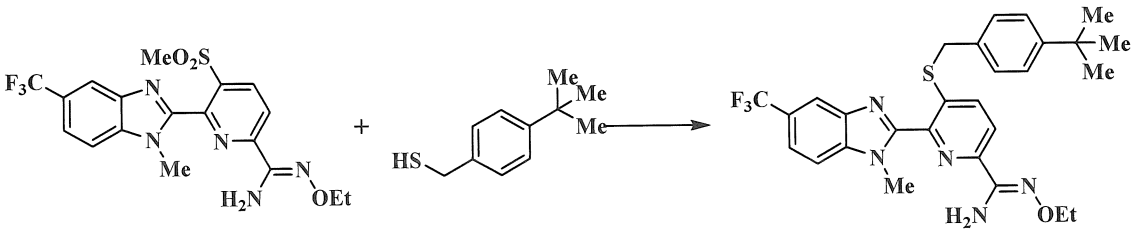
Điều chế 5-[(4-tert-butylphenyl)metylthio]-N'-etoxy-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-

yl]pyridin-2-cacboxamidin (Hợp chất số 3-59) và N'-etoxy-5-metylsulfamoyl-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cac boxamidin (Hợp chất số 1-210)

Ví dụ điều chế 4-1

Điều chế 5-[(4-tert-butylphenyl)metylthio]-N'-etoxy-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacboxamidin (Hợp chất số 3-59)

[Công thức hóa học 44]



Bổ sung 4-(tert-butyl)benzylthiol (0,16 mL, 0,86 mmol) và xesi cacbonat (0,38 g, 1,2 mmol) ở nhiệt độ phòng vào dung dịch N,N-dimetylformamit (5,0 mL) của N'-etoxy-5-metylsulfonyl-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacb oxamidin (0,26 g, 0,58 mmol), và hỗn hợp được khuấy ở 80°C trong 3 giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung dung dịch nước amoni clorua bão hòa, và thực hiện quá trình chiết xuất. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được làm khô trong môi trường chân không. Phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra 5-[(4-tert-butylphenyl)metylthio]-N'-etoxy-6-[1-metyl-5-(triflometyl) benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacboxamidin (0,22 g, 0,40 mmol).

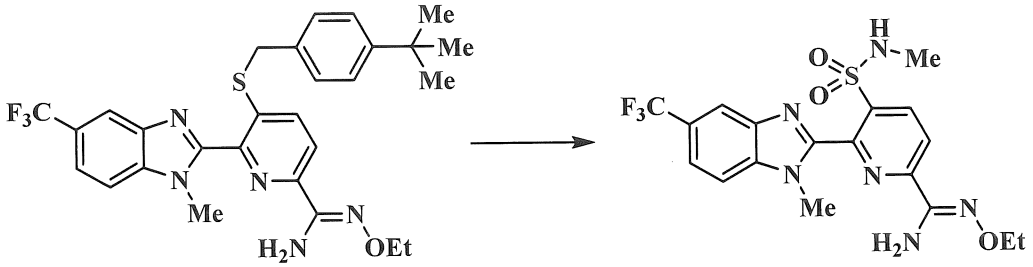
Hiệu suất: 69%

Tính chất vật lý: ^{1}H-NMR($CDCl_3$): 8,16 (s, 1H), 8,01 (d, 1H), 7,79(dd,1H), 7,61(dd,1H), 7,50(d,1H), 7,29(d,2H), 7,22(d,2H), 5,41(s,2H), 4,19(q,2H), 4,13(s,2H), 3,82(s,3H), 1,34(t,3H), 1,28(s,9H)

Ví dụ điều chế 4-2

Điều chế N'-etoxy-5-metylsulfamoyl-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cac boxamidin (Hợp chất số 1-210)

[Công thức hóa học 45]



Bổ sung axit axetic (0,041 mL, 0,72 mmol), nước (0,026 mL, 1,4 mmol), và 1,3-diclo-5,5-dimetylhydantoin (0,14 g, 0,72 mmol) ở 0°C vào dung dịch cloroform (2,0 mL) của 5-[(4-tert-butylphenyl)metylthio]-N'-etoxy-6-[1-metyl-5-(triflometyl) benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacboxamidin (0,13 g, 0,24 mmol), và hỗn hợp được khuấy trong 5 phút. Bổ sung metylamin (2,0 mL, dung dịch metanol 40%), và hỗn hợp được khuấy trong 10 phút. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung nước, và thực hiện quá trình chiết xuất. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được làm khô trong môi trường chân không. Phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra N'-etoxy-5-metylsulfamoyl-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol -2-yl]pyridin-2-cacboxamidin (0,11 g, 0,24 mmol).

Hiệu suất: 100%

Tính chất vật lý: Điểm nóng chảy: 173 đến 174°C

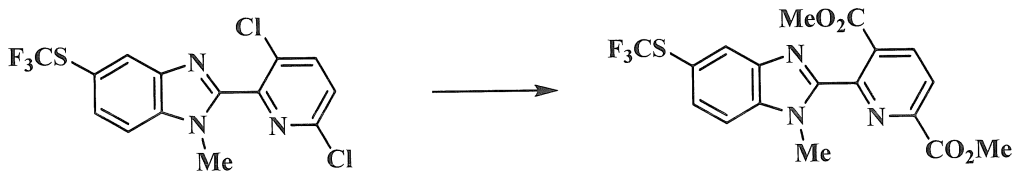
Ví dụ điều chế 5

Điều chế este của metyl với axit
6-[(E)-etoxyiminometyl]-2-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]pyridin-3-ca cboxylic (Hợp chất số 2-82), axit
6-[(E)-etoxyiminometyl]-2-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]pyridin-3-ca cboxylic (Hợp chất số 2-81), este của etyl với axit
6-[(E)-etoxyiminometyl]-2-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]pyridin-3-ca cboxylic (Hợp chất số 2-83), và
6-[(E)-etoxyiminometyl]-N,N-dimetyl-2-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-y l]pyridin-3-cacboxamit (Hợp chất số 2-95)

Ví dụ điều chế 5-1

Điều chế este của metyl với axit 6-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]pyridin-2,5-dicacboxylic

[Công thức hóa học 46]



Bổ sung 1,4-bis(diphenylphosphino)butan (136 mg, 0,32 mmol), diclobis(triphenylphosphin)paladi(II) (112 mg, 0,16 mmol), và trietylamin (2,8 mL, 19,9 mmol) vào dung dịch metanol (40 mL) của 2-(3,6-diclopyridin-2-yl) -1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol (3,0 g, 7,95 mmol), và hỗn hợp được khuấy dưới khí quyển cacbon monoxit 4 MPa ở 130°C trong 3 giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, thực hiện quá trình lọc và làm khô chân không. Phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra este của metyl với axit 6-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]pyridin-2,5-dicacboxylic (3,1 g, 7,26 mmol).

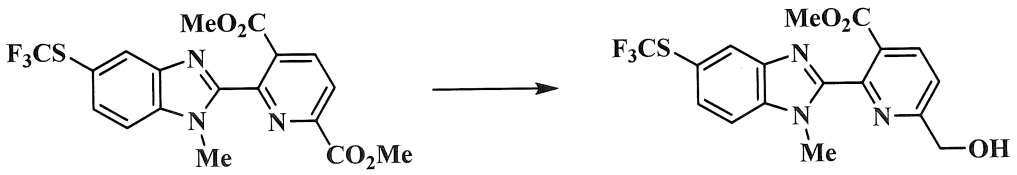
Hiệu suất: 91%

Tính chất vật lý: Điểm nóng chảy: 142 đến 143°C

Ví dụ điều chế 5-2

Điều chế este của metyl với axit 6-(hydroxymetyl)-2-[1-metyl-5-(triflometylthio) benzimidazol-2-yl]pyridin-3-cacboxylic

[Công thức hóa học 47]



Bổ sung Red-Al (nhãn hiệu đã được đăng ký) (1,7 mL, 5,88 mmol, dung dịch toluen 3,5 M) ở 0°C vào dung dịch toluen (23 mL) của este của metyl với axit 6-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]pyridin-2,5-dicacboxylic (1,0 g, 2,35 mmol), và hỗn hợp được khuấy trong 15 phút. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung dung dịch nước kali natri tartrat bão hòa, và hỗn hợp được khuấy trong 30 phút. Thực

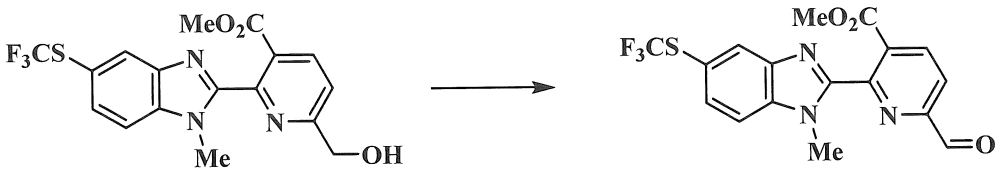
hiện quá trình chiết xuất etyl axetat, và lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không. Phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra este của metyl với axit 6-(hydroxymetyl)-2-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]pyridin-3-cacboxylic (290 mg, 0,73 mmol).

Hiệu suất: 31%

Ví dụ điều chế 5-3

Điều chế este của metyl với axit 6-formyl-2-[1-metyl-5-(triflometylthio) benzimidazol-2-yl]pyridin-3-cacboxylic

[Công thức hóa học 48]



Bổ sung mangan(IV) dioxit (2,0 g, 23 mmol) vào dung dịch cloroform (5 mL) của este của metyl với axit 6-(hydroxymetyl)-2-[1-metyl-5-(triflometylthio) benzimidazol-2-yl]pyridin-3-cacboxylic (204 mg, 0,51 mmol), và hỗn hợp được gia nhiệt dưới điều kiện hồi lưu trong 3 giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, thực hiện quá trình lọc Xelit và cô đặc trong chân không. Phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra este của metyl với axit 6-formyl-2-[1-metyl-5-(triflometylthio) benzimidazol-2-yl]pyridin-3-cacboxylic (193 mg, 0,48 mmol).

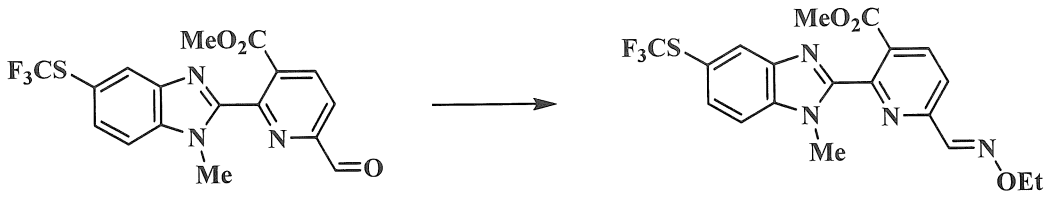
Hiệu suất: 94%

Tính chất vật lý: ^{1}H-NMR($CDCl_3$): 10,16 (s, 1H), 8,36 (d, 1H), 8,14 (s, 1H), 8,13 (d, 1H), 7,66 (dd, 1H), 7,52 (d, 1H), 4,08 (s, 3H), 3,85 (s, 3H)

Ví dụ điều chế 5-4

Điều chế este của metyl với axit 6-[(E)-etoxyiminometyl]-2-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]pyridin-3-cacboxylic (Hợp chất số 2-82)

[Công thức hóa học 49]



Bổ sung O-etylhydroxylamin hydroclorua (0,032 g, 0,33 mmol) và pyridin (0,026 mL, 0,33 mmol) vào dung dịch cloroform (1,0 mL) của este của metyl với axit 6-formyl-2-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]pyridin-3-cacboxylic (0,10 g, 0,25 mmol), và hỗn hợp được khuấy qua đêm. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung nước, và thực hiện quá trình chiết xuất cloroform. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không. Phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra este của metyl với axit 6-[(E)-etoxyiminometyl]-2-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]pyridin-3-cacboxylic (0,10 g, 0,23 mmol).

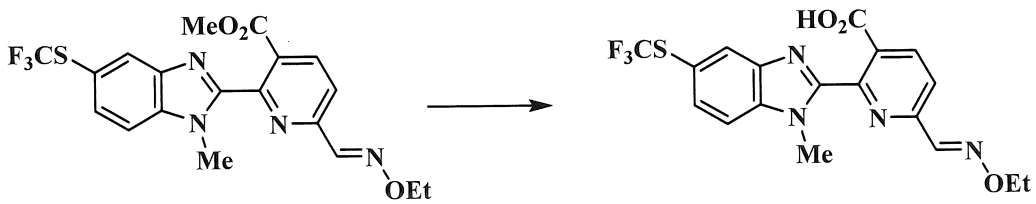
Hiệu suất: 91%

Tính chất vật lý: ^{1}H-NMR($CDCl_3$): 8,24 (d, 1H), 8,20 (s, 1H), 8,12(d,1H), 8,07(d,1H), 7,63(dd,1H), 7,47(d,1H), 4,32(q,2H), 3,91(s,3H), 3,79(s,3H), 1,37(t,3H)

Ví dụ điều chế 5-5

Điều chế axit 6-[(E)-etoxyiminometyl]-2-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]pyridin-3-cacboxylic (Hợp chất số 2-81)

[Công thức hóa học 50]



Bổ sung dung dịch nước liti hydroxit 4 M (35 μL, 0,14 mmol) vào dung dịch etanol (1 mL) của este của metyl với axit 6-[(E)-etoxyiminometyl]-2-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]pyridin-3-cacboxylic (40,9 mg, 0,093 mmol), và hỗn hợp được khuấy trong 2 giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung axit clohydric 2 M, và hỗn hợp được làm khô trong môi trường chân không. Bổ sung nước vào phần còn sót lại, và chất rắn sinh ra được thu bằng quá trình lọc để cho ra axit

6-[(E)-etoxyiminometyl]-2-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]pyridin-3-ca cboxylic (18,4 mg, 0,043 mmol).

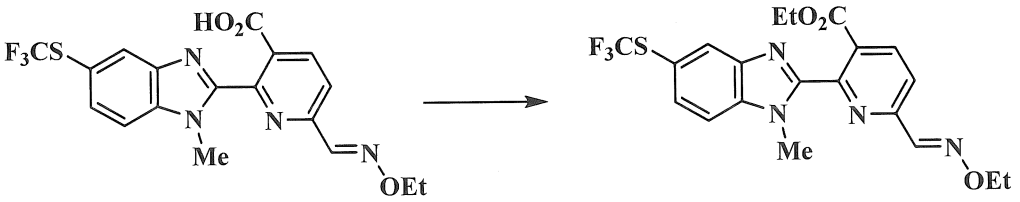
Hiệu suất: 46%

Tính chất vật lý: Điểm nóng chảy: 195 đến 196°C

Ví dụ điều chế 5-6

Điều chế este của etyl với axit 6-[(E)-etoxyiminometyl]-2-[1-metyl-5-(triflometylthio) benzimidazol-2-yl]pyridin-3-cacboxylic (Hợp chất số 2-83)

[Công thức hóa học 51]



Bổ sung N,N-dimetylformamit (1 μL, 0,007 mmol) và oxalyl clorua (9 μL, 0,10 mmol) ở nhiệt độ phòng vào dung dịch tetrahydrofuran (1 mL) của axit 6-[(E)-etoxyiminometyl]-2-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]pyridin-3-ca cboxylic (30 mg, 0,07 mmol), và hỗn hợp được khuấy trong một giờ. Bổ sung etanol (1 mL) và trietylamin (1 mL), và hỗn hợp được khuấy trong 30 phút. Hỗn hợp phản ứng được cô đặc trong môi trường chân không, và phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra este của etyl với axit 6-[(E)-etoxyiminometyl] -2-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]pyridin-3-cacboxylic (15,8 mg, 0,035 mmol).

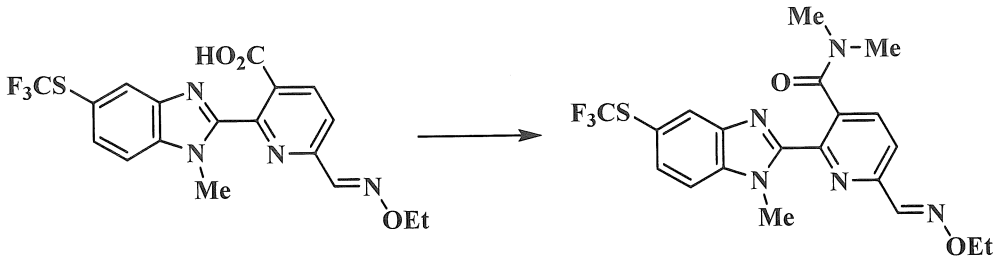
Hiệu suất: 49%

Tính chất vật lý: ^{1}H-NMR($CDCl_3$): 8,28 (d, 1H), 8,21 (s, 1H), 8,12(d,1H), 8,08(d,1H), 7,63(dd,1H), 7,47(d,1H), 4,33(q,2H), 4,20(q,2H), 3,87(s,3H), 1,37(t,3H), 1,02(t,3H)

Ví dụ điều chế 5-7

Điều chế 6-[(E)-etoxyiminometyl]-N,N-dimetyl-2-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-y l]pyridin-3-cacboxamit (Hợp chất số 2-95)

[Công thức hóa học 52]



Bổ sung N,N-dimetylformamit (5 μL, 0,012 mmol) và oxalyl clorua (15 μL, 0,18 mmol) ở nhiệt độ phòng vào dung dịch tetrahydrofuran (1 mL) của axit 6-[(E)-etoxyiminometyl]-2-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]pyridin-3-ca cboxylic (50 mg, 0,12 mmol), và hỗn hợp được khuấy trong một giờ. Bổ sung dung dịch nước metylamin 50% (1 mL), và hỗn hợp được khuấy trong 30 phút. Hỗn hợp phản ứng được cô đặc trong môi trường chân không, và phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra 6-[(E)-etoxyiminometyl]-N,N-dimetyl-2-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]pyridin-3-cacboxamit (38,6 mg, 0,085 mmol).

Hiệu suất: 73%

Tính chất vật lý: Điểm nóng chảy: 118 đến 119°C

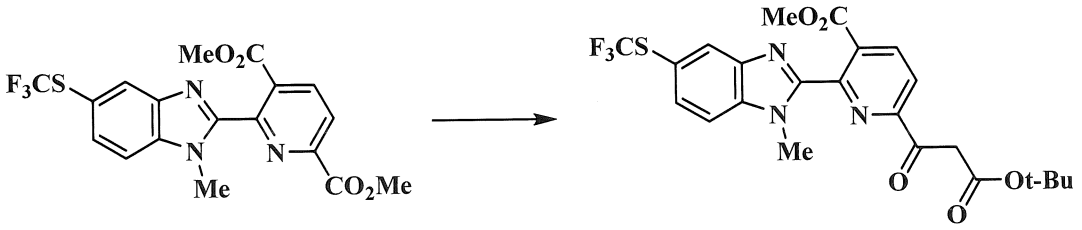
Ví dụ điều chế 6

Điều chế este của metyl với axit 6-[(E)-N-etoxy-C-metyl-cacbonimidoyl]-2-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]pyridin-3-cacboxylic (Hợp chất số 2-105)

Ví dụ điều chế 6-1

Điều chế este của metyl với axit 6-(3-tert-butoxy-3-oxo-propanyl)-2-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]pyridin-3-cacboxylic

[Công thức hóa học 53]



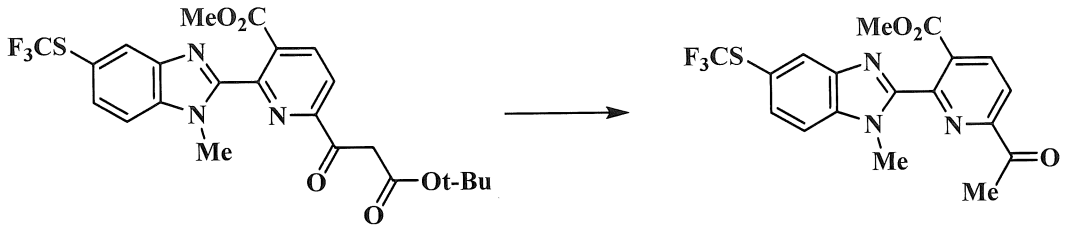
Bổ sung tert-butyl axetat (1,9 mL, 14,1 mmol) và liti diisopropylamit (12,8 mL, 14,1 mmol, 1,1 M dung dịch tetrahydrofuran) ở -78°C vào dung dịch tetrahydrofuran (80 mL) của este của metyl với axit 6-[1-metyl-5-(triflometylthio) benzimidazol-2-yl]pyridin-2,5-dicacboxylic (6,0 g, 21,6 mmol), và hỗn hợp được khuấy trong một giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung axit clohydric 2 M, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được làm khô trong môi trường chân không để cho ra este của metyl với axit 6-(3-tert-butoxy-3-oxo-propanyl)-2-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]pyri din-3-cacboxylic là sản phẩm thô.

Tính chất vật lý: Điểm nóng chảy: 91 đến 92°C

Ví dụ điều chế 6-2

Điều chế este của metyl với axit 6-axetyl-2-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol -2-yl]pyridin-3-cacboxylic

[Công thức hóa học 54]



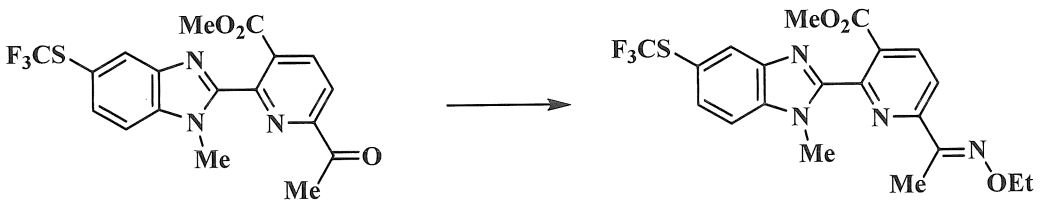
Dung dịch axit trifloaxetic (14 mL) của este của metyl với axit 6-(3-tert-butoxy-3-oxo-propanyl)-2-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]pyri din-3-cacboxylic đã thu được trong ví dụ điều chế 6-1 được gia nhiệt dưới điều kiện hồi lưu trong 3 giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, hỗn hợp phản ứng được cô đặc trong môi trường chân không. Bổ sung dung dịch nước natri hydro cacbonat bão hòa, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không. Phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra este của metyl với axit 6-axetyl-2-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]pyridin-3-cacboxylic (1,47 g, 3,59 mmol).

Hiệu suất: 51% (2 bước)

Ví dụ điều chế 6-3

Điều chế este của metyl với axit 6-[(E)-N-etoxy-C-metyl-cacbonimidoyl]-2-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]pyridin-3-cacboxylic (Hợp chất số 2-105)

[Công thức hóa học 55]



Bổ sung O-etylhydroxylamin hydroclorua (0,023 g, 0,23 mmol) và pyridin (0,019 mL, 0,23 mmol) vào dung dịch cloroform (2,0 mL) của este của metyl với axit 6-axetyl-2-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]pyridin-3-cacboxylic (0,064 g, 0,16 mmol), và hỗn hợp được khuấy qua đêm. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung nước, và thực hiện quá trình chiết xuất cloroform. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không. Phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra este của metyl với axit 6-[(E)-N-etoxy-C-metyl-cacbonimidoyl]-2-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]pyridin-3-cacboxylic (0,047 g, 0,10 mmol).

Hiệu suất: 66%

Tính chất vật lý: Điểm nóng chảy: 121 đến 122°C

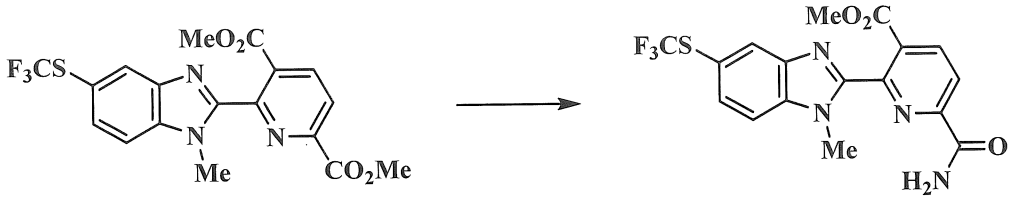
Ví dụ điều chế 7

Điều chế
N'-hydroxy-5-metoxycacbonyl-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacboxamidin (Hợp chất số 2-121) và
N'-etoxy-5-metoxycacbonyl-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacboxamidin (Hợp chất số 2-123)

Ví dụ điều chế 7-1

Điều chế este của metyl với axit
6-cacbamoyl-2-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]pyridin-3-cacboxylic

[Công thức hóa học 56]



Bổ sung amoniac 4% (9,0 mL, dung dịch metanol 4%) vào este của metyl với axit 6-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]pyridin-2,5-dicacboxylic (0,79 g, 1,9 mmol), và hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ phòng qua đêm. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung nước, và chất rắn sinh ra được thu bằng quá trình lọc để cho ra este của metyl với axit 6-cacbamoyl-2-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]pyridin-3-cacboxylic (0,58 g, 1,4 mmol).

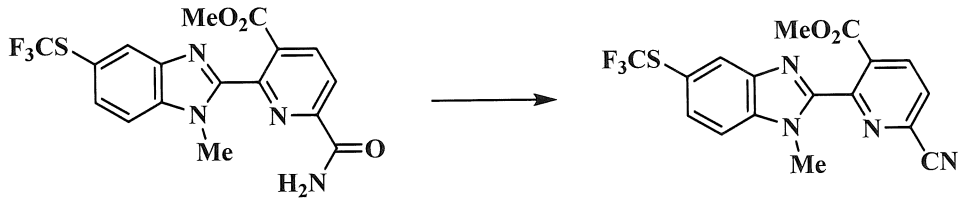
Hiệu suất: 76%

Tính chất vật lý: Điểm nóng chảy: 252 đến 253°C

Ví dụ điều chế 7-2

Điều chế este của metyl với axit 6-xyano-2-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]pyridin-3-cacboxylic

[Công thức hóa học 57]



Bổ sung phospho oxyclorua (0,51 mL, 5,8 mmol) vào dung dịch N,N-dimetylformamit (13 mL) của este của metyl với axit 6-cacbamoyl-2-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]pyridin-3-cacboxylic (0,56 g, 1,4 mmol), và hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ phòng trong 30 phút. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung dung dịch nước natri hydro cacbonat bão hòa, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được làm khô trong môi trường chân không. Phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra este của metyl với axit 6-xyano-2-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]pyridin-3-cacboxylic (0,54 g, 1,4 mmol).

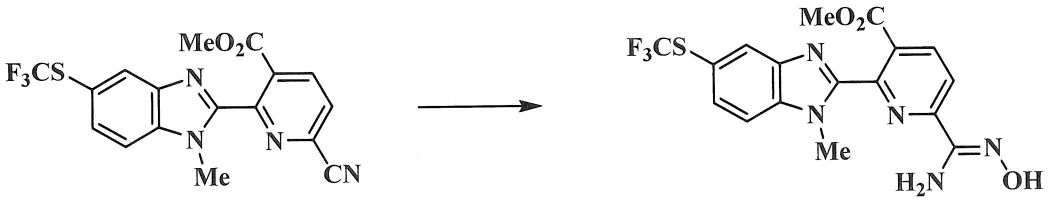
Hiệu suất: 100%

Tính chất vật lý: Điểm nóng chảy: 193 đến 194°C

Ví dụ điều chế 7-3

Điều chế
N'-hydroxy-5-metoxycacbonyl-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacboxamidin (Hợp chất số 2-121)

[Công thức hóa học 58]



Lần lượt bổ sung hydroxylamin hydroclorua (141 mg, 2,03 mmol) và natri axetat (166 mg, 2,03 mmol) vào dung dịch etanol (14 mL) của este của metyl với axit 6-xyano-2-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]pyridin-3-cacboxylic (530 mg, 1,35 mmol), và hỗn hợp được gia nhiệt dưới điều kiện hồi lưu trong 2 giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, hỗn hợp phản ứng được làm khô trong môi trường chân không. Bổ sung dung dịch nước natri hydro cacbonat bão hòa, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không. Phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra N'-hydroxy-5-metoxycacbonyl-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacboxamidin (529 mg, 1,24 mmol).

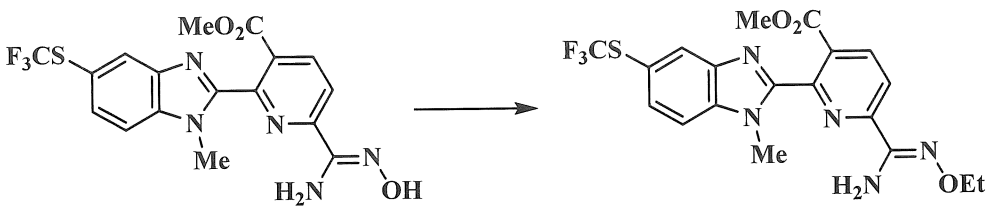
Hiệu suất: 92%

Tính chất vật lý: Điểm nóng chảy: 199 đến 200°C

Ví dụ điều chế 7-4

Điều chế
N'-etoxy-5-metoxycacbonyl-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacboxamidin (Hợp chất số 2-123)

[Công thức hóa học 59]



Lần lượt bổ sung xesi cacbonat (61 mg, 0,19 mmol) và etyl iodua (15 μL, 0,19 mmol) ở nhiệt độ phòng vào dung dịch N,N-dimetylformamit (1 mL) của N'-hydroxy-5-metoxycacbonyl-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacboxamidin (40 mg, 0,094 mmol), và hỗn hợp được khuấy ở 50°C trong 2 giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung dung dịch nước amoni clorua bão hòa, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không. Phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra N'-etoxy-5-metoxycacbonyl-6-[1-metyl-5-(triflometyl) benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacboxamidin (38,9 mg, 0,086 mmol).

Hiệu suất: 91%

Tính chất vật lý: Điểm nóng chảy: 46 đến 47°C

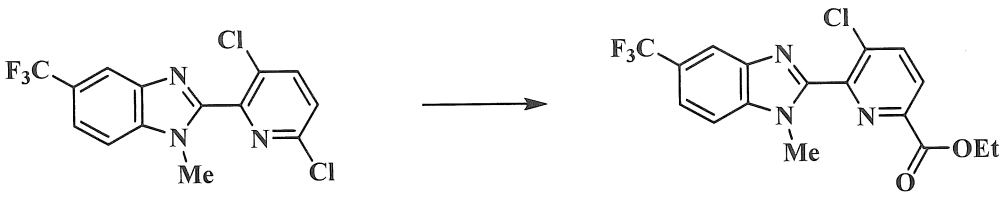
Ví dụ điều chế 8

Điều chế
5-clo-N'-etoxy-4-metyl-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacboxamidin (Hợp chất số 3-65),
N'-etoxy-4-metyl-5-metylthio-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacboxamidin (Hợp chất số 3-68), và
N'-etoxy-4-metyl-5-metylsulfonyl-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacboxamidin (Hợp chất số 3-70)

Ví dụ điều chế 8-1

Điều chế este của etyl với axit
5-clo-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacboxylic

[Công thức hóa học 60]

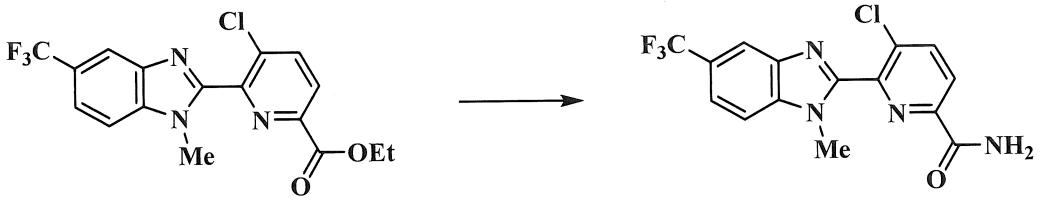


Bổ sung paladi(II) axetat (0,098 g, 0,44 mmol), 1,4-bis(diphenylphosphino)butan (0,37 g, 0,87 mmol), và natri axetat (3,6 g, 44 mmol) vào dung dịch etanol (0,15 L) của 2-(3,6-diclopyridin-2-yl)-1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol (15 g, 44 mmol), và hỗn hợp được khuấy dưới khí quyển cacbon monoxit (4 MPa) ở 100°C trong 2 giờ. Hỗn hợp phản ứng được cô đặc trong môi trường chân không. Bổ sung dung dịch nước natri hydro cacbonat bão hòa vào phần còn sót lại, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được rửa với dung dịch nước natri clorua bão hòa, được làm khô qua magie sulfat khan, và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không để cho ra este của etyl với axit 5-clo-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacboxylic là sản phẩm thô.

Ví dụ điều chế 8-2

Điều chế 5-clo-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacboxamit

[Công thức hóa học 61]



Bổ sung dung dịch amoniac 4% (0,10 L) trong etanol vào este của etyl với axit 5-clo-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacboxylic đã thu được trong ví dụ điều chế 8-1, và hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ phòng qua đêm. Sau khi kết thúc phản ứng, hỗn hợp phản ứng được cô đặc trong môi trường chân không để cho ra 5-clo-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacboxamit (9,1 g, 26 mmol).

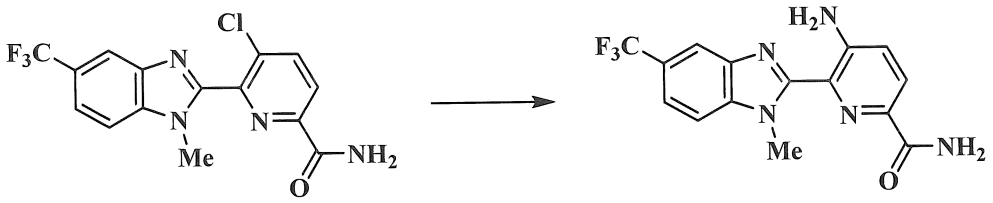
Hiệu suất: 59% (2 bước)

Tính chất vật lý: Điểm nóng chảy: 246 đến 247°C

Ví dụ điều chế 8-3

Điều chế 5-amino-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacboxamit

[Công thức hóa học 62]



Bổ sung natri azua (2,4 g, 36 mmol) và triphenylphosphin (9,6 g, 36 mmol) vào dung dịch dimetyl sulfoxit (0,12 L) của 5-clo-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol -2-yl]pyridin-2-cacboxamit (8,7 g, 24 mmol), và hỗn hợp được khuấy ở 130°C trong 2 giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, hỗn hợp phản ứng được làm mát xuống nhiệt độ phòng, bổ sung nước và metyl tert-butyl ete, và chất rắn sinh ra được thu bằng quá trình lọc. Bổ sung axit clohydric 2 M (24 mL) vào dung dịch tetrahydrofuran (0,12 mL) của chất rắn sinh ra, và hỗn hợp được khuấy ở 40°C trong một giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, hỗn hợp phản ứng được cô đặc trong môi trường chân không. Bổ sung nước và metyl tert-butyl ete, và chất rắn sinh ra được thu bằng quá trình lọc để cho ra 5-amino-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacboxamit (5,1 g, 15 mmol).

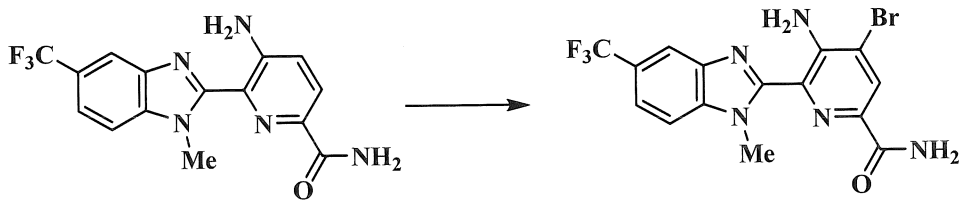
Hiệu suất: 62%

Tính chất vật lý: ^{1}H-NMR($CDCl_3$): 8,09 (s, 1H), 8,08 (d, 1H), 7,63(dd,1H), 7,54(d,1H), 7,30(br-s,1H), 7,24(d,1H), 6,70(br-s,2H), 5,46(br-s,1H), 4,29(s,3H)

Ví dụ điều chế 8-4

Điều chế
5-amino-4-brom-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacboxamit

[Công thức hóa học 63]



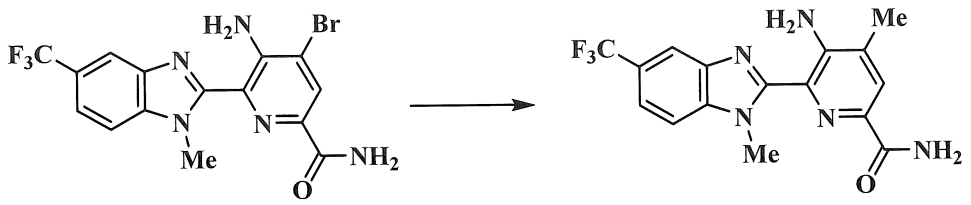
Bổ sung N-bromsucxinimit (0,52 g, 2,9 mmol) ở nhiệt độ phòng vào dung dịch N,N-dimetylformamit (7,0 mL) của 5-amino-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacboxamit (0,76 g, 2,3 mmol), và hỗn hợp được khuấy ở 60°C trong một giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, hỗn hợp phản ứng được làm mát xuống nhiệt độ phòng. Bổ sung nước, và chất rắn sinh ra được thu bằng quá trình lọc để cho ra 5-amino-4-brom-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacboxamit là sản phẩm thô.

Tính chất vật lý: ^{1}H-NMR($CDCl_3$): 8,40 (s, 1H), 8,11 (d, 1H), 7,65 (dd, 1H), 7,55 (d, 1H), 7,32 (br-s, 1H), 5,49 (br-s, 1H), 4,28 (s, 3H)

Ví dụ điều chế 8-5

Điều chế 5-amino-4-metyl-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacboxamit

[Công thức hóa học 64]



Bổ sung sản phẩm cộng trimetylboroxin (1,5 g, 12 mmol), diclo[1,1'-bis(diphenylphosphino)ferroxen]paladi(II) axeton (0,18 g, 0,24 mmol), và natri cacbonat (2,4 g, 23 mmol) vào dung dịch 1,2-dimetoxyetan:nước (2:1) (24 mL) của 5-amino-4-brom-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacboxamit đã thu được trong ví dụ điều chế 8-4, và hỗn hợp được gia nhiệt dưới điều kiện hồi lưu trong 2 giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung nước, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được rửa với dung dịch nước natri clorua bão hòa, được làm khô qua magie sulfat khan, và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không. Phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra 5-amino-4-metyl-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacboxamit (0,78 g, 2,2 mmol).

Hiệu suất: 99% (2 bước)

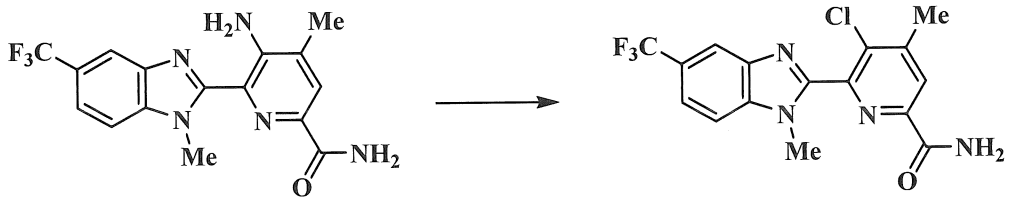
Tính chất vật lý: ^{1}H-NMR($CDCl_3$): 8,09 (d, 1H), 8,02 (s, 1H), 7,62(dd,1H), 7,53(d,1H), 7,35(br-s,1H), 6,69(br-s,2H), 5,47(br-s,1H), 4,27(s,3H), 2,33(s,3H)

Ví dụ điều chế 8-6

Điều chế

5-clo-4-metyl-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacboxamit

[Công thức hóa học 65]



Bổ sung đồng(II) clorua (0,31 g, 2,3 mmol) và tert-butyl nitrit (0,27 mL, 2,3 mmol) ở nhiệt độ phòng vào axetonitril dung dịch (11 mL) của 5-amino-4-metyl-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacboxamit (0,40 g, 1,1 mmol), và hỗn hợp được khuấy ở 60°C trong một giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, hỗn hợp phản ứng được làm mát xuống nhiệt độ phòng. Bổ sung dung dịch nước amoniac, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được rửa với dung dịch nước natri clorua bão hòa, được làm khô qua magie sulfat khan, và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không để cho ra 5-clo-4-metyl-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacboxamit là sản phẩm thô.

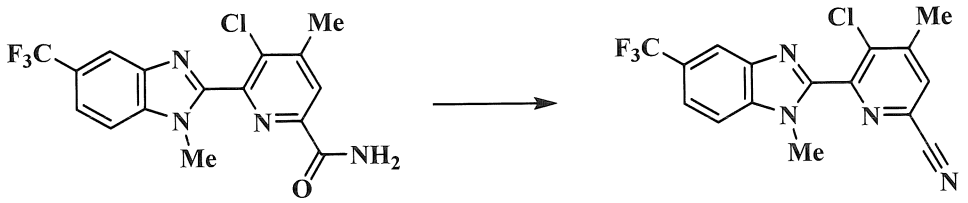
Tính chất vật lý: ^{1}H-NMR($CDCl_3$): 8,28 (s, 1H), 8,17 (d, 1H), 7,66 (dd, 1H), 7,56 (d, 1H), 5,57 (br-s, 2H), 3,81 (s, 3H), 2,17 (s, 3H)[0009]

Ví dụ điều chế 8-7

Điều chế

5-clo-4-metyl-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacbonitril

[Công thức hóa học 66]



Bổ sung phospho oxyclorua (0,56 mL, 4,6 mmol) ở nhiệt độ phòng vào dung dịch N,N-dimetylformamit (11 mL) của 5-clo-4-metyl-6-[1-metyl-5-(triflometyl) benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacboxamit đã thu được trong ví dụ điều chế 8-6, và hỗn hợp được khuấy ở 60°C trong 30 phút. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung dung dịch nước natri hydro cacbonat bão hòa, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được rửa với dung dịch nước natri clorua bão hòa, được làm khô qua magie sulfat khan, và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không. Phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra 5-clo-4-metyl-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacbonitril (0,30 g, 0,84 mmol).

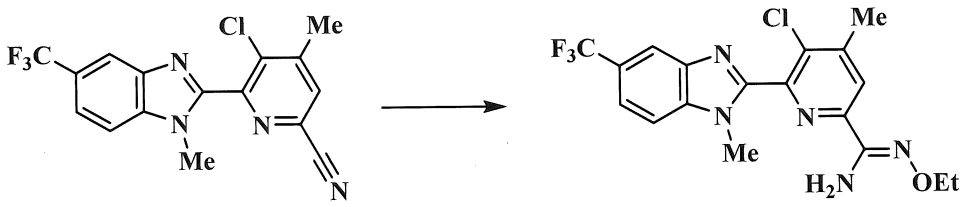
Hiệu suất: 74% (hai bước)

Tính chất vật lý: ^{1}H-NMR($CDCl_3$): 8,16 (s, 1H), 7,73 (d, 1H), 7,65 (dd, 1H), 7,55 (d, 1H), 3,88 (s, 3H), 2,61 (s, 3H)

Ví dụ điều chế 8-8

Điều chế 5-clo-N'-etoxy-4-metyl-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacboxamidin (Hợp chất số 3-65)

[Công thức hóa học 67]



Bổ sung natri metoxit (0,17 mL, 0,84 mmol, 5 M dung dịch metanol) ở nhiệt độ phòng vào dung dịch metanol (8,0 mL) của 5-clo-4-metyl-6-[1-metyl-5-(triflometyl) benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacbonitril (0,30 g, 0,84 mmol), và hỗn hợp được khuấy trong một giờ. Sau khi xác nhận sự biến mất của hợp chất khởi đầu, bổ sung O-etylhydroxylamin hydroclorua (0,12 g, 1,3 mmol), và hỗn hợp được khuấy trong một giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, hỗn hợp phản ứng được cô đặc trong môi trường chân không. Bổ sung dung dịch nước natri hydro cacbonat bão hòa vào phần còn sót lại, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được rửa với dung dịch nước natri clorua bão hòa, được làm khô qua magie sulfat khan, và sau đó được cô đặc

trong môi trường chân không. Phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra 5-clo-N'-etoxy-4-metyl-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl] pyridin-2-cacboxamidin (0,32 g, 0,77 mmol).

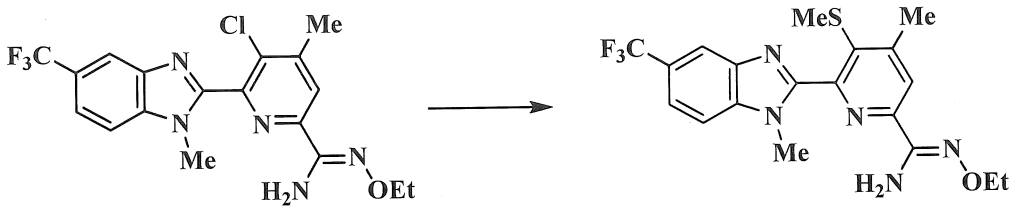
Hiệu suất: 92%

Tính chất vật lý: Điểm nóng chảy: 144 đến 145°C

Ví dụ điều chế 8-9

Điều chế N'-etoxy-4-metyl-5-metylthio-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacboxamidin (Hợp chất số 3-68)

[Công thức hóa học 68]



Bổ sung natri thiometoxit (0,048 g, 0,68 mmol) ở nhiệt độ phòng vào dung dịch N,N-dimetylformamit (3,0 mL) của 5-clo-N'-etoxy-4-metyl-6-[1-metyl-5-(triflometyl) benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacboxamidin (0,15 g, 0,34 mmol), và hỗn hợp được khuấy trong một giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung dung dịch nước amoni clorua bão hòa, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được rửa với dung dịch nước natri clorua bão hòa, được làm khô qua magie sulfat khan, và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không. Phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra N'-etoxy-4-metyl-5-metylthio-6-[1-metyl-5-(triflometyl) benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacboxamidin (0,13 g, 0,30 mmol, 90%).

Hiệu suất: 90%

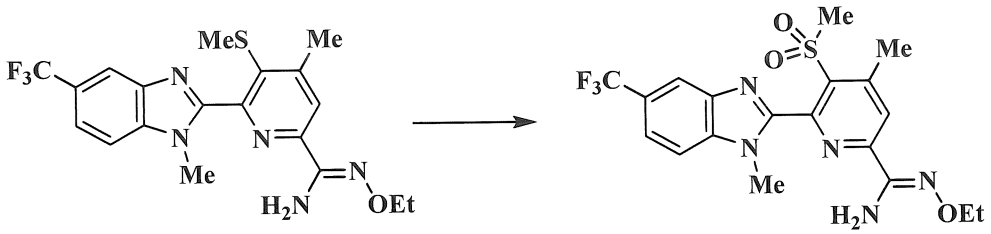
Tính chất vật lý: ^{1}H-NMR($CDCl_3$): 8,13 (s, 1H), 8,02 (d, 1H), 7,62(dd,1H), 7,52(d,1H), 5,45(s,2H), 4,20(q,2H), 3,72(s,3H), 2,66(s,3H), 2,18(s,3H), 1,36(t,3H)

Ví dụ điều chế 8-10

Điều chế

N'-etoxy-4-metyl-5-metylsulfonyl-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacboxamidin (Hợp chất số 3-70)

[Công thức hóa học 69]



Bổ sung axit m-clopeoxybenzoic (0,18 g, 0,68 mmol) ở nhiệt độ phòng vào dung dịch etyl axetat (3,0 mL) của N'-etoxy-4-metyl-5-metylthio-6-[1-metyl-5-(triflometyl) benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacboxamidin (0,12 g, 0,27 mmol), và hỗn hợp được khuấy trong 2 giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung dung dịch nước natri hydro cacbonat bão hòa và dung dịch nước natri thiosulfat bão hòa, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được rửa với dung dịch nước natri clorua bão hòa, được làm khô qua magie sulfat khan, và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không. Phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra N'-etoxy-4-metyl-5-metylsulfonyl-6-[1-metyl-5-(triflometyl)benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacboxamidin (0,090 g, 0,19 mmol).

Hiệu suất: 72%

Tính chất vật lý: Điểm nóng chảy: 246 đến 247°C

Ví dụ điều chế 9

Điều chế

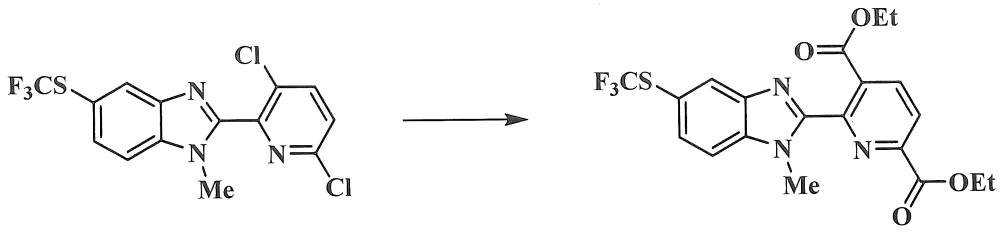
6-[(E)-N-etoxy-C-metyl-cacbonimidoyl]-5-metyl-2-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]pyridin-3-cacboxylic este của etyl với axit (Hợp chất số 3-91)

Ví dụ điều chế 9-1

Điều chế este của etyl với axit

6-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]pyridin-2,5-dicacboxylic

[Công thức hóa học 70]



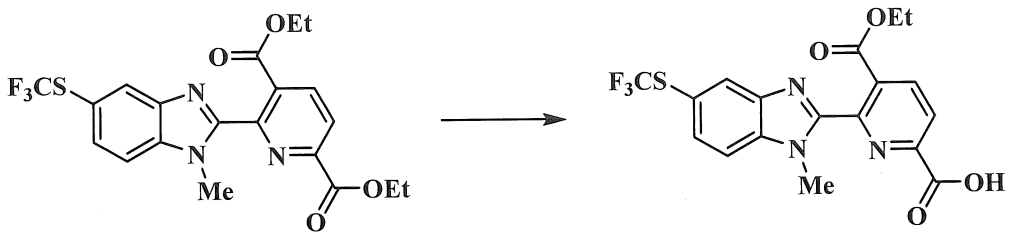
Như được mô tả trong Ví dụ điều chế 5-1 ngoại trừ việc sử dụng etanol thay cho metanol, thu được 6-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]pyridin-2,5-dicacboxylic este của etyl với axit.

Tính chất vật lý: Điểm nóng chảy: 127 đến 128°C

Ví dụ điều chế 9-2

Điều chế axit 5-etoxycacbonyl-6-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl] pyridin-2-cacboxylic

[Công thức hóa học 71]



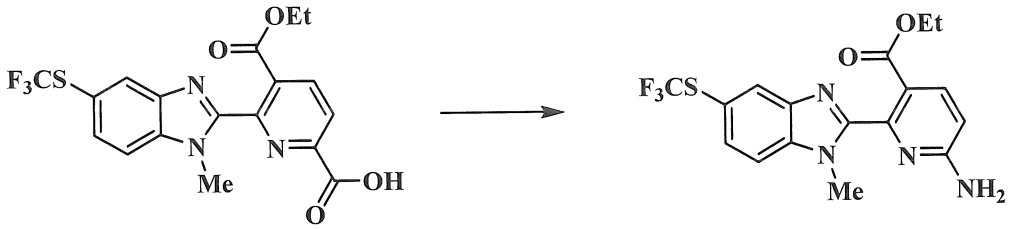
Hòa tan este của etyl với axit 6-[1-Metyl-5-(triflometylthio) benzimidazol-2-yl]pyridin-2,5-dicacboxylic (9,2 g, 20 mmol) trong tetrahydrofuran (40 mL) và etanol (20 mL). Bổ sung liti hydroxit monohydrat (0,85 g, 20 mmol), và hỗn hợp được khuấy trong 3 giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung nước, và metyl tert-butyl ete thực hiện quá trình chiết xuất. Bổ sung axit clohydric 2 M vào lớp nước để điều chỉnh pH đến 1, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được rửa với nước, được làm khô qua natri sulfat khan, và được lọc qua nút bông. Dung môi được làm bay hơi đi trong môi trường chân không để cho ra axit 5-etoxycacbonyl-6-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]pyridin-2-cacboxylic là sản phẩm thô.

Tính chất vật lý: ^{1}H-NMR($CDCl_3$): 8,42 (d, 1H), 8,29 (d, 1H), 8,16 (d, 1H), 7,66 (dd, 1H), 7,19 (d, 1H), 4,24 (q, 2H), 3,49 (s, 3H), 1,11 (t, 3H)

Ví dụ điều chế 9-3

Điều chế este của etyl với axit 6-amino-2-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]pyridin-3-cacboxylic

[Công thức hóa học 72]

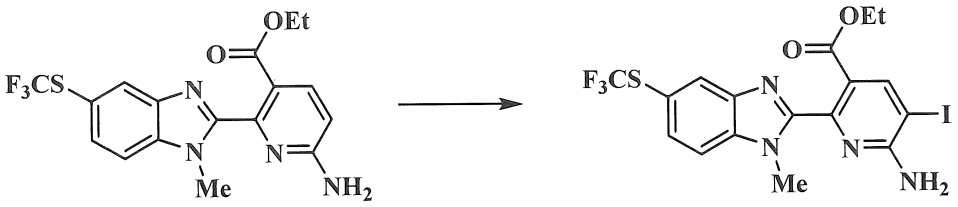


Hòa tan axit 5-etoxycacbonyl-6-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl] pyridin-2-cacboxylic đã thu được trong ví dụ điều chế 9-2 trong tert-butanol (40 mL). Bổ sung trietylamin (3,9 mL, 28 mmol) và amit của axit diphenylphosphoric (4,8 mL, 22 mmol), và hỗn hợp được gia nhiệt dưới điều kiện hồi lưu trong 2 giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, hỗn hợp phản ứng được làm mát xuống nhiệt độ phòng, và dung môi được làm bay hơi đi trong môi trường chân không. Bổ sung dung dịch nước natri hydro cacbonat bão hòa, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được rửa với nước, được làm khô qua natri sulfat khan, và được lọc qua nút bông. Dung môi được làm bay hơi đi trong môi trường chân không. Hòa tan phần còn sót lại trong cloroform (20 mL) và axit trifloaxetic (10 mL), và hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ phòng trong 6 giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, dung môi được làm bay hơi đi trong môi trường chân không. Bổ sung nước, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được rửa với dung dịch nước natri hydro cacbonat bão hòa, được làm khô qua natri sulfat khan, và được lọc qua nút bông. Dung môi được làm bay hơi đi trong môi trường chân không để cho ra este của etyl với axit 6-amino-2-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]pyridin-3-cacboxylic là sản phẩm thô.

Ví dụ điều chế 9-4

Điều chế este của etyl với axit 6-amino-5-iod-2-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]pyridin-3-cacboxylic

[Công thức hóa học 73]



Hòa tan este của etyl với axit 6-amino-2-[1-metyl-5-(triflometylthio) benzimidazol-2-yl]pyridin-3-cacboxylic đã thu được trong ví dụ điều chế 9-3 trong axit axetic (60 mL). Bổ sung 1,3-Diiod-5,5-dimetylhydantoin (3,8 g, 10 mmol), và hỗn hợp được khuấy ở 90°C trong 2 giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, hỗn hợp phản ứng được làm mát xuống nhiệt độ phòng, và dung môi được làm bay hơi đi trong môi trường chân không. Bổ sung nước, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được rửa với dung dịch nước natri hydro cacbonat bão hòa, được làm khô qua natri sulfat khan, và được lọc qua nút bông. Dung môi được làm bay hơi đi trong môi trường chân không. Hòa tan phần còn sót lại trong etyl axetat (50 mL) và tetrahydrofuran (10 mL). Bổ sung dung dịch nước natri thiosulfat bão hòa (30 mL) và dung dịch nước natri hydro cacbonat bão hòa (30 mL), và hỗn hợp được khuấy trong vài giờ. Thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat, và lớp hữu cơ được rửa với nước, được làm khô qua natri sulfat khan, và được lọc qua nút bông. Dung môi được làm bay hơi đi trong môi trường chân không, và phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra este của etyl với axit 6-amino-5-iod-2-[1-metyl-5-(triflometylthio) benzimidazol-2-yl]pyridin-3-cacboxylic (2,5 g, 4,9 mmol).

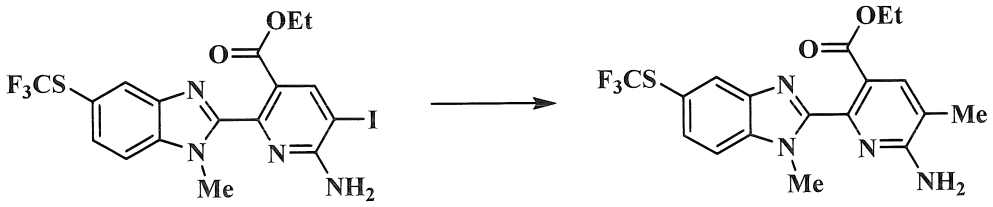
Hiệu suất: 24% (4 bước)

Tính chất vật lý: Điểm nóng chảy: 168 đến 171°C

Ví dụ điều chế 9-5

Điều chế este của etyl với axit 6-amino-5-metyl-2-[1-metyl-5-(triflometylthio) benzimidazol-2-yl]pyridin-3-cacboxylic

[Công thức hóa học 74]



Bổ sung sản phẩm cộng trimetylboroxin (241 mg, 1,7 mmol), diclo[1,1'-bis(diphenylphosphino)ferroxen]paladi(II) axeton (44 mg, 0,058 mmol), và xesi cacbonat (749 mg, 2,3 mmol) vào dung dịch 1,2-dimetoxyetan:nước (4:1) (5,0 mL) của este của etyl với axit 6-amino-5-iod-2-[1-metyl-5-(triflometylthio) benzimidazol-2-yl]pyridin-3-cacboxylic (300 mg, 0,58 mmol), và hỗn hợp được gia nhiệt dưới điều kiện hồi lưu trong 2 giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, Thực hiện quá trình lọc Xelit và cô đặc trong chân không. Phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra este của etyl với axit 6-amino-5-metyl-2-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]pyridin-3-cacboxylic (235 mg, 0,57 mmol).

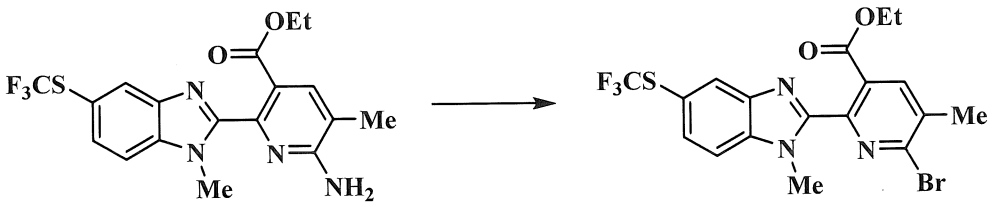
Hiệu suất: 99%

Tính chất vật lý: Điểm nóng chảy: 154 đến 156°C

Ví dụ điều chế 9-6

Điều chế este của etyl với axit 6-brom-5-metyl-2-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]pyridin-3-cacboxylic

[Công thức hóa học 75]



Hòa tan este của etyl với axit 6-amino-5-metyl-2-[1-metyl-5-(triflometylthio) benzimidazol-2-yl]pyridin-3-cacboxylic (235 mg, 0,57 mmol) trong tetrahydrofuran (3,0 mL). Bổ sung đồng(II) bromua (192 mg, 0,86 mmol) và tert-butyl nitrit (136 mL, 1,2 mmol), và hỗn hợp được khuấy ở 60°C trong một giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, hỗn hợp phản ứng được lọc qua Xelit. Bổ sung nước, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được rửa với nước, được làm khô qua natri sulfat khan, và được lọc qua nút bông. Dung môi được làm bay hơi đi trong môi trường chân không. Phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra este của etyl với axit 6-brom-5-metyl-2-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]pyridin-3-cacboxylic (148 mg, 0,31 mmol).

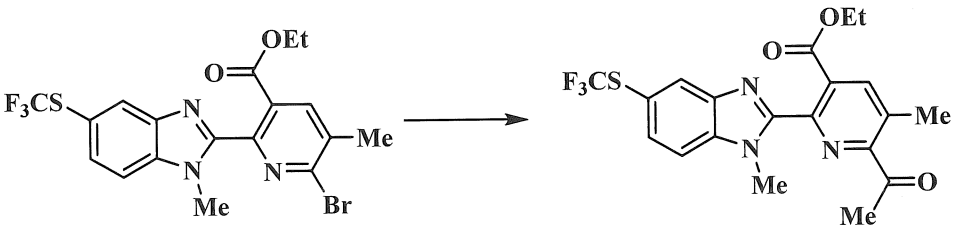
Hiệu suất: 55%

Tính chất vật lý: Điểm nóng chảy: 154 đến 157°C

Ví dụ điều chế 9-7

Điều chế este của etyl với axit 6-axetyl-5-metyl-2-[1-metyl-5-(triflometylthio) benzimidazol-2-yl]pyridin-3-cacboxylic

[Công thức hóa học 76]



Hòa tan este của etyl với axit 6-brom-5-metyl-2-[1-metyl-5-(triflometylthio) benzimidazol-2-yl]pyridin-3-cacboxylic (118 mg, 0,25 mmol) trong 1,2-dimetoxyetan (1,5 mL). Bổ sung tributyl(1-etoxyvinyl)stannan (0,17 mL, 0,50 mmol) và tetrakis(triphenylphosphin)paladi(0) (29 mg, 0,025 mmol), và hỗn hợp được gia nhiệt dưới điều kiện hồi lưu trong 3 giờ. Sau khi làm mát xuống nhiệt độ phòng, bổ sung axit clohydric 2 M (2mL), và hỗn hợp được khuấy trong 2 giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được rửa với nước, được làm khô qua natri sulfat khan, và được lọc qua nút bông. Dung môi được làm bay hơi đi trong môi trường chân không. Phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra este của etyl với axit 6-axetyl-5-metyl-2-[1-metyl-5-(triflometylthio) benzimidazol-2-yl]pyridin-3-cacboxylic (35 mg, 0,08 mmol).

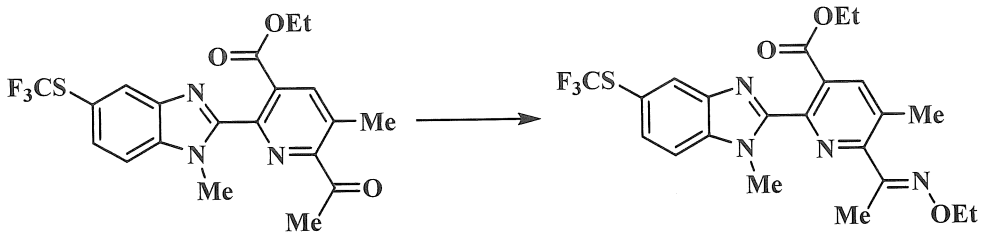
Hiệu suất: 32%

Tính chất vật lý: Điểm nóng chảy: 85 đến 88°C

Ví dụ điều chế 9-8

Điều chế este của etyl với axit 6-[(E)-N-etoxy-C-metyl-cacbonimidoyl]-5-metyl-2-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]pyridin-3-cacboxylic (Hợp chất số 3-91)

[Công thức hóa học 77]



este của etyl với axit 6-axetyl-5-metyl-2-[1-metyl-5-(triflometylthio) benzimidazol-2-yl]pyridin-3-cacboxylic (25 mg, 0,057 mmol) was hòa tand in pyridin (1,0 mL). Bổ sung O-etylhydroxylamin hydroclorua (28 mg, 0,29 mmol), và hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ phòng trong 2 giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, dung môi được làm bay hơi đi trong môi trường chân không. Bổ sung dung dịch nước natri hydro cacbonat bão hòa, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được rửa với nước, được làm khô qua natri sulfat khan, và được lọc qua nút bông. Dung môi được làm bay hơi đi trong môi trường chân không. Phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra este của etyl với axit 6-[(E)-N-etoxy-C-metyl-cacbonimidoyl]-5-metyl-2-[1-metyl-5-(triflometylthio)benzimidazol-2-yl]pyridin-3-ca cboxylic (7,4 mg, 0,015 mmol).

Hiệu suất: 27%

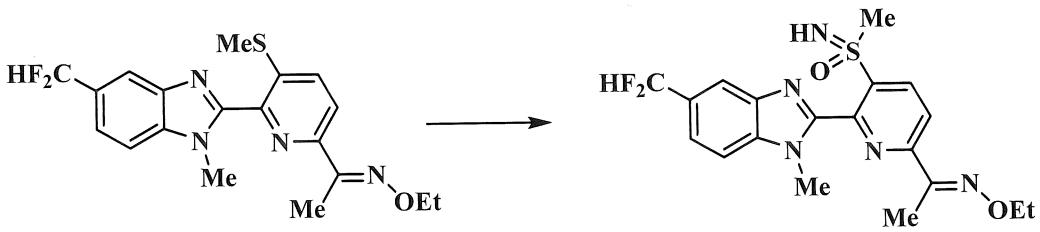
Tính chất vật lý: Chỉ số khúc xạ: 1,3386 (22,2°C)

Ví dụ điều chế 10

Điều chế

1-{6-[5-(diflometyl)-1-metylbenzimidazol-2-yl]-5-(metylsulfonimidoyl)pyridin-2-yl}-N-etoxy-etanimin (Hợp chất số 3-50)

[Công thức hóa học 78]



Bổ sung amoni cacbonat (0,11 g, 1,10 mmol) và bisaxetoxyiodbenzen (0,38 g, 1,70 mmol) ở nhiệt độ phòng vào dung dịch metanol (5,1 mL) của 1-{6-[5-(diflometyl)-1-metylbenzimidazol-2-yl]-5-metylthiopyridin-2-yl}-N-etoxy-eta nimin (0,20 g, 0,51 mmol), và hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ phòng trong một giờ.

Sau khi kết thúc phản ứng, hỗn hợp phản ứng được cô đặc trong môi trường chân không, và phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra 1-{6-[5-(diflometyl)-1-metylbenzimidazol-2-yl]-5-(metylsulfonimidoyl)pyridin-2-yl}-N-etoxy-etanimin (0,25 g, 0,60 mmol).

Hiệu suất: 100%

Tính chất vật lý: Điểm nóng chảy: 100 đến 101°C

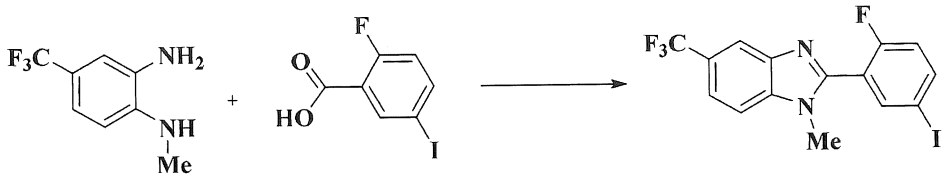
Ví dụ điều chế 11

Điều chế (Z)-N'-etoxy-3-(1-metyl-5-(triflometyl)-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)-4-(N-metylsulfamoyl)benzimidamit (Hợp chất số 4-46)

Ví dụ điều chế 11-1

Điều chế 2-(2-flo-5-iodphenyl)-1-metyl-5-(triflometyl)-1H-benzo[d]imidazol

[Công thức hóa học 79]



Bổ sung 2-amino-1-metylamino-4-triflobenzen (3,6 g, 19 mmol), 1-(3-dimetylaminopropyl)-3-etylcacbodiimit (4,0 g, 21 mmol), và N,N-dimetyl-4-aminopyridin (2,3 g, 19 mmol) ở nhiệt độ phòng vào dung dịch pyridin (45 mL) của axit 2-flo-5-iodbenzoic (5,0 g, 19 mmol), và hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ phòng qua đêm. Sau khi kết thúc phản ứng, hỗn hợp phản ứng được cô đặc trong môi trường chân không. Bổ sung axit clohydric 0,5 N vào phần còn sót lại, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không. Bổ sung axit axetic (40 mL) vào phần còn sót lại, và hỗn hợp được khuấy ở 120°C trong 2 giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, hỗn hợp phản ứng được cô đặc trong môi trường chân không. Bổ sung dung dịch nước natri hydro cacbonat bão hòa vào phần còn sót lại, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không. Phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica

gel để cho ra 2-(2-flo-5-iodphenyl)-1-metyl-5-(triflometyl)-1H-benzo[d]imidazol (4,1 g, 7,1 mmol).

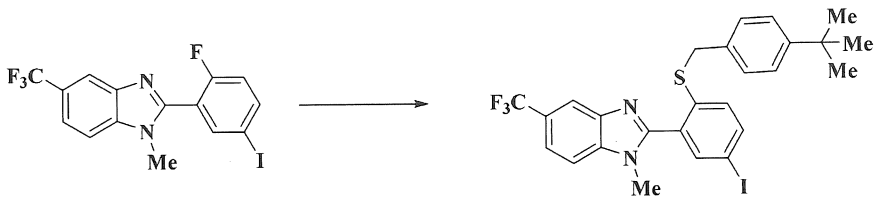
Hiệu suất: 37%

Tính chất vật lý: ^{1}H-NMR ($CDCl_3$): 8,05 (dd, 1H), 7,81 (m, 1H), 7,61 (d, 1H), 7,30 (d, 1H), 7,18 (dd, 1H), 7,00 (dd, 1H), 2,51 (s, 3H)

Ví dụ điều chế 11-2

Điều chế 2-(2-((4-(tert-butyl)benzyl)thio)-5-iodphenyl)-1-metyl-5-(triflometyl)-1H-benzo[d]imidazol

[Công thức hóa học 80]



Bổ sung 4-(tert-butyl)benzylthiol (0,63 mL, 3,4 mmol) và xesi cacbonat (1,3 g, 4,0 mmol) ở nhiệt độ phòng vào dung dịch N,N-dimetylaxetamit (10 mL) của 2-(2-flo-5-iodphenyl)-1-metyl-5-(triflometyl)-1H-benzo[d]imidazol (1,2 g, 2,9 mmol), và hỗn hợp được khuấy ở 80°C trong 3 giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung dung dịch nước amoni clorua bão hòa, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không. Phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra 2-(2-((4-(tert-butyl)benzyl)thio)-5-iodphenyl)-1-metyl-5-(triflometyl)-1H-benzo[d]imidazol (1,1 g, 1,8 mmol).

Hiệu suất: 64%

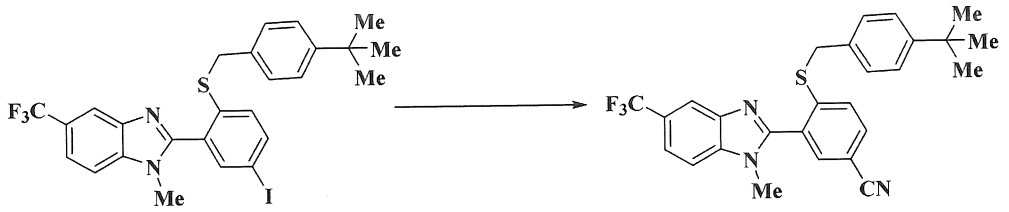
Tính chất vật lý: ^{1}H-NMR ($CDCl_3$): 8,10 (d, 1H), 7,79 (d, 1H), 7,74 (dd,1H), 7,60 (dd,1H), 7,46 (dd, 1H), 7,24 (d, 2H), 7,17 (dd, 1H), 7,10 (d, 2H), 3,98 (s, 2H), 3,61 (s, 3H), 1,27 (s, 9H)

Ví dụ điều chế 11-3

Điều chế

2-((4-(tert-butyl)benzyl)thio)-3-(1-metyl-5-(triflometyl)-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)benzonitril

[Công thức hóa học 81]



Bổ sung kẽm xyanua (0,45 g, 3,8 mmol), tetrakis(triphenylphosphin)paladi(0) (0,66 g, 0,57 mmol), và trietylamin (0,53 mL, 3,8 mmol) ở nhiệt độ phòng vào dung dịch N,N-dimetylaxetamit (6,3 mL) của 2-(2-((4-(tert-butyl)benzyl)thio)-5-iodphenyl)-1-metyl-5-(triflometyl)-1H-benzo[d]imidazol (1,1 g, 1,9 mmol), và hỗn hợp được khuấy và được gia nhiệt dưới điều kiện hồi lưu trong 3 giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung nước, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không. Phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra 2-((4-(tert-butyl)benzyl)thio)-3-(1-metyl-5-(triflometyl)-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)benzonitril (0,44 g, 0,91 mmol).

Hiệu suất: 48%

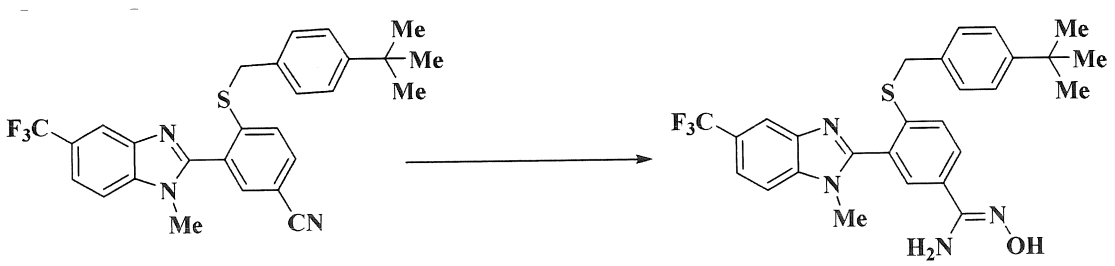
Tính chất vật lý: ^{1}H-NMR ($CDCl_3$): 8,11 (d, 1H), 7,70 (m, 2H), 7,61 (dd, 1H), 7,51 (dd, 1H), 7,30 (d, 2H), 7,21 (d, 2H), 7,13 (d, 1H), 4,14 (s, 2H), 3,66 (s, 3H), 1,28 (s, 9H)

Ví dụ điều chế 11-4

Điều chế

(Z)-4-((4-(tert-butyl)benzyl)thio)-N'-hydroxy-3-(1-metyl-5-(triflometyl)-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)benzimidamit

[Công thức hóa học 82]



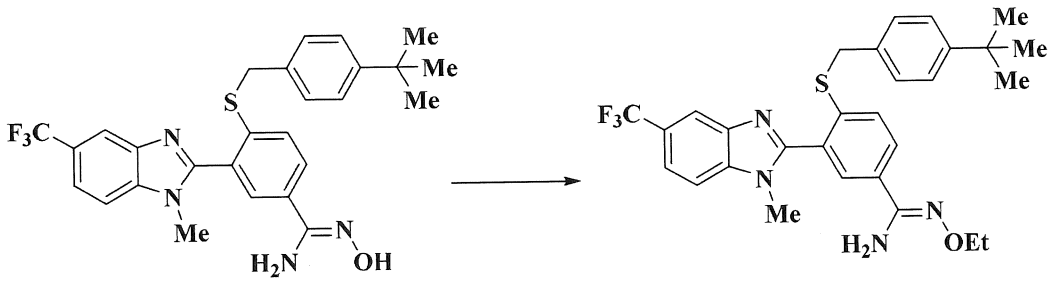
Bổ sung hydroxylamin hydroclorua (22 mg, 0,31 mmol) và natri axetat (26 mg, 0,31 mmol) ở nhiệt độ phòng vào dung dịch etanol (1,0 mL) của 2-((4-(tert-butyl)benzyl)thio)-3-(1-metyl-5-(triflometyl)-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)benzonitril (0,10 g, 0,21 mmol), và hỗn hợp được khuấy và được gia nhiệt dưới điều kiện hồi lưu trong 2 giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung nước, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không để cho ra (Z)-4-((4-(tert-butyl)benzyl)thio)-N'-hydroxy-3-(1-metyl-5-(triflometyl)-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)benzimidamit (0,11 g, 0,21 mmol).

Hiệu suất: 100%

Ví dụ điều chế 11-5

Điều chế (Z)-4-((4-(tert-butyl)benzyl)thio)-N'-etoxy-3-(1-metyl-5-(triflometyl)-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)benzimidamit

[Công thức hóa học 83]



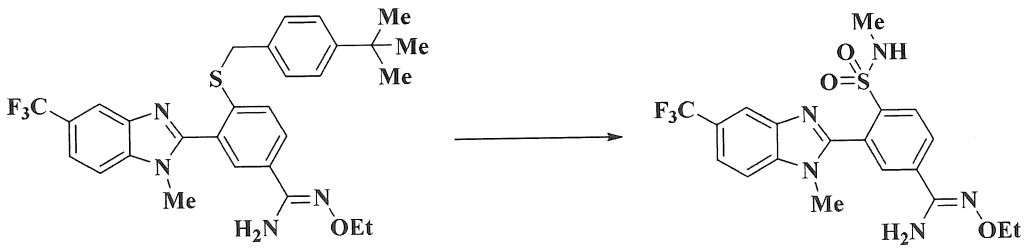
Bổ sung etyl iodua (20 μL, 0,26 mmol) và xesi cacbonat (0,11 g, 0,32 mmol) ở nhiệt độ phòng vào dung dịch N,N-dimetylformamit (1,0 mL) của (Z)-4-((4-(tert-butyl)benzyl)thio)-N'-hydroxy-3-(1-metyl-5-(triflometyl)-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)benzimidamit (0,11 g, 0,21 mmol), và hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ phòng trong 2 giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung dung dịch nước amoni clorua bão hòa, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không. Phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra (Z)-4-((4-(tert-butyl)benzyl)thio)-N'-etoxy-3-(1-metyl-5-(triflometyl)-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)benzimidamit (70 mg, 0,13 mmol).

Hiệu suất: 60%

Ví dụ điều chế 11-6

Điều chế
(Z)-N'-etoxy-3-(1-metyl-5-(triflometyl)-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)-4-(N-metylsulfam oyl)benzimidamit (Hợp chất số 4-46)

[Công thức hóa học 84]



Bổ sung 1,3-diclo-5,5-dimetylhydantoin (80 mg, 0,39 mmol), axit axetic (25 μL, 0,39 mmol), và nước (15 μL, 0,78 mmol) ở 0°C vào dung dịch cloroform (1,0 mL) của (Z)-4-((4-(tert-butyl)benzyl)thio)-N'-etoxy-3-(1-metyl-5-(triflometyl)-1H-benzo[d]imi dazol-2-yl)benzimidamit (70 mg, 0,13 mmol), và hỗn hợp được khuấy ở 0°C trong 15 phút. Sau đó, bổ sung metylamin (dung dịch metanol 40%) (0,13 mL, 1,3 mmol), và hỗn hợp được khuấy trong 10 phút. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung nước vào hỗn hợp phản ứng, và thực hiện quá trình chiết xuất cloroform. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không. Phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra (Z)-N'-etoxy-3-(1-metyl-5-(triflometyl)-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)-4-(N-metylsulfam oyl)benzimidamit (37 mg, 0,081 mmol).

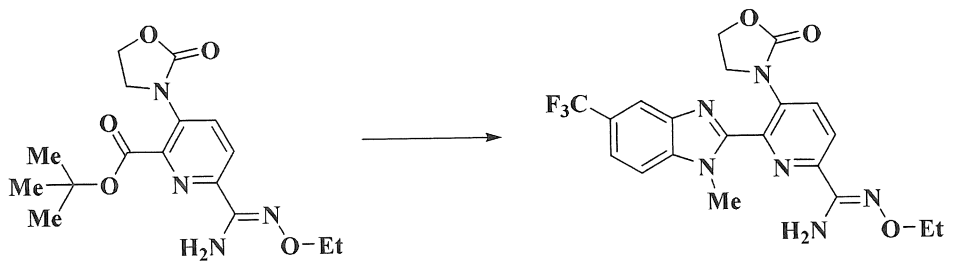
Hiệu suất: 62%

Tính chất vật lý: ^{1}H-NMR ($CDCl_3$): 8,19 (d, 1H), 8,06 (d, 1H), 7,92 (dd, 1H), 7,88 (d, 1H), 7,63 (dd, 1H), 7,52 (d, 1H), 6,41 (q, 1H), 4,84 (s, 2H), 4,18 (q, 2H), 3,74 (s, 3H), 2,72 (d, 3H), 1,33 (t, 3H)

Ví dụ điều chế 12

Điều chế (Z)-N'-etoxy-6-(1-metyl-5-(triflometyl)-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)-5-(2-oxo-oxazolidin-3-yl)picolinimidamit (Hợp chất số 3-130)

[Công thức hóa học 85]



Bổ sung axit trifloaxetic (1,0 mL) ở nhiệt độ phòng vào este của (Z)-tert-butyl với axit 6-(N'-etoxycacbamimidoyl)-3-(2-oxo-oxazolidin-3-yl)picolinic (48 mg, 0,13 mmol), và hỗn hợp được khuấy ở 60°C trong 3 giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, hỗn hợp phản ứng được cô đặc trong môi trường chân không. Bổ sung pyridin (1,0 mL), 1-(3-dimetylaminopropyl)-3-etylcacbodiimit (30 mg, 0,16 mmol), và N,N-dimetyl-4-aminopyridin (20 mg, 0,13 mmol) vào phần còn sót lại ở nhiệt độ phòng, và hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ phòng qua đêm. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung axit clohydric 0,5 N vào hỗn hợp phản ứng, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không. Bổ sung axit axetic (1,0 mL) vào phần còn sót lại, và hỗn hợp được khuấy ở 120°C trong 3 giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung dung dịch nước natri hydro cacbonat bão hòa vào hỗn hợp phản ứng, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không. Phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra (Z)-N'-etoxy-6-(1-metyl-5-(triflometyl)-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)-5-(2-oxo-oxazolidin-3-yl)picolinimidamit (36 mg, 0,080 mmol).

Hiệu suất: 58%

Tính chất vật lý: ^{1}H-NMR ($CDCl_3$): 8,19 (d, 1H), 8,04 (s, 1H), 7,79 (d, 1H), 7,60 (dd, 1H), 7,53 (d, 1H), 5,45 (s, 2H), 4,52 (t, 2H), 4,24 (t, 2H), 4,22 (q, 2H), 3,96 (s, 3H), 1,36 (t, 3H)

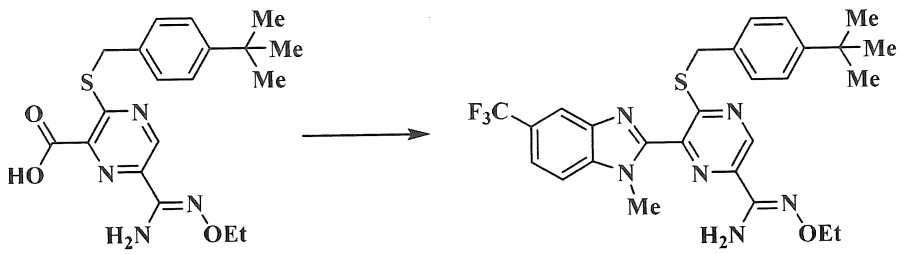
Ví dụ điều chế 13

Điều chế (Z)-N'-etoxy-6-(1-metyl-5-(triflometyl)-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)-5-(N-metylsulfamoyl)pyrazin-2-cacboximidamit (Hợp chất số 7-46)

Ví dụ điều chế 13-1

Điều chế (Z)-5-((4-(tert-butyl)benzyl)thio)-N'-etoxy-6-(1-metyl-5-(triflometyl)-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)pyrazin-2-cacboximidamit

[Công thức hóa học 86]



Bổ sung N-metyl-4-triflometylbenzen-1,2-diamin (0,10 g, 0,50 mmol), N,N-dimetyl-4-aminopyridin (0,061 g, 0,50 mmol), và 1-(3-dimetylaminopropyl)-3-etylcacbodiimit hydroclorua (0,14 g, 0,75 mmol) vào dung dịch pyridin (3,0 mL) của axit (Z)-3-((4-(tert-butyl)benzyl)thio)-6-(N'-etoxycacbamimidoyl)pyrazin-2-cacboxylic (0,19 g, 0,50 mmol), và hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ phòng trong 16 giờ. hỗn hợp phản ứng được cô đặc trong môi trường chân không, bổ sung nước và etyl axetat vào phần còn sót lại, và thực hiện quá trình chiết xuất. Lớp hữu cơ được làm khô qua natri sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không. Bổ sung axit axetic (3,0 mL) phần còn sót lại, và hỗn hợp được khuấy ở 120°C trong 2 giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, hỗn hợp phản ứng được cô đặc trong môi trường chân không. Bổ sung dung dịch nước natri hydro cacbonat bão hòa vào phần còn sót lại, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không. Phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra (Z)-5-((4-(tert-butyl)benzyl)thio)-N'-etoxy-6-(1-metyl-5-(triflometyl)-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)pyrazin-2-cacboximidamit (0,20 g, 0,37 mmol).

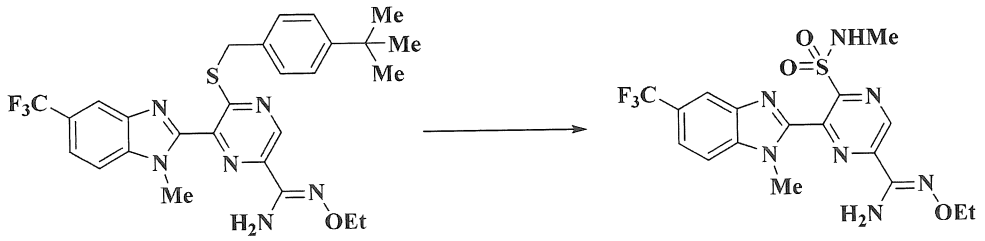
Hiệu suất: 74%

Tính chất vật lý: Điểm nóng chảy: 180 đến 181°C

Ví dụ điều chế 13-2

Điều chế
(Z)-N'-etoxy-6-(1-metyl-5-(triflometyl)-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)-5-(N-metylsulfamoyl)pyrazin-2-cacboximidamit (Hợp chất số 7-46)

[Công thức hóa học 87]



Bổ sung 1,3-diclo-5,5-dimetylhydantoin (0,10 g, 0,53 mmol), axit axetic (0,030 mL, 0,53 mmol), và nước (0,019 mL, 1,1 mmol) ở 0°C vào dung dịch cloroform (2,0 mL) của (Z)-5-((4-(tert-butyl)benzyl)thio)-N'-etoxy-6-(1-metyl-5-(triflometyl)-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)pyrazin-2-cacboximidamit (0,095 g, 0,18 mmol), và hỗn hợp được khuấy ở 0°C trong 5 phút. Sau đó, bổ sung metylamin (dung dịch metanol 40%) (2,0 mL, 20 mmol), và hỗn hợp được khuấy trong 5 phút. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung nước vào hỗn hợp phản ứng, và thực hiện quá trình chiết xuất cloroform. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không. Phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra (Z)-N'-etoxy-6-(1-metyl-5-(triflometyl)-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)-5-(N-metylsulfamoyl)pyrazin-2-cacboximidamit (0,017 g, 0,038 mmol).

Hiệu suất: 21%

Tính chất vật lý: Điểm nóng chảy: 244 đến 246°C

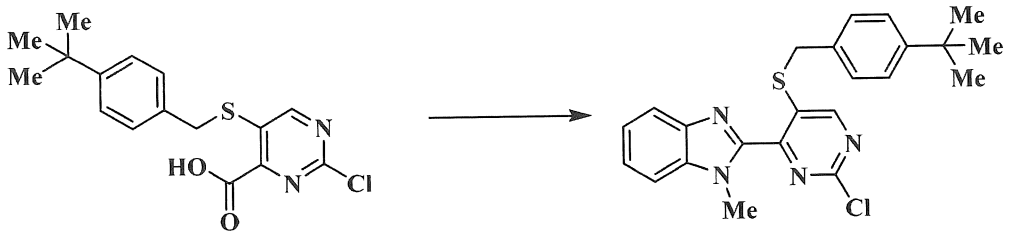
Ví dụ điều chế 14

Điều chế
(Z)-N'-etoxy-4-(1-metyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)-5-(N-metylsulfamoyl)pyrimidin-2-cacboximidamit (Hợp chất số 8-6)

Ví dụ điều chế 14-1

Điều chế 2-(5-((4-(tert-butyl)benzyl)thio)-2-clopyrimidin-4-yl)-1H-benzo[d]imidazol

[Công thức hóa học 88]



Bổ sung N-metyl-1,2-phenylenediamin dihydroclorua (0,87 g, 4,5 mmol), 1-hydroxybenzotriazol (34 mg, 0,89 mmol), và 1-(3-dimetylaminopropyl)-3-etylcacbodiimit hydroclorua (1,0 g, 5,34 mmol) vào dung dịch pyridin (10 mL) của axit 5-((4-(tert-butyl)benzyl)thio)-2-clopyrimidin-4-cacboxylic (1,5 g, 4,5 mmol), và hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ phòng trong 16 giờ. Hỗn hợp phản ứng được cô đặc trong môi trường chân không, bổ sung nước và etyl axetat vào phần còn sót lại, và thực hiện quá trình chiết xuất. Lớp hữu cơ được làm khô qua natri sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không. Bổ sung axit axetic (10 mL) vào phần còn sót lại, và hỗn hợp được khuấy ở 120°C trong 2 giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, hỗn hợp phản ứng được cô đặc trong môi trường chân không. Bổ sung dung dịch nước natri hydro cacbonat bão hòa vào phần còn sót lại, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không. Phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra 2-(5-((4-(tert-butyl)benzyl)thio)-2-clopyrimidin-4-yl)-1H-benzo[d]imidazol (1,1 g, 2,7 mmol).

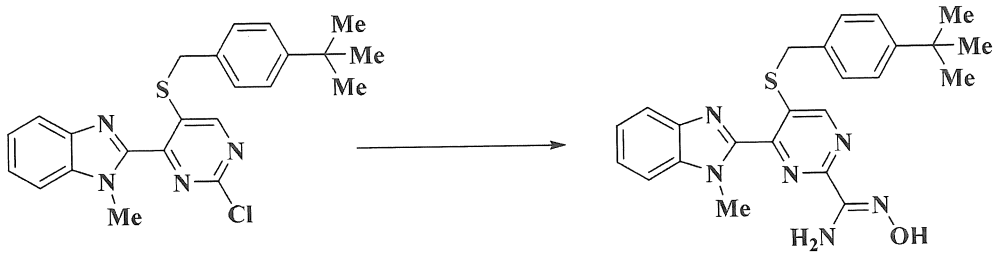
Hiệu suất: 61%

Tính chất vật lý: ^{1}H-NMR ($CDCl_3$): 8,63 (s, 1H), 7,89 (d, 1H), 7,45-7,41 (m, 2H), 7,36-7,31 (m, 5H), 4,21 (s, 2H), 4,10 (s, 3H), 1,29 (s, 9H)

Ví dụ điều chế 14-2

Điều chế (Z)-5-((4-(tert-butyl)benzyl)thio)-N'-hydroxy-4-(1-metyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)pyrimidin-2-cacboximidamit

[Công thức hóa học 89]



Bổ sung 1,4-diazabixyclo[2,2,2]octan (25 mg, 0,23 mmol) ở nhiệt độ phòng vào dung dịch dimetyl sulfoxit (10 mL) của 2-(5-((4-(tert-butyl)benzyl)thio)-2-clopyrimidin-4-yl)-1H-benzo[d]imidazol (0,48 g, 1,1 mmol), và hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ phòng trong 5 phút. Sau đó, bổ sung nhỏ giọt dung dịch nước (1,0 mL) của natri xyanua (66 mg, 1,4 mmol) ở nhiệt độ phòng, và hỗn hợp được khuấy ở cùng nhiệt độ trong 2 giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung dung dịch nước natri clorua bão hòa vào hỗn hợp phản ứng, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được làm khô qua natri sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không. Bổ sung hydroxylamin hydroclorua (48 mg, 0,69 mmol) và natri axetat (56 mg, 0,69 mmol) ở nhiệt độ phòng vào dung dịch etanol (10 mL) của sản phẩm thô thu được, và hỗn hợp được khuấy và được gia nhiệt dưới điều kiện hồi lưu trong một giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, hỗn hợp phản ứng được cô đặc trong môi trường chân không. Bổ sung dung dịch nước natri hydro cacbonat bão hòa vào phần còn sót lại, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được làm khô qua natri sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không để cho ra (Z)-5-((4-(tert-butyl)benzyl)thio)-N'-hydroxy-4-(1-metyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)pyrimidin-2-cacboximidamit (0,24 g, 0,54 mmol).

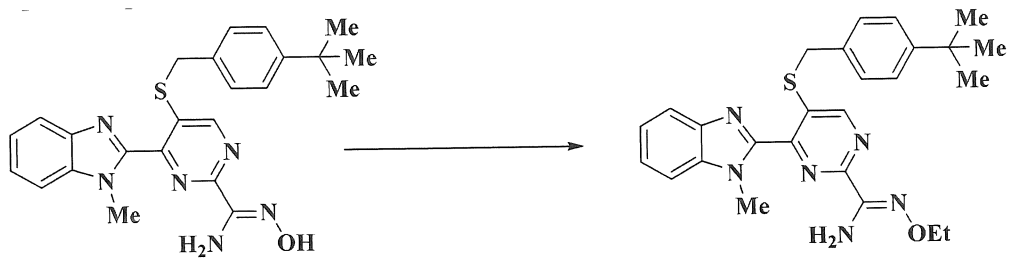
Hiệu suất: 48%

Tính chất vật lý: ^{1}H-NMR ($CDCl_3$): 8,82 (s, 1H), 7,89 (d, 1H), 7,45-7,31 (m, 7H), 5,52 (br-s, 2H), 4,24 (s, 2H), 4,05 (s, 3H), 1,29 (s, 9H)

Ví dụ điều chế 14-3

Điều chế (Z)-5-((4-(tert-butyl)benzyl)thio)-N'-etoxy-4-(1-metyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)pyrimidin-2-cacboximidamit

[Công thức hóa học 90]



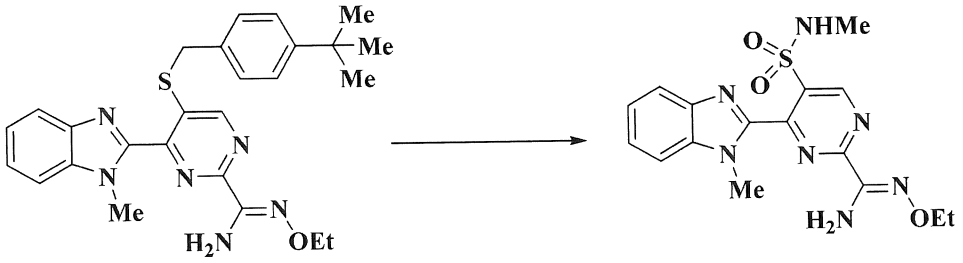
Bổ sung etyl iodua (0,054 mL, 0,67 mmol) và xesi cacbonat (0,22 g, 0,67 mmol) ở nhiệt độ phòng vào dung dịch N,N-dimetylaxetamit (1,0 mL) của (Z)-5-((4-(tert-butyl)benzyl)thio)-N'-hydroxy-4-(1-metyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)pyrimidin-2-cacboximidamit (0,10 g, 0,22 mmol), và hỗn hợp được khuấy ở cùng nhiệt độ trong 2 giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung dung dịch nước amoni clorua bão hòa to hỗn hợp phản ứng, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được làm khô qua natri sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không để cho ra (Z)-5-((4-(tert-butyl)benzyl)thio)-N'-etoxy-4-(1-metyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)pyrimidin-2-cacboximidamit (55 mg, 0,12 mmol).

Hiệu suất: 51%

Ví dụ điều chế 14-4

Điều chế (Z)-N'-etoxy-4-(1-metyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)-5-(N-metylsulfamoyl)pyrimidin-2-cacboximidamit (Hợp chất số 8-6)

[Công thức hóa học 91]



Bổ sung 1,3-diclo-5,5-dimetylhydantoin (0,068 g, 0,35 mmol), axit axetic (0,020 mL, 0,35 mmol), và nước (0,012 ml, 0,69 mmol) ở 0°C vào dung dịch cloroform (1,0 mL) của (Z)-5-((4-(tert-butyl)benzyl)thio)-N'-etoxy-4-(1-metyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)pyrimidin-2-cacboximidamit (0,055 g, 0,12 mmol), và hỗn hợp được khuấy ở

0°C trong 10 phút. Sau đó, bổ sung metylamin (dung dịch metanol 40%) (0,10 mL, 0,98 mmol), và hỗn hợp được khuấy trong 10 phút. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung nước vào hỗn hợp phản ứng, và thực hiện quá trình chiết xuất cloroform. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không. Phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra (Z)-N'-etoxy-4-(1-metyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)-5-(N-metylsulfamoyl)pyrimidin-2-cacboximidamit (0,026 g, 0,067 mmol).

Hiệu suất: 59%

Tính chất vật lý: Điểm nóng chảy: 222 đến 223°C

Ví dụ tham chiếu 1

Điều chế axit 6-(1,3-dioxan-2-yl)-3-etylsulfonylpyridin-2-cacboxylic (hợp chất ban đầu của Ví dụ điều chế 1-1)

Ví dụ điều chế tham chiếu 1-1

Điều chế este của etyl với axit 6-clo-3-etylsulfonylpyridin-2-cacboxylic

[Công thức hóa học 92]

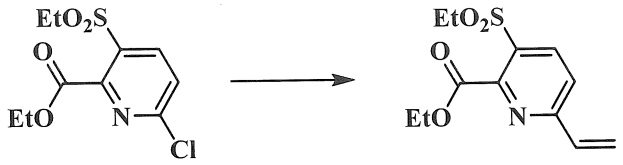
Bổ sung axit m-clopeoxybenzoic (11 g, 41 mmol) vào dung dịch etyl axetat (60 mL) của este của etyl với axit 6-clo-3-etylthiopyridin-2-cacboxylic (4,0 g, 16 mmol), và hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ phòng trong 2 giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung dung dịch nước natri hydro cacbonat bão hòa và dung dịch nước natri thiosulfat bão hòa. Phân tách các lớp thu được. Lớp hữu cơ được rửa với dung dịch nước natri clorua bão hòa, được làm khô qua magie sulfat khan, và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không để cho ra este của etyl với axit 6-clo-3-etylsulfonylpyridin -2-cacboxylic (4,2 g, 15 mmol).

Hiệu suất: 92%

Ví dụ điều chế tham chiếu 1-2

Điều chế este của etyl với axit 3-etylsulfonyl-6-vinylpyridin-2-cacboxylic

[Công thức hóa học 93]



Bổ sung dung dịch nước natri cacbonat 2 M (36 mL, 73 mmol), kali vinyltrifloborat (3,3 g, 24 mmol), và sản phẩm cộng diclo[1,1'-bis(diphenylphosphino) ferroxen]paladi(II) axeton (0,38 g, 0,49 mmol) vào dung dịch 1,2-dimetoxyetan (0,11 L) của este của etyl với axit 6-clo-3-etylsulfonylpyridin-2-cacboxylic (4,2 g, 15 mmol), và hỗn hợp được gia nhiệt dưới điều kiện hồi lưu trong 2 giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung nước. Phân tách các lớp thu được. Lớp hữu cơ được rửa với dung dịch nước natri clorua bão hòa, được làm khô qua magie sulfat khan, và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không. Phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra este của etyl với axit 3-etylsulfonyl-6-vinylpyridin-2-cacboxylic (3,0 g, 11 mmol).

Hiệu suất: 75%

Ví dụ điều chế tham chiếu 1-3

Điều chế este của etyl với axit 3-etylsulfonyl-6-formylpyridin-2-cacboxylic

[Công thức hóa học 94]

Bổ sung chất đệm pH 7 (50 mL), N-metylmorpholin N-oxit (11 g, 48 mmol, dung dịch nước 50%), và osmi(VIII) oxit (1,6 mL, 0,16 mmol, dung dịch tert-butanol 0,1 M) vào dung dịch tetrahydrofuran (0,10 L) của este của etyl với axit 3-etylsulfonyl-6-vinylpyridin-2-cacboxylic (3,0 g, 11 mmol), và hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ phòng qua đêm. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung natri periodat (5,2 g, 24 mmol), và hỗn hợp được khuấy tiếp ở nhiệt độ phòng trong một giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung dung dịch nước natri bicacbonat bão hòa và dung dịch nước natri thiosulfat bão hòa, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không. Phần

còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra este của etyl với axit 3-etylsulfonyl-6-formylpyridin-2-cacboxylic (2,1 g, 7,6 mmol).

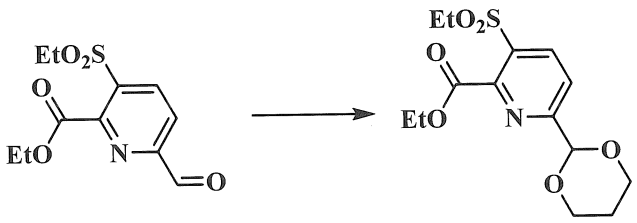
Hiệu suất: 71%

Tính chất vật lý: ^{1}H-NMR($CDCl_3$): 10,15 (s, 1H), 8,53 (d, 1H), 8,19 (d, 1H), 4,56 (q, 2H), 3,54 (q, 2H), 1,48 (t, 3H), 1,36 (t, 3H)

Ví dụ điều chế tham chiếu 1-4

Điều chế este của etyl với axit 6-(1,3-dioxan-2-yl)-3-etylsulfonylpyridin-2-cacboxylic

[Công thức hóa học 95]



Bổ sung 1,3-propandiol (2,0 g, 26 mmol) và monohydrat của axit p-toluensulfonic (3,3 g, 17 mmol) vào dung dịch toluen (85 mL) của este của etyl với axit 3-etylsulfonyl-6-formylpyridin-2-cacboxylic (4,7 g, 17 mmol), và hỗn hợp được gia nhiệt dưới điều kiện hồi lưu trong một giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung dung dịch nước natri bicacbonat bão hòa, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không. Phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra este của etyl với axit 6-(1,3-dioxan-2-yl)-3-etylsulfonylpyridin-2-cacboxylic (5,0 g, 15 mmol).

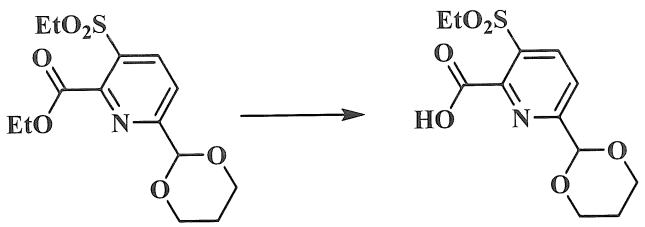
Hiệu suất: 87%

Tính chất vật lý: Điểm nóng chảy: 85 đến 86°C

Ví dụ điều chế tham chiếu 1-5

Điều chế axit 6-(1,3-dioxan-2-yl)-3-etylsulfonylpyridin-2-cacboxylic

[Công thức hóa học 96]



Bổ sung liti hydroxit (8,6 mL, 34 mmol, dung dịch nước 4 M) vào dung dịch etanol (50 mL) của este của etyl với axit 6-(1,3-dioxan-2-yl)-3-etylsulfonylpyridin-2-cacboxylic (5,0 g, 15 mmol), và hỗn hợp được khuấy trong 3 giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung axit clohydric 2 M để điều chỉnh pH đến 2, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không để cho ra axit 6-(1,3-dioxan-2-yl)-3-etylsulfonylpyridin -2-cacboxylic (4,1 g, 13 mmol).

Hiệu suất: 90%

Tính chất vật lý: Điểm nóng chảy: 145 đến 146°C

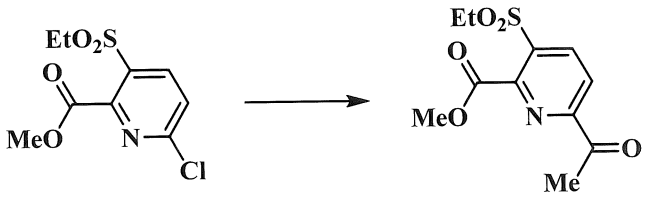
Ví dụ tham chiếu 2

Điều chế axit
6-[(E)-N-etoxy-C-metyl-cacbonimidoyl]-3-etylsulfonylpyridin-2-cacboxylic (hợp chất ban đầu của Ví dụ điều chế 2)

Ví dụ điều chế tham chiếu 2-1

Điều chế 6-axetyl-3-etylsulfonylpyridin-2-cacboxylic este của metyl với axit

[Công thức hóa học 97]



Bổ sung tributyl(1-etoxyvinyl)tin (17 mL, 49 mmol) và tetrakis(triphenylphosphin)paladi(0) (2,5 g, 2,2 mmol) dưới khí quyển agon ở nhiệt độ phòng vào dung dịch 1,2-dimetoxyetan (200 mL) của este của metyl với axit 6-clo-3-etylsulfonylpyridin-2-cacboxylic (11 g, 41 mmol), và hỗn hợp được khuấy ở 110°C trong 3 giờ. Sau đó làm mát xuống nhiệt độ phòng, bổ sung tetrahydrofuran

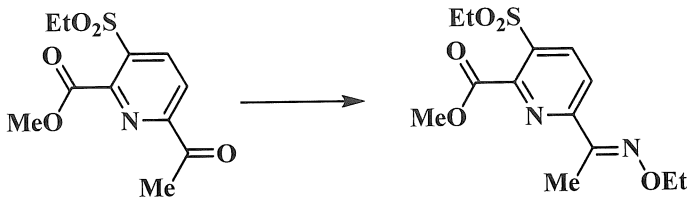
(100 mL) và axit clohydric 2 N (100 mL), và hỗn hợp được khuấy ở 50°C trong 3 giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung etyl axetat và nước vào hỗn hợp phản ứng, và thực hiện quá trình chiết xuất. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không. Phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra este của metyl với axit 6-axetyl-3-etylsulfonylpyridin -2-cacboxylic là sản phẩm thô.

Tính chất vật lý: ^{1}H-NMR($CDCl_3$): 8,54 (d, 1H), 8,28 (d, 1H), 4,08 (s, 3H), 3,35 (s, 3H), 2,77 (s, 3H)

Ví dụ điều chế tham chiếu 2-2

Điều chế este của metyl với axit
6-[(E)-N-etoxy-C-metyl-cacbonimidoyl]-3-etylsulfonylpyridin-2-cacboxylic

[Công thức hóa học 98]



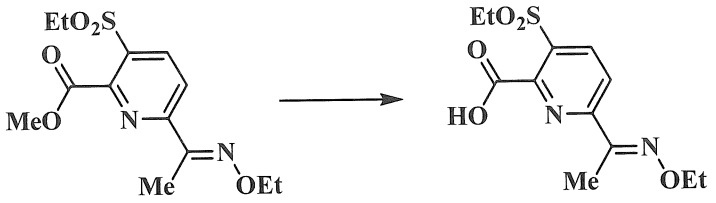
Bổ sung pyridin (60,0 mL) và O-etylhydroxylamin hydroclorua (5,94 g, 60,9 mmol) ở nhiệt độ phòng vào dung dịch cloroform (200 mL) của este của metyl với axit 6-axetyl-3-etylsulfonylpyridin-2-cacboxylic đã thu được trong Ví dụ điều chế tham chiếu 2-1, và hỗn hợp được khuấy qua đêm. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung axit clohydric 1 N và cloroform vào hỗn hợp phản ứng, và thực hiện quá trình chiết xuất. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không để cho ra este của metyl với axit 6-[(E)-N-etoxy-C-metyl-cacbonimidoyl]-3-etylsulfonylpyridin-2-cacboxylic là sản phẩm thô.

Tính chất vật lý: Điểm nóng chảy: 111 đến 112°C

Ví dụ điều chế tham chiếu 2-3

Điều chế axit
6-[(E)-N-etoxy-C-metyl-cacbonimidoyl]-3-etylsulfonylpyridin-2-cacboxylic

[Công thức hóa học 99]



Bổ sung dung dịch nước liti hydroxit 4 M (16 mL) ở nhiệt độ phòng vào dung dịch metanol (150 mL) của 6-[(E)-N-etoxy-C-metyl-cacbonimidoyl]-3-etylsulfonylpyridin-2-cacboxylic este của metyl với axit đã thu được trong Ví dụ điều chế tham chiếu 2-2, và hỗn hợp được khuấy trong một giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung axit clohydric 2 N và cloroform vào hỗn hợp phản ứng, và thực hiện quá trình chiết xuất. Bổ sung thêm dung dịch nước natri hydroxit 2 N, và lớp nước được chiết tách. Bổ sung thêm axit clohydric 2 N vào dịch chiết cho đến khi nó lại trở thành có tính axit, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không. Bổ sung metyl tert-butyl ete và n-hexan vào phần còn sót lại. Chất rắn kết tủa được lọc để cho ra axit 6-[(E)-N-etoxy-C-metyl-cacbonimidoyl]-3-etylsulfonylpyridin-2-cacboxylic (8,4 g, 32 mmol).

Hiệu suất: 80% (3 bước)

Tính chất vật lý: Điểm nóng chảy: 137 đến 138°C

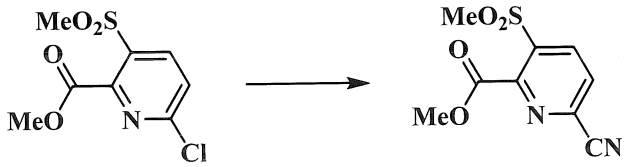
Ví dụ tham chiếu 3

Điều chế axit
6-[(Z)-N'-etoxy-C-metylcacbonimidoyl-3-metylsulfonylpyridin-2-cacboxylic (hợp chất ban đầu của Ví dụ điều chế 3-1)

Ví dụ điều chế tham chiếu 3-1

Điều chế este của metyl với axit 6-xyano-3-metylsulfonylpyridin-2-cacboxylic

[Công thức hóa học 100]



Bổ sung natri xyanua (2,4 g, 48 mmol) được hòa tan trong nước (16 mL) ở nhiệt độ phòng vào dung dịch dimetyl sulfoxit (0,16 L) của este của metyl với axit 6-clo-3-metylsulfonylpyridin-2-cacboxylic (10 g, 40 mmol), và hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ phòng trong một giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung nước, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không. Bổ sung metyl tert-butyl ete vào phần còn sót lại, và chất rắn kết tủa được thu bằng quá trình lọc và được làm khô trong môi trường chân không để cho ra este của metyl với axit 6-xyano-3-metylsulfonylpyridin-2-cacboxylic (7,2 g, 30 mmol).

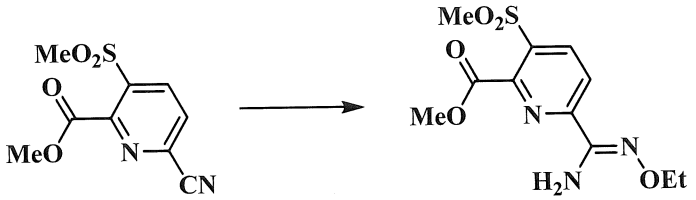
Hiệu suất: 75%

Tính chất vật lý: Điểm nóng chảy: 159 đến 160°C

Ví dụ điều chế tham chiếu 3-2

Điều chế este của metyl với axit
6-[(Z)-N'-etoxy-C-metylcacbonimidoyl-3-metylsulfonylpyridin-2-cacboxylic

[Công thức hóa học 101]



Bổ sung natri metoxit (2,5 mL, 12 mmol, 5 M dung dịch nước) vào dung dịch metanol (60 L) của este của metyl với axit 6-xyano-3-metylsulfonylpyridin-2 -cacboxylic (3,0 g, 12 mmol), và hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ phòng trong 30 phút. Bổ sung O-Etylhydroxylamin hydroclorua (1,6 g, 16 mmol), và hỗn hợp được khuấy trong một giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung nước, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không. Bổ sung MTBE và hexan vào phần còn sót lại, và chất rắn kết tủa được thu bằng quá trình lọc và được làm khô trong môi trường chân không để cho ra este của metyl với axit 6-[(Z)-N'-etoxy-C-metylcacbonimidoyl-3-metylsulfonylpyridin-2-cacboxylic (3,1 g, 10 mol).

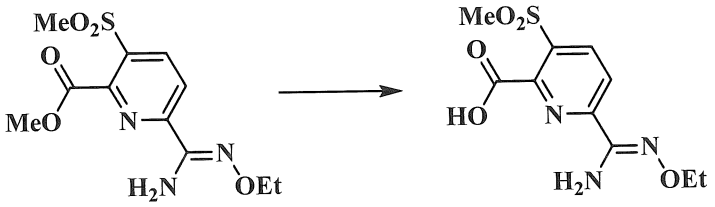
Hiệu suất: 83%

Tính chất vật lý: Điểm nóng chảy: 104 đến 105°C

Ví dụ điều chế tham chiếu 3-3

Điều chế axit
6-[(Z)-N'-etoxy-C-metylcacbonimidoyl-3-metylsulfonylpyridin-2-cacboxylic

[Công thức hóa học 102]



Bổ sung liti hydroxit monohydrat (0,79 g, 19 mmol) vào dung dịch metanol:nước (2:1) (60 mL) của este của metyl với axit 6-[(Z)-N'-etoxy-C-metylcacbonimidoyl-3-metylsulfonylpyridin-2-cacboxylic (3,1 g, 10 mmol), và hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ phòng qua đêm. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung axit clohydric 2,0 M để điều chỉnh pH đến 2, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không để cho ra axit 6-[(Z)-N'-etoxy-C-metylcacbonimidoyl-3-metylsulfonylpyridin-2-cacboxylic (2,5 g, 8,7 mmol).

Hiệu suất: 84%

Tính chất vật lý: Điểm nóng chảy: 154 đến 155°C

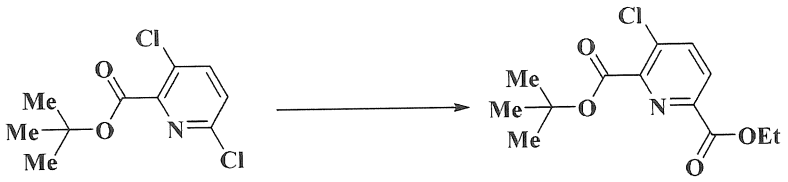
Ví dụ tham chiếu 4

Điều chế este của (Z)-tert-butyl với axit
6-(N'-etoxycacbamimidoyl)-3-(2-oxo-oxazolidin-3-yl)picolinic (hợp chất ban đầu của Ví dụ điều chế 12)

Ví dụ điều chế tham chiếu 4-1

Điều chế este của 6-etyl-2-tert-butyl với axit 3-clopyridin-2,6-dicacboxylic

[Công thức hóa học 103]



Bổ sung natri axetat (9,3 g, 0,11 mol), paladi(II) axetat (0,51 g, 2,3 mmol) và 1,4-bis(diphenylphosphino)butan (1,9 g, 4,5 mmol) ở nhiệt độ phòng vào dung dịch etanol (0,11 L) chứa este của tert-butyl với axit 3,6-diclopicolinic (28 g, 0,11 mol), và hỗn hợp được khuấy dưới khí quyển cacbon monoxit (4 MPa) ở 110°C trong 2 giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung dung dịch nước natri hydro cacbonat bão hòa vào hỗn hợp phản ứng, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không để cho ra este của 6-etyl-2-tert-butyl với axit 3-clopyridin-2,6-dicacboxylic (24 g, 84 mmol).

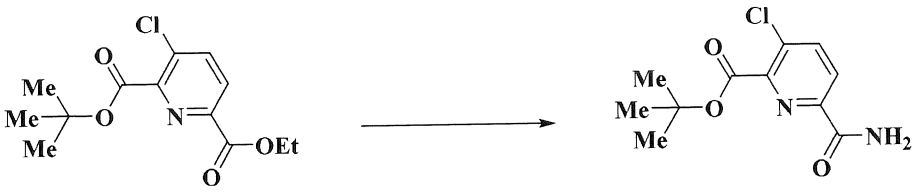
Hiệu suất: 74%

Tính chất vật lý: ^{1}H-NMR ($CDCl_3$): 8,09 (d, 1H), 7,88 (d, 1H), 4,46 (q, 2H), 1,64 (s, 9H), 1,43 (t, 3H)

Ví dụ điều chế tham chiếu 4-2

Điều chế este của tert-butyl với axit 6-cacbamoyl-3-clopicolic

[Công thức hóa học 104]



Bổ sung amoniac (dung dịch etanol 4%) (50 mL, 0,56 mol) ở nhiệt độ phòng vào dung dịch etanol (30 mL) chứa este của 6-etyl-2-tert-butyl với axit 3-clopyridin-2,6-dicacboxylic (24 g, 84 mmol), và hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ phòng qua đêm. Sau khi kết thúc phản ứng, hỗn hợp phản ứng được cô đặc trong môi trường chân không để cho ra este của tert-butyl với axit 6-cacbamoyl-3-clopicolic (20 g, 78 mmol).

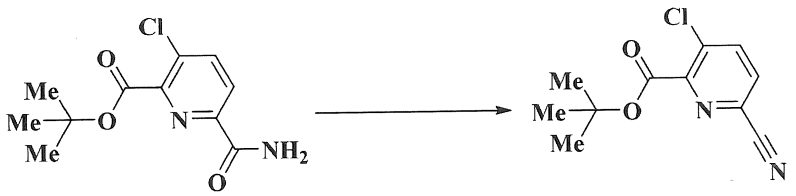
Hiệu suất: 93%

Tính chất vật lý: ^{1}H-NMR ($CDCl_3$): 8,20 (d, 1H), 7,92 (d, 1H), 7,73 (s, 1H), 5,83 (s, 1H), 1,64 (s, 9H)

Ví dụ điều chế tham chiếu 4-3

Điều chế este của tert-butyl với axit 3-clo-6-xyanopicolic

[Công thức hóa học 105]



Bổ sung phosphoryl clorua (22 mL, 0,23 mol) ở 0°C vào dung dịch N,N-dimetylformamit (0,18 L) chứa este tert-butyl với axit 6-cacbamoyl-3-clopicolic (20 g, 78 mmol), và hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ phòng trong một giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung dung dịch nước natri hydro cacbonat bão hòa vào hỗn hợp phản ứng, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không để cho ra este của tert-butyl với axit 3-clo-6-xyanopicolic (16 g, 66 mmol).

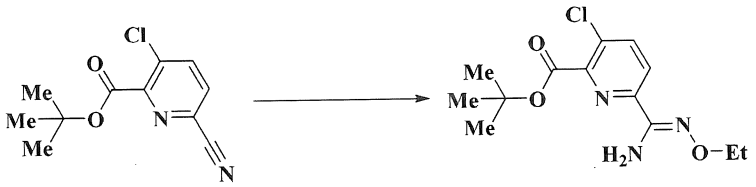
Hiệu suất: 85%

Tính chất vật lý: ^{1}H-NMR ($CDCl_3$): 7,91 (d, 1H), 7,69 (d, 1H), 1,64 (s, 9H)

Ví dụ điều chế tham chiếu 4-4

Điều chế este của (Z)-tert-butyl với axit 3-clo-6-(N'-etoxycacbamimidoyl)picolinic

[Công thức hóa học 106]



Bổ sung natri metoxit (28% dung dịch metanol) (0,43 mL, 4,2 mmol) ở 0°C vào dung dịch metanol (14 mL) chứa este của tert-butyl với axit 3-clo-6-xyanopicolic (1,0 g, 4,2 mmol), và hỗn hợp được khuấy ở 0°C trong một giờ. Sau đó, bổ sung O-etylhydroxylamin hydroclorua (0,41 g, 4,2 mmol), và hỗn hợp được khuấy trong

một giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung nước vào hỗn hợp phản ứng, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không. Phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra este của (Z)-tert-butyl với axit 3-clo-6-(N'-etoxycacbamimidoyl)picolinic (1,21 g, 4,0 mmol).

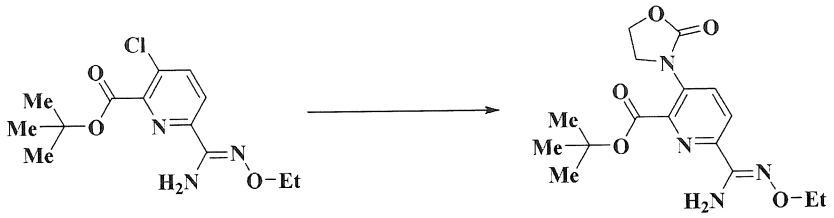
Hiệu suất: 96%

Tính chất vật lý: ^{1}H-NMR ($CDCl_3$): 7,98 (d, 1H), 7,70 (d, 1H), 5,49 (s, 2H), 4,17 (q, 2H), 1,64 (s, 9H), 1,33 (t, 3H)

Ví dụ điều chế tham chiếu 4-5

Điều chế este của (Z)-tert-butyl với axit 6-(N'-etoxycacbamimidoyl)-3-(2-oxo-oxazolidin-3-yl)picolinic

[Công thức hóa học 107]



Bổ sung 2-oxazolidon (0,30 g, 3,3 mmol), xesi cacbonat (2,2 g, 6,6 mmol), 4,5-bis(diphenylphosphino)-9,9-dimetylxanthen (0,39 g, 0,67 mmol), và tris(dibenzylidenaxeton)dipaladi(0) (0,31 g, 0,30 mmol) ở nhiệt độ phòng vào dung dịch toluen (8,0 mL) chứa este của (Z)-tert-butyl với axit 3-clo-6-(N'-etoxycacbamimidoyl)picolinic (0,50 g, 1,7 mmol), và hỗn hợp được khuấy ở 110°C trong 4 giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung dung dịch nước amoni clorua bão hòa vào hỗn hợp phản ứng, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không. Phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra este của (Z)-tert-butyl với axit 6-(N'-etoxycacbamimidoyl)-3-(2-oxo-oxazolidin-3-yl)picolinic (48 mg, 0,14 mmol).

Hiệu suất: 8%

Tính chất vật lý: ^{1}H-NMR ($CDCl_3$): 8,10 (d, 2H), 5,47 (s, 2H), 4,17 (q, 2H), 3,10 (m, 4H), 1,63 (s, 9H), 1,33 (t, 3H)

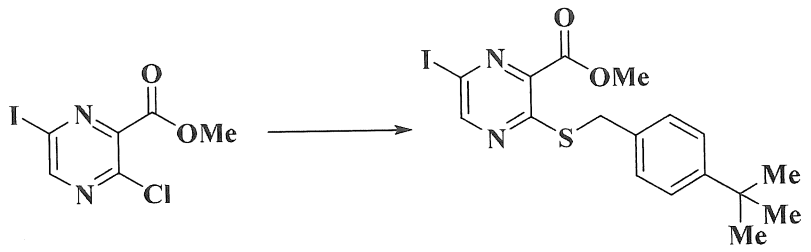
Ví dụ tham chiếu 5

Điều chế axit (Z)-3-((4-(tert-butyl)benzyl)thio)-6-(N'-etoxycacbamimidoyl)pyrazin-2-cacboxylic (hợp chất ban đầu của Ví dụ điều chế 13-1)

Ví dụ điều chế tham chiếu 5-1

Điều chế este của metyl với axit 3-((4-(tert-butyl)benzyl)thio)-6-iodpyrazin-2-cacboxylic

[Công thức hóa học 108]



Bổ sung xesi cacbonat (4,5 g, 14 mmol) và 4-(tert-butyl)benzylthiol (1,5 mL, 8,4 mmol) ở nhiệt độ phòng vào dung dịch N,N-dimetylaxetamit (25 mL) chứa este của metyl với axit 3-clo-6-iodpyrazin-2-cacboxylic (2,0 g, 7,0 mmol), và hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ phòng trong một giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung dung dịch nước amoni clorua bão hòa vào hỗn hợp phản ứng, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không. Phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra este của metyl với axit 3-((4-(tert-butyl)benzyl)thio)-6-iodpyrazin -2-cacboxylic (0,82 g, 1,9 mmol).

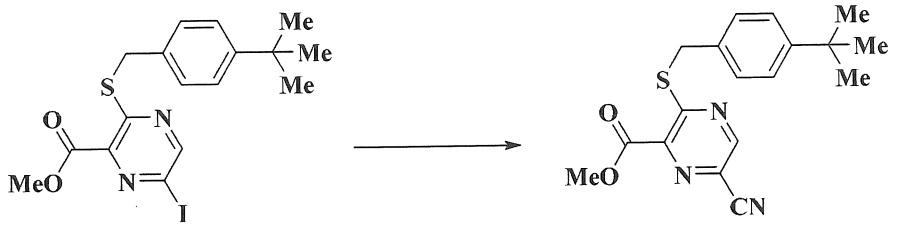
Hiệu suất: 26%

Tính chất vật lý: ^{1}H-NMR ($CDCl_3$): 8,77 (s, 1H), 7,32 (s, 4H), 4,32 (s, 2H), 1,30 (s, 9H)

Ví dụ điều chế tham chiếu 5-2

Điều chế este của metyl với axit
3-((4-(tert-butyl)benzyl)thio)-6-xyanopyrazin-2-cacboxylic

[Công thức hóa học 109]



Bổ sung đồng xyanua(I) (0,20 g, 2,2 mmol) ở nhiệt độ phòng vào dung dịch N-metyl-2-pyrrolidon (15 mL) chứa este của metyl với axit 3-((4-(tert-butyl)benzyl)thio)-6-iodpyrazin-2-cacboxylic (0,81 g, 1,8 mmol), và hỗn hợp được khuấy ở 120°C trong 2 giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung nước vào hỗn hợp phản ứng, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được làm khô qua magie sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không. Phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra este của metyl với axit 3-((4-(tert-butyl)benzyl)thio)-6-xyanopyrazin-2-cacboxylic (0,50 g, 1,5 mmol).

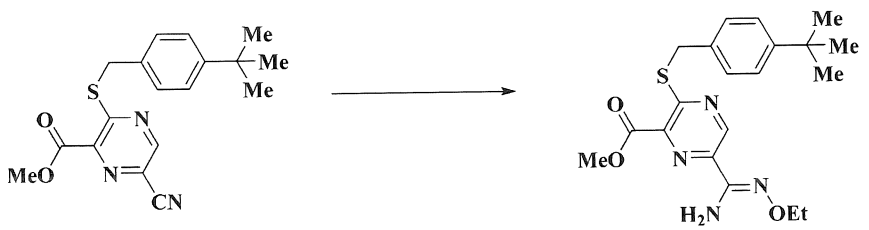
Hiệu suất: 80%

Tính chất vật lý: ^{1}H-NMR ($CDCl_3$): 8,80 (s, 1H), 7,33 (s, 4H), 4,40 (s, 2H), 1,30 (s, 9H)

Ví dụ điều chế tham chiếu 5-3

Điều chế este của metyl với axit
(Z)-3-((4-(tert-butyl)benzyl)thio)-6-(N'-etoxycacbamimidoyl)pyrazin-2-cacboxylic

[Công thức hóa học 110]



Bổ sung natri metoxit (0,28 mL, 1,4 mmol, 5,0 M dung dịch metanol) vào dung dịch metanol (10 mL) chứa este của metyl với axit 3-((4-(tert-butyl)benzyl)thio)-

6-xyanopyrazin-2-cacboxylic (0,48 g, 1,4 mmol), và hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ phòng trong một giờ. Sau đó, bổ sung O-etylhydroxylamin hydroclorua (0,18 g, 1,8 mmol), và hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ phòng trong một giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, hỗn hợp phản ứng được cô đặc trong môi trường chân không. Bổ sung dung dịch nước natri hydro cacbonat bão hòa và etyl axetat vào phần còn sót lại, và thực hiện quá trình chiết xuất. Lớp hữu cơ được làm khô qua natri sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không để cho ra este của metyl với axit (Z)-3-((4-(tert-butyl)benzyl)thio)-6-(N'-etoxycacbamimidoyl)pyrazin-2-cacboxylic (0,58 g, 1,4 mmol).

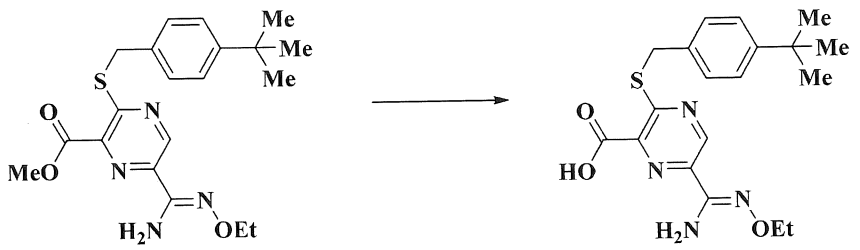
Hiệu suất: 100%

Tính chất vật lý: ^{1}H-NMR ($CDCl_3$): 9,17 (s, 1H), 7,35-7,30 (m, 4H), 5,42 (s, 2H), 4,40 (s, 2H), 4,20 (q, 2H), 3,97 (s, 3H), 1,35 (t, 3H), 1,30 (s, 9H)

Ví dụ điều chế tham chiếu 5-4

Điều chế axit (Z)-3-((4-(tert-butyl)benzyl)thio)-6-(N'-etoxycacbamimidoyl)pyrazin-2-cacboxylic

[Công thức hóa học 111]



Bổ sung liti hydroxit monohydrat (0,091 g, 2,2 mmol) vào dung dịch chứa este của metyl với axit (Z)-3-((4-(tert-butyl)benzyl)thio)-6-(N'-etoxycacbamimidoyl) pyrazin-2-cacboxylic (0,58 g, 1,4 mmol) trong dung môi hỗn hợp gồm tetrahydrofuran (4,0 mL) và nước (2,0 mL), và hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ phòng trong một giờ. Bổ sung axit clohydric 1 N và etyl axetat vào hỗn hợp phản ứng, và thực hiện quá trình chiết xuất. Lớp hữu cơ được làm khô qua natri sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không để cho ra axit (Z)-3-((4-(tert-butyl)benzyl)thio)-6-(N'-etoxycacbamimidoyl)pyrazin-2-cacboxylic (0,58 g, 1,5 mmol).

Hiệu suất: 100%

Tính chất vật lý: ^{1}H-NMR ($CDCl_3$): 9,29 (s, 1H), 7,36-7,30 (m, 4H), 5,33 (br-s, 2H), 4,42 (s, 2H), 4,22 (q, 2H), 1,36 (t, 3H), 1,29 (s, 9H)

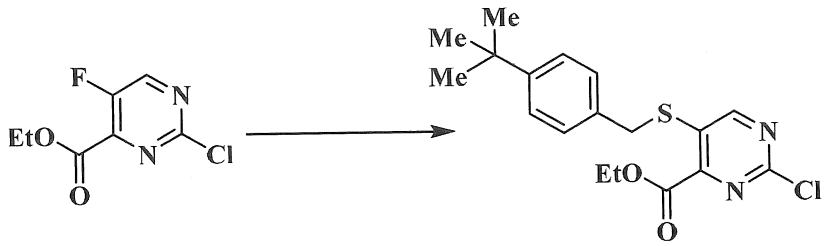
Ví dụ tham chiếu 6

Điều chế axit 5-((4-(tert-butyl)benzyl)thio)-2-clopyrimidin-4-cacboxylic (hợp chất ban đầu của Ví dụ điều chế 14-1)

Ví dụ điều chế tham chiếu 6-1

Điều chế este của etyl với axit 5-((4-(tert-butyl)benzyl)thio)-2-clopyrimidin-4-cacboxylic

[Công thức hóa học 112]



Bổ sung 4-(tert-butyl)benzylthiol (4,3 mL, 23 mmol) và natri hydrua (0,93 g, 23 mmol) dưới khí quyển agon ở 0°C vào dung dịch tetrahydrofuran (100 mL) chứa este của etyl với axit 2-clo-5-flopyrimidin-4-cacboxylic (4,8 g, 23 mmol), và hỗn hợp được khuấy ở cùng nhiệt độ trong một giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung dung dịch nước amoni clorua bão hòa vào hỗn hợp phản ứng, và thực hiện quá trình chiết xuất etyl axetat. Lớp hữu cơ được làm khô qua natri sulfat khan và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không. Phần còn sót lại được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel để cho ra este của etyl với axit 5-((4-(tert-butyl)benzyl)thio)-2-clopyrimidin -4-cacboxylic (5,4 g, 15 mmol).

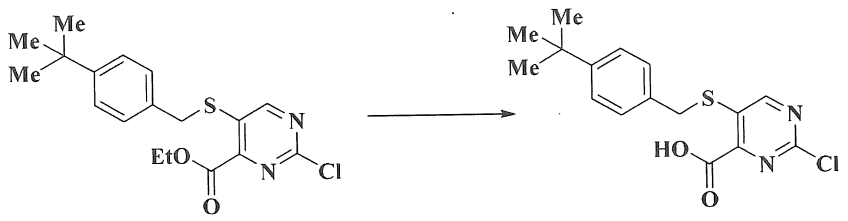
Hiệu suất: 64%

Tính chất vật lý: ^{1}H-NMR ($CDCl_3$): 8,55 (s, 1H), 7,34 (d, 2H), 7,27 (d, 2H), 4,49 (q, 2H), 4,17 (s, 2H), 1,43 (t, 3H), 1,30 (s, 9H)

Ví dụ điều chế tham chiếu 6-2

Điều chế axit 5-((4-(tert-butyl)benzyl)thio)-2-clopyrimidin-4-cacboxylic

[Công thức hóa học 113]



Bổ sung liti hydroxit monohydrat (0,68 g, 16 mmol) vào dung dịch tetrahydrofuran:nước (2:1) (90 mL) chứa este của etyl với axit 5-((4-(tert-butyl)benzyl)thio)-2-clopyrimidin-4-cacboxylic (3,3 g, 16 mmol), và hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ phòng trong một giờ. Sau khi kết thúc phản ứng, bổ sung dung dịch nước axit clohydric 2 N để điều chỉnh pH đến 2, và hỗn hợp được chiết xuất với etyl axetat. Lớp hữu cơ được rửa với dung dịch nước natri clorua bão hòa, được làm khô qua magie sulfat khan, và sau đó được cô đặc trong môi trường chân không để cho ra axit 5-((4-(tert-butyl)benzyl)thio)-2-clopyrimidin-4-cacboxylic (2,2 g, 12 mmol).

Hiệu suất: 76%

Sau đây, các ví dụ phối chế được thể hiện, nhưng sáng chế không bị giới hạn ở đó. Trong các ví dụ phối chế này, "phần" có nghĩa là phần theo trọng lượng.

Ví dụ phối chế 1

Hợp chất của sáng chế	10 phần
Xylen	70 phần
N-metylpyrrolidon	10 phần
Hỗn hợp của polyoxyetylen nonylphenyl ete và canxi alkylbenzen sulfonat	10 phần

Các thành phần nêu trên được trộn đều để hòa tan nhằm cho ra chế phẩm cô đặc có thể nhũ hóa được.

Ví dụ phối chế 2

Hợp chất của sáng chế	3 phần

Bột đất sét	82 phần
Bột diatomit	15 phần

Các thành phần nêu trên được trộn đều và sau đó được tán nhỏ để cho ra chế phẩm dạng bột.

Ví dụ phối chế 3

Hợp chất của sáng chế	5 phần
Hỗn hợp của bột bentonit và bột đất sét	90 phần
Canxi lignosulfonat	5 phần

Các thành phần nêu trên được trộn đều. Sau khi bổ sung lượng nước thích hợp, hỗn hợp được nhào trộn, được tạo hạt và được làm khô để cho ra chế phẩm dạng hạt.

Ví dụ phối chế 4

Hợp chất của sáng chế	20 phần
Cao lanh và axit silixic tổng hợp có độ phân tán cao	75 phần
Hỗn hợp của polyoxyetylen nonylphenyl ete và canxi alkylbenzen sulfonat	5 phần

Các thành phần nêu trên được trộn đều và sau đó được tán nhỏ để cho ra chế phẩm dạng bột có thể thấm ướt được.

Ví dụ thử nghiệm 1

Thử nghiệm hiệu lực diệt cỏ hậu nảy mầm đối với cỏ dại trên lúa

Cỏ lồng vực (*Echinochloa crus-galli*) được gieo hạt và trồng trong các ống nghiệm có chứa môi trường thủy canh trong buồng khí hậu nhân tạo hoặc phytotron. Các chế phẩm chất nông dược có chứa các hợp chất theo sáng chế dưới dạng các thành phần hoạt tính được điều chế theo Ví dụ phối chế 1 được pha loãng riêng với nước sao cho nồng độ của thành phần hoạt tính sẽ là một nồng độ được xác định trước và được sử dụng để xử lý cỏ lồng vực. Cỏ lồng vực được trồng trong buồng khí hậu nhân tạo ở

nhiệt độ 30°C dưới điều kiện ánh sáng đầy đủ. Sáu ngày sau khi xử lý chất nông dược, hiệu quả diệt cỏ được đánh giá so với nhóm không xử lý theo các tiêu chí sau.

Tiêu chí về tác dụng diệt cỏ (mức độ ức chế sinh trưởng) và độc tính thực vật

Điểm 4 hiệu quả diệt cỏ từ 90% đến 100%

Điểm 3 hiệu quả diệt cỏ từ 70% đến 89%

Điểm 2 hiệu quả diệt cỏ từ 40% đến 69%

Điểm 1 hiệu quả diệt cỏ từ 1% đến 39%

Điểm 0 hiệu quả diệt cỏ là 0%

Theo kết quả của ví dụ thử nghiệm 1, trong số các hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1) của sáng chế, các hợp chất được đánh số 1-6, 1-7, 1-11, 1-12, 1-13, 1-15, 1-16, 1-17, 1-18, 1-19, 1-22, 1-39, 1-41, 1-51, 1-54, 1-57, 1-58, 1-61, 1-63, 1-64, 1-65, 1-66, 1-67, 1-69, 1-70, 1-71, 1-74, 1-75, 1-76, 1-77, 1-80, 1-84, 1-86, 1-87, 1-90, 1-102, 1-103, 1-104, 1-107, 1-108, 1-109, 1-110, 1-111, 1-114, 1-115, 1-116, 1-117, 1-118, 1-121, 1-124, 1-125, 1-126, 1-128, 1-131, 1-132, 1-134, 1-135, 1-136, 1-139, 1-140, 1-141, 1-143, 1-148, 1-151, 1-154, 1-155, 1-156, 1-157, 1-158, 1-160, 1-161, 1-163, 1-164, 1-165, 1-167, 1-174, 1-175, 1-177, 1-179, 1-180, 1-181, 1-183, 1-184, 1-185, 1-186, 1-188, 1-189, 1-190, 1-191, 1-192, 1-193, 1-194, 1-195, 1-196, 1-198, 1-200, 1-204, 1-205, 1-206, 1-208, 1-209, 1-210, 1-211, 1-214, 1-216, 1-217, 1-220, 1-221, 1-225, 1-226, 1-227, 1-228, 1-229, 1-233, 1-234, 1-237, 1-238, 1-239, 1-240, 1-241, 1-242, 1-243, 1-245, 1-246, 1-249, 1-252, 1-255, 1-256, 1-257, 1-262, 1-263, 1-264, 1-265, 1-269, 1-270, 1-271, 1-272, 1-273, 1-274, 1-275, 1-279, 1-280, 1-283, 1-286, 1-288, 1-289, 1-290, 1-291, 1-301, 1-304, 1-305, 1-306, 1-309, 1-313, 1-314, 1-322, 1-323, 1-324, 1-325, 1-327, 1-336, 1-337, 1-338, 1-339, 1-340, 1-341, 1-342, 1-343, 1-350, 1-355, 1-356, 1-360, 1-361, 1-362, 1-363, 1-364, 1-368, 1-369, 1-370, 1-373, 1-379, 1-380, 1-382, 1-390, 1-391, 1-392, 1-393, 1-394, 1-395, 1-396, 1-397, 1-398, 1-399, 1-400, 1-401, 1-402, 1-403, 2-1, 2-3, 2-5, 2-7, 2-10, 2-11, 2-16, 2-18, 2-21, 2-23, 2-25, 2-28, 2-31, 2-32, 2-33, 2-35, 2-36, 2-37, 2-42, 2-44, 2-45, 2-46, 2-48, 2-49, 2-50, 2-51, 2-52, 2-54, 2-55, 2-56, 2-57, 2-58, 2-59, 2-61, 2-62, 2-63, 2-65, 2-66, 2-67, 2-68, 2-69, 2-70, 2-71, 2-72, 2-73, 2-77, 2-80, 2-82, 2-83, 2-85, 2-89, 2-90, 2-91, 2-92, 2-95, 2-97, 2-101, 2-103, 2-105, 2-106, 2-107, 2-108, 2-109, 2-122, 2-123,

2-126, 2-135, 2-136, 2-138, 2-147, 2-159, 2-163, 2-165, 2-181, 2-204, 2-216, 2-220, 2-221, 2-223, 2-224, 2-225, 2-226, 2-227, 2-243, 2-249, 2-250, 2-259, 2-262, 2-266, 2-270, 2-275, 2-276, 2-277, 2-281, 2-283, 2-285, 2-286, 2-288, 2-302, 2-310, 2-314, 2-315, 2-317, 2-319, 2-321, 2-325, 2-327, 2-328, 2-329, 2-330, 2-331, 2-334, 2-336, 2-337, 2-338, 2-339, 2-340, 2-341, 2-343, 2-344, 2-345, 2-346, 3-10, 3-11, 3-12, 3-13, 3-17, 3-19, 3-21, 3-23, 3-24, 3-27, 3-29, 3-31, 3-33, 3-36, 3-37, 3-39, 3-41, 3-43, 3-44, 3-47, 3-48, 3-50, 3-51, 3-52, 3-54, 3-56, 3-60, 3-62, 3-63, 3-64, 3-65, 3-66, 3-67, 3-68, 3-69, 3-70, 3-71, 3-72, 3-73, 3-84, 3-90, 3-91, 3-101, 3-115, 3-120, 3-121, 3-130, 3-134, 4-14, 4-15, 4-16, 4-22, 4-46, 4-49, 4-50, 4-54, 4-61, 4-67, 4-68, 4-108, 4-109, 4-111, 4-117, 4-118, 4-119, 4-120, 4-121, 5-97, 5-100, 6-89, 7-6, 7-17, 7-46, 7-48, 8-6, 8-9, 8-42, và 8-44 đã thể hiện hiệu quả diệt cỏ đối với cỏ lồng vực ở điểm 3 hoặc cao hơn theo các tiêu chí trên khi áp dụng ở nồng độ thành phần hoạt tính là 10 ppm.

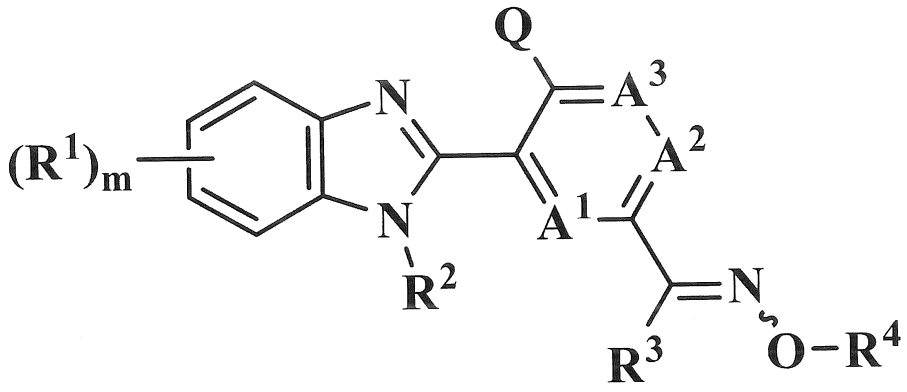
Khả năng áp dụng công nghiệp

Hợp chất dị vòng ngưng tụ chứa nitơ của sáng chế hoặc muối của nó là thuốc diệt cỏ dùng trong nông nghiệp và trồng trọt có hiệu quả cao.

YÊU CẦU BẢO HỘ

1. Hợp chất được biểu diễn bằng công thức chung (1):

[Công thức hóa học 1]



(1)

{trong đó

R^1 là

(a1) nguyên tử halogen;

(a2) nhóm xyano;

(a3) nhóm nitro;

(a4) nhóm formyl;

(a5) nhóm cacboxyl;

(a6) nhóm (C_1-C_6) alkyl;

(a7) nhóm (C_2-C_6) alkenyl;

(a8) nhóm (C_2-C_6) alkynyl;

(a9) nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl;

(a10) nhóm halo (C_1-C_6) alkyl;

(a11) nhóm halo (C_2-C_6) alkenyl;

(a12) nhóm halo (C_2-C_6) alkynyl;

(a13) nhóm halo (C_3-C_6) xycloalkyl;

(a14) nhóm hydroxy (C_1-C_6) alkyl;

(a15) nhóm hydroxy halo (C_1-C_6) alkyl;

(a16) nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl;

(a17) nhóm di-(C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl;

(a18) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl;

(a19) nhóm (C_1-C_6) alkoxy halo (C_1-C_6) alkyl;

(a20) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy halo (C_1-C_6) alkyl;

(a21) nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl;

(a22) nhóm (C_1-C_6) alkoxy;

(a23) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy;

(a24) nhóm (C_1-C_6) alkylthio;

(a25) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl;

(a26) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(a27) nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio;

(a28) nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl;

(a29) nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(a30) nhóm $R^8(R^9)N$ trong đó R^8 và R^9 có thể giống nhau hoặc khác nhau và mỗi ký hiệu là nguyên tử hydro, nhóm hydroxyl, nhóm amino, nhóm di-(C_1-C_6) alkylamino, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl, nhóm (C_2-C_6) alkenyl, nhóm (C_2-C_6) alkynyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_2-C_6) alkenyloxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_2-C_6) alkenyl, nhóm halo (C_2-C_6) alkynyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_3-C_6) xycloalkyl, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm xyano (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkylcacbonyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylcacbonyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxycacbonyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfanylcacbonyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl, nhóm N-(C_1-C_6) alkylcacboxamit, nhóm N,N-di-(C_1-C_6) alkylcacboxamit, nhóm N-(C_1-C_6) alkylsulfamoyl, nhóm N,N-di-(C_1-C_6) alkylsulfamoyl, nhóm N-halo (C_1-C_6) alkylcacboxamit, nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl, nhóm di-(C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkylcacbonyl, nhóm thietanyl, nhóm

1,1-dioxothietanyl, nhóm tetrahydrofuranyl, nhóm thiazolyl, nhóm 2-oxotetrahydrofuranyl, nhóm phenyl, nhóm phenyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 5 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nhóm chỉ bao gồm nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl, hoặc nhóm phenyl (C_1-C_6) alkyl, hoặc R^8 và R^9 có thể ghép với nhau để tạo thành vòng có từ 4 đến 6 phần tử;

(a31) nhóm $R^{10}(R^{11})N$ (C_1-C_6) alkyl trong đó R^{10} và R^{11} có thể giống nhau hoặc khác nhau và mỗi ký hiệu là nguyên tử hydro, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkylcacbonyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylcacbonyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxycacbonyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, hoặc nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl, hoặc R^{10} và R^{11} có thể ghép với nhau để tạo thành vòng có từ 4 đến 6 phần tử;

(a32) nhóm (C_1-C_6) alkylthio (C_1-C_6) alkyl;

(a33) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl (C_1-C_6) alkyl;

(a34) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl (C_1-C_6) alkyl;

(a35) nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio (C_1-C_6) alkyl;

(a36) nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl (C_1-C_6) alkyl;

(a37) nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl (C_1-C_6) alkyl;

(a38) nhóm (C_1-C_6) alkylthio halo (C_1-C_6) alkyl;

(a39) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl halo (C_1-C_6) alkyl;

(a40) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl halo (C_1-C_6) alkyl;

(a41) nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio halo (C_1-C_6) alkyl;

(a42) nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl halo (C_1-C_6) alkyl;

(a43) nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl halo (C_1-C_6) alkyl;

(a44) nhóm (C_1-C_6) alkylcacbonyl;

(a45) nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl;

(a46) nhóm halo (C_1-C_6) alkylcacbonyl;

(a47) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxycacbonyl;

(a48) nhóm (C_1-C_6) alkylcacbonyloxy;

(a49) nhóm halo (C_1-C_6) alkylcacbonyloxy;

(a50) nhóm $R^{10}(R^{11})N$ cacbonyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên;

(a51) nhóm $R^{10}(R^{11})N$ cacbonyloxy trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên;

(a52) nhóm $R^{10}(R^{11})N$ sulfonyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên;

(a53) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyloxy;

(a54) nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyloxy;

(a55) nhóm (C_1-C_6) alkoxyimino (C_1-C_3) alkyl;

(a56) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxyimino (C_1-C_3) alkyl;

(a57) nhóm phenyl;

(a58) nhóm phenyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 5 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ (C_1-C_6) alkyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(a59) nhóm pyridyl;

(a60) nhóm pyridyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 4 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ (C_1-C_6) alkyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ trong đó R^{10} và R^{11} giống

như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(a61) nhóm pyrazolyl;

(a62) nhóm pyrazolyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 3 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ (C_1-C_6) alkyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(a63) nhóm phenoxy;

(a64) nhóm phenoxy có, ở trên vòng, từ 1 đến 5 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ (C_1-C_6) alkyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(a65) nhóm dioxolanyl;

(a66) nhóm dioxolanyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 4 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm cacbonyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ (C_1-C_6) alkyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(a67) nhóm dioxanyl;

(a68) nhóm dioxanyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 6 các nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm cacbonyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ (C_1-C_6) alkyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(a69) nhóm (C_1-C_6) alkylen được tạo thành cùng với một nhóm thế liền kề, trong đó nhóm (C_1-C_6) alkylen có thể được thế với từ 1 đến 4 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm phenyl, và nhóm (C_1-C_6) alkyl; hoặc

(a70) nhóm metylendioxy được tạo thành cùng với một nhóm thế liền kề, trong đó nhóm metylendioxy có thể được thế bằng 1 hoặc 2 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm phenyl, và nhóm (C_1-C_6) alkyl,

trong đó, khi m là số nguyên lớn hơn hoặc bằng 2, các R^1 có thể giống nhau hoặc khác nhau,

m là 0, 1, 2, 3, hoặc 4,

R^2 là

(b1) nguyên tử hydro;

(b2) nhóm (C_1-C_6) alkyl;

(b3) nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl;

(b4) nhóm (C_2-C_6) alkenyl;

(b5) nhóm (C_2-C_6) alkynyl;

(b6) nhóm halo (C_1-C_6) alkyl;

(b7) nhóm halo (C_2-C_6) alkenyl;

(b8) nhóm halo (C_2-C_6) alkynyl;

(b9) nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl;

(b10) nhóm (C_1-C_6) alkylthio (C_1-C_6) alkyl;

(b11) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl (C_1-C_6) alkyl;

(b12) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl (C_1-C_6) alkyl;

(b13) nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl;

(b14) nhóm (C_1-C_6) alkoxy;

(b15) nhóm (C_1-C_6) alkylcacbonyl;

(b16) nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl;

(b17) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy;

(b18) nhóm halo (C_1-C_6) alkylcacbonyl;

(b19) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxycacbonyl;

(b20) nhóm $R^{10}(R^{11})N$ cacbonyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên; hoặc

(b21) nhóm $R^{10}(R^{11})N$ sulfonyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên,

R^3 là

(c1) nguyên tử hydro;

(c2) nhóm halogen;

(c3) nhóm xyano;

(c4) nhóm cacboxyl;

(c5) nhóm cacboxamit;

(c6) nhóm (C_1-C_6) alkyl;

(c7) nhóm (C_2-C_6) alkenyl;

(c8) nhóm (C_2-C_6) alkynyl;

(c9) nhóm halo (C_1-C_6) alkyl;

(c10) nhóm halo (C_2-C_6) alkenyl;

(c11) nhóm halo (C_2-C_6) alkynyl;

(c12) nhóm $R^8(R^9)N$ trong đó R^8 và R^9 giống như trên;

(c13) nhóm (C_1-C_6) alkoxy;

(c14) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy;

(c15) nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl; hoặc

(c16) nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl (C_1-C_6) alkyl,

R^4 là

(d1) nguyên tử hydro;

(d2) nhóm (C_1-C_6) alkyl;

(d3) nhóm (C_2-C_6) alkenyl;

(d4) nhóm (C_2-C_6) alkynyl;

(d5) nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl;

(d6) nhóm halo (C_1-C_6) alkyl;

(d7) nhóm halo (C_2-C_6) alkenyl;

(d8) nhóm halo (C_2-C_6) alkynyl;

(d9) nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl;

(d10) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl;

(d11) nhóm (C_1-C_6) alkoxy halo (C_1-C_6) alkyl;

(d12) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy halo (C_1-C_6) alkyl;

(d13) nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl;

(d14) nhóm xyano (C_1-C_6) alkyl;

(d15) nhóm (C_1-C_6) alkylthio (C_1-C_6) alkyl;

(d16) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl (C_1-C_6) alkyl;

(d17) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl (C_1-C_6) alkyl;

(d18) nhóm cacboxyl (C_1-C_6) alkyl;

(d19) nhóm phenyl (C_1-C_6) alkyl;

(d20) nhóm phenyl (C_1-C_6) alkyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 5 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(d21) nhóm $R^{10}(R^{11})N$ alkyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên;

(d22) nhóm (C_1-C_6) alkylcacbonyl;

(d23) nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl;

(d24) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(d25) nhóm halo (C_1-C_6) alkylcacbonyl;

(d26) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxycacbonyl;

(d27) nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(d28) nhóm $R^{10}(R^{11})N$ cacbonyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên;

(d29) nhóm $R^{10}(R^{11})N$ sulfonyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên;

(d30) nhóm phenyl;

(d31) nhóm phenyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 5 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl; hoặc

(d32) nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl (C_1-C_6) alkyl,

A^1, A^2, và A^3 có thể giống nhau hoặc khác nhau và mỗi ký hiệu là CR^5 (trong đó R^5 là nguyên tử hydro, nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm

$R^{10}(R^{11})N$ trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, hoặc nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl) hoặc nguyên tử nitơ, và

Q là

(e1) nguyên tử halogen;

(e2) nhóm xyano;

(e3) nhóm nitro;

(e4) nhóm formyl;

(e5) nhóm (C_1-C_6) alkyl;

(e6) nhóm (C_2-C_6) alkenyl;

(e7) nhóm (C_2-C_6) alkynyl;

(e8) nhóm halo (C_1-C_6) alkyl;

(e9) nhóm halo (C_2-C_6) alkenyl;

(e10) nhóm halo (C_2-C_6) alkynyl;

(e11) nhóm (C_1-C_6) alkoxy;

(e12) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy;

(e13) nhóm hydroxy (C_1-C_6) alkyl;

(e14) nhóm dihydroxy (C_1-C_6) alkyl;

(e15) nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl;

(e16) nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_2-C_6) alkenyl;

(e17) nhóm $R^8(R^9)N$ trong đó R^8 và R^9 giống như trên;

(e18) nhóm dioxolanyl;

(e19) nhóm dioxolanyl có, ở trên vòng, 1 hoặc 2 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm cacbonyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ (C_1-C_6) alkyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6)

alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(e20) nhóm dioxanyl;

(e21) nhóm dioxanyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 3 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm cacbonyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ (C_1-C_6) alkyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(e22) nhóm phenyl;

(e23) nhóm phenyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 5 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, nhóm và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(e24) nhóm imidazolyl;

(e25) nhóm imidazolyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 3 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(e26) nhóm oxadiazolyl;

(e27) nhóm oxadiazolyl có, ở trên vòng, nhóm thế được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6)

xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(e28) nhóm $S(O)_pR^6$ trong đó R^6 là nguyên tử hydro, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_2-C_6) alkenyl, nhóm (C_2-C_6) alkynyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_2-C_6) alkenyl, nhóm halo (C_2-C_6) alkynyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl, nhóm halo (C_3-C_6) xycloalkyl, nhóm phenyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxyphenyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkylphenyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm tri-(C_1-C_6) alkylsilylphenyl (C_1-C_6) alkyl, hoặc nhóm $N(R^8)R^9$ trong đó R^8 và R^9 giống như trên, và p là 0, 1, hoặc 2;

(e29) nhóm $C(O)R^7$ trong đó R^7 là nhóm hydroxyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_2-C_6) alkenyl, nhóm (C_2-C_6) alkynyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_2-C_6) alkenyl, nhóm halo (C_2-C_6) alkynyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm phenyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm phenyl (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_2-C_6) alkenyloxy, nhóm (C_2-C_6) alkynyloxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_2-C_6) alkynyloxy, nhóm phenyloxy, nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm phenyl, nhóm thiazolidinyl, hoặc nhóm $N(R^8)R^9$ trong đó R^8 và R^9 giống như trên;

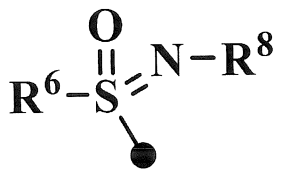
(e30) nhóm thiocacboxamit;

(e31) nhóm N-(C_1-C_6) alkylaminothiocacbonyl;

(e32) nhóm N,N-di-(C_1-C_6) alkylaminothiocacbonyl;

(e33)

[Công thức hóa học 2]



trong đó R^6 và R^8 giống như trên;

(e34) nhóm hydroxyimino (C_1-C_3) alkyl;

(e35) nhóm (C_1-C_6) alkoxyimino (C_1-C_3) alkyl;

(e36) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxyimino (C_1-C_3) alkyl;

(e37) nhóm hydrazono (C_1-C_3) alkyl;

(e38) nhóm (C_1-C_6) alkylhydrazono (C_1-C_3) alkyl;

(e39) nhóm di-(C_1-C_6) alkylhydrazono (C_1-C_3) alkyl;

(e40) nhóm phenyl (C_1-C_6) alkoxyimino (C_1-C_3) alkyl;

(e41) nhóm (C_2-C_6) alkenyloxyimino (C_1-C_3) alkyl;

(e42) nhóm di-(C_1-C_6) alkoxyphosphoryl;

(e43) nhóm di-(C_1-C_6) alkoxyphosphorylamino;

(e44) nhóm hydroxyl;

(e45) nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkoxy;

(e46) nhóm (C_1-C_6) alkoxyiminoamino (C_1-C_3) alkyl;

(e47) nhóm xyano (C_1-C_6) alkyl;

(e48) nhóm xyano (C_2-C_6) alkenyl;

(e49) nhóm dixyano (C_1-C_6) alkyl; hoặc

(e50) nhóm dixyano (C_2-C_6) alkenyl}, hoặc

muối của nó.

2. Hợp chất hoặc muối của nó theo điểm 1, trong đó

A^1, A^2, và A^3 là giống như điểm 1,

R^1 là

(a1) nguyên tử halogen;

(a2) nhóm xyano;

(a3) nhóm nitro;

(a4) nhóm formyl;

(a5) nhóm cacboxyl;

(a6) nhóm (C_1-C_6) alkyl;

(a7) nhóm (C_2-C_6) alkenyl;

(a8) nhóm (C_2-C_6) alkynyl;

(a9) nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl;

(a10) nhóm halo (C_1-C_6) alkyl;

(a11) nhóm halo (C_2-C_6) alkenyl;

(a12) nhóm halo (C_2-C_6) alkynyl;

(a14) nhóm hydroxy (C_1-C_6) alkyl;

(a15) nhóm hydroxy halo (C_1-C_6) alkyl;

(a16) nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl;

(a17) nhóm di-(C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl;

(a18) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl;

(a19) nhóm (C_1-C_6) alkoxy halo (C_1-C_6) alkyl;

(a20) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy halo (C_1-C_6) alkyl;

(a21) nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl;

(a22) nhóm (C_1-C_6) alkoxy;

(a23) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy;

(a24) nhóm (C_1-C_6) alkylthio;

(a25) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl;

(a26) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(a27) nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio;

(a28) nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl;

(a29) nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(a30) nhóm $R^8(R^9)N$ trong đó R^8 và R^9 có thể giống nhau hoặc khác nhau và mỗi ký hiệu là nguyên tử hydro, nhóm hydroxyl, nhóm amino, nhóm di-(C_1-C_6) alkylamino, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl, nhóm (C_2-C_6) alkenyl, nhóm (C_2-C_6) alkynyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_2-C_6) alkenyloxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_2-C_6) alkenyl, nhóm halo (C_2-C_6) alkynyl, nhóm halo (C_3-C_6) xycloalkyl, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm xyano (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkylcacbonyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylcacbonyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxycacbonyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfanylcacbonyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl, nhóm N-(C_1-C_6) alkylcacboxamit, nhóm N,N-di-(C_1-C_6) alkylcacboxamit, nhóm N-(C_1-C_6) alkylsulfamoyl, nhóm N,N-di-(C_1-C_6) alkylsulfamoyl, nhóm N-halo (C_1-C_6) alkylcacboxamit, nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl, nhóm di-(C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkylcacbonyl, nhóm thietanyl, nhóm 1,1-dioxothietanyl, nhóm tetrahydrofuranyl, nhóm thiazolyl, nhóm 2-oxotetrahydrofuranyl, nhóm phenyl, nhóm phenyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 5 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nhóm chỉ bao gồm nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, và nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, hoặc nhóm phenyl (C_1-C_6) alkyl, hoặc R^8 và R^9 có thể ghép với nhau để tạo thành vòng có từ 4 đến 6 phần tử;

(a31) nhóm $R^{10}(R^{11})N$ (C_1-C_6) alkyl trong đó R^{10} và R^{11} có thể giống nhau hoặc khác nhau và mỗi ký hiệu là nguyên tử hydro, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkylcacbonyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylcacbonyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxycacbonyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, hoặc nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl, hoặc R^{10} và R^{11} có thể ghép với nhau để tạo thành vòng có từ 4 đến 6 phần tử;

(a32) nhóm (C_1-C_6) alkylthio (C_1-C_6) alkyl;

(a33) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl (C_1-C_6) alkyl;

(a34) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl (C_1-C_6) alkyl;

(a35) nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio (C_1-C_6) alkyl;

(a36) nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl (C_1-C_6) alkyl;

(a37) nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl (C_1-C_6) alkyl;

(a44) nhóm (C_1-C_6) alkylcacbonyl;

(a45) nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl;

(a46) nhóm halo (C_1-C_6) alkylcacbonyl;

(a47) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxycacbonyl;

(a50) nhóm $R^{10}(R^{11})N$ cacbonyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên;

(a52) nhóm $R^{10}(R^{11})N$ sulfonyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên;

(a55) nhóm (C_1-C_6) alkoxyimino (C_1-C_3) alkyl;

(a56) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxyimino (C_1-C_3) alkyl;

(a57) nhóm phenyl;

(a58) nhóm phenyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 5 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ (C_1-C_6) alkyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(a59) nhóm pyridyl;

(a60) nhóm pyridyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 4 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ (C_1-C_6) alkyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(a61) nhóm pyrazolyl;

(a62) nhóm pyrazolyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 3 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ (C_1-C_6) alkyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(a63) nhóm phenoxy;

(a64) nhóm phenoxy có, ở trên vòng, từ 1 đến 5 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ (C_1-C_6) alkyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(a65) nhóm dioxolanyl;

(a66) nhóm dioxolanyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 4 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm cacbonyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ (C_1-C_6) alkyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(a67) nhóm dioxanyl;

(a68) nhóm dioxanyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 6 các nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm cacbonyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm

(C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ (C_1-C_6) alkyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(a69) nhóm (C_1-C_6) alkylen được tạo thành cùng với một nhóm thế liền kề, trong đó nhóm (C_1-C_6) alkylen có thể được thế với 1 hoặc 2 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm phenyl, và nhóm (C_1-C_6) alkyl; hoặc

(a70) nhóm metylendioxy được tạo thành cùng với một nhóm thế liền kề, trong đó nhóm metylendioxy có thể được thế bằng 1 hoặc 2 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm phenyl, và nhóm (C_1-C_6) alkyl,

trong đó, khi m là số nguyên lớn hơn hoặc bằng 2, các R^1 có thể giống nhau hoặc khác nhau,

m là 0, 1, 2, 3, hoặc 4,

R^2 là

(b1) nguyên tử hydro;

(b2) nhóm (C_1-C_6) alkyl;

(b3) nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl;

(b4) nhóm (C_2-C_6) alkenyl;

(b5) nhóm (C_2-C_6) alkynyl;

(b6) nhóm halo (C_1-C_6) alkyl;

(b7) nhóm halo (C_2-C_6) alkenyl;

(b8) nhóm halo (C_2-C_6) alkynyl;

(b9) nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl;

(b10) nhóm (C_1-C_6) alkylthio (C_1-C_6) alkyl;

(b11) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl (C_1-C_6) alkyl;

(b12) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl (C_1-C_6) alkyl;

(b13) nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl;

(b15) nhóm (C_1-C_6) alkylcacbonyl;

(b16) nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl;

(b18) nhóm halo (C_1-C_6) alkylcacbonyl; hoặc

(b21) nhóm $R^{10}(R^{11})N$ sulfonyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên,

R^3 là

(c1) nguyên tử hydro;

(c2) nhóm halogen;

(c3) nhóm xyano;

(c4) nhóm cacboxyl;

(c5) nhóm cacboxamit;

(c6) nhóm (C_1-C_6) alkyl;

(c9) nhóm halo (C_1-C_6) alkyl;

(c12) nhóm $R^8(R^9)N$ trong đó R^8 và R^9 giống như trên;

(c13) nhóm (C_1-C_6) alkoxy;

(c14) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy;

(c15) nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl; hoặc

(c16) nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl (C_1-C_6) alkyl,

R^4 là

(d1) nguyên tử hydro;

(d2) nhóm (C_1-C_6) alkyl;

(d3) nhóm (C_2-C_6) alkenyl;

(d4) nhóm (C_2-C_6) alkynyl;

(d5) nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl;

(d6) nhóm halo (C_1-C_6) alkyl;

(d7) nhóm halo (C_2-C_6) alkenyl;

(d8) nhóm halo (C_2-C_6) alkynyl;

(d9) nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl;

(d10) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl;

(d13) nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl;

(d14) nhóm xyano (C_1-C_6) alkyl;

(d15) nhóm (C_1-C_6) alkylthio (C_1-C_6) alkyl;

(d16) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl (C_1-C_6) alkyl;

(d17) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl (C_1-C_6) alkyl;

(d18) nhóm cacboxyl (C_1-C_6) alkyl;

(d19) nhóm phenyl (C_1-C_6) alkyl;

(d20) nhóm phenyl (C_1-C_6) alkyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 5 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(d22) nhóm (C_1-C_6) alkylcacbonyl;

(d23) nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl;

(d24) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(d25) nhóm halo (C_1-C_6) alkylcacbonyl;

(d26) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxycacbonyl;

(d27) nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(d30) nhóm phenyl;

(d31) nhóm phenyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 5 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm

formyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl; hoặc

(d32) nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl (C_1-C_6) alkyl, và

Q là

(e1) nguyên tử halogen;

(e2) nhóm xyano;

(e4) nhóm formyl;

(e5) nhóm (C_1-C_6) alkyl;

(e6) nhóm (C_2-C_6) alkenyl;

(e7) nhóm (C_2-C_6) alkynyl;

(e8) nhóm halo (C_1-C_6) alkyl;

(e11) nhóm (C_1-C_6) alkoxy;

(e12) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy;

(e13) nhóm hydroxy (C_1-C_6) alkyl;

(e14) nhóm dihydroxy (C_1-C_6) alkyl;

(e15) nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl;

(e16) nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_2-C_6) alkenyl;

(e17) nhóm $R^8(R^9)N$ trong đó R^8 và R^9 giống như trên;

(e18) nhóm dioxolanyl;

(e19) nhóm dioxolanyl có, ở trên vòng, 1 hoặc 2 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nhóm cacbonyl và nhóm (C_1-C_6) alkyl;

(e20) nhóm dioxanyl;

(e21) nhóm dioxanyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 3 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm

formyl, nhóm cacbonyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ (C_1-C_6) alkyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(e22) nhóm phenyl;

(e23) nhóm phenyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 5 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(e24) nhóm imidazolyl;

(e25) nhóm imidazolyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 3 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(e26) nhóm oxadiazolyl;

(e27) nhóm oxadiazolyl có, ở trên vòng, nhóm thế được chọn từ nguyên tử halogen, nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm $R^{10}(R^{11})N$ trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, và nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(e28) nhóm $S(O)_pR^6$ trong đó R^6 là nguyên tử hydro, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_2-C_6) alkenyl, nhóm (C_2-C_6) alkynyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_2-C_6)

alkenyl, nhóm halo (C_2-C_6) alkynyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl, nhóm halo (C_3-C_6) xycloalkyl, nhóm phenyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxyphenyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkylphenyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm tri-(C_1-C_6) alkylsilylphenyl (C_1-C_6) alkyl, hoặc nhóm $N(R^8)R^9$ trong đó R^8 và R^9 giống như trên, và p là 0, 1, hoặc 2;

(e29) nhóm $C(O)R^7$ trong đó R^7 là nhóm hydroxyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_2-C_6) alkenyl, nhóm (C_2-C_6) alkynyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_2-C_6) alkenyl, nhóm halo (C_2-C_6) alkynyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm phenyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm phenyl (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_2-C_6) alkenyloxy, nhóm (C_2-C_6) alkynyloxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkoxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy, nhóm halo (C_2-C_6) alkynyloxy, nhóm phenyloxy, nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm phenyl, nhóm thiazolidinyl, hoặc nhóm $N(R^8)R^9$ trong đó R^8 và R^9 giống như trên;

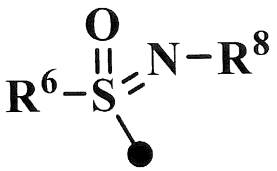
(e30) nhóm thiocacboxamit;

(e31) nhóm N-(C_1-C_6) alkylaminothiocacbonyl;

(e32) nhóm N,N-di-(C_1-C_6) alkylaminothiocacbonyl;

(e33)

[Công thức hóa học 3]



trong đó R^6 và R^8 giống như trên;

(e34) nhóm hydroxyimino (C_1-C_3) alkyl;

(e35) nhóm (C_1-C_6) alkoxyimino (C_1-C_3) alkyl;

(e36) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxyimino (C_1-C_3) alkyl;

(e37) nhóm hydrazono (C_1-C_3) alkyl;

(e38) nhóm (C_1-C_6) alkylhydrazono (C_1-C_3) alkyl;

(e39) nhóm di-(C_1-C_6) alkylhydrazono (C_1-C_3) alkyl;

(e40) nhóm phenyl (C_1-C_6) alkoxyimino (C_1-C_3) alkyl;

(e41) nhóm (C_2-C_6) alkenyloxyimino (C_1-C_3) alkyl;

(e42) nhóm di-(C_1-C_6) alkoxyphosphoryl;

(e43) nhóm di-(C_1-C_6) alkoxyphosphorylamino;

(e44) nhóm hydroxyl;

(e45) nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkoxy; hoặc

(e46) nhóm (C_1-C_6) alkoxyiminoamino (C_1-C_3) alkyl.

3. Hợp chất hoặc muối của nó theo điểm 1 hoặc 2, trong đó

R^1 là

(a1) nguyên tử halogen;

(a2) nhóm xyano;

(a3) nhóm nitro;

(a4) nhóm formyl;

(a5) nhóm cacboxyl;

(a6) nhóm (C_1-C_6) alkyl;

(a7) nhóm (C_2-C_6) alkenyl;

(a9) nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl;

(a10) nhóm halo (C_1-C_6) alkyl;

(a14) nhóm hydroxy (C_1-C_6) alkyl;

(a16) nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl;

(a17) nhóm di-(C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl;

(a22) nhóm (C_1-C_6) alkoxy;

(a23) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxy;

(a24) nhóm (C_1-C_6) alkylthio;

(a26) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(a27) nhóm halo (C_1-C_6) alkylthio;

(a28) nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfinyl;

(a29) nhóm halo (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(a30) nhóm $R^8(R^9)N$ trong đó R^8 và R^9 có thể giống nhau hoặc khác nhau và mỗi ký hiệu là nguyên tử hydro, nhóm hydroxyl, nhóm amino, nhóm di-(C_1-C_6) alkylamino, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl, nhóm (C_2-C_6) alkenyl, nhóm (C_2-C_6) alkynyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_2-C_6) alkenyloxy, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_3-C_6) xycloalkyl, nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkylcacbonyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkylcacbonyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl, nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl, nhóm N,N-di-(C_1-C_6) alkylsulfamoyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl, nhóm di-(C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl, nhóm thietanyl, nhóm thiazolyl, hoặc nhóm 2-oxotetrahydrofuranyl, hoặc R^8 và R^9 có thể ghép với nhau để tạo thành vòng có từ 4 đến 6 phần tử;

(a31) nhóm $R^{10}(R^{11})N$ (C_1-C_6) alkyl trong đó R^{10} và R^{11} có thể giống nhau hoặc khác nhau và mỗi ký hiệu là nguyên tử hydro hoặc nhóm (C_1-C_6) alkyl, hoặc R^{10} và R^{11} có thể ghép với nhau để tạo thành vòng có từ 4 đến 6 phần tử;

(a32) nhóm (C_1-C_6) alkylthio (C_1-C_6) alkyl;

(a33) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl (C_1-C_6) alkyl;

(a34) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl (C_1-C_6) alkyl;

(a45) nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl;

(a52) nhóm $R^{10}(R^{11})N$ sulfonyl trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên;

(a55) nhóm (C_1-C_6) alkoxyimino (C_1-C_3) alkyl;

(a57) nhóm phenyl;

(a58) nhóm phenyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 5 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nguyên tử halogen và nhóm (C_1-C_6) alkoxy;

(a59) nhóm pyridyl;

(a62) nhóm pyrazolyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 3 nhóm (C_1-C_6) alkyl mà có thể giống nhau hoặc khác nhau;

(a65) nhóm dioxolanyl;

(a67) nhóm dioxanyl;

(a69) nhóm (C_1-C_6) alkylen được tạo thành cùng với một nhóm thế liền kề; hoặc

(a70) nhóm metylendioxy được tạo thành cùng với một nhóm thế liền kề, trong đó nhóm metylendioxy có thể được thế với 1 hoặc 2 nguyên tử halogen,

trong đó, khi m là số nguyên lớn hơn hoặc bằng 2, các R^1 có thể giống nhau hoặc khác nhau,

m là 0, 1, 2, 3, hoặc 4,

R^2 là

(b1) nguyên tử hydro;

(b2) nhóm (C_1-C_6) alkyl;

(b3) nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl;

(b5) nhóm (C_2-C_6) alkynyl;

(b6) nhóm halo (C_1-C_6) alkyl; hoặc

(b9) nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl,

R^3 là

(c1) nguyên tử hydro;

(c3) nhóm xyano;

(c5) nhóm cacboxamit;

(c6) nhóm (C_1-C_6) alkyl;

(c12) nhóm $R^8(R^9)N$ trong đó R^8 và R^9 giống như trên;

(c13) nhóm (C_1-C_6) alkoxy; hoặc

(c16) nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl (C_1-C_6) alkyl,

R^4 là

(d1) nguyên tử hydro;

(d2) nhóm (C_1-C_6) alkyl;

(d3) nhóm (C_2-C_6) alkenyl;

(d4) nhóm (C_2-C_6) alkynyl;

(d6) nhóm halo (C_1-C_6) alkyl;

(d9) nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkyl;

(d13) nhóm (C_3-C_6) xycloalkyl (C_1-C_6) alkyl;

(d14) nhóm xyano (C_1-C_6) alkyl;

(d15) nhóm (C_1-C_6) alkylthio (C_1-C_6) alkyl;

(d16) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfinyl (C_1-C_6) alkyl;

(d17) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl (C_1-C_6) alkyl;

(d18) nhóm cacboxyl (C_1-C_6) alkyl;

(d19) nhóm phenyl (C_1-C_6) alkyl;

(d20) nhóm phenyl (C_1-C_6) alkyl có, ở trên vòng, từ 1 đến 5 nguyên tử halogen mà có thể giống nhau hoặc khác nhau;

(d22) nhóm (C_1-C_6) alkylcacbonyl;

(d23) nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl;

(d24) nhóm (C_1-C_6) alkylsulfonyl;

(d30) nhóm phenyl; hoặc

(d32) nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl (C_1-C_6) alkyl,

A^1, A^2, và A^3 có thể giống nhau hoặc khác nhau và mỗi ký hiệu là CR^5 (trong đó R^5 là nguyên tử hydro, nguyên tử halogen, nhóm (C_1-C_6) alkyl, hoặc nhóm $R^{10}(R^{11})N$ trong đó R^{10} và R^{11} giống như trên) hoặc nguyên tử nitơ, và

Q là

(e1) nguyên tử halogen;

(e2) nhóm xyano;

(e4) nhóm formyl;

(e5) nhóm (C_1-C_6) alkyl;

(e6) nhóm (C_2-C_6) alkenyl;

(e8) nhóm halo (C_1-C_6) alkyl;

(e11) nhóm (C_1-C_6) alkoxy;

(e13) nhóm hydroxy (C_1-C_6) alkyl;

(e14) nhóm dihydroxy (C_1-C_6) alkyl;

(e16) nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_2-C_6) alkenyl;

(e17) nhóm $R^8(R^9)N$ trong đó R^8 và R^9 giống như trên;

(e18) nhóm dioxolanyl;

(e19) nhóm dioxolanyl có, ở trên vòng, 1 hoặc 2 nhóm thế mà có thể giống nhau hoặc khác nhau và được chọn từ nhóm cacbonyl và nhóm (C_1-C_6) alkyl;

(e20) nhóm dioxanyl;

(e22) nhóm phenyl;

(e24) nhóm imidazolyl;

(e27) nhóm oxadiazolyl có, ở trên vòng, nhóm (C_1-C_6) alkyl;

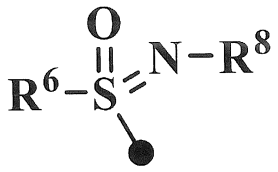
(e28) nhóm $S(O)_pR^6$ trong đó R^6 là nguyên tử hydro, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm halo (C_1-C_6) alkyl, nhóm phenyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxyphenyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkylphenyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm tri-(C_1-C_6) alkylsilylphenyl (C_1-C_6) alkyl, hoặc nhóm $N(R^8)R^9$ trong đó R^8 và R^9 giống như trên, và p là 0, 1, hoặc 2;

(e29) nhóm $C(O)R^7$ trong đó R^7 là nhóm hydroxyl, nhóm (C_1-C_6) alkyl, nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl (C_1-C_6) alkyl, nhóm phenyl (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_2-C_6) alkynyloxy, nhóm (C_3-C_6) xycloalkoxy, nhóm phenyloxy, nhóm (C_1-C_6) alkoxycacbonyl (C_1-C_6) alkoxy, nhóm (C_1-C_6) alkylthio, nhóm thiazolidinyl, hoặc nhóm $N(R^8)R^9$ trong đó R^8 và R^9 giống như trên;

(e31) nhóm N-(C_1-C_6) alkylaminothiocacbonyl;

(e33)

[Công thức hóa học 4]



trong đó R^6 và R^8 giống như trên;

(e35) nhóm (C_1-C_6) alkoxyimino (C_1-C_3) alkyl;

(e36) nhóm halo (C_1-C_6) alkoxyimino (C_1-C_3) alkyl;

(e37) nhóm hydrazono (C_1-C_3) alkyl;

(e40) nhóm phenyl (C_1-C_6) alkoxyimino (C_1-C_3) alkyl;

(e41) nhóm (C_2-C_6) alkenyloxyimino (C_1-C_3) alkyl;

(e42) nhóm di-(C_1-C_6) alkoxyphosphoryl;

(e43) nhóm di-(C_1-C_6) alkoxyphosphorylamino;

(e44) nhóm hydroxyl; hoặc

(e45) nhóm (C_1-C_6) alkoxy (C_1-C_6) alkoxy.

4. Hợp chất hoặc muối của nó theo điểm 1, trong đó A^1 là nguyên tử nitơ, và A^2 và A^3 có thể giống nhau hoặc khác nhau và là các CR^5.

5. Hợp chất hoặc muối của nó theo điểm 2, trong đó A^1 là nguyên tử nitơ, và A^2 và A^3 có thể giống nhau hoặc khác nhau và là các CR^5.

6. Hợp chất hoặc muối của nó theo điểm 3, trong đó A^1 là nguyên tử nitơ, và A^2 và A^3 có thể giống nhau hoặc khác nhau và là các CR^5.

7. Hợp chất hoặc muối của nó theo điểm 2, trong đó A^1, A^2, và A^3 có thể giống nhau hoặc khác nhau và là các CR^5.

8. Hợp chất hoặc muối của nó theo điểm 3, trong đó A^1, A^2, và A^3 có thể giống nhau hoặc khác nhau và là các CR^5.

9. Hợp chất hoặc muối của nó theo điểm 3, trong đó A^1 và A^3 có thể giống nhau hoặc khác nhau và là các CR^5, và A^2 là nguyên tử nitơ.

10. Hợp chất hoặc muối của nó theo điểm 3, trong đó A^1 và A^2 có thể giống nhau hoặc khác nhau và là các CR^5, và A^3 là nguyên tử nitơ.

11. Hợp chất hoặc muối của nó theo điểm 3, trong đó A^1 và A^3 là các nguyên tử nitơ, và A^2 là CR^5.

12. Hợp chất hoặc muối của nó theo điểm 2, trong đó A^1 và A^2 là các nguyên tử nitơ, và A^3 là CR^5.

13. Hợp chất hoặc muối của nó theo điểm 3, trong đó A^1 và A^2 là các nguyên tử nitơ, và A^3 là CR^5.

14. Hợp chất hoặc muối của nó theo điểm 3, trong đó A^1 là CR^5, và A^2 và A^3 là các nguyên tử nitơ.

15. Thuốc diệt cỏ dùng trong nông nghiệp và trồng trọt bao gồm hợp chất hoặc muối của nó theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 14 làm thành phần hoạt tính.

16. Phương pháp sử dụng thuốc diệt cỏ dùng trong nông nghiệp và trồng trọt, bao gồm xử lý cỏ dại, đất, ruộng lúa hoặc môi trường phát triển với một lượng hiệu quả thuốc diệt cỏ dùng trong nông nghiệp và trồng trọt theo điểm 15.

17. Phương pháp kiểm soát cỏ dại, bao gồm xử lý cỏ dại, đất, ruộng lúa hoặc môi trường phát triển với một lượng hiệu quả thuốc diệt cỏ dùng trong nông nghiệp và trồng trọt theo điểm 15.