



- (12) BẢN MÔ TẢ SÁNG CHẾ THUỘC BẰNG ĐỘC QUYỀN SÁNG CHẾ
(19) Cộng hòa xã hội chủ nghĩa Việt Nam (VN) (11) CỤC SỞ HỮU TRÍ TUỆ
(51)^{2020.01} C07D 401/04; C07D 403/04; C07D 401/14; A01N 43/653 (13) B

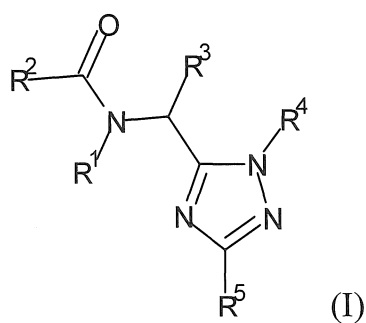


1-0050670

-
- (21) 1-2022-00964 (22) 17/07/2020
(86) PCT/EP2020/070268 17/07/2020 (87) WO2021/013719 28/01/2021
(30) 19187899.0 23/07/2019 EP; 19202319.0 09/10/2019 EP
(45) 25/08/2025 449 (43) 25/04/2022 409A
(73) BAYER AKTIENGESELLSCHAFT (DE)
Kaiser-Wilhelm-Allee 1, 51373 Leverkusen, Germany
(72) SCHWARZ, Hans-Georg (DE); ARLT, Alexander (DE); JESCHKE, Peter (DE);
CANCHO GRANDE, Yolanda (ES); FÜßLEIN, Martin (DE); LINKA, Marc (DE);
LÖSEL, Peter (GB); EBBINGHAUS-KINTSCHER, Ulrich (DE); DAMIJONAITIS,
Arunas Jonas (DE); TURBERG, Andreas (DE); MANDZHULO, Oleksandr (UA);
HEISLER, Iring (DE).
(74) Công ty Luật TNHH T&G (TGVN)
-
- (54) HỢP CHẤT HETEROARYL-TRIAZOL LÀM CHẤT DIỆT SINH VẬT GÂY HẠI,
PHƯƠNG PHÁP PHÒNG TRỪ SINH VẬT GÂY HẠI VÀ PHƯƠNG PHÁP BẢO
VỆ HẠT HOẶC THỰC VẬT NẢY MẦM KHỎI SINH VẬT GÂY HẠI

(21) 1-2022-00964

(57) Sáng chế đề cập đến hợp chất heteroaryl-triazol có công thức chung (I), trong đó các yếu tố cấu trúc R^1 , R^2 , R^3 , R^4 và R^5 có nghĩa được đưa trong bản mô tả, đến các chế phẩm bào chế và chế phẩm chứa các hợp chất này để phòng trừ động vật gây hại bao gồm động vật chân khớp và côn trùng trong việc bảo vệ thực vật và để phòng trừ sinh vật ngoại ký sinh trên động vật. Sáng chế cũng đề cập đến các phương pháp phòng trừ sinh vật gây hại và các phương pháp bảo vệ hạt hoặc thực vật nảy mầm khỏi sinh vật gây hại.



Lĩnh vực kỹ thuật được đề cập

Sáng chế đề cập đến hợp chất heteroaryl-triazol mới, đến các chế phẩm bào chế và chế phẩm chứa các hợp chất này và sử dụng chúng để phòng trừ động vật gây hại bao gồm động vật chân khớp và côn trùng trong việc bảo vệ thực vật và đến việc sử dụng chúng để phòng trừ sinh vật ngoại ký sinh trên động vật.

Tình trạng kỹ thuật của sáng chế

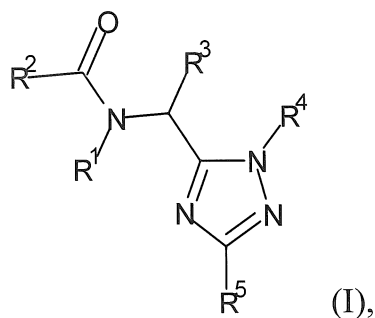
Các hợp chất heteroaryl-triazol và heteroaryl-tetrazol nhất định được bộc lộ để sử dụng trong việc phòng trừ sinh vật ngoại ký sinh trên động vật trong WO 2017/192385 và để sử dụng trong việc phòng trừ động vật gây hại bao gồm động vật chân khớp và côn trùng trong lĩnh vực bảo vệ thực vật trong WO 2019/170626 và WO 2019/215198. Hơn nữa, các đơn sáng chế WO 2019/197468, WO 2019/201835, WO 2019/202077 và WO 2019/206799 bộc lộ hợp chất heteroaryl-triazol nhất định để sử dụng trong việc phòng trừ sinh vật ngoại ký sinh trên động vật và để phòng trừ động vật gây hại bao gồm động vật chân khớp và côn trùng trong lĩnh vực bảo vệ thực vật. WO 2020/002563, WO 2020/053364, WO 2020/053365, WO 2020/079198, WO 2020/094363 mô tả hợp chất azol-amit, tất cả trong số chúng có thể được sử dụng làm chất diệt côn trùng.

Sản phẩm bảo vệ thực vật hiện đại và chất diệt vật ngoại ký sinh dùng trong thú y cần phải đáp ứng nhiều yêu cầu, ví dụ liên quan đến các đặc tính hiệu lực, mức độ tồn dư, phổ và khả năng phá vỡ tính kháng. Các vấn đề về độc tính, khả năng kết hợp với các hoạt chất hoặc các chất phụ trợ bào chế khác đóng vai trò, cũng như vấn đề về chi phí mà quá trình tổng hợp hoạt chất yêu cầu. Ngoài ra, sự kháng thuốc là có thể xảy ra. Vì tất cả những lý do này, vấn đề tìm kiếm các chế phẩm bảo cây trồng hoặc các chất diệt vật ngoại ký sinh trong thú y mới không thể được coi là hoàn thiện và vẫn luôn thường trực nhu cầu về các hợp chất mới có các đặc tính được cải thiện hơn so với các hợp chất đã biết, ít nhất về từng khía cạnh riêng biệt.

Bản chất kỹ thuật của sáng chế

Mục đích của sáng chế là đề cập đến các hợp chất mà có phổ diệt sinh vật gây hại rộng hơn theo nhiều khía cạnh khác nhau.

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



trong đó (Cấu hình 1-1):

R¹ là hydro;

R² là phenyl hoặc pyridin, trong đó phenyl hoặc pyridin tùy ý được thế bằng một đến hai phân tử thế, với điều kiện (các) phân tử thế không ở trên mỗi cacbon liền kề với cacbon được liên kết với nhóm C=O, mỗi nhóm độc lập được chọn từ nhóm bao gồm flo, clo, brom, -CN, -NO₂, -SF₅, metyl, diflometyl, triflometyl, pentafloretyl, metoxy, diflometoxy, triflometoxy, diflometylthio, triflometylthio, difloetylthio, và trifluroetylthio;

R³ là C₁-C₃-alkyl;

R⁴ là pyridin, pyrimidin hoặc pyrazin, trong đó pyridin, pyrimidin hoặc pyrazin được thế bằng CN.

R⁵ là etyl, iso-propyl, tert-butyl, diflometyl, xyclopropyl, metoxy, etoxy, iso-propoxy, hoặc halogen.

Tương tự, các hợp chất có công thức (I) bao gồm chất đồng phân không đối quang hoặc chất đồng phân đối ảnh bất kỳ và các chất đồng phân E/Z tồn tại, và cả muối và N-oxit của hợp chất có công thức (I), và việc sử dụng chúng để phòng trừ động vật gây hại.

Các định nghĩa về gốc được ưu tiên đối với các công thức được nêu trên đây và sau đây được đưa ra dưới đây.

Ưu tiên (Cấu hình 2-1) đối với các hợp chất có công thức (I) trong đó

R¹ là hydro;

R² 3-clo-5-(triflometyl)phenyl, 3-clo-5-(diflometyl)phenyl, 3-clo-5-(pentaflaoetyl)phenyl, 3-clo-5-(triflometoxy)phenyl, 3-clo-5-(triflometylthio)phenyl, 3-clo-5-(diflometylthio)phenyl, 3-clo-5-(diflometoxy)phenyl, 3-bromo-5-(triflometoxy)phenyl, 3-bromo-5-clophenyl, 3,5-diclophenyl, 3,5-dibromophenyl, 3,5-bis(triflometyl)phenyl, 3-xyano-5-(triflometyl)phenyl, 3,5-bis(diflometoxy)phenyl, 5-bromopyridin-3-yl, 3-bromo-5-(triflometyl)phenyl, 3-flo-5-xyanophenyl, 3-bromo-5-xyanophenyl, 6-bromopyridin-2-yl, 5-(triflometyl)pyridin-3-yl, 6-(triflometyl)pyridin-2-yl, 2-clo-6-(triflometyl)pyridin-4-yl hoặc 4-bromo-6-(triflometyl)pyridin-2-yl;

R³ là metyl;

R⁴ là 5-xyanopyridin-2-yl,

R⁵ là etyl, iso-propyl, tert-butyl, diflometyl, xyclopropyl, metoxy, etoxy, iso-propoxy, clo hoặc brom.

Ưu tiên (Cấu hình 2-2) cũng đối với các hợp chất có công thức (I) trong đó

R¹ là hydro;

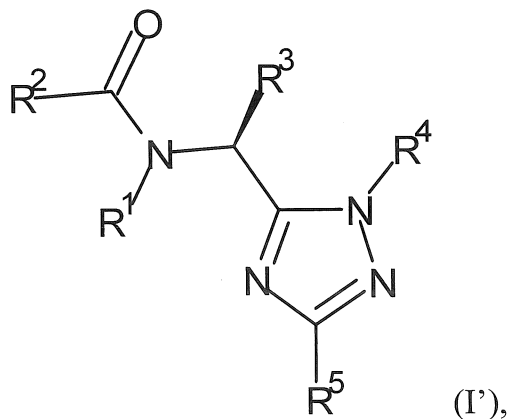
R² 3-clo-5-(triflometyl)phenyl, 3-clo-5-(diflometyl)phenyl, 3-clo-5-(pentaflaoetyl)phenyl, 3-clo-5-(triflometoxy)phenyl, 3-clo-5-(triflometylthio)phenyl, 3-clo-5-(diflometylthio)phenyl, 3-clo-5-(diflometoxy)phenyl, 3-bromo-5-(triflometoxy)phenyl, 3-bromo-5-clophenyl, 3,5-diclophenyl, 3,5-dibromophenyl, 3,5-bis(triflometyl)phenyl, 3-xyano-5-(triflometyl)phenyl, 3,5-bis(diflometoxy)phenyl, 5-bromopyridin-3-yl, 3-bromo-5-(triflometyl)phenyl, 3-flo-5-xyanophenyl, 3-bromo-5-xyanophenyl, 3-(diflometyl)-5-(triflometoxy)phenyl, 3-(diflometoxy)-5-(diflometyl)phenyl, 6-bromopyridin-2-yl, 5-(triflometyl)pyridin-3-yl, 6-(triflometyl)pyridin-2-yl, 2-clo-6-(triflometyl)pyridin-4-yl hoặc 4-bromo-6-(triflometyl)pyridin-2-yl;

R³ là metyl;

R^4 là 5-xyanopyridin-2-yl,

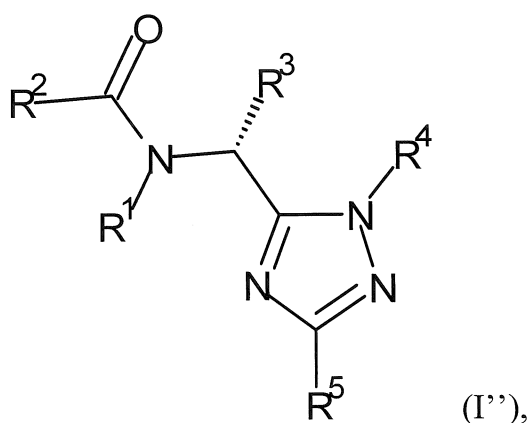
R^5 là ethyl, iso-propyl, tert-butyl, diflometyl, xyclopropyl, metoxy, etoxy, isopropoxy, clo hoặc brom.

Theo một phương án được ưu tiên nữa, sáng chế đề xuất các hợp chất có công thức (I'') trong đó R^3 là C_1 - C_3 alkyl, metyl được ưu tiên đặc biệt, và



trong đó các yếu tố cấu trúc R^1 , R^2 , R^4 và R^5 có nghĩa được đưa ra trong Cấu hình (1-1) hoặc trong Cấu hình (2-1) hoặc trong Cấu hình (2-2).

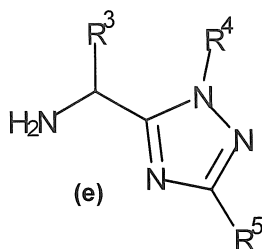
Theo một phương án được ưu tiên nữa, sáng chế đề xuất các hợp chất có công thức (I'') trong đó R^3 là C_1 - C_3 alkyl, metyl được ưu tiên đặc biệt, và



trong đó các yếu tố cấu trúc R^1 , R^2 , R^4 và R^5 có nghĩa được đưa ra trong Cấu hình (1-1) hoặc trong Cấu hình (2-1) hoặc trong Cấu hình (2-2).

Theo một khía cạnh khác, sáng chế bao hàm các hợp chất trung gian hữu hiệu để điều chế các hợp chất có công thức chung (I), nêu trên.

Cụ thể, sáng chế bao hàm các hợp chất trung gian có công thức chung (e):



trong đó các yếu tố cấu trúc R^3 , R^4 và R^5 có nghĩa được đưa ra trong Cấu hình (1-1) hoặc trong Cấu hình (2-1) hoặc trong Cấu hình (2-2), bao gồm

amin tự do của INT-1: 6-[5-[(1S)-1-aminoethyl]-3-ethyl-1,2,4-triazol-1-yl]pyridin-3-carbonitril hydroclorua;

INT-2: 6-[5-[(1S)-1-aminoethyl]-3-isopropyl-1,2,4-triazol-1-yl]pyridin-3-carbonitril;

amin tự do của INT-3: 6-[5-[(1S)-1-aminoethyl]-3-cyclopropyl-1,2,4-triazol-1-yl]pyridin-3-carbonitril hydroclorua;

INT-4: 6-[5-(1-aminoethyl)-3-(diflometyl)-1,2,4-triazol-1-yl]pyridin-3-carbonitril;

INT-5: 6-[5-[(1S)-1-aminoethyl]-3-metoxi-1,2,4-triazol-1-yl]pyridin-3-carbonitril;

INT-6: 6-[5-[(1S)-1-aminoethyl]-3-etoxi-1,2,4-triazol-1-yl]pyridin-3-carbonitril;

INT-7: 6-[5-[(1S)-1-aminoethyl]-3-isopropoxi-1,2,4-triazol-1-yl]pyridin-3-carbonitril;

INT-8: 6-[5-[(1S)-1-aminoethyl]-3-tert-butyl-1,2,4-triazol-1-yl]pyridin-3-carbonitril;

INT-11: 6-[5-(1-aminoethyl)-3-clo-1,2,4-triazol-1-yl]pyridin-3-carbonitril;

và

INT-12: 6-[5-(1-aminoethyl)-3-bromo-1,2,4-triazol-1-yl]pyridin-3-carbonitril;

và hydroclorua của các amin tự do.

Sáng chế còn bao hàm các chất trung gian axit 3-clo-5-[(diflometyl)sulfanyl]benzoic (INT-9), axit 3-clo-5-(diflometyl)benzoic (INT-10), axit 3-clo-5-(pentaflometyl)benzoic (INT-13), axit 3-(triflometoxy)-5-(diflometyl)benzoic (INT-14), và axit 3-(diflometoxy)-5-(diflometyl)benzoic (INT-15) và các muối của chúng.

Hợp chất có công thức (I), tùy thuộc vào bản chất của các phần tử thế, còn có thể ở dạng chất đồng phân lập thể, nghĩa là ở dạng chất đồng phân hình học và/hoặc quang học hoặc

hỗn hợp chất đồng phân có thành phần khác nhau. Sáng chế đề xuất cả chất đồng phân lập thể tinh khiết và hỗn hợp mong muốn bất kỳ của các chất đồng phân này, cho dù trong bản mô tả này chỉ đề cập chung đến các hợp chất có công thức (I).

Tuy nhiên, theo sáng chế ưu tiên sử dụng các dạng đồng phân lập thể quang hoạt của các hợp chất có công thức (I) và muối của chúng.

Do đó, sáng chế đề cập đến cả chất đồng phân đối ảnh và chất đồng phân không đối quang tinh khiết và hỗn hợp của chúng để phòng trừ động vật gây hại, bao gồm động vật chân khớp và đặc biệt là côn trùng.

Nếu phù hợp, các hợp chất có công thức (I) cũng có thể ở các dạng đa hình khác nhau hoặc dưới dạng hỗn hợp của các dạng đa hình khác nhau. Cả dạng đa hình tinh khiết và hỗn hợp đa hình được đề xuất bởi sáng chế và có thể được sử dụng theo sáng chế.

Mô tả chi tiết sáng chế

Định nghĩa

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

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

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

Nếu thuật ngữ chung dùng cho phân tử thế, ví dụ $(C_{\text{LL}}-C_{\text{UL}})$ -alkyl, đặt ở cuối phân tử thế phức hợp, ví dụ $(C_{\text{LL}}-C_{\text{UL}})$ -xycloalkyl- $(C_{\text{LL}}-C_{\text{UL}})$ -alkyl, thì thành phần cấu thành khởi đầu

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Theo sáng chế, "alkylxycloalkyl" là alkylxycloalkyl một, hai hoặc ba vòng, tốt hơn có từ 4 đến 10 hoặc từ 4 đến 7 nguyên tử cacbon, ví dụ, metylxyclopropyl, etylxyclopropyl, isopropylxyclobutyl, 3-metylxyclopentyl và 4-metylxyclohexyl. Cũng được ưu tiên là các alkylxycloalkyl có 4, 5 hoặc 7 nguyên tử cacbon như, không kể các nhóm khác,

ethylxyclopropyl hoặc 4-methylxyclohexyl. Các alkylxycloalkyl theo sáng chế có thể được thể bởi một hoặc nhiều gốc giống nhau hoặc khác nhau.

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

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

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

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

Theo sáng chế, "alkylsulfinyl" là alkylsulfinyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh tốt hơn là có 1 đến 6 nguyên tử cacbon, ví dụ, metylsulfinyl, etylsulfinyl, n-propylsulfinyl, isopropylsulfinyl, n-butylsulfinyl, isobutylsulfinyl, s-butylsulfinyl và t-butylsulfinyl. Cũng ưu tiên là các nhóm alkylsulfinyl có 1 đến 4 nguyên tử cacbon. Các nhóm alkylsulfinyl theo sáng chế có thể được thể bởi một hoặc nhiều gốc giống nhau hoặc khác nhau và bao gồm cả hai chất đồng phân đối ảnh.

Theo sáng chế, "alkylsulfonyl" là alkylsulfonyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh tốt hơn là có 1 đến 6 nguyên tử cacbon, ví dụ, metylsulfonyl, etylsulfonyl, n-propylsulfonyl, isopropylsulfonyl, n-butylsulfonyl, isobutylsulfonyl, s-butylsulfonyl và t-butylsulfonyl. Cũng ưu tiên là các nhóm alkylsulfonyl có 1 đến 4 nguyên tử cacbon. Các nhóm alkylsulfonyl theo sáng chế có thể được thể bởi một hoặc nhiều gốc giống nhau hoặc khác nhau.

Theo sáng chế, "xycloalkylthio" hoặc "xycloalkylsulfanyl" là -S-xycloalkyl tốt hơn là có 3 đến 6 nguyên tử cacbon, ví dụ, xyclopropylthio, xyclobutylthio, xyclopentylthio, xyclohexylthio. Cũng được ưu tiên là các nhóm xycloalkylthio có 3 đến 5 nguyên tử cacbon. Các nhóm xycloalkylthio theo sáng chế có thể được thể bởi một hoặc nhiều gốc giống nhau hoặc khác nhau.

Theo sáng chế, "xycloalkylsulfinyl" là -S(O)-xycloalkyl tốt hơn là có 3 đến 6 nguyên tử cacbon, ví dụ, xyclopropylsulfinyl, xyclobutylsulfinyl, xyclopentylsulfinyl, xyclohexylsulfinyl. Cũng được ưu tiên là các nhóm xycloalkylsulfinyl có 3 đến 5 nguyên tử cacbon. Các nhóm xycloalkylsulfinyl theo sáng chế có thể được thể bởi một hoặc nhiều gốc giống nhau hoặc khác nhau và bao gồm cả hai chất đồng phân đối ảnh.

Theo sáng chế, "xycloalkylsulfonyl" là -SO₂-xycloalkyl tốt hơn là có 3 đến 6 nguyên tử cacbon, ví dụ, xyclopropylsulfonyl, xyclobutylsulfonyl, xyclopentylsulfonyl, xyclohexylsulfonyl. Cũng được ưu tiên là các nhóm xycloalkylsulfonyl có 3 đến 5 nguyên tử cacbon. Các nhóm xycloalkylsulfonyl theo sáng chế có thể được thể bởi một hoặc nhiều gốc giống nhau hoặc khác nhau.

Theo sáng chế, "phenylthio", hoặc "phenylsulfanyl" là -S-phenyl, ví dụ, phenylthio. Các nhóm phenylthio theo sáng chế có thể được thể bởi một hoặc nhiều gốc giống nhau hoặc khác nhau.

Theo sáng chế, "phenylsulfinyl" là -S(O)-phenyl, ví dụ, phenylsulfinyl. Các nhóm phenylsulfinyl theo sáng chế có thể được thể bởi một hoặc nhiều gốc giống nhau hoặc khác nhau và bao gồm cả hai chất đồng phân đối ảnh.

Theo sáng chế, "phenylsulfonyl" là $-\text{SO}_2\text{-phenyl}$, ví dụ phenylsulfonyl. Các nhóm phenylsulfonyl theo sáng chế có thể được thể bởi một hoặc nhiều gốc giống nhau hoặc khác nhau.

Theo sáng chế, "alkylcarbonyl" là alkyl-C(=O) mạch thẳng hoặc mạch nhánh tốt hơn là có 2 đến 7 nguyên tử cacbon như methylcarbonyl, ethylcarbonyl, n-propylcarbonyl, isopropylcarbonyl, s-butylcarbonyl và t-butylcarbonyl. Cũng được ưu tiên là alkylcarbonyl có từ 1 đến 4 nguyên tử cacbon. Alkylcarbonyl theo sáng chế có thể được thể bởi một hoặc nhiều gốc giống nhau hoặc khác nhau.

Theo sáng chế, "alkoxycarbonyl" - riêng rẽ hoặc dưới dạng phần tử cấu thành của nhóm hóa học - là alkoxycarbonyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh, tốt hơn là có 1 đến 6 nguyên tử cacbon hoặc có 1 đến 4 nguyên tử cacbon trong phần alkoxy, ví dụ, metoxycarbonyl, etoxycarbonyl, n-propoxycarbonyl, isopropoxycarbonyl, s-butoxycarbonyl và t-butoxycarbonyl. Các nhóm alkoxycarbonyl theo sáng chế có thể được thể bởi một hoặc nhiều gốc giống nhau hoặc khác nhau.

Theo sáng chế, "alkylaminocarbonyl" là alkylaminocarbonyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh, tốt hơn có 1 đến 6 nguyên tử cacbon hoặc 1 đến 4 nguyên tử cacbon ở phần alkyl, ví dụ, methylaminocarbonyl, ethylaminocarbonyl, n-propylaminocarbonyl, isopropylaminocarbonyl, s-butylaminocarbonyl và t-butylaminocarbonyl. Các nhóm alkylaminocarbonyl theo sáng chế có thể được thể bởi một hoặc nhiều gốc giống nhau hoặc khác nhau.

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

Theo sáng chế, "aryl" là hệ thơm một, hai hoặc đa vòng, tốt hơn có từ 6 đến 14, đặc biệt là từ 6 đến 10 nguyên tử cacbon vòng, ví dụ, phenyl, naphthyl, anthryl, phenanthrenyl, tốt hơn là phenyl. Ngoài ra, aryl cũng là hệ đa vòng như tetrahydronaphthyl, indenyl, indanyl,

florenyl, biphenyl, trong đó vị trí liên kết nằm ở trên hệ thơm. Các nhóm aryl theo sáng chế có thể được thế bởi một hoặc nhiều gốc giống nhau hoặc khác nhau.

Ví dụ về các aryl được thế là arylalkyl, tương tự nhóm này có thể được thế bởi một hoặc nhiều gốc giống nhau hoặc khác nhau ở phần C₁-C₄-alkyl và/hoặc C₆-C₁₄-aryl. Ví dụ về arylalkyl như vậy bao gồm benzyl và phenyl-1-etyl.

Theo sáng chế, "dị vòng", "vòng dị vòng" hoặc "hệ vòng dị vòng" là hệ vòng cacbon vòng có ít nhất một vòng, trong đó ít nhất một nguyên tử cacbon được thay thế bằng dị nguyên tử, tốt hơn là bằng dị nguyên tử từ nhóm bao gồm N, O, S, P, B, Si, Se, và hệ vòng này là bão hòa, không bão hòa hoặc dị vòng thơm và có thể không được thế hoặc được thế, trong đó vị trí liên kết nằm ở trên nguyên tử vòng. Trừ khi được định nghĩa theo cách khác, vòng dị vòng tốt hơn chứa 3 đến 9 nguyên tử vòng, đặc biệt là 3 đến 6 nguyên tử vòng, và một hoặc nhiều, tốt hơn là 1 đến 4, đặc biệt là 1, 2 hoặc 3 nguyên tử khác loại ở vòng dị vòng, tốt hơn là từ nhóm bao gồm N, O, và S, mặc dù hai nguyên tử oxy không được trực tiếp liền kề nhau. Các vòng dị vòng thường chứa không nhiều hơn 4 nguyên tử nito và/hoặc không nhiều hơn 2 nguyên tử oxy và/hoặc không nhiều hơn 2 nguyên tử lưu huỳnh. Khi gốc heteroxyclyl hoặc vòng dị vòng được thế tùy ý, nó có thể được ngưng tụ với các vòng cacbon vòng hoặc vòng dị vòng khác. Trong trường hợp heteroxyclyl được thế tùy ý, sáng chế cũng bao gồm các hệ đa vòng, ví dụ 8-azabixyclo[3.2.1]octanyl hoặc 1-azabixyclo[2.2.1]heptyl. Trong trường hợp heteroxyclyl được thế tùy ý, sáng chế cũng bao gồm các hệ vòng xoắn, ví dụ, 1-oxa-5-azaspiro[2.3]hexyl.

Các nhóm heteroxyclyl theo sáng chế là, ví dụ, piperidinyl, piperazinyl, morpholinyl, thiomorpholinyl, dihydropyranlyl, tetrahydropyranlyl, dioxanyl, pyrrolinyl, pyrrolidinyl, imidazoliny, imidazolidinyl, thiazolidinyl, oxazolidinyl, dioxolanyl, dioxolyl, pyrazolidinyl, tetrahydrofuranyl, dihydrofuranyl, oxetanyl, oxiranyl, azetidiny, aziridinyl, oxazetidiny, oxaziridinyl, oxazepanyl, oxazinanyl, azepanyl, oxopyrrolidinyl, dioxopyrrolidinyl, oxomorpholinyl, oxopiperazinyl và oxepanyl.

Đặc biệt có ý nghĩa là các heteroaryl, đó là các hệ dị vòng thơm. Theo sáng chế, thuật ngữ heteroaryl để chỉ các hợp chất dị vòng thơm, tức là các hợp chất dị vòng thơm hoàn toàn không bão hòa, các hợp chất này nằm trong phạm vi định nghĩa về dị vòng nêu trên. Được ưu tiên là các vòng có 5 đến 7 cạnh, có 1 đến 3, tốt hơn là 1 hoặc 2 nguyên tử khác loại

giống nhau hoặc khác nhau từ nhóm nêu trên. Các heteroaryl theo sáng chế là, ví dụ, furyl, thienyl, pyrazolyl, imidazolyl, 1,2,3- và 1,2,4-triazolyl, isoxazolyl, thiazolyl, isothiazolyl, 1,2,3-, 1,3,4-, 1,2,4- và 1,2,5-oxadiazolyl, azepinyl, pyrrolyl, pyridyl, pyridazinyl, pyrimidinyl, pyrazinyl, 1,3,5-, 1,2,4- và 1,2,3-triazinyl, 1,2,4-, 1,3,2-, 1,3,6- và 1,2,6-oxazinyl, oxepinyl, thiepinyl, 1,2,4-triazolonyl và 1,2,4-diazepinyl. Các nhóm heteroaryl theo sáng chế cũng có thể được thế bởi một hoặc nhiều gốc giống nhau hoặc khác nhau.

Thuật ngữ các nhóm/phần tử thế "(tùy ý) được thế", như gốc alkyl, alkenyl, alkynyl, alkoxy, alkylthio, alkylsulfinyl, alkylsulfonyl, xycloalkyl, aryl, phenyl, benzyl, heteroxyclyl và heteroaryl được thế, có nghĩa, ví dụ, gốc được thế có dẫn xuất từ cấu trúc bazơ không được thế, trong đó phần tử thế, ví dụ, một (1) phần tử thế hoặc nhiều phần tử thế, tốt hơn là 1, 2, 3, 4, 5, 6 hoặc 7, được chọn từ nhóm bao gồm amino, hydroxyl, halogen, nitro, xyano, isoxyano, mercapto, isothioxyanato, C₁-C₄carboxyl, carbonamit, SF₅, aminosulphonyl, C₁-C₄alkyl, C₁-C₄haloalkyl C₃-C₄xycloalkyl, C₂-C₄alkenyl, C₅-C₆xycloalkenyl, C₂-C₄alkynyl, *N*-mono-C₁-C₄alkylamino, *N,N*-di-C₁-C₄alkylamino, *N*-C₁-C₄alkanoylamino, C₁-C₄alkoxy, C₁-C₄haloalkoxy, C₂-C₄alkenyloxy, C₂-C₄alkynyloxy, C₃-C₄xycloalkoxy, C₅-C₆xycloalkenyloxy, C₁-C₄alkoxycarbonyl, C₂-C₄alkenyloxycarbonyl, C₂-C₄alkynyloxycarbonyl, C₆-,C₁₀-,C₁₄-aryloxycarbonyl, C₁-C₄alkanoyl, C₂-C₄alkenylcarbonyl, C₂-C₄alkynylcarbonyl, C₆-,C₁₀-,C₁₄-arylcarbonyl, C₁-C₄alkylthio, C₁-C₄haloalkylthio, C₃-C₄xycloalkylthio, C₂-C₄alkenylthio, C₅-C₆xycloalkenylthio, C₂-C₄alkynylthio, C₁-C₄alkylsulfinyl, bao gồm cả hai chất đồng phân đối ảnh của nhóm C₁-C₄alkylsulfinyl, C₁-C₄haloalkylsulfinyl, bao gồm cả hai chất đồng phân đối ảnh của nhóm C₁-C₄haloalkylsulfinyl, C₁-C₄alkylsulfonyl, C₁-C₄haloalkylsulfonyl, *N*-mono-C₁-C₄alkylaminosulfonyl, *N,N*-di-C₁-C₄alkylaminosulfonyl, C₁-C₄alkylphosphinyl, C₁-C₄alkylphosphonyl, bao gồm cả hai chất đồng phân đối ảnh của C₁-C₄alkylphosphinyl và C₁-C₄alkylphosphonyl, *N*-C₁-C₄alkylaminocarbonyl, *N,N*-di-C₁-C₄alkylaminocarbonyl, *N*-C₁-C₄alkanoylaminocarbonyl, *N*-C₁-C₄alkanoyl-*N*-C₁-C₄alkylaminocarbonyl, C₆-,C₁₀-,C₁₄-aryl, C₆-,C₁₀-,C₁₄-aryloxy, benzyl, benzyloxy, benzylthio, C₆-,C₁₀-,C₁₄-arylthio, C₆-,C₁₀-,C₁₄-arylamino, benzylamino, heteroxyclyl và trialkylsilyl, phần tử thế được liên kết qua liên kết đôi, như C₁-C₄alkyliden (ví dụ metyliden hoặc etyliden), nhóm oxo, nhóm imino và nhóm imino được thế. Khi hai hoặc nhiều gốc tạo ra một hoặc nhiều vòng, các vòng này có thể là vòng cacbon, dị vòng, bão hòa, bão hòa một phần, không bão hòa, ví dụ bao

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

Các nhóm hóa học được thế halogen hoặc các nhóm được halogen hóa theo sáng chế (ví dụ, alkyl hoặc alkoxy) được thế một lần hoặc nhiều lần bằng halogen tới số lượng phần tử thế nhiều nhất có thể. Các nhóm như vậy cũng được gọi là nhóm halo (ví dụ, haloalkyl). Trong trường hợp thế nhiều lần bằng halogen, các nguyên tử halogen có thể giống nhau hoặc khác nhau, và tất cả có thể được liên kết với một nguyên tử cacbon hoặc có thể được liên kết với nhiều nguyên tử cacbon. Halogen cụ thể là flo, clo, brom hoặc iot, tốt hơn là flo, clo hoặc brom và tốt hơn nữa là flo. Các nhóm được thế halogen tốt hơn nữa là monohaloxycloalkyl như 1-floxypropyl, 2-floxypropyl hoặc 1-floxybutyl, monohaloalkyl như 2-cloetyl, 2-floetyl, 1-cloetyl, 1-floetyl, clometyl, hoặc flometyl; perhaloalkyl như triclometyl hoặc triflometyl hoặc CF_2CF_3 , polyhaloalkyl như diflometyl, 2-flo-2-cloetyl, diclometyl, 1,1,2,2-tetrafloetyl hoặc 2,2,2-trifloetyl. Các ví dụ khác về haloalkyl là triclometyl, clodiflometyl, dicloflometyl, clometyl, bromometyl, 1-floetyl, 2-floetyl, 2,2-difloetyl, 2,2,2-trifloetyl, 2,2,2-tricloetyl, 2-clo-2,2-difloetyl, pentafloretyl, 3,3,3-triflopropyl và pentafloro-t-butyl. Được ưu tiên là các haloalkyl có 1 đến 4 nguyên tử cacbon và 1 đến 9, tốt hơn là 1 đến 5 nguyên tử halogen giống nhau hoặc khác nhau được chọn từ flo, clo và brom. Đặc biệt được ưu tiên là các haloalkyl có 1 hoặc 2 nguyên tử cacbon và từ 1 đến 5 nguyên tử halogen giống nhau hoặc khác nhau được chọn từ flo và clo, như diflometyl, triflometyl hoặc 2,2-difloetyl, không kể các nhóm khác. Các ví dụ khác về các hợp chất được thế bởi halogen là haloalkoxy như OCF_3 , OCHF_2 , OCH_2F , OCF_2CF_3 , OCH_2CF_3 , OCH_2CHF_2 và $\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{Cl}$, haloalkylsulfanyl như diflometylthio, triflometylthio, triclometylthio, clodiflometylthio, 1-floetylthio, 2-floetylthio, 2,2-difloetylthio, 1,1,2,2-tetrafloetylthio, 2,2,2-trifloetylthio hoặc 2-clo-1,1,2-trifloetylthio, haloalkylsulfinyl như diflometylsulfinyl, triflometylsulfinyl, triclometylsulfinyl, clodiflometylsulfinyl, 1-floetylsulfinyl, 2-floetylsulfinyl, 2,2-difloetylsulfinyl, 1,1,2,2-tetrafloetylsulfinyl, 2,2,2-trifloetylsulfinyl và 2-clo-1,1,2-trifloetylsulfinyl, haloalkylsulfinyl như diflometylsulfinyl, triflometylsulfinyl, triclometylsulfinyl,

clodiflometylsulfinyl, 1-floetylsulfinyl, 2-floetylsulfinyl, 2,2-difloetylsulfinyl, 1,1,2,2-tetrafloetylsulfinyl, 2,2,2-trifloetylsulfinyl và 2-clo-1,1,2-trifloetylsulfinyl, các nhóm haloalkylsulfonyl như diflometylsulfonyl, triflometylsulfonyl, triclometylsulfonyl, clodiflometylsulfonyl, 1-floetylsulfonyl, 2-floetylsulfonyl, 2,2-difloetylsulfonyl, 1,1,2,2-tetrafloetylsulfonyl, 2,2,2-trifloetylsulfonyl và 2-clo-1,1,2-trifloetylsulfonyl.

Trong trường hợp các gốc có các nguyên tử cacbon, tốt hơn là các gốc có 1 đến 4 nguyên tử cacbon, đặc biệt là 1 hoặc 2 nguyên tử cacbon. Thông thường, được ưu tiên là các phần tử thể từ nhóm của halogen, ví dụ, flo và clo, (C₁-C₄)-alkyl, tốt hơn là metyl hoặc etyl, (C₁-C₄)-haloalkyl, tốt hơn là triflometyl, (C₁-C₄)-alkoxy, tốt hơn là metoxy hoặc etoxy, (C₁-C₄)-haloalkoxy, nitro và xyano. Đặc biệt ưu tiên ở đây là các phần tử thể metyl, metoxy, flo và clo.

Amino được thể như amino được thể một lần hoặc hai lần có nghĩa là gốc từ nhóm các gốc amino được thể, các gốc này được thể *N*, ví dụ, bởi một hoặc hai gốc giống nhau hoặc khác nhau từ nhóm alkyl, hydroxy, amino, alkoxy, acyl và aryl; tốt hơn là *N*-mono- và *N,N*-dialkylamino, (ví dụ, metylamino, etylamino, *N,N*-dimetylamino, *N,N*-dietylamino, *N,N*-di-*n*-propylamino, *N,N*-diisopropylamino hoặc *N,N*-dibutylamino), các nhóm *N*-mono- hoặc *N,N*-dialkoxyalkylamino (ví dụ, *N*-metoxymetylamino, *N*-metoxyetylamino, *N,N*-di(metoxymetyl)amino hoặc *N,N*-di(metoxyetyl)amino), *N*-mono- và *N,N*-diarylamino, như các anilin tùy ý được thể, axylamino, *N,N*-diaxylamino, *N*-alkyl-*N*-arylamino, *N*-alkyl-*N*-axylamino và cả các *N*-dị vòng no; được ưu tiên ở đây là các gốc alkyl có từ 1 đến 4 nguyên tử cacbon; ở đây, aryl tốt hơn là phenyl hoặc phenyl được thể; đối với axyl, định nghĩa bổ sung dưới đây được áp dụng, tốt hơn là (C₁-C₄)-alkanoyl. Định nghĩa tương tự áp dụng cho hydroxylamino hoặc hydrazino được thể.

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

Phenyl được thể tùy ý tốt hơn là phenyl không được thể hoặc được thể một lần hoặc được thể nhiều lần, tốt hơn là được thể ba lần, bởi gốc giống nhau hoặc khác nhau từ nhóm của halogen, (C₁-C₄)-alkyl, (C₁-C₄)-alkoxy, (C₁-C₄)-alkoxy-(C₁-C₄)-alkoxy, (C₁-C₄)-alkoxy-(C₁-C₄)-alkyl, (C₁-C₄)-haloalkyl, (C₁-C₄)-haloalkoxy, (C₁-C₄)-alkylthio, (C₁-C₄)-haloalkylthio, (C₁-C₄)-alkylsulfinyl (C₁-C₄)-haloalkylsulfinyl, (C₁-C₄)-alkylsulfonyl (C₁-

C₄)haloalkylsulfonyl, xyano, isoxyano và nitro, ví dụ o-, m- và p-tolyl, dimethylphenyl, 2-, 3- và 4-clophenyl, 2-, 3- và 4-flophenyl, 2-, 3- và 4-triflometyl- và 4-triclometylphenyl, 2,4-, 3,5-, 2,5- và 2,3-diclophenyl, o-, m- và p-metoxyphenyl, 4-heptafllophenyl.

Xycloalkyl được thể tùy ý tốt hơn là xycloalkyl không được thể hoặc được thể một lần hoặc được thể nhiều lần, tốt hơn là được thể ba lần, bởi gốc giống nhau hoặc khác nhau từ nhóm của halogen, xyano, (C₁-C₄)alkyl, (C₁-C₄)alkoxy, (C₁-C₄)alkoxy-(C₁-C₄)alkoxy, (C₁-C₄)alkoxy-(C₁-C₄)alkyl, (C₁-C₄)haloalkyl và (C₁-C₄)haloalkoxy, đặc biệt được thể bởi một hoặc hai gốc (C₁-C₄)-alkyl.

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

Các chất đồng phân

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

Các phương pháp và sử dụng

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

Ngoài ra, sáng chế còn bộc lộ việc sử dụng các hợp chất có công thức (I) làm chất diệt sinh vật gây hại, nhất là làm các chất bảo vệ cây trồng.

Trong ngữ cảnh của đơn sáng chế này, thuật ngữ "chất diệt sinh vật gây hại" trong mỗi trường hợp cũng luôn bao gồm thuật ngữ "chất bảo vệ cây trồng".

Hợp chất có công thức (I), có khả năng dung nạp tốt trên thực vật, không gây độc tính đối với động vật máu nóng và có độ tương thích tốt với môi trường, thích hợp để bảo vệ thực vật và các bộ phận của thực vật chống lại các yếu tố kích thích sinh học và phi sinh học, để làm tăng sản lượng thu hoạch, để cải thiện chất lượng của vật liệu thu hoạch và để kiểm soát động vật gây hại, nhất là sâu bọ, động vật thuộc lớp nhện, giun sán, giun tròn và động vật thân mềm, thường gặp trong nông nghiệp, trong làm vườn, trong chăn nuôi, trong nuôi trồng thủy sản, trong trồng rừng, vườn và các cơ sở giải trí, trong bảo vệ sản phẩm và vật liệu bảo quản và trong khu vực vệ sinh.

Trong ngữ cảnh của đơn sáng chế này, thuật ngữ "vệ sinh" cần được hiểu nghĩa là bất kỳ và tất cả các biện pháp, quy trình và thực hành nhằm mục đích ngăn ngừa bệnh, đặc biệt là bệnh do nhiễm trùng, và bảo vệ sức khỏe con người và động vật và/hoặc bảo vệ môi trường và/hoặc giữ sạch sẽ. Theo sáng chế, thuật ngữ này đặc biệt bao gồm các biện pháp làm sạch, khử trùng và tiệt trùng, ví dụ vải hoặc các bề mặt cứng, đặc biệt là bề mặt làm từ thủy tinh, gỗ, xi măng, đồ sứ, đồ gốm, chất dẻo hoặc (các) kim loại, và để đảm bảo rằng không có các sinh vật gây hại về mặt vệ sinh và/hoặc chất tiết của chúng. Phạm vi bảo hộ của sáng chế về mặt này tốt hơn là loại trừ các quy trình phẫu thuật hoặc điều trị trị liệu được áp dụng cho cơ thể người hoặc cơ thể động vật, và các quy trình chẩn đoán được thực hiện trên cơ thể người hoặc cơ thể động vật.

Thuật ngữ "khu vực vệ sinh" bao gồm tất cả các vùng, khu vực kỹ thuật và ứng dụng công nghiệp trong đó các biện pháp, quy trình và thực hành vệ sinh là quan trọng, ví dụ vệ sinh trong bếp, lò bánh, sân bay, phòng tắm, bể bơi, trung tâm thương mại, khách sạn, bệnh viện, chuồng ngựa, trại nuôi động vật, v.v..

Thuật ngữ "sinh vật gây hại về mặt vệ sinh" do đó cần được hiểu nghĩa là một hoặc nhiều động vật gây hại mà sự có mặt của chúng trong khu vực vệ sinh là có vấn đề, đặc biệt vì lý do sức khỏe. Do đó, mục tiêu chính là tránh hoặc giảm thiểu sự có mặt của các sinh vật gây hại về mặt vệ sinh, và/hoặc sự tiếp xúc với chúng, trong khu vực vệ sinh. Đặc biệt, điều này có thể đạt được thông qua việc ứng dụng chất diệt sinh vật gây hại mà có thể được sử dụng để ngăn ngừa sự xâm nhập và giải quyết sự lây nhiễm đã xuất hiện. Các chế

phẩm mà tránh hoặc làm giảm sự tiếp xúc với sinh vật gây hại cũng có thể được sử dụng. Các sinh vật gây hại về mặt vệ sinh bao gồm, ví dụ, các sinh vật được nêu sau đây.

Vì vậy, thuật ngữ “bảo vệ về mặt vệ sinh” bao hàm tất cả các hoạt động để duy trì và/hoặc cải thiện các biện pháp, thủ tục và thực hành vệ sinh.

Các hợp chất có công thức (I) tốt hơn là có thể được sử dụng làm các chất diệt sinh vật gây hại. Các hợp chất này có hoạt tính chống lại các loài nhạy cảm và có tính kháng thông thường và chống lại tất cả hoặc một số giai đoạn phát triển. Các sinh vật gây hại nêu trên bao gồm:

Sinh vật gây hại thuộc ngành chân khớp (Arthropoda), cụ thể là từ lớp nhện (nhện), ví dụ *Acarus* spp., ví dụ *Acarus siro*, *Aceria kuko*, *Aceria sheldoni*, *Aculops* spp., *Aculus* spp., ví dụ *Aculus fockeui*, *Aculus schlechtendali*, *Amblyomma* spp., *Amphitetranychus viennensis*, *Argas* spp., *Boophilus* spp., *Brevipalpus* spp., ví dụ *Brevipalpus phoenicis*, *Bryobia graminum*, *Bryobia praetiosa*, *Centruroides* spp., *Chorioptes* spp., *Dermanyssus gallinae*, *Dermatophagoides pteronyssinus*, *Dermatophagoides farinae*, *Dermacentor* spp., *Eotetranychus* spp., ví dụ *Eotetranychus hickoriae*, *Epitrimeus pyri*, *Eutetranychus* spp., ví dụ *Eutetranychus banksi*, *Eriophyes* spp., ví dụ *Eriophyes pyri*, *Glycyphagus domesticus*, *Halotydeus destructor*, *Hemitarsonemus* spp., ví dụ *Hemitarsonemus latus* (=Polyphagotarsonemus latus), *Hyalomma* spp., *Ixodes* spp., *Latrodectus* spp., *Loxosceles* spp., *Neutrombicula autumnalis*, *Nuphessa* spp., *Oligonychus* spp., ví dụ *Oligonychus coffeae*, *Oligonychus coniferarum*, *Oligonychus ilicis*, *Oligonychus indicus*, *Oligonychus mangiferus*, *Oligonychus pratensis*, *Oligonychus punicae*, *Oligonychus yothersi*, *Ornithodoros* spp., *Ornithonyssus* spp., *Panonychus* spp., ví dụ *Panonychus citri* (=Metatetranychus citri), *Panonychus ulmi* (=Metatetranychus ulmi), *Phyllocoptruta oleivora*, *Platytetranychus multidigituli*, *Polyphagotarsonemus latus*, *Psoroptes* spp., *Rhipicephalus* spp., *Rhizoglyphus* spp., *Sarcoptes* spp., *Scorpio maurus*, *Steneotarsonemus* spp., *Steneotarsonemus spinki*, *Tarsonemus* spp., ví dụ *Tarsonemus confusus*, *Tarsonemus pallidus*, *Tetranychus* spp., ví dụ *Tetranychus canadensis*, *Tetranychus cinnabarinus*, *Tetranychus turkestanii*, *Tetranychus urticae*, *Trombicula alfreddugesi*, *Vaejovis* spp., *Vasates lycopersici*;

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

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

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

thuộc lớp Côn trùng (Insecta), ví dụ, thuộc bộ Gián (Blattodea), ví dụ, *Blatta orientalis*, *Blattella asahinai*, *Blattella germanica*, *Leucophaea maderae*, *Loboptera decipiens*, *Neostylopyga rhombifolia*, *Panchlora* spp., *Parcoblatta* spp., *Periplaneta* spp., ví dụ, *Periplaneta americana*, *Periplaneta australasiae*, *Pycnoscelus surinamensis*, *Supella longipalpa*;

thuộc bộ Cánh cứng (Coleoptera), ví dụ *Acalymma vittatum*, *Acanthoscelides obtectus*, *Adoretus* spp., *Aethina tumida*, *Agelastica alni*, *Agrilus* spp., ví dụ *Agrilus planipennis*, *Agrilus coxalis*, *Agrilus bilineatus*, *Agrilus anxius*, *Agriotes* spp., ví dụ *Agriotes linneatus*, *Agriotes mancus*, *Agriotes obscurus*, *Alphitobius diaperinus*, *Amphimallon solstitialis*, *Anobium punctatum*, *Anomala dubia*, *Anoplophora* spp., ví dụ *Anoplophora glabripennis*, *Anthonomus* spp., ví dụ *Anthonomus grandis*, *Anthrenus* spp., *Apion* spp., *Apogonia* spp., *Athous haemorrhoidales*, *Atomaria* spp., ví dụ *Atomaria linearis*, *Attagenus* spp., *Baris caerulescens*, *Bruchidius obtectus*, *Bruchus* spp., ví dụ *Bruchus pisorum*, *Bruchus rufimanus*, *Cassida* spp., *Cerotoma trifurcata*, *Ceutorrhynchus* spp., ví dụ *Ceutorrhynchus assimilis*, *Ceutorrhynchus quadridens*, *Ceutorrhynchus rapae*, *Chaetocnema* spp., ví dụ *Chaetocnema confinis*, *Chaetocnema denticulata*, *Chaetocnema ectypa*, *Cleonus mendicus*, *Conoderus* spp., *Cosmopolites* spp., ví dụ *Cosmopolites sordidus*, *Costelytra zealandica*, *Ctenicera* spp., *Curculio* spp., ví dụ *Curculio caryae*, *Curculio caryatipes*, *Curculio obtusus*, *Curculio sayi*, *Cryptolestes ferrugineus*, *Cryptolestes pusillus*, *Cryptorhynchus lapathi*, *Cryptorhynchus mangiferae*, *Cylindrocopturus* spp., *Cylindrocopturus adpersus*, *Cylindrocopturus furnissi*, *Dendroctonus* spp., ví dụ *Dendroctonus ponderosae*, *Dermestes* spp., *Diabrotica* spp., ví dụ *Diabrotica balteata*, *Diabrotica barberi*, *Diabrotica undecimpunctata howardi*, *Diabrotica undecimpunctata undecimpunctata*, *Diabrotica virgifera virgifera*, *Diabrotica virgifera zea*, *Dichocrocis* spp., *Dicladispa armigera*, *Diloboderus* spp., *Epicaerus* spp., *Epilachna* spp., ví dụ *Epilachna borealis*, *Epilachna varivestis*, *Epitrix* spp., ví dụ *Epitrix cucumeris*, *Epitrix fuscata*, *Epitrix hirtipennis*, *Epitrix subcrinita*, *Epitrix tuberosa*, *Faustinus* spp., *Gibbium psyllodes*, *Gnathocerus cornutus*, *Hellula undalis*, *Heteronychus arator*, *Heteronyx* spp., *Hoplia argentea*, *Hylamorpha elegans*, *Hylotrupes bajulus*, *Hypera*

postica, *Hypomeces squamosus*, *Hypothenemus* spp., ví dụ *Hypothenemus hampei*, *Hypothenemus obscurus*, *Hypothenemus pubescens*, *Lachnosterna consanguinea*, *Lasioderma serricorne*, *Latheticus oryzae*, *Lathridius* spp., *Lema* spp., *Leptinotarsa decemlineata*, *Leucoptera* spp., ví dụ *Leucoptera coffeella*, *Limonius ectypus*, *Lissorhoptrus oryzophilus*, *Listronotus* (= *Hyperodes*) spp., *Lixus* spp., *Luperodes* spp., *Luperomorpha xanthodera*, *Lyctus* spp., *Megacyllene* spp., ví dụ *Megacyllene robiniae*, *Megascelis* spp., *Melanotus* spp., ví dụ *Melanotus longulus oregonensis*, *Meligethes aeneus*, *Melolontha* spp., ví dụ *Melolontha melolontha*, *Migdolus* spp., *Monochamus* spp., *Naupactus xanthographus*, *Necrobia* spp., *Neogalerucella* spp., *Niptus hololeucus*, *Oryctes rhinoceros*, *Oryzaephilus surinamensis*, *Oryzaphagus oryzae*, *Otiorhynchus* spp., ví dụ *Otiorhynchus cribricollis*, *Otiorhynchus ligustici*, *Otiorhynchus ovatus*, *Otiorhynchus rugosostriatus*, *Otiorhynchus sulcatus*, *Oulema* spp., ví dụ *Oulema melanopus*, *Oulema oryzae*, *Oxycetonia jucunda*, *Phaedon cochleariae*, *Phyllophaga* spp., *Phyllophaga helleri*, *Phyllotreta* spp., ví dụ *Phyllotreta armoraciae*, *Phyllotreta pusilla*, *Phyllotreta ramosa*, *Phyllotreta striolata*, *Popillia japonica*, *Premnotrypes* spp., *Prostephanus truncatus*, *Psylliodes* spp., ví dụ *Psylliodes affinis*, *Psylliodes chrysocephala*, *Psylliodes punctulata*, *Ptinus* spp., *Rhizobius ventralis*, *Rhizopertha dominica*, *Rhynchophorus* spp., *Rhynchophorus ferrugineus*, *Rhynchophorus palmarum*, *Scolytus* spp., ví dụ *Scolytus multistriatus*, *Sinoxylon perforans*, *Sitophilus* spp., ví dụ *Sitophilus granarius*, *Sitophilus linearis*, *Sitophilus oryzae*, *Sitophilus zeamais*, *Sphenophorus* spp., *Stegobium paniceum*, *Sternechus* spp., ví dụ *Sternechus paludatus*, *Symphyletes* spp., *Tanymecus* spp., ví dụ *Tanymecus dilaticollis*, *Tanymecus indicus*, *Tanymecus palliatus*, *Tenebrio molitor*, *Tenebrioides mauretanicus*, *Tribolium* spp., ví dụ *Tribolium audax*, *Tribolium castaneum*, *Tribolium confusum*, *Trogoderma* spp., *Tychius* spp., *Xylotrechus* spp., *Zabrus* spp., ví dụ *Zabrus tenebrioides*;

thuộc bộ Cánh da (Dermaptera), ví dụ, *Anisolabis maritime*, *Forficula auricularia*, *Labidura riparia*;

thuộc bộ Hai cánh (Diptera), ví dụ *Aedes* spp., ví dụ *Aedes aegypti*, *Aedes albopictus*, *Aedes sticticus*, *Aedes vexans*, *Agromyza* spp., ví dụ *Agromyza frontella*, *Agromyza parvicornis*, *Anastrepha* spp., *Anopheles* spp., ví dụ *Anopheles quadrimaculatus*, *Anopheles gambiae*, *Asphondylia* spp., *Bactrocera* spp., ví dụ *Bactrocera cucurbitae*,

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

thuộc bộ Cánh nửa (Hemiptera), ví dụ *Acizzia acaciaebaileyanae*, *Acizzia dodonaeae*, *Acizzia uncatoides*, *Acrida turrita*, *Acyrtosiphon* spp., ví dụ *Acyrtosiphon pisum*, *Acrogonia* spp., *Aeneolamia* spp., *Agonosцена* spp., *Aleurocanthus* spp., *Aleyrodes proletella*, *Aleurolobus barodensis*, *Aleurothrixus floccosus*, *Allocaridara malayensis*, *Amrasca* spp., ví dụ *Amrasca bigutulla*, *Amrasca devastans*, *Anuraphis cardui*, *Aonidiella* spp., ví dụ *Aonidiella aurantii*, *Aonidiella citrina*, *Aonidiella inornata*, *Aphanostigma piri*, *Aphis* spp., ví dụ *Aphis citricola*, *Aphis craccivora*, *Aphis fabae*, *Aphis forbesi*, *Aphis glycines*, *Aphis gossypii*, *Aphis hederarum*, *Aphis illinoisensis*, *Aphis middletoni*, *Aphis nasturtii*, *Aphis nerii*, *Aphis pomi*, *Aphis spiraeicola*, *Aphis viburniphila*, *Arboridia apicalis*, *Arytainilla* spp., *Aspidiella* spp., *Aspidiotus* spp., ví dụ *Aspidiotus nerii*, *Atanus* spp., *Aulacorthum solani*, *Bemisia tabaci*, *Blastopsylla occidentalis*, *Boreioglycaspis*

melaleuca, *Brachycaudus helichrysi*, *Brachycolus* spp., *Brevicoryne brassicae*, *Cacopsylla* spp., ví dụ *Cacopsylla pyricola*, *Calligypona marginata*, *Capulinia* spp., *Carneocephala fulgida*, *Ceratovacuna lanigera*, *Cercopidae*, *Ceroplastes* spp., *Chaetosiphon fragaefolii*, *Chionaspis tegalensis*, *Chlorita onukii*, *Chondracris rosea*, *Chromaphis juglandicola*, *Chrysomphalus aonidum*, *Chrysomphalus ficus*, *Cicadulina mbila*, *Coccomytilus halli*, *Coccus* spp., ví dụ *Coccus hesperidum*, *Coccus longulus*, *Coccus pseudomagnoliarum*, *Coccus viridis*, *Cryptomyzus ribis*, *Cryptoneossa* spp., *Ctenarytaina* spp., *Dalbulus* spp., *Dialeurodes chittendeni*, *Dialeurodes citri*, *Diaphorina citri*, *Diaspis* spp., *Diuraphis* spp., *Doralis* spp., *Drosicha* spp., *Dysaphis* spp., ví dụ *Dysaphis apiifolia*, *Dysaphis plantaginea*, *Dysaphis tulipae*, *Dysmicoccus* spp., *Empoasca* spp., ví dụ *Empoasca abrupta*, *Empoasca fabae*, *Empoasca maligna*, *Empoasca solana*, *Empoasca stevensi*, *Eriosoma* spp., ví dụ *Eriosoma americanum*, *Eriosoma lanigerum*, *Eriosoma pyricola*, *Erythroneura* spp., *Eucalyptolyma* spp., *Euphyllura* spp., *Euscelis bilobatus*, *Ferrisia* spp., *Fiorinia* spp., *Furcaspis oceanica*, *Geococcus coffeae*, *Glycaspis* spp., *Heteropsylla cubana*, *Heteropsylla spinulosa*, *Homalodisca coagulata*, *Hyalopterus arundinis*, *Hyalopterus pruni*, *Icerya* spp., ví dụ *Icerya purchasi*, *Idiocerus* spp., *Idioscopus* spp., *Laodelphax striatellus*, *Lecanium* spp., ví dụ *Lecanium corni* (= *Parthenolecanium corni*), *Lepidosaphes* spp., ví dụ *Lepidosaphes ulmi*, *Lipaphis erysimi*, *Lopholeucaspis japonica*, *Lycorma delicatula*, *Macrosiphum* spp., ví dụ *Macrosiphum euphorbiae*, *Macrosiphum lili*, *Macrosiphum rosae*, *Macrosteles facifrons*, *Mahanarva* spp., *Melanaphis sacchari*, *Metcalfiella* spp., *Metcalfa pruinosa*, *Metopolophium dirhodum*, *Monellia costalis*, *Monelliopsis pecanis*, *Myzus* spp., ví dụ *Myzus ascalonicus*, *Myzus cerasi*, *Myzus ligustri*, *Myzus ornatus*, *Myzus persicae*, *Myzus nicotianae*, *Nasonovia ribisnigri*, *Neomaskellia* spp., *Nephotettix* spp., ví dụ, *Nephotettix cincticeps*, *Nephotettix nigropictus*, *Nettigoniella spectra*, *Nilaparvata lugens*, *Oncometopia* spp., *Orthezia praelonga*, *Oxya chinensis*, *Pachypsylla* spp., *Parabemisia myricae*, *Paratrioza* spp., ví dụ, *Paratrioza cockerelli*, *Parlatoria* spp., *Pemphigus* spp., ví dụ, *Pemphigus bursarius*, *Pemphigus populivenerae*, *Peregrinus maidis*, *Perkinsiella* spp., *Phenacoccus* spp., ví dụ, *Phenacoccus madeirensis*, *Phloeomyzus passerinii*, *Phorodon humuli*, *Phylloxera* spp., ví dụ, *Phylloxera devastatrix*, *Phylloxera notabilis*, *Pinnaspis aspidistrae*, *Planococcus* spp., ví dụ, *Planococcus citri*, *Prosopidopsylla flava*, *Protopulvinaria pyrifomis*, *Pseudaulacaspis pentagona*, *Pseudococcus* spp., ví dụ, *Pseudococcus calceolariae*,

Pseudococcus comstocki, *Pseudococcus longispinus*, *Pseudococcus maritimus*, *Pseudococcus viburni*, *Psyllopsiopsis* spp., *Psylla* spp., ví dụ, *Psylla buxi*, *Psylla mali*, *Psylla pyri*, *Pteromalus* spp., *Pulvinaria* spp., *Pyrilla* spp., *Quadraspidiotus* spp., ví dụ, *Quadraspidiotus juglansregiae*, *Quadraspidiotus ostreaeformis*, *Quadraspidiotus perniciosus*, *Quesada gigas*, *Rastrococcus* spp., *Rhopalosiphum* spp., ví dụ, *Rhopalosiphum maidis*, *Rhopalosiphum oxyacanthae*, *Rhopalosiphum padi*, *Rhopalosiphum rufiabdominale*, *Saissetia* spp., ví dụ, *Saissetia coffeae*, *Saissetia miranda*, *Saissetia neglecta*, *Saissetia oleae*, *Scaphoideus titanus*, *Schizaphis graminum*, *Selenaspis articulatus*, *Sipha flava*, *Sitobion avenae*, *Sogata* spp., *Sogatella furcifera*, *Sogatodes* spp., *Stictocephala festina*, *Siphoninus phillyreae*, *Tenalaphara malayensis*, *Tetragonocephala* spp., *Tinocallis caryaefoliae*, *Tomaspis* spp., *Toxoptera* spp., ví dụ, *Toxoptera aurantii*, *Toxoptera citricidus*, *Trialeurodes vaporariorum*, *Trioza* spp., ví dụ, *Trioza diospyri*, *Typhlocyba* spp., *Unaspis* spp., *Viteus vitifolii*, *Zygina* spp.;

thuộc phân bộ cánh không đều (Heteroptera), ví dụ *Aelia* spp., *Anasa tristis*, *Antestiopsis* spp., *Boisea* spp., *Blissus* spp., *Calocoris* spp., *Campylomma livida*, *Cavelerius* spp., *Cimex* spp., ví dụ *Cimex adjunctus*, *Cimex hemipterus*, *Cimex lectularius*, *Cimex pilosellus*, *Collaria* spp., *Creontiades dilutus*, *Dasynus piperis*, *Dichelops furcatus*, *Diconocoris hewetti*, *Dysdercus* spp., *Euschistus* spp., ví dụ *Euschistus heros*, *Euschistus servus*, *Euschistus tristigmus*, *Euschistus variolarius*, *Eurydema* spp., *Eurygaster* spp., *Halyomorpha halys*, *Heliopeltis* spp., *Horcias nobilellus*, *Leptocoris* spp., *Leptocoris varicornis*, *Leptoglossus occidentalis*, *Leptoglossus phyllopus*, *Lygocoris* spp., ví dụ *Lygocoris pabulinus*, *Lygus* spp., ví dụ *Lygus elisus*, *Lygus hesperus*, *Lygus lineolaris*, *Macropes excavatus*, *Megacopta cribraria*, *Miridae*, *Monalonion atratum*, *Nezara* spp., ví dụ *Nezara viridula*, *Nysius* spp., *Oebalus* spp., *Pentomidae*, *Piesma quadrata*, *Piezodorus* spp., ví dụ *Piezodorus guildinii*, *Psallus* spp., *Pseudacysta perseae*, *Rhodnius* spp., *Sahlbergella singularis*, *Scaptocoris castanea*, *Scotinophora* spp., *Stephanitis nashi*, *Tibraca* spp., *Triatoma* spp.;

thuộc bộ Cánh màng (Hymenoptera), ví dụ *Acromyrmex* spp., *Athalia* spp., ví dụ *Athalia rosae*, *Atta* spp., *Camponotus* spp., *Dolichovespula* spp., *Diprion* spp., ví dụ *Diprion similis*, *Hoplocampa* spp., ví dụ *Hoplocampa cookei*, *Hoplocampa testudinea*, *Lasius* spp., *Linepithema* (*Iridomyrmex*) *humile*, *Monomorium pharaonis*, *Paratrechina* spp.,

Paravespula spp., *Plagiolepis* spp., *Sirex* spp., ví dụ *Sirex noctilio*, *Solenopsis invicta*, *Tapinoma* spp., *Technomyrmex albipes*, *Urocerus* spp., *Vespa* spp., ví dụ *Vespa crabro*, *Wasmannia auropunctata*, *Xeris* spp.;

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

thuộc bộ Cánh bằng (Isoptera), ví dụ, *Coptotermes* spp., ví dụ, *Coptotermes formosanus*, *Cornitermes cumulans*, *Cryptotermes* spp., *Incisitermes* spp., *Kaloterms* spp., *Microtermes obesi*, *Nasutitermes* spp., *Odontotermes* spp., *Porotermes* spp., *Reticulitermes* spp., ví dụ, *Reticulitermes flavipes*, *Reticulitermes hesperus*;

thuộc bộ Cánh vẩy (Lepidoptera), ví dụ *Achroia grisella*, *Acronicta major*, *Adoxophyes* spp., ví dụ *Adoxophyes orana*, *Aedia leucomelas*, *Agrotis* spp., ví dụ *Agrotis segetum*, *Agrotis ipsilon*, *Alabama* spp., ví dụ *Alabama argillacea*, *Amyelois transitella*, *Anarsia* spp., *Anticarsia* spp., ví dụ *Anticarsia gemmatalis*, *Argyroplote* spp., *Autographa* spp., *Barathra brassicae*, *Blastodacna atra*, *Borbo cinnara*, *Bucculatrix thurberiella*, *Bupalus piniarius*, *Busseola* spp., *Cacoecia* spp., *Caloptilia theivora*, *Capua reticulana*, *Carpocapsa pomonella*, *Carposina niponensis*, *Cheimatobia brumata*, *Chilo* spp., ví dụ *Chilo plejadellus*, *Chilo suppressalis*, *Choreutis pariana*, *Choristoneura* spp., *Chrysodeixis chalcites*, *Clysia ambiguella*, *Cnaphalocerus* spp., *Cnaphalocrocis medinalis*, *Cnephasia* spp., *Conopomorpha* spp., *Conotrachelus* spp., *Copitarsia* spp., *Cydia* spp., ví dụ *Cydia nigricana*, *Cydia pomonella*, *Dalaca noctuoides*, *Diaphania* spp., *Diparopsis* spp., *Diatraea saccharalis*, *Dioryctria* spp., ví dụ *Dioryctria zimmermani*, *Earias* spp., *Ecdytolopha aurantium*, *Elasmopalpus lignosellus*, *Eldana saccharina*, *Ephestia* spp., ví dụ *Ephestia elutella*, *Ephestia kuehniella*, *Epinotia* spp., *Epiphyas postvittana*, *Erannis* spp., *Erschoviella musculana*, *Etiella* spp., *Eudocima* spp., *Eulia* spp., *Eupoecilia ambiguella*, *Euproctis* spp., ví dụ *Euproctis chrysorrhoea*, *Euxoa* spp., *Feltia* spp., *Galleria mellonella*, *Gracillaria* spp., *Grapholitha* spp., ví dụ *Grapholita molesta*, *Grapholita prunivora*, *Hedylepta* spp., *Helicoverpa* spp., ví dụ *Helicoverpa armigera*, *Helicoverpa zea*, *Heliothis* spp., ví dụ *Heliothis virescens*, *Hepialus* spp., ví dụ *Hepialus humuli*, *Hofmannophila pseudospretella*, *Homoeosoma* spp., *Homona* spp., *Hyponomeuta padella*, *Kakivoria flavofasciata*, *Lampides* spp., *Laphygma* spp., *Laspeyresia molesta*, *Leucinodes orbonalis*, *Leucoptera* spp., ví dụ *Leucoptera coffeella*, *Lithocolletis* spp., ví dụ

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

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

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

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

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

thuộc bộ Cánh tơ (Thysanoptera), ví dụ, *Anaphothrips obscurus*, *Baliothrips biformis*, *Chaetanaphothrips leeuweni*, *Drepanothrips reuteri*, *Enneothrips flavens*, *Frankliniella* spp., ví dụ, *Frankliniella fusca*, *Frankliniella occidentalis*, *Frankliniella schultzei*, *Frankliniella tritici*, *Frankliniella vaccinii*, *Frankliniella williamsi*, *Haplothrips* spp., *Heliothrips* spp., *Hercinothrips femoralis*, *Kakothrips* spp., *Rhipiphorothrips cruentatus*, *Scirtothrips* spp., *Taeniothrips cardamomi*, *Thrips* spp., ví dụ, *Thrips palmi*, *Thrips tabaci*;

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

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

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

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

Các sinh vật gây hại thực vật thuộc ngành Giun tròn (Nematoda), tức là phytoparasitic giun tròn, cụ thể là *Aglenchus* spp., ví dụ *Aglenchus agricola*, *Anguina* spp., ví dụ *Anguina tritici*, *Aphelenchoides* spp., ví dụ *Aphelenchoides arachidis*, *Aphelenchoides fragariae*, *Belonolaimus* spp., ví dụ *Belonolaimus gracilis*, *Belonolaimus longicaudatus*, *Belonolaimus nortoni*, *Bursaphelenchus* spp., ví dụ *Bursaphelenchus cocophilus*, *Bursaphelenchus eremus*, *Bursaphelenchus xylophilus*, *Cacopaurus* spp., ví dụ *Cacopaurus pestis*, *Criconemella* spp., ví dụ *Criconemella curvata*, *Criconemella onoensis*, *Criconemella ornata*, *Criconemella rusium*, *Criconemella xenoplax* (= *Mesocriconema xenoplax*), *Criconemoides* spp., ví dụ *Criconemoides ferniae*, *Criconemoides onoense*, *Criconemoides ornatum*, *Ditylenchus* spp., ví dụ *Ditylenchus dipsaci*, *Dolichodorus* spp., *Globodera* spp., ví dụ *Globodera pallida*, *Globodera rostochiensis*, *Helicotylenchus* spp., ví dụ *Helicotylenchus dihystra*, *Hemicriconemoides* spp., *Hemicyclophora* spp., *Heterodera* spp., ví dụ *Heterodera avenae*, *Heterodera glycines*, *Heterodera schachtii*, *Hirschmaniella* spp., *Hoplolaimus* spp., *Longidorus* spp., ví dụ *Longidorus africanus*, *Meloidogyne* spp., ví dụ *Meloidogyne chitwoodi*, *Meloidogyne fallax*, *Meloidogyne hapla*, *Meloidogyne incognita*, *Meloinema* spp.,

Nacobbus spp., *Neotylenchus* spp., *Paralongidorus* spp., *Paraphelenchus* spp., *Paratrichodorus* spp., ví dụ *Paratrichodorus minor*, *Paratylenchus* spp., *Pratylenchus* spp., ví dụ *Pratylenchus penetrans*, *Pseudohalenchus* spp., *Psilenchus* spp., *Punctodera* spp., *Quinisulcius* spp., *Radopholus* spp., ví dụ *Radopholus citrophilus*, *Radopholus similis*, *Rotylenchulus* spp., *Rotylenchus* spp., *Scutellonema* spp., *Subanguina* spp., *Trichodorus* spp., ví dụ *Trichodorus obtusus*, *Trichodorus primitivus*, *Tylenchorhynchus* spp., ví dụ *Tylenchorhynchus annulatus*, *Tylenchulus* spp., ví dụ *Tylenchulus semipenetrans*, *Xiphinema* spp., ví dụ *Xiphinema index*.

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

Các chế phẩm bào chế/Dạng sử dụng

Sáng chế còn đề cập đến các chế phẩm bào chế, cụ thể là các chế phẩm bào chế để phòng ngừa động vật gây hại không mong muốn. Chế phẩm bào chế có thể được đưa vào động vật gây hại và/hoặc ở khu vực sống của chúng.

Chế phẩm bào chế theo sáng chế có thể được cung cấp cho người sử dụng cuối ở dạng sử dụng “sẵn để dùng”, tức là các chế phẩm bào chế thể được đưa trực tiếp lên thực vật hoặc hạt bằng thiết bị thích hợp, như thiết bị phun hoặc phun mù. Theo cách khác, các chế phẩm bào chế có thể được cung cấp cho người sử dụng cuối ở dạng dịch cô đặc mà nó cần phải được pha loãng, tốt hơn là bằng nước, trước khi sử dụng. Nếu không được chỉ ra theo cách khác, từ “chế phẩm bào chế” theo đó có nghĩa là dạng cô đặc, trong khi đó từ “dạng dùng” có nghĩa là người sử dụng cuối là dung dịch “sẵn để dùng”, tức là thường là chế phẩm bào chế được pha loãng như vậy.

Chế phẩm bào chế theo sáng chế có thể được điều chế theo cách thông thường, ví dụ bằng cách trộn hợp chất theo sáng chế với một hoặc nhiều chất phụ trợ thích hợp, như được bộc lộ ở đây.

Chế phẩm bào chế chứa ít nhất một hợp chất theo sáng chế và ít nhất một chất phụ trợ thích hợp trong nông nghiệp, ví dụ (các) chất mang và/hoặc (các) chất hoạt động bề mặt.

Chất mang là chất rắn hoặc lỏng, tự nhiên hoặc tổng hợp, hữu cơ hoặc vô cơ mà chúng thông thường ở dạng trơ. Chất mang thường cải thiện được việc áp dụng các hợp chất, chẳng hạn, lên thực vật, các bộ phận của thực vật hoặc hạt. Ví dụ về các chất mang rắn thích hợp bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, muối amoni, cụ thể là amoni sulfat, amoni phosphat và amoni nitrat, bột đá tự nhiên, như cao lanh, đất sét, bột talc, đá phấn, thạch anh, attapulgit, montmorillonit và đất diatomit, silicagel và bột đá tổng hợp, như silic oxit nghiền mịn, nhôm oxit và các silicat. Ví dụ về các chất mang rắn hữu dụng điển hình để tạo hạt mịn bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, đá tự nhiên nghiền và phân mảnh như canxit, đá hoa cương, đá bột, sepiolit, dolomit và các hạt mịn tổng hợp từ bột vô cơ và hữu cơ và hạt mịn từ vật liệu hữu cơ như giấy, mùn cưa, vỏ dừa, lõi ngô và cuống thuốc lá. Ví dụ về các chất mang thích hợp bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, nước, dung môi hữu cơ và tổ hợp của chúng. Ví dụ về các dung môi thích hợp bao gồm chất lỏng hóa học hữu cơ phân cực và không phân cực, ví dụ thuộc nhóm hydrocacbon thơm và không thơm (như xyclohexan, parafin, alkylbenzen, xylen, toluen, tetrahydronaphtalen, alkylnaphtalen, hydrocacbon thơm được clo hóa hoặc béo được clo hóa như clobenzen, cloetylen hoặc metylen clorua), rượu và polyol (mà có thể tùy ý cũng được thế, được este hóa và/hoặc được este hóa, như etanol, propanol, butanol, rượu benzylic, xyclohexanol hoặc glycol), keton (như axeton, metyl etyl keton, metyl isobutyl keton, axetophenon, hoặc xyclohexanon), este (bao gồm chất béo và dầu) và (poly)ete, amin không được thế và được thế, amit (như dimetylformamit hoặc amit của axit béo) và este của chúng, lactam (như N-alkylpyrrolidon, cụ thể là N-metylpyrrolidon) và lacton, sulfon và sulfoxit (như dimetyl sulfoxit), dầu có nguồn gốc thực vật hoặc động vật, nitril (alkyl nitril như axetonitril, propionotrilie, butyronitril, hoặc nitril thơm, như benzonitril), este của axit cacbonic (este vòng của axit cacbonic, như etylen cacbonat, propylen cacbonat, butylen cacbonat, hoặc dialkyl este của axit cacbonic, như dimetyl cacbonat, dietyl cacbonat, dipropyl cacbonat, dibutyl cacbonat, dioctyl cacbonat). Chất mang cũng có thể là chất độn

dạng khí hóa lỏng, tức là chất lỏng ở dạng khí ở nhiệt độ tiêu chuẩn và áp suất tiêu chuẩn, ví dụ các chất đẩy dạng sol khí như halohydrocarbon, butan, propan, nitơ và cacbon dioxit.

Các chất mang rắn được ưu tiên được chọn từ đất sét, bột talc và silic oxit.

Các chất mang rắn được ưu tiên được chọn từ nước, amit và este của axit béo của chúng, hydrocacbon thơm và không thơm, lactam, lacton, este của axit cacbonic, keton, (poly)ete.

Lượng chất mang thường nằm trong khoảng từ 1 đến 99,99%, tốt hơn nằm trong khoảng từ 5 đến 99,9%, tốt hơn nữa nằm trong khoảng từ 10 đến 99,5%, và tốt hơn nhất nằm trong khoảng từ 20 đến 99% theo khối lượng so với chế phẩm bào chế.

Các chất mang lỏng thường có mặt trong khoảng từ 20 đến 90%, ví dụ 30 đến 80% khối lượng của chế phẩm bào chế.

Các chất mang rắn thường có mặt trong khoảng từ 0 đến 50%, tốt hơn là 5 đến 45%, ví dụ 10 đến 30% khối lượng của chế phẩm bào chế.

Nếu chế phẩm bào chế chứa hai hoặc nhiều chất mang, thì các khoảng đưa ra để chỉ tổng lượng chất mang.

Chất hoạt động bề mặt có thể là chất hoạt động bề mặt ion (cation hoặc anion), lưỡng tính hoặc không ion, như (các) chất nhũ hóa ion hoặc không ion, (các) chất tạo bọt, (các) chất phân tán, (các) chất tạo ẩm, (các) chất tăng cường khả năng xuyên thấu và hỗn hợp bất kỳ của các chất này. Ví dụ về các chất hoạt động bề mặt thích hợp bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, các muối của axit polyacrylic, dẫn xuất poly(α -acrylat được etoxylat hóa, muối của axit lignosulfonic (như natri lignosulfonat), muối của axit phenolsulfonic hoặc axit naphtalenulfonic, sản phẩm trùng ngưng của etylen oxit và/hoặc propylen oxit với hoặc không với rượu, axit béo hoặc amin béo (ví dụ, este của polyoxyetylen và axit béo như dầu thầu dầu etoxylat, các ete polyoxyetylen của rượu béo, ví dụ alkylaryl polyglycol ete), phenol được thế (tốt hơn là alkylphenol hoặc arylphenol), muối của este của sulfosuccinic, dẫn xuất taurin (tốt hơn là alkyl taurat), este phosphoric của rượu polyetoxyl hóa hoặc phenol, este béo của polyol (như este của axit béo của glyxerol, sorbitol hoặc sucroza), các sulfat (như alkyl sulfat và alkyl ete sulfat), sulfonat (ví dụ, alkylsulfonat, arylsulfonat và alkylbenzen sulfonat), polyme được sulfonat hóa của naphtalen/formaldehyt, phosphat este, protein hydrolysat, dịch thải lignosulphit và

metylxenluloza. Việc viện dẫn bất kỳ đến các muối trong đoạn này tốt hơn để chỉ các muối kiềm, kiềm thổ và amoni tương ứng.

Các chất hoạt động bề mặt được ưu tiên được chọn từ dẫn xuất poly(α)acrylat được etoxylat hóa, sản phẩm trùng ngưng của etylen oxit và/hoặc propylen oxit với rượu, este của polyoxyetylen và axit béo, alkylbenzen sulfonat, polyme được sulfonat hóa của naphtalen/formaldehyt, este của polyoxyetylen và axit béo như dầu thầu dầu etoxylat, natri lignosulfonat và arylphenol etoxylat.

Lượng chất hoạt động bề mặt thường nằm trong khoảng từ 5 đến 40%, ví dụ 10 đến 20%, khối lượng của chế phẩm bào chế.

Các ví dụ khác về các chất phụ trợ thích hợp bao gồm chất đẩy nước, chất hút ẩm, chất liên kết (chất kết dính, chất dính, tác nhân cố định, như carboxymetylxenluloza, các polyme tự nhiên và tổng hợp ở dạng bột, hạt mịn hoặc nhựa, như gôm arabic, rượu polyvinyl và polyvinyl axetat, các phospholipit tự nhiên như xephalin và lexithin và các phospholipit tổng hợp, polyvinylpyrrolidon, polyvinyl axetat, rượu polyvinyl và tyloza), chất làm đặc và chất làm đặc thứ cấp (như xenluloza ete, dẫn xuất axit acrylic, gôm xanthan, đất sét biến tính, ví dụ sản phẩm có sẵn với tên gọi Bentone, và silic dioxit được nghiền mịn), chất ổn định (ví dụ chất ổn định trong điều kiện lạnh, chất bảo quản (ví dụ, diclophen, hemiformal của rượu benzylic, 1,2-benzisothiazolin-3-on, 2-metyl-4-isothiazolin-3-on), chất chống oxy hóa, chất ổn định ánh sáng, cụ thể chất ổn định UV, hoặc các chất khác mà cải thiện độ ổn định hóa học và/hoặc vật lý), thuốc nhuộm hoặc chất màu (như chất màu vô cơ, ví dụ sắt oxit, titan oxit và xanh Prussian; thuốc nhuộm hữu cơ, ví dụ thuốc nhuộm alizarin, azo và phtaloxyanin kim loại), chất chống tạo bọt (ví dụ, chất chống tạo bọt silicon và magie stearat), chất chống đông, chất dính, gibberelin và các chất phụ trợ gia công, các dầu khoáng và dầu thực vật, nước hoa, sáp và chất dinh dưỡng (bao gồm các chất dinh dưỡng vi lượng, như muối của sắt, mangan, bo, đồng, coban, molybden và kẽm), các chất keo bảo vệ, các chất xúc biến, chất thấm, tác nhân chelat hóa và chất tạo phức.

Việc chọn các chất phụ trợ phụ thuộc vào phương thức áp dụng dự định của hợp chất theo sáng chế và/hoặc liên quan đến các đặc tính vật lý của (các) hợp chất. Ngoài ra, các chất phụ trợ có thể được chọn để truyền các đặc tính cụ thể (kỹ thuật, vật lý và/hoặc sinh học)

cho các chế phẩm bào chế hoặc các dạng sử dụng được điều chế từ đó. Việc chọn các chất phụ trợ có thể cho phép tùy chỉnh các chế phẩm bào chế theo các nhu cầu cụ thể.

Chế phẩm bào chế chứa lượng hữu hiệu trừ sâu/trừ ve bét/điệt giun tròn của (các) hợp chất theo sáng chế. Thuật ngữ "lượng hữu hiệu" dùng để chỉ lượng, là đủ để phòng trừ côn trùng/nhện/giun tròn gây hại trên cây trồng hoặc đủ để bảo vệ vật liệu và lượng này không gây ra thiệt hại đáng kể cho thực vật được xử lý. Lượng như vậy có thể thay đổi trong khoảng rộng và phụ thuộc vào các yếu tố khác nhau, như loài côn trùng/nhện/giun tròn cần phòng trừ, cây trồng hoặc vật liệu được xử lý, điều kiện khí hậu và hợp chất theo sáng chế cụ thể được sử dụng. Thông thường, chế phẩm bào chế theo sáng chế chứa từ 0,01 đến 99% khối lượng, tốt hơn là từ 0,05 đến 98% khối lượng, tốt hơn là từ 0,1 đến 95% khối lượng, còn tốt hơn nữa là từ 0,5 đến 90% khối lượng, tốt nhất là từ 1 đến 80% khối lượng của hợp chất theo sáng chế. Chế phẩm bào chế có thể chứa hai hoặc nhiều hợp chất theo sáng chế. Trong trường hợp như vậy, các khoảng đã đưa ra chỉ tổng lượng của các hợp chất theo sáng chế.

Chế phẩm bào chế theo sáng chế có thể ở loại chế phẩm bào chế thông thường bất kỳ, như dung dịch (ví dụ, dung dịch nước), nhũ tương, hỗn dịch trên nền nước và dầu, bột (ví dụ bột thấm ướt, bột hòa tan), mù, hồ, hạt (ví dụ, hạt hòa tan, hạt phát tán), dịch cô đặc huyền phù nhũ tương, các sản phẩm tự nhiên tẩm hợp chất theo sáng chế, phân bón và cả vi nang trong chất nền polyme. Hợp chất theo sáng chế có thể có mặt ở dạng huyền phù, nhũ tương hoặc hòa tan. Ví dụ về loại chế phẩm bào chế thích hợp cụ thể là dung dịch, dịch cô đặc hòa tan trong nước (ví dụ SL, LS), dịch cô đặc có thể phân tán (DC), huyền phù và dịch cô đặc huyền phù (ví dụ SC, OD, OF, FS), dịch cô đặc có thể nhũ hóa (ví dụ EC), nhũ tương (ví dụ EW, EO, ES, ME, SE), viên nang (ví dụ CS, ZC), hồ, viên ngậm, bột thấm ướt hoặc mù (ví dụ WP, SP, WS, DP, DS), dạng nén (ví dụ BR, TB, DT), hạt (ví dụ WG, SG, GR, FG, GG, MG), vật phẩm diệt côn trùng (ví dụ LN), cũng như các chế phẩm bào chế dạng gel để xử lý vật liệu nhân giống thực vật như hạt (ví dụ GW, GF). Các loại chế phẩm bào chế này và loại chế phẩm bào chế khác được xác định bởi Tổ chức Nông Lương Liên hợp quốc (the Food and Agriculture Organization of the United Nations - FAO). Tổng quan được đưa ra trong tài liệu "Catalogue of pesticide formulation types and international coding system", Technical Monograph No. 2, 6th Ed. May 2008, Croplife International.

Tốt hơn là, chế phẩm bào chế theo sáng chế ở dạng thuộc một trong các loại sau: EC, SC, FS, SE, OD, WG, WP, CS, tốt hơn là EC, SC, OD, WG, CS.

Chi tiết hơn về các ví dụ về các loại chế phẩm bào chế và quy trình điều chế chúng được đưa ra dưới đây. Nếu hai hoặc nhiều hợp chất theo sáng chế có mặt, thì lượng đưa ra của hợp chất theo sáng chế để chỉ tổng lượng các hợp chất theo sáng chế. Điều này áp dụng các sửa đổi cần thiết đối với thành phần khác bất kỳ của chế phẩm bào chế, nếu hai hoặc nhiều đại diện của thành phần này, ví dụ tác nhân làm ẩm, chất liên kết, có mặt.

i) Dịch cô đặc hòa tan trong nước (SL, LS)

10-60% khối lượng của ít nhất một hợp chất theo sáng chế và 5-15% khối lượng chất hoạt động bề mặt (ví dụ sản phẩm trùng ngưng của etylen oxit và/hoặc propylen oxit với rượu) được hòa tan với lượng như vậy của nước và/hoặc dung môi có thể hòa tan trong nước (ví dụ rượu như propylen glycol hoặc cacbonat như propylen cacbonat) để thu được tổng lượng là 100% khối lượng. Trước khi dùng, thể cô đặc được hòa tan với nước.

ii) Dịch cô đặc có thể phân tán (dịch cô đặc có thể phân tán - DC)

5-25% khối lượng của ít nhất một hợp chất theo sáng chế và 1-10% khối lượng chất hoạt động bề mặt và/hoặc chất liên kết (ví dụ polyvinylpyrrolidon) được hòa tan với lượng như vậy của dung môi hữu cơ (ví dụ xyclohexanon) để thu được tổng lượng là 100% khối lượng. Pha loãng với nước để tạo ra thể phân tán.

iii) Dịch cô đặc có thể nhũ hóa (dịch cô đặc có thể nhũ hóa - EC)

15-70% khối lượng của ít nhất một hợp chất theo sáng chế và 5-10% khối lượng chất hoạt động bề mặt (ví dụ hỗn hợp của canxi dodexylbenzenulfonat và dầu thầu dầu etoxylat) được hòa tan với lượng như vậy của dung môi hữu cơ không tan trong nước (ví dụ hydrocacbon thơm hoặc amit của axit béo) và nếu cần dung môi bổ sung có thể hòa tan trong nước để thu được tổng lượng là 100% khối lượng. Pha loãng với nước để tạo ra nhũ tương.

iv) Nhũ tương (EW, EO, ES)

5-40% khối lượng của ít nhất một hợp chất theo sáng chế và 1-10% khối lượng chất hoạt động bề mặt (ví dụ hỗn hợp của canxi dodexylbenzenulfonat và dầu thầu dầu etoxylat,

hoặc sản phẩm trùng ngưng của etylen oxit và/hoặc propylen oxit với hoặc không với rượu) được hòa tan trong 20-40% khối lượng dung môi hữu cơ không tan trong nước (ví dụ hydrocacbon thơm). Hỗn hợp này được bổ sung vào nước với lượng như vậy bằng máy nhũ hóa để thu được tổng lượng là 100% khối lượng. Chế phẩm bào chế thu được là nhũ tương đồng nhất. Trước khi dùng nhũ tương còn có thể được pha loãng với nước.

v) huyền phù và dịch cô đặc huyền phù

v-1) trên nền nước (SC, FS)

Trong thiết bị nghiền thích hợp, ví dụ máy nghiền bóng được khuấy, 20-60% khối lượng của ít nhất một hợp chất theo sáng chế được tán nhỏ với việc bổ sung 2-10% khối lượng chất hoạt động bề mặt (ví dụ natri lignosulfonat và ete của polyoxyetylen với rượu béo), 0,1-2% khối lượng chất làm đặc (ví dụ gôm xanthan) và nước để tạo ra huyền phù nền mịn hoạt tính. Nước được bổ sung với lượng như vậy để thu được tổng lượng là 100% khối lượng. Pha loãng với nước thu được huyền phù ổn định chứa hoạt chất. Đối với các loại chế phẩm bào chế FS lên đến 40% khối lượng chất liên kết (ví dụ rượu polyvinyllic) được bổ sung.

v-2) trên nền dầu (OD, OF)

Trong thiết bị nghiền thích hợp, ví dụ máy nghiền bóng được khuấy, 20-60% khối lượng của ít nhất một hợp chất theo sáng chế được tán nhỏ với việc bổ sung 2-10% khối lượng chất hoạt động bề mặt (ví dụ natri lignosulfonat và ete của polyoxyetylen với rượu béo), 0,1-2% khối lượng chất làm đặc (ví dụ đất sét biến tính, cụ thể là Bentone, hoặc silic oxit) và chất mang hữu cơ để tạo ra huyền phù dầu nền mịn hoạt tính. Chất mang hữu cơ được bổ sung với lượng như vậy để thu được tổng lượng là 100% khối lượng. Pha loãng với nước thu được thể phân tán ổn định chứa hoạt chất.

vi) Hạt có thể phân tán trong nước và hạt hòa tan trong nước (WG, SG)

1-90% khối lượng, tốt hơn là 20-80%, tốt nhất là 50-80% khối lượng của ít nhất một hợp chất theo sáng chế được nghiền mịn với việc bổ sung chất hoạt động bề mặt (ví dụ natri lignosulfonat và natri alkylnaphtylsulfonat) và có thể là vật liệu mang và được chuyển hóa thành hạt phân tán trong nước hoặc hòa tan trong nước bằng các ứng dụng kỹ thuật thông thường như, ví dụ, đèn, sấy phun, tạo hạt kiểu tầng sôi. Chất hoạt động bề mặt và

vật liệu mang được sử dụng với lượng như vậy để thu được tổng lượng là 100% khối lượng. Pha loãng với nước thu được thể phân tán hoặc dung dịch ổn định chứa hoạt chất.

vii) Bột có thể phân tán trong nước và bột hòa tan trong nước (WP, SP, WS)

50-80% khối lượng của ít nhất một hợp chất theo sáng chế được nghiền trong máy nghiền quay-tĩnh với việc bổ sung 1-20% khối lượng chất hoạt động bề mặt (ví dụ natri lignosulfonat, natri alkylnaphtylsulfonat) và lượng như vậy của chất mang rắn, ví dụ silicagel, để thu được tổng lượng là 100% khối lượng. Pha loãng với nước thu được thể phân tán hoặc dung dịch ổn định chứa hoạt chất.

viii) Gel (GW, GF)

Trong máy nghiền bóng được khuấy, 5-25% khối lượng của ít nhất một hợp chất theo sáng chế được tán nhỏ với việc bổ sung 3-10% khối lượng chất hoạt động bề mặt (ví dụ natri lignosulfonat), 1-5% khối lượng chất liên kết (ví dụ carboxymetylxenluloza) và lượng như vậy của nước để thu được tổng lượng là 100% khối lượng. Quy trình này tạo ra huyền phù mịn chứa hoạt chất. Pha loãng với nước thu được huyền phù ổn định chứa hoạt chất.

ix) Vi nhũ tương (ME)

5-20% khối lượng của ít nhất một hợp chất theo sáng chế được bổ sung vào 5-30% khối lượng hỗn hợp phối trộn dung môi hữu cơ (ví dụ dimetylamin của axit béo và xyclohexanon), 10-25% khối lượng chất hoạt động bề mặt blend (ví dụ ete của polyoxyetylen với rượu béo và arylphenol etoxylat), và lượng như vậy của nước để thu được tổng lượng là 100% khối lượng. Hỗn hợp này được khuấy trong 1 h để tự động tạo ra vi nhũ tương ổn định về mặt nhiệt động học.

x) Vi nang (CS)

Pha dầu chứa 5-50% khối lượng của ít nhất một hợp chất theo sáng chế, 0-40% khối lượng dung môi hữu cơ không tan trong nước (ví dụ hydrocacbon thơm), 2-15% khối lượng acrylic monome (ví dụ metylmetacrylat, axit metacrylic và di- hoặc triacrylat) được phân tán vào dung dịch nước chứa keo bảo vệ (ví dụ rượu polyvinyllic). Phản ứng polyme hóa các gốc được khơi mào bằng chất khơi mào gốc, dẫn đến tạo thành vi nang

poly(met)acrylat. Theo cách khác, pha dầu chứa 5-50% khối lượng của ít nhất một hợp chất theo sáng chế, 0-40% khối lượng dung môi hữu cơ không tan trong nước (ví dụ hydrocacbon thơm), và isoxyanat monome (ví dụ diphenylmeten-4,4'-diisoxyanatae) được phân tán vào dung dịch nước chứa keo bảo vệ (ví dụ rượu polyvinyllic), quy trình này tạo thành vi nang polyurea. Tùy ý, việc bổ sung polyamin (ví dụ hexametylendiamin) cũng được sử dụng để tạo thành vi nang polyurea. Lượng monome đến 1-10% khối lượng của chế phẩm bào chế CS toàn phần.

xi) Bột có thể ở dạng bụi (DP, DS)

1-10% khối lượng của ít nhất một hợp chất theo sáng chế được nghiền mịn và được trộn nhuyễn với lượng như vậy của chất mang rắn, ví dụ cao lanh được nghiền mịn, để thu được tổng lượng là 100% khối lượng.

xii) Hạt (GR, FG)

0,5-30% khối lượng của ít nhất một hợp chất theo sáng chế được nghiền mịn và kết hợp với lượng như vậy của chất mang rắn (ví dụ silicate) để thu được tổng lượng là 100% khối lượng.

xiii) Chất lỏng có thể tích cực thấp (UL)

1-50% khối lượng của ít nhất một hợp chất theo sáng chế được hòa tan với lượng như vậy của dung môi hữu cơ, ví dụ hydrocacbon thơm, để thu được tổng lượng là 100% khối lượng.

Các loại chế phẩm bào chế i) đến xiii) có thể tùy ý comprise further auxiliaries, như 0,1-1% khối lượng chất bảo quản, 0,1-1% khối lượng chất chống tạo bọt, 0,1-1% khối lượng thuốc nhuộm và/hoặc chất màu, và 5-10% khối lượng chất chống đông.

Hỗn hợp

Hợp chất có công thức (I) cũng có thể được sử dụng ở dạng hỗn hợp cùng với một hoặc nhiều chất diệt nấm, chất diệt khuẩn, chất diệt ve bét, chất diệt động vật thân mềm, chất diệt giun tròn, chất diệt côn trùng, các chất chống vi khuẩn, các loài có lợi, thuốc diệt cỏ, phân bón, chất xua đuổi chim, chất bổ dưỡng thực vật, chất tiết trùng, chất an toàn, hóa chất truyền tin và/hoặc chất điều hòa sinh trưởng thực vật thích hợp, ví dụ, nhằm để mở

rộng phổ tác động, để kéo dài thời gian tác động, để làm tăng tỷ lệ tác động, để ngăn chặn sự đẩy ngược hoặc ngăn chặn sự phát triển tính kháng. Hợp chất có công thức (I) cũng có thể được sử dụng ở dạng hỗn hợp cùng với một hoặc nhiều chất diệt nấm, chất diệt khuẩn, chất diệt ve bét, chất diệt động vật thân mềm, chất diệt giun tròn, chất diệt côn trùng, các chất chống vi khuẩn, các loài có lợi, thuốc diệt cỏ, phân bón, chất xua đuổi chim, chất bảo dưỡng thực vật, chất tiết trùng, chất an toàn, chất truyền tin và/hoặc chất điều hòa sinh trưởng thực vật thích hợp, ví dụ, nhằm để mở rộng phổ tác động, để kéo dài thời gian tác động, để làm tăng tỷ lệ tác động, để ngăn chặn sự đẩy ngược hoặc ngăn chặn sự phát triển tính kháng. Cũng có thể cải thiện đặc tính trở hoa và kết trái, tối ưu hóa khả năng nảy mầm và phát triển rễ, tạo thuận lợi cho việc thu hoạch và cải thiện năng suất, tác động lên quá trình chín, cải thiện chất lượng và/hoặc giá trị dinh dưỡng của các sản phẩm thu hoạch, kéo dài thời gian bảo quản và/hoặc cải thiện khả năng xử lý của các sản phẩm thu hoạch.

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

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

Nếu một trong số các hợp chất nêu dưới đây có thể tồn tại ở các dạng đồng phân hỗn biến khác nhau, thì các dạng này cũng được bao gồm ngay cả khi không được nêu một cách rõ ràng trong mỗi trường hợp. Ngoài ra, tất cả các thành phần phối trộn khác, nếu các nhóm chức của chúng cho phép điều này, tùy ý có thể tạo ra muối với kiềm hoặc axit thích hợp.

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

Các hoạt chất nhận dạng ở đây bằng tên chung của chúng là đã biết và được mô tả, ví dụ, trong tài liệu sách hướng dẫn về chất diệt sinh vật gây hại (“The Pesticide Manual” 16th Ed., British Crop Protection Council 2012) hoặc có thể được tìm thấy trên Internet (ví dụ, <http://www.alanwood.net/pesticides>). Việc phân loại dựa trên hệ thống phân loại theo phương thức tác động IRAC ở thời điểm nộp đơn sáng chế này.

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

(2) Các chất phong bế kênh clorua đóng mở cổng bởi GABA, tốt hơn là các xyclodien-clo hữu cơ được chọn từ chlordane và endosulfan, hoặc phenylpyrazol (fiprol) được chọn từ ethiprol và fipronil.

(3) Các chất điều biến kênh natri, tốt hơn là các pyrethroit được chọn từ acrinathrin, allethrin, d-cis-trans allethrin, d-trans allethrin, bifenthrin, bioallethrin, chất đồng phân bioallethrin s-xyclopentenyl, bioresmethrin, cycloprothrin, cyfluthrin, beta-cyfluthrin, cyhalothrin, lamda-cyhalothrin, gama-cyhalothrin, cypermethrin, alpha-cypermethrin, beta-cypermethrin, theta-cypermethrin, zeta-cypermethrin, cyphenothrin [chất đồng phân (1R)-trans], deltamethrin, empenthrin [chất đồng phân (EZ)-(1R)], esfenvalerat, etofenprox, fenpropathrin, fenvalerat, flucythrinate, flumethrin, tau-fluvalinat, halfenprox, imiprothrin, kadethrin, momflorothrin, permethrin, phenothrin [chất đồng phân (1R)-trans], prallethrin, pyrethrin (pyrethrum), resmethrin, silafluofen, tefluthrin, tetramethrin, tetramethrin [chất đồng phân (1R)], tralomethrin và transfluthrin hoặc DDT hoặc metoxyclo.

- (4) Các chất điều biến cạnh tranh của thụ thể axetylcholin nicotinic (Nicotinic axetylcholine receptor - nAChR), tốt hơn là các neonicotinoit được chọn từ acetamiprid, clothianidin, dinotefuran, imidacloprid, nitenpyram, thiacloprid và thiamethoxam, hoặc nicotin, hoặc các sulfoximin được chọn từ sulfoxaflor, hoặc các butenolid được chọn từ flupyradifuron, hoặc các mesoionic được chọn từ triflumezopyrim.
- (5) Các chất điều biến dị lập thể của thụ thể axetylcholin nicotinic (nAChR) (Vị trí I), tốt hơn là các spinosyn được chọn từ spinetoram và spinosad.
- (6) Các chất điều biến dị lập thể kênh clorua qua cổng glutamat (Glutamate-gated clorua channel - GluCl), tốt hơn là các avermectin/các milbemycin, được chọn từ abamectin, emamectin benzoat, lepimectin và milbemectin.
- (7) Các chất bắt chước hormone ấu trùng, tốt hơn là các chất tương tự hormone ấu trùng được chọn từ hydropren, kinopren và metopren hoặc fenoxycarb hoặc pyriproxyfen.
- (8) Các chất ức chế không đặc hiệu (nhiều vị trí) hỗn tạp, tốt hơn là các alkyl halogenua được chọn từ methyl bromua và các alkyl halogenua khác; hoặc clopicrin hoặc lưu huỳnhhyl florua hoặc thuốc gây nôn borac hoặc tartar hoặc chất tạo methyl isoxyanat được chọn từ diazomet và metam.
- (9) Các chất điều biến kênh TRPV cơ quan dây âm, tốt hơn là pyridin azometan được chọn từ pymetrozin và pyrifluquinazon, hoặc pyropen được chọn từ afidopyropen.
- (10) Các chất ức chế sự sinh trưởng của ve bét tác động CHS1 được chọn từ clofentezine, hexythiazox, diflovidazin và etoxazole.
- (11) Vi sinh vật phá vỡ màng ruột côn trùng được chọn từ *Bacillus thuringiensis* loài phụ *israelensis*, *Bacillus sphaericus*, *Bacillus thuringiensis* loài phụ *aizawai*, *Bacillus thuringiensis* loài phụ *kurstaki*, *Bacillus thuringiensis* loài phụ *tenebrionis*, và các protein của thực vật *B.t.* được chọn từ Cry1Ab, Cry1Ac, Cry1Fa, Cry1A,105, Cry2Ab, Vip3A, mCry3A, Cry3Ab, Cry3Bb và Cry34Ab1/35Ab1.
- (12) Các chất ức chế ATP syntaza ty thể, tốt hơn là các chất phá vỡ ATP được chọn từ diafenthiuron, hoặc các hợp chất hữu cơ-thiếc được chọn từ azocyclotin, cyhexatin và fenbutatin oxit, hoặc propargite hoặc tetradifon.

- (13) Các chất phân tách quá trình phosphoryl hóa oxy hóa bằng cách làm gián đoạn gradien proton được chọn từ clorfenapyr, DNOC và sulfluramid.
- (14) Các chất phong bế kênh của thụ thể axetylcholin nicotinic được chọn từ bensultap, cartap hydroclorua, thiocylam và thiosultap-natri.
- (15) Các chất ức chế sự sinh tổng hợp kitin tác động CHS1, tốt hơn là benzoylure được chọn từ bistrifluron, chlorfluazuron, diflubenzuron, fluxyclozuron, flufenoxuron, hexaflumuron, lufenuron, novaluron, noviflumuron, teflubenzuron và triflumuron.
- (16) Các chất ức chế sự sinh tổng hợp kitin, loại 1 được chọn từ buprofezin.
- (17) Chất phá vỡ quá trình lột xác (cụ thể đối với bộ côn trùng hai cánh, tức là côn trùng hai cánh) được chọn từ cyromazine.
- (18) Các chất chủ vận thụ thể ecdyson, tốt hơn là diaxylhydrazin được chọn từ chromafenozit, halofenozit, metoxyfenozit và tebufenozit.
- (19) Các chất chủ vận thụ thể octopamin được chọn từ amitraz.
- (20) Các chất ức chế vận chuyển điện tử phức III của ty thể được chọn từ được chọn từ hydrametylnon, acequinocyl, fluacrypyrim và bifenazat.
- (21) Các chất ức chế vận chuyển điện tử phức hợp I của ty thể, tốt hơn là chất diệt ve bét METI và chất diệt côn trùng được chọn từ fenazaquin, fenpyroximate, pyrimidifen, pyridaben, tebufenpyrad và tolfenpyrad, hoặc rotenone (Derris).
- (22) Các chất phong bế kênh natri phụ thuộc điện thế, tốt hơn là oxadiazines được chọn từ indoxacarb, hoặc semicarbazon được chọn từ metaflumizon.
- (23) Các chất ức chế axetyl-CoA carboxylaza, tốt hơn là các dẫn xuất axit tetronic và tetramic được chọn từ spiroadiclofen, spiromesifen, spiropidion và spirotetramat.
- (24) Các chất ức chế vận chuyển điện tử phức hợp IV của ty thể, tốt hơn là các phosphin được chọn từ nhôm phosphua, canxi phosphua, phosphin và kẽm phosphua, hoặc các xyanua được chọn từ canxi xyanua, kali xyanit và natri xyanit.

- (25) Chất ức chế vận chuyển điện tử phức hợp II của ty thể, tốt hơn là các dẫn xuất *beta*-ketonitril được chọn từ cyenopyrafen và cyflumetofen, hoặc các carboxanilit được chọn từ pyflubumide;
- (28) Các chất điều biến thụ thể ryanodin, tốt hơn là diamit được chọn từ chlorantraniliprole, cyantraniliprole, cyclaniliprole, flubendiamit và tetraniliprole.
- (29) Các chất điều biến cơ quan dây âm (với vị trí đích không xác định) được chọn từ flonicamit.
- (30) Các chất điều biến dị lập thể kênh clorua qua cổng GABA, tốt hơn là *meta*-diamit được chọn từ broflanilide, hoặc isoxazol được chọn từ fluxametamit.
- (31) Baculoviruses, tốt hơn là Granulovirus (GV) được chọn từ *Cydia pomonella* GV và *Thaumatotibia leucotreta* (GV), hoặc Nucleopolyhedrovirus (NPV) được chọn từ *Anticarsia gemmatilis* MNPV và *Helicoverpa armigera* NPV.
- (32) Các chất điều biến dị lập thể của thụ thể axetylcholin nicotinic (Vị trí II) được chọn từ GS-omega/kappa HXTX-Hv1a peptit.
- (33) các hợp chất có hoạt tính khác được chọn từ Acynonapyr, Afoxolaner, Azadirachtin, Benclothiaz, Benzoximate, Benzpyrimoxan, Bromopropylate, Chinomethionat, cloprallethrin, Cryolite, Cyclobutifluram, Cycloxaprid, Cyetpyrafen, Cyhalodiamit, Cyproflanilide (CAS 2375110-88-4), Diclomezotiaz, Dicofol, Dimpropyridaz, epsilon-Metofluthrin, epsilon-Momfluthrin, Flometoquin, Fluazaindolizine, Flucypriprole (CAS 1771741-86-6), Fluensulfone, Flufenerim, Flufenoxystrobin, Flufiprole, Fluhexafon, Fluopyram, Flupyrimin, Fluralaner, Fufenozide, Flupentiofenox, Guadipyr, Heptafluthrin, Imidaclothiz, Iprodione, Isocycloseram, kappa-Bifenthrin, kappa-Tefluthrin, Lotilaner, Meperfluthrin, Nicofluprole (CAS 1771741-86-6), Oxazosulfyl, Paichongding, Pyridalyl, Pyrifluquinazon, Pyriminostrobin, Sarolaner, Spidoxamat, Spirobudiclofen, Tetrametylfluthrin, Tetrachlorantraniliprole, Tigolaner, Tioxazafen, Thiofluoximate, Tyclopyrazoflor, Iodometan; các chế phẩm khác trên cơ sở *Bacillus firmus* (I-1582, Votivo) và azadirachtin (BioNeem), và cũng như các hợp chất sau: 1-{2-flo-4-metyl-5-[(2,2,2-trifloetyl)sulphinyl]phenyl}-3-(triflometyl)-1H-1,2,4-triazol-5-amin (đã biết từ WO2006/043635) (CAS 885026-50-6), 2-clo-N-[2-{1-[(2E)-3-(4-

clophenyl)prop-2-en-1-yl]piperidin-4-yl}-4-(triflometyl)phenyl]isonicotinamit (đã biết từ WO2006/003494) (CAS 872999-66-1), 3-(4-clo-2,6-dimetylphenyl)-4-hydroxy-8-metoxi-1,8-diazaspiro[4.5]dec-3-en-2-on (đã biết từ WO 2010052161) (CAS 1225292-17-0), 3-(4-clo-2,6-dimetylphenyl)-8-metoxi-2-oxo-1,8-diazaspiro[4.5]dec-3-en-4-yl etyl cacbonat (đã biết từ EP2647626) (CAS 1440516-42-6), PF1364 (đã biết từ JP2010/018586) (CAS 1204776-60-2), (3E)-3-[1-[(6-clo-3-pyridyl)metyl]-2-pyridyliden]-1,1,1-triflo-propan-2-on (đã biết từ WO2013/144213) (CAS 1461743-15-6), N-[3-(benzylcarbamoil)-4-clophenyl]-1-metyl-3-(pentafluoetyl)-4-(triflometyl)-1H-pyrazol-5-carboxamit (đã biết từ WO2010/051926) (CAS 1226889-14-0), 5-bromo-4-clo-N-[4-clo-2-metyl-6-(metylcarbamoil)phenyl]-2-(3-clo-2-pyridyl)pyrazol-3-carboxamit (đã biết từ CN103232431) (CAS 1449220-44-3), 4-[5-(3,5-diclophenyl)-4,5-dihydro-5-(triflometyl)-3-isoxazolyl]-2-metyl-N-(cis-1-oxido-3-thietanyl)-benzamit, 4-[5-(3,5-diclophenyl)-4,5-dihydro-5-(triflometyl)-3-isoxazolyl]-2-metyl-N-(trans-1-oxido-3-thietanyl)-benzamit và 4-[(5S)-5-(3,5-diclophenyl)-4,5-dihydro-5-(triflometyl)-3-isoxazolyl]-2-metyl-N-(cis-1-oxido-3-thietanyl)benzamit (đã biết từ WO 2013/050317 A1) (CAS 1332628-83-7), N-[3-clo-1-(3-pyridinyl)-1H-pyrazol-4-yl]-N-etyl-3-[(3,3,3-triflopropyl)sulfinyl]-propanamit, (+)-N-[3-clo-1-(3-pyridinyl)-1H-pyrazol-4-yl]-N-etyl-3-[(3,3,3-triflopropyl)sulfinyl]-propanamit và (-)-N-[3-clo-1-(3-pyridinyl)-1H-pyrazol-4-yl]-N-etyl-3-[(3,3,3-triflopropyl)sulfinyl]-propanamit (đã biết từ WO 2013/162715 A2, WO 2013/162716 A2, US 2014/0213448 A1) (CAS 1477923-37-7), 5-[[2E)-3-clo-2-propen-1-yl]amino]-1-[2,6-diclo-4-(triflometyl)phenyl]-4-[(triflometyl)sulfinyl]-1H-pyrazol-3-carbonitril (đã biết từ CN 101337937 A) (CAS 1105672-77-2), 3-bromo-N-[4-clo-2-metyl-6-[(metylamino)thioxometyl]phenyl]-1-(3-clo-2-pyridinyl)-1H-pyrazol-5-carboxamit, (Liudaibenjiaxuanan, đã biết từ CN 103109816 A) (CAS 1232543-85-9); N-[4-clo-2-[(1,1-dimetyletyl)amino]carbonyl]-6-metylphenyl]-1-(3-clo-2-pyridinyl)-3-(flometoxi)-1H-pyrazol-5-carboxamit (đã biết từ WO 2012/034403 A1) (CAS 1268277-22-0), N-[2-(5-amino-1,3,4-thiadiazol-2-yl)-4-clo-6-metylphenyl]-3-bromo-1-(3-clo-2-pyridinyl)-1H-pyrazol-5-carboxamit (đã biết từ WO 2011/085575 A1) (CAS 1233882-22-8), 4-[3-[2,6-diclo-4-[(3,3-diclo-2-propen-1-yl)oxy]phenoxy]propoxy]-2-metoxi-6-(triflometyl)-pyrimidin (đã biết từ CN 101337940 A) (CAS 1108184-52-6); (2E)- và 2(Z)-2-[2-(4-xyanophenyl)-1-[3-(triflometyl)phenyl]etyliden]-N-[4-(diflometoxi)phenyl]-hydrazincarboxamit (đã biết từ

CN 101715774 A) (CAS 1232543-85-9); este của axit 3-(2,2-dicloetenyl)-2,2-dimetyl-4-(1*H*-benzimidazol-2-yl)phenyl-xyclopropanecarboxylic (đã biết từ CN 103524422 A) (CAS 1542271-46-4); metyl este của axit (4*aS*)-7-clo-2,5-dihydro-2-[[(metoxycarbonyl) 4-[(triflometyl)thio]phenyl]amino]carbonyl]-indeno[1,2-*e*][1.3.4]oxadiazin-4*a*(3*H*)-carboxylic (đã biết từ CN 102391261 A) (CAS 1370358-69-2); 6-deoxy-3-*O*-etyl-2,4-di-*O*-metyl-, 1-[*N*-[4-[1-[4-(1,1,2,2,2-pentafloroetoxy)phenyl]-1*H*-1,2,4-triazol-3-yl]phenyl]carbamat]- α -L-mannopyranoza (đã biết từ US 2014/0275503 A1) (CAS 1181213-14-8); 8-(2-xyclopropylmetoxy-4-triflometyl-phenoxy)-3-(6-triflometyl-pyridazin-3-yl)-3-aza-bixyclo[3.2.1]octan (CAS 1253850-56-4), (8-*anti*)-8-(2-xyclopropylmetoxy-4-triflometyl-phenoxy)-3-(6-triflometyl-pyridazin-3-yl)-3-aza-bicyclo[3.2.1]octan (CAS 933798-27-7), (8-*syn*)-8-(2-xyclopropylmetoxy-4-triflometyl-phenoxy)-3-(6-triflometyl-pyridazin-3-yl)-3-aza-bicyclo[3.2.1]octan (đã biết từ WO 2007040280 A1, WO 2007040282 A1) (CAS 934001-66-8), *N*-[4-(aminothioxometyl)-2-metyl-6-[(metylamino)carbonyl]phenyl]-3-bromo-1-(3-clo-2-pyridinyl)-1*H*-pyrazol-5-carboxamit (đã biết từ CN 103265527 A) (CAS 1452877-50-7), 3-(4-clo-2,6-dimetylphenyl)-8-metoxo-1-metyl-1,8-diazaspiro[4.5]decan-2,4-dion (đã biết từ WO 2014/187846 A1) (CAS 1638765-58-8), etyl este của axit 3-(4-clo-2,6-dimetylphenyl)-8-metoxo-1-metyl-2-oxo-1,8-diazaspiro[4.5]dec-3-en-4-yl-carbonic (đã biết từ WO 2010/066780 A1, WO 2011151146 A1) (CAS 1229023-00-0), *N*-[1-(2,6-diflophenyl)-1*H*-pyrazol-3-yl]-2-(triflometyl)benzamid (đã biết từ WO 2014/053450 A1) (CAS 1594624-87-9), *N*-[2-(2,6-diflophenyl)-2*H*-1,2,3-triazol-4-yl]-2-(triflometyl)benzamid (đã biết từ WO 2014/053450 A1) (CAS 1594637-65-6), *N*-[1-(3,5-diflo-2-pyridinyl)-1*H*-pyrazol-3-yl]-2-(triflometyl)benzamid (đã biết từ WO 2014/053450 A1) (CAS 1594626-19-3), muối nội (3*R*)-3-(2-clo-5-thiazolyl)-2,3-dihydro-8-metyl-5,7-dioxo-6-phenyl-5*H*-thiazolo[3,2-*a*]pyrimidini (đã biết từ WO 2018/177970 A1) (CAS 2246757-58-2); muối nội 3-(2-clo-5-thiazolyl)-2,3-dihydro-8-metyl-5,7-dioxo-6-phenyl-5*H*-thiazolo[3,2-*a*]pyrimidini (đã biết từ WO 2018/177970 A1) (CAS 2246757-56-0); *N*-[3-clo-1-(3-pyridinyl)-1*H*-pyrazol-4-yl]-2-(metylsulfonyl)-propanamid (đã biết từ WO 2019/236274 A1) (CAS 2396747-83-2), *N*-[2-bromo-4-[1,2,2,2-tetrafloro-1-(triflometyl)etyl]-6-(triflometyl)phenyl]-2-floro-3-[(4-florobenzoyl)amino]-benzamid (đã biết từ WO 2019059412 A1) (CAS 1207977-87-4).

Các chất diệt nấm

Các hoạt chất được xác định rõ ở đây bằng tên chung của chúng là đã biết và được mô tả, ví dụ trong tài liệu “The Pesticide Manual” (16th ed., British Crop Protection Council) hoặc có thể tìm trên internet (ví dụ www.alanwood.net/pesticides).

Tất cả các thành phần phối trộn có thể diệt nấm khác thuộc các nhóm từ (1) đến (15) có thể tùy ý tạo ra muối với kiềm hoặc axit thích hợp, nếu các nhóm chức của chúng cho phép điều này. Tất cả các thành phần phối trộn thuộc các nhóm từ (1) đến (15) có thể bao gồm các dạng hồ biến, nếu được áp dụng.

1) Chất ức chế sinh tổng hợp ergosterol, ví dụ (1.001) cyproconazole, (1.002) difenoconazole, (1.003) epoxiconazole, (1.004) fenhexamid, (1.005) fenpropidin, (1.006) fenpropimorph, (1.007) fenpyrazamin, (1.008) fluquinconazole, (1.009) flutriafol, (1.010) imazalil, (1.011) imazalil sulfat, (1.012) ipconazole, (1.013) metconazole, (1.014) myclobutanil, (1.015) paclobutrazol, (1.016) prochloraz, (1.017) propiconazole, (1.018) prothioconazole, (1.019) pyrisoxazole, (1.020) spiroxamin, (1.021) tebuconazole, (1.022) tetraconazole, (1.023) triadimenol, (1.024) tridemorph, (1.025) triticonazole, (1.026) (1R,2S,5S)-5-(4-clobenzyl)-2-(clometyl)-2-metyl-1-(1H-1,2,4-triazol-1-ylmetyl)xylopentanol, (1.027) (1S,2R,5R)-5-(4-clobenzyl)-2-(clometyl)-2-metyl-1-(1H-1,2,4-triazol-1-ylmetyl)xylopentanol, (1.028) (2R)-2-(1-cloxypropyl)-4-[(1R)-2,2-dicloxypropyl]-1-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)butan-2-ol, (1.029) (2R)-2-(1-cloxypropyl)-4-[(1S)-2,2-dicloxypropyl]-1-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)butan-2-ol, (1.030) (2R)-2-[4-(4-clophenoxy)-2-(triflometyl)phenyl]-1-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)propan-2-ol, (1.031) (2S)-2-(1-cloxypropyl)-4-[(1R)-2,2-dicloxypropyl]-1-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)butan-2-ol, (1.032) (2S)-2-(1-cloxypropyl)-4-[(1S)-2,2-dicloxypropyl]-1-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)butan-2-ol, (1.033) (2S)-2-[4-(4-clophenoxy)-2-(triflometyl)phenyl]-1-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)propan-2-ol, (1.034) (R)-[3-(4-clo-2-florophenyl)-5-(2,4-diflophenyl)-1,2-oxazol-4-yl](pyridin-3-yl)metanol, (1.035) (S)-[3-(4-clo-2-florophenyl)-5-(2,4-diflophenyl)-1,2-oxazol-4-yl](pyridin-3-yl)metanol, (1.036) [3-(4-clo-2-florophenyl)-5-(2,4-diflophenyl)-1,2-oxazol-4-yl](pyridin-3-yl)metanol, (1.037) 1-[(2R,4S)-2-[2-clo-4-(4-clophenoxy)phenyl]-4-metyl-1,3-dioxolan-2-yl]metyl-1H-1,2,4-triazol, (1.038) 1-[(2S,4S)-2-[2-clo-4-(4-clophenoxy)phenyl]-4-metyl-1,3-dioxolan-2-yl]metyl-1H-1,2,4-triazol, (1.039) 1-[(2-clophenyl)-2-(2,4-diflophenyl)oxiran-2-yl]metyl-1H-1,2,4-triazol-5-yl thioxyanat,

(1.040) 1-{[rel(2R,3R)-3-(2-clophenyl)-2-(2,4-diflophenyl)oxiran-2-yl]metyl}-1H-1,2,4-triazol-5-yl thioxyanat, (1.041) 1-{[rel(2R,3S)-3-(2-clophenyl)-2-(2,4-diflophenyl)oxiran-2-yl]metyl}-1H-1,2,4-triazol-5-yl thioxyanat, (1.042) 2-[(2R,4R,5R)-1-(2,4-diclophenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimetylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (1.043) 2-[(2R,4R,5S)-1-(2,4-diclophenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimetylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (1.044) 2-[(2R,4S,5R)-1-(2,4-diclophenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimetylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (1.045) 2-[(2R,4S,5S)-1-(2,4-diclophenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimetylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (1.046) 2-[(2S,4R,5R)-1-(2,4-diclophenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimetylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (1.047) 2-[(2S,4R,5S)-1-(2,4-diclophenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimetylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (1.048) 2-[(2S,4S,5R)-1-(2,4-diclophenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimetylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (1.049) 2-[(2S,4S,5S)-1-(2,4-diclophenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimetylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (1.050) 2-[1-(2,4-diclophenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimetylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (1.051) 2-[2-clo-4-(2,4-diclophenoxy)phenyl]-1-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)propan-2-ol, (1.052) 2-[2-clo-4-(4-clophenoxy)phenyl]-1-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)butan-2-ol, (1.053) 2-[4-(4-clophenoxy)-2-(triflometyl)phenyl]-1-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)butan-2-ol, (1.054) 2-[4-(4-clophenoxy)-2-(triflometyl)phenyl]-1-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)pentan-2-ol, (1.055) Mefentrifluconazole, (1.056) 2-{[3-(2-clophenyl)-2-(2,4-diflophenyl)oxiran-2-yl]metyl}-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (1.057) 2-{[rel(2R,3R)-3-(2-clophenyl)-2-(2,4-diflophenyl)oxiran-2-yl]metyl}-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (1.058) 2-{[rel(2R,3S)-3-(2-clophenyl)-2-(2,4-diflophenyl)oxiran-2-yl]metyl}-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (1.059) 5-(4-clobenzyl)-2-(clometyl)-2-metyl-1-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)metyl)cyclopentanol, (1.060) 5-(allylsulfanyl)-1-{[3-(2-clophenyl)-2-(2,4-diflophenyl)oxiran-2-yl]metyl}-1H-1,2,4-triazol, (1.061) 5-(allylsulfanyl)-1-{[rel(2R,3R)-3-(2-clophenyl)-2-(2,4-diflophenyl)oxiran-2-yl]metyl}-1H-1,2,4-triazol, (1.062) 5-(allylsulfanyl)-1-{[rel(2R,3S)-3-(2-clophenyl)-2-(2,4-diflophenyl)oxiran-2-yl]metyl}-1H-1,2,4-triazol, (1.063) N'-(2.5-dimetyl-4-{[3-(1,1,2,2-tetrafloroetoxy)phenyl]sulfanyl}phenyl)-N-etyl-N-metylimidoformamit, (1.064) N'-(2.5-dimetyl-4-{[3-(2.2,2-trifloetoxy)phenyl]sulfanyl}phenyl)-N-etyl-N-metylimidoformamit, (1.065) N'-(2.5-dimetyl-4-{[3-(2.2,3,3-

tetrafloropropoxy)phenyl}sulfanyl}phenyl)-N-etyl-N-metylimidoformamit, (1.066) N'-(2.5-dimetyl-4-{[3-(pentafloroetoxy)phenyl}sulfanyl}phenyl)-N-etyl-N-metylimidoformamit, (1.067) N'-(2.5-dimetyl-4-{3-[(1,1,2,2-tetrafloetyl)sulfanyl]phenoxy}phenyl)-N-etyl-N-metylimidoformamit, (1.068) N'-(2.5-dimetyl-4-{3-[(2,2,2-trifloetyl)sulfanyl]phenoxy}phenyl)-N-etyl-N-metylimidoformamit, (1.069) N'-(2.5-dimetyl-4-{3-[(2,2,3,3-tetrafloropropyl)sulfanyl]phenoxy}phenyl)-N-etyl-N-metylimidoformamit, (1.070) N'-(2.5-dimetyl-4-{3-[(pentafloretyl)sulfanyl]phenoxy}phenyl)-N-etyl-N-metylimidoformamit, (1.071) N'-(2.5-dimetyl-4-phenoxyphenyl)-N-etyl-N-metylimidoformamit, (1.072) N'-(4-{[3-(diflometoxy)phenyl}sulfanyl}-2,5-dimetylphenyl)-N-etyl-N-metylimidoformamit, (1.073) N'-(4-{3-[(diflometyl)sulfanyl]phenoxy}-2,5-dimetylphenyl)-N-etyl-N-metylimidoformamit, (1.074) N'-[5-bromo-6-(2.3-dihydro-1H-inden-2-yloxy)-2-metylpyridin-3-yl]-N-etyl-N-metylimidoformamit, (1.075) N'-{4-[(4,5-diclo-1,3-thiazol-2-yl)oxy]-2,5-dimetylphenyl}-N-etyl-N-metylimidoformamit, (1.076) N'-{5-bromo-6-[(1R)-1-(3.5-diflophenyl)etoxy]-2-metylpyridin-3-yl}-N-etyl-N-metylimidoformamit, (1.077) N'-{5-bromo-6-[(1S)-1-(3.5-diflophenyl)etoxy]-2-metylpyridin-3-yl}-N-etyl-N-metylimidoformamit, (1.078) N'-{5-bromo-6-[(cis-4-isopropylxyclohexyl)oxy]-2-metylpyridin-3-yl}-N-etyl-N-metylimidoformamit, (1.079) N'-{5-bromo-6-[(trans-4-isopropylxyclohexyl)oxy]-2-metylpyridin-3-yl}-N-etyl-N-metylimidoformamit, (1.080) N'-{5-bromo-6-[1-(3.5-diflophenyl)etoxy]-2-metylpyridin-3-yl}-N-etyl-N-metylimidoformamit, (1.081) ipfentrifluconazole, (1.082) 2-[4-(4-clophenoxy)-2-(triflometyl)phenyl]-1-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)propan-2-ol, (1.083) 2-[6-(4-bromophenoxy)-2-(triflometyl)-3-pyridyl]-1-(1,2,4-triazol-1-yl)propan-2-ol, (1.084) 2-[6-(4-clophenoxy)-2-(triflometyl)-3-pyridyl]-1-(1,2,4-triazol-1-yl)propan-2-ol, (1.085) 3-[2-(1-cloxypropyl)-3-(3-clo-2-flo-phenyl)-2-hydroxy-propyl]imidazol-4-carbonitril và (1.086) 4-[[6-[rac-(2R)-2-(2,4-diflophenyl)-1,1-diflo-2-hydroxy-3-(5-thioxo-4H-1,2,4-triazol-1-yl)propyl]-3-pyridyl]oxy]benzonitril.

2) Các chất ức chế chuỗi hô hấp ở phức I hoặc II, ví dụ (2.001) benzovindiflupyr, (2.002) bixafen, (2.003) boscalid, (2.004) carboxin, (2.005) fluopyram, (2.006) flutolanil, (2.007) fluxapyroxad, (2.008) furametpyr, (2.009) Isofetamid, (2.010) isopyrazam (chất đồng phân không đối quang kháng epime 1R,4S,9S), (2.011) isopyrazam (chất đồng phân

không đối quang kháng epime 1S,4R,9R), (2.012) isopyrazam (raxemat kháng epime 1RS,4SR,9SR), (2.013) isopyrazam (hỗn hợp raxemat syn-epimeric 1RS,4SR,9RS và raxemat kháng epimeric 1RS,4SR,9SR), (2.014) isopyrazam (chất đồng phân không đối quang syn-epime 1R,4S,9R), (2.015) isopyrazam (chất đồng phân không đối quang syn-epime 1S,4R,9S), (2.016) isopyrazam (raxemat syn-epime 1RS,4SR,9RS), (2.017) penflufen, (2.018) penthiopyrad, (2.019) pydiflumetofen, (2.020) Pyraziflumid, (2.021) sedaxan, (2.022) 1,3-dimetyl-N-(1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl)-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.023) 1,3-dimetyl-N-[(3R)-1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.024) 1,3-dimetyl-N-[(3S)-1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.025) 1-metyl-3-(triflometyl)-N-[2'-(triflometyl)biphenyl-2-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.026) 2-flo-6-(triflometyl)-N-(1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl)benzamid, (2.027) 3-(diflometyl)-1-metyl-N-(1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl)-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.028) 3-(diflometyl)-1-metyl-N-[(3R)-1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.029) 3-(diflometyl)-1-metyl-N-[(3S)-1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.030) 3-(diflometyl)-N-(7-flo-1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.031) 3-(diflometyl)-N-[(3R)-7-flo-1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl]-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.032) 3-(diflometyl)-N-[(3S)-7-flo-1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl]-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.033) 5,8-diflo-N-[2-(2-flo-4-{[4-(triflometyl)pyridin-2-yl]oxy}phenyl)etyl]quinazolin-4-amin, (2.034) N-(2-xyclopentyl-5-flobenzyl)-N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.035) N-(2-tert-butyl-5-metylbenzyl)-N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.036) N-(2-tert-butylbenzyl)-N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.037) N-(5-clo-2-etylbenzyl)-N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.038) N-(5-clo-2-isopropylbenzyl)-N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.039) N-[(1R,4S)-9-(diclometylen)-1,2,3,4-tetrahydro-1,4-metanonaphtalen-5-yl]-3-(diflometyl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.040) N-[(1S,4R)-9-(diclometylen)-1,2,3,4-tetrahydro-1,4-metanonaphtalen-5-yl]-3-(diflometyl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.041) N-[1-(2,4-diclophenyl)-1-metoxipropan-2-yl]-3-(diflometyl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.042) N-[2-clo-6-(triflometyl)benzyl]-N-xyclopropyl-

3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.043) N-[3-clo-2-flo-6-(triflometyl)benzyl]-N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.044) N-[5-clo-2-(triflometyl)benzyl]-N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.045) N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-N-[5-metyl-2-(triflometyl)benzyl]-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.046) N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-N-(2-flo-6-isopropylbenzyl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.047) N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-N-(2-isopropyl-5-metylbenzyl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.048) N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-N-(2-isopropylbenzyl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-carbothioamit, (2.049) N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-N-(2-isopropylbenzyl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.050) N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-5-flo-N-(5-flo-2-isopropylbenzyl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.051) N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-N-(2-etyl-4,5-dimetylbenzyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.052) N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-N-(2-etyl-5-flobenzyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.053) N-xyclopropyl-3-(diflometyl)-N-(2-etyl-5-metylbenzyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.054) N-xyclopropyl-N-(2-xyclopropyl-5-flobenzyl)-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.055) N-xyclopropyl-N-(2-xyclopropyl-5-metylbenzyl)-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, (2.056) N-xyclopropyl-N-(2-xyclopropylbenzyl)-3-(diflometyl)-5-flo-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit.

3) Các chất ức chế chuỗi hô hấp ở phức III, ví dụ (3.001) ametoctradin, (3.002) amisulbrom, (3.003) azoxystrobin, (3.004) coumetoxystrobin, (3.005) coumoxystrobin, (3.006) cyazofamid, (3.007) dimoxystrobin, (3.008) enoxastrobin, (3.009) famoxadone, (3.010) fenamidone, (3.011) flufenoxystrobin, (3.012) fluoxastrobin, (3.013) kresoxim-metyl, (3.014) metominostrobin, (3.015) orysastrobin, (3.016) picoxystrobin, (3.017) pyraclostrobin, (3.018) pyrametostrobin, (3.019) pyraoxystrobin, (3.020) trifloxystrobin, (3.021) (2E)-2-{2-[(1E)-1-(3-{[(E)-1-flo-2-phenylvinyl]oxy}phenyl)etyliden]amino}oxy)metyl]phenyl}-2-(metoxyimino)-N-metylaxetamit, (3.022) (2E,3Z)-5-{[1-(4-clophenyl)-1H-pyrazol-3-yl]oxy}-2-(metoxyimino)-N,3-dimetyl-pent-3-enamit, (3.023) (2R)-2-{2-[(2,5-dimetylphenoxy)metyl]phenyl}-2-metoxi-N-metylaxetamit, (3.024) (2S)-2-{2-[(2,5-dimetylphenoxy)metyl]phenyl}-2-metoxi-N-metylaxetamit, (3.025) fenpicoxamid, (3.026) mandestrobin, (3.027) N-(3-etyl-3,5,5-trimetylxclohexyl)-3-formamido-2-

hydroxybenzamid, (3.028) (2E,3Z)-5-{[1-(4-clo-2-flophenyl)-1H-pyrazol-3-yl]oxy}-2-(metoxyimino)-N,3-dimetylpen-3-enamid, (3.029) metyl {5-[3-(2,4-dimetylphenyl)-1H-pyrazol-1-yl]-2-metylbenzyl}carbam, (3.030) metyltetraprol, (3.031) florylpicoxamid.

4) Các chất ức chế nguyên phân và phân chia tế bào, ví dụ (4.001) carbendazim, (4.002) diethofencarb, (4.003) ethaboxam, (4.004) fluopicolit, (4.005) pencycuron, (4.006) thiabendazol, (4.007) thiophanat-metyl, (4.008) zoxamid, (4.009) 3-clo-4-(2,6-diflophenyl)-6-metyl-5-phenylpyridazin, (4.010) 3-clo-5-(4-clophenyl)-4-(2,6-diflophenyl)-6-metylpyridazin, (4.011) 3-clo-5-(6-clopyridin-3-yl)-6-metyl-4-(2,4,6-triflophenyl)pyridazin, (4.012) 4-(2-bromo-4-flophenyl)-N-(2,6-diflophenyl)-1,3-dimetyl-1H-pyrazol-5-amin, (4.013) 4-(2-bromo-4-flophenyl)-N-(2-bromo-6-flophenyl)-1,3-dimetyl-1H-pyrazol-5-amin, (4.014) 4-(2-bromo-4-flophenyl)-N-(2-bromophenyl)-1,3-dimetyl-1H-pyrazol-5-amin, (4.015) 4-(2-bromo-4-flophenyl)-N-(2-clo-6-flophenyl)-1,3-dimetyl-1H-pyrazol-5-amin, (4.016) 4-(2-bromo-4-flophenyl)-N-(2-clophenyl)-1,3-dimetyl-1H-pyrazol-5-amin, (4.017) 4-(2-bromo-4-flophenyl)-N-(2-flophenyl)-1,3-dimetyl-1H-pyrazol-5-amin, (4.018) 4-(2-clo-4-flophenyl)-N-(2,6-diflophenyl)-1,3-dimetyl-1H-pyrazol-5-amin, (4.019) 4-(2-clo-4-flophenyl)-N-(2-clo-6-flophenyl)-1,3-dimetyl-1H-pyrazol-5-amin, (4.020) 4-(2-clo-4-flophenyl)-N-(2-clophenyl)-1,3-dimetyl-1H-pyrazol-5-amin, (4.021) 4-(2-clo-4-flophenyl)-N-(2-flophenyl)-1,3-dimetyl-1H-pyrazol-5-amin, (4.022) 4-(4-clophenyl)-5-(2,6-diflophenyl)-3,6-dimetylpyridazin, (4.023) N-(2-bromo-6-flophenyl)-4-(2-clo-4-flophenyl)-1,3-dimetyl-1H-pyrazol-5-amin, (4.024) N-(2-bromophenyl)-4-(2-clo-4-flophenyl)-1,3-dimetyl-1H-pyrazol-5-amin, (4.025) N-(4-clo-2,6-diflophenyl)-4-(2-clo-4-flophenyl)-1,3-dimetyl-1H-pyrazol-5-amin.

5) Các hợp chất có khả năng hoạt động nhiều vị trí, ví dụ (5.001) hỗn hợp bordeaux, (5.002) captafol, (5.003) captan, (5.004) clothalonil, (5.005) đồng hydroxit, (5.006) đồng naphtenat, (5.007) đồng oxit, (5.008) đồng oxyclorea, (5.009) đồng(2+) sulfat, (5.010) dithianon, (5.011) dodin, (5.012) folpet, (5.013) mancozeb, (5.014) maneb, (5.015) metiram, (5.016) metiram kẽm, (5.017) oxine-đồng, (5.018) propineb, (5.019) lưu huỳnh và chế phẩm chứa lưu huỳnh bao gồm canxi polysulfua, (5.020) thiram, (5.021) zineb, (5.022) ziram, (5.023) 6-etyl-5,7-dioxa-6,7-dihydro-5H-pyrolol[3',4':5,6][1,4]dithiino[2,3-c][1,2]thiazol-3-carbonitril.

- 6) Các hợp chất có khả năng cảm ứng cơ chế phòng vệ của vật chủ, ví dụ (6.001) acibenzolar-S-methyl, (6.002) isotianil, (6.003) probenazol, (6.004) tiadinil.
- 7) Các chất ức chế sinh tổng hợp axit amin và/hoặc protein, ví dụ (7.001) xyprodinil, (7.002) kasugamycin, (7.003) kasugamycin hydroclorua hydrat, (7.004) oxytetracyclin, (7.005) pyrimethanil, (7.006) 3-(5-fluoro-3,3,4,4-tetramethyl-3,4-dihydroisoquinolin-1-yl)quinolin.
- 8) Chất ức chế sản sinh ATP, ví dụ (8.001) silthiofam.
- 9) Các chất chế tổng hợp thành ức tế bào, ví dụ (9.001) benthiavalicarb, (9.002) dimethomorph, (9.003) flumorph, (9.004) iprovalicarb, (9.005) mandipropamid, (9.006) pyrimorph, (9.007) valifenalate, (9.008) (2E)-3-(4-tert-butylphenyl)-3-(2-chloropyridin-4-yl)-1-(morpholin-4-yl)prop-2-en-1-on, (9.009) (2Z)-3-(4-tert-butylphenyl)-3-(2-clopyridin-4-yl)-1-(morpholin-4-yl)prop-2-en-1-on.
- 10) Các chất ức chế tổng hợp lipid và màng, ví dụ (10.001) propamocarb, (10.002) propamocarb hydroclorua, (10.003) tolclofos-methyl.
- 11) Các chất ức chế sinh tổng hợp melanin, ví dụ (11.001) tricyclazole, (11.002) 2,2,2-trifluoethyl {3-methyl-1-[(4-methylbenzoyl)amino]butan-2-yl}carbamate.
- 12) Các chất ức chế tổng hợp axit nucleic, ví dụ (12.001) benalaxyl, (12.002) benalaxyl-M (kiralaxyl), (12.003) metalaxyl, (12.004) metalaxyl-M (mefenoxam).
- 13) Các chất ức chế truyền tín hiệu, ví dụ (13.001) fludioxonil, (13.002) iprodione, (13.003) proxymidon, (13.004) proquinazid, (13.005) quinoxifen, (13.006) vinclozolin.
- 14) Các hợp chất có khả năng hoạt động dưới dạng chất phân tách, ví dụ (14.001) fluazinam, (14.002) meptyldinocap.
- 15) Các chất diệt nấm khác được chọn từ nhóm bao gồm (15.001) axit abscisic, (15.002) benthiazole, (15.003) bethoxazin, (15.004) capsimycin, (15.005) carvone, (15.006) chinomethionat, (15.007) cufraneb, (15.008) cyflufenamid, (15.009) cymoxanil, (15.010) cyprosulfamid, (15.011) flutianil, (15.012) fosetyl-nhôm, (15.013) fosetyl-canxi, (15.014) fosetyl-natri, (15.015) methyl isothioxyanat, (15.016) metrafenone, (15.017) mildiomicin, (15.018) natamycin, (15.019) kẽm dimetyldithiocarbamat, (15.020) nitrothal-isopropyl,

(15.021) oxamocarb, (15.022) Oxathiapiprolin, (15.023) oxyfenthiin, (15.024) pentaclophenol và muối, (15.025) axit phosphoric axit và muối của nó, (15.026) propamocarb-fosetylát, (15.027) pyrioifenone (chlazafenone), (15.028) tebufloquin, (15.029) tecloftalam, (15.030) tolifenide, (15.031) 1-(4-{4-[(5R)-5-(2,6-diflophenyl)-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl]-1,3-thiazol-2-yl}piperidin-1-yl)-2-[5-metyl-3-(triflometyl)-1H-pyrazol-1-yl]etanon, (15.032) 1-(4-{4-[(5S)-5-(2,6-diflophenyl)-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl]-1,3-thiazol-2-yl}piperidin-1-yl)-2-[5-metyl-3-(triflometyl)-1H-pyrazol-1-yl]etanon, (15.033) 2-(6-benzylpyridin-2-yl)quinazolin, (15.034) dipymetitron, (15.035) 2-[3,5-bis(diflometyl)-1H-pyrazol-1-yl]-1-[4-(4-{5-[2-(prop-2-yn-1-yloxy)phenyl]-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl}-1,3-thiazol-2-yl)piperidin-1-yl]etanon, (15.036) 2-[3,5-bis(diflometyl)-1H-pyrazol-1-yl]-1-[4-(4-{5-[2-clo-6-(prop-2-yn-1-yloxy)phenyl]-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl}-1,3-thiazol-2-yl)piperidin-1-yl]ethanone, (15.037) 2-[3,5-bis(diflometyl)-1H-pyrazol-1-yl]-1-[4-(4-{5-[2-flo-6-(prop-2-yn-1-yloxy)phenyl]-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl}-1,3-thiazol-2-yl)piperidin-1-yl]etanon, (15.038) 2-[6-(3-flo-4-metoxypheyl)-5-metylpyridin-2-yl]quinazolin, (15.039) 2-{(5R)-3-[2-(1-{[3,5-bis(diflometyl)-1H-pyrazol-1-yl]axetyl}piperidin-4-yl)-1,3-thiazol-4-yl]-4,5-dihydro-1,2-oxazol-5-yl}-3-clophenyl metansulfonat, (15.040) 2-{(5S)-3-[2-(1-{[3,5-bis(diflometyl)-1H-pyrazol-1-yl]axetyl}piperidin-4-yl)-1,3-thiazol-4-yl]-4,5-dihydro-1,2-oxazol-5-yl}-3-clophenyl metansulfonat, (15.041) Ipflufenquin, (15.042) 2-{2-flo-6-[(8-flo-2-metylquinolin-3-yl)oxy]phenyl}propan-2-ol, (15.043) fluoxapiprolin, (15.044) 2-{3-[2-(1-{[3,5-bis(diflometyl)-1H-pyrazol-1-yl]axetyl}piperidin-4-yl)-1,3-thiazol-4-yl]-4,5-dihydro-1,2-oxazol-5-yl}phenyl metansulfonat, (15.045) 2-phenylphenol và muối, (15.046) 3-(4,4,5-triflo-3,3-dimetyl-3,4-dihydroisoquinolin-1-yl)quinolin, (15.047) quinofumelin, (15.048) 4-amino-5-floropyrimidin-2-ol (dạng tautome: 4-amino-5-floropyrimidin-2(1H)-on), (15.049) axit 4-oxo-4-[(2-phenyletyl)amino]butanoic, (15.050) 5-amino-1,3,4-thiadiazol-2-thiol, (15.051) 5-clo-N'-phenyl-N'-(prop-2-yn-1-yl)thiophen-2-sulfonohydrazit, (15.052) 5-flo-2-[(4-florobenzyl)oxy]pyrimidin-4-amin, (15.053) 5-flo-2-[(4-metylbenzyl)oxy]pyrimidin-4-amin, (15.054) 9-flo-2,2-dimetyl-5-(quinolin-3-yl)-2,3-dihydro-1,4-benzoxazepin, (15.055) but-3-yn-1-yl {6-[(Z)-(1-metyl-1H-tetrazol-5-yl)(phenyl)metylen]amino}oxy)metyl]pyridin-2-yl}carbamát, (15.056) etyl (2Z)-3-amino-2-xyano-3-phenylacrylat, (15.057) axit phenazin-1-carboxylic, (15.058) propyl

3,4,5-trihydroxybenzoat, (15.059) quinolin-8-ol, (15.060) quinolin-8-ol sulfat (2:1),
 (15.061) tert-butyl {6-[(1-metyl-1H-tetrazol-5-yl)(phenyl)metylen]amino}oxy)metyl]pyridin-2-yl}carbamate, (15.062) 5-flo-4-imino-
 3-metyl-1-[(4-metylphenyl)sulfonyl]-3,4-dihydropyrimidin-2(1H)-on, (15.063)
 aminopyrifin, (15.064) (N'-[2-clo-4-(2-florophenoxy)-5-metylphenyl]-N-etyl-N-
 metylimidoformamit), (15.065) (N'-(2-clo-5-metyl-4-phenoxyphenyl)-N-etyl-N-
 metylimidoformamit), (15.066) (2-{2-[(7,8-diflo-2-metylquinolin-3-yl)oxy]-6-
 florophenyl}propan-2-ol), (15.067) (5-bromo-1-(5,6-dimetylpyridin-3-yl)-3,3-dimetyl-
 3,4-dihydroisoquinoline), (15.068) (3-(4,4-diflo-5,5-dimetyl-4,5-dihydrothieno[2,3-
 c]pyridin-7-yl)quinoline), (15.069) (1-(4,5-dimetyl-1H-benzimidazol-1-yl)-4,4-diflo-3,3-
 dimetyl-3,4-dihydroisoquinolin), (15.070) 8-flo-3-(5-flo-3,3-dimetyl-3,4-
 dihydroisoquinolin-1-yl)quinolone, (15.071) 8-flo-3-(5-flo-3,3,4,4-tetrametyl-3,4-
 dihydroisoquinolin-1-yl)quinolone, (15.072) 3-(4,4-diflo-3,3-dimetyl-3,4-
 dihydroisoquinolin-1-yl)-8-floroquinolin, (15.073) (N-metyl-N-phenyl-4-[5-
 (triflometyl)-1,2,4-oxadiazol-3-yl]benzamid), (15.074) (metyl{4-[5-(triflometyl)-1,2,4-
 oxadiazol-3-yl]phenyl}carbamit), (15.075) (N-{4-[5-(triflometyl)-1,2,4-oxadiazol-3-
 yl]benzyl}-xyclopropan-carboxamid), (15.076) N-metyl-4-(5-(triflometyl)-1,2,4-
 oxadiazol-3-yl]benzamid, (15.077) N-[(E)-metoxyiminometyl]-4-[5-(triflometyl)-1,2,4-
 oxadiazol-3-yl]benzamid, (15.078) N-[(Z)-metoxyiminometyl]-4-[5-(triflometyl)-1,2,4-
 oxadiazol-3-yl]benzamid, (15.079) N-[4-[5-(triflometyl)-1,2,4-oxadiazol-3-yl]phenyl]-
 cyclopropan-carboxamid, (15.080) N-(2-florophenyl)-4-[5-(triflometyl)-1,2,4-
 oxadiazol-3-yl]benzamid, (15.081) 2,2-diflo-N-metyl-2-[4-[5-(triflometyl)-1,2,4-
 oxadiazol-3-yl]phenyl]-acetamid, (15.082) N-allyl-N-[4-[5-(triflometyl)-1,2,4-
 oxadiazol-3-yl]phenyl]metyl]acetamid, (15.083) N-[(E)-N-metoxi-C-metyl-
 carbonimidoyl]-4-(5-(triflometyl)-1,2,4-oxadiazol-3-yl]-benzamid, (15.084) N-[(Z)-N-
 metoxi-C-metyl-carbonimidoyl]-4-[5-(triflometyl)-1,2,4-oxadiazol-3-yl]benzamid,
 (15.085) N-allyl-N-[4-[5-(triflometyl)-1,2,4-oxadiazol-3-yl]phenyl]-metyl]propanamid,
 (15.086) 4,4-dimetyl-1-[4-[5-(triflometyl)-1,2,4-oxadiazol-3-
 yl]phenyl]metyl]pyrrolidin-2-on, (15.087) N-metyl-4-[5-(triflometyl)-1,2,4-oxadiazol-3-
 yl]-benzencarbothioamid, (15.088) 5-metyl-1-[4-[5-(triflometyl)-1,2,4-oxadiazol-3-
 yl]phenyl]metyl]pyrrolidin-2-on, (15.089) N-((2,3-diflo-4-[5-(triflometyl)-1,2,4-
 oxadiazol-3-yl]phenyl]metyl)-3,3,3-triflo-propanamid, (15.090) 1-metoxi-1-metyl-3-[[4-

[5-(triflometyl)-1,2,4-oxadiazol-3-yl]phenyl]metyl]urea, (15.091) 1,1-dietyl-3-[[4-[5-(triflometyl)-1,2,4-oxadiazol-3-yl]phenyl]metyl]urea, (15.092) N-[[4-[5-(triflometyl)-1,2,4-oxadiazol-3-yl]phenyl]metyl]propanamit, (15.093) N-metoxyl-N-[[4-[5-(triflometyl)-1,2,4-oxadiazol-3-yl]phenyl]metyl]cyclopropanecarboxamit, (15.094) 1-metoxyl-3-metyl-1-[[4-[5-(triflometyl)-1,2,4-oxadiazol-3-yl]phenyl]metyl]urea, (15.095) N-metoxyl-N-[[4-[5-(triflometyl)-1,2,4-oxadiazol-3-yl]phenyl]metyl]cyclopropanecarboxamit, (15.096) N,2-dimetoxyl-N-[[4-[5-(triflometyl)-1,2,4-oxadiazol-3-yl]phenyl]metyl]propanamit, (15.097) N-etyl-2-metyl-N-[[4-[5-(triflometyl)-1,2,4-oxadiazol-3-yl]phenyl]metyl]propanamit, (15.098) 1-metoxyl-3-metyl-1-[[4-[5-(triflometyl)-1,2,4-oxadiazol-3-yl]phenyl]metyl]urea, (15.099) 1,3-dimetoxyl-1-[[4-[5-(triflometyl)-1,2,4-oxadiazol-3-yl]phenyl]metyl]urea, (15.100) 3-etyl-1-metoxyl-1-[[4-[5-(triflometyl)-1,2,4-oxadiazol-3-yl]phenyl]metyl]urea, (15.101) 1-[[4-[5-(triflometyl)-1,2,4-oxadiazol-3-yl]phenyl]metyl]piperidin-2-on, (15.102) 4,4-dimetyl-2-[[4-[5-(triflometyl)-1,2,4-oxadiazol-3-yl]phenyl]metyl]isoxazolidin-3-on, (15.103) 5,5-dimetyl-2-[[4-[5-(triflometyl)-1,2,4-oxadiazol-3-yl]phenyl]metyl]isoxazolidin-3-on, (15.104) 3,3-dimetyl-1-[[4-[5-(triflometyl)-1,2,4-oxadiazol-3-yl]phenyl]metyl]piperidin-2-on, (15.105) 1-[[3-flo-4-(5-(triflometyl)-1,2,4-oxadiazol-3-yl]phenyl]metyl]azepan-2-on, (15.106) 4,4-dimetyl-2-[[4-(5-(triflometyl)-1,2,4-oxadiazol-3-yl]phenyl]metyl]isoxazolidin-3-on (15,107) 5,5-dimetyl-2-[[4-[5-(triflometyl)-1,2,4-oxadiazol-3-yl]phenyl]metyl]isoxazolidin-3-on, (15.108) etyl (1-{4-[5-(triflometyl)-1,2,4-oxadiazol-3-yl]benzyl}-1H-pyrazol-4-yl)aetat, (15,109) N,N-dimetyl-1-{4-[5-(triflometyl)-1,2,4-oxadiazol-3-yl]benzyl}-1H-1,2,4-triazol-3-amin và (15,110) N-{2,3-diflo-4-[5-(triflometyl)-1,2,4-oxadiazol-3-yl]benzyl}butanamit.

Các chất diệt sinh vật gây hại sinh học làm thành phần phối trộn

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

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

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

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

Bacillus amyloliquefaciens, chủng FZB42 (DSM 231179), hoặc *Bacillus cereus*, đặc biệt là *B. cereus* chủng CNCM I-1562 hoặc *Bacillus firmus*, chủng I-1582 (Số nộp lưu CNCM I-1582) hoặc *Bacillus pumilus*, đặc biệt là chủng GB34 (Số nộp lưu ATCC 700814) và chủng QST2808 (Số nộp lưu NRRL B-30087), hoặc *Bacillus subtilis*, đặc biệt là chủng GB03 (Số nộp lưu ATCC SD-1397), hoặc *Bacillus subtilis* chủng QST713 (Số nộp lưu NRRL B-21661) hoặc *Bacillus subtilis* chủng OST 30002 (Số nộp lưu NRRL B-50421), *Bacillus thuringiensis*, đặc biệt là *B. thuringiensis* loài phụ *israelensis* (kiểu huyết thanh H-14), chủng AM65-52 (Số nộp lưu ATCC 1276), hoặc *B. thuringiensis subsp. aizawai*, đặc biệt là chủng ABTS-1857 (SD-1372), hoặc *B. thuringiensis subsp. kurstaki* chủng HD-1, hoặc *B. thuringiensis subsp. tenebrionis* chủng NB 176 (SD-5428), *Pasteuria penetrans*, *Pasteuria spp.* (*Rotylenchulus reniformis* nematode)-PR3 (Số nộp lưu ATCC SD-5834), *Streptomyces microflavus* chủng AQ6121 (= QRD 31,013, NRRL B-50550), *Streptomyces galbus* chủng AQ 6047 (Số nộp lưu NRRL 30232).

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

Beauveria bassiana, đặc biệt là chủng ATCC 74040, *Coniothyrium minitans*, đặc biệt là chủng CON/M/91-8 (Mã truy cập số DSM-9660), *Lecanicillium spp.*, đặc biệt là chủng HRO LEC 12, *Lecanicillium lecanii*, (trước đây được biết là *Verticillium lecanii*), đặc biệt là chủng KV01, *Metarhizium anisopliae*, đặc biệt là chủng F52 (DSM3884/ ATCC 90448), *Metschnikowia fructicola*, đặc biệt là chủng NRRL Y-30752, *Paecilomyces fumosoroseus* (hiện nay là: *Isaria fumosorosea*), đặc biệt là chủng IFPC 200613, hoặc chủng Apopka 97 (Accession No. ATCC 20874), *Paecilomyces lilacinus*, đặc biệt là *P. lilacinus* chủng 251 (AGAL 89/030550), *Talaromyces flavus*, đặc biệt là chủng V117b, *Trichoderma atroviride*, đặc biệt là chủng SC1 (Mã truy cập số CBS 122089), *Trichoderma harzianum*, đặc biệt là *T. harzianum rifai* T39. (Số truy cập CNCM I-952).

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

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

Cũng bao gồm vi khuẩn và nấm, các loại này được bổ sung làm 'thành phần để cấy' lên thực vật hoặc các bộ phận của thực vật hoặc các cơ quan của thực vật và, nhờ các đặc tính cụ thể của chúng, thúc đẩy sự sinh trưởng của thực vật và sức khỏe của thực vật. Các ví dụ có thể được kể đến là:

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

Ví dụ về các chất chiết từ thực vật và các sản phẩm tạo ra bởi vi sinh vật bao gồm cả các protein và các sản phẩm chuyển hóa thứ cấp được sử dụng hoặc có thể được sử dụng làm chất diệt sinh vật gây hại sinh học đó là:

Allium sativum, *Artemisia absinthium*, azadirachtin, Biokeeper WP, *Cassia nigricans*, *Celastrus angulatus*, *Chenopodium anthelminticum*, chitin, Armour-Zen, *Dryopteris filix-mas*, *Equisetum arvense*, Fortune Aza, Fungastop, Heads Up (*Chenopodium quinoa* saponin extract), Pyrethrum/Pyrethrins, Quassia amara, *Quercus*, Quillaja, Regalia, "Requiem™ Insecticide", rotenone, ryania/ryanodine, *Symphytum officinale*, *Tanacetum vulgare*, thymol, Triact 70, TriCon, *Tropaeolum majus*, *Urtica dioica*, Veratrin, *Viscum album*, Brassicaceae extract, cụ thể là bột dầu hạt cải hoặc bột mù tạc, cũng như chất có hoạt tính diệt côn trùng sinh học / diệt ve bét thu được từ dầu ôliu, cụ thể là axit béo/carboxylic không bão hòa có chiều dài mạch cacbon C₁₆-C₂₀ làm thành phần hoạt tính, như, ví dụ, được chứa trong sản phẩm với tên thương mại FLIPPER®.

Chất an toàn làm thành phần phối trộn

Hợp chất có công thức (I) có thể được kết hợp với chất an toàn, ví dụ như, benoxacor, cloquintocet (-mexyl), xyometrinil, xyprosulfamid, diclomid, fenclorazol (-etyl), fenclorim, flurazol, fluxofenim, furilazol, isoxadifen (-etyl), mefenpyr (-dietyl), naphthalic anhydrit, oxabetrinil, 2-metoxi-N-({4-[(metylcacbamoyl)amino]phenyl}sulphonyl)benzamid (CAS 129531-12-0), 4-(dicloaxetyl)-1-oxa-4-azaspiro[4,5]decan (CAS 71526-07-3), 2,2,5-trimetyl-3-(dicloaxetyl)-1,3-oxazolidin (CAS 52836-31-4).

Thực vật và các bộ phận của thực vật

Tất cả các thực vật và các bộ phận của thực vật có thể được xử lý theo sáng chế. Ở đây, thực vật cần được hiểu có nghĩa là toàn bộ thực vật và các bộ phận của thực vật như thực vật hoang dại mong muốn và không mong muốn hoặc cây trồng (bao gồm cả cây trồng xuất hiện tự nhiên), ví dụ ngũ cốc (lúa mì, lúa gạo, tiểu hắc mạch, lúa mạch, lúa mạch đen, yến mạch), ngô, đậu tương, khoai tây, củ cải đường, cây mía đường, cà chua, ớt, dưa chuột, dưa, cà rốt, dưa hấu, hành, rau diếp, rau chân vịt, tỏi tây, đậu, *Brassica oleracea* (ví dụ, cải bắp) và các loài rau khác, bông, thuốc lá, cải dầu, và cả thực vật lấy quả (với các loại táo quả, lê, thực vật họ cam quýt và nho). Các cây trồng có thể là các thực vật mà có thể thu được bằng các phương pháp nhân giống và tối ưu hóa thông thường hoặc bằng các phương pháp công nghệ sinh học và xử lý bằng kỹ thuật di truyền hoặc kết hợp các phương pháp này, bao gồm các thực vật chuyển gen và bao gồm các giống thực vật mà có thể hoặc không được bảo vệ bằng quyền sở hữu đối với giống cây trồng. Các thực vật cần được hiểu với nghĩa là tất cả các giai đoạn phát triển, như hạt, cây giống, cây con (chưa trưởng thành) đến cây trưởng thành. Các bộ phận của thực vật cần được hiểu có nghĩa là tất cả các bộ phận và cơ quan của thực vật ở trên và dưới mặt đất, như chồi, lá, hoa và rễ, ví dụ minh họa đó là lá, lá kim, cuống, thân, hoa, thể quả, quả và hạt, và cả thân củ, rễ và thân rễ. Các bộ phận của các thực vật cũng bao gồm các thực vật được thu hoạch hoặc các bộ phận của thực vật được thu hoạch và vật liệu nhân giống sinh dưỡng và sinh sản, ví dụ, cây giống, thân củ, thân rễ, cành giâm và hạt.

Theo sáng chế, việc xử lý thực vật và các bộ phận của thực vật bằng hợp chất có công thức (I) được thực hiện trực tiếp hoặc bằng cách cho hợp chất tác động lên các vùng xung

quanh, môi trường hoặc không gian bảo quản bằng các phương pháp xử lý thông thường, ví dụ bằng phương pháp ngâm, phun, làm bay hơi, tạo sương, tung rắc, quét lên, tiêm và trong trường hợp vật liệu nhân giống, đặc biệt là trong trường hợp hạt giống, tương tự bằng cách ứng dụng một hoặc nhiều lớp phủ.

Như được nêu ở trên, có thể xử lý tất cả thực vật và bộ phận của thực vật theo sáng chế. Theo một phương án ưu tiên, các loài cây đại và các giống thực vật, hoặc những thực vật thu nhận bằng các phương pháp gây giống sinh học thông thường, như lai giống hoặc dung hợp thể nguyên sinh, và các phần của nó, được xử lý. Theo một phương án được ưu tiên khác, các thực vật chuyển gen và các giống thực vật thu được bằng các phương pháp xử lý bằng kỹ thuật di truyền, nếu thích hợp, kết hợp với các phương pháp thông thường (sinh vật được biến đổi di truyền), và các bộ phận của chúng được xử lý. Thuật ngữ “bộ phận” hoặc “bộ phận của thực vật” hoặc “bộ phận thực vật” đã được giải thích trên đây. Sáng chế được sử dụng với sự ưu tiên đặc biệt để xử lý các thực vật thuộc các giống thông thường trên thị trường tương ứng hoặc các giống đang sử dụng. Các giống thực vật cần phải được hiểu với nghĩa là các thực vật có các đặc tính mới ("các tính trạng") và thu được bằng cách nhân giống thông thường, bằng cách gây đột biến hoặc bằng kỹ thuật ADN tái tổ hợp. Thực vật có thể là giống cây trồng, giống thực vật, các kiểu sinh học hoặc kiểu gen.

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

Theo sáng chế, các hợp chất có công thức (I) có thể được sử dụng có lợi để xử lý thực vật chuyển gen, cây trồng hoặc bộ phận thực vật đã nhận vật liệu di truyền mà tạo nên các đặc tính có lợi và/hoặc hữu ích (tính trạng) cho các thực vật, cây trồng hoặc bộ phận thực vật này. Do đó, dự định rằng sáng chế có thể được kết hợp với một hoặc nhiều tính trạng tái tổ hợp hoặc (các) sự kiện chuyển gen hoặc tổ hợp của chúng. Nhằm mục đích của đơn này, sự kiện chuyển gen được tạo nên bằng cách chèn phân tử ADN tái tổ hợp đặc hiệu với vị trí đặc hiệu (locus) trong nhiễm sắc thể của bộ gen thực vật. Việc chèn này tạo nên trình tự ADN mới để chỉ “sự kiện” và được đặc trưng bởi phân tử ADN tái tổ hợp được chèn và một vài lượng ADN bộ gen nằm liền kề ngay với/bên hông các đầu của ADN được chèn. (Các) tính trạng hoặc (các) sự kiện chuyển gen như vậy bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, tính kháng thuốc của sinh vật gây hại, hiệu quả dùng trong nước, hiệu suất, tính chống chịu với hạn hán, chất lượng hạt, chất lượng dinh dưỡng được cải thiện, khả

năng sản xuất hạt lai, và tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, trong đó tính trạng được xác định đối với thực vật thiếu tính trạng hoặc sự kiện chuyển gen như vậy. Ví dụ cụ thể về các đặc tính có lợi và/hoặc hữu ích (tính trạng) như vậy là sự sinh trưởng thực vật, sức sống, tính chống chịu với ứng suất, tính tiêu chuẩn, tính chống đổ rạp, tính hấp thu dinh dưỡng, dinh dưỡng của thực vật, và/hoặc hiệu suất tốt hơn, cụ thể là sự sinh trưởng cải thiện, tính chống chịu tăng lên với các nhiệt độ cao hoặc thấp, tính chống chịu tăng lên với hạn hán hoặc với các mực nước hoặc độ mặn của đất, hiệu suất trở hoa tăng, thu hoạch dễ hơn, nhanh chín hơn, hiệu suất cao hơn, chất lượng cao hơn và/hoặc giá trị dinh dưỡng cao hơn của các sản phẩm đã được thu hoạch, thời gian bảo quản và/hoặc khả năng chế biến các sản phẩm đã được thu hoạch tốt hơn, và tăng tính kháng hoặc tính chống chịu với động vật và vi sinh vật gây hại, như đối với côn trùng, nhện, giun tròn, ve bét, sên và ốc sên.

Trong số protein mã hóa các trình tự ADN có các đặc tính kháng hoặc chống chịu với các động vật và vi sinh vật gây hại như vậy, cụ thể là côn trùng, vật liệu di truyền được đề cập từ *Bacillus thuringiensis* mã hóa protein Bt được mô tả rộng rãi trong tài liệu và đã biết rõ đối với người hiểu biết trung bình trong lĩnh vực này. Cũng đề cập đến các protein được chiết từ vi khuẩn như *Photobacterium* (WO97/17432 và WO98/08932). Cụ thể là, đề cập đến các protein Bt Cry hoặc VIP bao gồm các protein CryIA, CryIAb, CryIAC, CryIIA, CryIIIA, CryIIIB2, Cry9c Cry2Ab, Cry3Bb và CryIF hoặc mảnh gây độc của chúng và cũng như dạng lai hoặc tổ hợp của chúng, đặc biệt là protein CryIF hoặc các dạng lai dẫn xuất từ protein CryIF (ví dụ protein CryIA-CryIF lai hoặc mảnh gây độc của chúng), các protein loại CryIA hoặc mảnh gây độc của chúng, tốt hơn là protein CryIAC hoặc các dạng lai dẫn xuất từ protein CryIAC (ví dụ các protein CryIAb-CryIAC lai) hoặc protein CryIAb hoặc Bt2 hoặc mảnh gây độc của chúng, các protein Cry2Ae, Cry2Af hoặc Cry2Ag hoặc mảnh gây độc của chúng, protein CryIA.105 hoặc mảnh gây độc của chúng, protein VIP3Aa19, protein VIP3Aa20, các protein VIP3A được tạo ra trong các sự kiện bông COT202 hoặc COT203, protein VIP3Aa hoặc mảnh gây độc của chúng như được mô tả trong Estruch et al. (1996), Proc Natl Acad Sci US A. 28;93(11):5389-94, các protein Cry như được mô tả trong WO2001/47952, protein diệt côn trùng từ các chủng của loài *Xenorhabdus* (như được mô tả trong WO98/50427), *Serratia* (cụ thể là từ *S. entomophila*) hoặc *Photobacterium*, như các protein Tc từ *Photobacterium* như được mô tả trong WO98/08932. Ngoài ra, các biến thể hoặc đột biến bất kỳ của một trong số các

protein này khác nhau ở một vài axit amin (1-10, tốt hơn là 1-5) từ các trình tự bất kỳ trong số các trình tự được gọi tên nêu trên, cụ thể là trình tự của mảnh gây độc của chúng, hoặc mà được dung hợp với peptit chuyển, như peptit chuyển plastid, hoặc protein hoặc peptit khác, được bao gồm trong bản mô tả này.

Ví dụ đại diện khác và cụ thể về các đặc tính như vậy có tính chống chịu với một hoặc nhiều chất diệt cỏ, ví dụ imidazolinon, sulphonylure, glyphosat hoặc phosphinothricin. Trong số các protein mã hóa trình tự ADN có các đặc tính chống chịu với các chất diệt cỏ nhất định trên các tế bào thực vật và thực vật được biến nạp, được đề cập cụ thể tới thanh hoặc gen PAT hoặc gen *Streptomyces coelicolor* được mô tả trong WO2009/152359 có tính chống chịu với chất diệt cỏ glufosinat, gen mã hóa EPSPS thích hợp (5-Enolpyruvylshikimat-3-phosphat-synthaza) có tính chống chịu với chất diệt cỏ có EPSPS làm đích, đặc biệt là chất diệt cỏ như glyphosat và muối của nó, gen mã hóa glyphosat-n-axetyltransferaza, hoặc gen mã hóa glyphosat oxidoreductaza. Tính trạng chống chịu với thuốc diệt cỏ thích hợp khác bao gồm ít nhất một chất ức chế ALS (axetolactat synthaza) (ví dụ WO2007/024782), gen *Arabidopsis* ALS/AHAS đột biến (ví dụ Patent Mỹ 6,855,533), các gen mã hóa 2,4-D-monooxygenaza có tính chống chịu với 2,4-D (axit 2,4-diclophenoxyaxetic) và các gen mã hóa Dicamba monooxygenaza có tính chống chịu với dicamba (axit 3,6-diclo-2- metoxybenzoic).

Ví dụ đại diện khác và cụ thể về các đặc tính như vậy là tính kháng tăng chống nấm, vi khuẩn và/hoặc virus gây bệnh thực vật nhờ, ví dụ, tính kháng tập nhiễm hệ thống (systemic acquired resistance - SAR), systemin, phytoalexin, chất kích thích và cả các gen kháng và các protein và độc tố được biểu hiện tương ứng.

Cụ thể, các sự kiện chuyển gen hữu ích trong thực vật hoặc cây trồng chuyển gen có thể được xử lý ưu tiên theo sáng chế bao gồm Sự kiện 531/ PV-GHBK04 (bông, phòng trừ côn trùng, được mô tả trong WO2002/040677), sự kiện 1143-14A (bông, phòng trừ côn trùng, không được nộp lưu, được mô tả trong WO2006/128569); sự kiện 1143-51B (bông, phòng trừ côn trùng, không được nộp lưu, được mô tả trong WO2006/128570); sự kiện 1445 (bông, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, không được nộp lưu, được mô tả trong US-A 2002-120964 hoặc WO2002/034946); sự kiện 17053 (lúa gạo, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là PTA-9843, được mô tả trong WO2010/117737); sự kiện 17314 (lúa gạo, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là PTA-9844, được mô

tả trong WO2010/117735); sự kiện 281-24-236 (bông, phòng trừ côn trùng - tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là PTA-6233, được mô tả trong WO2005/103266 hoặc US-A 2005-216969); sự kiện 3006-210-23 (bông, phòng trừ côn trùng - tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là PTA-6233, được mô tả trong US-A 2007-143876 hoặc WO2005/103266); sự kiện 3272 (ngô, tính trạng chất lượng, được nộp lưu là PTA-9972, được mô tả trong WO2006/098952 hoặc US-A 2006-230473); sự kiện 33391 (lúa mì, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là PTA-2347, được mô tả trong WO2002/027004), sự kiện 40416 (ngô, phòng trừ côn trùng - tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là ATCC PTA-11508, được mô tả trong WO 11/075593); sự kiện 43A47 (ngô, phòng trừ côn trùng - tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là ATCC PTA-11509, được mô tả trong WO2011/075595); sự kiện 5307 (ngô, phòng trừ côn trùng, được nộp lưu là ATCC PTA-9561, được mô tả trong WO2010/077816); sự kiện ASR-368 (cỏ màn trâu, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là ATCC PTA-4816, được mô tả trong US-A 2006-162007 hoặc WO2004/053062); sự kiện B16 (ngô, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, không được nộp lưu, được mô tả trong US-A 2003-126634); sự kiện BPS-CV127- 9 (đậu tương, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là NCIMB số 41603, được mô tả trong WO2010/080829); sự kiện BLR1 (cải dầu, phục hồi sự vô sinh của giống đực, được nộp lưu là NCIMB 41193, được mô tả trong WO2005/074671), sự kiện CE43-67B (bông, phòng trừ côn trùng, được nộp lưu là DSM ACC2724, được mô tả trong US-A 2009-217423 hoặc WO2006/128573); sự kiện CE44-69D (bông, phòng trừ côn trùng, không được nộp lưu, được mô tả trong US-A 2010-0024077); sự kiện CE44-69D (bông, phòng trừ côn trùng, không được nộp lưu, được mô tả trong WO2006/128571); sự kiện CE46-02A (bông, phòng trừ côn trùng, không được nộp lưu, được mô tả trong WO2006/128572); sự kiện COT102 (bông, phòng trừ côn trùng, không được nộp lưu, được mô tả trong US-A 2006-130175 hoặc WO2004/039986); sự kiện COT202 (bông, phòng trừ côn trùng, không được nộp lưu, được mô tả trong US-A 2007-067868 hoặc WO2005/054479); sự kiện COT203 (bông, phòng trừ côn trùng, không được nộp lưu, được mô tả trong WO2005/054480);); sự kiện DAS21606-3 / 1606 (đậu tương, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là PTA-11028, được mô tả trong WO2012/033794), sự kiện DAS40278 (ngô, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là ATCC PTA-10244, được mô tả trong WO2011/022469); sự kiện DAS-44406-6 / pDAB8264.44.06.1 (đậu tương, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là

PTA-11336, được mô tả trong WO2012/075426), sự kiện DAS-14536-7 /pDAB8291.45.36.2 (đậu tương, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là PTA-11335, được mô tả trong WO2012/075429), sự kiện DAS-59122-7 (ngô, phòng trừ côn trùng - tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là ATCC PTA 11384, được mô tả trong US-A 2006-070139); sự kiện DAS-59132 (ngô, phòng trừ côn trùng - tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, không được nộp lưu, được mô tả trong WO2009/100188); sự kiện DAS68416 (đậu tương, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là ATCC PTA-10442, được mô tả trong WO2011/066384 hoặc WO2011/066360); sự kiện DP-098140-6 (ngô, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là ATCC PTA-8296, được mô tả trong US-A 2009- 137395 hoặc WO 08/112019); sự kiện DP-305423-1 (đậu tương, tính trạng chất lượng, không được nộp lưu, được mô tả trong US-A 2008-312082 hoặc WO2008/054747); sự kiện DP-32138-1 (ngô, hệ thống lai hóa, được nộp lưu là ATCC PTA-9158, được mô tả trong US-A 2009-0210970 hoặc WO2009/103049); sự kiện DP-356043-5 (đậu tương, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là ATCC PTA-8287, được mô tả trong US-A 2010-0184079 hoặc WO2008/002872); sự kiện EE-I (brinjal, phòng trừ côn trùng, không được nộp lưu, được mô tả trong WO 07/091277); sự kiện Fil 17 (ngô, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là ATCC 209031, được mô tả trong US-A 2006-059581 hoặc WO 98/044140); sự kiện FG72 (đậu tương, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là PTA-11041, được mô tả trong WO2011/063413), sự kiện GA21 (ngô, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là ATCC 209033, được mô tả trong US-A 2005-086719 hoặc WO 98/044140); sự kiện GG25 (ngô, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là ATCC 209032, được mô tả trong US-A 2005-188434 hoặc WO98/044140); sự kiện GHB119 (bông, phòng trừ côn trùng - tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là ATCC PTA-8398, được mô tả trong WO2008/151780); sự kiện GHB614 (bông, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là ATCC PTA-6878, được mô tả trong US-A 2010-050282 hoặc WO2007/017186); sự kiện GJ11 (ngô, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là ATCC 209030, được mô tả trong US-A 2005-188434 hoặc WO98/044140); sự kiện GM RZ13 (củ cải đường, kháng virus, được nộp lưu là NCIMB-41601, được mô tả trong WO2010/076212); sự kiện H7-1 (củ cải đường, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là NCIMB 41158 hoặc NCIMB 41159, được mô tả trong US-A 2004-172669 hoặc WO 2004/074492); sự kiện JOPLINI (lúa mì, tính chống chịu bệnh, không được nộp

lưu, được mô tả trong US-A 2008-064032); sự kiện LL27 (đậu tương, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là NCIMB41658, được mô tả trong WO2006/108674 hoặc US-A 2008-320616); sự kiện LL55 (đậu tương, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là NCIMB 41660, được mô tả trong WO 2006/108675 hoặc US-A 2008-196127); sự kiện LLCOTTON25 (bông, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là ATCC PTA-3343, được mô tả trong WO2003/013224 hoặc US- A 2003-097687); sự kiện LLRICE06 (lúa gạo, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là ATCC 203353, được mô tả trong US 6,468,747 hoặc WO2000/026345); sự kiện LLRICE62 (lúa gạo, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là ATCC 203352, được mô tả trong WO2000/026345), sự kiện LLRICE601 (lúa gạo, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là ATCC PTA-2600, được mô tả trong US-A 2008-2289060 hoặc WO2000/026356); sự kiện LY038 (ngô, tính trạng chất lượng, được nộp lưu là ATCC PTA-5623, được mô tả trong US-A 2007-028322 hoặc WO2005/061720); sự kiện MIR162 (ngô, phòng trừ côn trùng, được nộp lưu là PTA-8166, được mô tả trong US-A 2009-300784 hoặc WO2007/142840); sự kiện MIR604 (ngô, phòng trừ côn trùng, không được nộp lưu, được mô tả trong US-A 2008-167456 hoặc WO2005/103301); sự kiện MON15985 (bông, phòng trừ côn trùng, được nộp lưu là ATCC PTA-2516, được mô tả trong US-A 2004-250317 hoặc WO2002/100163); sự kiện MON810 (ngô, phòng trừ côn trùng, không được nộp lưu, được mô tả trong US-A 2002-102582); sự kiện MON863 (ngô, phòng trừ côn trùng, được nộp lưu là ATCC PTA-2605, được mô tả trong WO2004/011601 hoặc US-A 2006-095986); sự kiện MON87427 (ngô, phòng trừ sự thụ phấn, được nộp lưu là ATCC PTA-7899, được mô tả trong WO2011/062904); sự kiện MON87460 (ngô, tính chống chịu với ứng suất, được nộp lưu là ATCC PTA-8910, được mô tả trong WO2009/111263 hoặc US-A 2011-0138504); sự kiện MON87701 (đậu tương, insect control, được nộp lưu là ATCC PTA- 8194, được mô tả trong US-A 2009-130071 hoặc WO2009/064652); sự kiện MON87705 (đậu tương, tính trạng chất lượng - tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là ATCC PTA-9241, được mô tả trong US-A 2010-0080887 hoặc WO2010/037016); sự kiện MON87708 (đậu tương, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là ATCC PTA-9670, được mô tả trong WO2011/034704); sự kiện MON87712 (đậu tương, hiệu suất, được nộp lưu là PTA-10296, được mô tả trong WO2012/051199), sự kiện MON87754 (đậu tương, tính trạng chất lượng, được nộp lưu là ATCC PTA-9385, được mô tả trong WO2010/024976); sự

kiện MON87769 (đậu tương, tính trạng chất lượng, được nộp lưu là ATCC PTA- 8911, được mô tả trong US-A 2011-0067141 hoặc WO2009/102873); sự kiện MON88017 (ngô, phòng trừ côn trùng - tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là ATCC PTA-5582, được mô tả trong US-A 2008-028482 hoặc WO2005/059103); sự kiện MON88913 (bông, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là ATCC PTA-4854, được mô tả trong WO2004/072235 hoặc US-A 2006-059590); sự kiện MON88302 (cải dầu, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là PTA-10955, được mô tả trong WO2011/153186), sự kiện MON88701 (bông, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là PTA-11754, được mô tả trong WO2012/134808), sự kiện MON89034 (ngô, phòng trừ côn trùng, được nộp lưu là ATCC PTA-7455, được mô tả trong WO 07/140256 hoặc US-A 2008-260932); sự kiện MON89788 (đậu tương, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là ATCC PTA-6708, được mô tả trong US-A 2006-282915 hoặc WO2006/130436); sự kiện MSI 1 (cải dầu, phòng trừ sự thụ phấn - tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là ATCC PTA-850 hoặc PTA-2485, được mô tả trong WO2001/031042); sự kiện MS8 (cải dầu, phòng trừ sự thụ phấn - tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là ATCC PTA-730, được mô tả trong WO2001/041558 hoặc US-A 2003-188347); sự kiện NK603 (ngô, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là ATCC PTA-2478, được mô tả trong US-A 2007-292854); sự kiện PE-7 (lúa gạo, insect control, không được nộp lưu, được mô tả trong WO2008/114282); sự kiện RF3 (cải dầu, phòng trừ sự thụ phấn - tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là ATCC PTA-730, được mô tả trong WO2001/041558 hoặc US-A 2003-188347); sự kiện RT73 (cải dầu, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, không được nộp lưu, được mô tả trong WO2002/036831 hoặc US-A 2008-070260); sự kiện SYHT0H2 / SYN-000H2-5 (đậu tương, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là PTA-11226, được mô tả trong WO2012/082548), sự kiện T227-1 (củ cải đường, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, không được nộp lưu, được mô tả trong WO2002/44407 hoặc US-A 2009-265817); sự kiện T25 (ngô, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, không được nộp lưu, được mô tả trong US-A 2001-029014 hoặc WO2001/051654); sự kiện T304-40 (bông, phòng trừ côn trùng - tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là ATCC PTA-8171, được mô tả trong US-A 2010-077501 hoặc WO2008/122406); sự kiện T342-142 (bông, phòng trừ côn trùng, không được nộp lưu, được mô tả trong WO2006/128568); sự kiện TC1507 (ngô, phòng trừ côn trùng - tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, không được nộp lưu, được mô tả trong

US-A 2005-039226 hoặc WO2004/099447); sự kiện VIP1034 (ngô, phòng trừ côn trùng - tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là ATCC PTA-3925, được mô tả trong WO2003/052073), sự kiện 32316 (ngô, phòng trừ côn trùng-tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là PTA-11507, được mô tả trong WO2011/084632), sự kiện 4114 (ngô, phòng trừ côn trùng-tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, được nộp lưu là PTA-11506, được mô tả trong WO2011/084621), sự kiện EE-GM3 / FG72 (đậu tương, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, số truy cập ATCC PTA-11041) tùy ý được xếp với Sự kiện EE-GM1/LL27 hoặc Sự kiện EE-GM2/LL55 (WO2011/063413A2), sự kiện DAS-68416-4 (đậu tương, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, số truy cập ATCC PTA-10442, WO2011/066360A1), sự kiện DAS-68416-4 (đậu tương, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, số truy cập ATCC PTA-10442, WO2011/066384A1), sự kiện DP-040416-8 (ngô, phòng trừ côn trùng, số truy cập ATCC PTA-11508, WO2011/075593A1), sự kiện DP-043A47-3 (ngô, phòng trừ côn trùng, số truy cập ATCC PTA-11509, WO2011/075595A1), sự kiện DP-004114-3 (ngô, phòng trừ côn trùng, số truy cập ATCC PTA-11506, WO2011/084621A1), sự kiện DP-032316-8 (ngô, phòng trừ côn trùng, số truy cập ATCC PTA-11507, WO2011/084632A1), sự kiện MON-88302-9 (cải dầu, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, số truy cập ATCC PTA-10955, WO2011/153186A1), sự kiện DAS-21606-3 (đậu tương, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, số truy cập ATCC PTA-11028, WO2012/033794A2), sự kiện MON-87712-4 (đậu tương, tính trạng chất lượng, số truy cập ATCC. PTA-10296, WO2012/051199A2), sự kiện DAS-44406-6 (đậu tương, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ xếp chồng, số truy cập ATCC. PTA-11336, WO2012/075426A1), sự kiện DAS-14536-7 (đậu tương, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ xếp chồng, số truy cập ATCC. PTA-11335, WO2012/075429A1), sự kiện SYN-000H2-5 (đậu tương, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, số truy cập ATCC. PTA-11226, WO2012/082548A2), sự kiện DP-061061-7 (cải dầu, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, không có số nộp lưu, WO2012071039A1), sự kiện DP-073496-4 (cải dầu, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ, không có số nộp lưu, US2012131692), sự kiện 8264.44.06.1 (đậu tương, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ xếp chồng, Số truy cập PTA-11336, WO2012075426A2), sự kiện 8291.45.36.2 (đậu tương, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ xếp chồng, Số truy cập PTA-11335, WO2012075429A2), sự kiện SYHT0H2 (đậu tương, số truy cập ATCC. PTA-11226, WO2012/082548A2), sự kiện MON88701 (bông, số truy cập ATCC PTA-11754, WO2012/134808A1), sự kiện KK179-2 (alfalfa, số truy cập

ATCC PTA-11833, WO2013/003558A1), sự kiện pDAB8264.42.32,1 (đậu tương, tính chống chịu với thuốc diệt cỏ xếp chồng, số truy cập ATCC PTA-11993, WO2013/010094A1), sự kiện MZDT09Y (ngô, số truy cập ATCC PTA-13025, WO2013/012775A1).

Hơn nữa, danh sách (các) sự kiện chuyển gen được đưa ra bởi Cục kiểm dịch động thực vật (Animal and Plant Health Inspection Service - APHIS) của Bộ nông nghiệp Mỹ (United States Department of Agriculture - USDA) và có thể được tìm thấy trên trang web của Bộ trên toàn thế giới tại aphis.usda.gov. Đối với đơn này, trạng thái danh sách này có liên quan vì nó được nộp vào ngày nộp đơn này.

Các gen/sự kiện mà truyền các tính trạng mong muốn đang xét cũng có thể có mặt kết hợp với nhau trong các thực vật chuyển gen. Các ví dụ về các thực vật chuyển gen mà có thể được đề cập là các cây trồng quan trọng, như cây ngũ cốc (lúa mì, lúa, tiểu hắc mạch, lúa mạch, lúa mạch đen, yến mạch), cây ngô, cây đậu tương, cây khoai tây, cây củ cải đường, cây mía, cây cà chua, cây đậu Hà lan và các loại rau khác, cây bông, cây thuốc lá, cây cải hạt dầu và cả các cây ăn quả (với quả táo, lê, cam quýt và nho), với sự đặc biệt nhấn mạnh đối với cây ngô, cây đậu tương, cây lúa mì, cây lúa, cây khoai tây, cây bông, cây mía, cây thuốc lá và cây cải hạt dầu. Các tính trạng được đặc biệt chú ý là tính kháng tăng của thực vật với côn trùng, nhện, giun tròn và sên và ốc sên, cũng như tính kháng tăng của thực vật với một hoặc nhiều chất diệt cỏ.

Các ví dụ có sẵn thương mại về các thực vật, bộ phận thực vật hoặc hạt thực vật như vậy có thể được xử lý theo sáng chế bao gồm các sản phẩm thương mại, như hạt thực vật, được bán hoặc phân phối với tên thương mại GENUITY®, DROUGHTGARD®, SMARTSTAX®, RIB COMPLETE®, ROUNDUP READY®, VT DOUBLE PRO®, VT TRIPLE PRO®, BOLLGARD II®, ROUNDUP READY 2 YIELD®, YIELDGARD®, ROUNDUP READY® 2 XTEN^{DTM}, INTACTA RR2 PRO®, VISTIVE GOLD®, và/hoặc XTENDFLEXTM.

Bảo vệ cây trồng – các kiểu xử lý

Việc xử lý thực vật và các bộ phận của thực vật bằng hợp chất có công thức (I) được tiến hành trực tiếp hoặc bằng cách tác động lên vùng xung quanh, môi trường sống hoặc không gian bảo quản nhờ sử dụng các phương pháp xử lý thông thường, ví dụ bằng cách nhúng,

phun, phun mù, tưới, làm bay hơi, phun bụi, tạo sương, tung rắc, tạo bột, quét lên, phết lên, tiêm, tưới nước (tưới ướt), tưới ngập và trong trường hợp vật liệu nhân giống, đặc biệt là trong trường hợp hạt giống, ngoài ra, ở dạng bột để xử lý hạt khô, dung dịch để xử lý hạt ở dạng lỏng, bột hòa tan trong nước để xử lý ở dạng huyền phù đặc, bằng cách phủ lên vỏ ngoài, bằng cách phủ bằng một hoặc nhiều lớp phủ, v.v.. Ngoài ra, có thể áp dụng hợp chất có công thức (I) bằng phương pháp thể tích cực nhỏ hoặc bơm dạng ứng dụng hoặc chính hợp chất có công thức (I) vào trong đất.

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

Trong trường hợp hoạt chất tác động theo đường hệ thống, hợp chất có công thức (I) cũng tiếp cận thực vật thông qua hệ rễ. Sau đó, thực vật được xử lý thông qua tác động của hợp chất có công thức (I) lên môi trường sống của thực vật. Việc này có thể được thực hiện, ví dụ, bằng cách tưới ướt, hoặc bằng cách trộn vào đất hoặc dung dịch dinh dưỡng, tức là vị trí của thực vật (ví dụ, đất hoặc hệ thống trồng thủy sinh) được thấm bởi dạng lỏng của hợp chất có công thức (I), hoặc bằng cách áp dụng lên đất, tức là hợp chất có công thức (I) theo sáng chế được đưa vào ở dạng rắn (ví dụ, dưới dạng hạt) vào vị trí của thực vật, hoặc bằng cách áp dụng nhỏ giọt (thường còn được gọi là "bổ sung hóa chất"), tức là áp dụng dạng lỏng của hợp chất có công thức (I) theo sáng chế bằng các đường ống nhỏ giọt bề mặt hoặc cận bề mặt trong khoảng thời gian nhất định với việc thay đổi nước ở các vị trí xác định trong vùng lân cận của thực vật. Trong trường hợp cây trồng là cây lúa, thao tác này có thể được tiến hành bằng cách định lượng hợp chất có công thức (I) ở dạng ứng dụng rắn (ví dụ, dạng hạt) lên cánh đồng lúa tưới ngập nước.

Kỹ thuật số

Các hợp chất theo sáng chế có thể được kết hợp với các mô hình ví dụ được cài vào các chương trình máy tính để quản lý cây trồng đặc hiệu vị trí, trồng trọt nhờ vệ tinh, trồng trọt chính xác hoặc nông nghiệp chính xác. Các mô hình như vậy hỗ trợ quản lý đặc hiệu vị trí của các vị trí nông nghiệp bằng dữ liệu từ các nguồn khác nhau như đất, thời tiết, cây trồng (ví dụ loại, giai đoạn sinh trưởng, sức khỏe thực vật), cỏ (ví dụ loại, giai đoạn sinh trưởng), bệnh, sinh vật gây hại, chất dinh dưỡng, nước, độ ẩm, sinh khối, dữ liệu vệ

ting, hiệu suất v.v. nhằm mục đích tối ưu khả năng sinh lợi, khả năng chống đỡ và bảo vệ môi trường. Cụ thể là, các mô hình như vậy có thể giúp tối ưu quyết định nông học, kiểm soát tính chính xác của các ứng dụng trừ sinh vật gây hại và ghi nhận các công việc đã tiến hành.

Ví dụ, các hợp chất theo sáng chế có thể được đưa vào cây trồng theo phác đồ liều thích hợp nếu mô hình đưa ra sự phát triển của sinh vật gây hại và tính toán rằng ngưỡng đạt được để có thể khuyến đưa hợp chất theo sáng chế vào cây trồng.

Các hệ thống có sẵn thương mại bao gồm các mô hình nông học là, ví dụ, FieldScripts™ từ The Climate Corporation, Xarvio™ từ BASF, AGLogic™ từ John Deere, v.v..

Các hợp chất theo sáng chế cũng có thể được sử dụng kết hợp với thiết bị phun thông minh như, ví dụ, thiết bị phun vết hoặc thiết bị phun chính xác được gắn với hoặc nằm trong thiết bị trồng trọt như máy kéo, người máy, trục thăng, máy bay, phương tiện bay không người lái (unmanned aerial vehicle - UAV) như phương tiện tự động, v.v.. Thiết bị như vậy thường bao gồm các cảm biến đầu vào (như ví dụ, máy quay) và bộ phận xử lý được tạo cấu hình để phân tích dữ liệu vào và được tạo cấu hình để đưa ra quyết định dựa trên phân tích dữ liệu vào để đưa hợp chất theo sáng chế vào cây trồng (tương ứng với các loại cỏ) theo cách cụ thể và chính xác. Việc sử dụng thiết bị phun thông minh như vậy cũng thường đòi hỏi hệ thống định vị (ví dụ, thiết bị nhận GPS) để định vị dữ liệu được ghi nhận và để hướng dẫn hoặc để kiểm soát các phương tiện trồng trọt; hệ thống thông tin địa lý (geographic information system - GIS) để đưa ra thông tin trên bản đồ trí tuệ, và phương tiện trồng trọt thích hợp để tiến hành các thao tác trồng trọt được yêu cầu như phun.

Trong một ví dụ, sinh vật gây hại có thể được phát hiện từ hình ảnh thu được bằng máy quay. Trong một ví dụ, sinh vật gây hại có thể được nhận diện và/hoặc phân loại dựa vào hình ảnh đó. Việc nhận diện và/hoặc phân loại như vậy có thể sử dụng các thuật toán xử lý hình ảnh. Các thuật toán xử lý hình ảnh như vậy có thể sử dụng các thuật toán học máy, như mạng trung hòa được huấn luyện, cây quyết định và sử dụng thuật toán trí tuệ nhân tạo. Theo cách này, các hợp chất được mô tả trong bản mô tả này có thể chỉ được đưa vào khi cần.

Xử lý hạt

Việc phòng trừ động vật gây hại bằng cách xử lý hạt thực vật đã được biết trong thời gian dài và là đối tượng cải tiến liên tục. Tuy nhiên, việc xử lý hạt kéo theo một loạt các vấn đề mà không phải lúc nào cũng giải quyết được một cách thỏa đáng. Do đó, mong muốn phát triển các phương pháp bảo vệ hạt và thực vật nảy mầm mà không cần, hoặc ít nhất là giảm đáng kể, việc dùng thêm chất diệt sinh vật gây hại trong quá trình bảo quản, sau khi gieo hạt hoặc sau khi thực vật mọc. Ngoài ra, mong muốn tối ưu hóa lượng hoạt chất được dùng theo cách sao cho tạo ra được sự bảo vệ tối ưu cho hạt và thực vật nảy mầm khỏi sự tấn công bởi các động vật gây hại, mà không làm tổn thương đến chính thực vật này bởi hoạt chất được dùng. Cụ thể, phương pháp xử lý hạt cũng cần phải tính đến các đặc tính diệt trừ côn trùng hoặc diệt trừ giun tròn nội sinh của thực vật chuyển gen kháng lại hoặc chịu được sinh vật gây hại nhằm để đạt được sự bảo vệ tối ưu cho hạt và cả thực vật nảy mầm với lượng chất diệt sinh vật gây hại tối thiểu được sử dụng.

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

Tương tự, sáng chế đề cập đến việc sử dụng các hợp chất có công thức (I) trong xử lý hạt để bảo vệ hạt và thực vật nảy mầm khỏi động vật gây hại.

Ngoài ra, sáng chế đề cập đến hạt mà hạt này đã được xử lý bằng hợp chất có công thức (I) theo sáng chế sao cho có được sự bảo vệ tránh được động vật gây hại. Sáng chế cũng đề cập đến hạt đã được xử lý đồng thời bằng hợp chất có công thức (I) và thành phần phối trộn. Ngoài ra, sáng chế còn đề cập đến hạt mà hạt này đã được xử lý tại các thời điểm khác nhau bằng hợp chất có công thức (I) và thành phần kết hợp. Trong trường hợp hạt mà hạt này đã được xử lý tại các thời điểm khác nhau cùng lúc với hợp chất có công thức (I) và thành phần kết hợp, các chất riêng biệt có thể có mặt ở các lớp khác nhau trên hạt. Trong bản mô tả, các lớp chứa hợp chất có công thức (I) và các thành phần kết hợp tùy ý có thể được tách riêng bằng một lớp hợp chất trung gian. Sáng chế cũng đề cập đến hạt,

trong đó hợp chất có công thức (I) và thành phần kết hợp đã được đưa lên ở dạng một thành phần của lớp phủ hoặc ở lớp khác hoặc các lớp khác ngoài lớp phủ ra.

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

Một trong các lợi thế có được đối với hợp chất có công thức (I) tác động theo đường hệ thống trên thực tiễn là ở chỗ, bằng cách xử lý hạt, không chỉ bản thân hạt mà cả thực vật nảy sinh từ hạt, sau khi nảy mầm, đều được bảo vệ chống lại động vật gây hại. Theo phương thức này, có thể không cần bước xử lý trung gian cho cây tại thời điểm gieo hạt hoặc ngay sau đó một thời gian ngắn.

Có thể coi là một lợi thế nữa ở chỗ, nhờ xử lý hạt bằng hợp chất có công thức (I), sự nảy mầm và nhú mầm của hạt đã xử lý có thể được tăng cường.

Cũng được coi là một lợi thế ở chỗ, hợp chất có công thức (I) có thể được sử dụng nhất là cả đối với hạt chuyển gen.

Ngoài ra, hợp chất có công thức (I) có thể được sử dụng kết hợp với các hỗn hợp hoặc hợp chất thuộc công nghệ truyền tín hiệu, dẫn đến sự tạo cụm tốt hơn bằng các hiện tượng cộng sinh, ví dụ như, chủng vi khuẩn nốt rễ, nấm cộng sinh mycorrhizae và/hoặc vi khuẩn hoặc nấm nội ký sinh thực vật và/hoặc dẫn đến sự cố định nitơ tối ưu.

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

Như đã đề cập trên đây, việc xử lý hạt chuyển gen bằng hợp chất có công thức (I) cũng đặc biệt quan trọng. Điều này tạo ra hạt thực vật mà theo nguyên tắc, bao gồm ít nhất một gen khác loại mà gen này quản lý sự biểu hiện của polypeptit có các đặc tính diệt côn

trùng và/hoặc diệt giun tròn cụ thể. Gen khác loại trong hạt chuyển gen có thể có nguồn gốc từ các vi sinh vật như *Bacillus*, *Rhizobium*, *Pseudomonas*, *Serratia*, *Trichoderma*, *Clavibacter*, *Glomus* hoặc *Gliocladium*. Sáng chế đặc biệt thích hợp trong xử lý hạt chuyển gen bao gồm ít nhất một gen khác loại có nguồn gốc từ *Bacillus* sp. Tốt nhất gen khác loại có nguồn gốc từ *Bacillus thuringiensis*.

Trong ngữ cảnh của sáng chế, hợp chất có công thức (I) được áp dụng lên hạt. Tốt hơn là, hạt được xử lý ở trạng thái trong đó nó đủ ổn định để tránh bị tổn thương trong quá trình xử lý. Nói chung, hạt có thể được xử lý ở thời điểm bất kỳ trong khoảng thời gian từ lúc thu hoạch cho đến khi gieo trồng. Hạt thường sử dụng đã được tách ra khỏi thực vật và không còn lõi, vỏ, cuống, màng, lông hoặc thịt của quả. Ví dụ, có thể sử dụng hạt mà hạt này đã được thu hoạch, làm sạch và làm khô đến hàm lượng ẩm cho phép để bảo quản. Theo cách khác, cũng có thể sử dụng hạt mà sau khi làm khô đã được xử lý bằng, ví dụ, nước và sau đó làm khô lại, ví dụ môi nước. Trong trường hợp hạt lúa gạo, cũng có thể sử dụng hạt mà đã được làm ẩm, ví dụ, trong nước đến giai đoạn nhất định của quá trình mầm nhú lên bằng cách phá vỡ lớp vỏ ('pigeon breast stage') để kích thích khả năng nảy mầm và khả năng nhú mầm đồng đều hơn.

Khi xử lý hạt, cần phải cẩn thận ở chỗ, lượng hợp chất có công thức (I) được đưa lên hạt và/hoặc lượng các chất phụ gia khác được chọn theo cách sao cho sự nảy mầm của hạt không bị ảnh hưởng bất lợi, hoặc sao cho cây thu được không bị thương tổn. Thao tác này cần phải được bảo đảm, nhất là trong trường hợp các hoạt chất có thể thể hiện các tác dụng gây độc thực vật với tỷ lệ áp dụng nhất định.

Nói chung, hợp chất có công thức (I) được đưa lên hạt trong chế phẩm bào chế thích hợp. Các chế phẩm bào chế và quy trình xử lý hạt thích hợp là đã biết đối với người có hiểu biết trung bình về lĩnh vực này.

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

Các chế phẩm này được điều chế theo cách đã biết, bằng cách kết hợp hợp chất có công thức (I) với các chất phụ gia thông thường, ví dụ như, chất độn thông thường và cả dung

môi hoặc chất pha loãng, chất nhuộm màu, chất làm ẩm, chất phân tán, chất nhũ hóa, chất chống tạo bọt, chất bảo quản, chất cô đặc thứ cấp, chất dính kết, gibberelin và cả nước.

Chất màu mà có thể có trong các chế phẩm phủ ngoài hạt mà có thể được sử dụng theo sáng chế là tất cả các chất màu thông thường cho mục đích này. Có thể sử dụng phẩm màu, mà ít tan trong nước, hoặc thuốc nhuộm, mà hòa tan được trong nước. Ví dụ bao gồm các chất màu đã biết với tên Rhodamin B, C.I. Pigment Red 112 và C.I. Solvent Red 1.

Các chất thấm ướt hữu ích mà có thể có mặt trong chế phẩm phủ ngoài hạt có thể sử dụng được theo sáng chế là tất cả các chất mà thúc đẩy việc làm ướt và thường được sử dụng cho chế phẩm chứa các hoạt chất hóa nông. Ưu tiên sử dụng alkylnaphtalensulphonat, như diisopropyl- hoặc diisobutylnaphtalensulphonat.

Chất phân tán và/hoặc chất nhũ hóa hữu ích mà có thể có mặt trong các chế phẩm phủ ngoài hạt có thể sử dụng được theo sáng chế là tất cả các chất phân tán không ion, anion và cation thường được sử dụng cho chế phẩm chứa các hoạt chất hóa nông. Tốt hơn nếu sử dụng chất phân tán không ion hoặc anion hoặc hỗn hợp gồm các chất phân tán không ion hoặc anion. Các chất phân tán không ion thích hợp bao gồm đặc biệt là các polyme khối etylen oxit/propylen oxit, alkylphenol polyglycol ete và tristyrylphenol polyglycol ete và các dẫn xuất phosphat hóa hoặc sulphat hóa của chúng. Các chất phân tán anion thích hợp cụ thể là các lignosulphonat, các muối của axit polyacrylic và các sản phẩm ngưng tụ arylsulphonat/formaldehyt.

Các chất chống tạo bọt mà có thể có mặt trong các chế phẩm phủ ngoài hạt có thể sử dụng được theo sáng chế là tất cả các chất ức chế bọt thường được sử dụng cho chế phẩm chứa các hoạt chất hóa nông. Ưu tiên sử dụng các chất chống tạo bọt silicon và magie stearat.

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

Chất làm đặc thứ cấp mà có thể có mặt trong chế phẩm xử lý hạt dùng được theo sáng chế là tất cả các chất mà có thể được sử dụng cho các mục đích như vậy trong các chế phẩm

hóa nông. Các dẫn xuất của xenluloza, các dẫn xuất của axit acrylic, xanthan, đất sét cải biến và silic dioxit nghiền mịn là được ưu tiên.

Các chất bám dính mà có thể có mặt trong các chế phẩm phủ ngoài hạt có thể sử dụng được theo sáng chế là tất cả các chất kết dính thông thường có thể sử dụng được trong các sản phẩm phủ ngoài hạt. Polyvinylpyrrolidon, polyvinyl axetat, rượu polyvinyllic và tyloza có thể được đề cập là được ưu tiên.

Giberelin mà có thể có mặt trong chế phẩm xử lý hạt có thể được sử dụng theo sáng chế tốt hơn là giberelin A1, A3 (= axit giberelic), A4 và A7; axit giberelic là được ưu tiên sử dụng nhất. Các gibberelin là đã biết (tham khảo R. Wegler "Chemie der Pflanzenschutz- und Schädlingsbekämpfungsmittel", vol. 2, Springer Verlag, 1970, pp. 401-412).

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

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

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

Sức khỏe của động vật

Trong lĩnh vực sức khỏe động vật, tức là trong lĩnh vực thuốc thú y, hợp chất có công thức (I) có hoạt tính chống lại các sinh vật ký sinh trên động vật, đặc biệt là sinh vật ngoại ký sinh hoặc sinh vật nội ký sinh. Thuật ngữ sinh vật nội ký sinh bao gồm đặc biệt là giun sán và động vật nguyên sinh, như cầu trùng coccidia. Sinh vật ngoại ký sinh điển hình và tốt hơn là ngành chân khớp, đặc biệt là côn trùng hoặc ve bét.

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

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

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

Theo một phương án cụ thể, hợp chất có công thức (I) được sử dụng cho động vật có vú.

Theo phương án cụ thể khác, hợp chất có công thức (I) được sử dụng cho chim, cụ thể là chim lồng và đặc biệt là gia cầm.

Bằng cách sử dụng hợp chất có công thức (I) để phòng trừ sinh vật ký sinh trên động vật, dự tính có thể giảm thiểu hoặc phòng ngừa sự ốm yếu, các trường hợp tử vong và giảm năng suất (trong trường hợp thịt, sữa, len, da sống, trứng, mật và tương tự), sao cho việc chăn nuôi động vật có thể được thực hiện một cách kinh tế hơn và đơn giản hơn và động vật có thể có được sức khỏe tốt hơn.

Thuật ngữ “phòng trừ” hoặc “kiểm soát” theo sử dụng ở đây liên quan đến lĩnh vực sức khỏe động vật, có nghĩa là hợp chất có công thức (I) có tác dụng làm giảm tỷ lệ ký sinh

trùng tương ứng ở động vật bị nhiễm bởi ký sinh trùng này xuống mức không gây hại. Cụ thể hơn, "phòng trừ", như được sử dụng trong bản mô tả có nghĩa là, các hợp chất có công thức (I) có tác dụng tiêu diệt sinh vật ký sinh tương ứng, ức chế sự phát triển của chúng, hoặc ức chế sự tăng sinh của chúng.

Động vật chân khớp lấy làm ví dụ bao gồm, nhưng không giới hạn ở

từ bộ chấy rận hút máu (Anoplurida), ví dụ, *Haematopinus* spp., *Linognathus* spp., *Pediculus* spp., *Phtirus* spp., *Solenopotes* spp.;

từ bộ chấy rận cắn đốt (Mallophagida) và phân bộ Amblycerina và Ischnocerina, ví dụ, *Bovicola* spp., *Damalina* spp., *Felicola* spp., *Lepikentron* spp., *Menopon* spp., *Trichodectes* spp., *Trimenopon* spp., *Trinoton* spp., *Werneckiella* spp.;

từ bộ hai cánh (Diptera) và phân bộ Nematocerina và Brachycerina, ví dụ, *Aedes* spp., *Anopheles* spp., *Atylotus* spp., *Braula* spp., *Calliphora* spp., *Chrysomyia* spp., *Chrysops* spp., *Culex* spp., *Culicoides* spp., *Eusimulium* spp., *Fannia* spp., *Gasterophilus* spp., *Glossina* spp., *Haematobia* spp., *Haematopota* spp., *Hippobosca* spp., *Hybomitra* spp., *Hydrotaea* spp., *Hypoderma* spp., *Lipoptena* spp., *Lucilia* spp., *Lutzomyia* spp., *Melophagus* spp., *Morellia* spp., *Musca* spp., *Odagmia* spp., *Oestrus* spp., *Philipomyia* spp., *Phlebotomus* spp., *Rhinoestrus* spp., *Sarcophaga* spp., *Simulium* spp., *Stomoxys* spp., *Tabanus* spp., *Tipula* spp., *Wilhelmia* spp., *Wohlfahrtia* spp.;

từ bộ bọ chét (Siphonaptera), ví dụ, *Ceratophyllus* spp., *Ctenocephalides* spp., *Pulex* spp., *Tunga* spp., *Xenopsylla* spp.;

từ bộ cánh nửa (Heteropterida), ví dụ *Cimex* spp., *Panstrongylus* spp., *Rhodnius* spp., *Triatoma* spp.; cũng như các sinh vật gây phiền toái và gây hại trong lĩnh vực vệ sinh từ bộ Blattaria.

Hơn nữa, trong số các động vật chân khớp, loài ve bét sau đây có thể được đề cập làm ví dụ, mà không giới hạn ở:

thuộc phân lớp ve bét (Acarina) và bộ Metastigmata, ví dụ, từ họ Argasidae như *Argas* spp., *Ornithodoros* spp., *Otobius* spp., từ họ Ixodidae như *Amblyomma* spp., *Dermacentor* spp., *Haemaphysalis* spp., *Hyalomma* spp., *Ixodes* spp., *Rhipicephalus* (*Boophilus*) spp.,

Rhipicephalus spp. (chi gốc của ve bét nhiều vật chủ); thuộc bộ Mesostigmata như Dermanyssus spp., Ornithonyssus spp., Pneumonyssus spp., Raillietia spp., Sternostoma spp., Tropilaelaps spp., Varroa spp.; thuộc bộ Actinedida (Prostigmata), ví dụ, Acarapis spp., Cheyletiella spp., Demodex spp., Listrophorus spp., Myobia spp., Neotrombicula spp., Ornithocheyletia spp., Psorergates spp., Trombicula spp.; và thuộc bộ Acaridida (Astigmata), ví dụ, Acarus spp., Caloglyphus spp., Chorioptes spp., Cytodites spp., Hypodectes spp., Knemidocoptes spp., Laminosioptes spp., Notoedres spp., Otodectes spp., Psoroptes spp., Pterolichus spp., Sarcoptes spp., Trixacarus spp., Tyrophagus spp.

Động vật nguyên sinh ký sinh lây làm ví dụ bao gồm, nhưng không giới hạn ở:

Mastigophora (Flagellata) như:

Metamonada: thuộc bộ Diplomonadida, ví dụ, Giardia spp., Spironucleus spp.

Parabasala: từ bộ Trichomonadida, ví dụ, Histomonas spp., Pentatrichomonas spp., Tetratrichomonas spp., Trichomonas spp., Tritrichomonas spp.

Euglenozoa: thuộc bộ Trypanosomatida ví dụ Leishmania spp., Trypanosoma spp.

Sarcomastigophora (Rhizopoda) như Entamoebidae, ví dụ, Entamoeba spp., Centramoebidae, ví dụ Acanthamoeba sp., Euamoebidae, ví dụ Hartmanella sp.

Alveolata như Apicomplexa (Sporozoa): ví dụ Cryptosporidium spp.; từ bộ Eimeriida, ví dụ, Besnoitia spp., Cystoisospora spp., Eimeria spp., Hammondia spp., Isospora spp., Neospora spp., Sarcocystis spp., Toxoplasma spp.; từ bộ Adeleida, ví dụ, Hepatozoon spp., Klossiella spp.; từ bộ Haemosporida, ví dụ, Leucocytozoon spp., Plasmodium spp.; từ bộ Piroplasmida, ví dụ, Babesia spp., Ciliophora spp., Echinozoon spp., Theileria spp.; từ bộ Vesiculiferida, ví dụ, Balantidium spp., Buxtonella spp.

Microspora như Encephalitozoon spp., Enterocytozoon spp., Globidium spp., Nosema spp., và cả, ví dụ Myxozoa spp.

Giun sán gây bệnh cho người hoặc động vật bao gồm, ví dụ, động vật đầu móc, giun tròn, pentastoma và giun dẹp (ví dụ sán lá đơn chủ, sán dây và sán lá).

Các giun sán lây làm ví dụ bao gồm, nhưng không giới hạn ở:

Sán lá đơn chủ: ví dụ: *Dactylogyrus* spp., *Gyrodactylus* spp., *Micngười máyhrium* spp., *Polystoma* spp., *Troglocephalus* spp.

Sán dây: thuộc bộ Pseudophyllidea, ví dụ: *Bothridium* spp., *Diphyllobothrium* spp., *Diplogonoporus* spp., *Ichthyobothrium* spp., *Ligula* spp., *Schistocephalus* spp., *Spirometra* spp.

Thuộc bộ Cyclophyllida ví dụ: *Andyra* spp., *Anoplocephala* spp., *Avitellina* spp., *Bertiella* spp., *Cittotaenia* spp., *Davainea* spp., *Diorchis* spp., *Diplopylidium* spp., *Dipylidium* spp., *Echinococcus* spp., *Echinocotyle* spp., *Echinolepis* spp., *Hydatigera* spp., *Hymenolepis* spp., *Joyeuxiella* spp., *Mesocestoides* spp., *Moniezia* spp., *Paranoplocephala* spp., *Raillietina* spp., *Stilesia* spp., *Taenia* spp., *Thysaniezia* spp., *Thysanosoma* spp.

sán máng: thuộc lớp Digenea, ví dụ: *Austroilharzia* spp., *Brachylaima* spp., *Calicophoron* spp., *Catatropis* spp., *Clonorchis* spp., *Collyriclum* spp., *Cotylophoron* spp., *Cyclocoelum* spp., *Dicrocoelium* spp., *Diplostomum* spp., *Echinochasmus* spp., *Echinoparyphium* spp., *Echinostoma* spp., *Eurytrema* spp., *Fasciola* spp., *Fasciolides* spp., *Fasciolopsis* spp., *Fischoederius* spp., *Gastrothylacus* spp., *Gigantobilharzia* spp., *Gigantocotyle* spp., *Heterophyes* spp., *Hypoderaeum* spp., *Leucochloridium* spp., *Metagonimus* spp., *Metorchis* spp., *Nanophyetus* spp., *Notocotylus* spp., *Opisthorchis* spp., *Ornithobilharzia* spp., *Paragonimus* spp., *Paramphistomum* spp., *Plagiorchis* spp., *Posthodiplostomum* spp., *Prosthogonimus* spp., *Schistosoma* spp., *Trichobilharzia* spp., *Troglotrema* spp., *Typhlocoelum* spp.

Giun tròn: thuộc bộ Trichinellida, ví dụ: *Capillaria* spp., *Eucoleus* spp., *Paracapillaria* spp., *Trichinella* spp., *Trichomosoides* spp., *Trichuris* spp.

thuộc bộ Tylenchida, ví dụ: *Micronema* spp., *Parastrongyloides* spp., *Strongyloides* spp.

thuộc bộ Rhabditina, ví dụ: *Aelurostrongylus* spp., *Amidostomum* spp., *Ancylostoma* spp., *Angiostrongylus* spp., *Bronchonema* spp., *Bunostomum* spp., *Chabertia* spp., *Cooperia* spp., *Cooperioides* spp., *Crenosoma* spp., *Cyathostomum* spp., *Cyclococercus* spp., *Cyclodontostomum* spp., *Cylicocycus* spp., *Cylicostephanus* spp., *Cylindropharynx* spp., *Cystocaulus* spp., *Dictyocaulus* spp., *Elaphostrongylus* spp., *Filaroides* spp., *Globocephalus* spp., *Graphidium* spp., *Gyallocephalus* spp., *Haemonchus* spp.,

Heligmosomoides spp., *Hyostrogylus* spp., *Marshallagia* spp., *Metastrongylus* spp., *Muellerius* spp., *Necator* spp., *Nematodirus* spp., *Neostrogylus* spp., *Nippostrongylus* spp., *Obeliscoides* spp., *Oesophagodontus* spp., *Oesophagostomum* spp., *Ollulanus* spp.; *Ornithostrogylus* spp., *Oslerus* spp., *Ostertagia* spp., *Paracooperia* spp., *Paracrenosoma* spp., *Parafilaroides* spp., *Parelaphostrogylus* spp., *Pneumocaulus* spp., *Pneumostrogylus* spp., *Poteriostomum* spp., *Protostrongylus* spp., *Spicocaulus* spp., *Stephanurus* spp., *Strongylus* spp., *Syngamus* spp., *Teladorsagia* spp., *Trichonema* spp., *Trichostrongylus* spp., *Triodontophorus* spp., *Troglostrogylus* spp., *Uncinaria* spp.

thuộc bộ *Spirurida*, ví dụ: *Acanthocheilonema* spp., *Anisakis* spp., *Ascaridia* spp.; *Ascaris* spp., *Ascarops* spp., *Aspicularis* spp., *Baylisascaris* spp., *Brugia* spp., *Cercopithifilaria* spp., *Crassicauda* spp., *Dipetalonema* spp., *Dirofilaria* spp., *Dracunculus* spp.; *Draschia* spp., *Enterobius* spp., *Filaria* spp., *Gnathostoma* spp., *Gongylonema* spp., *Habronema* spp., *Heterakis* spp.; *Litomosoides* spp., *Loa* spp., *Onchocerca* spp., *Oxyuris* spp., *Parabronema* spp., *Parafilaria* spp., *Parascaris* spp., *Passalurus* spp., *Physaloptera* spp., *Probstmayria* spp., *Pseudofilaria* spp., *Setaria* spp., *Skjrabinema* spp., *Spirocerca* spp., *Stephanofilaria* spp., *Strongyluris* spp., *Syphacia* spp., *Thelazia* spp., *Toxascaris* spp., *Toxocara* spp., *Wuchereria* spp.

Giun đầu móc: thuộc bộ *Oligacanthorhynchida*, ví dụ: *Macracanthorhynchus* spp., *Prosthenorchis* spp.; thuộc bộ *Moniliformida*, ví dụ: *Moniliformis* spp.

thuộc bộ *Polymorphida*, ví dụ: *Filicollis* spp.; thuộc bộ *Echinorhynchida*, ví dụ: *Acanthocephalus* spp., *Echinorhynchus* spp., *Leptorhynchoides* spp.

Ngành năm lỗ miệng: thuộc bộ *Porocephalida*, ví dụ: *Linguatula* spp.

Trong lĩnh vực thú y và trong lĩnh vực chăn nuôi động vật, việc sử dụng hợp chất có công thức (I) được thực hiện bằng các phương pháp thông thường đã biết trong lĩnh vực, như theo đường ruột, theo đường ngoài tiêu hóa, theo đường da hoặc mũi dưới dạng chế phẩm thích hợp. Việc sử dụng có thể được thực hiện theo cách phòng ngừa, hoặc theo cách điều trị.

Do đó, theo một phương án, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) để dùng làm thuốc.

Theo một khía cạnh khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) để dùng làm chất chống sinh vật nội ký sinh.

Theo khía cạnh cụ thể khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) để dùng làm chất diệt giun sán, cụ thể hơn là dùng làm chất diệt giun tròn, chất diệt giun dẹt, chất diệt động vật đầu móc, hoặc chất diệt động vật năm giác.

Theo một khía cạnh khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) để dùng làm chất chống sinh vật nguyên sinh.

Theo khía cạnh khác, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức (I) để dùng làm chất chống sinh vật ngoại ký sinh, đặc biệt là làm chất diệt động vật chân khớp, đặc biệt hơn là chất diệt côn trùng hoặc chất diệt ve bét.

Theo các khía cạnh khác, sáng chế đề cập đến chế phẩm thú y chứa lượng hữu hiệu của ít nhất một hợp chất có công thức (I) và ít nhất một thành phần sau: tá dược được dụng (ví dụ chất pha loãng rắn hoặc lỏng), chất hỗ trợ được dụng (ví dụ chất hoạt động bề mặt), đặc biệt là tá dược được dụng và/hoặc chất hỗ trợ được dụng thường dùng trong các chế phẩm thú y.

Theo khía cạnh có liên quan, sáng chế đề cập đến phương pháp sản xuất chế phẩm thú y như được mô tả ở đây, phương pháp này bao gồm bước trộn ít nhất một hợp chất có công thức (I) với tá dược và/hoặc chất hỗ trợ được dụng, đặc biệt là tá dược được dụng và/hoặc chất hỗ trợ được dụng thường dùng trong các chế phẩm thú y.

Theo các khía cạnh khác, sáng chế đề cập đến các chế phẩm thú y được chọn từ nhóm gồm chế phẩm diệt sinh vật ngoại ký sinh và diệt sinh vật nội ký sinh, đặc biệt hơn là được chọn từ nhóm gồm chế phẩm diệt giun sán, diệt động vật nguyên sinh và diệt động vật chân khớp, thậm chí đặc biệt hơn là được chọn từ nhóm gồm chế phẩm diệt giun tròn, diệt giun dẹt, diệt động vật đầu móc, diệt động vật năm giác, diệt côn trùng và trừ nhện, theo các khía cạnh nêu trên, cũng như phương pháp sản xuất các chế phẩm này.

Theo các khía cạnh khác, sáng chế đề cập đến phương pháp điều trị tình trạng nhiễm sinh vật ký sinh, đặc biệt là nhiễm sinh vật ký sinh được chọn từ nhóm gồm sinh vật ngoại ký sinh và sinh vật nội ký sinh đã nêu ở đây, bằng cách sử dụng lượng hữu hiệu hợp chất có công thức (I) cho động vật, đặc biệt là động vật không phải người, cần được điều trị.

Theo các khía cạnh khác, sáng chế đề cập đến phương pháp điều trị tình trạng nhiễm sinh vật ký sinh, đặc biệt là nhiễm sinh vật ký sinh được chọn từ nhóm gồm sinh vật ngoại ký sinh và sinh vật nội ký sinh đã nêu ở đây, bằng cách sử dụng chế phẩm thú y được xác định trong bản mô tả cho động vật, đặc biệt là động vật không phải người, có nhu cầu sử dụng.

Theo khía cạnh khác, sáng chế đề cập đến việc sử dụng các hợp chất có công thức (I) để điều trị tình trạng nhiễm sinh vật ký sinh, đặc biệt là nhiễm sinh vật ký sinh được chọn từ nhóm gồm sinh vật ngoại ký sinh và sinh vật nội ký sinh đã nêu ở đây, cho động vật, đặc biệt là động vật không phải người.

Trong ngữ cảnh về sức khỏe động vật hoặc lĩnh vực thú y, thuật ngữ "điều trị" bao gồm việc điều trị dự phòng, dự phòng bùng phát hoặc điều trị.

Theo một phương án cụ thể, sáng chế đề xuất hỗn hợp gồm ít nhất một hợp chất có công thức (I) với các hoạt chất khác, đặc biệt là với chất diệt sinh vật nội và ngoại ký sinh, dùng cho lĩnh vực thuốc thú y.

Trong lĩnh vực sức khỏe động vật, "hỗn hợp" không chỉ có nghĩa là hai (hoặc nhiều) hoạt chất khác nhau được phối chế trong chế phẩm chung và theo đó sử dụng cùng nhau, mà còn liên quan đến các sản phẩm chứa chế phẩm riêng rẽ của từng hoạt chất. Theo đó, khi nhiều hơn hai hoạt chất cần được sử dụng, tất cả các hoạt chất có thể được phối chế trong cùng một chế phẩm chung hoặc tất cả các hoạt chất có thể được phối chế trong các chế phẩm riêng rẽ; tương tự có thể ở dạng trộn lẫn trong đó một số hoạt chất được phối chế cùng nhau và một số hoạt chất được phối chế riêng rẽ. Các chế phẩm riêng rẽ cho phép áp dụng riêng rẽ hoặc lần lượt các hoạt chất cần quan tâm.

Các hoạt chất được xác định ở đây bằng tên thông thường của chúng là đã biết và được mô tả, ví dụ, trong tài liệu "Pesticide Manual" (xem trên đây) hoặc có thể được tra cứu trên Internet (ví dụ: <http://www.alanwood.net/pesticides>).

Các hoạt chất làm ví dụ từ nhóm gồm chất diệt sinh vật ngoại ký sinh, ở dạng thành phần trộn, bao gồm nhưng không giới hạn ở chất diệt côn trùng và diệt ve bét được liệt kê chi tiết ở trên. Các hoạt chất khác có thể được sử dụng được liệt kê sau đây theo cách phân loại đã nêu dựa trên hệ thống phân loại theo phương thức tác động IRAC hiện hành: (1)

Chất ức chế axetylcholinesteraza (AChE); (2) chất phong bế kênh clorua đóng mở cổng bởi GABA; (3) chất điều biến kênh natri; (4) chất điều biến cạnh tranh của thụ thể axetylcholin nicotin (nAChR); (5) chất điều biến dị lập thể của thụ thể axetylcholin nicotin (nAChR); (6) chất điều biến dị lập thể kênh clorua đóng mở cổng bởi glutamat (GluCl); (7) chất giả hormon sâu non; (8) chất ức chế không đặc hiệu hỗn hợp (nhiều vị trí); (9) chất điều biến cơ quan dây âm; (10) chất ức chế sự sinh trưởng của ve bét; (12) chất ức chế ATP synthaza ti thể, như chất phá vỡ ATP; (13) chất phân tách sự phosphoryl hóa oxy hóa thông qua việc phá vỡ gradien proton; (14) chất phong bế kênh thụ thể axetylcholin nicotin; (15) chất ức chế sự sinh tổng hợp kitin, loại 0; (16) chất ức chế sự sinh tổng hợp kitin, loại 1; (17) chất phá vỡ quá trình lột xác (đặc biệt trong trường hợp bộ hai cánh, tức là côn trùng hai cánh); (18) chất chủ vận thụ thể ecdyson (hormon lột xác); (19) chất chủ vận thụ thể octopamin; (21) chất ức chế vận chuyển điện tử phức I của ty thể; (25) chất ức chế vận chuyển điện tử phức II của ty thể; (20) chất ức chế vận chuyển điện tử phức III của ty thể; (22) chất phong bế kênh natri phụ thuộc điện thế; (23) chất ức chế axetyl CoA carboxylaza; (28) chất điều biến thụ thể ryanodin; (30) chất điều biến dị lập thể kênh clorua qua cổng GABA.

Hoạt chất với các cơ chế tác động chưa biết hoặc không đặc hiệu, ví dụ, fentrifanil, fenoxacrim, xyclopren, clobenzilat, chlordimeform, flubenzimin, dicyclanil, amidoflomet, quinomethionat, triarathen, clothiazoben, tetrasul, kali oleat, dầu mỏ, metoxadiazon, gossyplur, flutenzin, bromopropylat, cryolit;

Hợp chất thuộc các nhóm khác, ví dụ butacarb, dimetilan, cloethocarb, phosphocarb, pirimiphos (-etyl), parathion (-etyl), methacrifos, isopropyl o-salixylat, trichlorfon, tigolaner, sulprofos, propaphos, sebufos, pyridathion, prothoat, dichlofenthion, demeton-S-metylsulphon, isazofos, xyanofenphos, dialifos, carbophenothion, autathiofos, aromfenvinfos (-metyl), azinphos (-etyl), chlorpyrifos (-etyl), fosmethilan, iodofenphos, dioxabenzofos, formothion, fonofos, flupyrzofos, fensulfothion, etrimfos;

các hợp chất clo hữu cơ, ví dụ camphechlor, lindane, heptachlor; hoặc phenylpyrazol, ví dụ acetoprol, pyrafluprol, pyriprol, vaniliprol, sisapronil; hoặc isoxazolines, ví dụ sarolaner, afoxolaner, lotilaner, fluralaner;

các pyrethroid, ví dụ (cis-, trans-), metofluthrin, profluthrin, flufenprox, flubroxithrinat, fubfenprox, fenfluthrin, protrifenbut, pyresmethrin, RU15525, terallethrin, cis-resmethrin, heptafluthrin, bioethanomethrin, biopermethrin, fenpyrithrin, cis-cypermethrin, cis-permethrin, clocythrín, cyhalothrin (λ -), chlovaporthrin, hoặc các hợp chất hydrocacbon được halogen hóa (HCHs);

các neonicotinoid, ví dụ nithiazine

diclomezotiaz, triflumezopyrim

các lacton vòng lớn, ví dụ nemadectin, ivermectin, latidectin, moxictin, selamectin, eprinomectin, doramectin, emamectin benzoate; milbemycin oxim

triprene, epofenonane, diofenolan;

các hợp chất sinh học, hormon hoặc pheromon, ví dụ các sản phẩm tự nhiên, ví dụ thuringiensin, codlemón hoặc các thành phần của cây sấu đầu

các dinitrophenol, ví dụ dinocap, dinobuton, binapacryl;

các benzoylure, ví dụ fluazuron, penfluron,

các dẫn xuất amidin, ví dụ, chlormebuform, cymiazole, demiditraz

chất diệt ve bét varroa ở tổ ong, ví dụ các axit hữu cơ, ví dụ axit formic, axit oxalic.

Các hoạt chất làm ví dụ từ nhóm chất diệt sinh vật nội ký sinh, làm thành phần phối trộn, bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở các hoạt chất diệt giun sán và các hoạt chất diệt động vật nguyên sinh.

Các hoạt chất diệt giun sán bao gồm, nhưng không giới hạn ở các hoạt chất diệt giun tròn, diệt sán lá và/hoặc diệt sán dây sau đây:

từ nhóm lacton vòng lớn, ví dụ: eprinomectin, abamectin, nemadectin, moxictin, doramectin, selamectin, lepimectin, latidectin, milbemectin, ivermectin, emamectin, milbemycin;

từ nhóm benzimidazol và probenzimidazol, ví dụ: oxibendazol, mebendazol, triclabendazol, thiophanat, parbendazol, oxfendazol, netobimin, fenbendazol, febantel, thiabendazol, xyclobendazol, cambendazol, albendazol sulfoxit, albendazol, flubendazol;

từ nhóm depsipeptit, tốt hơn là các depsipeptit vòng, cụ thể là các depsipeptit vòng 24 cạnh, ví dụ: emodepsit, PF1022A;

từ nhóm tetrahydropyrimidin, ví dụ: morantel, pyrantel, oxantel;

từ nhóm imidazothiazol, ví dụ: butamisol, levamisol, tetramisol;

từ nhóm aminophenylamidin, ví dụ: amidantel, amidantel loại axyl hóa (dAMD), tribendimidin;

từ nhóm aminoaxetonitril, ví dụ: monepantel;

từ nhóm paraherquamit, ví dụ: paraherquamit, derquantel;

từ nhóm salixylanilit, ví dụ: tribromsalan, bromoxanid, brotianid, clioxanid, closantel, niclosamid, oxyclozanid, rafoxanid;

từ nhóm các phenol được thế, ví dụ: nitroxynil, bithionol, disophenol, hexaclophene, niclofolan, meniclopholan;

từ nhóm các hợp chất phosphat hữu cơ, ví dụ: trichlorfon, naphthalofos, dichlorvos/DDVP, crufomat, coumaphos, haloxon;

từ nhóm piperazinon/quinolin, ví dụ: praziquantel, epsiprantel;

từ nhóm piperazin, ví dụ: piperazin, hydroxyzin;

từ nhóm tetracyclin, ví dụ: tetracyclin, clotetracyclin, doxyxycyclin, oxytetracyclin, rolitetracyclin;

từ các nhóm khác, ví dụ: bunamidin, niridazol, resorantel, omphalotin, oltipraz, nitroscanat, nitroxynil, oxamniquin, mirasan, miraxil, lucanthone, hycanthone, hetololol, emetin, diethylcarbamazin, diclophen, diamfenetol, clonazepam, bephenium, amoscanate, clorsulon.

Các hoạt chất diệt động vật nguyên sinh bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, các hoạt chất sau đây:

từ nhóm triazin, ví dụ: diclazuril, ponazuril, letrazuril, toltrazuril;

thuộc nhóm thể mang ion polyete, ví dụ: monensin, salinomycin, maduramicin, narasin;

thuộc nhóm lacton vòng lớn, ví dụ: milbemycin, erythromycin;

thuộc nhóm quinolon, ví dụ: enrofloxacin, pradofloxacin;

thuộc nhóm quinin, ví dụ: cloquin;

thuộc nhóm pyrimidin, ví dụ: pyrimethamin;

thuộc nhóm sulfonamid, ví dụ: sulfaquinoxalin, trimetoprim, sulfaclozin;

thuộc nhóm thiamin, ví dụ: amprolium;

thuộc nhóm lincosamid, ví dụ: clindamycin;

thuộc nhóm carbanilide, ví dụ: imidocarb;

thuộc nhóm nitrofurantoin, ví dụ: nifurtimox;

thuộc nhóm quinazolinon alkaloid, ví dụ: halofuginon;

thuộc các nhóm khác, ví dụ: oxamniquin, paromomycin;

thuộc nhóm vacxin hoặc kháng nguyên từ vi sinh vật, ví dụ: *Babesia canis rossi*, *Eimeria tenella*, *Eimeria praecox*, *Eimeria necatrix*, *Eimeria mitis*, *Eimeria maxima*, *Eimeria brunetti*, *Eimeria acervulina*, *Babesia canis vogeli*, *Leishmania infantum*, *Babesia canis canis*, *Dictyocaulus viviparus*.

Tất cả các thành phần phối trộn khác, nếu các nhóm chức của chúng cho phép điều này, tùy ý có thể tạo ra muối với kiềm hoặc axit thích hợp.

Phòng trừ vật truyền

Các hợp chất có công thức (I) cũng có thể được sử dụng trong việc phòng trừ vật truyền. Đối với mục đích của sáng chế, vectơ là ngành chân khớp, đặc biệt là côn trùng hoặc lớp nhện, có khả năng truyền tác nhân gây bệnh, ví dụ như, virus, ấu trùng, sinh vật đơn bào và vi khuẩn từ ổ chứa (thực vật, động vật, người, v.v..) sang vật chủ. Tác nhân gây bệnh có thể được truyền theo đường cơ học (ví dụ, đau mắt hột bởi các loại ruồi không đốt) sang vật chủ hoặc qua tiêm đốt (ví dụ, ký sinh trùng sốt rét bởi muỗi) vào vật chủ.

Các ví dụ về các vật truyền và các bệnh hoặc tác nhân gây bệnh mà chúng truyền là:

1) Muỗi

- Anopheles: sốt rét, bệnh giun chỉ;
- Culex: viêm não Nhật Bản, bệnh giun chỉ, các bệnh virus khác, truyền các loại giun khác;
- Aedes: bệnh sốt vàng, sốt Dengue, các bệnh khác do virus gây ra, bệnh giun chỉ;
- Simuliidae: truyền ấu trùng, đặc biệt là *Onchocerca volvulus*;
- Psychodidae: truyền bệnh leishmaniasis

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

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

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

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

6) Tích: bệnh do xoắn khuẩn borrellia như *Borrelia burgdorferi sensu lato.*, *Borrelia duttoni*, viêm não do tích đốt, sốt Q (*Coxiella burnetii*), bệnh babesia (*Babesia canis canis*), bệnh ehrlichiosis.

Các ví dụ về các vật truyền với nghĩa trong sáng chế là các côn trùng, ví dụ, rệp, ruồi, rầy lá hoặc bọ trĩ, mà có khả năng truyền các virus thực vật sang thực vật. Các vật truyền khác có khả năng truyền virus thực vật là nhện đỏ, rận, bọ cánh cứng và giun tròn.

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

Việc phòng trừ vật truyền cũng có thể thực hiện nếu như hợp chất có công thức (I) phá vỡ tính kháng.

Hợp chất có công thức (I) thích hợp để sử dụng trong phòng ngừa bệnh và/hoặc mầm bệnh được truyền bởi vật truyền. Do đó, một khía cạnh khác theo sáng chế bộc lộ việc sử dụng hợp chất có công thức (I) để kiểm soát vectơ, ví dụ trong nông nghiệp, trong làm vườn, trong vườn và trong các cơ sở giải trí và cả trong bảo vệ nguyên liệu và các sản phẩm bảo quản.

Bảo vệ các vật liệu công nghiệp

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

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

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

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

Cũng đã bất ngờ phát hiện rằng, các hợp chất có công thức (I) có thể được sử dụng để bảo vệ các đối tượng tiếp xúc với nước mặn hoặc nước lợ, đặc biệt là thân tàu thủy, sàn, lưới, tòa nhà, nơi neo giữ tàu và các hệ thống truyền tín hiệu, chống lại sự đóng cặn. Tương tự,

hợp chất có công thức (I), duy nhất hoặc kết hợp với các hoạt chất khác, có thể được sử dụng làm chất chống cấu gi.

Phòng trừ động vật gây hại trong lĩnh vực vệ sinh

Các hợp chất có công thức (I) thích hợp để phòng trừ động vật gây hại trong lĩnh vực vệ sinh. Cụ thể, sáng chế có thể được ứng dụng trong khu vực gia đình, trong khu vực vệ sinh và trong bảo vệ các sản phẩm bảo quản, nhất là để kiểm soát côn trùng, lớp nhện, con tích và ve bét bắt gặp trong các không gian kín như khu nhà ở, tòa nhà trong nhà máy, văn phòng, cabin phương tiện giao thông, trại nuôi động vật. Để phòng trừ sinh vật gây hại, hợp chất có công thức (I) được sử dụng đơn độc hoặc kết hợp với các hoạt chất khác và/hoặc các chất bổ trợ. Hợp chất theo sáng chế tốt hơn được sử dụng trong các sản phẩm diệt côn trùng trong gia đình. Hợp chất có công thức (I) có hiệu quả chống lại các loài nhậy và kháng và chống lại tất cả các giai đoạn phát triển.

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

Ví dụ, hợp chất theo sáng chế được sử dụng trong các sản phẩm dạng sol khí, sản phẩm phun áp tự do, ví dụ, bơm và máy phun bụi, các hệ thống phun mù tự động, máy phun mù, ở dạng bột xốp, gel, các sản phẩm bốc hơi với viên nén bốc hơi được làm từ xenluloza hoặc chất dẻo, dụng cụ làm bay hơi chất lỏng, dụng cụ làm bay hơi gel và màng, dụng cụ làm bay hơi dẫn động bằng cánh quạt, các hệ thống làm bay hơi năng lượng tự do hoặc cưỡng bức, các giấy bắt nhậy, túi bắt nhậy và gel bắt nhậy, ở dạng hạt nhỏ hoặc bụi, trong các môi để phát tán hoặc trong các điểm đặt môi.

Các chữ viết tắt và các ký hiệu

AcOH: axit axetic

aq.: chứa nước

br.: vạch rộng

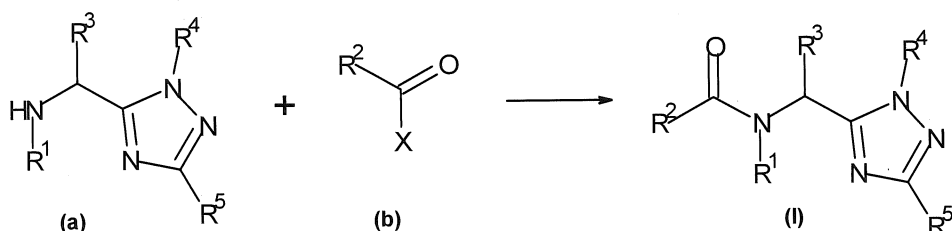
Boc:	<i>tert</i> -Butyloxycarbonyl
d:	vạch đôi
DAST:	diethylaminosulfur triflorua
DCC:	N,N'-dixyclohexylcarbodiimit
DCM:	diclometan
DIPEA:	diisopropyletylamin
DMF:	N,N-dimetylformamit
DMSO:	dimetylsulfoxit
ee:	lượng dư chất đồng phân đối ảnh
eq.:	đương lượng
EtOAc:	etyl axetat
HATU:	1-[bis(dimetylamino)metylen]-1H-1,2,3-triazolo[4,5-b]pyridini-3-oxid hexaflophosphat
HOBt:	1-hydroxybenzotriazol hydrat
HPLC:	sắc ký lỏng hiệu năng cao
<i>i</i> PrOH:	isopropanol
<i>J</i> :	hằng số kết hợp
<i>M</i> :	nồng độ phân tử gam
<i>m</i> :	đa vạch
MeCN	axetonitril
MeOH:	metanol
NMR:	cộng hưởng từ hạt nhân
<i>q</i> :	vạch bốn
<i>r. t.</i> :	nhiệt độ trong phòng
<i>s</i> :	vạch đơn
<i>sat.</i> :	bão hòa

T:	nhiệt độ
t:	vạch ba
T3P®:	anhydrit propylphosphonic
TLC:	sắc ký lớp mỏng
THF:	tetrahydrofuran
δ:	độ chuyển dịch hóa học

Mô tả các quy trình và các hợp chất trung gian

Các hợp chất có công thức I và hợp chất được thể hiện trong bảng 3 có thể được điều chế như được minh họa theo sơ đồ 1 dưới đây trong đó R¹, R², R³, R⁴, và R⁵ là như được định nghĩa trên đây hoặc là các đoạn tương ứng của các hợp chất được thể hiện trong bảng 3. X là OH hoặc Cl.

Sơ đồ 1



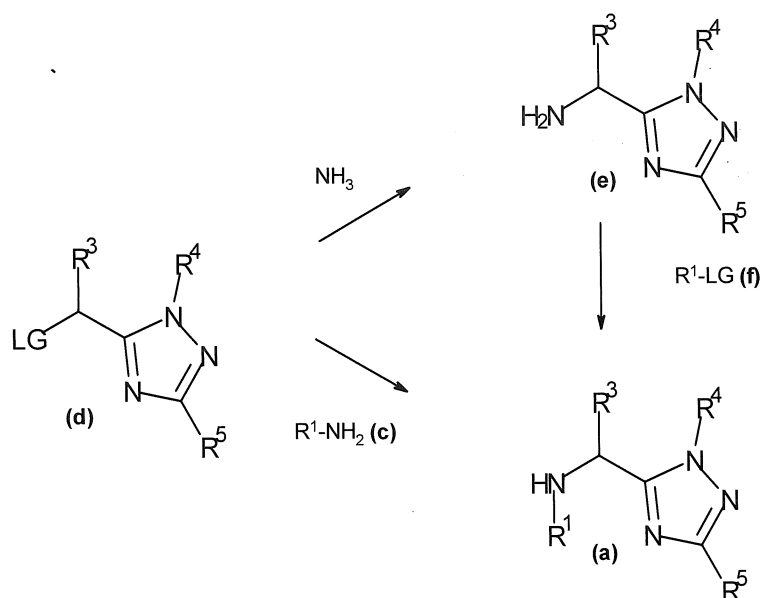
X = OH: Hợp chất triazol có công thức (a) được phản ứng với axit carboxylic có công thức (b) (X = OH) để tạo ra các hợp chất có công thức I. Ví dụ, hỗn hợp của triazol có công thức (a), axit carboxylic có công thức (b) (X = OH), chất phản ứng kết hợp thích hợp, như T3P®, HATU hoặc DCC/HOBt, bazơ thích hợp như triethylamin hoặc DIPEA, trong dung môi thích hợp, như ethyl axetat hoặc DMF được trộn ở các nhiệt độ trong khoảng từ 0 đến 100°C để thu được các hợp chất có công thức I mà sau đó có thể được tách và, nếu cần và nếu muốn, được tinh chế theo các phương pháp đã biết rõ trong lĩnh vực kỹ thuật này, như sắc ký.

X = Cl: Hợp chất triazol có công thức (a) được phản ứng với clorua của axit carboxylic có công thức (b) (X = Cl) để tạo ra các hợp chất có công thức I. ví dụ, hỗn hợp của triazol có công thức (a), axit carboxylic clorua có công thức (b) (X = Cl), bazơ thích hợp như

triethylamin hoặc DIPEA, trong dung môi thích hợp, như diclometan hoặc THF được trộn ở các nhiệt độ trong khoảng từ 0 đến 100°C để thu được các hợp chất có công thức I mà sau đó có thể được tách và, nếu cần và nếu muốn, được tinh chế theo các phương pháp đã biết rõ trong lĩnh vực kỹ thuật này, như sắc ký.

Các axit carboxylic có công thức (b) ($X = OH$) và clorua của axit carboxylic có công thức (b) ($X = Cl$) là có sẵn thương mại hoặc có thể được tổng hợp bằng các phương pháp đã biết đối với người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực. Các hợp chất triazol cần thiết có công thức (a) có thể được điều chế như được minh họa trên sơ đồ 2 dưới đây, trong đó R^3 và R^4 được mô tả trên đây, R^1 là C_1 - C_6 alkyl và R^5 là C_1 - C_3 alkyl; hoặc R^1 , R^3 , R^4 và R^5 là các đoạn tương ứng của hợp chất được thể hiện trong bảng 3. LG là nhóm rời chuyển thích hợp (cũng xem WO 2017192385).

Sơ đồ 2

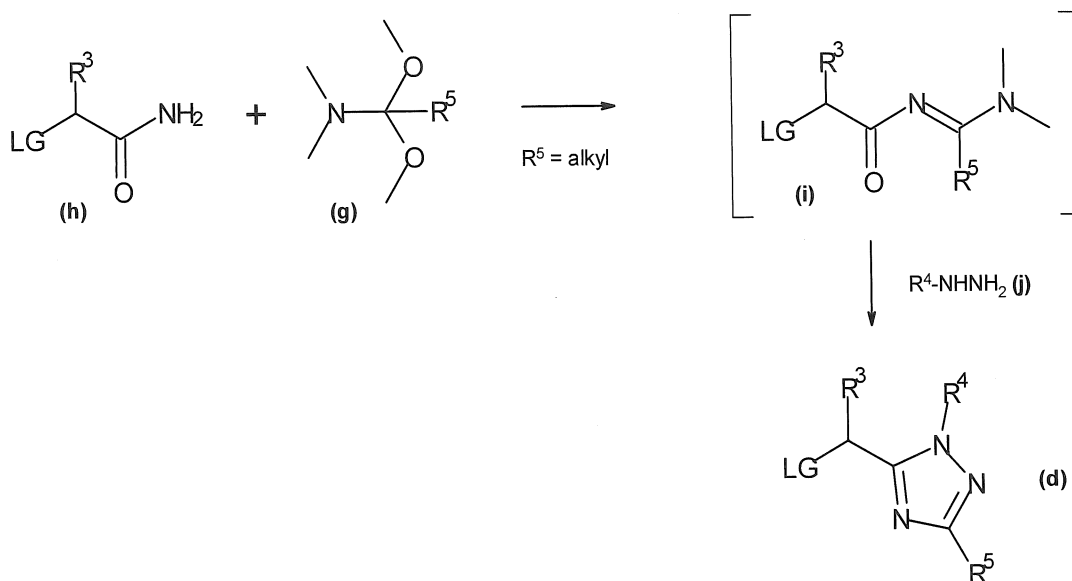


Amin có công thức (c) được phản ứng với triazol được thể có công thức (d) để tạo ra các hợp chất có công thức (a). Ví dụ, hỗn hợp gồm azol có công thức (d), amin có công thức (c), bazơ thích hợp, như K_2CO_3 , NaH hoặc DIPEA trong dung môi thích hợp, như axetonitril hoặc DMF được trộn lẫn ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ khoảng 20 đến 120°C để tạo ra các hợp chất có công thức (a) mà sau đó có thể được tách và, nếu cần và nếu

muốn, được tinh chế theo các phương pháp đã biết rõ trong lĩnh vực kỹ thuật này, như sắc ký.

Theo cách khác, triazol được thể có công thức (d) được phản ứng với amoniác để tạo ra các hợp chất có công thức (e). Ví dụ, dung dịch amoniác trong dung môi thích hợp, như metanol, và azol được thể có công thức (d) được trộn lẫn trong ống được bịt kín ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ khoảng 0 đến 25°C để tạo ra các hợp chất có công thức (e) mà sau đó có thể được tách và, nếu cần và nếu muốn, được tinh chế theo các phương pháp đã biết rõ trong lĩnh vực kỹ thuật này, như nghiền tinh chế. Azol được thể có công thức (e), hợp chất có công thức (f), bazơ thích hợp, như K_2CO_3 hoặc DIPEA trong dung môi thích hợp, như axetonitril hoặc DMF được trộn lẫn ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ khoảng 20 đến 120°C để tạo ra các hợp chất có công thức (a) mà sau đó có thể được tách và, nếu cần và nếu muốn, được tinh chế theo các phương pháp đã biết rõ trong lĩnh vực kỹ thuật này, như sắc ký.

Các amin có công thức (c) và các hợp chất có công thức (f) có bán trên thị trường hoặc có thể được tổng hợp theo các phương pháp đã biết đối với người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực. Các hợp chất triazol cần thiết có công thức (d) có thể được điều chế như được minh họa trên sơ đồ dưới đây 3, trong đó R^3 và R^4 được mô tả trên đây và R^5 là C_1 - C_3 alkyl; hoặc R^3 , R^4 và R^5 là các đoạn tương ứng của hợp chất được thể hiện trong bảng 3, LG là nhóm dimer chuyển thích hợp (cũng xem WO 2017192385).

Sơ đồ 3

Cho amit có công thức (h) phản ứng với *N,N*-dimetylmit dimetyl axetal (g) để tạo ra các hợp chất có công thức (i), sau đó cho phản ứng với hydrazin (j) trong điều kiện axit để tạo ra các hợp chất có công thức (d). Ví dụ, cho hợp chất có công thức (h) phản ứng với *N,N*-dimetylmit dimetyl axetal có công thức (g) trong dung môi thích hợp, như CH_2Cl_2 có gia nhiệt hồi lưu để tạo ra các hợp chất có công thức (i). Sau khi loại bỏ dung môi, cho các hợp chất có công thức (i) phản ứng với hydrazin được thể (j) trong dung môi thích hợp như 1,4-dioxan, axit axetic hoặc hỗn hợp các dung môi như vậy ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ khoảng 20 đến 100°C để tạo ra các hợp chất có công thức (d) mà sau đó có thể được tách và, nếu cần và nếu muốn, được tinh chế theo các phương pháp đã biết rõ trong lĩnh vực kỹ thuật này, như sắc ký.

N,N-dimetylmit axetal có công thức (g), amit có công thức (h), và hydrazin có công thức (j) là có sẵn thương mại hoặc có thể được tổng hợp bằng các phương pháp đã biết đối với người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực.

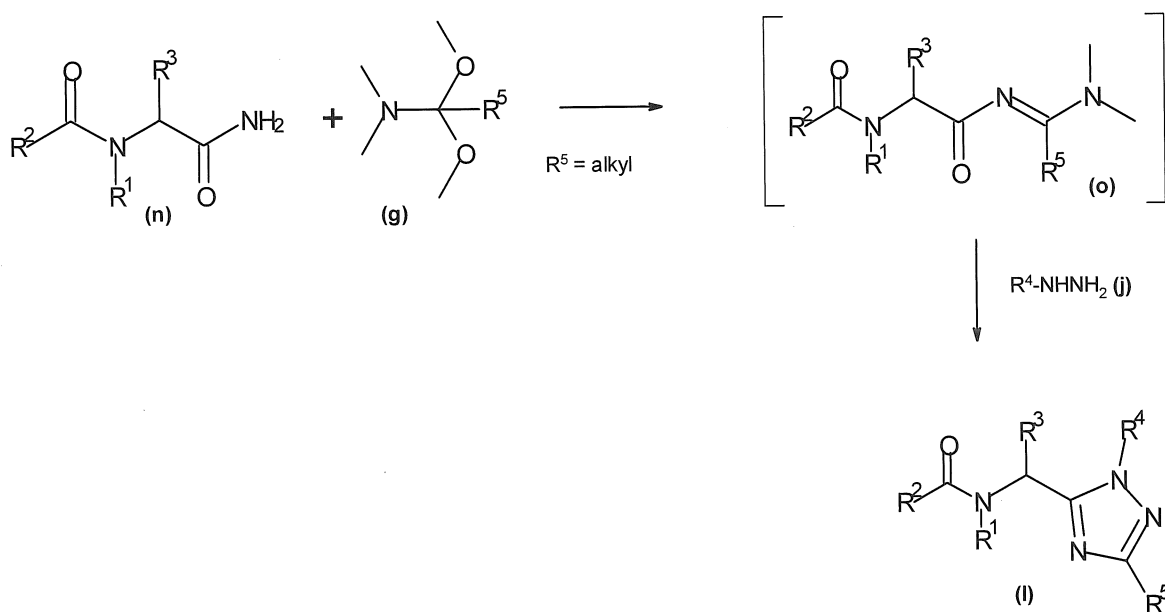
Ví dụ:

Đối với 5-bromo-2-hydrazinopyridin, xem WO2013/038362

Đối với 2-hydrazino-1,3,-thiazol, xem US2008/0234327, WO2018/064119, WO2008/144767, WO2008\121861, WO2004046120

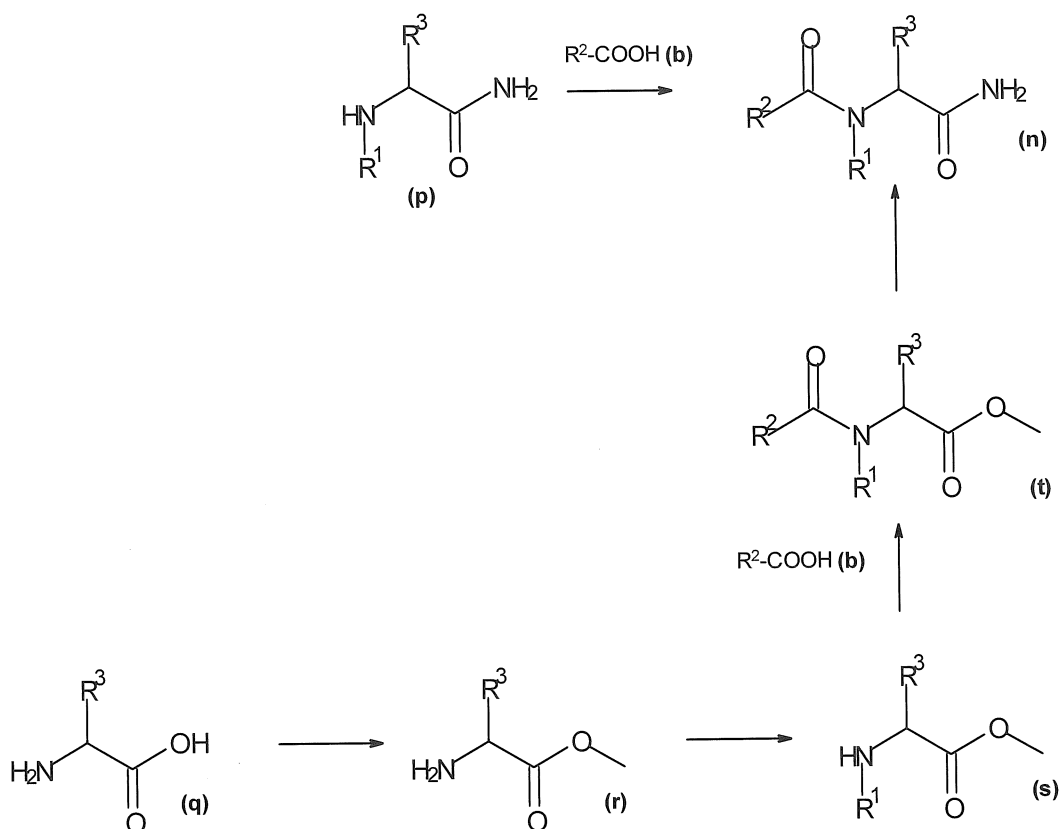
Các hợp chất có công thức I và các ví dụ được thể hiện trong bảng 3 có thể được điều chế như được minh họa trên sơ đồ dưới đây 4 trong đó R^1 , R^2 , R^3 và R^4 là như được định nghĩa trên đây và R^5 là C_1 - C_3 alkyl; hoặc R^1 , R^2 , R^3 , R^4 và R^5 là các đoạn tương ứng của các hợp chất được thể hiện trong bảng 3.

Sơ đồ 4



Amit có công thức (n) được phản ứng với *N,N*-dimetylamit dimetyl axetal có công thức (g) để tạo ra các hợp chất có công thức (o) được cho phản ứng sau đó với hydrazin được thể có công thức (j) trong điều kiện tính axit để tạo ra Các hợp chất có công thức I. Ví dụ, hợp chất có công thức (n) và *N,N*-dimetylamit dimetyl axetal có công thức (g) được cho phản ứng trong dung môi thích hợp, như CH_2Cl_2 có gia nhiệt hồi lưu để thu được các hợp chất có công thức (o). Sau khi loại bỏ dung môi, cho các hợp chất có công thức (o) phản ứng với hydrazin được thể có công thức (i) trong dung môi thích hợp như 1,4-dioxan, axit axetic hoặc hỗn hợp các dung môi như vậy ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ khoảng 20 đến 100°C . Sau đó, các hợp chất có công thức I'' thu được có thể được tách và, nếu cần và nếu muốn, được tinh chế theo các phương pháp đã biết rõ trong lĩnh vực kỹ thuật này, như sắc ký.

Amit cần thiết có công thức (n) có thể được điều chế như được minh họa trên sơ đồ dưới đây 5, trong đó R^2 và R^3 được mô tả trên đây và R^1 là C_1 - C_6 alkyl hoặc H (cũng xem WO 2017192385); hoặc R^1 , R^2 và R^3 là các đoạn tương ứng của các hợp chất được thể hiện trong bảng 3.

Sơ đồ 5

Cho amino amit có công thức (p) phản ứng với axit carboxylic có công thức (b) để tạo ra các hợp chất có công thức (n). Ví dụ, hỗn hợp gồm amino amit có công thức (p), axit carboxylic (b), tác nhân kết hợp thích hợp như T3P®, HATU, DCC hoặc HOBt, bazơ thích hợp như triethylamin hoặc DIPEA, trong dung môi thích hợp như etyl axetat hoặc DMF được trộn lẫn ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ khoảng 0 đến 100°C để tạo ra các hợp chất có công thức (n) mà sau đó có thể được tách và, nếu cần và nếu muốn, được tinh chế theo các phương pháp đã biết rõ trong lĩnh vực kỹ thuật này, như sắc ký.

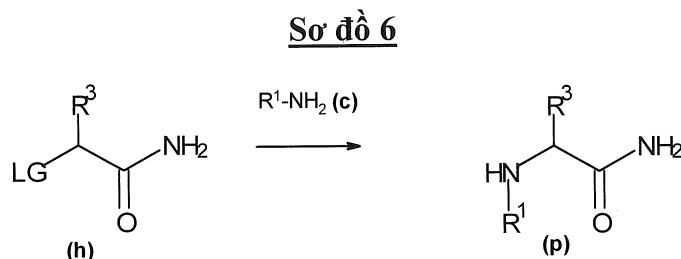
Theo cách khác, cho axit amin có công thức (q) phản ứng với thionyl clorua trong dung môi thích hợp, như MeOH, ở nhiệt độ trong phòng để tạo ra amino este có công thức (r). Cho amino este (r) thu được phản ứng với aldehyt hoặc keton, tác nhân khử thích hợp như natri triaxetoxymorohydrua, tác nhân khử hydrat, như Na₂SO₄, trong dung môi thích hợp như axit axetic, ở nhiệt độ trong phòng để tạo ra các hợp chất có công thức (s). Các amino este có công thức (s) thu được sau đó được cho phản ứng với axit carboxylic có công thức (b), chất ghép đôi thích hợp, như T3P®, bazơ thích hợp như DIPEA, trong dung môi thích hợp, như etyl axetat ở khoảng 90°C để thu được các amido este có công thức (t) mà sau đó có thể được tách ra và, nếu cần và mong muốn, được tinh chế bằng cách sử dụng các

kỹ thuật đã được biết rõ trong lĩnh vực này, như sắc ký. Các amido este có công thức (t) thu được được cho phản ứng với magie nitrua trong dung môi thích hợp, như MeOH ở khoảng 80°C trong ống được đậy kín để thu được các hợp chất có công thức (n) mà sau đó có thể được tách ra và, nếu cần và mong muốn, được tinh chế bằng cách sử dụng các kỹ thuật đã được biết rõ trong lĩnh vực này, như sắc ký hoặc chiết.

Các hợp chất có công thức (b) và (q) sẵn có trên thị trường. Các hợp chất amino amit cần thiết có công thức (p) có sẵn thương mại hoặc có thể được điều chế như được minh họa trên sơ đồ 6 dưới đây, trong đó R¹, R³ và Y được mô tả trên đây hoặc là các đoạn tương ứng của các hợp chất được thể hiện trong bảng 3 và LG là nhóm rời chuyển thích hợp (cũng xem WO 2017192385).

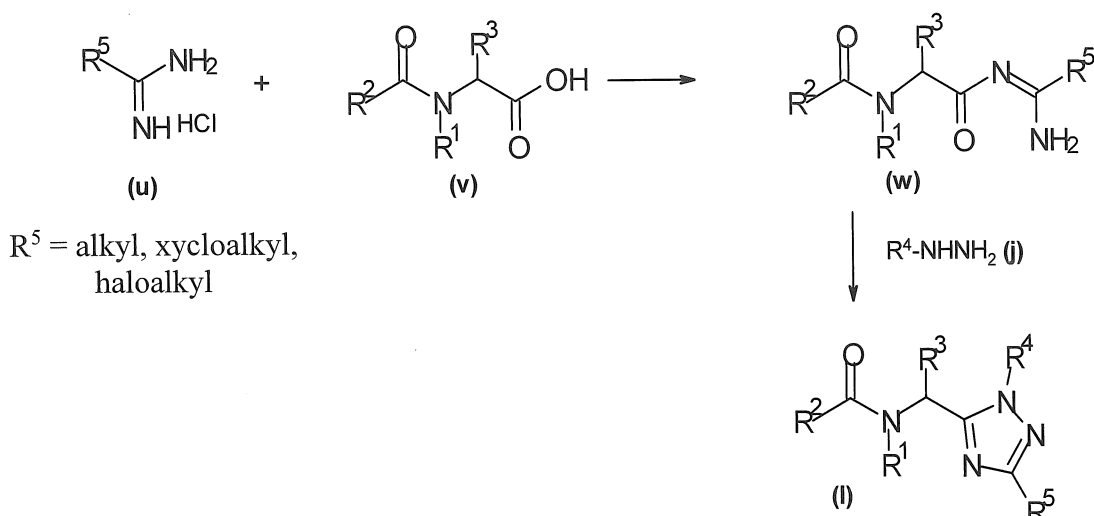
Các hợp chất có công thức (c) và (h) sẵn có trên thị trường.

Các amin cần thiết có công thức (p) có thể được điều chế như được minh họa trên sơ đồ dưới đây 6, trong đó R¹ và R³, được mô tả trên đây (cũng xem WO 2017192385) hoặc là các đoạn tương ứng của các hợp chất được thể hiện trong bảng 3.



Cho amin có công thức (c) phản ứng với amit có công thức (h) để tạo ra các hợp chất có công thức (p). Ví dụ, hỗn hợp gồm amin có công thức (c), amit có công thức (h), bazơ thích hợp, như K₂CO₃ hoặc DIPEA trong dung môi thích hợp, như axetonitril hoặc DMF được trộn lẫn ở 25–80°C để tạo ra các hợp chất có công thức (p) mà sau đó có thể được tách và, nếu cần và nếu muốn, được tinh chế theo các phương pháp đã biết rõ trong lĩnh vực kỹ thuật này, như sắc ký.

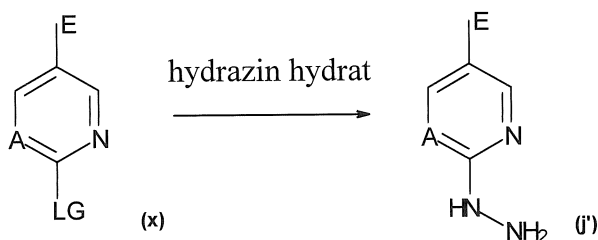
Trong phương pháp khác, các hợp chất có công thức I có thể được điều chế như được minh họa trên sơ đồ 7 dưới đây trong đó R¹, R², R³, R⁴ là như được định nghĩa trên đây và R⁵ là etyl, iso-propyl, tert-butyl, diflometyl hoặc xyclopropyl; hoặc R¹, R², R³, R⁴ và R⁵ là các đoạn tương ứng của các hợp chất được thể hiện trong bảng 3.

Sơ đồ 7

Cho amidin hydroclorua có công thức (u) phản ứng với axit có công thức (v). Ví dụ, amidin hydroclorua có công thức (u), axit carboxylic (v), chất ghép đôi thích hợp, như HATU hoặc DCC/HOBt, bazơ thích hợp như triethylamin hoặc DIPEA, trong dung môi thích hợp như axetonitril hoặc DMF được trộn ở các nhiệt độ nằm trong khoảng từ quanh 0 đến 100°C, để tạo ra các hợp chất có công thức (w) mà sau đó được cho phản ứng với hydrazin được thể có công thức (j) trong điều kiện axit để tạo ra các hợp chất có công thức I mà sau đó có thể được tách ra và, nếu cần và mong muốn, được tinh chế bằng cách sử dụng các kỹ thuật đã được biết rõ trong lĩnh vực này, như sắc ký.

Các amidin hydroclorua có công thức (u), các dẫn xuất axit carboxylic có công thức (v) và các hydrazin có công thức (j) là có bán trên thị trường hoặc có thể được tổng hợp bằng các phương pháp đã biết đối với người có hiểu biết trung bình.

Các hợp chất có công thức (j') có thể được điều chế như được minh họa trên sơ đồ 8 dưới đây trong đó E là triflometoxy, diflometoxy hoặc triflometylsulfanyl, LG là clo, flo, methylthio, metylsulfinyl hoặc metylsulfonyl và A' là N hoặc CH.

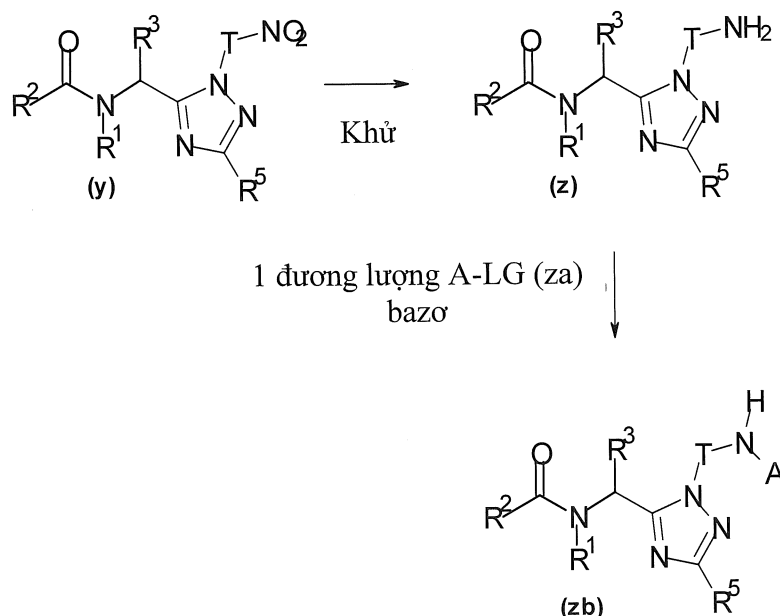
Sơ đồ 8

Hợp chất có công thức (x) chứa nhóm dimer chuyển (LG) (WO2016/001266 đối với LG = methylsulfonyl) được cho phản ứng với hydrazin hydrat để tạo ra hydrazin có công thức (j'). Ví dụ, hỗn hợp gồm nhóm dimer chuyển chứa hợp chất (x) và hydrazin hydrat trong dung môi thích hợp, như metanol hoặc etanol được cho phản ứng ở 0-80°C để thu được các hợp chất có công thức (j') hoặc hydroclorua, hydrobromua hoặc các muối metansulfonat của chúng mà sau đó có thể được tách ra và, nếu cần và mong muốn, được tinh chế bằng cách sử dụng các kỹ thuật đã được biết rõ trong lĩnh vực này.

Các hợp chất có công thức (x) là có bán trên thị trường hoặc có thể được tổng hợp bằng các phương pháp đã biết đối với người có hiểu biết trung bình.

Các hợp chất có công thức (zb) có thể được điều chế như được minh họa trên sơ đồ 9 dưới đây trong đó R¹, R², R³, và R⁵ là như được định nghĩa trên đây; hoặc R¹, R², R³ và R⁵ là các đoạn tương ứng của các hợp chất được thể hiện trong bảng 3. T là vòng pyridin hoặc pyrimidin mà được thế lần lượt bằng nhóm -NO₂-group, nhóm -NH₂-, hoặc nhóm -NH-A-. LG là nhóm dimer chuyển thích hợp và A là CO-C₁-C₆alkyl, CO-xyclopropyl, CO-(4-florophenyl).

Sơ đồ 9



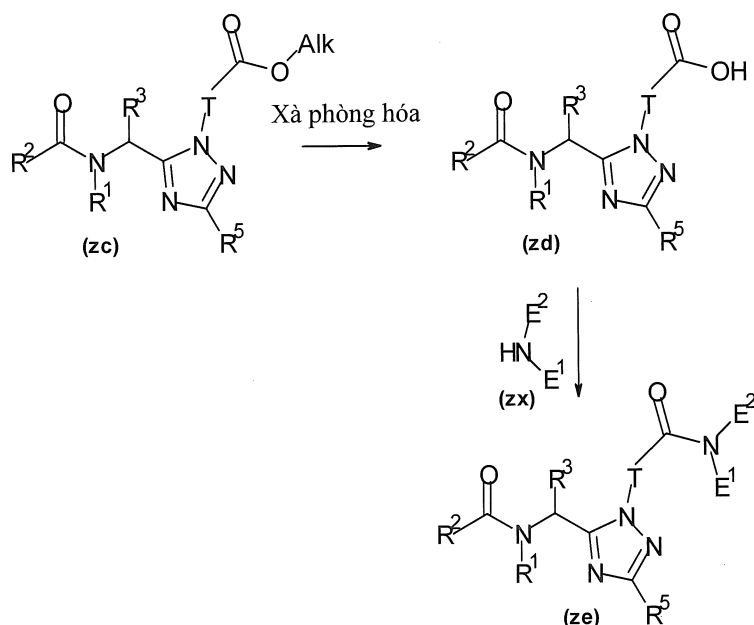
Hợp chất nitro có công thức (y) được chuyển hóa thành hợp chất amino tương ứng có công thức trong điều kiện khử, cũng như vậy với hydro và paladi trên than trong dung môi thích hợp như THF hoặc etanol (European Journal of Medicinal Chemistry, 158, 322-333; 2018), với thiếc(II) clorua và HCl trong dung môi thích hợp như etanol (WO

2018085247), với bột sắt và HCl trong dung môi thích hợp như etanol (WO 2017216293) hoặc với bột sắt trong hỗn hợp gồm axit axetic và etanol. Hợp chất amino thu được (z) cho phản ứng với chất phản ứng axyl hóa hoặc benzoyl hóa A-LG có công thức (za) khi có mặt bazơ thích hợp như DIPEA hoặc kali cacbonat. Các hợp chất có công thức (zb) thu được sau đó nếu cần và nếu muốn, được tinh chế sử dụng các kỹ thuật đã biết rõ trong lĩnh vực, như sắc ký.

Clorua của axit carboxylic có công thức (za) có sẵn thương mại hoặc có thể được tổng hợp bằng các phương pháp đã biết đối với người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực. Các hợp chất có công thức (y) cần thiết có thể thu được như được mô tả trên sơ đồ 4.

Các hợp chất có công thức (ze) có thể được điều chế như được minh họa trên sơ đồ dưới đây 10 trong đó R^1 , R^2 , R^3 , và R^5 là như được định nghĩa trên đây; hoặc R^1 , R^2 , R^3 và R^5 là các đoạn tương ứng của các hợp chất được thể hiện trong bảng 3. T là pyridin hoặc pyrimidin được thế lần lượt bằng nhóm $-\text{CO}_2\text{alkyl}$, nhóm $-\text{COOH}$ hoặc nhóm $-\text{CON}(\text{E}^1)\text{E}^2$. E^1 và E^2 độc lập được chọn từ nhóm H, $\text{C}_1\text{-C}_6\text{alkyl}$ và xyclopropyl.

Sơ đồ 10



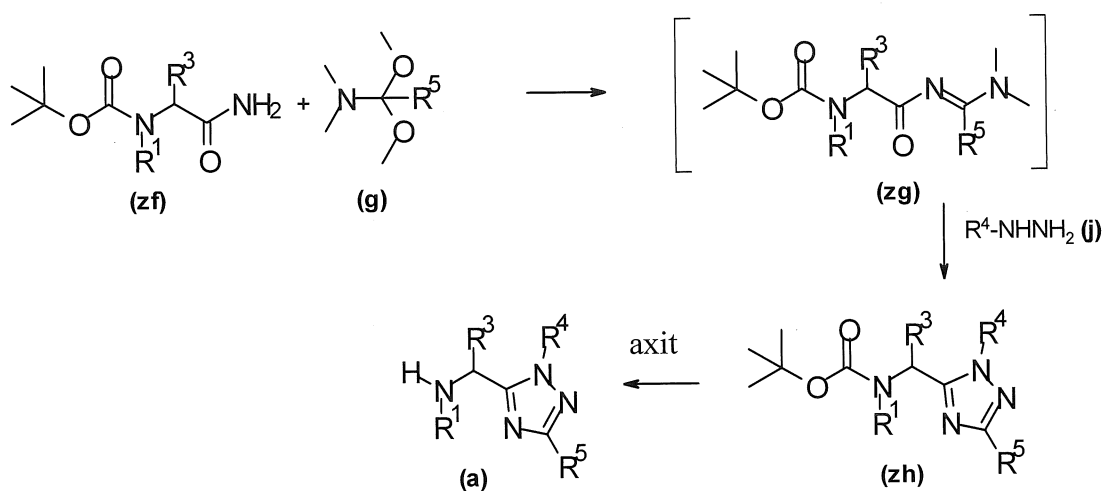
Hợp chất este có công thức (zc) được xà phòng hóa để thu được hợp chất axit carboxylic tương ứng có công thức (zd) tiếp theo là bước ghép đôi amit với các amin có công thức (zx) để thu được amit có công thức (ze) bằng các phương pháp đã biết đối với người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực.

ví dụ, hỗn hợp gồm amin có công thức (zx), axit carboxylic (zd), chất phản ứng kết hợp thích hợp, như T3P®, HATU hoặc DCC/HOBt, bazơ thích hợp như triethylamin hoặc DIPEA, trong dung môi thích hợp như ethyl axetat hoặc DMF được trộn ở các nhiệt độ trong khoảng từ 0 đến 100°C để thu được các hợp chất có công thức (ze) mà sau đó có thể được tách và, nếu cần và nếu muốn, được tinh chế sử dụng các kỹ thuật đã biết rõ trong lĩnh vực, như sắc ký.

Các amin có công thức (za) là có bán trên thị trường hoặc có thể được tổng hợp bằng các phương pháp đã biết đối với người có hiểu biết trung bình. Các hợp chất có công thức (zc) cần thiết có thể thu được như được mô tả trên sơ đồ 4.

Các hợp chất có công thức (e) may also be prepared như được minh họa trên sơ đồ dưới đây 11 trong đó R¹, R³ và R⁴ là như được định nghĩa trên đây và R⁵ là C₁-C₃alkyl; hoặc R¹, R³, R⁴ và R⁵ là các đoạn tương ứng của các hợp chất được thể hiện trong bảng 3.

Sơ đồ 11



Amin có công thức (zf) được phản ứng với *N,N*-dimetylamin dimetyl axetal có công thức (g) để tạo ra các hợp chất có công thức (zg) được cho phản ứng sau đó với hydrazin được thể có công thức (j) trong điều kiện tính axit để tạo ra các hợp chất có công thức (zh). Ví dụ, hợp chất có công thức (zf) và *N,N*-dimetylamin dimetyl axetal có công thức (g) được cho phản ứng trong dung môi thích hợp, như CH₂Cl₂ có gia nhiệt hồi lưu để thu được các hợp chất có công thức (zg). Sau khi loại bỏ dung môi, cho các hợp chất có công thức (zh) phản ứng với hydrazin được thể có công thức (j) trong dung môi thích hợp như 1,4-dioxan, axit axetic hoặc hỗn hợp các dung môi như vậy ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ khoảng

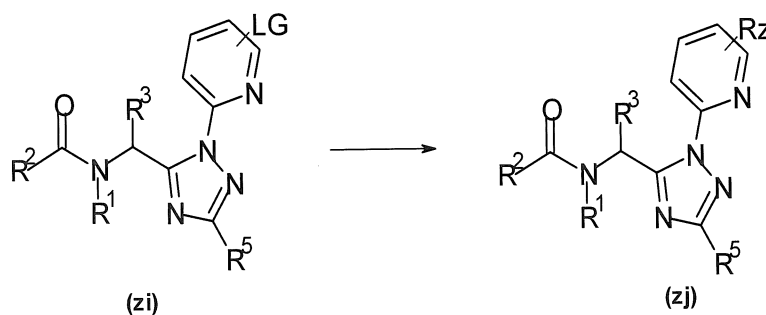
20 đến 80°C. Sau đó, các hợp chất có công thức (zi) thu được có thể được tách và, nếu cần và nếu muốn, được tinh chế theo các phương pháp đã biết rõ trong lĩnh vực kỹ thuật này, như sắc ký.

Carbamat có công thức (zh) được xử lý bằng axit để tạo ra các amin có công thức (a). Ví dụ, carbamat có công thức (zh) và axit thích hợp, như hydroclorua hoặc axit trifloaxetic, được cho phản ứng trong dung môi thích hợp, như dioxan hoặc trong trường hợp axit trifloaxetic mà không có dung môi bổ sung ở các nhiệt độ nằm trong khoảng từ quanh 0 đến 80°C. Các amin có công thức (zh) thu được sau đó có thể được tách dưới dạng các muối axit của chúng hoặc sau khi xử lý bằng bazơ dưới dạng các amin tự do và, nếu cần và mong muốn, được tinh chế bằng cách sử dụng các kỹ thuật đã được biết rõ trong lĩnh vực này, như sắc ký.

Các amit cần thiết có công thức (zf) và các hydrazin có công thức (j) có bán trên thị trường hoặc có thể được tổng hợp theo các phương pháp được mô tả trong đơn này hoặc các phương pháp đã biết đối với người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực kỹ thuật này.

Các hợp chất có công thức (zj) có thể được điều chế như được minh họa trên sơ đồ 12 dưới đây trong đó trong đó R^1 , R^2 , R^3 và R^5 là như được định nghĩa trên đây; hoặc R^1 , R^2 , R^3 , và R^5 là các đoạn tương ứng của các hợp chất được thể hiện trong bảng 3. LG là nhóm rời chuyển thích hợp như clo, brom hoặc iot, Rz là heteroaryl hoặc metylsulfonyl tùy ý được thế 5 đến 6 cạnh.

Sơ đồ 12



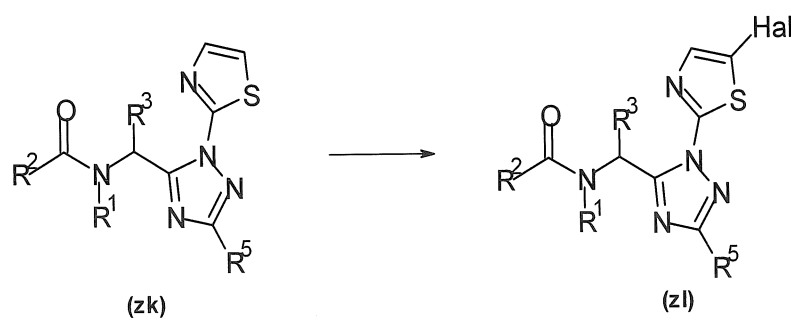
Các hợp chất có công thức (zi) cần thiết có thể thu được như được mô tả trên sơ đồ 4.

Ví dụ, LG có thể là brom mà có thể được trao đổi bằng chất ái nhân thích hợp, ví dụ, trong phản ứng được xúc tác bởi kim loại chuyển tiếp với pyrazol hoặc triazol được thế hoặc

sulfinat, theo quy trình đã biết thông thường. Ví dụ, trong trường hợp thay thế brom bằng pyrazol, xem: WO2013/062981 A1 trang 37 ví dụ 6 bước 1.

Các hợp chất có công thức (zl) có thể được điều chế như được minh họa trên sơ đồ 13 dưới đây trong đó R^1 , R^2 , R^3 và R^5 là như được định nghĩa trên đây. Hal là clo, brom hoặc iot.

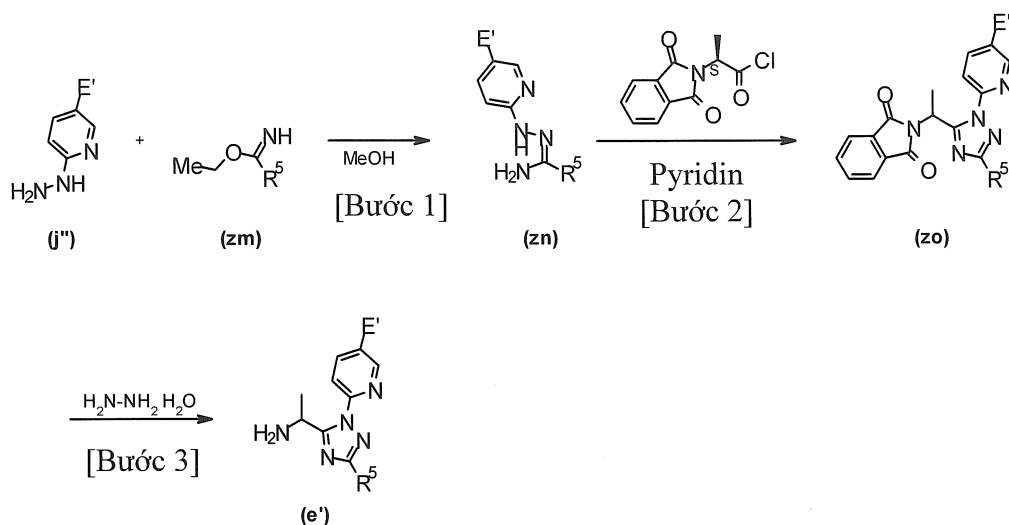
Sơ đồ 13



Các hợp chất có công thức (zk) có thể còn được tạo dẫn xuất bằng cách halogen hóa thiazol. Các phương pháp cần thiết là đã biết đối với người có hiểu biết trung bình. Ví dụ, quá trình clo hóa thu được bằng tác nhân halogen hóa như N-clo-succinimit trong dung môi thích hợp như DMF (quy trình tổng hợp của ví dụ II-15 được mô tả trong đơn này).

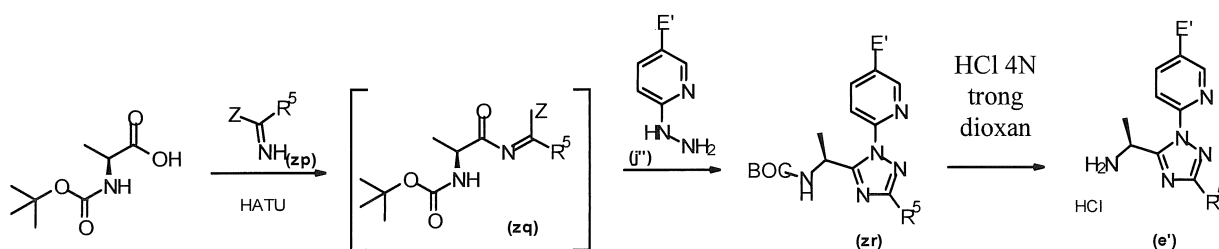
Các hợp chất có công thức (zk) có thể được điều chế như được minh họa trên các sơ đồ 1 đến 7 và 11.

Sơ đồ 14 minh họa quy trình điều chế 3-haloalkyl triazol chứa amin (e') như được sử dụng để tổng hợp hợp chất ví dụ I-9. R^5 là diflometyl và E' là CN.

Sơ đồ 14

Ở bước thứ nhất, hydrazone amit (zn) được tạo ra như được mô tả trong EP 1099695. Ở bước thứ hai, (αS)-1,3-dihydro-α-metyl-1,3-dioxo-2H-isindol-2-axetyl clorua, điều chế được từ axit (αS)-1,3-dihydro-α-metyl-1,3-dioxo-2H-isindol-2-axetic (Pht-Ala-OH được mua từ ABCR) và oxalyl clorua theo *Tetrahedron: Asymmetry*, 21(8), 936-942, 2010, phản ứng với hydrazone amit khi có mặt bazơ, như pyridin, như được mô tả trong EP 1099695 để tạo ra triazol có công thức (zo); có thể raxemic hóa một phần hoặc toàn bộ. Ở bước thứ ba, nhóm bảo vệ phtalimit được loại bỏ bằng phản ứng với hydrazin hydrat trong dung môi thích hợp, như etanol, như được mô tả trong WO 2018086605. Ở bước cuối, amin (e') thu được được phản ứng với axit carboxylic để tạo ra các hợp chất ví dụ, ví dụ I-9 như được mô tả trên sơ đồ 1.

Sơ đồ 15 minh họa quy trình điều chế alkyltriazol chứa amin (e') như được sử dụng để tổng hợp hợp chất ví dụ I-6. R^5 etyl, iso-propyl, hoặc xyclopropyl và E' là CN. Z là NH_2 hoặc OC_1-C_6alkyl .

Sơ đồ 15

N-(tert-butoxycarbonyl)-L-alanin được phản ứng với alkylamidin (đối với $Z = NH_2$) hoặc alkylimidat (đối với $Z = OC_1-C_6alkyl$) để tạo ra các hợp chất trung gian có công thức (zq)

được cho phản ứng sau đó với hydrazin được thể có công thức (j'') để tạo ra alkyltriazol có công thức (zr). Ví dụ trong trường hợp $Z = \text{NH}_2$ (compare *J. Org. Chem.* 2011, 76, 1177-1179) N-(tert-butoxycarbonyl)-L-alanin và alkylamidin có công thức (zp) được cho phản ứng khi có mặt chất phản ứng kết hợp thích hợp, như HATU, bazơ thích hợp như triethylamin hoặc DIPEA, trong dung môi thích hợp, như DMF, ở các nhiệt độ nằm trong khoảng từ 0 đến 50°C để tạo ra hợp chất trung gian axylamidin có công thức (zq). Sau khi loại dung môi, các hợp chất trung gian có công thức (zq) được cho phản ứng với hydrazin được thể có công thức (j'') trong dung môi thích hợp như axit axetic ở các nhiệt độ trong khoảng từ 20 đến 80°C. Alkyltriazol thu được có công thức (zr) sau đó có thể được tách và, nếu cần và nếu muốn, được tinh chế sử dụng các kỹ thuật đã biết rõ trong lĩnh vực, như sắc ký.

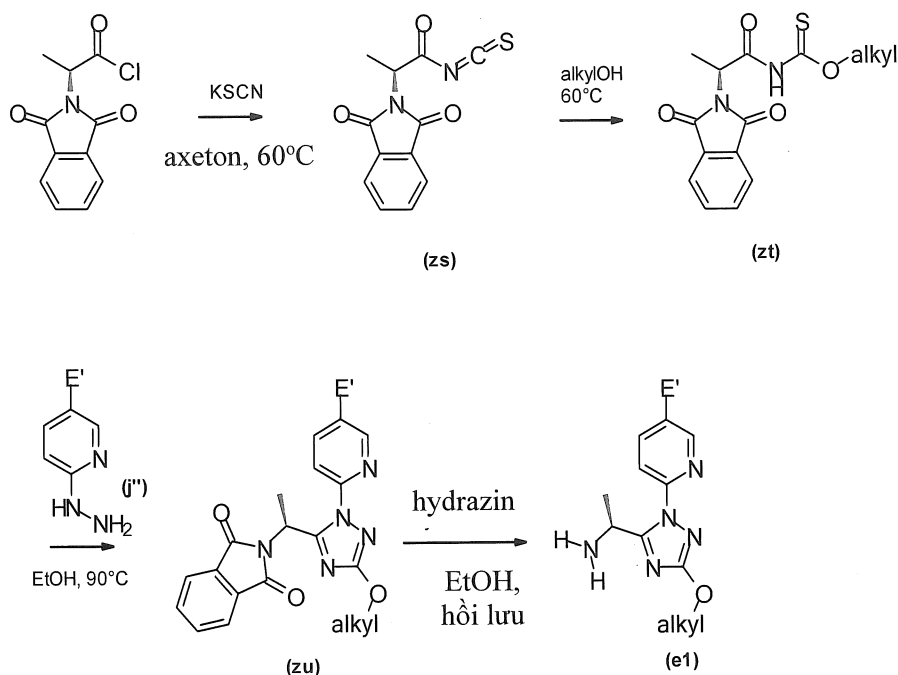
Trong trường hợp $Z = \text{OC}_1\text{-C}_6\text{alkyl}$ N-(tert-butoxycarbonyl)-L-alanin và alkylimidat có công thức (zp) hoặc muối thích hợp của chúng được cho phản ứng khi có mặt chất phản ứng kết hợp thích hợp, như HATU, bazơ thích hợp như triethylamin hoặc DIPEA, trong dung môi thích hợp, như THF ở các nhiệt độ nằm trong khoảng từ 0 đến 25°C để tạo ra các hợp chất trung gian axyl imidat có công thức (zq). Khi bổ sung hydrazin được thể có công thức (j''), hợp chất trung gian có công thức (zq) phản ứng ở các nhiệt độ nằm trong khoảng từ 20 đến 80°C để tạo ra alkyltriazol có công thức (zr) mà sau đó có thể được tách và, nếu cần và nếu muốn, được tinh chế sử dụng các kỹ thuật đã biết rõ trong lĩnh vực, như sắc ký.

Carbamat có công thức (zr) được xử lý bằng axit (ví dụ 4N HCl trong dioxan) để tạo ra amin có công thức (e') như được thể hiện trên sơ đồ 11.

Alkylamidin và alkylimidat cần thiết hoặc các muối thích hợp của chúng và hydrazin có công thức (j'') có sẵn thương mại hoặc có thể được tổng hợp bằng các phương pháp được mô tả trong đơn này hoặc phương pháp đã biết đối với người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực.

Sơ đồ 16 minh họa quy trình điều chế alkoxytriazol chứa amin (e1) như được sử dụng để tổng hợp, ví dụ, hợp chất ví dụ I-10. Alkyl là methyl, ethyl hoặc iso-propyl và E' là CN.

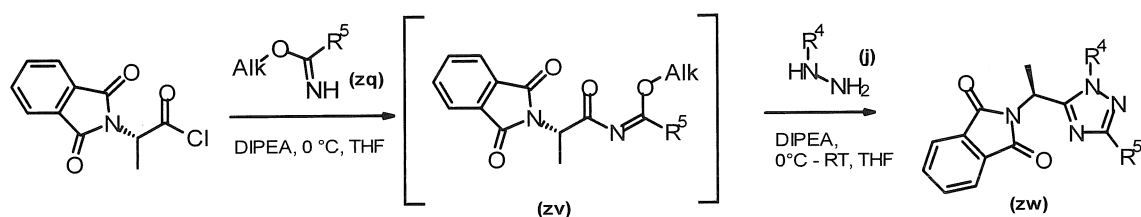
Sơ đồ 16



Quy trình tổng hợp bắt đầu bằng phản ứng của (2S)-2-(1,3-dioxo-1,3-dihydro-2H-isoindol-2-yl)propanoyl clorua với kali thioxyanat (KSCN) trong axeton để thu được hợp chất trung gian isoxyanat tương ứng (zs) mà được xử lý ở bước tiếp theo với rượu tương ứng để tạo ra O-alkyl [(2S)-2-(1,3-dioxo-1,3-dihydro-2H-isoindol-2-yl)propanoyl]carbamothioat (zt). Phản ứng giữa hợp chất trung gian (zt) và hydrazin có công thức (j'') trong etanol tạo ra các sản phẩm vòng có công thức (zu) như được mô tả trong Bioorganic & Medicinal Chemistry 26 (2018) 3321–3344. Việc khử bảo vệ nhóm amino bằng hydrazin hydrat thu được amin bậc một có công thức (e1). Ở bước cuối, amin thu được được phản ứng với axit carboxylic để tạo ra các hợp chất ví dụ, hợp chất ví dụ I-10 như được mô tả trên sơ đồ 1.

Các hợp chất có công thức (zw) có thể được điều chế như được minh họa trong sơ đồ 17 dưới đây trong đó Alk là C₁-C₆alkyl, R⁴ là 5-xyanopyridin-2-yl và R⁵ là etyl, n-propyl, iso-propyl, xyclopropyl hoặc t-butyl.

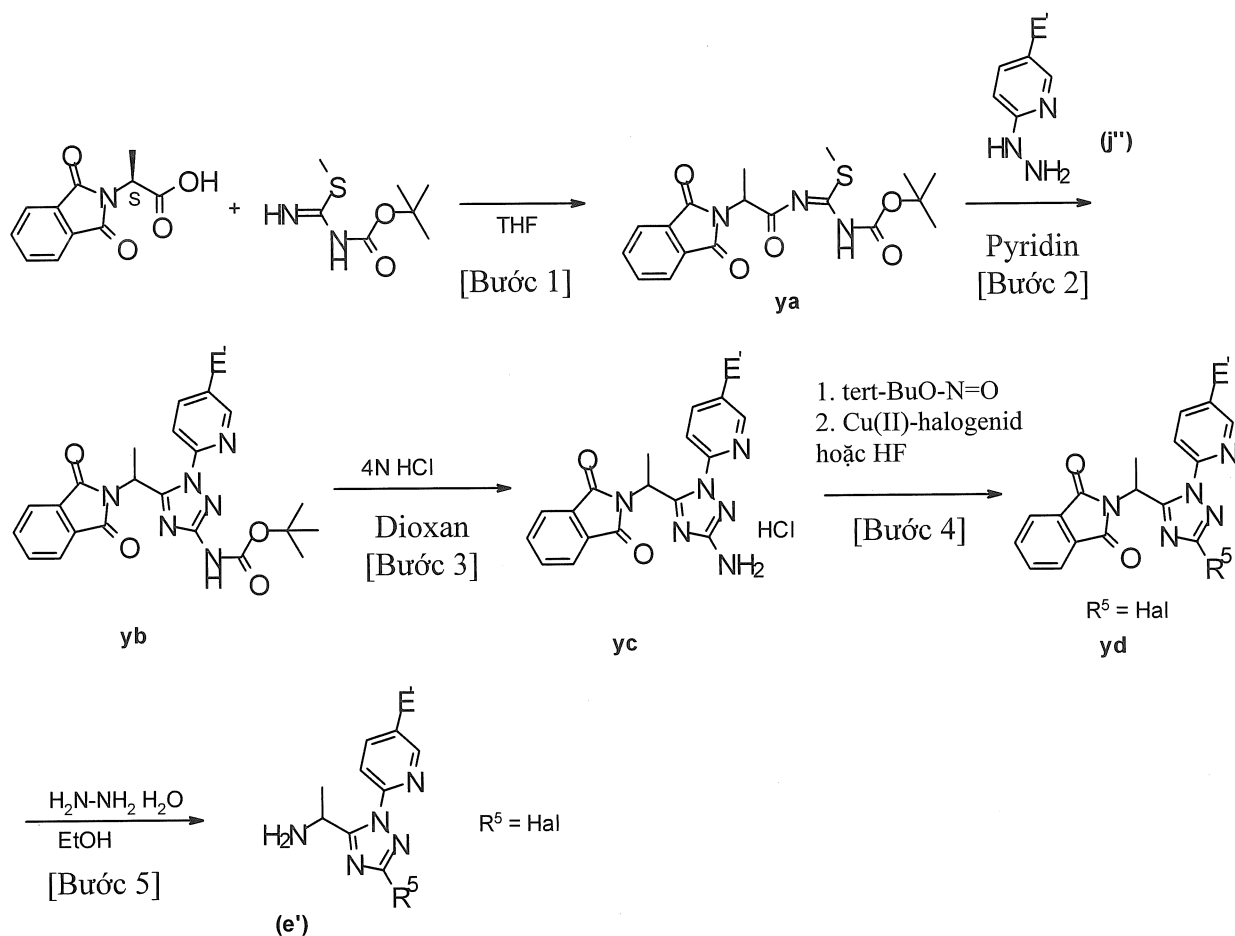
Sơ đồ 17



(α S)-1,3-dihydro- α -methyl-1,3-dioxo-2*H*-isoindol-2-axetyl clorua được phản ứng với imidat (zq) hoặc muối thích hợp của nó để tạo ra hợp chất trung gian axyl imidat có công thức (zv) mà sau đó được phản ứng với hydrazin có công thức (j) để thu được triazol có công thức (zw). Ví dụ, hỗn hợp của axit clorua và imidat có công thức (zv), được cho phản ứng trong dung môi thích hợp, như THF ở các nhiệt độ nằm trong khoảng từ -20 đến 25°C . Các hợp chất trung gian có công thức (zv) thu được sau đó được cho phản ứng với hydrazin có công thức (j) trong dung môi thích hợp, như THF ở các nhiệt độ nằm trong khoảng từ 0°C đến 80°C . Các triazol thu được có công thức (zw) sau đó nếu cần và nếu muốn, được tinh chế sử dụng các kỹ thuật đã biết rõ trong lĩnh vực, như sắc ký. Nhóm bảo vệ phthalimit có thể được loại ra sử dụng hydrazin như được mô tả trên sơ đồ 14 để thu được amin tự do tương ứng.

Axit clorua thu được có thể thu được như được mô tả trên sơ đồ 14 và imidat có công thức (zq) hoặc muối của chúng là có sẵn thương mại hoặc có thể được tổng hợp bằng các phương pháp đã biết đối với người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực.

sơ đồ 18 minh họa quy trình điều chế 3-halogen triazol chứa amin (e') như được sử dụng để tổng hợp, ví dụ, hợp chất ví dụ I-39, trong đó R^5 là halogen và E' là CN.

Sơ đồ 18

Ở bước thứ nhất, axit (αS)-1,3-dihydro- α -metyl-1,3-dioxo-2*H*-isoindol-2-axetic (Pht-Ala-OH) được mua từ ABCR) phản ứng với 1-*N*-Boc-2-metyl-isothioure (được mua từ ABCR) khi có mặt bazơ và chất phản ứng kết hợp HATU để tạo ra 1-*N*-Boc-2-metyl-isothioure được axyl hóa *N* có công thức (ya); có thể raxemic hóa một phần hoặc toàn bộ. Ở bước thứ hai, quá trình tạo vòng xuất hiện với hydrazin (**j''**) (ví dụ E' là CN) và khi có mặt bazơ, tương tự pyridin, như được mô tả trong WO 2014009425 A1 để tạo ra 1,2,4-triazol có công thức (yb), chứa nhóm NH-Boc. Sau khi khử bảo vệ *N*-Boc ở bước thứ ba trong điều kiện tính axit (ví dụ 4N HCl trong dioxan) 3-amino-1,2,4-triazol hydroclorua có công thức (yc) được tạo ra, mà có thể được xử lý ở bước thứ tư với *tert*-butyl nitrit sau đó bởi đồng halua làm các muối, tương tự CuCl_2 ($R^5 = \text{Cl}$) được mô tả bởi N. Desroy et al., *J. Med. Chem.* **2013**, 56, 1418-1430, CuBr_2 ($R^5 = \text{Br}$) được mô tả trong JP-Pat. 2010070503 A, hỗn hợp CuI/I_2 ($R^5 = \text{I}$) như được mô tả bởi K. Pchalek và M. P. Hay *J. Org. Chem.* **2006**, 71, 6530-6535, hoặc với diiodometan ($R^5 = \text{I}$) như được mô tả bởi N. R. Norcross et al. *J. Med. Chem.*, **2016**, 59(13), 6101-6120, tạo ra 1,2,4-triazol được thế 3-halogen (yd). Theo cách khác, flo ($R^5 = \text{F}$) có thể được đưa vào ví dụ sử dụng HF thay cho đồng

halua như được mô tả ví dụ bởi V. Krchnak and Z. Arnold *Coll. Czech. Chem. Commun.*, 1975, 40(5), 1390-1395. Ở bước thứ năm, nhóm bảo vệ phtalimit được loại ra bởi phản ứng với hydrazin hydrat trong dung môi thích hợp, tương tự etanol, như được mô tả trong WO 2018086605. Ở bước cuối, amin thu được (e') được cho phản ứng với axit carboxylic để tạo ra ví dụ, các hợp chất ví dụ I-39 hoặc I-48 như được mô tả trên sơ đồ 1.

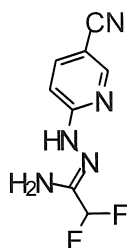
Ví dụ thực hiện sáng chế

Các ví dụ điều chế

Tổng hợp 3-clo-N-{1-[1-(6-xyano-3-pyridinyl)-3-(diflometyl)-1*H*-1,2,4-triazol-5-yl]etyl}-5-(triflometyl)benzamid (hợp chất ví dụ I-9)

Bước 1

Axit 2-[6-xyano-3-pyridinyl]hydrazit-2,2-diflo-etanimidic

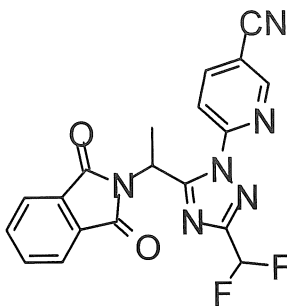


To 2,33 g (17,4mmol) 5-hydrazinyl-2-pyridincacbonitril trong metanol (30mL) 3,15 g (24,3mmol) etyl 2,2-difloetancarboximidat (được mua từ Enamin Building Blocks) được bổ sung vào, và hỗn hợp phản ứng được khuấy ở nhiệt độ trong phòng qua đêm. Dung môi được làm bay hơi và cặn sau đó được khuấy với n-hexan (30mL) và etyl axetat (3mL). Kết tủa màu hơi nâu được tách ra và được làm khô để thu được 3,38 g (độ tinh khiết: 90,4%; hiệu suất: 83,0%) axit 2-[6-xyano-3-pyridinyl]hydrazit-2,2-diflo-etanimidic.

Khối lượng ESI [m/z]: 211,1 [M+H]⁺

Bước 2

2-[1-[3-(diflometyl)-1-(6-xyano-3-pyridinyl)-1*H*-1,2,4-triazol-5-yl]etyl]-1*H*-isoindol-1,3(2*H*)-dion

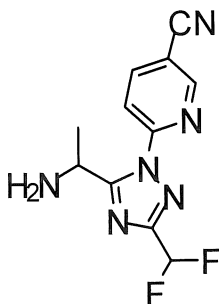


3,28 g (14,0mmol) axit 2-[6-xyano-3-pyridinyl]hydrazit-2,2-diflo-etanimidic trong pyridin (20mL), 3,32 g (14,0mmol) (α S)-1,3-dihydro- α -metyl-1,3-dioxo-2*H*-isoindol-2-axetyl clorua (xem quy trình điều chế từ axit (α S)-1,3-dihydro- α -metyl-1,3-dioxo-2*H*-isoindol-2-axetic (Pht-Ala-OH được mua từ ABCR) và oxalyl clorua: D. A. Gruzdev *et al.*, Tetrahedron: Asymmetry, 21(8), 936-942, 2010) được bổ sung vào, và hỗn hợp phản ứng được khuấy ở nhiệt độ trong phòng qua đêm. Sau đó, nước (200mL) được bổ sung vào và hỗn hợp này được chiết bằng diclometan (200mL). Pha hữu cơ được chiết hai lần bằng dung dịch nước NaHCO₃ bão hoà (100mL), được làm khô trên Na₂SO₄, và được làm bay hơi trong điều kiện áp suất thấp. Cặn rắn còn lại được chạy sắc ký với gradien xyclohexan/axeton trên silicagel để thu được 1,09 g (độ tinh khiết: 95,7%; hiệu suất: 18,8%) hợp chất raxemic nêu ở đề mục ở dạng chất rắn không màu.

Khối lượng ESI [m/z]: 395,2 [M+H]⁺

Bước 3

6-[5-(1-aminoetyl)-3-(diflometyl)-1,2,4-triazol-1-yl]pyridin-3-carbonitril (INT-4)



đến 1,0 g (2,5mmol) 2-[1-[3-(diflometyl)-1-(6-xyano-3-pyridinyl)-1*H*-1,2,4-triazol-5-yl]etyl]-1*H*-isoindol-1,3(2*H*)-dion trong etanol (20mL), 577 mg (6,34mmol) hydrazin-hydrat được bổ sung vào, và hỗn hợp phản ứng được gia nhiệt trong điều kiện hồi lưu. Sau 30 phút, kết tủa không màu được tạo ra. Hỗn hợp phản ứng này được khuấy và được

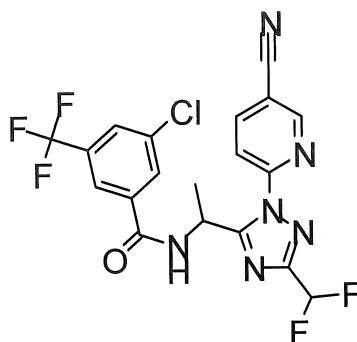
làm nóng trong điều kiện hồi lưu một giờ nữa, axeton (15mL) được bổ sung vào và việc làm nóng được tiếp tục trong 30 phút nữa. Hỗn hợp phản ứng này được cô và cặn rắn được xử lý bằng etanol. Sau khi lọc, phần lọc được hoá hơi trong điều kiện áp suất thấp để tạo ra 663 mg 6-[5-(1-aminoethyl)-3-(diflometyl)-1,2,4-triazol-1-yl]pyridin-3-carbonitril (IT-4), mà được sử dụng ở bước 4 không cần tinh chế.

Khối lượng ESI [m/z]: 265,2 [M+H]⁺

Danh sách đỉnh ¹H-NMR xem bảng 2 (INT-4).

Bước 4

3-clo-*N*-{1-[1-(6-xyano-3-pyridinyl)-3-(diflometyl)-1*H*-1,2,4-triazol-5-yl]etyl}-5-(triflometyl)benzamit



222 mg (0,84mmol) 6-[5-(1-aminoethyl)-3-(diflometyl)-1,2,4-triazol-1-yl]pyridin-3-carbonitril (INT-4), 194 mg axit (0,84mmol) 3-clo-5-(triflometyl)-benzoic, 141 mg (1,09mmol) *N,N*-diisopropyletylamin (Bazơ Hünig) trong *N,N*-dimetylformamit (DMF) (5mL), 383 mg (1,00mmol) [*O*-(7-azabenzotriazol-1-yl)-*N,N,N',N'*-tetrametyluroni-hexafloro-phosphat] (HATU) được bổ sung vào, và hỗn hợp phản ứng được khuấy ở nhiệt độ trong phòng qua đêm. Hỗn hợp phản ứng được cô trong điều kiện áp suất thấp và phần cặn rắn được xử lý bằng diclometan và sau đó được chiết bằng dung dịch nước NaHCO₃ bão hoà và nước. Pha hữu cơ được tách ra, được làm khô trên Na₂SO₄ và dung môi được làm bay hơi trong điều kiện áp suất thấp. Phần cặn rắn còn lại được sắc ký bằng gradien xyclohexan/axeton trên silicagel tiếp đó là dispergation with dietyl ete và lọc để thu được 259 mg (độ tinh khiết: 100%; hiệu suất: 65,4%) hợp chất raxemic nêu ở đề mục.

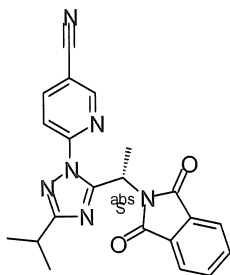
Khối lượng ESI [m/z]: 471,1 [M+H]⁺

¹H-Danh sách đỉnh NMR xem bảng 1.

Tổng hợp 6-{5-[(1S)-1-aminoethyl]-3-isopropyl-1H-1,2,4-triazol-1-yl}nicotinonitril (INT-2)

Bước 1

6-{5-[(1S)-1-(1,3-dioxo-1,3-dihydro-2H-isoindol-2-yl)ethyl]-3-isopropyl-1H-1,2,4-triazol-1-yl}nicotinonitril



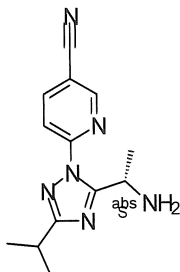
Dung dịch chứa 5,00 g (độ tinh khiết 95%, 21,6mmol) axit (2S)-2-(1,3-dioxo-1,3-dihydro-2H-isoindol-2-yl)propanoic và 0,08mL (1mmol) DMF trong 30mL CH₂Cl₂ tuyệt đối được xử lý bằng 3,78mL (43,3mmol) oxalyl clorua ở 0°C. Hỗn hợp phản ứng được khuấy trong 2 d ở nhiệt độ môi trường. Tất cả các chất dễ bay hơi được loại ra trong điều kiện áp suất thấp và phần lỏng còn lại được sử dụng ở bước tiếp theo mà không cần tinh chế thêm.

Dung dịch chứa 3,13 g (độ tinh khiết 95%, 21,6mmol) metyl 2-metylpropanimidat hydroclorua (1:1) trong 40mL THF tuyệt đối được bổ sung vào ở 0°C 15,1mL (86,4mmol) DIPEA tuyệt đối. Axit clorua được điều chế ở bước thứ nhất được hoà tan trong 20mL THF tuyệt đối và được bổ sung từng giọt trong 25 phút vào dung dịch imidat. Sau 30 phút khuấy ở 0°C 3,19 g (23,7mmol) 6-hydrazinonicotinonitril và 10mL THF tuyệt đối được bổ sung vào. Hỗn hợp phản ứng được khuấy trong 30 phút ở 0°C và qua đêm ở nhiệt độ môi trường. Tất cả các chất dễ bay hơi được loại bỏ dưới áp suất giảm. Phần lỏng còn lại được bổ sung vào 200mL nước và hỗn hợp được chiết bằng 200mL EtOAc. độ phas được tách và pha nước được chiết một vài lần bằng EtOAc. Các pha hữu cơ gom lại được rửa bằng nước muối và được làm khô trên Na₂SO₄. Dung môi được loại bỏ trong điều kiện áp suất thấp và phần lỏng còn lại được tinh chế bằng sắc ký trên silic oxit (xyclohexan / etyl axetat) để tạo ra 5,57 g 6-{5-[(1S)-1-(1,3-dioxo-1,3-dihydro-2H-isoindol-2-yl)ethyl]-3-isopropyl-1H-1,2,4-triazol-1-yl}nicotinonitril.

Khối lượng ESI [m/z]: 387,5 [M+H]⁺

Bước 2

6-{5-[(1S)-1-aminoethyl]-3-isopropyl-1H-1,2,4-triazol-1-yl}nicotinonitril (**INT-2**)



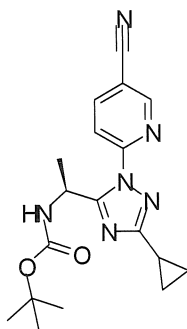
Dung dịch chứa 2,00 g (5,17mmol) 6-{5-[(1S)-1-(1,3-dioxo-1,3-dihydro-2H-isoindol-2-yl)ethyl]-3-isopropyl-1H-1,2,4-triazol-1-yl}nicotinonitril và 0,38mL hydrazin hydrat trong 40mL etanol được gia nhiệt trong 2 h ở 80°C. Huyền phù thu được được khuấy qua đêm ở nhiệt độ môi trường và sau đó được làm lạnh đến 10°C. Hỗn hợp được lọc và phần lắng cặn được rửa bằng nước đá-etanol lạnh. Phần lọc được cô trong điều kiện áp suất thấp để thu được 1,57 g (độ tinh khiết 70%) 6-{5-[(1S)-1-aminoethyl]-3-isopropyl-1H-1,2,4-triazol-1-yl}nicotinonitril.

Khối lượng ESI [m/z]: 257,2 [M+H]⁺

Tổng hợp 3-clo-N-{(1S)-1-[1-(5-xyanopyridin-2-yl)-3-xyclopropyl-1H-1,2,4-triazol-5-yl]etyl}-5-(triflometyl)benzamid (hợp chất ví dụ I-6)

Bước 1

tert-butyl {(1S)-1-[1-(5-xyanopyridin-2-yl)-3-xyclopropyl-1H-1,2,4-triazol-5-yl]etyl}carbamate



Dung dịch chứa 2,0 g (10,5mmol) N-(tert-butoxycarbonyl)-L-alanin trong N,N-dimethylformamit (37,5mL) được bổ sung 1,91 g (15,9 mmol) xyclopropylamidin tiếp đó là 4,42 g (11,63mmol) HATU và 5,52mL (31,7mmol) N,N-diisopropyletylamin và hỗn hợp phản ứng được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 3 h. Sau đó 6,05mL (105,7mmol) axit axetic và 2,13 g (15,8mmol) 6-hydrazinonicotinonitril được bổ sung vào và hỗn hợp phản ứng được khuấy 5 h ở 80°C và sau đó ở nhiệt độ trong phòng qua đêm. Hỗn hợp phản ứng được làm nguội đến nhiệt độ trong phòng, dung dịch nước bão hòa Na₂CO₃ được bổ sung và sau đó hỗn hợp được chiết bằng EtOAc. Các lớp hữu cơ gom lại được rửa bằng nước, dung dịch nước chứa 5% NaH₂PO₄, nước muối và Cuối cùng được làm khô trên Na₂SO₄. Sau khi lọc và làm bay hơi dung môi trong chân không, hợp chất thô được tinh chế bằng HPLC điều chế (nước/axetonitril). Các phân đoạn sản phẩm gom lại được làm bay hơi để thu được hợp chất nêu ở đề mục (0,77 g, 21%).

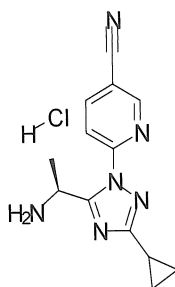
Khối lượng ESI [m/z]: 355,3 [M+H]⁺

Danh sách đỉnh ¹H-NMR (400,2 MHz, CD₃CN):

δ= 8,8116 (6,3); 8,8100 (6,6); 8,8062 (6,7); 8,8046 (5,9); 8,2628 (4,8); 8,2573 (4,6); 8,2412 (5,5); 8,2357 (5,4); 7,9980 (7,0); 7,9964 (6,6); 7,9764 (5,9); 7,9747 (5,6); 5,8766 (0,8); 5,7388 (0,5); 5,7213 (1,4); 5,7031 (1,9); 5,6849 (1,3); 5,6682 (0,4); 2,1614 (41,0); 2,0585 (1,0); 2,0462 (2,0); 2,0378 (2,2); 2,0344 (1,4); 2,0255 (3,5); 2,0194 (1,3); 2,0132 (2,1); 2,0049 (2,2); 1,9926 (1,1); 1,9648 (4,6); 1,9528 (18,4); 1,9467 (34,9); 1,9405 (49,0); 1,9343 (33,6); 1,9281 (17,1); 1,4498 (14,5); 1,4328 (14,5); 1,3608 (16,0); 1,2685 (1,1); 1,2388 (0,7); 1,1974 (0,7); 1,0334 (0,4); 1,0281 (0,4); 1,0173 (1,7); 1,0106 (5,0); 1,0083 (4,1); 1,0049 (6,3); 0,9990 (1,5); 0,9901 (6,0); 0,9848 (6,4); 0,9754 (1,5); 0,9669 (2,7); 0,9546 (1,2); 0,9464 (3,2); 0,9446 (3,1); 0,9403 (2,8); 0,9385 (2,8); 0,9342 (3,2); 0,9324 (3,0); 0,9274 (4,6); 0,9204 (2,9); 0,9154 (3,3); 0,9084 (2,6); 0,9047 (1,3); 0,9014 (1,4); 0,8974 (1,0); 0,8927 (0,8); 0,8872 (0,7); 0,8837 (0,6); 0,1459 (0,8); 0,0080 (6,7); -0,0002 (166,9); -0,0086 (6,2); -0,0171 (0,6); -0,1495 (0,8)

Bước 2

6-{5-[(1S)-1-aminoetyl]-3-xyclopropyl-1H-1,2,4-triazol-1-yl}nicotinonitril hydroclorua (1:1) (INT-3)

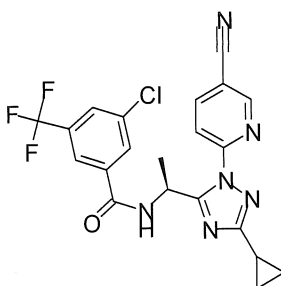


Dung dịch chứa 830 mg (2,34mmol) tert-butyl {(1S)-1-[1-(5-xyanopyridin-2-yl)-3-xyclopropyl-1H-1,2,4-triazol-5-yl]etyl}carbamate trong dioxan (22mL) được xử lý bằng HCl 4N trong dioxan (10,9mL). Hỗn hợp phản ứng được khuấy ở nhiệt độ trong phòng qua đêm. Kết tủa thu được được tách ra bằng cách lọc và được làm khô trong không khí để thu được hợp chất nêu ở đề mục (0,71, 100%).

Khối lượng ESI [m/z]: 255,1 [M+H-HCl]⁺

Bước 3

3-clo-N-{(1S)-1-[1-(5-xyanopyridin-2-yl)-3-xyclopropyl-1H-1,2,4-triazol-5-yl]etyl}-5-(triflo-metyl)benzamidit



Dung dịch chứa 100 mg (0,34mmol) 6-{5-[(1S)-1-aminoetyl]-3-xyclopropyl-1H-1,2,4-triazol-1-yl}nicotinonitril hydroclorua (1:1) trong diclometan khan (4,65mL) được bổ sung 0,01mL (0,48mmol) N,N-diisopropyletylamin tiếp đó là dung dịch chứa 0,06mL (0,37mmol) 3-clo-5-(triflometyl)benzoyl clorua trong 1,5mL diclometan khan. Khuấy hỗn hợp ở nhiệt độ trong phòng qua đêm. Hỗn hợp phản ứng được làm nguội bằng dung dịch nước chứa 5% NaH₂PO₄ và sau đó được chiết bằng diclometan. Pha hữu cơ được làm khô qua Na₂SO₄, được lọc và sau khi làm bay hơi dung môi trong chân không hợp chất thô được tinh chế bằng HPLC điều chế (nước/axetonitril, 0,1% axit formic). Các phân đoạn sản phẩm gom lại được làm bay hơi để thu được hợp chất nêu ở đề mục (115 mg, 73%).

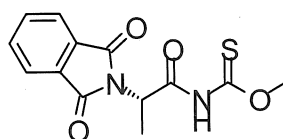
Khối lượng ESI [m/z]: 461,2 [M+H]⁺

Danh sách đỉnh ¹HNMR xem bảng 1.

Tổng hợp 3-clo-N-[(1S)-1-[1-(5-xyanopyridin-2-yl)-3-metoxy-1H-1,2,4-triazol-5-yl]etyl]-5-(triflometyl)benzamid (hợp chất ví dụ I-10)

Bước 1:

O-metyl [(2S)-2-(1,3-dioxo-1,3-dihydro-2H-isoindol-2-yl)propanoyl]carbamothioat

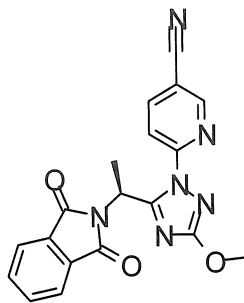


Dung dịch chứa 1,0 g (4,6mmol) (2S)-2-(1,3-dioxo-1,3-dihydro-2H-isoindol-2-yl) axit propanoic trong toluen (15mL) được bổ sung 0,80mL (9,12mmol) oxalyl clorua và một giọt N,N-dimetylformamit. Hỗn hợp phản ứng được khuấy 3 h ở nhiệt độ trong phòng và sau đó hexan (15mL) được bổ sung và khuấy liên tục qua đêm. Sau thời gian này, bổ sung oxalyl clorua (0,5mL) được bổ sung lại và hỗn hợp phản ứng được khuấy 3 h và cuối cùng được hoá hơi. Phần cặn thô được hoà tan trong axeton (15mL) và sau đó 0,44 g (4,56mmol) KSCN được bổ sung vào như dung dịch trong axeton (5mL) và hỗn hợp được khuấy ở 60°C trong 2 h. Sau đó 0,46mL (11,4mmol) metanol được bổ sung vào và hỗn hợp được khuấy ở 60°C qua đêm, được làm nguội đến nhiệt độ trong phòng và được làm bay hơi trong điều kiện áp suất thấp. Phần cặn thu được được hoà tan trong EtOAc, được rửa bằng nước và nước muối một cách tương ứng và cuối cùng lớp hữu cơ được làm khô qua Na₂SO₄ khan và sau đó được cô trong điều kiện áp suất thấp. Sản phẩm thô được tinh chế bằng silicagel sắc ký để thu được hợp chất nêu ở đề mục (0,82 g, 59%).

Khối lượng ESI [m/z]: 293,1 [M+H]⁺

Bước 2:

6-{5-[(1S)-1-(1,3-dioxo-1,3-dihydro-2H-isoindol-2-yl)etyl]-3-metoxy-1H-1,2,4-triazol-1-yl}nicotinonitril

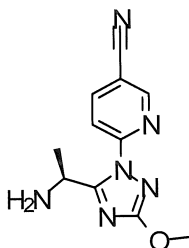


Dung dịch chứa 1,5 g (5,1mmol) O-metyl [(2S)-2-(1,3-dioxo-1,3-dihydro-2H-isoindol-2-yl)propanoyl]carbamoat trong ethanol (30mL) được bổ sung vào 0,69 g (5,1mmol) 6-hydrazinonicotinonitril và hỗn hợp phản ứng được khuấy ở 90°C qua đêm. Hỗn hợp được làm nguội đến nhiệt độ trong phòng, được làm bay hơi trong điều kiện áp suất thấp và phần cặn thu được được hoà tan trong EtOAc, được rửa lần lượt bằng nước và nước muối. Lóp hữu cơ được làm khô qua Na₂SO₄ khan và sau đó được cô trong điều kiện áp suất thấp. Sản phẩm thô được tinh chế bằng silicagel sắc ký để thu được hợp chất nêu ở đề mục (1,23 g, 58%).

Khối lượng ESI [m/z]: 375,1 [M+H]⁺

Bước 3:

6-{5-[(1S)-1-aminoethyl]-3-metoxi-1H-1,2,4-triazol-1-yl}nicotinonitril (**INT-5**)

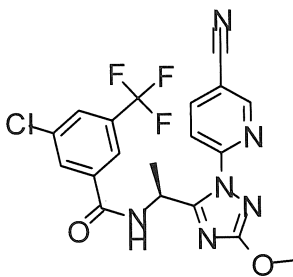


Dung dịch chứa 1,20 g (3,20mmol) 6-{5-[(1S)-1-(1,3-dioxo-1,3-dihydro-2H-isoindol-2-yl)etyl]-3-metoxi-1H-1,2,4-triazol-1-yl}nicotinonitril trong ethanol (30mL) được bổ sung vào 0,39mL (8,01mmol) hydrazin hydrat và phản ứng được gia nhiệt đến hồi lưu qua đêm. Sau khi làm lạnh hỗn hợp đến nhiệt độ trong phòng, axeton (10mL) được bổ sung và nó được gia nhiệt lại đến hồi lưu trong 3 h. Kết tủa thu được được lọc và phần lọc được làm bay hơi trong điều kiện áp suất thấp để thu được phần cặn mà được sử dụng trong bước tiếp theo mà không cần tinh chế thêm (1,05 g, độ tinh khiết 44%, hiệu suất 59%).

Khối lượng ESI [m/z]: 245,1 [M+H]⁺

Bước 4:

3-clo-N-{(1S)-1-[1-(5-xyanopyridin-2-yl)-3-metoxi-1H-1,2,4-triazol-5-yl]etyl}-5-(triflometyl)benzamidit



Dung dịch chứa 200 mg (0,82mmol) 6-{5-[(1S)-1-aminoetyl]-3-metoxi-1H-1,2,4-triazol-1-yl}nicotinonitril trong diclometan (4,5mL) được bổ sung vào 0,74mL (1,15mmol) N,N-diisopropyletylamin tiếp đó là dung dịch chứa 0,15mL (0,90mmol) 3-clo-5-(triflometyl)benzoyl clorua trong 1,5mL diclometan. Hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ trong phòng qua đêm. Hỗn hợp phản ứng được làm nguội bằng dung dịch nước 5% NaH₂PO₄ và sau đó được chiết bằng diclometan. Pha hữu cơ được làm khô qua Na₂SO₄, được lọc, và được làm bay hơi trong điều kiện áp suất thấp. Nguyên liệu thô được tinh chế bằng HPLC điều chế (nước/axetonitril, 0,1% axit formic). Các phân đoạn sản phẩm gom lại được làm bay hơi và phần lỏng còn lại được tinh chế, sau đó bằng cách sắc ký silicagel để thu được hợp chất nêu ở đề mục (75 mg, 20%).

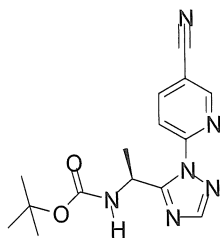
Khối lượng ESI [m/z]: 451,2 [M+H]⁺

Danh sách đỉnh ¹HNMR xem bảng 1.

Tổng hợp 6-{5-[(1S)-1-aminoetyl]-1H-1,2,4-triazol-1-yl}nicotinonitril hydroclorua

Bước 1:

tert-butyl {(1S)-1-[1-(5-xyanopyridin-2-yl)-1H-1,2,4-triazol-5-yl]etyl}carbamit



Dung dịch chứa 2,00 g (10,6mmol) N²-(tert-butoxycarbonyl)-L-alaninamid trong 40mL CH₂Cl₂ được bổ sung 2,1mL (16mmol) N,N-dimetylformamid dimetylxetal. Dung dịch này được gia nhiệt ở nhiệt độ hồi lưu trong 2 giờ sau đó, dung môi được loại bỏ dưới áp suất giảm. Cặn được hòa tan trong hỗn hợp gồm 20mL 1,4-dioxan và 20mL axit axetic bằng 1,7 g (13mmol) 6-hydrazinonicotinonitril được bổ sung vào và hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ 50°C trong 60 phút. Các dung môi được loại bỏ dưới áp suất giảm, dung dịch nước NaHCO₃ bão hòa được bổ sung vào và hỗn hợp được chiết lặp lại bằng etyl axetat. Các lớp hữu cơ gộp lại được rửa bằng nước muối, được làm khô bằng Na₂SO₄ và dung môi được loại bỏ dưới áp suất giảm. Cặn được tinh chế bằng sắc ký pha đảo (H₂O / axetonitril) để thu được 3,0 g tert-butyl {(1S)-1-[1-(5-xyanopyridin-2-yl)-1H-1,2,4-triazol-5-yl]etyl}carbamate.

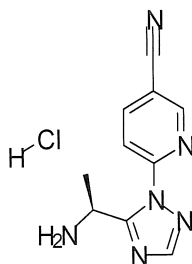
$$[\alpha]_D^{20} = +89 \text{ (c = 1,0; ethanol)}$$

¹H NMR (DMSO-d₆, 400 MHz): 9,10 (s, 1 H), 8,57 (dd, 1 H), 8,21 (s, 1H), 8,05 (d, 1H), 7,52 (d, 1H), 5,63 (m, 1 H), 1,43 (d, 3 H), 1,31 (s, 9 H).

Khối lượng ESI [m/z]: 259,2 [M-C₄H₈+H]⁺

Bước 2:

6-{5-[(1S)-1-aminoetyl]-1H-1,2,4-triazol-1-yl}nicotinonitril hydroclorua



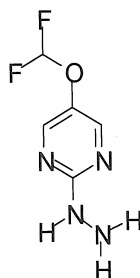
Dung dịch chứa 2,9 g (9,2mmol) tert-butyl {(1S)-1-[1-(5-xyanopyridin-2-yl)-1H-1,2,4-triazol-5-yl]etyl}carbamate trong 40mL 1,4-dioxan được bổ sung 23mL dung dịch HCl 4

M trong 1,4-dioxan. Hỗn hợp này được khuấy trong 4 giờ ở 50°C và qua đêm ở nhiệt độ trong phòng. Dung môi được loại bỏ dưới áp suất giảm để thu được 2,81 g cặn chứa 6-{5-[(1S)-1-aminoethyl]-1H-1,2,4-triazol-1-yl}nicotinonitril hydroclorua. Cặn này được sử dụng mà không cần tinh chế thêm.

^1H NMR (DMSO- d_6 , 400 MHz): 9,11 (d, 1H), 8,80 (*br* d, 3H), 8,61 (dd, 1H), 8,45 (s, 1H), 8,13 (d, 1H), 5,39 (m, 1H), 1,63 (d, 3H).

Khối lượng ESI [m/z]: 215,2 [M+H-HCl] $^+$

Tổng hợp 5-(diflometoxy)-2-hydrazinopyrimidin



Dung dịch chứa 500 mg (2,60mmol) 5-(diflometoxy)-2-(metylsulfanyl)pyrimidin trong 2mL etanol được xử lý bằng 0,52mL (11mmol) hydrazin hydrat. Hỗn hợp được làm nóng đến hồi lưu qua đêm. Sau đó, hỗn hợp phản ứng này được làm lạnh xuống nhiệt độ 5°C khi đó kết tủa màu trắng được tạo ra. Huyền phù được lọc và kết tủa được rửa bằng etanol. Cặn được làm khô dưới áp suất giảm để thu được 125 mg 5-(diflometoxy)-2-hydrazinopyrimidin.

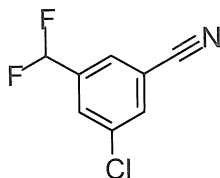
^1H NMR (DMSO- d_6 , 400 MHz): 8,35 (s, 1 H), 8,28 (s, 2 H), 7,06 (t, J = 74 Hz, 1 H), 4,17 (*br* s, 2 H).

Khối lượng ESI [m/z]: 177,2 [M+H] $^+$

Tổng hợp axit 3-clo-5-(diflometyl)benzoic (INT-10)

Bước 1:

3-clo-5-(diflometyl)benzonitril

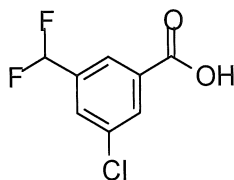


Dung dịch chứa 5,00 g (30,1mmol) 3-clo-5-formylbenzonitril in 150mL CH₂Cl₂ được xử lý bằng 5,84 g (36,2mmol) diethylaminosulfua triflorua (DAST) và được khuấy trong 2 h ở nhiệt độ trong phòng. Phản ứng được dừng bằng cách bổ sung cẩn thận dung dịch NaHCO₃ bão hòa và hỗn hợp được chiết lặp lại bằng CH₂Cl₂. Lớp hữu cơ gom lại được rửa bằng nước muối và được làm khô bằng Na₂SO₄. Dung môi được loại bỏ trong điều kiện áp suất thấp để tạo ra 5,31 g 3-clo-5-(diflometyl)benzonitril mà được sử dụng tiếp mà không cần tinh chế thêm.

Khối lượng EI [m/z]: 187 [M]⁺

Bước 2:

Axit 3-clo-5-(diflometyl)benzoic (INT-10)



Dung dịch chứa 300 mg (1,59mmol) 3-clo-5-(diflometyl)benzonitril trong hỗn hợp gồm 6,5mL THF và 3,5mL metanol được xử lý bằng 1,92 g (23,9mmol) 50% dung dịch nước natri hydroxit. Hỗn hợp được gia nhiệt tới hồi lưu và được khuấy trong 45 phút ở nhiệt độ đó. Sau đó, tất cả các chất dễ bay hơi được loại bỏ trong điều kiện áp suất thấp. Nước được bổ sung và độ pH được điều chỉnh đến độ pH = 1 sử dụng axit clohydric đậm đặc. Hỗn hợp được chiết lặp lại bằng EtOAc. Các lớp hữu cơ gom lại được rửa bằng nước muối, được làm khô bằng Na₂SO₄ và dung môi được loại bỏ trong điều kiện áp suất thấp để tạo ra 278 mg axit 3-clo-5-(diflometyl)benzoic mà được sử dụng tiếp mà không cần tinh chế thêm trong quy trình tổng hợp của hợp chất ví dụ II-12.

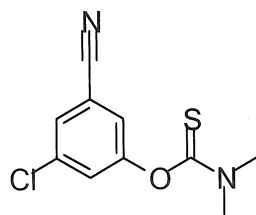
¹H NMR (DMSO-d₆, 400 MHz): 13,65 (brs, 1 H), 8,06 (s, 2 H), 7,93 (s, 1 H), 7,14 (t, *J* = 55 Hz, 1 H).

Khối lượng ESI [m/z]: 207,1 [M+H]⁺

Tổng hợp axit 3-clo-5-(diflometyl)benzoic (INT-09)

Bước 1:

O-(3-clo-5-xyanophenyl) dimethylcarbamothioat

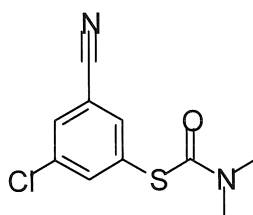


38,9mL (279mmol) triethylamin, 1,14 g (9,3mmol) N,N-dimethylpyridin-4-amin (DMAP) và 13,8 g (112mmol) dimethylcarbamothioyl clorua được bổ sung lần lượt vào huyền phù đã được khuấy mạnh chứa 14,3 g (93mmol) 3-clo-5-hydroxybenzonitril trong 450mL EtOAc khan. Hỗn hợp phản ứng được đặt đến nhiệt độ 55-60°C và được khuấy ở nhiệt độ này trong 24 h. Sau khi làm lạnh xuống nhiệt độ trong phòng, hỗn hợp phản ứng được rửa bằng 450mL nước và 450mL nước muối. Lớp hữu cơ được tách ra, được làm khô trên Na₂SO₄ và được lọc. Phần lọc được cô trong chân không tới thể tích của khoảng 50mL. phần cô được pha loãng bằng 150mL n-hexan, phần kết tủa được tạo thành được lọc bỏ, được rửa bằng 150mL hỗn hợp dietyl ete và n-hexan với tỷ lệ 1:1 và được làm khô trong chân không ở 60 °C (1 tor, 3 h) để tạo ra 9,3 g (86%) O-(3-clo-5-xyanophenyl) dimethylcarbamothioat ở dạng tinh thể không màu.

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ: 3,35 (s, 3H), 3,46 (s, 3H), 7,30 (s, 1H), 7,35 (s, 1H), 7,53 (s, 1H) (được đo trên máy Varian Gemini 2000).

Bước 2:

S-(3-clo-5-xyanophenyl) dimethylcarbamothioat

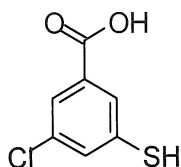


Dung dịch chứa 2,41 g (10mmol) O-(3-clo-5-xyanophenyl) dimethylcarbamothioat trong 20mL dimetyl axetamit khan được gia nhiệt trong lò vi sóng Biotage Initiator trong 35 phút ở 220 °C. Hỗn hợp phản ứng được để đến nhiệt độ trong phòng và được pha loãng bằng nước 40mL. Phần kết tủa được tạo thành được lọc bỏ, được rửa bằng nước nóng (khoảng 70 °C) và n-hexan và được làm khô trong chân không ở 60 °C (1 tor, 3 h) để tạo ra 2,05 g (85%) S-(3-clo-5-xyanophenyl) dimethylcarbamothioat ở dạng bột màu trắng.

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ : 3,05 (s, 3H), 3,10 (s, 3H), 7,64 (s, 1H), 7,69 (s, 1H), 7,73 (s, 1H) (được đo trên máy Varian Gemini 2000).

Bước 3:

Axit 3-clo-5-sulfanylbenzoic

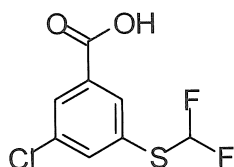


Dung dịch nóng (khoảng 70°C) chứa 68,5 g (1,71 mol) NaOH trong 300mL nước được bổ sung vào huyền phù chứa 27,5 g (114mmol) S-(3-clo-5-xyanophenyl) dimethylcarbamothioat trong 700mL metanol ấm (khoảng 40°C). Hỗn hợp phản ứng được khuấy trong điều kiện hồi lưu (20 h). Metanol được loại bỏ trong chân không và ddung dịch nước được rửa bằng 2 x 200mL dietyl ete. Lớp nước được tách ra và được bổ sung từng giọt vào huyền phù chứa 300 g băng trong nước HCl đậm đặc (trong môi trường khí agon, làm lạnh bằng bể đá). Dung dịch được tạo thành được lọc bỏ, được rửa bằng 2 x 50mL nước, 50mL n-hexan và được làm khô trong chân không ở 60 °C (1 tor, 3 h) để tạo ra 21,2 g (98%) axit 3-clo-5-sulfanylbenzoic ở dạng bột màu trắng.

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ : 3,65 (s, 1H), 7,50 (s, 1H), 7,86 (s, 1H), 7,89 (s, 1H), 10,80 (brs, 1H) (được đo trên máy Varian Gemini 2000).

Bước 4:

Axit 3-clo-5-[(diflometyl)sulfanyl]benzoic (**INT-09**)

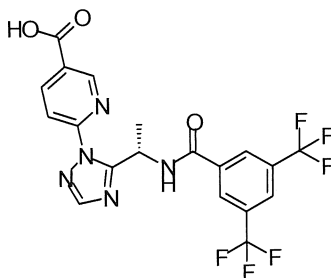


12,44 g (90mmol) K_2CO_3 và 18,3 g (120mmol) natri clo(diflo)axetat được bổ sung vào lần lượt vào dung dịch chứa 11,32 g (60mmol) axit 3-clo-5-sulfanylbenzoic trong DMF khan trong môi trường argon. Hỗn hợp phản ứng được khuấy ở 95 - 100°C trong 3 h. Cần trọng: Ở 90 – 95 °C CO_2 tỏa nhiệt mạnh! Các chất dễ bay hơi được loại ra trong chân không và phần cặn lắng được pha loãng bằng nước đến thể tích 500mL. Sản phẩm được chiết bằng dietyl ete. Lớp nước được tách ra và được bổ sung từng giọt vào huyền phù chứa khoảng 100 g băng trong 200mL 5% axit clohydric. Huyền phù được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 20 h, phần kết tủa được lọc bỏ, được rửa bằng nước 2 x 50mL và 1/1 hỗn hợp của n-hexan và dietylete. Làm khô trong chân không 60 °C (1 tor, 3 h) thu được 11 g sản phẩm thô (85% tinh khiết theo 1H và ^{19}F NMR). Thăng hoa ở 90 - 95°C/0,01 tor tạo ra 7,7 g (54%) axit 3-clo-5-[(diflometyl)sulfanyl]benzoic ở dạng bột màu trắng.

1H NMR (400 MHz, $CDCl_3$) δ : 6,90 (t, 1H, $J = 74,4$ Hz), 7,83 (t, 1H, $J = 2$ Hz), 8,14 (t, 1H, $J = 2$ Hz), 8,20 (s, 1H), 10,50 (brs, 1H). (được đo trên máy Varian Gemini 2000).

Tổng hợp 6-(5-((1S)-1-[3,5-bis(triflometyl)benzamido]etyl)-1H-1,2,4-triazol-1-yl)-N-xyclopropyl-N-metylnicotinamit (hợp chất ví dụ II-38)

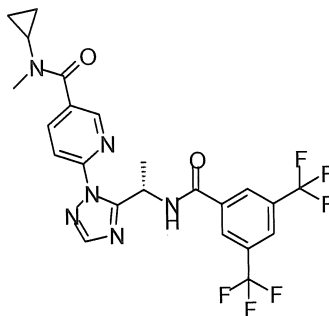
Bước 1: Axit 6-(5-((1S)-1-[3,5-bis(triflometyl)benzamido]etyl)-1H-1,2,4-triazol-1-yl)nicotinic



Dung dịch chứa 2,00 g (6,09mmol) N-[(2S)-1-amino-1-oxopropan-2-yl]-3,5-bis(triflometyl)benzamidit và 1,21mL (9,14mmol) N,N-dimetylformamid dimetyl axetal trong 40mL diclometan được gia nhiệt tới hồi lưu. Sau 1 giờ, hỗn hợp phản ứng được cô

Khối lượng ESI [m/z]: 474,2 [M+H]⁺

6-(5-{(1S)-1-[3,5-bis(triflometyl)benzamido]etyl}-1H-1,2,4-triazol-1-yl)-N-cyclopropyl-N-metylnicotinamit (hợp chất ví dụ II-38)



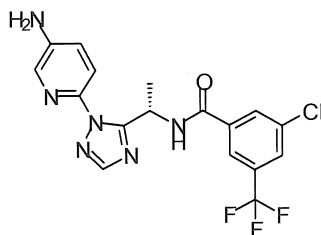
Khối lượng ESI [m/z]: 527,2 [M+H]⁺

Danh sách đỉnh ^1H NMR xem bảng 3

Tổng hợp 3-clo-N-[(1S)-1-{1-[5-(isobutyrylamino)pyridin-2-yl]-1H-1,2,4-triazol-5-yl}etyl]-5-(triflometyl)benzamid (hợp chất ví dụ II-2)

Bước 1:

N-[(1S)-1-[1-(5-aminopyridin-2-yl)-1H-1,2,4-triazol-5-yl]etyl]-3-clo-5-(triflometyl)benzamid

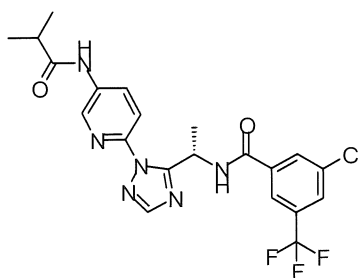


Dung dịch chứa 1,22 g (2,76mmol) 3-clo-N-[(1S)-1-[1-(5-nitropyridin-2-yl)-1H-1,2,4-triazol-5-yl]etyl]-5-(triflometyl)benzamid trong hỗn hợp gồm 65mL etanol và 6,4mL axit axetic được bổ sung 0,62 g (11mmol) bột sắt. Hỗn hợp được gia nhiệt ở 80°C trong 2 h. Tất cả các chất dễ bay hơi được loại ra trong điều kiện áp suất thấp. Nước và dung dịch nước NaHCO₃ bão hòa được bổ sung vào cạn. Các lớp được tách ra và lớp nước được chiết vài lần bằng etyl axetat. Các lớp hữu cơ gộp lại được rửa bằng nước muối, được làm khô bằng Na₂SO₄, lọc và cô dưới áp suất giảm để thu được 1,19 g N-[(1S)-1-[1-(5-aminopyridin-2-yl)-1H-1,2,4-triazol-5-yl]etyl]-3-clo-5-(triflometyl)benzamid.

Khối lượng ESI [m/z]: 411,2 [M+H]⁺

Bước 2:

3-clo-N-[(1S)-1-{1-[5-(isobutyrylamino)pyridin-2-yl]-1H-1,2,4-triazol-5-yl}etyl]-5-(triflometyl)benzamid (hợp chất ví dụ II-2)

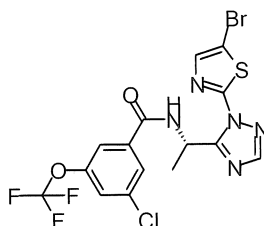


Dung dịch chứa 80 mg (0,19mmol) N-{(1S)-1-[1-(5-aminopyridin-2-yl)-1H-1,2,4-triazol-5-yl]etyl}-3-clo-5-(triflometyl)benzamid trong 0,3mL THF được xử lý ở 0°C với 20 μ L (0,19mmol) 2-metylpropanoyl clorua và 30 μ L (0,21mmol) trietylamin. Hỗn hợp phản ứng được khuấy qua đêm ở nhiệt độ trong phòng. Tất cả các chất dễ bay hơi được loại ra trong điều kiện áp suất thấp và phần lỏng còn lại được tinh chế bằng sắc ký trên silic oxit (xyclohexan / EtOAc) để tạo ra 43 mg 3-clo-N-[(1S)-1-{1-[5-(isobutyrylamino)pyridin-2-yl]-1H-1,2,4-triazol-5-yl}etyl]-5-(triflometyl)benzamid.

Khối lượng ESI [m/z]: 481,2 [M+H]⁺

Danh sách đỉnh ¹H NMR xem bảng 3

Tổng hợp N-{(1S)-1-[1-(5-bromo-1,3-thiazol-2-yl)-1H-1,2,4-triazol-5-yl]etyl}-3-clo-5-(triflometoxy)benzamid (hợp chất ví dụ II-15)



0,50 g (1,2mmol) 3-clo-N-{(1S)-1-[1-(1,3-thiazol-2-yl)-1H-1,2,4-triazol-5-yl]etyl}-5-(triflometoxy)benzamid và 0,73 g (4,1mmol) N-bromo-succinimit được hòa tan trong 37mL DMF và được khuấy qua đêm ở nhiệt độ trong phòng. Việc chuyển hóa nguyên liệu ban đầu là không hoàn toàn chính vì thế 0,73 g (4,1mmol) N-bromo-succinimit bổ sung được bổ sung vào và khuấy tiếp trong 5 h. Aq. natri bisulfit được bổ sung và hỗn hợp repeatedly được chiết bằng EtOAc. Các lớp hữu cơ gom lại được rửa bằng nước, aq. bão hoà NaHCO₃ dung dịch và nước muối. Tất cả các chất dễ bay hơi được loại ra trong điều kiện áp suất thấp và phần lỏng còn lại được tinh chế bằng sắc ký trên silic oxit (xyclohexan / EtOAc) để tạo ra 457 mg N-{(1S)-1-[1-(5-bromo-1,3-thiazol-2-yl)-1H-1,2,4-triazol-5-yl]etyl}-3-clo-5-(triflometoxy)benzamid.

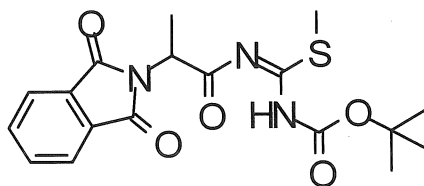
Khối lượng ESI [m/z]: 497,9 [M+H]⁺

Danh sách đỉnh ¹H NMR xem bảng 3

Tổng hợp 3,5-di(triflometyl)-N-{1-[3-clo-1-(3-xyano-pyridin-6-yl)-1H-1,2,4-triazol-5-yl]etyl}-benzamid (hợp chất ví dụ I-39)

Bước 1

tert-butyl *N*-[(*E*)-*N*-[2-(1,3-dioxoisindolin-2-yl)propanoyl]-*C*-metylsulfanyl-carbonimidoyl] carbamat



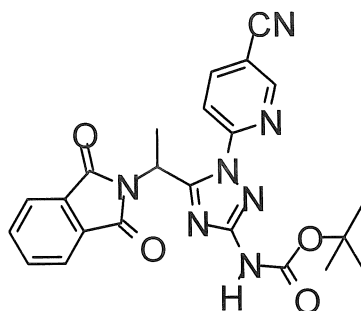
1,09 g (5,0mmol) axit (αS)-1,3-dihydro- α -metyl-1,3-dioxo-2*H*-isindol-2-axetic (Pht-Ala-OH được mua từ ABCR) và 0,95 g (5,0mmol) 1-*N*-Boc-2-metyl-isothioure (được mua từ ABCR) được hòa tan trong tetrahydrofuran (30mL), trietylamin (2,1mL) và [O-(7-azabenzotriazol-1-yl)-*N,N,N',N'*-tetrametyluroni-hexafloro-phosphat] (HATU) được bổ sung vào, và hỗn hợp phản ứng được khuấy 2 h ở nhiệt độ 80°C. Sau đó, nước được bổ sung và hỗn hợp được chiết bằng natri hydrocacbonat dung dịch và diclometan. Pha hữu cơ được tách ra, được làm khô trên Na₂SO₄, được lọc và dung môi được làm bay hơi. Phần cặn rắn còn lại được tinh chế bằng sắc ký với gradien xyclohexan/axeton trên silicagel để tạo ra 1,40 g (độ tinh khiết: 97,0%; hiệu suất: 69,6%) hợp chất raxemic nêu ở đề mục.

Khối lượng ESI [*m/z*]: 392,2 [*M*+*H*]⁺

Danh sách đỉnh ¹H-NMR (400 MHz, DMSO-*d*₆, ppm) δ = 11,8958 (0,5); 11,4353 (0,9); 7,9299 (0,5); 7,9221 (1,0); 7,9152 (1,2); 7,9102 (1,0); 7,9063 (1,2); 7,9000 (2,1); 7,8930 (1,1); 7,8847 (2,6); 7,8785 (1,3); 7,8744 (1,2); 7,8627 (0,8); 4,9976 (0,8); 4,9794 (0,8); 3,3230 (9,5); 2,5251 (0,4); 2,5204 (0,6); 2,5117 (8,2); 2,5072 (16,6); 2,5027 (21,9); 2,4981 (15,8); 2,4936 (7,6); 2,2949 (2,4); 1,9720 (6,0); 1,6029 (2,9); 1,5848 (3,0); 1,5719 (1,3); 1,5540 (1,1); 1,4430 (16,0); 1,3971 (11,0); 1,2665 (6,6); -0,0002 (0,5)

Bước 2

2-[1-[3-(*N*-Boc-amino)-1-(3-cyano-pyridin-6-yl)-1*H*-1,2,4-triazol-5-yl)ethyl]-1*H*-isoindol-1,3(2*H*)-dione



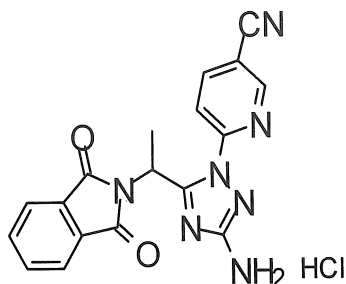
Dung dịch chứa 2,1 g (5,36mmol) *tert*-butyl *N*-[(*E*)-*N*-[2-(1,3-dioxoisoindolin-2-yl)propanoyl]-*C*-metylsulfanyl-carbonimidoyl]carbamate trong pyridin (20mL), 1,0 g (7,45mmol) 6-hydrazinyl-3-pyridincarbonitril được bổ sung và hỗn hợp phản ứng được khuấy ở 80°C trong 2 h. Sau đó, bổ sung 250 mg *tert*-butyl *N*-[(*E*)-*N*-[2-(1,3-dioxoisoindolin-2-yl)propanoyl]-*C*-metylsulfanyl-carbonimidoyl]carbamate được bổ sung vào và hỗn hợp phản ứng được khuấy trong một giờ nữa ở nhiệt độ 80°C. Sau đó dung môi được làm bay hơi *trong chân không* và sản phẩm thô được tinh chế bằng sắc ký với gradien xyclohexan/ etyl este của axit axetic trên silicagel để tạo ra 1,7 g (độ tinh khiết: 98,5%; hiệu suất: 67,9%) hợp chất racemic nêu ở đề mục.

Khối lượng ESI [*m/z*]: 404,3 [*M*-H₂C=(CH₃)₂]⁺

Danh sách đỉnh ¹H-NMR (400 MHz, DMSO-*d*₆, ppm) δ = 10,1893 (1,2); 8,7198 (1,0); 8,7155 (1,0); 8,4412 (0,7); 8,4357 (0,6); 8,4197 (0,7); 8,4142 (0,7); 7,8856 (1,0); 7,8642 (0,9); 7,8302 (9,0); 6,1248 (0,8); 6,1071 (0,8); 3,3201 (12,8); 2,5249 (0,7); 2,5113 (13,7); 2,5070 (27,3); 2,5026 (35,5); 2,4980 (25,3); 2,4936 (12,2); 1,9890 (0,4); 1,8230 (2,2); 1,8054 (2,2); 1,4459 (16,0); 1,3977 (14,0); -0,0002 (3,0)

Bước 3

2-[1-[3-amino-1-(3-cyano-pyridin-6-yl)-1*H*-1,2,4-triazol-5-yl)ethyl]-1*H*-isoindol-1,3(2*H*)-dione-hydroclorua



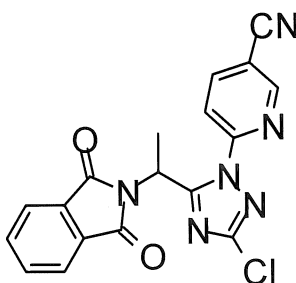
1,9 g (4,14mmol) 2-[1-[3-(*N*-Boc-amino)-1-(3-cyano-pyridin-6-yl)-1*H*-1,2,4-triazol-5-yl)ethyl]-1*H*-isoindol-1,3(2*H*)-dion được xử lý bằng 4*N* HCl trong dung dịch dioxan (50mL) và hỗn hợp phản ứng được khuấy trong 18 h ở nhiệt độ trong phòng. Sau đó hỗn hợp phản ứng được cô và phần cặn racemic rắn được sử dụng để đưa halogen vào (bước 4) không cần tinh chế.

Khối lượng ESI [*m/z*]: 360,3 [*M*-HCl]⁺

Danh sách đỉnh ¹H-NMR (400 MHz, DMSO-*d*₆, ppm) δ = 8,6984 (0,6); 8,6942 (0,7); 8,3712 (0,5); 8,3656 (0,4); 8,3496 (0,5); 8,3439 (0,5); 7,8431 (2,4); 7,8409 (2,4); 7,7665 (0,6); 7,7448 (0,6); 6,1130 (0,5); 6,0953 (0,5); 3,8452 (0,6); 3,5682 (16,0); 2,5245 (0,8); 2,5109 (17,6); 2,5066 (35,5); 2,5021 (46,5); 2,4976 (33,8); 2,4932 (16,7); 1,8297 (1,6); 1,8120 (1,6); -0,0002 (2,4)

Bước 4

2-[1-[3-clo-1-(3-cyano-pyridin-6-yl)-1*H*-1,2,4-triazol-5-yl)ethyl]-1*H*-isoindol-1,3(2*H*)-dion



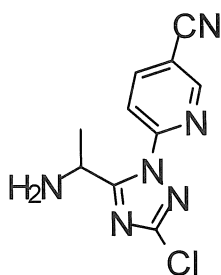
1,14 g (3,17mmol) 2-[1-[3-amino-1-(3-cyano-pyridin-6-yl)-1*H*-1,2,4-triazol-5-yl)ethyl]-1*H*-isoindol-1,3(2*H*)-dion-hydroclorua trong axetonitril (91,2mL), 725,1 mg (5,39mmol) Cu(II)-clorua được bổ sung vào, và sau đó hỗn hợp phản ứng được xử lý từng giọt bằng 458,0 mg (4,44mmol) *tert*-butyl nitrit ở nhiệt độ trong phòng. Sau đó hỗn hợp phản ứng

được khuấy 1 h ở 70°C và sau đó được xử lý bằng etyl este của axit axetic và sau đó được chiết bằng dung dịch NaHCO₃ bão hoà và nước. Pha hữu cơ được tách ra, được làm khô trên Na₂SO₄, được lọc và dung môi được làm bay hơi. Sản phẩm thô được tinh chế bằng sắc ký với gradien xyclohexan/axeton trên silicagel để tạo ra 670 mg (độ tinh khiết: 100%; hiệu suất: 55,7%) hợp chất raxemic nêu ở đề mục.

Khối lượng ESI [m/z]: 379,1 [M+H]⁺

Bước 5

6-[5-(1-aminoethyl)-3-clo-1,2,4-triazol-1-yl]pyridin-3-carbonitril (INT-11)

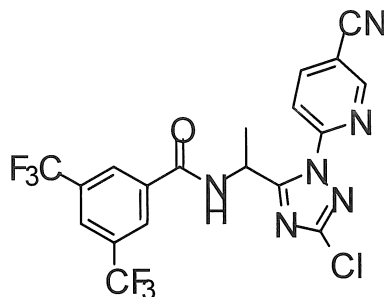


650,0 mg (1,71mmol) 2-[1-[3-clo-1-(3-xyano-pyridin-6-yl)-1*H*-1,2,4-triazol-5-yl)ethyl]-1*H*-isoindol-1,3(2*H*)-dion trong etanol (36,1mL), 390,5 mg (4,29mmol) hydrazin-hydrat được bổ sung vào, và hỗn hợp phản ứng được gia nhiệt trong điều kiện hồi lưu. Sau 30 phút, kết tủa không màu được tạo ra. Hỗn hợp phản ứng được khuấy và được gia nhiệt trong điều kiện hồi lưu hai giờ nữa, axeton (10mL) được bổ sung và việc gia nhiệt được tiếp tục trong 30 phút nữa. Hỗn hợp phản ứng được cô và phần cặn rắn được xử lý bằng etanol. Sau khi lọc, phần lọc được hoá hơi trong điều kiện áp suất thấp để tạo ra raxemic 6-[5-(1-aminoethyl)-3-clo-1,2,4-triazol-1-yl]pyridin-3-carbonitril (INT-11), mà được sử dụng ở bước 6 không cần tinh chế.

Khối lượng ESI [m/z]: 249,2 [M+H]⁺

Bước 6

3,5-di(triflometyl)-N-{1-[3-clo-1-(3-xyano-pyridin-6-yl)-1H-1,2,4-triazol-5-yl]etyl}-benzamid (hợp chất ví dụ I-39)



125,0 mg (0,50mmol) 6-[5-(1-aminoetyl)-3-clo-1,2,4-triazol-1-yl]pyridin-3-carbonitril (INT-11), 146,6 mg (0,55mmol) axit 3,5-bis(triflometyl)-benzoic, 100 mg (0,77mmol) *N,N*-diisopropyletylamin (Bazơ Hünig) trong axetonitril (6,25mL), 258,3 mg (0,67mmol) [*O*-(7-azabenzotriazol-1-yl)-*N,N,N',N'*-tetrametyluroni-hexafloro-phosphat] (HATU) được bổ sung vào, và hỗn hợp phản ứng được khuấy ở nhiệt độ trong phòng qua đêm. Hỗn hợp phản ứng được cô trong điều kiện áp suất thấp và phần cặn rắn được xử lý bằng diclometan và sau đó được chiết bằng dung dịch nước NaHCO₃ bão hoà và nước. Pha hữu cơ được tách ra, được làm khô trên Na₂SO₄ và dung môi được làm bay hơi trong điều kiện áp suất thấp. Dầu màu nâu còn lại được tinh chế bằng HPLC điều chế bằng gradien nước/axetonitril trung tính để thu được 106,0 mg (độ tinh khiết: 100%; hiệu suất: 39,3%) hợp chất raxemic nêu ở đề mục.

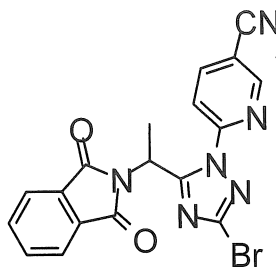
Khối lượng ESI [*m/z*]: 489,1 [*M*+*H*]⁺

Danh sách đỉnh ¹H NMR xem bảng 1

Tổng hợp 3,5-di(triflometyl)-N-{1-[3-bromo-1-(3-xyano-pyridin-6-yl)-1H-1,2,4-triazol-5-yl]etyl}-benzamid (hợp chất ví dụ I-48)

Bước 1

2-[1-[3-bromo-1-(3-xyano-pyridin-6-yl)-1H-1,2,4-triazol-5-yl]etyl]-1H-isoindol-1,3(2H)-dion

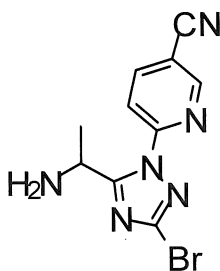


250,0 mg (0,69mmol) 2-[1-[3-amino-1-(3-cyano-pyridin-6-yl)-1H-1,2,4-triazol-5-yl]ethyl]-1H-indole-1,3(2H)-dione-hydrochlorua trong axetonitril (16,6mL), 300,0 mg (1,34mmol) Cu(II)-bromua được bổ sung, và sau đó hỗn hợp phản ứng được xử lý từng giọt ở nhiệt độ trong phòng bằng 110,0 mg (1,06mmol) *tert*-butyl nitrit. Sau đó hỗn hợp phản ứng được khuấy trong 1 giờ ở 70°C, tiếp đó là xử lý với etyl este của axit axetic và chiết bằng dung dịch NaHCO₃ bão hoà và nước. Pha hữu cơ được tách ra, được làm khô trên Na₂SO₄, được lọc và dung môi được làm bay hơi. Sản phẩm thô được sắc ký bằng gradien xyclohexan/axeton trên silicagel để tạo ra 300 mg (độ tinh khiết: 96,2%) hợp chất raxemic nêu ở đề mục.

Khối lượng ESI [m/z]: 423,3 [M+H]⁺

Bước 2

6-[5-(1-aminoethyl)-3-bromo-1,2,4-triazol-1-yl]pyridin-3-carbonitril (**INT-12**)



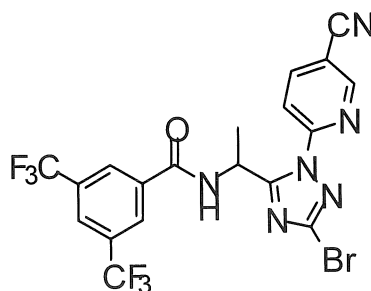
300,0 mg (0,70mmol) 2-[1-[3-bromo-1-(3-cyano-pyridin-6-yl)-1H-1,2,4-triazol-5-yl]ethyl]-1H-indole-1,3(2H)-dione trong etanol (10mL), 160,0 mg (1,75mmol) hydrazinhydrat được bổ sung vào, và hỗn hợp phản ứng được gia nhiệt trong điều kiện hồi lưu. Sau 30 phút, kết tủa không màu được tạo ra. Hỗn hợp phản ứng được khuấy và được gia nhiệt trong điều kiện hồi lưu hai giờ nữa, axeton (2mL) được bổ sung và việc gia nhiệt được tiếp tục trong 30 phút nữa. Hỗn hợp phản ứng được cô và phần cặn rắn được xử lý bằng etanol. Sau khi lọc, phần lọc được hoá hơi trong điều kiện áp suất thấp để tạo ra 210 mg (độ tinh khiết: 88%; hiệu suất: 88,9%) raxemic 6-[5-(1-aminoethyl)-3-bromo-1,2,4-

triazol-1-yl]pyridin-3-carbonitril (INT-12), mà được sử dụng ở bước cuối 3 mà không cần tinh chế thêm.

Khối lượng ESI [m/z]: 293,0 [M+H]⁺

Bước 3

3,5-di(triflometyl)-*N*-{1-[3-bromo-1-(3-xyano-pyridin-6-yl)-1*H*-1,2,4-triazol-5-yl]etyl}-benzamid (hợp chất ví dụ I-48)



173,8 mg (0,59mmol) 6-[5-(1-aminoetyl)-3-bromo-1,2,4-triazol-1-yl]pyridin-3-carbonitril (INT-12), 170,0 mg (0,63mmol) axit 3,5-bis(triflometyl)-benzoic, 115,9 mg (0,89mmol) *N,N*-diisopropyletylamin (Bazơ Hünig) trong axetonitril (6,25mL), 299,4 mg (0,78mmol) [*O*-(7-azabenzotriazol-1-yl)-*N,N,N',N'*-tetrametyluroni-hexafloro-phosphat] (HATU) được bổ sung vào, và hỗn hợp phản ứng được khuấy ở nhiệt độ trong phòng qua đêm. Hỗn hợp phản ứng được cô trong điều kiện áp suất thấp và phần cặn rắn được xử lý bằng diclometan và sau đó được chiết bằng dung dịch nước NaHCO₃ bão hoà và nước. Pha hữu cơ được tách ra, được làm khô trên Na₂SO₄ và dung môi được làm bay hơi trong điều kiện áp suất thấp. Dầu màu nâu còn lại được tinh chế bằng HPLC điều chế bằng gradien nước/axetonitril để thu được 81,0 mg (độ tinh khiết: 94,8%; hiệu suất: 22,5%) hợp chất raxemic nêu ở đề mục.

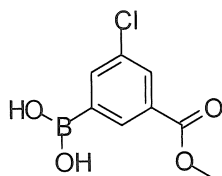
Khối lượng ESI [m/z]: 535,0 [M+H]⁺

Danh sách đỉnh ¹H NMR xem bảng 1

Tổng hợp axit 3-clo-5-[(triflometyl)sulfanyl]benzoic

Bước 1:

Axit [3-clo-5-(metoxycacbonyl)phenyl]boronic



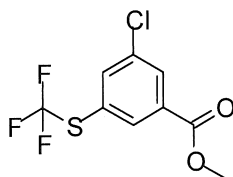
Huyền phù chứa 12 g (40mmol) methyl 3-clo-5-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzoat trong 30mL axeton và 30mL H₂O được bổ sung vào 17,3 g (80,9mmol) natri periodat và 6,24 g (80,9mmol) amoni axetat. Hỗn hợp được khuấy ở 25°C trong 2 h và Sau đó được lọc qua xelit. Phần lọc được hoá hơi. Phần cặn lắng được pha loãng bằng 200mL etyl axetat và được rửa bằng 100mL H₂O. Pha hữu cơ được rửa bằng nước muối, được làm khô trên khan Na₂SO₄, được lọc và được cô cô trong chân không. Sản phẩm thô được nghiền bằng 10mL dầu mỏ ete ở 15°C trong 20 phút. Hỗn hợp được lọc và phần lắng cặn được làm khô trong điều kiện áp suất thấp để thu được 7 g axit [3-clo-5-(metoxycacbonyl)phenyl]boronic ở dạng chất rắn màu trắng.

¹H-NMR (400 MHz, CDCl₃): δ = 8,72 (s, 1H), 8,35 (s, 1H), 8,27 (s, 1H), 4,02 (s, 3H).

Xem vết tín hiệu CHCl₃ ở 7,25ppm. Được đo sử dụng máy Varian 400MR NMR.

Bước 2:

metyl 3-clo-5-[(triflometyl)sulfanyl]benzoat

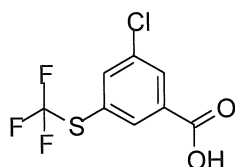


13 g (61mmol) axit [3-clo-5-(metoxycacbonyl)phenyl]boronic, 43,1 g (303mmol) trimetyl(triflometyl)silan, 33,4 g (121mmol) Ag₂CO₃, 38,6 g (182mmol) K₃PO₄, 762 mg (6,06mmol) CuSCN, 2,2 g (12mmol) 1,10-Phenanthrolin, 46,7 g (1,46 mol) lưu huỳnh và 13 g sàng phân tử 4 Å trong 500mL DMF được khuấy ở 25°C trong 16 h trong điều kiện N₂. Hỗn hợp được lọc qua xelit. Phần lọc được pha loãng bằng 1,5 L metyl *tert*-butyl ete và được rửa bằng 2 x 500mL H₂O. Pha hữu cơ được rửa bằng nước muối, được làm khô trên Na₂SO₄ khan, được lọc và được cô cô trong chân không. Sản phẩm thô được tinh chế bằng MPLC trên silicagel (dầu mỏ ete : etyl axetat = 1 : 0 ~ 20 : 1) để thu được 5,5 g metyl 3-clo-5-[(triflometyl)sulfanyl]benzoat ở dạng dầu màu vàng sáng.

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3): δ = 8,20 (s, 1H), 8,10 – 8,15 (m, 1H), 7,83 (s, 1H), 3,96 (s, 3H). Xem vết tín hiệu CHCl_3 ở 7,25ppm. Được đo sử dụng máy Varian 400MR NMR.

Bước 3:

Axit 3-clo-5-[(triflometyl)sulfanyl]benzoic



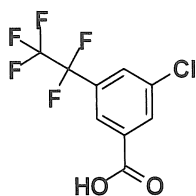
5,5 g (20mmol) metyl 3-clo-5-[(triflometyl)sulfanyl]benzoat được hòa tan trong hỗn hợp của 12mL tetrahydrofuran và 12mL H_2O . 1,63 g (40,6mmol) NaOH được bổ sung vào hỗn hợp mà sau đó được khuấy ở 25°C trong 2 h. Hỗn hợp được điều chỉnh đến độ pH = 5 bằng 40mL 1 M HCl bổ sung và được chiết bằng 150mL etyl axetat. Pha hữu cơ được rửa bằng nước muối, được làm khô trên Na_2SO_4 khan, được lọc và được cô cô trong chân không. Sản phẩm thô được nghiền bằng 50mL dầu mỏ ete ở 25°C trong 15 phút. Hỗn hợp được lọc và phần lắng cặn được làm khô trong điều kiện áp suất thấp để thu được 3,0 g axit 3-clo-5-(triflometylsulfanyl)benzoic ở dạng chất rắn màu vàng.

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3): δ = 11,28 (br s, 1H), 8,29 (s, 1H), 8,20 – 8,25 (m, 1H), 7,91 (s, 1H). Xem vết tín hiệu CHCl_3 ở 7,25ppm. Được đo sử dụng máy Varian 400MR NMR.

Khối lượng ESI [m/z]: 254,8 [M-H] $^-$

Việc xác định bởi LC-MS được thực hiện sử dụng các pha động axetonitril và 10 mM dung dịch nước amoni bicarbonat; gradien tuyến tính từ 15% axetonitril đến 90% axetonitril, tốc độ chảy 0,80mL/phút; các thiết bị: Agilent 1200 & Agilent 6120. Cột sử dụng để sắc ký là cột 2,1*50mm Xbridge Shield RPC18 (các hạt 5 μm). Các phương pháp phát hiện là phương pháp phát hiện dãy điốt (diode array - DAD) và ánh sáng tán xạ bay hơi (evaporative light scattering - ELSD) cũng như phun điện ion hóa âm.

Tổng hợp axit 3-clo 5-(pentafluoretyl)benzoic (hợp chất trung gian INT-13)



Bước 1:

Metyl 3-clo-5-(pentafloetyl)benzoat

Metyl 3-clo-5-iodo-benzoat (18,5 g, 62,4mmol) trong DMF (180mL) được bổ sung muối kali của axit pentafloropropionic (22,7 g, 112,3mmol) và CuI (23,7 g, 124,8mmol) và hỗn hợp được khuấy ở 160°C trong 2 h, được kiểm tra bằng TLC. Nước (200mL) và EtOAc (300mL) được bổ sung vào hỗn hợp phản ứng, huyền phù thu được được lọc và pha hữu cơ được tách khỏi phần lọc. Pha hữu cơ được rửa bằng H₂O (2 x 50mL) và Sau đó được cô. Phần lắng cặn được tinh chế bằng sắc ký cột (SiO₂, dầu mỏ ete/etyl axetat=1/0 đến 100/1). Hợp chất nêu ở đề mục thu được ở dạng dầu rắn (10,0 g, 32,2mmol, hiệu suất 51,6%, độ tinh khiết 93,0%).

¹H-NMR (400 MHz, CDCl₃): δ = 8,24 (s, 1H), 8,17 (s, 1H), 7,78 (s, 1H), 3,98 (s, 3H).

Được đo sử dụng máy Bruker 400 MHz NMR.

Bước 2:

Axit 3-clo-5-(pentafloetyl)benzoic

Metyl 3-clo 5-(pentafloetyl)benzoat (10,0 g, 34,6mmol) được hoà tan trong MeOH (50mL). LiOH (1,66 g, 69,3mmol) trong H₂O (50mL) được bổ sung vào dung dịch nêu trên, hỗn hợp được khuấy ở 25°C trong 5 h, được kiểm tra bởi TLC. Nước (100mL) được bổ sung vào hỗn hợp phản ứng và hỗn hợp được chiết bằng etyl axetat (60mL). Pha nước đã được tách được axit hóa bằng 1N HCl cho đến khi độ pH=5-6, sau đó dung dịch được chiết bằng etyl axetat (3 x 50mL). Các pha hữu cơ gom lại được rửa bằng nước muối (30mL), được làm khô trên natri sulfat, được lọc và được cô. Hợp chất nêu ở đề mục thu được ở dạng chất rắn màu trắng (8,00 g, 29,1mmol, hiệu suất 84,0%).

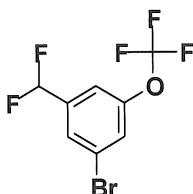
¹H-NMR (400 MHz, MeOD): δ = 8,24 (s, 1H), 8,14 (s, 1H), 7,88 (s, 1H). Được đo sử dụng máy Bruker 400 MHz NMR.

Khối lượng ESI [m/z]: 272,9 [M]⁺

Tổng hợp axit 3-(diflometyl)-5-(triflometoxy)benzoic (hợp chất trung gian INT-14)

Bước 1:

1-bromo-3-(diflometyl)-5-(triflometoxy)benzen



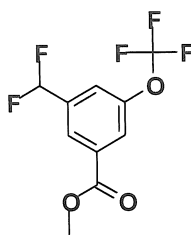
Dung dịch chứa 5,00 g (18,5mmol) 3-bromo-5-(triflometoxy)benzaldehyt trong 100mL CH₂Cl₂ được bổ sung vào 3,0mL (23mmol) diethylaminosulfua triflorua. Hỗn hợp phản ứng được khuấy trong 2 h ở nhiệt độ trong phòng. Sau thời gian này, hỗn hợp phản ứng được làm nguội bằng dung dịch nước NaHCO₃ bão hòa và được chiết bằng CH₂Cl₂. Lớp hữu cơ kết hợp được làm khô với Na₂SO₄, được lọc và cô đặc trong điều kiện áp suất giảm. Phân tích sản phẩm thô bởi NMR đã chỉ ra rằng có chuyển hóa không hoàn toàn của nguyên liệu ban đầu. Do đó, phần lắng cặn được tái hòa tan trong 100mL CH₂Cl₂ và 3,0mL (23mmol) diethylaminosulfua triflorua được bổ sung vào. Khuấy liên tục cho đến khi chuyển hóa hoàn toàn nguyên liệu ban đầu được quan sát bởi HPLC phân tích. Hỗn hợp phản ứng được làm nguội bằng dung dịch nước NaHCO₃ bão hòa và được chiết bằng CH₂Cl₂. Các lớp hữu cơ gom lại được làm khô bằng Na₂SO₄, được lọc và được cô trong điều kiện áp suất thấp để tạo ra 4,87 g phần cặn chứa 1-bromo-3-(diflometyl)-5-(triflometoxy)benzen. Một phần của nguyên liệu thô này được tinh chế bằng sắc ký trên silic oxit (xyclohexan / EtOAc) để tạo ra 1,78 g 1-bromo-3-(diflometyl)-5-(triflometoxy)benzen tinh khiết. Hợp chất này được sử dụng cho phản ứng carbonyl hóa tiếp theo.

¹H-NMR (DMSO-d₆, 400 MHz): δ = 7,92 (s, 1 H), 7,88 (s, 1 H), 7,65 (s, 1 H), 7,10 (t, *J* = 55 Hz, 1 H).

Khối lượng EI [m/z]: 290, 292 [M]⁺

Bước 2:

Metyl 3-(diflometyl)-5-(triflometoxy)benzoat

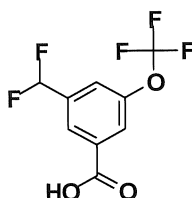


Dung dịch chứa 1,78 g (6,11mmol) 1-bromo-3-(difluoromethyl)-5-(trifluoromethoxy)benzen in 45mL metanol được bổ sung vào 1,51 g (18,3mmol) natri axetat và 0,15 g (0,18mmol) sản phẩm cộng diclo[1,1'-bis(diphenylphosphin)ferrocen]paladi(II) axeton. Sau đó, dung dịch được khuấy trong 16 h ở 80°C trong nồi hấp trong môi trường khí cacbon monoxit (5 bar). Sau thời gian này, quan sát thấy quá trình chuyển hóa hoàn toàn nguyên liệu ban đầu thành methyl 3-(difluoromethyl)-5-(trifluoromethoxy)benzoat. Hỗn hợp phản ứng được sử dụng trực tiếp ở bước tiếp theo.

Khối lượng EI [m/z]: 270 [M]⁺

Bước 3:

Axit 3-(difluoromethyl)-5-(trifluoromethoxy)benzoic

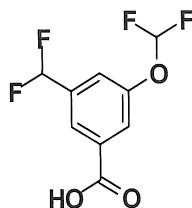


Dung dịch từ bước thứ nhất được bổ sung 70mL THF và 5,3mL dung dịch nước natri hydroxit 45%. Hỗn hợp được gia nhiệt trong điều kiện hồi lưu trong thời gian 45 phút, sau đó nó được axit hóa đến độ pH 1 – 2 bằng cách sử dụng axit clohydric đậm đặc. Kết tủa được tạo thành mà được lấy ra bằng cách lọc. Phần lọc được làm bay hơi đến khô. Nước được bổ sung vào phần lắng cặn và hỗn hợp được chiết lặp lại bằng dietyl ete. Các lớp hữu cơ gom lại được rửa bằng nước muối, được làm khô bằng Na₂SO₄, được lọc và được cô trong điều kiện áp suất thấp để tạo ra 1,44 g methyl 3-(difluoromethyl)-5-(trifluoromethoxy)benzoat.

¹H-NMR (DMSO-d₆, 400 MHz): δ = 13,8 (brs, 1 H), 8,15 (s, 1 H), 7,98 (s, 1 H), 7,89 (s, 1 H), 7,20 (t, J = 55 Hz, 1 H).

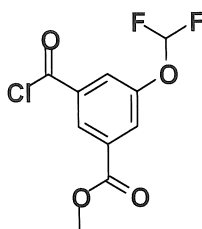
Khối lượng ESI [m/z]: 254,8 [M-H]⁻

Tổng hợp axit 3-(diflometoxy)-5-(diflometyl)benzoic (hợp chất trung gian INT-15)



Bước 1:

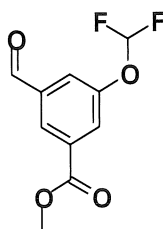
Metyl 3-(clocacbonyl)-5-(diflometoxy)benzoat



axit 3-(diflometoxy)-5-(metoxycacbonyl)benzoic (đã biết từ WO 2012019428 (7,38 g, 30mmol) được tạo huyền phù trong toluen khô (30mL). Oxalyl clorua (5,71 g, 45mmol) được bổ sung một phần tiếp đó là một giọt DMF ở nhiệt độ trong phòng. Hỗn hợp phản ứng được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 12 h và sau đó ở 60-70°C trong 2 h. Hỗn hợp phản ứng được hoá hơi để thu được 7,9 g metyl 3-(clocacbonyl)-5-(diflometoxy)benzoat thô được sử dụng mà không cần tinh chế thêm.

Bước 2:

metyl 3-(diflometoxy)-5-formylbenzoat



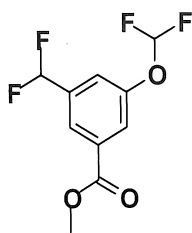
2,6-Lutidin (3,38 g, 3,68mL, 31,5mmol) và 3-(clocacbonyl)-5-(diflometoxy)benzoat từ bước 1 (7,94 g, 30mmol) được hòa tan trong THF tuyệt đối (100mL), Pd/C (Alfa, khô,

10%, 430 mg) được bổ sung và hỗn hợp được hydro hóa trong 48 h (bình cầu chứa H_2). Kết tủa thu được được lọc bỏ, được rửa bằng diethyl ete (200mL) và dung dịch nước $NaHCO_3$ bão hòa (30mL) được bổ sung vào phần lọc và được khuấy trong 12 h ở nhiệt độ trong phòng. Dung dịch được pha loãng bằng diethyl ete (300mL) khác và nước (300mL). Lớp hữu cơ được tách ra, được rửa bằng nước (2 x 300mL), dung dịch nước chứa axit xitric (5%, 200mL), nước (300mL) và nước muối (300mL). Các chất dễ bay hơi được loại ra *trong chân không* để thu được metyl 3-(diflometoxy)-5-formylbenzoat thô (4,1g, hiệu suất 59%).

1H -NMR (400 MHz, $CDCl_3$): δ = 10,05 (d, J = 0,7 Hz, 1H), 8,41 – 8,35 (m, 1H), 8,07 – 8,00 (m, 1H), 7,86 – 7,79 (m, 1H), 6,62 (t, J = 72,4 Hz, 1H), 3,98 (d, J = 0,7 Hz, 3H). Được đo sử dụng máy Varian Gemini 2000.

Bước 3:

metyl 3-(diflometoxy)-5-(diflometyl)benzoat

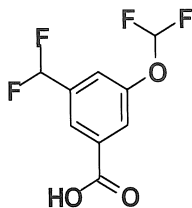


Metyl 3-(diflometoxy)-5-formylbenzoat thô (4 g, 17,38mmol) được hoà tan trong DCM (100mL) và dung dịch được làm lạnh xuống $-20^\circ C$. DAST (5,60 g, 34,8mmol) được bổ sung một phần và hỗn hợp phản ứng được khuấy trong 12 h (làm ấm từ từ lên tới nhiệt độ trong phòng). Hỗn hợp phản ứng được rót vào dung dịch nước $NaHCO_3$ bão hòa (200mL) và DCM (100mL) được bổ sung, tiếp đó là tách lớp hữu cơ, rửa bằng nước (100mL) và làm khô qua Na_2SO_4 . Các chất dễ bay hơi được loại ra *trong chân không* để thu được 4,5 g metyl 3-(diflometoxy)-5-(diflometyl)benzoat thô ở dạng dầu màu nâu.

1H -NMR (400 MHz, $CDCl_3$): δ = 8,04 (t, J = 1,4 Hz, 1H), 7,92 – 7,87 (m, 1H), 7,48 (s, 1H), 6,68 (t, J = 55,9 Hz, 1H), 6,59 (t, J = 72,6 Hz, 1H), 3,96 (s, 3H). Được đo sử dụng máy Varian Gemini 2000.

Bước 4:

Axit 3-(diflometoxy)-5-(diflometyl)benzoic



Dung dịch chứa LiOH (1,43 g, 34mmol) trong nước (10mL) được bổ sung vào dung dịch chứa methyl 3-(diflometoxy)-5-(diflometyl)benzoat thô từ bước 3 (4,3 g, 17mmol) trong hỗn hợp gồm THF (35mL) và MeOH (35mL). Hỗn hợp phản ứng được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 2 h. Các chất dễ bay hơi được loại ra *trong chân không*, nước (100mL) được bổ sung và hỗn hợp thu được được chiết bằng diethyl ete (100mL). Lớp nước đã được tách được bổ sung từng giọt vào HCl pha loãng (5%, 100mL). Phần kết tủa được lọc bỏ, được rửa bằng nước, được làm khô ở 100°C trong 2 h và cuối cùng được thăng hoa ở 105°C (0,1 torr) để thu được hợp chất nêu ở đề mục (3,2 g, hiệu suất 79%).

¹H-NMR (DMSO-d₆, 400 MHz): δ = 13,62 (s, 1H), 7,99 (t, J = 1,3 Hz, 1H), 7,82 (s, 1H), 7,70 – 7,62 (m, 1H), 7,42 (t, J = 73,3 Hz, 1H), 7,15 (t, J = 55,4 Hz, 1H). Được đo sử dụng máy Varian Gemini 2000.

Dữ liệu phân tích đối với các hợp chất

Việc xác định [M+H]⁺ hoặc M⁺ bằng LC-MS trong điều kiện sắc ký axit được tiến hành với 1mL axit formic trên mỗi lít axetonitril và 0,9mL axit formic trên mỗi lít nước Millipore làm dung môi rửa giải. Cột Zorbax Eclipse cùng với với C18 50 mm * 2,1 mm được sử dụng. Nhiệt độ của cột lò là 55°C.

Thiết bị:

LC-MS3: Waters UPLC với máy phổ khối SQD2 và thiết bị lấy mẫu tự động SampleManager. Gradient tuyến tính từ 0,0 đến 1,70 phút từ 10% axetonitril đến 95% axetonitril, từ 1,70 đến 2,40 phút 95% axetonitril không đổi, lưu lượng 2,0mL/phút.

LC-MS6 và LC-MS7: Agilent 1290 LC, Agilent MSD, thiết bị lấy mẫu tự động HTS PAL. Gradient tuyến tính từ 0,0 đến 1,80 phút từ 10% axetonitril đến 95% axetonitril, từ 1,80 đến 2,50 phút 95% axetonitril không đổi, lưu lượng 2,0mL/phút.

Việc xác định $[M+H]^+$ bằng LC-MS trong điều kiện sắc ký trung tính được tiến hành với axetonitril và nước Millipore chứa 79 mg/l amoni cacbonat làm dung môi rửa giải.

Việc xác định $[M+H]^+$ bằng LC-MS trong điều kiện sắc ký trung tính được tiến hành với axetonitril và nước Millipore chứa 79 mg/l amoni cacbonat làm dung môi rửa giải.

Thiết bị:

LC-MS4: Waters IClass Acquity với máy phổ khối QDA và thiết bị lấy mẫu tự động FTN (cột Waters Acquity 1,7 μ m 50 mm * 2,1 mm, nhiệt độ lò 45°C). Gradient tuyến tính từ 0,0 đến 2,10 phút từ 10% axetonitril đến 95% axetonitril, từ 2,10 đến 3,00 phút 95% axetonitril không đổi, lưu lượng 2,0mL/phút.

LC-MS5: Hệ Agilent 1100 LC với máy phổ khối MSD và thiết bị lấy mẫu tự động HTS PAL (cột: Zorbax XDB C18 1,8 μ m 50 mm * 4,6 mm, nhiệt độ lò 55°C). Gradient tuyến tính từ 0,0 đến 4,25 phút từ 10% axetonitril đến 95% axetonitril, từ 4,25 đến 5,80 phút 95% axetonitril không đổi, lưu lượng 2,0mL/phút.

Việc xác định dữ liệu ^1H NMR được thực hiện với Bruker Avance III 400 MHz được trang bị mẫu dò cryo TCI 1,7 mm, Bruker Avance III 600 MHz được trang bị mẫu dò cryo đa hạt nhân 5 mm hoặc Bruker Avance NEO 600 MHz được trang bị mẫu dò cryo TCI 5 mm với tetrametylsilan làm đối chiếu (0,0) và các dung môi CD_3CN , CDCl_3 hoặc $\text{D}_6\text{-DMSO}$.

Dữ liệu NMR của các ví dụ được chọn được liệt kê ở dạng thông thường (các trị số δ , chia vạch bội, số lượng nguyên tử hydro) hoặc dưới dạng danh sách đỉnh NMR.

Phương pháp liệt kê đỉnh NMR

Dữ liệu ^1H NMR của các ví dụ đã chọn được đưa ra dưới dạng danh sách đỉnh ^1H NMR. Đối với mỗi một đỉnh tín hiệu, trước tiên, trị số δ tính bằng ppm và sau đó, cường độ tín hiệu nằm trong dấu ngoặc đơn được liệt kê. Cặp trị số δ – số lượng cường độ tín hiệu đối với các đỉnh tín hiệu khác nhau được liệt kê với sự phân cách nhau bằng dấu chấm phẩy.

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

δ_1 (cường độ₁); δ_2 (cường độ₂);.....; δ_i (cường độ_i);.....; δ_n (cường độ_n)

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

Để hiệu chỉnh độ chuyển dịch hóa học của phổ ^1H NMR, các tác giả sáng chế sử dụng tetrametylsilan và/hoặc độ chuyển dịch của dung môi, nhất là trong trường hợp phổ mà được đo trong DMSO. Do đó, đỉnh tetrametylsilan có thể nhưng không nhất thiết xuất hiện trong các danh sách liệt kê đỉnh NMR.

Danh sách các đỉnh ^1H NMR là tương tự như bản in ^1H -NMR thông thường và do đó thường chứa tất cả các đỉnh được liệt kê trong diễn giải NMR thông thường.

Ngoài ra, giống như các bản in ^1H NMR thông thường, danh sách đỉnh có thể thể hiện các tín hiệu của dung môi, các tín hiệu của chất đồng phân lập thể của các hợp chất đích mà cũng được đề xuất bởi sáng chế, và/hoặc các đỉnh của tạp chất.

Khi báo cáo về các tín hiệu của hợp chất nằm trong khoảng delta của dung môi và/hoặc nước, danh sách các đỉnh ^1H NMR ở đây thể hiện các đỉnh dung môi chuẩn, ví dụ các đỉnh của DMSO trong DMSO- d_6 và đỉnh của nước, các đỉnh này thường có cường độ cao ở mức trung bình.

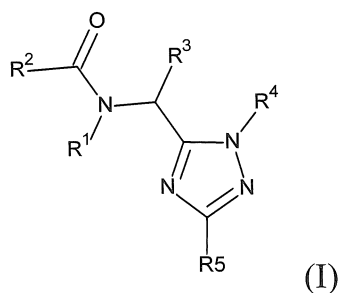
Các đỉnh của các chất đồng phân lập thể của các hợp chất đích và/hoặc các đỉnh của tạp chất trung bình thường có cường độ thấp hơn so với đỉnh của các hợp chất đích (ví dụ, với độ tinh khiết > 90%).

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

Người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực này tính toán các pic của các hợp chất đích bằng các phương pháp đã biết (MestreC, mô phỏng ACD, còn cả bằng các trị số kỳ vọng được đánh giá thực tế) có thể, nếu cần, tách các pic của các hợp chất đích, tùy ý sử dụng bộ lọc cường độ bổ sung. Việc tách này sẽ tương tự như việc lựa chọn pic đang xét trong sự thể hiện ^1H NMR thông thường.

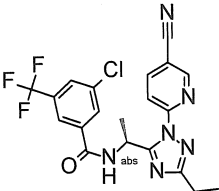
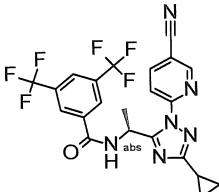
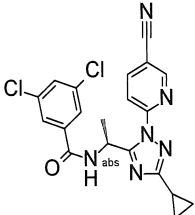
Các chi tiết khác về các danh sách đỉnh ^1H NMR có thể xem trong tài liệu Research Disclosure Data Number 564025.

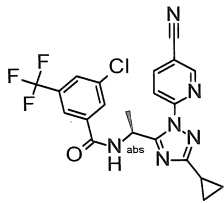
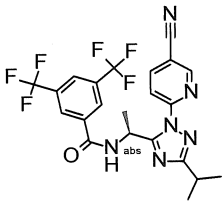
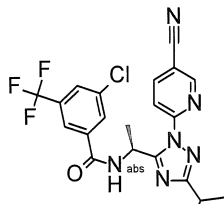
Các hợp chất theo sáng chế được mô tả trong bảng 1 dưới đây tương tự là các hợp chất được ưu tiên có công thức (I) theo sáng chế mà thu được theo hoặc tương tự như các ví dụ điều chế được mô tả trên đây.

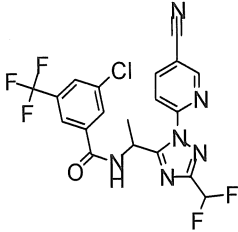
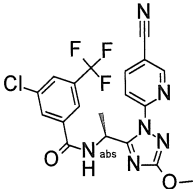
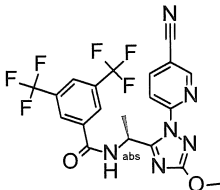


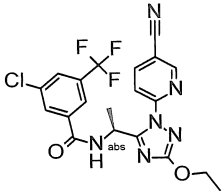
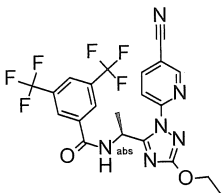
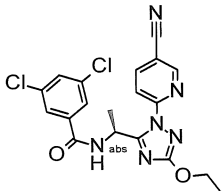
Bảng 1

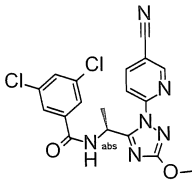
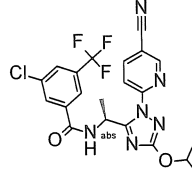
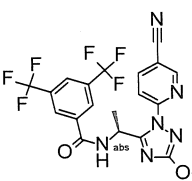
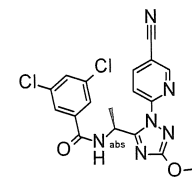
Ví dụ	Cấu trúc ²⁾	Danh sách đỉnh NMR ¹⁾ hoặc m/z ³
I-1		I-1: ^1H -NMR(600,1 MHz, CD ₃ CN lowT): δ = 8,8607 (4,5); 8,8573 (4,6); 8,3210 (12,7); 8,3067 (3,1); 8,3030 (3,1); 8,1814 (5,2); 8,0566 (4,8); 8,0422 (4,4); 6,2332 (0,4); 6,2216 (1,9); 6,2099 (2,9); 6,1981 (1,9); 6,1864 (0,5); 2,7472 (2,3); 2,7345 (7,3); 2,7219 (7,5); 2,7093 (2,5); 2,2999 (14,8); 2,0769 (0,4); 2,0729 (0,4); 2,0686 (0,4); 2,0641 (0,3); 1,9863 (2,8); 1,9782 (2,3); 1,9739 (3,0); 1,9703 (24,4); 1,9662 (44,6); 1,9621 (65,6); 1,9580 (45,7); 1,9539 (23,4); 1,9456 (0,5); 1,8470 (0,4); 1,6718 (11,5); 1,6601 (11,5); 1,2984 (7,9); 1,2857 (16,0); 1,2731 (7,7); 0,0053 (0,4); -0,0001 (13,4); -0,0056 (0,4)
I-2		I-2: ^1H -NMR(600,1 MHz, CD ₃ CN lowT): δ = 8,8543 (4,9); 8,8507 (5,0); 8,3168 (2,7); 8,3133 (2,7); 8,3024 (3,0); 8,2989 (3,0); 8,0480 (5,2); 8,0336 (4,8); 7,9934 (1,7); 7,9815 (1,7); 7,7236 (11,4); 7,7206 (12,4); 7,6284 (3,2); 7,6255 (5,7); 7,6226 (3,0); 6,1811 (0,5); 6,1694 (2,0); 6,1576 (3,1); 6,1459 (2,1); 6,1341 (0,5); 2,7554 (2,4); 2,7428 (7,4); 2,7302 (7,6); 2,7175 (2,6); 2,3024 (9,4); 2,0730 (0,3); 2,0639 (0,4); 1,9864 (3,2); 1,9780 (2,0); 1,9703 (19,7); 1,9663 (35,8); 1,9621 (52,4); 1,9581 (36,7); 1,9540 (18,9); 1,9455 (0,4);

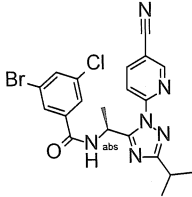
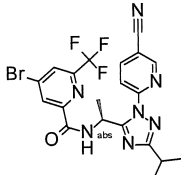
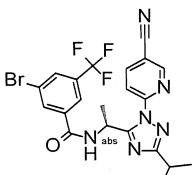
		1,6326 (12,2); 1,6210 (12,2); 1,3050 (7,9); 1,2923 (16,0); 1,2797 (7,7); 0,0047 (0,4); -0,0001 (10,2); -0,0053 (0,4)
I-3		I-3: $^1\text{H-NMR}$(600,1 MHz, CD_3CN lowT): δ= 8,8618 (5,0); 8,8582 (5,2); 8,3660 (1,3); 8,3551 (1,3); 8,3249 (2,8); 8,3214 (2,8); 8,3105 (3,1); 8,3070 (3,2); 8,0628 (5,4); 8,0484 (4,9); 8,0063 (5,2); 7,9857 (5,5); 7,8591 (4,9); 6,2398 (0,5); 6,2282 (2,0); 6,2164 (3,1); 6,2047 (2,0); 6,1930 (0,5); 2,7647 (2,4); 2,7521 (7,4); 2,7395 (7,6); 2,7269 (2,6); 2,3169 (11,0); 1,9882 (6,7); 1,9798 (0,8); 1,9721 (7,3); 1,9681 (13,3); 1,9640 (19,6); 1,9599 (13,8); 1,9558 (7,2); 1,6565 (12,0); 1,6449 (12,1); 1,3051 (8,0); 1,2925 (16,0); 1,2799 (7,9); -0,0001 (3,5)
I-4		I-4: $^1\text{H-NMR}$(600,1 MHz, CD_3CN lowT): δ= 8,8433 (6,5); 8,8411 (5,9); 8,8398 (6,8); 8,3169 (15,1); 8,3065 (3,7); 8,3030 (3,7); 8,2920 (3,9); 8,2886 (4,0); 8,1814 (6,3); 8,1403 (1,7); 8,1292 (1,8); 8,0359 (7,1); 8,0215 (6,4); 6,2055 (0,6); 6,1939 (2,6); 6,1822 (4,1); 6,1705 (2,7); 6,1588 (0,6); 2,3035 (22,9); 2,2697 (0,3); 2,0474 (0,7); 2,0393 (1,5); 2,0327 (1,8); 2,0255 (3,2); 2,0178 (2,0); 2,0118 (1,7); 2,0037 (0,8); 1,9869 (2,1); 1,9787 (1,7); 1,9707 (18,5); 1,9668 (34,0); 1,9627 (50,2); 1,9586 (35,8); 1,9546 (18,8); 1,6413 (15,9); 1,6297 (16,0); 1,0063 (3,8); 1,0027 (5,5); 0,9925 (3,7); 0,9888 (5,7); 0,9705 (0,9); 0,9509 (1,1); 0,9435 (1,3); 0,9339 (2,5); 0,9317 (2,3); 0,9266 (2,8); 0,9091 (2,5); 0,9057 (1,9); 0,9019 (2,3); 0,8903 (1,4); 0,8839 (0,7); -0,0001 (9,5); -0,0051 (0,4)
I-5		I-5: $^1\text{H-NMR}$(600,1 MHz, CD_3CN lowT): δ= 8,8352 (6,1); 8,8332 (5,9); 8,8317 (6,4); 8,3013 (3,3); 8,2978 (3,4); 8,2869 (3,6); 8,2835 (3,8); 8,0257 (6,7); 8,0113 (6,0); 7,8903 (2,5); 7,8782 (2,5); 7,7191 (13,4); 7,7165 (16,0); 7,6331 (6,8); 6,1456 (0,6); 6,1340 (2,6); 6,1223 (4,0); 6,1106 (2,6); 6,0989 (0,6); 2,3021 (16,9); 2,0765 (0,3); 2,0733 (0,4); 2,0678 (0,3); 2,0639 (0,3); 2,0507 (0,7); 2,0427 (1,5); 2,0359 (1,8); 2,0289 (3,0); 2,0213 (1,9); 2,0152 (1,6); 2,0072 (0,8); 1,9865 (2,6); 1,9783 (2,0); 1,9704 (20,6); 1,9664 (37,9); 1,9623 (55,9); 1,9583 (39,9); 1,9543 (20,9); 1,8472 (0,3); 1,6031 (15,4); 1,5915 (15,4); 1,4588 (0,4); 1,4475 (0,4); 1,1080 (0,4); 1,0970 (0,4);

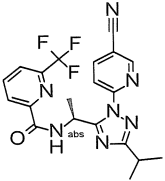
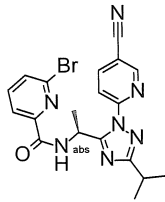
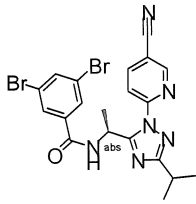
		1,0086 (5,2); 0,9946 (5,4); 0,9759 (0,7); 0,9544 (1,0); 0,9470 (1,1); 0,9372 (3,1); 0,9293 (3,2); 0,9205 (2,3); 0,9174 (2,4); 0,9126 (2,3); 0,9089 (2,3); 0,8990 (1,2); 0,8929 (0,6); -0,0001 (10,9)
I-6		I-6: $^1\text{H-NMR}$(600,1 MHz, CD_3CN lowT): δ= 8,8392 (6,8); 8,8370 (6,6); 8,8356 (7,1); 8,3040 (3,6); 8,3004 (3,8); 8,2896 (4,0); 8,2860 (4,3); 8,1811 (1,8); 8,1706 (1,9); 8,0304 (7,3); 8,0157 (12,8); 7,9921 (7,6); 7,8805 (6,7); 6,1917 (0,6); 6,1801 (2,7); 6,1684 (4,2); 6,1566 (2,7); 6,1450 (0,6); 2,3133 (11,3); 2,0520 (0,7); 2,0440 (1,6); 2,0371 (2,0); 2,0302 (3,2); 2,0226 (2,0); 2,0165 (1,7); 2,0084 (0,8); 1,9881 (1,4); 1,9800 (1,0); 1,9721 (9,7); 1,9680 (18,1); 1,9639 (26,7); 1,9598 (19,2); 1,9558 (10,1); 1,6258 (15,9); 1,6143 (16,0); 1,0181 (0,4); 1,0059 (5,2); 1,0016 (6,3); 0,9920 (4,9); 0,9877 (6,6); 0,9750 (0,8); 0,9716 (0,8); 0,9621 (0,4); 0,9535 (1,2); 0,9452 (1,3); 0,9379 (3,0); 0,9342 (2,7); 0,9299 (3,2); 0,9254 (3,4); 0,9198 (3,1); 0,9118 (2,8); 0,9018 (1,1); 0,8951 (0,8); -0,0001 (4,7)
I-7		I-7: $^1\text{H-NMR}$(600,1 MHz, CD_3CN lowT): δ= 8,8537 (4,0); 8,8519 (4,1); 8,8504 (4,3); 8,3219 (10,1); 8,3136 (2,2); 8,3103 (2,3); 8,2990 (2,3); 8,2959 (2,5); 8,2020 (4,2); 8,0523 (4,4); 8,0379 (4,0); 8,0163 (1,8); 8,0044 (1,8); 6,2003 (0,4); 6,1889 (1,7); 6,1773 (2,6); 6,1657 (1,7); 6,1540 (0,4); 3,0523 (0,7); 3,0408 (1,7); 3,0293 (2,3); 3,0178 (1,7); 3,0061 (0,7); 2,2944 (73,0); 2,2614 (1,2); 2,0798 (0,7); 2,0760 (1,0); 2,0726 (1,1); 2,0672 (1,1); 2,0635 (1,0); 1,9856 (7,0); 1,9765 (6,3); 1,9694 (60,1); 1,9656 (110,0); 1,9615 (161,8); 1,9576 (117,2); 1,9537 (62,1); 1,8539 (0,4); 1,8504 (0,6); 1,8464 (0,9); 1,8426 (0,7); 1,8387 (0,4); 1,6637 (10,2); 1,6522 (10,2); 1,3103 (16,0); 1,2988 (15,7); -0,0001 (31,4)
I-8		I-8: $^1\text{H-NMR}$(600,1 MHz, CD_3CN lowT): δ= 8,8522 (3,8); 8,8489 (4,0); 8,3132 (2,0); 8,3101 (2,1); 8,2989 (2,2); 8,2958 (2,3); 8,0508 (4,1); 8,0367 (7,3); 7,9913 (5,3); 7,9074 (4,0); 6,1871 (0,4); 6,1754 (1,6); 6,1637 (2,5); 6,1520 (1,6); 6,1403 (0,4); 3,0552 (0,6); 3,0437 (1,6); 3,0321 (2,2); 3,0206 (1,7); 3,0091 (0,7); 2,3089 (9,2); 1,9867 (1,3); 1,9783 (1,1); 1,9705 (11,1); 1,9667 (20,3); 1,9627 (29,7); 1,9588 (21,3); 1,9548

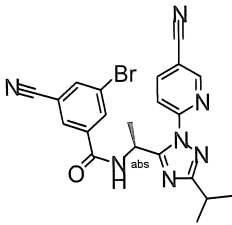
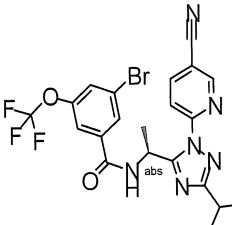
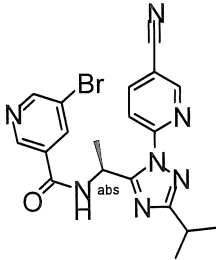
		(11,3); 1,6474 (9,5); 1,6358 (9,6); 1,3113 (16,0); 1,2997 (15,9); -0,0001 (5,8)
I-9		I-9: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,5079 (3,6); 9,4906 (3,7); 9,0941 (6,7); 9,0888 (6,6); 8,6228 (4,9); 8,6173 (4,7); 8,6014 (5,3); 8,5958 (5,2); 8,3154 (0,5); 8,1465 (6,9); 8,0904 (9,1); 8,0825 (11,2); 8,0706 (7,0); 8,0694 (6,9); 7,3625 (3,1); 7,2308 (7,6); 7,0992 (3,6); 6,1051 (0,6); 6,0879 (2,9); 6,0706 (4,6); 6,0533 (2,9); 6,0359 (0,6); 3,3244 (150,9); 3,3045 (0,5); 2,8919 (2,0); 2,7321 (1,7); 2,6906 (1,6); 2,6808 (0,5); 2,6765 (1,0); 2,6719 (1,4); 2,6674 (1,0); 2,6631 (0,5); 2,5254 (3,8); 2,5207 (5,6); 2,5120 (81,4); 2,5075 (168,0); 2,5030 (222,3); 2,4984 (158,0); 2,4939 (74,5); 2,3387 (0,4); 2,3344 (0,9); 2,3299 (1,3); 2,3252 (0,9); 2,3206 (0,4); 2,0868 (8,5); 1,6780 (16,0); 1,6606 (15,9); 1,3979 (12,9); 0,1459 (0,6); 0,0081 (4,6); -0,0001 (152,8); -0,0085 (4,7); -0,1495 (0,6)
I-10		I-10: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, CD_3CN): δ= 8,8127 (1,8); 8,8089 (1,8); 8,2774 (1,4); 8,2720 (1,3); 8,2558 (1,5); 8,2503 (1,4); 8,0352 (1,9); 7,9870 (3,3); 7,9652 (1,6); 7,8784 (1,7); 7,7990 (0,5); 7,7860 (0,5); 6,1764 (0,9); 6,1587 (1,3); 6,1408 (0,9); 4,0677 (0,5); 4,0498 (0,5); 3,9955 (16,0); 2,4674 (0,4); 2,4625 (0,6); 2,4581 (0,4); 2,1462 (83,4); 2,1192 (0,6); 2,1131 (0,9); 2,1070 (1,0); 2,1007 (0,7); 2,0945 (0,4); 1,9715 (2,5); 1,9639 (4,2); 1,9575 (6,7); 1,9520 (58,0); 1,9458 (109,7); 1,9396 (153,0); 1,9334 (104,8); 1,9273 (53,4); 1,7742 (0,6); 1,7681 (0,9); 1,7618 (0,6); 1,6495 (6,2); 1,6322 (6,2); 1,4369 (1,5); 1,2215 (0,6); 1,2037 (1,1); 1,1859 (0,6); 0,1458 (2,7); 0,0404 (0,4); 0,0177 (1,4); 0,0079 (26,0); -0,0002 (568,7); -0,0086 (24,2); -0,0303 (0,9); -0,1495 (2,7)
I-11		I-11: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, CD_3CN): δ= 8,8157 (0,5); 8,8106 (2,3); 8,3125 (5,3); 8,2782 (0,5); 8,2732 (1,3); 8,2566 (1,5); 8,2516 (0,4); 8,1497 (2,2); 7,9904 (2,4); 7,9687 (2,1); 7,9112 (0,7); 7,8933 (0,7); 6,2068 (1,1); 6,1892 (1,6); 6,1714 (1,1); 3,9954 (16,0); 2,1340 (10,9); 2,0134 (1,0); 1,9713 (0,9); 1,9637 (0,9); 1,9518 (10,8); 1,9459 (20,3); 1,9399 (28,1); 1,9338 (19,7); 1,9276 (0,4); 1,6677 (7,0); 1,6503 (7,0); 1,4361

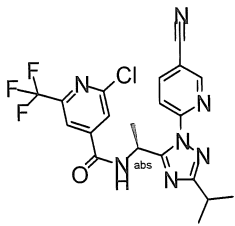
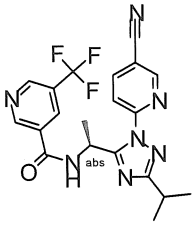
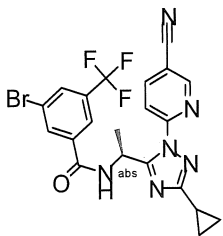
		(9,8); 1,2034 (0,4); 0,1454 (0,6); -0,0003 (105,2); -0,1499 (0,6)
I-12		I-12: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, CD_3CN): δ= 8,8100 (1,8); 8,8082 (1,9); 8,8045 (1,9); 8,8027 (1,7); 8,2677 (1,4); 8,2622 (1,4); 8,2461 (1,6); 8,2405 (1,6); 8,0296 (0,9); 7,9886 (0,35); 7,9720 (2,0); 7,9702 (2,0); 7,9504 (0,35); 7,9486 (1,7); 7,8744 (1,8); 7,7994 (0,5); 7,7825 (0,9); 6,1783 (1,0); 6,1605 (1,3); 6,1424 (1,0); 4,3823 (1,2); 4,3646 (3,9); 4,3470 (3,9); 4,3294 (1,2); 2,1350 (0,81); 1,9718 (0,4); 1,9642 (0,9); 1,9580 (1,6); 1,9523 (12,2); 1,9461 (22,8); 1,9400 (31,5); 1,9338 (0,81); 1,9276 (11,0); 1,6459 (6,6); 1,6286 (6,6); 1,4365 (16,0); 1,4086 (4,2); 1,3910 (8,6); 1,3734 (4,1); 0,1459 (0,5); 0,0079 (5,5); -0,0002 (115,2); -0,0086 (4,8); -0,1495 (0,5)
I-13		I-13: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, CD_3CN): δ= 8,8118 (2,4); 8,8065 (2,4); 8,3153 (5,5); 8,2693 (1,4); 8,2643 (1,4); 8,2476 (1,6); 8,2427 (1,5); 8,1518 (2,3); 7,9756 (2,6); 7,9540 (2,2); 7,9013 (0,7); 7,8858 (0,7); 6,2054 (1,1); 6,1879 (1,7); 6,1703 (1,1); 4,3817 (1,3); 4,3641 (3,9); 4,3465 (3,9); 4,3290 (1,3); 2,1329 (19,4); 1,9710 (0,9); 1,9629 (1,4); 1,9513 (15,8); 1,9454 (29,1); 1,9395 (40,1); 1,9335 (27,9); 1,9273 (14,4); 1,6643 (7,2); 1,6469 (7,1); 1,4362 (16,0); 1,4065 (4,1); 1,3889 (8,1); 1,3713 (4,0); 1,2036 (0,3); 0,1453 (0,8); 0,0064 (9,1); -0,0002 (152,6); -0,1502 (0,8)
I-14		I-14: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, CD_3CN): δ= 8,8060 (1,9); 8,8017 (1,9); 8,2659 (1,3); 8,2604 (1,3); 8,2443 (1,5); 8,2388 (1,5); 7,9656 (2,0); 7,9440 (1,8); 7,7210 (0,9); 7,7163 (0,35); 7,6843 (0,5); 7,6798 (0,5); 7,6729 (0,35); 7,6154 (1,6); 7,6108 (2,6); 7,6062 (1,3); 6,1495 (0,9); 6,1315 (1,4); 6,1138 (1,0); 4,3821 (1,2); 4,3645 (3,7); 4,3468 (3,8); 4,3292 (1,2); 2,1456 (18,6); 1,9714 (0,81); 1,9638 (1,2); 1,9520 (15,6); 1,9458 (29,2); 1,9397 (40,4); 1,9335 (27,9); 1,9274 (14,3); 1,8850 (0,81); 1,6277 (6,6); 1,6104 (6,6); 1,4364 (16,0); 1,4108 (4,0); 1,3932 (8,0); 1,3755 (3,8); 0,1456 (0,8); 0,0200 (0,4); 0,0075 (7,4); -0,0003 (156,5); -0,0085 (7,2); -0,1498 (0,8)

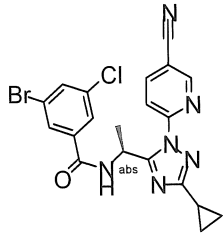
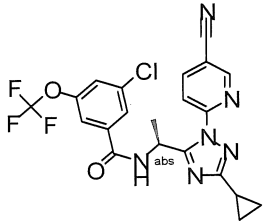
I-15		I-15: $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ = 9,3058 (0,5); 9,2886 (1,3); 9,0149 (2,3); 9,0095 (0,5); 8,5439 (1,6); 8,5384 (1,5); 8,5223 (0,4); 8,5168 (1,7); 7,9778 (2,4); 7,9562 (2,3); 7,8587 (5,8); 7,8539 (7,3); 7,8217 (1,9); 7,8170 (2,7); 7,8125 (1,3); 6,0550 (1,0); 6,0377 (1,6); 6,0204 (1,0); 3,9627 (16,0); 3,3225 (9,3); 2,5256 (0,7); 2,5120 (15,2); 2,5077 (30,6); 2,5032 (40,2); 2,4987 (0,4); 2,4943 (14,2); 2,0756 (2,5); 1,6048 (5,5); 1,5874 (5,5); 0,0079 (1,9); -0,0002 (48,8); -0,0085 (1,7)
I-16		I-16: $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, CD_3CN): δ = 8,8067 (3,4); 8,8026 (3,4); 8,2637 (2,2); 8,2582 (2,2); 8,2420 (2,6); 8,2365 (2,5); 8,0367 (3,5); 7,9952 (3,6); 7,9694 (3,6); 7,9477 (3,1); 7,8736 (3,4); 7,8428 (0,8); 6,1963 (0,4); 6,1787 (1,5); 6,1606 (2,2); 6,1429 (1,6); 6,1254 (0,4); 5,0090 (0,7); 4,9936 (1,8); 4,9783 (2,4); 4,9629 (1,8); 4,9475 (0,7); 2,1614 (41,0); 1,9651 (0,9); 1,9532 (14,5); 1,9470 (27,9); 1,9409 (39,6); 1,9347 (27,2); 1,9285 (13,9); 1,6431 (11,5); 1,6258 (11,4); 1,3906 (12,0); 1,3760 (16,0); 1,3628 (11,9); 1,2682 (1,0); 0,0079 (0,8); -0,0002 (22,0); -0,0084 (0,8)
I-17		I-17: $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, CD_3CN): δ = 8,8098 (3,3); 8,8055 (3,4); 8,3218 (7,4); 8,2650 (2,3); 8,2595 (2,2); 8,2434 (2,6); 8,2379 (2,5); 8,1501 (3,0); 7,9753 (3,5); 7,9741 (3,5); 7,9536 (3,6); 7,9524 (3,6); 7,9350 (0,8); 6,2258 (0,4); 6,2080 (1,6); 6,1903 (2,2); 6,1722 (1,6); 6,1547 (0,4); 5,4469 (0,7); 5,0093 (0,7); 4,9938 (1,9); 4,9784 (2,5); 4,9630 (1,9); 4,9477 (0,8); 2,1495 (28,1); 2,0867 (0,6); 1,9644 (1,0); 1,9526 (15,7); 1,9464 (29,7); 1,9403 (41,2); 1,9341 (28,2); 1,9280 (14,3); 1,6622 (11,4); 1,6449 (11,3); 1,3891 (11,3); 1,3763 (16,0); 1,3613 (11,8); 1,2683 (0,4); 0,0079 (0,8); -0,0002 (21,3); -0,0084 (0,8)
I-18		I-18: $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ = 9,2762 (2,4); 9,2592 (2,4); 9,0010 (4,3); 8,9970 (4,1); 8,5287 (2,5); 8,5234 (2,4); 8,5072 (2,6); 8,5017 (2,5); 8,3152 (0,5); 7,9550 (4,0); 7,9334 (3,8); 7,8548 (9,3); 7,8503 (11,5); 7,8238 (3,6); 7,8194 (4,6); 7,6479 (0,6); 7,6431 (0,5); 6,0579 (0,4); 6,0401 (1,6); 6,0228 (2,5); 6,0056 (1,6);

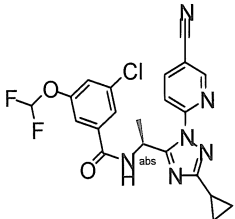
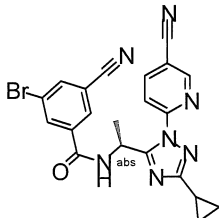
		5,9890 (0,4); 5,4735 (0,6); 4,9476 (0,7); 4,9324 (1,8); 4,9170 (2,4); 4,9017 (1,8); 4,8861 (0,7); 3,3226 (108,3); 2,6714 (1,7); 2,5024 (285,4); 2,3290 (1,7); 1,9890 (0,4); 1,5981 (9,1); 1,5807 (9,0); 1,3979 (11,3); 1,3609 (11,4); 1,3433 (16,0); 1,3265 (11,4); -0,0001 (36,1)
I-19		I-19: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,2993 (2,3); 9,2815 (2,3); 9,0238 (4,1); 9,0200 (4,0); 9,0183 (4,1); 8,5404 (3,1); 8,5349 (3,0); 8,5189 (3,4); 8,5133 (3,4); 8,0298 (3,8); 8,0282 (4,3); 8,0084 (3,6); 8,0067 (4,1); 7,9629 (2,8); 7,9588 (5,5); 7,9550 (4,0); 7,9225 (3,2); 7,9178 (5,8); 7,9133 (3,2); 7,8581 (3,6); 7,8537 (5,0); 7,8498 (3,3); 6,0859 (0,3); 6,0685 (1,7); 6,0509 (2,7); 6,0333 (1,7); 6,0159 (0,4); 5,7574 (0,4); 3,3263 (28,3); 3,0531 (0,8); 3,0357 (2,1); 3,0184 (2,9); 3,0011 (2,2); 2,9838 (0,9); 2,6775 (0,3); 2,6728 (0,5); 2,6683 (0,4); 2,5263 (1,7); 2,5216 (2,6); 2,5128 (27,8); 2,5084 (56,1); 2,5038 (76,0); 2,4992 (58,6); 2,4948 (30,8); 2,3352 (0,3); 2,3307 (0,5); 2,3262 (0,4); 1,6130 (9,1); 1,5956 (9,2); 1,3972 (0,8); 1,2965 (15,5); 1,2904 (16,0); 1,2792 (15,6); 1,2731 (15,7); 0,0080 (0,9); -0,0002 (28,6); -0,0085 (1,3)
I-20		I-20: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, CD_3CN): δ= 8,9047 (1,8); 8,8997 (1,9); 8,8685 (1,8); 8,8637 (1,9); 8,4677 (0,6); 8,4488 (0,5); 8,4077 (1,9); 8,4029 (2,0); 8,2911 (1,3); 8,2856 (1,3); 8,2695 (1,5); 8,2640 (1,5); 8,0477 (2,1); 8,0262 (1,8); 6,1965 (0,9); 6,1792 (1,1); 6,1768 (1,1); 6,1596 (1,0); 3,0869 (0,4); 3,0695 (1,1); 3,0521 (1,5); 3,0348 (1,1); 3,0176 (0,5); 2,1427 (49,7); 2,1076 (0,3); 1,9646 (1,6); 1,9584 (1,8); 1,9527 (16,3); 1,9465 (30,8); 1,9404 (43,7); 1,9342 (30,7); 1,9280 (16,1); 1,6156 (6,9); 1,5986 (6,9); 1,4368 (0,4); 1,3337 (16,0); 1,3164 (15,7); -0,0002 (4,1)
I-21		I-21: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, CD_3CN): δ= 8,8313 (2,5); 8,8298 (2,8); 8,8260 (2,9); 8,8244 (2,7); 8,2814 (2,0); 8,2759 (2,0); 8,2599 (2,3); 8,2543 (2,3); 8,1611 (0,95); 8,0361 (2,9); 8,0346 (3,0); 8,0125 (8,2); 7,8221 (0,95); 7,8041 (0,37); 6,1879 (0,4); 6,1705 (1,5); 6,1526 (2,0); 6,1347 (1,5); 6,1173 (0,4); 5,4475 (0,7); 3,0714 (0,6); 3,0540 (1,5); 3,0367 (2,0); 3,0194 (1,6); 3,0021 (0,6); 2,6808 (0,3); 2,1583 (39,8); 1,9727 (0,6); 1,9657 (0,8); 1,9593 (1,0); 1,9537 (8,5); 1,9476

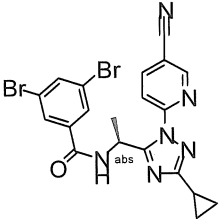
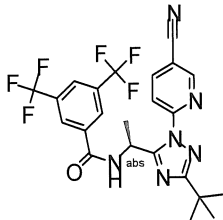
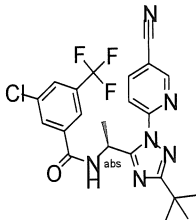
		(16,1); 1,9414 (22,8); 1,9352 (16,1); 1,9291 (8,5); 1,6479 (9,2); 1,6306 (9,2); 1,4358 (2,2); 1,3252 (16,0); 1,3078 (15,6); 1,2743 (0,6); 1,2581 (1,0); 1,2416 (0,6); 1,2235 (0,6); 1,2046 (0,4); -0,0002 (0,37)
I-22		I-22: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, CD_3CN): δ= 9,0760 (0,4); 9,0567 (0,4); 8,8845 (1,7); 8,8831 (1,8); 8,8791 (1,9); 8,8777 (1,8); 8,3151 (1,2); 8,2954 (1,7); 8,2880 (1,5); 8,2825 (1,4); 8,2664 (1,7); 8,2609 (1,7); 8,1979 (0,9); 8,1785 (1,7); 8,1589 (0,8); 8,0547 (2,0); 8,0531 (2,1); 8,0331 (1,7); 8,0315 (1,7); 7,9730 (1,6); 7,9710 (1,7); 7,9534 (1,4); 7,9515 (1,4); 6,1796 (1,0); 6,1624 (1,0); 6,1595 (1,1); 6,1423 (1,0); 3,1004 (0,4); 3,0830 (1,1); 3,0657 (1,4); 3,0484 (1,1); 3,0311 (0,4); 2,1424 (18,3); 1,9657 (0,7); 1,9596 (0,7); 1,9537 (6,8); 1,9476 (12,7); 1,9414 (18,0); 1,9352 (12,6); 1,9291 (6,5); 1,6571 (7,0); 1,6400 (7,0); 1,3432 (16,0); 1,3259 (15,8); -0,0002 (1,6)
I-23		I-23: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, CD_3CN): δ= 8,9129 (2,4); 8,9077 (2,5); 8,8939 (0,5); 8,2895 (1,3); 8,2840 (1,3); 8,2678 (1,6); 8,2624 (1,6); 8,0513 (2,7); 8,0366 (2,0); 8,0348 (2,0); 8,0294 (2,0); 7,8437 (1,2); 7,8243 (2,5); 7,8051 (1,6); 7,7437 (2,2); 7,7423 (2,2); 7,7238 (1,4); 6,1638 (1,0); 6,1465 (1,1); 6,1434 (1,1); 6,1261 (1,0); 3,1025 (0,4); 3,0851 (1,1); 3,0678 (1,5); 3,0504 (1,2); 3,0332 (0,5); 2,1464 (17,6); 1,9657 (0,6); 1,9595 (0,7); 1,9539 (6,2); 1,9477 (11,6); 1,9415 (16,4); 1,9353 (11,4); 1,9292 (6,0); 1,6367 (7,2); 1,6196 (7,2); 1,4358 (0,8); 1,3452 (16,0); 1,3279 (15,8); -0,0002 (1,5)
I-24		I-24: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, CD_3CN): δ= 8,8293 (2,8); 8,8254 (2,9); 8,2826 (2,0); 8,2770 (2,0); 8,2610 (2,4); 8,2554 (2,3); 8,0310 (3,0); 8,0296 (3,0); 8,0094 (0,95); 8,0081 (2,6); 7,8926 (7,1); 7,8901 (13,1); 7,7639 (0,95); 7,7461 (0,37); 6,1562 (0,4); 6,1388 (1,5); 6,1210 (2,1); 6,1031 (1,5); 6,0857 (0,4); 3,0723 (0,6); 3,0550 (1,6); 3,0377 (2,2); 3,0203 (1,7); 3,0030 (0,7); 2,4713 (0,5); 2,4665 (0,6); 2,4620 (0,5); 2,1862 (122,7); 2,1147 (0,4); 2,1084 (0,4); 2,1024 (0,3); 1,9654 (2,2); 1,9591 (2,6); 1,9535 (22,4); 1,9474 (42,4); 1,9412 (59,7); 1,9350 (41,7); 1,9289 (21,5); 1,7696 (0,4); 1,6279 (9,9); 1,6106 (9,8); 1,3263

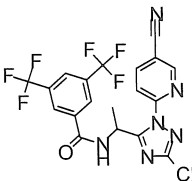
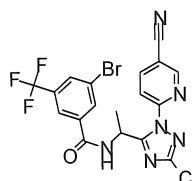
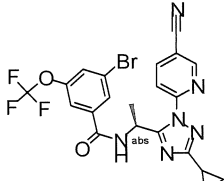
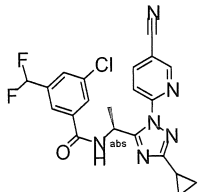
		(16,0); 1,3089 (15,7); 1,2669 (0,5); 1,2498 (0,6); -0,0002 (0,37)
I-25		I-25: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, CD_3CN): δ= 8,8317 (2,8); 8,8301 (2,7); 8,8262 (2,9); 8,2836 (2,1); 8,2780 (2,0); 8,2620 (2,4); 8,2564 (2,3); 8,1783 (2,3); 8,1748 (3,4); 8,1708 (1,9); 8,0809 (3,7); 8,0625 (2,7); 8,0588 (3,5); 8,0545 (1,8); 8,0376 (3,2); 8,0160 (2,7); 7,7881 (0,7); 6,1813 (0,4); 6,1641 (1,5); 6,1464 (2,1); 6,1285 (1,4); 6,1111 (0,4); 5,4478 (2,7); 3,0721 (0,6); 3,0547 (1,6); 3,0374 (2,2); 3,0201 (1,6); 3,0028 (0,7); 2,6763 (0,4); 2,1687 (20,4); 2,1206 (0,3); 2,1146 (0,3); 2,1084 (0,4); 1,9653 (1,5); 1,9591 (1,8); 1,9534 (15,0); 1,9472 (28,0); 1,9410 (38,8); 1,9348 (26,3); 1,9287 (13,4); 1,6386 (9,7); 1,6213 (9,7); 1,3289 (16,0); 1,3116 (15,7); 1,2737 (0,9); 1,2610 (1,0); 1,2577 (1,0); 1,2445 (0,8); 1,2219 (0,4); -0,0002 (1,6)
I-26		I-26: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, CD_3CN): δ= 8,8284 (2,6); 8,8268 (2,7); 8,8230 (2,8); 8,2817 (1,9); 8,2761 (1,8); 8,2601 (2,2); 8,2545 (2,1); 8,0342 (2,9); 8,0326 (0,9); 8,0126 (0,35); 8,0110 (2,3); 7,9276 (3,6); 7,7995 (0,35); 7,7867 (0,8); 7,6618 (2,4); 7,6409 (2,5); 6,1658 (0,9); 6,1483 (1,4); 6,1306 (2,0); 6,1126 (1,4); 6,0952 (0,4); 3,0722 (0,6); 3,0548 (1,5); 3,0374 (2,0); 3,0201 (0,81); 3,0028 (0,6); 2,4652 (0,4); 2,1714 (56,7); 2,1082 (0,3); 1,9652 (1,8); 1,9589 (2,4); 1,9533 (0,81); 1,9472 (34,0); 1,9410 (47,3); 1,9348 (32,8); 1,9287 (17,0); 1,6391 (8,9); 1,6218 (8,9); 1,3268 (16,0); 1,3095 (15,7); 1,2702 (0,5); 1,2544 (0,6); 1,2387 (0,4); -0,0002 (2,4)
I-27		I-27: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, CD_3CN): δ= 8,8576 (2,8); 8,8532 (2,8); 8,8355 (2,4); 8,8316 (2,4); 8,7879 (2,7); 8,7823 (2,8); 8,2830 (1,6); 8,2775 (1,6); 8,2614 (2,0); 8,2557 (3,3); 8,2498 (2,9); 8,2450 (1,5); 8,0380 (2,6); 8,0164 (2,2); 7,7687 (0,6); 6,1774 (1,3); 6,1594 (1,8); 6,1417 (1,3); 6,1243 (0,3); 3,0740 (0,5); 3,0567 (1,3); 3,0394 (1,8); 3,0221 (1,4); 3,0048 (0,6); 2,1483 (17,6); 2,1201 (0,4); 2,1138 (0,3); 2,1076 (0,4); 1,9647 (1,6); 1,9527 (16,8); 1,9465 (31,5); 1,9404 (44,2); 1,9342 (30,7); 1,9280 (16,0); 1,6430 (8,4); 1,6257 (8,4); 1,3291 (16,0); 1,3117 (15,7); -0,0002 (2,2)

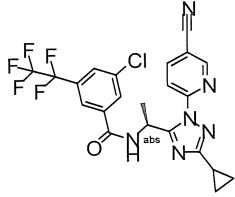
I-28		I-28: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, CD_3CN): δ= 8,8258 (2,3); 8,8242 (2,3); 8,8204 (2,4); 8,2857 (1,6); 8,2802 (1,6); 8,2641 (1,9); 8,2586 (1,8); 8,0425 (2,8); 8,0407 (2,6); 8,0209 (5,6); 8,0065 (0,4); 7,9832 (0,6); 7,9618 (3,3); 6,1847 (1,2); 6,1670 (1,7); 6,1492 (1,1); 3,0740 (0,5); 3,0567 (1,4); 3,0393 (1,9); 3,0220 (1,4); 3,0046 (0,6); 2,1646 (16,2); 1,9655 (1,0); 1,9591 (1,1); 1,9536 (9,4); 1,9474 (17,6); 1,9412 (24,6); 1,9351 (16,9); 1,9289 (8,6); 1,6555 (8,4); 1,6382 (8,4); 1,4362 (8,3); 1,3293 (16,0); 1,3119 (15,6); 1,2846 (0,5); 1,2688 (1,0); 1,2522 (0,6); -0,0002 (1,1)
I-30		I-30: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, CD_3CN): δ= 9,1570 (2,4); 9,1529 (2,5); 9,0173 (2,2); 9,0146 (2,2); 8,8403 (2,5); 8,8389 (2,5); 8,8349 (2,6); 8,3761 (2,4); 8,2869 (1,8); 8,2814 (1,7); 8,2653 (2,1); 8,2598 (2,1); 8,0440 (2,9); 8,0424 (2,8); 8,0224 (2,5); 8,0208 (2,4); 7,9973 (0,6); 6,2325 (0,3); 6,2150 (1,4); 6,1972 (2,0); 6,1794 (1,4); 6,1619 (0,3); 3,0756 (0,6); 3,0582 (1,5); 3,0409 (2,1); 3,0236 (1,6); 3,0062 (0,6); 2,7288 (5,9); 2,2102 (28,8); 1,9671 (0,6); 1,9608 (0,7); 1,9551 (6,2); 1,9490 (11,6); 1,9428 (16,2); 1,9366 (11,2); 1,9304 (5,7); 1,6646 (9,2); 1,6473 (9,1); 1,4354 (0,4); 1,3285 (16,0); 1,3112 (15,7); 1,2840 (0,5); 1,2683 (0,8); 1,2537 (0,5); -0,0002 (0,7)
I-31		I-31: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,4063 (4,0); 9,3887 (4,1); 9,0115 (7,4); 9,0077 (6,9); 9,0060 (7,0); 8,5330 (5,2); 8,5274 (5,1); 8,5115 (5,6); 8,5059 (5,7); 8,3160 (1,1); 8,2885 (7,5); 8,1724 (6,9); 8,1232 (7,2); 8,0108 (6,9); 8,0092 (7,5); 7,9893 (6,4); 7,9876 (7,0); 6,0799 (0,6); 6,0625 (2,9); 6,0450 (4,6); 6,0276 (3,0); 6,0103 (0,6); 3,9051 (0,7); 3,3250 (385,6); 2,6757 (2,5); 2,6712 (3,4); 2,6667 (2,6); 2,5246 (10,0); 2,5110 (203,7); 2,5067 (410,1); 2,5022 (544,2); 2,4977 (405,5); 2,4933 (203,1); 2,3335 (2,4); 2,3291 (3,3); 2,3246 (2,4); 2,0869 (0,8); 2,0748 (1,8); 2,0660 (1,9); 2,0540 (3,7); 2,0419 (2,2); 2,0333 (1,9); 2,0210 (1,0); 1,6079 (16,0); 1,5905 (16,0); 1,3978 (5,3); 1,2341 (0,3); 1,0302 (0,3); 1,0218 (0,3); 1,0012 (4,7); 0,9959 (6,6); 0,9804 (4,4); 0,9751 (6,8); 0,9562 (0,7); 0,9491 (0,6); 0,9138 (1,0); 0,9019 (1,1); 0,8894 (3,9); 0,8843 (2,1); 0,8772 (4,0); 0,8703 (2,7); 0,8639 (2,9); 0,8577 (2,2); 0,8523 (2,7); 0,8351 (1,2); 0,8267

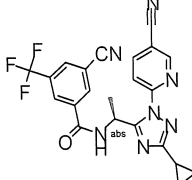
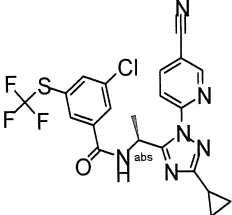
		(0,7); 0,1460 (0,9); 0,0080 (7,6); -0,0002 (232,8); -0,0084 (8,7); -0,1497 (1,0)
I-32		I-32: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,2626 (4,2); 9,2451 (4,4); 9,0095 (7,2); 9,0058 (7,4); 9,0040 (7,1); 8,5331 (4,8); 8,5276 (4,9); 8,5116 (5,2); 8,5061 (5,3); 8,3156 (0,4); 8,0069 (7,3); 7,9868 (6,2); 7,9853 (6,8); 7,9571 (4,9); 7,9533 (9,4); 7,9496 (7,2); 7,9235 (5,2); 7,9189 (9,5); 7,9145 (5,4); 7,8534 (5,9); 7,8493 (8,8); 7,8454 (6,0); 6,0489 (0,6); 6,0316 (2,9); 6,0142 (4,6); 5,9967 (2,9); 5,9793 (0,6); 3,3298 (409,8); 2,6762 (1,3); 2,6718 (1,7); 2,6675 (1,4); 2,5072 (201,7); 2,5028 (269,7); 2,4984 (211,4); 2,3340 (1,2); 2,3298 (1,6); 2,3252 (1,3); 2,0844 (0,8); 2,0725 (1,7); 2,0637 (2,0); 2,0519 (3,6); 2,0398 (2,2); 2,0311 (1,9); 2,0190 (0,9); 1,9893 (0,4); 1,5871 (16,0); 1,5697 (16,0); 1,3975 (14,0); 1,2338 (0,9); 1,0294 (0,3); 1,0214 (0,4); 1,0016 (5,2); 0,9958 (7,2); 0,9808 (4,9); 0,9751 (7,3); 0,9563 (0,8); 0,9498 (0,7); 0,9399 (0,3); 0,9122 (1,0); 0,8999 (1,2); 0,8882 (3,7); 0,8761 (3,8); 0,8697 (3,2); 0,8632 (3,4); 0,8568 (2,5); 0,8510 (3,2); 0,8338 (1,3); 0,8249 (0,8); 0,1459 (0,5); 0,0078 (4,1); -0,0003 (109,3); -0,0082 (5,6); -0,1498 (0,5)
I-33		I-33: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,3249 (4,4); 9,3074 (4,5); 9,0048 (7,2); 8,9995 (7,2); 8,5316 (4,9); 8,5261 (5,0); 8,5100 (5,2); 8,5045 (5,4); 8,3164 (0,5); 8,0082 (7,5); 7,9866 (7,0); 7,9438 (5,4); 7,9399 (9,0); 7,9363 (6,4); 7,7782 (6,2); 7,7169 (6,5); 6,0599 (0,7); 6,0424 (3,0); 6,0250 (4,6); 6,0075 (3,0); 5,9903 (0,6); 3,3250 (135,4); 2,6756 (1,5); 2,6714 (2,1); 2,6671 (1,7); 2,5068 (235,1); 2,5024 (314,6); 2,4980 (247,4); 2,3334 (1,4); 2,3293 (2,0); 2,3248 (1,5); 2,0862 (0,8); 2,0743 (1,8); 2,0654 (2,1); 2,0535 (3,7); 2,0415 (2,3); 2,0330 (2,0); 2,0207 (1,0); 1,9088 (0,6); 1,5999 (16,0); 1,5825 (16,0); 1,3974 (1,7); 1,2341 (1,1); 1,0285 (0,4); 1,0232 (0,5); 1,0018 (5,0); 0,9961 (7,1); 0,9810 (4,7); 0,9753 (7,3); 0,9558 (0,8); 0,9496 (0,7); 0,9296 (0,3); 0,9129 (1,1); 0,9007 (1,4); 0,8886 (3,7); 0,8766 (3,8); 0,8685 (2,8); 0,8628 (3,3); 0,8556 (2,6); 0,8506 (3,2); 0,8334 (1,4); 0,8251 (0,8); 0,1456 (0,6); 0,0072 (5,1); -0,0002 (117,9); -0,0083 (10,3); -0,1498 (0,6)

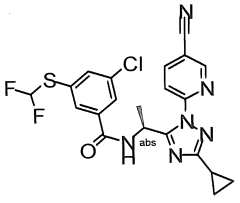
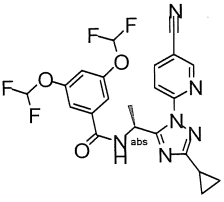
I-34		I-34: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,2457 (3,9); 9,2280 (3,8); 9,0111 (6,2); 9,0098 (6,5); 9,0058 (6,7); 9,0043 (6,2); 8,5335 (5,4); 8,5279 (5,1); 8,5120 (5,7); 8,5064 (5,7); 8,3161 (1,5); 8,0100 (6,9); 8,0085 (7,0); 7,9885 (6,5); 7,9869 (6,5); 7,7640 (5,5); 7,7601 (8,8); 7,7561 (5,8); 7,5460 (6,4); 7,5201 (7,0); 7,5137 (7,6); 7,5086 (3,6); 7,3375 (9,6); 7,1542 (4,7); 6,0565 (0,6); 6,0393 (3,0); 6,0219 (4,7); 6,0044 (3,0); 5,9871 (0,6); 3,3247 (501,0); 2,6800 (1,8); 2,6754 (3,8); 2,6709 (5,4); 2,6664 (3,9); 2,6620 (1,9); 2,6352 (0,4); 2,5244 (15,2); 2,5197 (22,1); 2,5110 (291,2); 2,5065 (599,7); 2,5019 (800,9); 2,4974 (585,2); 2,4928 (282,7); 2,3379 (1,6); 2,3334 (3,5); 2,3288 (5,0); 2,3242 (3,6); 2,3199 (1,6); 2,0835 (0,8); 2,0714 (1,8); 2,0625 (1,8); 2,0505 (3,8); 2,0384 (2,2); 2,0299 (2,0); 2,0176 (1,0); 1,5944 (16,0); 1,5770 (16,0); 1,3978 (9,3); 1,2350 (0,3); 1,0271 (0,3); 1,0198 (0,4); 1,0003 (4,7); 0,9945 (7,0); 0,9795 (4,3); 0,9737 (7,2); 0,9544 (0,7); 0,9484 (0,6); 0,9113 (1,0); 0,8983 (1,1); 0,8867 (3,5); 0,8816 (2,0); 0,8748 (3,4); 0,8692 (2,3); 0,8664 (2,2); 0,8609 (3,0); 0,8540 (2,0); 0,8487 (2,8); 0,8313 (1,2); 0,8225 (0,7); 0,1459 (1,8); 0,0180 (0,5); 0,0080 (13,3); -0,0002 (431,0); -0,0085 (14,2); -0,1495 (1,8)
I-35		I-35: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,3310 (3,2); 9,3135 (3,2); 9,0124 (5,3); 9,0081 (5,6); 8,5336 (4,0); 8,5280 (3,9); 8,5120 (4,3); 8,5065 (4,3); 8,3469 (3,8); 8,3430 (6,5); 8,3390 (4,5); 8,2873 (4,4); 8,2832 (7,4); 8,2790 (4,5); 8,2438 (5,0); 8,2404 (8,0); 8,2369 (4,3); 8,0105 (5,7); 7,9901 (5,2); 7,9889 (5,3); 6,0740 (0,5); 6,0568 (2,3); 6,0394 (3,7); 6,0220 (2,4); 6,0050 (0,5); 3,3254 (61,9); 2,6764 (0,6); 2,6720 (0,8); 2,6676 (0,6); 2,5253 (2,7); 2,5119 (48,9); 2,5075 (98,3); 2,5030 (130,4); 2,4985 (97,2); 2,4941 (49,0); 2,3344 (0,6); 2,3298 (0,8); 2,3253 (0,6); 2,0864 (0,6); 2,0742 (1,4); 2,0655 (1,6); 2,0535 (3,0); 2,0413 (1,8); 2,0328 (1,6); 2,0204 (0,8); 1,9894 (0,6); 1,5969 (12,8); 1,5795 (12,8); 1,3972 (16,0); 1,1755 (0,4); 1,0202 (0,5); 1,0027 (4,3); 0,9977 (5,6); 0,9820 (4,6); 0,9768 (5,4); 0,9611 (0,7); 0,9509 (0,5); 0,9141 (0,8); 0,9020 (0,8); 0,8908 (3,2); 0,8846 (2,0); 0,8782 (3,9); 0,8720 (3,1); 0,8680 (2,9); 0,8557 (2,5); 0,8416 (0,7);

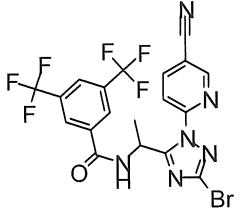
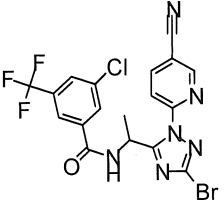
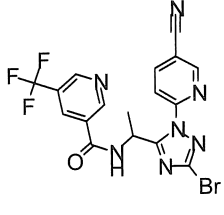
		0,8328 (0,5); 0,0077 (2,0); -0,0004 (59,9); -0,0086 (2,6)
I-36		I-36: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, CD_3CN): δ= 8,8140 (4,3); 8,8102 (4,4); 8,2705 (3,0); 8,2650 (3,0); 8,2489 (3,6); 8,2433 (3,6); 8,0114 (4,5); 8,0098 (4,6); 7,9898 (3,8); 7,9882 (3,8); 7,8988 (2,4); 7,8944 (5,4); 7,8902 (5,0); 7,8759 (15,2); 7,8716 (10,7); 7,6505 (1,3); 7,6333 (1,3); 6,1380 (0,6); 6,1206 (2,2); 6,1025 (3,1); 6,0847 (2,3); 6,0671 (0,6); 2,1369 (34,7); 2,1199 (0,4); 2,1140 (0,4); 2,1076 (0,6); 2,1014 (0,4); 2,0568 (0,7); 2,0444 (1,4); 2,0362 (1,5); 2,0325 (1,1); 2,0238 (2,4); 2,0202 (1,6); 2,0114 (1,5); 2,0032 (1,6); 1,9908 (0,8); 1,9719 (0,5); 1,9646 (3,2); 1,9584 (3,9); 1,9527 (31,5); 1,9465 (59,6); 1,9404 (83,0); 1,9342 (58,1); 1,9280 (30,2); 1,7749 (0,4); 1,7689 (0,5); 1,7628 (0,4); 1,6024 (14,7); 1,5851 (14,9); 1,5676 (0,4); 1,4365 (16,0); 1,0293 (0,3); 1,0208 (0,8); 1,0111 (3,2); 1,0057 (5,5); 0,9979 (1,2); 0,9904 (3,6); 0,9850 (6,0); 0,9691 (1,9); 0,9612 (0,9); 0,9516 (3,4); 0,9454 (2,0); 0,9393 (3,3); 0,9318 (2,3); 0,9280 (2,0); 0,9243 (1,9); 0,9194 (1,5); 0,9152 (1,3); 0,9066 (1,0); 0,8980 (0,5); 0,8925 (0,4); -0,0002 (8,3)
I-37		I-37: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, CD_3CN): δ= 8,8343 (0,6); 8,8325 (0,6); 8,8289 (0,6); 8,8270 (0,6); 8,2990 (1,4); 8,2814 (0,5); 8,2758 (0,5); 8,2598 (0,6); 8,2542 (0,6); 8,1522 (0,6); 8,0533 (0,7); 8,0514 (0,7); 8,0317 (0,6); 8,0299 (0,6); 6,1733 (0,4); 6,1554 (0,3); 2,1594 (20,4); 1,9653 (0,8); 1,9592 (0,7); 1,9533 (6,0); 1,9472 (11,3); 1,9410 (15,8); 1,9348 (10,9); 1,9286 (5,6); 1,6625 (2,2); 1,6452 (2,2); 1,3638 (16,0); -0,0002 (2,1)
I-38		I-38: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, CD_3CN): δ= 8,8310 (0,6); 8,8267 (0,7); 8,2797 (0,5); 8,2741 (0,5); 8,2581 (0,6); 8,2525 (4,2); 8,0477 (0,8); 8,0260 (0,6); 8,0166 (0,7); 7,9692 (0,8); 7,8762 (0,7); 6,1618 (0,4); 6,1440 (0,5); 6,1259 (0,4); 2,1514 (6,0); 1,9650 (0,6); 1,9588 (0,6); 1,9530 (5,6); 1,9469 (10,7); 1,9407 (15,0); 1,9345 (4,2); 1,9284 (4,2); 1,6436 (2,4); 1,6263 (2,4); 1,3642 (16,0); -0,0002 (2,5)

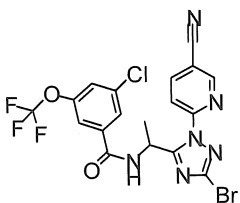
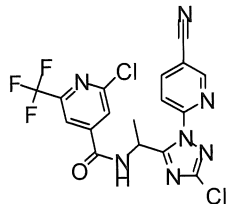
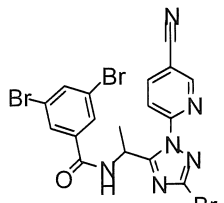
I-39		I-39: $^1\text{H-NMR}$ (600,1 MHz, CD_3CN): δ = 8,8634 (0,4); 8,8622 (0,4); 8,8597 (0,4); 8,8585 (0,3); 8,3306 (2,8); 8,3163 (2,8); 8,3126 (0,4); 8,3012 (0,8); 8,1577 (0,3); 8,0044 (0,4); 8,0032 (0,4); 7,9901 (0,4); 7,9889 (0,4); 6,1891 (0,3); 2,1392 (16,0); 1,9481 (2,8); 1,9439 (5,2); 1,9398 (2,8); 1,9357 (5,2); 1,9316 (2,6); 1,6976 (1,5); 1,6860 (1,5)
I-40		I-40: $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ = 9,4781 (3,9); 9,4614 (4,0); 9,0732 (7,2); 9,0693 (7,0); 8,6065 (4,6); 8,6011 (4,5); 8,5851 (5,0); 8,5796 (4,9); 8,3165 (0,4); 8,2968 (7,6); 8,1871 (7,1); 8,1320 (7,3); 8,0523 (6,7); 8,0308 (6,3); 6,0747 (0,6); 6,0577 (2,8); 6,0405 (4,4); 6,0234 (2,8); 6,0060 (0,6); 5,7571 (12,1); 4,1068 (0,3); 4,0934 (0,3); 3,3323 (207,0); 3,1764 (1,8); 3,1632 (1,7); 2,6771 (1,1); 2,6729 (1,5); 2,6683 (1,1); 2,5083 (197,4); 2,5039 (248,5); 2,4995 (182,8); 2,3351 (1,1); 2,3307 (1,4); 2,3262 (1,1); 1,6533 (16,0); 1,6359 (15,9); -0,0001 (13,4); -0,0083 (0,7) 501,0 $[\text{M}+\text{H}]^+$
I-41		I-41: $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, CD_3CN): δ = 8,8116 (5,9); 8,8090 (6,1); 8,2706 (3,2); 8,2678 (3,3); 8,2652 (3,1); 8,2490 (3,7); 8,2462 (3,7); 8,2436 (3,5); 8,0126 (5,7); 7,9909 (4,7); 7,9154 (7,1); 7,7708 (0,5); 7,7521 (0,6); 7,7150 (2,2); 7,6971 (2,3); 7,6585 (5,6); 7,6284 (5,7); 7,5876 (0,3); 6,1498 (0,8); 6,1323 (2,6); 6,1145 (3,7); 6,0965 (2,5); 6,0794 (0,6); 2,3078 (0,4); 2,1476 (42,9); 2,0576 (1,5); 2,0451 (2,3); 2,0364 (2,5); 2,0338 (2,5); 2,0240 (3,4); 2,0216 (3,5); 2,0120 (2,6); 2,0039 (2,6); 1,9915 (2,2); 1,9650 (4,8); 1,9531 (24,2); 1,9470 (41,8); 1,9437 (43,3); 1,9409 (56,0); 1,9381 (46,9); 1,9348 (39,4); 1,9321 (30,5); 1,9290 (20,5); 1,7697 (0,5); 1,6139 (16,0); 1,5967 (15,6); 1,4360 (0,5); 1,2686 (1,3); 1,2545 (0,9); 1,2385 (0,6); 1,2203 (0,4); 1,2037 (0,4); 1,0059 (6,7); 0,9852 (7,4); 0,9685 (2,8); 0,9611 (1,7); 0,9510 (4,0); 0,9389 (4,0); 0,9227 (2,7); 0,9033 (1,4); -0,0002 (4,1)
I-42		I-42: $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ = 9,3371 (3,8); 9,3196 (3,9); 9,0124 (6,2); 9,0109 (6,8); 9,0070 (6,8); 9,0054 (6,5); 8,5329 (5,4); 8,5274 (5,2); 8,5114 (5,8); 8,5058 (5,8); 8,3161 (0,5); 8,0264 (6,1); 8,0122 (7,0); 8,0106 (7,2);

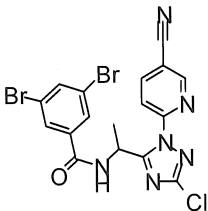
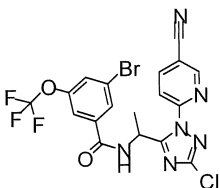
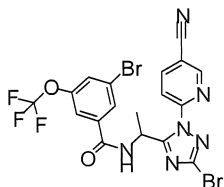
		7,9907 (6,5); 7,9890 (6,7); 7,9679 (6,7); 7,8257 (5,9); 7,2295 (3,1); 7,0911 (7,1); 6,9527 (3,4); 6,0727 (0,6); 6,0556 (2,9); 6,0382 (4,7); 6,0207 (3,0); 6,0035 (0,6); 5,7564 (0,4); 3,3273 (145,6); 2,6811 (0,4); 2,6768 (0,9); 2,6722 (1,2); 2,6676 (0,9); 2,6631 (0,4); 2,5256 (3,8); 2,5209 (5,8); 2,5122 (68,6); 2,5077 (140,1); 2,5032 (185,9); 2,4986 (136,3); 2,4941 (66,8); 2,3389 (0,4); 2,3346 (0,8); 2,3300 (1,2); 2,3254 (0,8); 2,3210 (0,4); 2,0852 (0,8); 2,0730 (1,8); 2,0644 (1,9); 2,0612 (1,5); 2,0523 (3,8); 2,0401 (2,2); 2,0315 (2,0); 2,0192 (1,0); 1,6022 (16,0); 1,5848 (16,0); 1,0275 (0,3); 1,0025 (3,4); 0,9993 (4,5); 0,9938 (6,5); 0,9817 (3,1); 0,9785 (4,2); 0,9730 (7,0); 0,9527 (0,6); 0,9471 (0,6); 0,9418 (0,3); 0,9127 (1,0); 0,9003 (1,2); 0,8883 (3,3); 0,8836 (2,1); 0,8766 (3,2); 0,8713 (2,2); 0,8668 (2,1); 0,8616 (2,8); 0,8546 (2,1); 0,8495 (2,6); 0,8324 (1,2); 0,8237 (0,7); 0,0080 (1,7); -0,0002 (54,4); -0,0085 (1,9)
I-43		I-43: ¹H-NMR(400,2 MHz, CD₃CN): δ= 8,8114 (4,6); 8,8075 (4,8); 8,2705 (3,5); 8,2649 (3,4); 8,2489 (4,1); 8,2433 (4,1); 8,1284 (0,3); 8,0419 (5,1); 8,0154 (5,1); 8,0145 (5,1); 7,9939 (4,3); 7,9928 (4,3); 7,9185 (5,3); 7,8395 (4,8); 7,7987 (1,4); 7,7806 (1,4); 7,7529 (0,5); 6,1682 (0,6); 6,1508 (2,4); 6,1330 (3,5); 6,1151 (2,5); 6,0976 (0,7); 4,0680 (0,4); 4,0503 (0,4); 2,2490 (0,5); 2,2304 (0,6); 2,1518 (11,9); 2,1145 (2,0); 2,1081 (1,7); 2,1020 (1,3); 2,0960 (1,0); 2,0870 (0,8); 2,0563 (1,0); 2,0440 (1,8); 2,0356 (1,8); 2,0322 (1,3); 2,0233 (2,7); 2,0196 (1,8); 2,0110 (1,8); 2,0028 (1,8); 1,9904 (1,0); 1,9723 (2,1); 1,9650 (3,1); 1,9587 (3,6); 1,9531 (28,2); 1,9469 (52,5); 1,9407 (73,1); 1,9346 (50,7); 1,9284 (26,4); 1,7755 (0,4); 1,7693 (0,5); 1,7630 (0,4); 1,6286 (16,0); 1,6113 (16,0); 1,4363 (1,7); 1,2683 (3,4); 1,2218 (0,5); 1,2040 (1,0); 1,1862 (0,5); 1,0333 (0,4); 1,0192 (0,9); 1,0093 (3,2); 1,0039 (6,0); 0,9969 (1,4); 0,9930 (1,5); 0,9884 (2,9); 0,9831 (7,2); 0,9706 (1,5); 0,9656 (2,0); 0,9594 (1,2); 0,9536 (1,1); 0,9485 (3,3); 0,9432 (1,6); 0,9366 (3,3); 0,9293 (2,2); 0,9244 (2,0); 0,9210 (1,8); 0,9160 (2,0); 0,9127 (1,9); 0,9089 (1,3); 0,8984 (1,3); 0,8897 (0,6); 0,8853 (0,6); 0,8811 (0,6); -0,0003 (6,0)

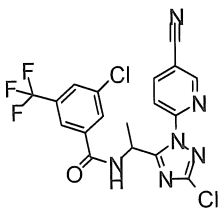
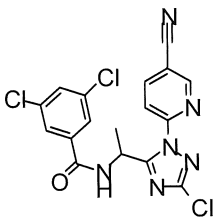
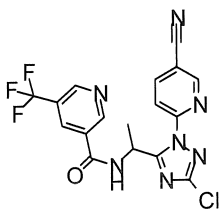
I-44		I-44: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, CD_3CN): δ= 8,8175 (4,6); 8,8135 (4,7); 8,3476 (5,5); 8,2828 (5,0); 8,2744 (3,9); 8,2687 (3,3); 8,2526 (3,8); 8,2471 (3,8); 8,2195 (4,8); 8,0213 (5,0); 8,0001 (4,2); 7,8324 (1,3); 7,8153 (1,3); 6,1946 (0,6); 6,1772 (2,4); 6,1595 (3,6); 6,1416 (2,4); 6,1243 (0,6); 2,1461 (68,9); 2,1206 (0,3); 2,1143 (0,4); 2,1081 (0,4); 2,1015 (0,4); 2,0579 (0,8); 2,0455 (1,5); 2,0372 (1,6); 2,0337 (1,1); 2,0248 (2,5); 2,0210 (1,8); 2,0126 (1,6); 2,0043 (1,6); 1,9918 (1,0); 1,9650 (2,9); 1,9530 (24,8); 1,9469 (46,6); 1,9407 (65,0); 1,9346 (45,2); 1,9284 (23,5); 1,7756 (0,3); 1,7693 (0,4); 1,6338 (16,0); 1,6166 (15,9); 1,4364 (4,1); 1,2689 (0,6); 1,0301 (0,4); 1,0224 (0,7); 1,0111 (3,5); 1,0064 (5,8); 1,0003 (1,3); 0,9907 (3,8); 0,9856 (6,5); 0,9703 (2,1); 0,9629 (1,1); 0,9532 (3,7); 0,9468 (2,2); 0,9405 (4,3); 0,9348 (2,7); 0,9275 (2,2); 0,9234 (1,9); 0,9168 (1,3); 0,9080 (1,0); 0,8952 (0,4); -0,0002 (5,4)
I-45		I-45: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, CD_3CN): δ= 8,8149 (4,9); 8,8110 (4,7); 8,2721 (3,4); 8,2665 (3,3); 8,2505 (4,0); 8,2449 (3,9); 8,0155 (5,1); 7,9939 (4,2); 7,9779 (5,5); 7,9517 (4,0); 7,9473 (6,0); 7,9433 (3,6); 7,9291 (0,4); 7,8903 (4,8); 7,7529 (1,4); 7,7359 (1,4); 7,5864 (0,5); 6,1573 (0,6); 6,1397 (2,4); 6,1220 (3,4); 6,1039 (2,4); 6,0869 (0,6); 2,4694 (0,4); 2,4644 (0,6); 2,4599 (0,5); 2,1557 (189,8); 2,1198 (1,2); 2,1140 (1,4); 2,1078 (1,5); 2,1016 (1,1); 2,0955 (0,7); 2,0577 (0,9); 2,0456 (1,7); 2,0372 (1,8); 2,0337 (1,2); 2,0248 (2,8); 2,0212 (1,7); 2,0125 (1,7); 2,0042 (1,8); 1,9919 (1,1); 1,9647 (7,9); 1,9528 (71,5); 1,9466 (133,8); 1,9405 (185,1); 1,9343 (128,9); 1,9281 (66,5); 1,7809 (0,4); 1,7752 (0,8); 1,7689 (1,1); 1,7629 (0,8); 1,6205 (15,8); 1,6032 (16,0); 1,5830 (0,7); 1,2700 (0,4); 1,0346 (0,4); 1,0208 (0,9); 1,0111 (3,5); 1,0059 (6,3); 0,9983 (1,3); 0,9851 (7,2); 0,9712 (1,7); 0,9679 (2,1); 0,9603 (1,1); 0,9504 (3,5); 0,9446 (1,8); 0,9382 (3,4); 0,9323 (2,8); 0,9279 (2,1); 0,9243 (2,0); 0,9202 (2,0); 0,9158 (1,8); 0,9026 (1,1); 0,8982 (0,8); 0,8888 (0,5); -0,0002 (14,1)

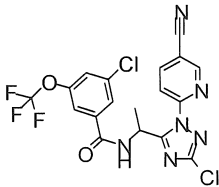
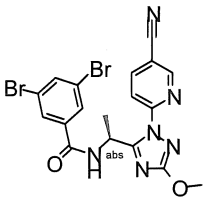
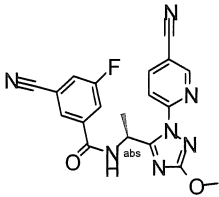
I-46		I-46: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, CD_3CN): δ= 8,8169 (4,4); 8,8131 (4,6); 8,2715 (3,2); 8,2659 (3,2); 8,2499 (3,9); 8,2443 (3,8); 8,0163 (4,8); 8,0148 (4,8); 7,9947 (4,1); 7,9931 (4,1); 7,8643 (6,5); 7,8607 (4,5); 7,8495 (4,2); 7,8449 (6,1); 7,8409 (3,5); 7,7757 (3,6); 7,7715 (5,5); 7,7672 (3,2); 7,6963 (1,3); 7,6815 (1,3); 7,5833 (0,4); 7,2632 (3,0); 7,1232 (6,2); 6,9831 (3,1); 6,1521 (0,7); 6,1350 (2,4); 6,1170 (3,3); 6,0992 (2,4); 6,0818 (0,6); 2,1375 (94,3); 2,1136 (0,9); 2,1072 (1,1); 2,1012 (0,8); 2,0954 (0,4); 2,0572 (0,8); 2,0452 (1,7); 2,0368 (1,6); 2,0332 (1,2); 2,0244 (2,6); 2,0207 (1,7); 2,0122 (1,7); 2,0038 (1,8); 1,9916 (1,0); 1,9718 (1,3); 1,9643 (6,3); 1,9579 (8,1); 1,9524 (60,6); 1,9462 (113,6); 1,9401 (157,4); 1,9339 (109,0); 1,9277 (56,1); 1,7808 (0,4); 1,7748 (0,7); 1,7686 (0,9); 1,7624 (0,7); 1,7565 (0,4); 1,6148 (16,0); 1,5976 (15,9); 1,4368 (3,5); 1,2723 (0,4); 1,2213 (0,4); 1,2039 (0,6); 1,0350 (0,3); 1,0306 (0,4); 1,0210 (0,8); 1,0110 (3,4); 1,0059 (6,0); 0,9982 (1,2); 0,9901 (3,7); 0,9851 (6,8); 0,9687 (2,1); 0,9615 (1,0); 0,9511 (3,7); 0,9450 (2,0); 0,9387 (3,5); 0,9308 (2,2); 0,9269 (2,0); 0,9232 (1,9); 0,9186 (1,6); 0,9140 (1,3); 0,9055 (1,1); 0,8917 (0,5); 0,0079 (0,4); -0,0002 (13,5)
I-47		I-47: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,2197 (3,3); 9,2022 (3,4); 9,0114 (5,5); 9,0097 (6,0); 9,0060 (6,0); 9,0041 (5,7); 8,5331 (4,6); 8,5275 (4,4); 8,5115 (4,9); 8,5060 (5,0); 8,3161 (0,7); 8,0113 (6,0); 8,0096 (6,1); 7,9899 (5,6); 7,9880 (5,7); 7,5116 (7,6); 7,4877 (13,5); 7,4822 (14,0); 7,3283 (16,0); 7,2248 (3,5); 7,2195 (6,3); 7,2141 (3,3); 7,1449 (7,9); 6,0646 (0,5); 6,0477 (2,4); 6,0302 (3,9); 6,0127 (2,5); 5,9952 (0,5); 3,3242 (164,4); 2,6800 (0,8); 2,6756 (1,6); 2,6710 (2,2); 2,6665 (1,6); 2,5245 (6,4); 2,5197 (9,8); 2,5110 (129,2); 2,5066 (262,8); 2,5021 (346,6); 2,4975 (253,5); 2,4930 (123,6); 2,3379 (0,7); 2,3335 (1,6); 2,3289 (2,2); 2,3244 (1,6); 2,0829 (0,7); 2,0707 (1,5); 2,0620 (1,6); 2,0590 (1,3); 2,0499 (3,2); 2,0377 (1,9); 2,0292 (1,6); 2,0168 (0,8); 1,6018 (13,4); 1,5844 (13,4); 0,9996 (4,0); 0,9940 (5,9); 0,9788 (3,8); 0,9732 (6,1); 0,9543 (0,6); 0,9478 (0,5); 0,9108 (0,8); 0,8982 (0,9); 0,8867 (3,0); 0,8813 (1,8); 0,8747 (3,1); 0,8682 (2,2); 0,8613 (2,6); 0,8547 (1,8); 0,8492 (2,4);

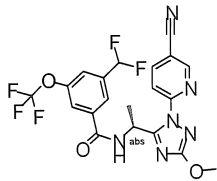
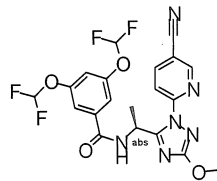
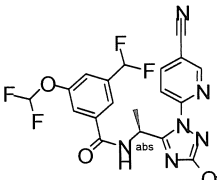
		0,8323 (1,0); 0,8236 (0,6); 0,1458 (1,3); 0,0080 (10,6); -0,0002 (327,8); -0,0085 (12,2); -0,1496 (1,3)
I-48		I-48: $^1\text{H-NMR}$(600,4 MHz, CD_3CN): δ= 8,8607 (3,7); 8,8595 (4,1); 8,8571 (4,4); 8,8558 (4,4); 8,3277 (3,6); 8,3240 (3,8); 8,3134 (4,0); 8,3097 (4,2); 8,2972 (8,9); 8,1538 (3,9); 8,0098 (4,3); 8,0085 (4,6); 8,0033 (1,0); 7,9955 (4,0); 7,9942 (4,2); 7,9890 (0,9); 7,8930 (1,2); 7,8828 (1,3); 6,2109 (0,6); 6,1992 (2,5); 6,1875 (3,8); 6,1808 (0,8); 6,1757 (2,6); 6,1641 (0,6); 2,1736 (0,4); 2,1659 (0,4); 2,1458 (495,8); 2,1401 (77,0); 2,1128 (7,9); 2,0579 (0,3); 2,0538 (0,6); 2,0497 (0,9); 2,0456 (0,6); 2,0414 (0,4); 1,9632 (12,4); 1,9551 (4,7); 1,9509 (5,1); 1,9471 (45,2); 1,9430 (87,0); 1,9388 (130,6); 1,9347 (97,9); 1,9306 (56,8); 1,8280 (0,5); 1,8239 (0,7); 1,8198 (0,6); 1,8157 (0,3); 1,6946 (15,6); 1,6865 (3,2); 1,6830 (16,0); -0,0001 (7,3); -0,0059 (0,9)
I-49		I-49: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,7072 (3,2); 9,6902 (3,4); 9,0709 (5,7); 9,0691 (6,4); 9,0655 (6,2); 9,0637 (5,7); 8,6027 (4,4); 8,5972 (4,2); 8,5812 (4,8); 8,5757 (4,7); 8,2221 (8,4); 8,2198 (8,8); 8,1777 (8,5); 8,0613 (5,8); 8,0596 (5,8); 8,0399 (5,5); 8,0381 (5,5); 6,1117 (0,5); 6,0944 (2,4); 6,0772 (3,8); 6,0600 (2,5); 6,0427 (0,5); 5,7561 (16,0); 3,3394 (452,8); 3,1763 (0,9); 3,1632 (0,9); 2,6775 (1,0); 2,6731 (1,3); 2,6685 (0,9); 2,5264 (4,6); 2,5128 (88,6); 2,5086 (168,4); 2,5042 (212,0); 2,4996 (151,6); 2,4953 (73,3); 2,3355 (0,9); 2,3310 (1,2); 2,3264 (0,9); 1,6553 (13,5); 1,6380 (13,2); 1,4433 (0,4); 1,2511 (1,0); 1,2339 (1,9); 1,2168 (1,0); -0,0002 (2,3) 501,9 $[\text{M}+\text{H}]^+$
I-50		I-50: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,5601 (3,7); 9,5431 (3,8); 9,2170 (6,5); 9,2128 (6,5); 9,1390 (6,0); 9,1361 (5,9); 9,0789 (6,8); 9,0772 (7,2); 9,0736 (7,1); 9,0718 (6,4); 8,6030 (5,2); 8,5975 (4,9); 8,5888 (0,6); 8,5815 (5,5); 8,5760 (5,4); 8,5435 (6,1); 8,3160 (0,4); 8,0666 (6,8); 8,0649 (6,6); 8,0451 (6,3); 8,0434 (6,2); 6,1182 (0,6); 6,1009 (2,9); 6,0837 (4,6); 6,0664 (2,9); 6,0490 (0,6); 5,7564 (10,4); 3,3336 (225,6); 3,1766 (0,8); 3,1634 (0,8); 2,6909 (0,4); 2,6776

		(1,0); 2,6731 (1,4); 2,6685 (1,0); 2,5265 (4,7); 2,5215 (7,8); 2,5130 (90,0); 2,5087 (177,2); 2,5041 (226,9); 2,4996 (162,8); 2,4952 (78,9); 2,3399 (0,4); 2,3356 (0,9); 2,3310 (1,3); 2,3265 (0,9); 1,6628 (16,0); 1,6454 (15,9); 1,2504 (0,4); 1,2319 (0,5); 0,0081 (0,5); -0,0001 (14,2); -0,0084 (0,5) 466,0 [M+H] ⁺
I-51		I-51: ¹ H-NMR(400,2 MHz, d ₆ -DMSO): δ= 9,3926 (4,0); 9,3759 (4,1); 9,0621 (7,0); 9,0607 (7,6); 9,0570 (7,4); 9,0554 (6,6); 8,5973 (5,0); 8,5918 (4,7); 8,5759 (5,4); 8,5704 (5,2); 8,3157 (0,4); 8,0560 (6,9); 8,0545 (6,8); 8,0346 (6,4); 8,0330 (6,4); 7,9528 (5,9); 7,9490 (8,8); 7,9451 (6,0); 7,7923 (6,4); 7,7281 (6,5); 6,0594 (0,6); 6,0427 (2,9); 6,0255 (4,5); 6,0084 (2,9); 5,9910 (0,6); 5,7564 (10,1); 3,3377 (429,0); 3,1765 (1,1); 3,1634 (1,1); 2,6776 (1,2); 2,6731 (1,5); 2,6687 (1,1); 2,5263 (5,7); 2,5086 (207,9); 2,5042 (261,9); 2,4997 (191,4); 2,3354 (1,1); 2,3310 (1,5); 2,3265 (1,1); 1,6400 (16,0); 1,6226 (15,8); -0,0001 (4,8) 516,0 [M+H] ⁺
I-52		I-52: ¹ H-NMR(400,2 MHz, d ₆ -DMSO): δ= 9,7112 (3,7); 9,6945 (3,8); 9,0745 (7,0); 9,0703 (7,0); 8,6106 (4,4); 8,6051 (4,3); 8,5891 (4,7); 8,5837 (4,7); 8,2212 (9,9); 8,1788 (9,9); 8,0558 (6,7); 8,0343 (6,2); 6,1071 (0,6); 6,0897 (2,8); 6,0726 (4,4); 6,0555 (2,8); 6,0385 (0,6); 5,7569 (16,0); 3,3314 (161,3); 3,1761 (1,1); 3,1630 (1,1); 2,6768 (1,0); 2,6726 (1,4); 2,6684 (1,0); 2,5081 (179,4); 2,5037 (224,6); 2,4994 (164,8); 2,3349 (1,0); 2,3304 (1,2); 2,3264 (0,9); 1,6607 (16,0); 1,6434 (15,8); 1,5972 (0,4); 1,2340 (0,4); -0,0002 (11,8) 458,0 [M+H] ⁺
I-53		I-53: ¹ H-NMR(400,2 MHz, d ₆ -DMSO): δ= 9,3311 (2,7); 9,3141 (2,7); 9,0666 (4,5); 9,0649 (5,1); 9,0612 (5,0); 9,0594 (4,7); 8,5993 (3,7); 8,5938 (3,5); 8,5779 (4,0); 8,5724 (3,9); 8,3153 (0,7); 8,0536 (4,8); 8,0520 (5,1); 8,0463 (3,9); 8,0419 (7,3); 8,0375 (4,8); 8,0323 (4,8); 8,0305 (4,8); 7,9857 (16,0); 7,9813 (14,2); 6,0421 (0,4); 6,0249 (2,0); 6,0077 (3,1); 5,9906 (2,0); 5,9730 (0,4); 5,7561 (14,0); 3,3345 (772,8); 3,1752 (1,3); 3,1620 (1,2); 2,6762 (1,9); 2,6718 (2,6); 2,6672

		(2,0); 2,6627 (1,0); 2,5251 (9,5); 2,5117 (169,3); 2,5073 (338,0); 2,5028 (439,8); 2,4982 (319,7); 2,4937 (157,6); 2,3341 (1,9); 2,3296 (2,5); 2,3250 (1,9); 1,6233 (10,8); 1,6059 (10,8); 0,0080 (0,4); -0,0002 (11,4); -0,0084 (0,4) 556,8 [M+H]⁺
I-54		I-54: ¹H-NMR(600,4 MHz, d₆-DMSO): δ= 9,3122 (3,2); 9,3010 (3,2); 9,0647 (4,9); 9,0637 (4,8); 9,0611 (5,1); 8,5975 (3,8); 8,5938 (3,7); 8,5832 (4,0); 8,5796 (3,9); 8,0404 (8,6); 8,0374 (7,6); 8,0345 (4,5); 8,0271 (5,2); 8,0261 (4,8); 7,9815 (16,0); 7,9786 (14,6); 6,0243 (0,6); 6,0127 (2,4); 6,0013 (3,6); 5,9898 (2,4); 5,9782 (0,5); 3,3060 (189,4); 2,6157 (1,4); 2,6127 (1,9); 2,6096 (1,4); 2,5216 (10,0); 2,5185 (12,0); 2,5154 (13,5); 2,5066 (116,0); 2,5037 (226,4); 2,5007 (302,7); 2,4977 (224,3); 2,4948 (110,7); 2,3876 (1,4); 2,3846 (1,9); 2,3816 (1,4); 1,6264 (13,3); 1,6148 (13,1); 1,3997 (0,3); 0,0053 (1,1); -0,0001 (22,7); -0,0056 (0,9) 512,8 [M+H]⁺
I-55		I-55: ¹H-NMR(400,2 MHz, d₆-DMSO): δ= 10,9905 (0,4); 9,3961 (3,9); 9,3794 (4,0); 9,0670 (6,6); 9,0654 (7,3); 9,0617 (7,4); 9,0600 (6,9); 8,6049 (5,3); 8,5994 (5,1); 8,5835 (5,7); 8,5780 (5,7); 8,3161 (0,4); 8,1673 (0,4); 8,0838 (5,3); 8,0801 (8,9); 8,0764 (5,7); 8,0516 (7,0); 8,0499 (7,2); 8,0301 (6,5); 8,0284 (6,7); 8,0015 (0,3); 7,9504 (0,3); 7,8977 (5,8); 7,7575 (5,8); 7,7552 (5,2); 6,0531 (0,6); 6,0360 (2,8); 6,0189 (4,4); 6,0018 (2,9); 5,9847 (0,6); 5,7568 (11,5); 3,3348 (381,7); 3,1763 (1,3); 3,1632 (1,3); 2,6773 (1,1); 2,6728 (1,6); 2,6683 (1,2); 2,6639 (0,6); 2,5262 (5,6); 2,5213 (8,8); 2,5128 (102,9); 2,5084 (206,1); 2,5039 (267,4); 2,4993 (194,3); 2,4949 (96,0); 2,3352 (1,1); 2,3307 (1,5); 2,3261 (1,1); 1,6438 (16,0); 1,6264 (15,8); 0,0080 (0,3); -0,0001 (10,4); -0,0084 (0,4) 516,9 [M+H]⁺
I-56		I-56: ¹H-NMR(400,2 MHz, d₆-DMSO): δ= 9,3923 (4,0); 9,3754 (4,1); 9,0610 (7,6); 9,0573 (7,3); 9,0556 (7,0); 8,5978 (5,2); 8,5923 (5,0); 8,5764 (5,5); 8,5709 (5,5); 8,3164 (0,5); 8,0825 (5,6); 8,0788 (9,1); 8,0751 (5,8); 8,0558 (6,9); 8,0543 (7,2); 8,0344 (6,4); 8,0328 (6,7); 7,9488 (0,3); 7,8968 (6,0); 7,7563 (6,1); 6,0576 (0,6);

		6,0407 (2,9); 6,0235 (4,5); 6,0063 (2,9); 5,9890 (0,6); 5,7569 (14,2); 3,3324 (336,6); 3,1761 (1,5); 3,1630 (1,4); 2,6770 (1,3); 2,6726 (1,8); 2,6680 (1,4); 2,5260 (6,3); 2,5124 (118,1); 2,5081 (234,8); 2,5036 (303,2); 2,4990 (220,0); 2,4947 (108,4); 2,3349 (1,2); 2,3304 (1,7); 2,3258 (1,2); 1,6380 (16,0); 1,6206 (15,8); 1,2340 (1,1); 1,2161 (1,6); 1,1985 (1,0); 0,0080 (0,6); -0,0002 (18,4); -0,0085 (0,7) 561,9 [M+H]⁺
I-57		I-57: ¹H-NMR(400,2 MHz, d₆-DMSO): δ = 9,4819 (2,5); 9,4651 (2,6); 9,0733 (4,7); 9,0695 (4,7); 8,6065 (2,8); 8,6010 (2,8); 8,5850 (3,0); 8,5796 (3,0); 8,1639 (4,8); 8,1022 (4,9); 8,0848 (4,4); 8,0525 (4,2); 8,0323 (3,9); 8,0310 (3,9); 6,0773 (0,4); 6,0601 (1,8); 6,0430 (2,8); 6,0258 (1,8); 6,0085 (0,4); 5,7572 (16,0); 3,3319 (53,6); 3,1760 (0,5); 3,1634 (0,5); 2,6773 (0,8); 2,6728 (1,0); 2,6684 (0,8); 2,5261 (3,9); 2,5084 (133,8); 2,5039 (170,3); 2,4994 (124,7); 2,4953 (63,2); 2,3352 (0,7); 2,3307 (0,9); 2,3264 (0,7); 1,6552 (10,2); 1,6378 (10,2); 1,2333 (0,3); 0,0079 (0,4); -0,0002 (11,0); -0,0084 (0,4) 456,1 [M+H]⁺
I-58		I-58: ¹H-NMR(400,2 MHz, d₆-DMSO): δ = 9,3376 (1,2); 9,3206 (1,2); 9,0721 (2,1); 9,0705 (2,2); 9,0668 (2,2); 9,0650 (2,0); 8,6069 (1,6); 8,6014 (1,5); 8,5855 (1,7); 8,5800 (1,7); 8,0504 (2,1); 8,0487 (2,1); 8,0290 (2,0); 8,0272 (2,0); 7,8248 (16,0); 6,0264 (0,9); 6,0092 (1,4); 5,9921 (0,9); 5,7569 (2,7); 3,3300 (51,4); 3,1760 (0,5); 3,1628 (0,4); 2,6723 (0,4); 2,6677 (0,3); 2,5257 (1,6); 2,5122 (29,7); 2,5079 (56,8); 2,5034 (71,8); 2,4988 (51,6); 2,4944 (25,1); 2,3301 (0,4); 1,6336 (5,0); 1,6162 (5,0); -0,0002 (4,8) 423,0 [M+H]⁺
I-59		I-59: ¹H-NMR(400,2 MHz, d₆-DMSO): δ = 9,5638 (3,6); 9,5471 (3,6); 9,2180 (5,4); 9,1400 (5,1); 9,0825 (6,7); 9,0782 (6,6); 8,6105 (4,5); 8,6050 (4,4); 8,5890 (4,9); 8,5835 (4,8); 8,5447 (6,1); 8,0615 (6,5); 8,0400 (6,1); 6,1128 (0,6); 6,0955 (2,8); 6,0783 (4,4); 6,0612 (2,9); 6,0439 (0,6); 5,7571 (14,0); 3,3327 (181,1); 3,1763 (0,6); 3,1631 (0,5); 2,6774 (0,9); 2,6729 (1,3); 2,6684

		(1,0); 2,5261 (4,3); 2,5127 (84,8); 2,5084 (167,6); 2,5039 (215,6); 2,4994 (155,9); 2,4951 (76,9); 2,3395 (0,4); 2,3353 (0,9); 2,3307 (1,2); 2,3262 (0,9); 1,6681 (16,0); 1,6507 (15,9); 1,6074 (0,6); 1,2478 (1,7); 1,2311 (3,3); 1,2144 (1,7); -0,0002 (7,4) 422,1 [M+H]⁺
I-60		I-60: ¹H-NMR(400,2 MHz, d₆-DMSO): δ= 9,3963 (3,8); 9,3796 (3,9); 9,0671 (6,7); 9,0656 (7,4); 9,0619 (7,1); 9,0602 (6,9); 8,6049 (4,9); 8,5994 (4,8); 8,5834 (5,2); 8,5779 (5,2); 8,3162 (0,4); 8,1636 (0,6); 8,1020 (0,5); 8,0846 (0,5); 8,0519 (6,8); 8,0503 (7,0); 8,0305 (6,4); 8,0288 (6,6); 7,9547 (5,3); 7,9507 (8,4); 7,9470 (6,0); 7,8641 (0,3); 7,7926 (6,0); 7,7297 (6,1); 6,0557 (0,7); 6,0383 (2,9); 6,0212 (4,4); 6,0041 (2,8); 5,9872 (0,6); 5,7567 (12,7); 3,3347 (206,9); 3,1765 (0,6); 3,1636 (0,6); 2,6776 (1,1); 2,6730 (1,5); 2,6686 (1,1); 2,5263 (5,5); 2,5086 (202,0); 2,5041 (260,0); 2,4996 (192,2); 2,3354 (1,1); 2,3309 (1,5); 2,3265 (1,1); 1,6457 (16,0); 1,6283 (15,8); 1,2336 (0,3); 0,0080 (0,6); -0,0001 (15,2); -0,0084 (0,7) 471,0 [M+H]⁺
I-61		I-61: ¹H-NMR(400,2 MHz, d₆-DMSO): δ= 9,3102 (1,3); 9,2930 (1,3); 9,0170 (2,2); 9,0154 (2,3); 9,0116 (2,4); 9,0100 (2,2); 8,5448 (1,7); 8,5392 (1,6); 8,5232 (1,8); 8,5176 (1,8); 8,0431 (1,3); 8,0388 (2,9); 8,0346 (2,6); 8,0201 (8,0); 8,0158 (5,4); 7,9791 (2,3); 7,9775 (2,3); 7,9575 (2,2); 7,9558 (2,2); 6,0504 (1,0); 6,0331 (1,5); 6,0158 (1,0); 3,9629 (16,0); 3,3298 (22,6); 2,5266 (0,8); 2,5217 (1,2); 2,5131 (15,4); 2,5087 (31,0); 2,5042 (40,2); 2,4997 (28,9); 2,4953 (14,0); 2,0767 (0,8); 1,6016 (5,3); 1,5842 (5,3); -0,0002 (1,2)
I-62		I-62: ¹H-NMR(400,2 MHz, d₆-DMSO): δ= 9,3558 (1,2); 9,3387 (1,2); 9,0180 (2,2); 9,0163 (2,3); 9,0126 (2,3); 9,0108 (2,1); 8,5450 (1,7); 8,5394 (1,6); 8,5234 (1,8); 8,5178 (1,8); 8,3147 (0,3); 8,1750 (1,9); 8,1718 (3,2); 8,1685 (1,9); 8,0866 (0,8); 8,0834 (0,9); 8,0802 (0,9); 8,0772 (0,8); 8,0657 (0,8); 8,0624 (0,9); 8,0594 (0,9); 8,0564 (0,8); 7,9970 (0,9); 7,9934 (1,0);

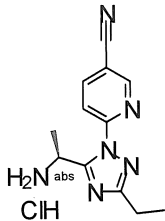
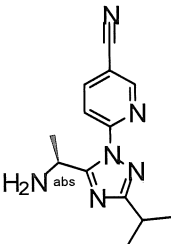
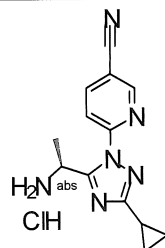
		7,9908 (1,0); 7,9835 (2,5); 7,9817 (2,3); 7,9735 (1,0); 7,9698 (1,1); 7,9670 (1,0); 7,9620 (2,6); 7,9601 (2,3); 6,0802 (0,9); 6,0629 (1,5); 6,0456 (0,9); 3,9641 (16,0); 3,3412 (110,0); 2,5269 (0,9); 2,5134 (18,8); 2,5090 (37,3); 2,5045 (47,9); 2,4999 (34,1); 2,4954 (16,3); 2,0757 (0,4); 1,6182 (5,2); 1,6008 (5,1); -0,0002 (1,3)
I-63		I-63: ¹ H-NMR(400,2 MHz, d ₆ -DMSO): δ= 9,4555 (1,3); 9,4385 (1,4); 9,0168 (2,4); 9,0114 (2,4); 8,5469 (1,7); 8,5414 (1,6); 8,5253 (1,8); 8,5198 (1,8); 8,1238 (2,4); 7,9855 (2,5); 7,9639 (4,0); 7,7883 (1,8); 7,2944 (1,0); 7,1562 (2,4); 7,0181 (1,1); 6,0888 (1,0); 6,0715 (1,5); 6,0542 (1,0); 3,9661 (16,0); 3,3341 (55,0); 2,5454 (0,7); 2,5149 (16,2); 2,5105 (31,6); 2,5060 (40,9); 2,5015 (29,6); 2,4970 (14,6); 2,0787 (4,4); 1,6314 (5,5); 1,6140 (5,4)
I-64		I-64: ¹ H-NMR(400,2 MHz, d ₆ -DMSO): δ= 9,2680 (1,3); 9,2509 (1,4); 9,0184 (2,3); 9,0144 (2,3); 9,0130 (2,2); 8,5480 (1,7); 8,5424 (1,6); 8,5264 (1,8); 8,5208 (1,8); 7,9848 (2,3); 7,9834 (2,3); 7,9633 (2,2); 7,9617 (2,2); 7,5306 (5,4); 7,5250 (5,9); 7,5224 (4,1); 7,3385 (5,8); 7,2404 (1,4); 7,2350 (2,5); 7,2297 (1,3); 7,1551 (2,9); 6,0706 (1,0); 6,0533 (1,5); 6,0360 (1,0); 3,9648 (16,0); 3,3362 (50,3); 2,5454 (0,7); 2,5284 (0,8); 2,5150 (14,6); 2,5106 (28,3); 2,5061 (36,2); 2,5015 (25,9); 2,4970 (12,5); 2,0787 (2,0); 1,6220 (5,3); 1,6045 (5,3)
I-65		I-65: ¹ H-NMR(400,2 MHz, d ₆ -DMSO): δ= 9,3558 (1,4); 9,0204 (2,4); 9,0163 (2,4); 9,0150 (2,3); 8,5479 (1,7); 8,5424 (1,6); 8,5263 (1,8); 8,5208 (1,8); 7,9870 (2,3); 7,9857 (2,4); 7,9655 (2,2); 7,9640 (2,4); 7,9517 (2,4); 7,7892 (1,9); 7,5636 (2,0); 7,5474 (1,4); 7,3640 (2,9); 7,2564 (1,0); 7,1806 (1,4); 7,1179 (2,3); 6,9795 (1,1); 6,0848 (1,0); 6,0675 (1,6); 6,0502 (1,0); 3,9647 (16,0); 3,3380 (62,4); 2,5455 (0,9); 2,5284 (0,7); 2,5151 (14,7); 2,5108 (29,0); 2,5062 (37,5); 2,5017 (27,3); 2,4973 (13,6); 2,0787 (2,2); 1,6268 (5,5); 1,6094 (5,5)

¹⁾ ‘lowT’ biểu thị phép đo được tiến hành ở nhiệt độ 260 Kelvin.

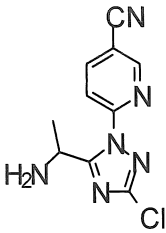
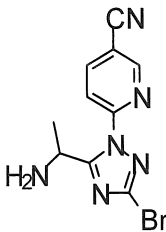
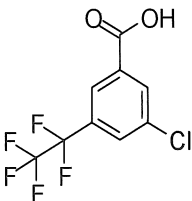
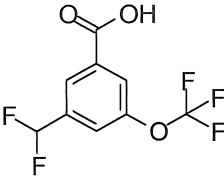
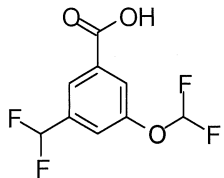
²⁾ ‘abs’ biểu thị hợp chất thu được ở dạng đồng phân đối ảnh được làm giàu hoặc tinh khiết với chất đồng phân lập thể chính có cấu hình tuyệt đối được mô tả trong các hình vẽ.

^[3] Khối lượng chỉ ra tương đương với đỉnh từ biểu đồ đồng vị của ion $[M+H]^+$ có cường độ cao nhất. # biểu thị ion $[M-H]^-$ được ghi lại.

Bảng 2 (Các hợp chất trung gian)

Ví dụ	Cấu trúc ²⁾	Dữ liệu NMR ¹⁾	Khối lượng ESI (m/z) ³⁾
INT-1			243,2 $[M+H-HCl]^+$
INT-2			257,2 $[M+H]^+$
INT-3			255,1 $[M+H-HCl]^+$

INT-4			265,2 [M+H] ⁺
INT-5			245,1 [M+H] ⁺
INT-6			259,3 [M+H] ⁺
INT-7			273,1 [M+H] ⁺
INT-8			271,3 [M+H] ⁺
INT-9		¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ: 6,90 (t, 1H, J = 74,4 Hz), 7,83 (t, 1H, J = 2 Hz), 8,14 (t, 1H, J = 2 Hz), 8,20 (s, 1H), 10,50 (brs, 1H). (được đo trên máy Varian Gemini 2000).	
INT-10		¹ H NMR (DMSO-d ₆ , 400 MHz): δ = 13,65 (brs, 1H), 8,06 (s, 2H), 7,93 (s, 1H), 7,14 (t, J = 55 Hz, 1H).	

INT-11			249,2 [M+H] ⁺
INT-12			295,0 [M+H] ⁺
INT-13		¹ H-NMR (400 MHz, MeOD): δ = 8,24 (s, 1H), 8,14 (s, 1H), 7,88 (s, 1H), Được đo sử dụng máy Bruker 400MHz NMR.	
INT-14		¹ H NMR (DMSO-d ₆ , 400 MHz): δ = 13,8 (brs, 1H), 8,15 (s, 1H), 7,98 (s, 1H), 7,89 (s, 1H), 7,20 (t, J = 55 Hz, 1H).	254,8 [M-H] ⁻
INT-15		¹ H-NMR (DMSO-d ₆ , 400 MHz): δ = 13,62 (s, 1H), 7,99 (t, 1H), 7,82 (s, 1H), 7,70 – 7,62 (m, 1H), 7,42 (t, 1H), 7,15 (t, 1H). Được đo sử dụng máy Varian Gemini 2000.	

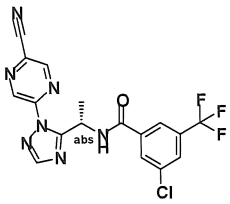
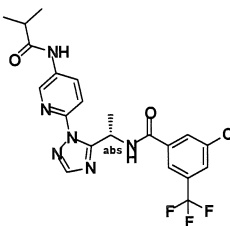
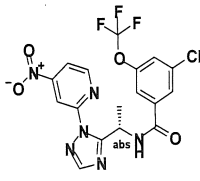
¹) ‘lowT’ biểu thị phép đo được tiến hành ở nhiệt độ 260 Kelvin.

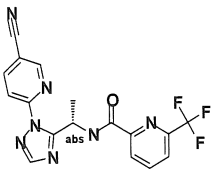
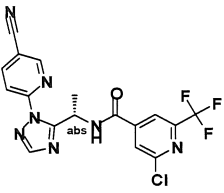
²) ‘abs’ biểu thị hợp chất thu được ở dạng đồng phân đối ảnh được làm giàu hoặc tinh khiết với chất đồng phân lập thể chính có cấu hình tuyệt đối được mô tả trong các hình vẽ.

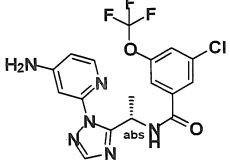
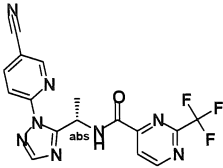
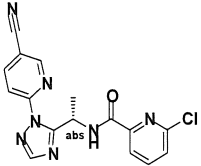
^[3] Khối lượng chỉ ra tương đương với đỉnh từ biểu đồ đồng vị của ion [M+H]⁺ có cường độ cao nhất. # biểu thị ion [M-H]⁻ được ghi lại.

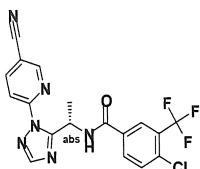
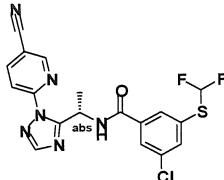
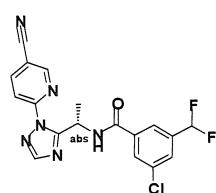
Ngoài ra, sáng chế đề cập đến các hợp chất sau:

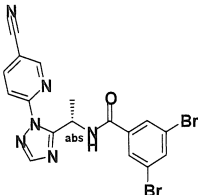
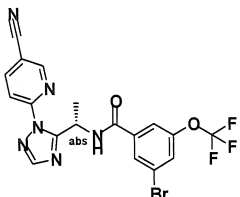
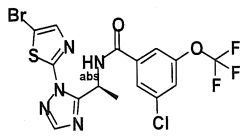
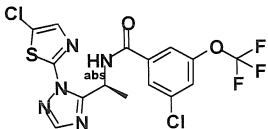
Bảng 3

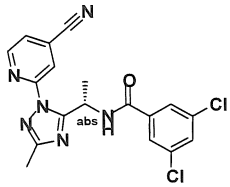
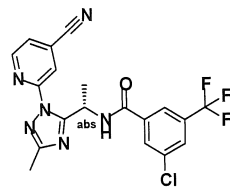
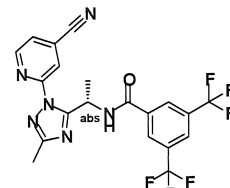
Ví dụ	Cấu trúc	Danh sách đỉnh NMR
II-1	 (hợp chất tham khảo)	II-1: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta =$ 9,4832 (3,1); 9,4659 (3,2); 9,3714 (11,3); 9,3679 (11,9); 9,2522 (11,7); 9,2488 (11,1); 8,3656 (16,0); 8,3164 (0,5); 8,1869 (0,9); 8,1832 (0,35); 8,1326 (5,7); 8,1312 (5,7); 8,0838 (0,35); 6,0824 (0,5); 6,0653 (2,4); 6,0480 (3,8); 6,0306 (0,9); 6,0134 (0,5); 3,3253 (117,3); 2,6806 (0,4); 2,6763 (0,8); 2,6716 (1,1); 2,6670 (0,8); 2,6624 (0,4); 2,5252 (0,81); 2,5205 (4,8); 2,5118 (66,4); 2,5073 (135,9); 2,5027 (179,2); 2,4980 (126,7); 2,4935 (58,8); 2,3387 (0,81); 2,3341 (0,8); 2,3295 (1,1); 2,3249 (0,8); 2,3205 (0,3); 2,0752 (9,0); 1,6390 (14,6); 1,6216 (14,5); 0,1459 (1,0); 0,0080 (8,5); -0,0002 (250,5); -0,0086 (8,0); -0,1496 (0,9)
II-2	 (hợp chất tham khảo)	II-2: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta =$ 10,2538 (2,7); 9,3385 (1,5); 9,3206 (1,5); 8,7248 (2,7); 8,7185 (2,7); 8,2818 (1,6); 8,2753 (1,6); 8,2597 (1,8); 8,2532 (1,8); 8,1090 (6,5); 8,0859 (2,7); 8,0325 (4,3); 7,7627 (2,7); 7,7405 (2,5); 5,9361 (1,0); 5,9186 (1,6); 5,9010 (1,0); 5,7568 (4,0); 4,2795 (0,4); 4,2619 (0,8); 4,2443 (0,4); 3,3253 (10,4); 2,6606 (0,4); 2,6434 (1,1); 2,6263 (1,5); 2,6093 (1,2); 2,5923 (0,4); 2,5267 (0,8); 2,5219 (1,3); 2,5131 (16,6); 2,5088 (34,2); 2,5042 (45,5); 2,4997 (34,4); 2,4953 (17,6); 2,4454 (0,3); 2,4260 (0,6); 2,4050 (0,4); 1,9901 (1,2); 1,6301 (6,0); 1,6127 (5,9); 1,3846 (1,0); 1,2335 (0,6); 1,1941 (0,4); 1,1763 (0,7); 1,1585 (0,4); 1,1370 (16,0); 1,1199 (15,6); 1,0886 (0,8); 1,0712 (0,8); 1,0677 (0,5); 1,0501 (0,4); 0,9914 (0,5); 0,9870 (0,8); 0,9734 (0,3); 0,9699 (0,8); -0,0002 (1,9)
II-3	 (hợp chất tham khảo)	II-3: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta =$ 9,3588 (3,4); 9,3413 (3,5); 8,9199 (7,0); 8,9063 (7,3); 8,4329 (7,2); 8,4280 (7,4); 8,3140 (0,3); 8,2699 (16,0); 8,2034 (5,0); 8,1983 (0,35); 8,1898 (4,8); 8,1847 (4,6); 7,9480 (0,35); 7,9441 (7,9); 7,9402 (5,2); 7,7710 (5,2); 7,7228 (5,0); 7,7204 (5,4); 6,1118 (0,6); 6,0944 (2,6); 6,0770 (4,1);

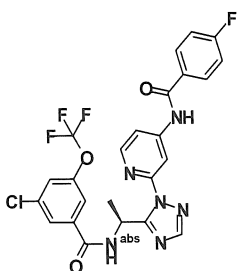
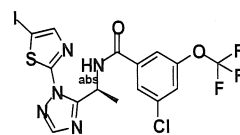
		6,0596 (2,6); 6,0422 (0,6); 3,5687 (1,3); 3,3195 (0,81); 2,6763 (0,7); 2,6718 (0,9); 2,6673 (0,7); 2,5252 (2,8); 2,5203 (4,1); 2,5117 (56,4); 2,5074 (0,81); 2,5029 (148,0); 2,4984 (106,6); 2,4940 (51,9); 2,3342 (0,6); 2,3298 (0,9); 2,3253 (0,7); 1,9891 (1,0); 1,6484 (15,5); 1,6310 (15,5); 1,3980 (10,8); 1,1758 (0,5); -0,0002 (8,8)
II-4	 (hợp chất tham khảo)	II-4: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta =$ 9,1806 (2,3); 9,1608 (2,4); 9,0997 (4,2); 9,0980 (4,6); 9,0943 (4,6); 9,0925 (4,3); 8,5854 (3,8); 8,5798 (3,6); 8,5639 (4,1); 8,5583 (4,0); 8,3226 (1,2); 8,3162 (0,6); 8,3088 (12,1); 8,3030 (3,6); 8,2836 (3,5); 8,2673 (4,5); 8,2504 (1,7); 8,1506 (3,7); 8,1472 (3,7); 8,1319 (2,9); 8,1286 (2,8); 8,0990 (4,9); 8,0972 (4,8); 8,0775 (4,5); 8,0756 (4,5); 6,1760 (0,4); 6,1587 (1,8); 6,1407 (2,3); 6,1221 (1,8); 6,1049 (0,4); 5,7566 (16,0); 3,3233 (33,6); 2,6771 (0,4); 2,6725 (0,6); 2,6678 (0,4); 2,5261 (1,7); 2,5213 (2,7); 2,5127 (37,5); 2,5082 (76,6); 2,5036 (100,4); 2,4990 (71,6); 2,4945 (33,7); 2,3350 (0,4); 2,3304 (0,6); 2,3259 (0,4); 1,6560 (12,2); 1,6388 (12,2); 1,2335 (0,4); 0,0080 (2,6); -0,0002 (81,1); -0,0086 (2,6)
II-5	 (hợp chất tham khảo)	II-5: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta =$ 9,6849 (3,1); 9,6677 (3,2); 9,0848 (0,4); 9,0812 (0,4); 9,0793 (0,4); 9,0691 (5,7); 9,0673 (6,4); 9,0636 (6,4); 9,0618 (6,1); 8,8059 (0,4); 8,7946 (0,3); 8,7828 (0,3); 8,7618 (0,3); 8,6001 (0,3); 8,5945 (0,4); 8,5892 (5,1); 8,5837 (4,9); 8,5787 (0,6); 8,5730 (0,6); 8,5677 (5,5); 8,5622 (5,5); 8,3145 (0,4); 8,2871 (1,0); 8,2701 (16,0); 8,2208 (8,4); 8,2184 (9,1); 8,1742 (8,6); 8,1603 (0,7); 8,1558 (0,7); 8,1048 (0,4); 8,0914 (6,4); 8,0896 (6,6); 8,0699 (5,9); 8,0681 (6,2); 6,1494 (0,6); 6,1324 (2,6); 6,1151 (4,0); 6,0978 (2,6); 6,0804 (0,5); 5,7551 (7,3); 3,3222 (145,1); 2,6807 (0,4); 2,6765 (0,8); 2,6719 (1,1); 2,6674 (0,8); 2,6627 (0,4); 2,5254 (3,4); 2,5207 (4,9); 2,5120 (65,9); 2,5075 (134,9); 2,5029 (177,6); 2,4983 (127,7); 2,4938 (61,5); 2,3388 (0,4); 2,3343 (0,8); 2,3298 (1,1); 2,3252 (0,8); 2,3207 (0,4); 2,0749 (1,4); 1,6792 (0,9); 1,6558 (15,6); 1,6385 (15,4); 1,2341 (0,4); 1,1216 (0,4); -0,0001 (4,2)

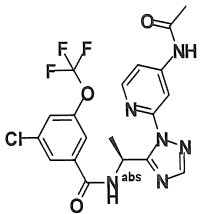
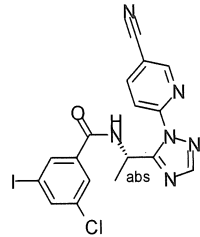
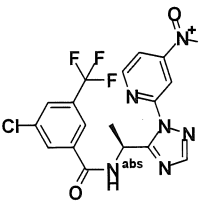
II-7	 (hợp chất tham khảo)	II-7: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta = 9,3027$ (3,7); $9,2847$ (3,7); $8,0268$ (16,0); $7,9708$ (5,1); $7,9670$ (8,1); $7,9629$ (5,5); $7,9497$ (7,1); $7,9354$ (7,2); $7,7679$ (5,5); $7,7496$ (5,6); $7,7471$ (5,5); $6,9388$ (7,8); $6,9338$ (8,1); $6,5347$ (4,8); $6,5295$ (4,9); $6,5205$ (5,4); $6,5152$ (6,5); $6,5063$ (9,5); $6,0474$ (0,6); $6,0303$ (2,6); $6,0127$ (4,0); $5,9950$ (2,6); $5,9774$ (0,6); $5,7567$ (13,0); $4,0574$ (0,3); $4,0397$ (1,1); $4,0219$ (1,1); $4,0043$ (0,6); $3,3295$ (47,2); $3,1786$ (0,8); $3,1656$ (0,8); $2,6737$ (0,4); $2,5272$ (1,3); $2,5224$ (2,0); $2,5137$ (26,2); $2,5093$ (53,5); $2,5048$ (70,4); $2,5003$ (51,4); $2,4959$ (25,3); $2,3316$ (0,4); $2,3273$ (0,3); $2,0476$ (0,4); $2,0142$ (1,4); $1,9904$ (4,6); $1,9112$ (4,9); $1,5860$ (15,0); $1,5686$ (14,7); $1,1942$ (1,3); $1,1764$ (2,5); $1,1586$ (1,2); $0,0080$ (1,9); $-0,0002$ (57,6); $-0,0085$ (2,2)
II-8	 (hợp chất tham khảo)	II-8: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta = 9,4752$ (3,0); $9,4561$ (3,1); $9,3026$ (6,5); $9,2900$ (6,7); $9,0857$ (5,6); $9,0840$ (6,1); $9,0803$ (6,2); $9,0786$ (5,8); $8,5877$ (4,9); $8,5822$ (4,7); $8,5662$ (5,3); $8,5606$ (5,3); $8,3095$ (15,7); $8,2380$ (6,4); $8,2254$ (6,2); $8,0996$ (6,3); $8,0979$ (6,4); $8,0781$ (5,8); $8,0764$ (5,9); $6,1753$ (0,6); $6,1580$ (2,5); $6,1400$ (3,6); $6,1220$ (2,6); $6,1046$ (0,6); $5,7557$ (15,6); $3,3242$ (95,1); $2,6770$ (0,6); $2,6723$ (0,8); $2,6678$ (0,6); $2,5258$ (2,2); $2,5210$ (3,7); $2,5124$ (49,3); $2,5080$ (100,1); $2,5034$ (131,6); $2,4988$ (94,8); $2,4943$ (45,8); $2,3348$ (0,6); $2,3303$ (0,8); $2,3256$ (0,6); $1,6646$ (16,0); $1,6474$ (16,0); $1,2341$ (0,4); $0,1460$ (0,4); $0,0081$ (3,5); $-0,0001$ (99,7); $-0,0085$ (3,3); $-0,1495$ (0,4)
II-9	 (hợp chất tham khảo)	II-9: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta = 9,1182$ (2,5); $9,1120$ (4,8); $9,1103$ (5,0); $9,1065$ (5,1); $9,1047$ (4,9); $9,0989$ (2,5); $8,5877$ (3,7); $8,5822$ (3,6); $8,5662$ (4,0); $8,5606$ (4,0); $8,2908$ (11,9); $8,0961$ (4,7); $8,0943$ (4,6); $8,0746$ (4,6); $8,0725$ (6,2); $8,0526$ (6,2); $8,0331$ (4,7); $7,9711$ (4,6); $7,9689$ (5,1); $7,9522$ (3,5); $7,9499$ (3,2); $7,7663$ (4,4); $7,7641$ (4,4); $7,7465$ (4,0); $7,7443$ (3,8); $6,1512$ (0,4); $6,1340$ (1,8); $6,1157$ (2,4); $6,0976$ (1,8); $6,0802$ (0,4); $5,7564$ (16,0); $3,3237$ (21,8); $2,6730$ (0,4); $2,6683$ (0,3); $2,5264$ (1,4); $2,5216$ (2,2); $2,5131$ (25,9); $2,5086$ (52,8); $2,5040$ (69,8); $2,4994$ (50,3); $2,4949$ (24,0); $2,3309$ (0,4); $1,6367$ (11,9); $1,6195$ (11,8); $1,4397$ (0,5); $1,4229$

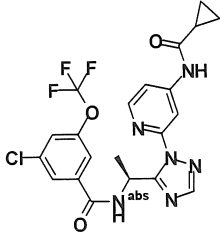
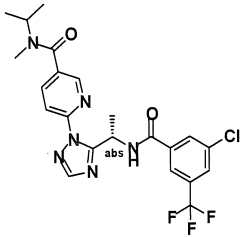
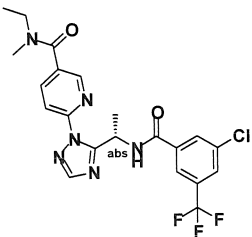
		(0,5); 1,2325 (0,4); 1,1253 (0,5); 1,1086 (0,5); 0,0080 (1,9); -0,0002 (54,4); -0,0085 (1,8)
II-10	 (hợp chất tham khảo)	II-10: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,4374 (3,5); 9,4200 (3,5); 9,0607 (6,6); 9,0570 (6,3); 9,0553 (6,4); 8,5846 (4,5); 8,5791 (4,4); 8,5631 (4,9); 8,5576 (4,9); 8,2444 (16,0); 8,2349 (6,4); 8,1193 (3,0); 8,1147 (2,8); 8,0983 (3,5); 8,0937 (3,4); 8,0848 (6,3); 8,0835 (6,8); 8,0635 (5,7); 8,0620 (6,2); 7,8546 (5,7); 7,8336 (4,9); 6,1214 (0,6); 6,1042 (2,5); 6,0868 (4,0); 6,0694 (2,6); 6,0519 (0,6); 5,7564 (7,2); 3,3256 (95,4); 2,6769 (0,6); 2,6725 (0,8); 2,6681 (0,6); 2,5428 (0,7); 2,5258 (2,2); 2,5079 (102,9); 2,5035 (134,7); 2,4990 (98,5); 2,3349 (0,6); 2,3302 (0,8); 2,3257 (0,6); 1,6444 (15,2); 1,6270 (15,2); 1,2332 (0,4); 0,0079 (1,8); -0,0001 (52,8); -0,0083 (2,0)
II-11	 (hợp chất tham khảo)	II-11: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,3406 (3,7); 9,3233 (3,8); 9,0615 (6,8); 9,0576 (6,8); 9,0561 (6,6); 8,5841 (4,8); 8,5786 (4,7); 8,5626 (5,2); 8,5571 (5,2); 8,3151 (0,4); 8,2422 (16,0); 8,0857 (6,5); 8,0842 (6,9); 8,0642 (6,1); 8,0626 (6,4); 7,9787 (4,9); 7,9745 (8,3); 7,9703 (6,2); 7,9443 (5,6); 7,9407 (9,3); 7,9372 (5,3); 7,8319 (5,1); 7,8276 (8,3); 7,8234 (4,8); 7,7339 (3,3); 7,5951 (7,6); 7,4563 (3,7); 6,1051 (0,6); 6,0880 (2,7); 6,0706 (4,2); 6,0532 (2,7); 6,0357 (0,6); 3,3224 (116,0); 2,6757 (1,0); 2,6711 (1,4); 2,6667 (1,0); 2,5245 (4,1); 2,5108 (84,0); 2,5067 (168,6); 2,5022 (222,0); 2,4977 (165,6); 2,4934 (83,7); 2,3336 (0,9); 2,3290 (1,3); 2,3246 (1,0); 1,6355 (15,9); 1,6182 (15,9); 1,2342 (0,6); 0,1457 (0,6); 0,0078 (5,4); -0,0003 (145,0); -0,0084 (6,6); -0,1498 (0,6)
II-12	 (hợp chất tham khảo)	II-12: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,3833 (3,1); 9,3659 (3,2); 9,0677 (6,0); 9,0658 (6,4); 9,0622 (6,6); 9,0602 (6,1); 8,5860 (5,5); 8,5804 (5,2); 8,5645 (5,9); 8,5590 (5,9); 8,2428 (16,0); 8,0875 (6,6); 8,0856 (6,4); 8,0661 (6,2); 8,0641 (6,1); 8,0355 (5,0); 7,9742 (5,6); 7,8275 (4,9); 7,2298 (2,7); 7,0914 (6,2); 6,9530 (3,0); 6,1173 (0,5); 6,1000 (2,4); 6,0826 (3,8); 6,0652 (2,4); 6,0478 (0,5); 3,3271 (45,2); 2,6779 (0,3); 2,6734 (0,5); 2,6689 (0,4); 2,5269 (1,3); 2,5222 (2,0); 2,5135 (29,1); 2,5090 (59,7); 2,5044 (78,1); 2,4998 (55,2); 2,4952 (26,0); 2,3357 (0,4); 2,3312

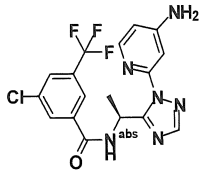
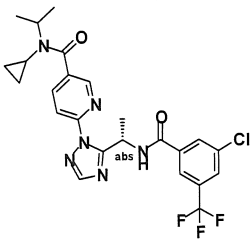
		(0,5); 2,3267 (0,4); 2,0765 (0,8); 1,6408 (14,4); 1,6234 (14,3); 0,1459 (0,4); 0,0080 (3,6); -0,0002 (106,0); -0,0086 (3,3); -0,1496 (0,4)
II-13	 (hợp chất tham khảo)	II-13: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta =$ 9,3085 (2,5); 9,2911 (2,6); 9,0652 (4,4); 9,0633 (5,0); 9,0597 (5,1); 9,0578 (4,8); 8,5862 (3,8); 8,5806 (3,8); 8,5647 (4,1); 8,5592 (4,2); 8,2404 (11,6); 8,0827 (4,7); 8,0809 (4,8); 8,0612 (4,5); 8,0594 (4,5); 8,0349 (3,3); 8,0306 (7,0); 8,0262 (5,0); 7,9879 (16,0); 7,9835 (13,9); 6,0879 (0,4); 6,0707 (1,8); 6,0533 (2,9); 6,0359 (1,9); 6,0186 (0,4); 5,7561 (3,0); 3,3245 (105,2); 2,6762 (0,7); 2,6717 (0,9); 2,6673 (0,7); 2,5251 (2,6); 2,5203 (4,3); 2,5117 (53,3); 2,5072 (109,2); 2,5027 (145,2); 2,4981 (109,1); 2,4937 (57,3); 2,3340 (0,6); 2,3295 (0,8); 2,3249 (0,6); 1,6224 (11,0); 1,6050 (11,1); 1,5842 (0,4); 1,2343 (0,4); 0,0079 (2,2); -0,0002 (62,2); -0,0084 (3,4)
II-14	 (hợp chất tham khảo)	II-14: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta =$ 9,3718 (3,5); 9,3546 (3,5); 9,0597 (6,6); 9,0544 (6,5); 8,5846 (4,3); 8,5791 (4,1); 8,5631 (4,5); 8,5576 (4,5); 8,2456 (15,4); 8,0848 (12,7); 8,0616 (6,3); 7,8843 (5,6); 7,7581 (5,6); 6,1028 (0,6); 6,0856 (2,7); 6,0682 (4,2); 6,0508 (2,7); 6,0336 (0,6); 5,7560 (0,5); 3,3234 (66,6); 2,6765 (0,8); 2,6721 (1,1); 2,6676 (0,8); 2,5253 (3,5); 2,5117 (70,6); 2,5075 (139,5); 2,5031 (180,7); 2,4986 (131,2); 2,4944 (64,8); 2,3343 (0,8); 2,3299 (1,1); 2,3254 (0,8); 1,6377 (16,0); 1,6203 (15,9); 1,2340 (0,6); 0,1458 (0,8); 0,0079 (6,1); -0,0001 (177,8); -0,0084 (6,9); -0,1496 (0,8)
II-15	 (hợp chất tham khảo)	II-15: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta =$ 9,4223 (2,4); 9,4058 (2,5); 8,2380 (11,7); 8,0096 (3,6); 8,0055 (5,7); 8,0015 (3,9); 7,9361 (16,0); 7,7961 (3,7); 7,7837 (3,9); 7,7810 (3,8); 5,9819 (0,4); 5,9650 (1,8); 5,9479 (2,7); 5,9308 (1,8); 5,9136 (0,4); 3,3268 (32,9); 2,6739 (0,4); 2,5275 (1,0); 2,5228 (1,5); 2,5141 (20,9); 2,5096 (43,1); 2,5050 (56,6); 2,5004 (40,2); 2,4958 (19,0); 2,3319 (0,4); 1,6194 (0,4); 1,6019 (10,7); 1,3974 (1,1); 0,0080 (2,0); -0,0002 (0,4); -0,0085 (2,0)
II-16		II-16: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta =$ 9,4228 (2,5); 9,4063 (2,6); 8,2369 (11,9); 8,0113 (3,8); 8,0072 (6,0); 8,0032 (4,1); 7,8909

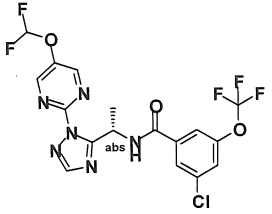
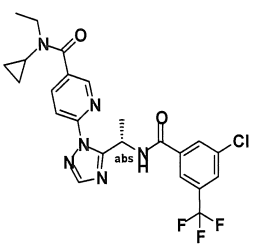
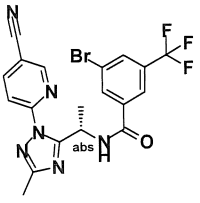
	(hợp chất tham khảo)	(16,0); 7,7976 (3,9); 7,7847 (4,1); 7,7821 (4,0); 5,9773 (0,4); 5,9601 (1,8); 5,9430 (2,8); 5,9259 (1,9); 5,9085 (0,4); 3,6563 (0,6); 3,3233 (22,3); 2,9457 (0,4); 2,6772 (0,4); 2,6725 (0,5); 2,6680 (0,4); 2,5261 (1,6); 2,5214 (2,3); 2,5127 (31,8); 2,5082 (65,7); 2,5036 (86,6); 2,4990 (62,5); 2,4945 (30,3); 2,3351 (0,4); 2,3305 (0,5); 2,3259 (0,4); 1,6196 (11,3); 1,6021 (11,3); 1,3976 (10,8); 1,3564 (0,4); 0,1458 (0,4); 0,0079 (2,6); -0,0002 (85,4); -0,0085 (3,2); -0,1496 (0,4)
II-17	 (hợp chất tham khảo)	II-17: $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ = 9,2590 (0,8); 9,2410 (0,8); 8,7783 (1,4); 8,7764 (1,5); 8,7657 (1,5); 8,7638 (1,6); 8,2422 (1,5); 8,2393 (2,1); 8,2371 (1,6); 7,9242 (1,4); 7,9208 (1,4); 7,9116 (1,3); 7,9081 (1,3); 7,8221 (3,3); 7,8175 (6,3); 7,8076 (2,0); 7,8030 (1,7); 7,7983 (0,8); 6,0068 (0,7); 5,9893 (1,1); 5,9716 (0,7); 3,3242 (31,1); 2,5252 (0,8); 2,5205 (1,2); 2,5118 (16,5); 2,5073 (33,9); 2,5028 (44,5); 2,4982 (31,7); 2,4936 (15,1); 2,3434 (11,0); 2,3344 (0,5); 2,3296 (0,4); 1,6027 (3,8); 1,5854 (3,8); 1,3976 (16,0); 0,0079 (1,6); -0,0002 (46,4); -0,0086 (1,5)
II-18	 (hợp chất tham khảo)	II-18: $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ = 9,4080 (1,0); 9,3900 (1,0); 8,7776 (1,8); 8,7757 (1,8); 8,7650 (1,8); 8,7631 (1,9); 8,2442 (1,8); 8,2413 (2,6); 8,2390 (1,9); 8,1529 (1,9); 8,0950 (1,8); 8,0659 (1,7); 7,9206 (1,7); 7,9172 (1,6); 7,9080 (1,6); 7,9045 (1,6); 6,0389 (0,8); 6,0213 (1,3); 6,0037 (0,8); 3,3204 (36,2); 2,6800 (0,3); 2,6754 (0,7); 2,6708 (1,0); 2,6662 (0,7); 2,6618 (0,4); 2,5243 (3,0); 2,5196 (4,4); 2,5109 (59,1); 2,5064 (122,1); 2,5019 (161,1); 2,4972 (115,2); 2,4927 (54,8); 2,3458 (13,0); 2,3333 (0,9); 2,3287 (1,0); 2,3241 (0,8); 2,3197 (0,4); 1,6229 (4,5); 1,6055 (4,5); 1,3979 (16,0); 0,1459 (0,7); 0,0080 (5,1); -0,0002 (161,0); -0,0086 (5,3); -0,1496 (0,6)
II-19	 (hợp chất tham khảo)	II-19: $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ = 9,5612 (0,8); 9,5432 (0,8); 8,7787 (1,4); 8,7767 (1,4); 8,7660 (1,4); 8,7641 (1,5); 8,4426 (3,0); 8,3131 (1,3); 8,2472 (1,5); 8,2443 (2,0); 8,2421 (1,5); 7,9179 (1,3); 7,9145 (1,3); 7,9053 (1,2); 7,9018 (1,2); 6,0751 (0,6); 6,0576 (1,0); 6,0399 (0,6); 3,3201 (19,6); 2,6758 (0,3); 2,6713 (0,5); 2,6667 (0,3); 2,5248 (1,5); 2,5201 (2,3); 2,5113 (28,9); 2,5069 (58,0); 2,5024 (75,5); 2,4978 (54,2); 2,4934 (26,2); 2,3493 (10,0); 2,3338 (0,4);

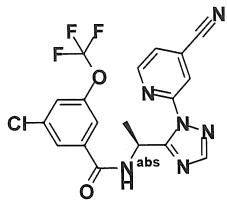
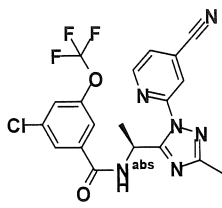
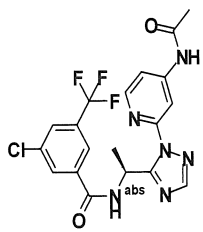
		2,3292 (0,5); 2,3246 (0,4); 1,6451 (3,5); 1,6277 (3,5); 1,3979 (16,0); 0,0080 (2,4); -0,0002 (72,3); -0,0085 (2,6)
II-20	 (hợp chất tham khảo)	II-20: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 10,8923 (6,2); 9,3132 (3,2); 9,2955 (3,3); 8,4549 (6,0); 8,4407 (6,4); 8,3793 (6,6); 8,3749 (6,6); 8,1467 (16,0); 8,1118 (0,5); 8,1043 (5,0); 8,0989 (2,1); 8,0907 (5,6); 8,0853 (2,8); 8,0819 (5,8); 8,0738 (2,2); 8,0684 (5,3); 8,0609 (0,6); 8,0218 (1,2); 8,0165 (0,5); 8,0078 (1,3); 7,9994 (1,4); 7,9909 (0,5); 7,9854 (1,4); 7,9298 (4,6); 7,9256 (7,2); 7,9218 (5,2); 7,8436 (4,1); 7,8387 (4,1); 7,8294 (4,1); 7,8246 (4,1); 7,7511 (4,6); 7,7101 (4,5); 7,7074 (4,9); 7,7049 (4,0); 7,4564 (0,6); 7,4489 (5,6); 7,4437 (1,7); 7,4318 (2,0); 7,4268 (10,5); 7,4217 (2,1); 7,4099 (1,6); 7,4046 (5,3); 7,3970 (0,6); 7,3421 (1,2); 7,3367 (0,4); 7,3250 (0,4); 7,3198 (2,3); 7,3147 (0,4); 7,3028 (0,4); 7,2975 (1,2); 7,2415 (0,4); 6,0648 (0,5); 6,0474 (2,2); 6,0299 (3,5); 6,0124 (2,2); 5,9948 (0,5); 5,7566 (6,5); 4,0568 (0,4); 4,0389 (1,3); 4,0212 (1,3); 4,0034 (0,4); 3,3254 (43,8); 3,1773 (1,1); 3,1643 (1,0); 2,6773 (0,7); 2,6727 (1,0); 2,6681 (0,7); 2,6635 (0,3); 2,5262 (3,0); 2,5215 (4,6); 2,5128 (57,6); 2,5084 (118,4); 2,5038 (155,9); 2,4991 (111,3); 2,4946 (53,0); 2,3776 (1,3); 2,3352 (0,7); 2,3306 (1,0); 2,3259 (0,7); 2,3215 (0,3); 1,9897 (6,0); 1,9105 (1,8); 1,6405 (12,9); 1,6231 (12,8); 1,5925 (0,5); 1,5751 (0,4); 1,1937 (1,7); 1,1760 (3,4); 1,1581 (1,7); 0,1459 (0,7); 0,0158 (0,4); 0,0079 (5,9); -0,0002 (177,3); -0,0086 (5,9); -0,1497 (0,7)
II-21	 (hợp chất tham khảo)	II-21: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,4091 (2,4); 9,3924 (2,5); 8,2235 (11,9); 7,9999 (3,6); 7,9959 (5,6); 7,9919 (3,8); 7,9415 (16,0); 7,9351 (0,4); 7,7946 (3,6); 7,7749 (3,7); 7,7722 (3,8); 5,9825 (0,4); 5,9656 (1,7); 5,9484 (2,7); 5,9313 (1,8); 5,9140 (0,4); 3,3270 (220,1); 2,6810 (0,3); 2,6767 (0,7); 2,6719 (1,0); 2,6674 (0,7); 2,6628 (0,3); 2,5255 (2,9); 2,5208 (4,2); 2,5121 (59,1); 2,5076 (121,2); 2,5030 (158,7); 2,4984 (112,5); 2,4938 (53,1); 2,3343 (0,7); 2,3298 (1,0); 2,3252 (0,7); 1,9893 (0,7); 1,6098 (10,6); 1,5923 (10,5); 1,3978 (2,1); 1,1757 (0,4); 0,0080 (0,7); -0,0002 (25,0); -0,0085 (0,8)

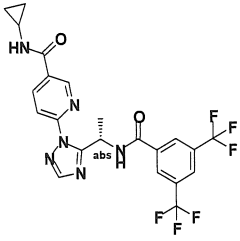
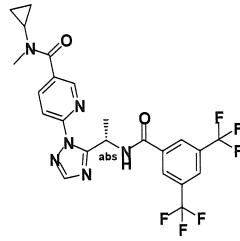
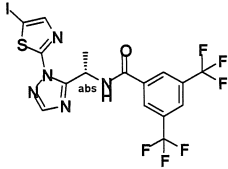
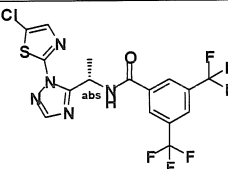
II-22	 (hợp chất tham khảo)	II-22: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 10,6318 (2,4); 9,2921 (1,4); 9,2744 (1,5); 8,3735 (2,8); 8,3594 (2,9); 8,1646 (3,0); 8,1603 (3,0); 8,1174 (6,1); 7,9207 (1,9); 7,9169 (3,2); 7,9133 (2,1); 7,7606 (2,3); 7,6986 (2,3); 7,5280 (1,8); 7,5232 (1,8); 7,5139 (1,8); 7,5091 (1,8); 6,0172 (1,0); 5,9997 (1,6); 5,9823 (1,1); 4,0569 (0,6); 4,0391 (1,8); 4,0214 (1,8); 4,0036 (0,6); 3,3255 (13,9); 2,5263 (0,8); 2,5126 (19,3); 2,5085 (38,3); 2,5041 (49,9); 2,4996 (36,3); 2,4955 (18,1); 2,2097 (0,4); 2,1266 (16,0); 1,9900 (7,6); 1,9108 (3,8); 1,6183 (6,1); 1,6009 (6,1); 1,1939 (2,1); 1,1761 (4,2); 1,1583 (2,1); 0,0079 (1,8); -0,0002 (48,2); -0,0085 (1,7)
II-23	 (hợp chất tham khảo)	II-23: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,2865 (3,7); 9,2691 (3,8); 9,0641 (6,9); 9,0600 (6,6); 9,0587 (6,7); 8,5871 (4,7); 8,5815 (4,6); 8,5656 (5,0); 8,5601 (5,1); 8,2395 (15,9); 8,1109 (5,5); 8,1076 (9,7); 8,1042 (6,1); 8,0819 (6,9); 8,0605 (6,5); 8,0160 (5,2); 8,0117 (8,2); 8,0079 (5,3); 7,8435 (5,6); 7,8392 (8,4); 7,8353 (5,4); 6,0847 (0,6); 6,0675 (2,7); 6,0502 (4,2); 6,0328 (2,7); 6,0154 (0,6); 5,7575 (0,5); 3,3323 (37,0); 2,6784 (0,3); 2,6742 (0,4); 2,6699 (0,3); 2,5098 (55,5); 2,5053 (71,3); 2,5008 (52,1); 2,4966 (25,8); 2,3322 (0,4); 1,6216 (16,0); 1,6042 (15,8); -0,0002 (4,3)
II-24	 (hợp chất tham khảo)	II-24: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,4456 (3,0); 9,4280 (3,1); 9,0525 (0,4); 9,0293 (0,4); 8,9237 (6,5); 8,9224 (6,5); 8,9101 (6,8); 8,9088 (6,8); 8,4349 (6,5); 8,4336 (6,9); 8,4298 (7,2); 8,4285 (6,6); 8,3156 (1,0); 8,2754 (16,0); 8,2663 (0,7); 8,2141 (0,6); 8,2044 (6,1); 8,1993 (5,7); 8,1908 (5,7); 8,1857 (5,6); 8,1520 (5,7); 8,1483 (3,9); 8,1088 (0,6); 8,0909 (5,5); 8,0894 (5,7); 8,0674 (5,1); 6,1303 (0,5); 6,1131 (2,4); 6,0957 (3,7); 6,0783 (2,4); 6,0611 (0,5); 3,5682 (7,0); 3,3209 (124,7); 2,9963 (0,4); 2,8876 (0,4); 2,6801 (0,9); 2,6756 (2,0); 2,6710 (2,8); 2,6663 (2,0); 2,6619 (0,9); 2,5245 (7,9); 2,5198 (12,0); 2,5111 (165,2); 2,5066 (338,7); 2,5020 (443,8); 2,4974 (313,4); 2,4928 (146,5); 2,3381 (0,9); 2,3334 (2,0); 2,3288 (2,7); 2,3242 (2,0); 2,3196 (0,9); 1,9888 (0,8); 1,6564 (14,4); 1,6390 (14,4); 1,4272 (1,5); 1,4090 (1,6); 1,3979 (13,1); 1,1752

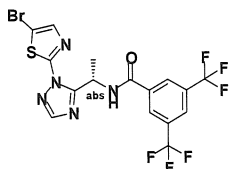
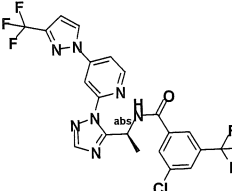
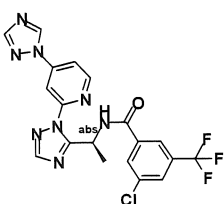
		(0,5); 0,1460 (1,3); 0,0081 (11,7); -0,0001 (364,6); -0,0085 (11,8); -0,1496 (1,4)
II-25	 (hợp chất tham khảo)	II-25: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 10,8957 (5,3); 9,2842 (3,1); 9,2664 (3,2); 8,3690 (6,1); 8,3548 (6,3); 8,3150 (0,9); 8,1687 (6,5); 8,1645 (6,4); 8,1093 (16,0); 7,9132 (4,7); 7,9091 (6,9); 7,9051 (5,0); 7,7572 (4,3); 7,6934 (4,2); 7,6908 (4,6); 7,6882 (3,8); 7,5459 (4,0); 7,5411 (4,0); 7,5318 (3,9); 7,5270 (3,9); 6,0310 (0,4); 6,0136 (2,1); 5,9961 (3,4); 5,9786 (2,1); 5,9613 (0,4); 3,3230 (201,0); 2,6806 (0,7); 2,6760 (1,5); 2,6715 (2,1); 2,6668 (1,5); 2,6624 (0,7); 2,5250 (6,4); 2,5203 (9,4); 2,5116 (120,8); 2,5071 (248,3); 2,5025 (327,2); 2,4979 (231,4); 2,4933 (108,1); 2,3385 (0,6); 2,3339 (1,4); 2,3293 (2,0); 2,3247 (1,4); 2,3202 (0,6); 2,0744 (1,1); 1,8564 (0,5); 1,8438 (1,1); 1,8387 (1,2); 1,8340 (1,0); 1,8260 (2,4); 1,8191 (1,0); 1,8139 (1,2); 1,8085 (1,3); 1,7948 (0,8); 1,6154 (12,6); 1,5980 (12,6); 0,9193 (0,4); 0,9051 (2,0); 0,8977 (5,8); 0,8812 (8,2); 0,8784 (8,7); 0,8732 (6,7); 0,8708 (6,9); 0,8478 (0,3); 0,1460 (0,7); 0,0081 (6,4); -0,0001 (198,6); -0,0084 (6,0); -0,1495 (0,8)
II-26	 (hợp chất tham khảo)	II-26: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,4000 (3,0); 9,3822 (3,1); 8,5771 (1,0); 8,5287 (1,6); 8,3149 (1,4); 8,1879 (16,0); 8,1330 (4,3); 8,0887 (7,4); 8,0630 (7,3); 7,9241 (3,3); 7,9038 (2,6); 6,1074 (0,6); 6,0905 (2,4); 6,0731 (3,8); 6,0557 (2,4); 6,0377 (0,6); 4,7090 (0,5); 4,0561 (0,8); 4,0381 (2,4); 4,0203 (2,4); 4,0024 (0,8); 3,6982 (1,0); 3,3202 (189,4); 2,8490 (4,9); 2,7135 (2,8); 2,6752 (2,5); 2,6708 (3,2); 2,6666 (2,5); 2,5239 (10,4); 2,5063 (376,7); 2,5019 (490,7); 2,4975 (362,9); 2,3816 (0,8); 2,3332 (2,1); 2,3287 (2,9); 2,3244 (2,2); 2,2066 (0,7); 1,9887 (10,6); 1,8554 (0,4); 1,6514 (16,0); 1,6341 (15,9); 1,3979 (2,1); 1,2357 (0,8); 1,1929 (3,6); 1,1752 (8,8); 1,1574 (6,8); 1,0823 (6,5); 0,1457 (0,7); 0,0079 (6,0); -0,0002 (149,6); -0,0083 (5,7); -0,1496 (0,7)
II-27		II-27: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,4050 (3,0); 9,3874 (3,0); 8,5881 (1,6); 8,5467 (1,8); 8,3159 (1,2); 8,2118 (0,3); 8,1887 (16,0); 8,1388 (6,4); 8,0914 (8,1); 8,0590 (6,9); 7,9218 (6,0); 7,9009 (4,9); 6,1090 (0,6); 6,0916 (2,6); 6,0741 (4,0); 6,0567 (2,6); 6,0391 (0,6); 4,0562

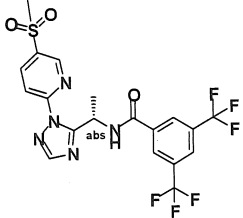
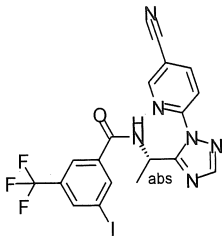
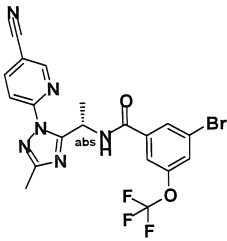
	(hợp chất tham khảo)	(0,6); 4,0384 (1,8); 4,0206 (1,9); 4,0028 (0,6); 3,4937 (1,4); 3,4775 (1,5); 3,3228 (84,9); 3,2990 (0,7); 3,1682 (1,6); 3,1512 (1,6); 2,9745 (5,4); 2,8712 (5,0); 2,8303 (0,4); 2,8189 (0,4); 2,6760 (1,0); 2,6717 (1,3); 2,6673 (1,0); 2,5248 (4,8); 2,5072 (161,0); 2,5027 (211,0); 2,4983 (157,5); 2,3340 (0,9); 2,3296 (1,3); 2,3251 (1,0); 1,9893 (8,1); 1,6513 (15,9); 1,6340 (15,9); 1,3527 (0,7); 1,3348 (0,7); 1,2590 (0,3); 1,2350 (0,7); 1,1933 (2,3); 1,1755 (5,2); 1,1576 (4,2); 1,1517 (3,1); 1,1355 (1,9); 1,0505 (2,1); 1,0350 (3,2); 0,0078 (2,6); -0,0002 (64,1); -0,0083 (2,8)
II-28	 (hợp chất tham khảo)	II-28: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,3830 (3,3); 9,3650 (3,3); 8,1660 (6,3); 8,1241 (6,2); 8,0595 (6,0); 8,0295 (16,0); 7,9511 (6,9); 7,9369 (7,1); 6,9359 (7,6); 6,9309 (7,9); 6,5327 (4,9); 6,5274 (4,9); 6,5184 (5,4); 6,5131 (6,4); 6,5039 (8,8); 6,0648 (0,5); 6,0474 (2,4); 6,0298 (3,8); 6,0121 (2,5); 5,9946 (0,5); 4,0569 (1,0); 4,0391 (3,0); 4,0213 (3,1); 4,0036 (1,3); 3,3272 (29,8); 2,6774 (0,4); 2,6730 (0,6); 2,6684 (0,4); 2,5265 (1,7); 2,5218 (2,6); 2,5130 (35,2); 2,5086 (72,9); 2,5040 (96,6); 2,4994 (70,3); 2,4950 (34,3); 2,3353 (0,4); 2,3309 (0,6); 2,3263 (0,4); 2,0136 (1,9); 1,9900 (13,1); 1,9099 (6,8); 1,5948 (14,6); 1,5774 (14,4); 1,3971 (0,4); 1,1938 (3,6); 1,1761 (7,3); 1,1582 (3,5); 0,0080 (1,2); -0,0002 (35,6); -0,0085 (1,2)
II-29	 (hợp chất tham khảo)	II-29: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,4107 (3,0); 9,3928 (3,0); 8,6735 (5,0); 8,6693 (5,1); 8,3160 (0,4); 8,1898 (15,0); 8,1719 (6,9); 8,1666 (8,5); 8,1218 (5,2); 8,0586 (4,9); 7,8948 (5,5); 7,8935 (5,3); 7,8739 (4,9); 7,8724 (4,6); 6,1481 (0,4); 6,1308 (2,0); 6,1133 (3,2); 6,0958 (2,0); 6,0786 (0,4); 4,3297 (0,9); 4,3129 (1,1); 4,2960 (0,9); 3,3220 (57,2); 2,8213 (0,4); 2,8027 (1,1); 2,7946 (1,6); 2,7854 (1,2); 2,7675 (0,4); 2,6806 (0,4); 2,6761 (0,9); 2,6715 (1,2); 2,6670 (0,9); 2,5250 (3,6); 2,5202 (5,4); 2,5115 (73,7); 2,5071 (149,1); 2,5026 (193,7); 2,4980 (138,4); 2,4935 (66,0); 2,3340 (0,9); 2,3294 (1,2); 2,3248 (0,8); 2,0749 (4,3); 1,6472 (11,9); 1,6298 (11,9); 1,3350 (15,9); 1,3321 (16,0); 1,3179 (15,9); 1,3150 (15,7); 1,2348 (2,3); 0,8541 (0,5); 0,5235 (0,4); 0,5064 (1,9); 0,4834 (2,7); 0,4659 (1,9);

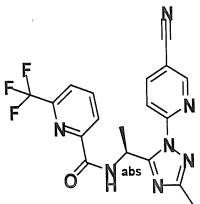
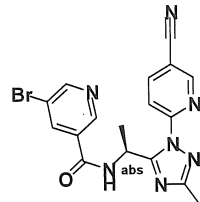
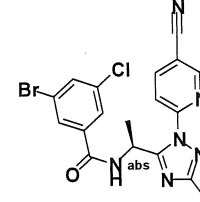
		0,4402 (0,6); 0,4067 (0,4); 0,3943 (0,8); 0,3694 (3,9); 0,0080 (2,0); -0,0002 (64,3); -0,0085 (2,2)
II-30	 (hợp chất tham khảo)	II-30: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,3285 (1,9); 9,3107 (1,9); 8,9576 (16,0); 8,3161 (0,4); 8,1781 (9,7); 7,9100 (2,9); 7,9058 (4,5); 7,9019 (3,2); 7,7658 (2,8); 7,6937 (2,7); 7,6911 (3,0); 7,6886 (2,6); 7,6222 (2,5); 7,4412 (5,5); 7,2603 (2,7); 5,9280 (1,4); 5,9105 (2,2); 5,8929 (1,4); 3,3229 (34,6); 2,6765 (0,4); 2,6719 (0,5); 2,6674 (0,4); 2,5254 (1,4); 2,5207 (2,2); 2,5120 (30,0); 2,5075 (61,8); 2,5030 (82,0); 2,4983 (58,8); 2,4938 (28,0); 2,3342 (0,4); 2,3298 (0,5); 2,3252 (0,4); 2,0751 (1,4); 1,6402 (8,6); 1,6228 (8,6); 0,1459 (0,5); 0,0080 (4,4); -0,0002 (130,5); -0,0085 (4,8); -0,0141 (0,5); -0,1497 (0,5)
II-31	 (hợp chất tham khảo)	II-31: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,4161 (3,3); 9,3983 (3,4); 8,6731 (3,5); 8,1916 (16,0); 8,1818 (2,8); 8,1683 (6,2); 8,1214 (5,9); 8,0573 (5,6); 7,9105 (6,1); 7,8906 (5,2); 7,8895 (5,4); 6,1504 (0,5); 6,1331 (2,1); 6,1156 (3,3); 6,0981 (2,1); 6,0808 (0,5); 5,7565 (14,3); 4,0397 (0,6); 4,0218 (0,6); 3,4869 (1,6); 3,3282 (17,4); 3,2809 (0,6); 3,2631 (0,6); 2,9226 (1,2); 2,6785 (0,4); 2,6735 (0,5); 2,6694 (0,4); 2,5271 (1,4); 2,5137 (26,6); 2,5093 (53,4); 2,5048 (70,3); 2,5002 (51,5); 2,4958 (25,9); 2,3317 (0,4); 2,3272 (0,3); 2,0678 (2,1); 1,9904 (2,7); 1,9114 (8,0); 1,6514 (13,6); 1,6340 (13,6); 1,2594 (0,6); 1,2332 (2,4); 1,2036 (4,7); 1,1947 (3,8); 1,1768 (2,8); 1,1590 (1,0); 1,0195 (0,6); 1,0016 (1,1); 0,9839 (0,6); 0,8537 (0,4); 0,8256 (0,4); 0,8127 (0,4); 0,7077 (0,5); 0,7001 (0,4); 0,6912 (0,4); 0,5223 (1,7); 0,4135 (2,6); 0,1460 (0,4); 0,0079 (4,0); -0,0002 (91,9); -0,0085 (4,3); -0,1497 (0,4)
II-32	 (hợp chất tham khảo)	II-32: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,4397 (1,4); 9,4220 (1,4); 9,0347 (2,4); 9,0329 (2,6); 9,0292 (2,7); 9,0274 (2,4); 8,5440 (2,0); 8,5384 (1,9); 8,5225 (2,2); 8,5169 (2,2); 8,3229 (2,6); 8,1743 (2,5); 8,1619 (2,6); 8,0261 (2,6); 8,0244 (2,5); 8,0046 (2,4); 8,0028 (2,4); 6,1103 (1,0); 6,0929 (1,6); 6,0753 (1,1); 4,0572 (0,4); 4,0394 (1,4); 4,0216 (1,4); 4,0038 (0,5); 3,3258 (21,4); 2,5270 (0,8); 2,5221 (1,2); 2,5135 (14,8); 2,5091 (30,0); 2,5046 (39,4); 2,5000 (28,3); 2,4955 (13,9); 2,3453 (16,0); 1,9903 (6,3); 1,6265

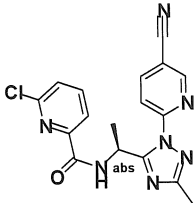
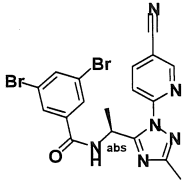
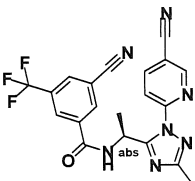
		(5,7); 1,6091 (5,7); 1,1942 (1,7); 1,1765 (3,4); 1,1587 (1,7); 0,0080 (1,4); -0,0002 (34,4); -0,0085 (1,4)
II-33	 (hợp chất tham khảo)	II-33: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,3385 (3,2); 9,3210 (3,3); 8,8034 (5,7); 8,8015 (5,8); 8,7908 (5,9); 8,7889 (5,9); 8,3169 (6,2); 8,3143 (8,4); 8,3117 (6,2); 8,2311 (16,0); 7,9651 (5,6); 7,9617 (5,4); 7,9524 (5,3); 7,9490 (5,3); 7,9240 (4,9); 7,9199 (7,5); 7,9160 (5,3); 7,7736 (4,7); 7,7016 (4,6); 7,6990 (5,1); 7,6964 (4,3); 6,0341 (0,5); 6,0170 (2,4); 5,9995 (3,8); 5,9820 (2,4); 5,9646 (0,5); 3,3231 (134,9); 2,6804 (0,5); 2,6760 (1,2); 2,6714 (1,6); 2,6668 (1,2); 2,6622 (0,6); 2,5249 (4,9); 2,5202 (7,6); 2,5115 (99,3); 2,5070 (203,8); 2,5025 (268,6); 2,4979 (191,6); 2,4934 (92,0); 2,3384 (0,5); 2,3338 (1,2); 2,3293 (1,6); 2,3248 (1,2); 2,3203 (0,6); 1,6352 (14,7); 1,6178 (14,6); 0,1460 (0,8); 0,0080 (7,1); -0,0001 (209,5); -0,0084 (8,2); -0,1495 (0,8)
II-34	 (hợp chất tham khảo)	II-34: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,3240 (1,2); 9,3062 (1,2); 8,7743 (2,2); 8,7723 (2,2); 8,7616 (2,3); 8,7596 (2,3); 8,2419 (2,3); 8,2391 (3,1); 8,2368 (2,3); 7,9503 (1,8); 7,9462 (2,8); 7,9423 (1,9); 7,9199 (2,1); 7,9164 (2,0); 7,9072 (2,0); 7,9038 (2,0); 7,7725 (1,8); 7,7251 (1,8); 7,7225 (1,9); 7,7199 (1,6); 6,0202 (1,0); 6,0027 (1,6); 5,9851 (1,0); 3,3243 (16,8); 2,5264 (0,7); 2,5216 (1,0); 2,5129 (14,4); 2,5084 (29,9); 2,5038 (39,5); 2,4992 (28,1); 2,4947 (13,3); 2,3463 (16,0); 2,3307 (0,4); 1,6155 (5,5); 1,5981 (5,4); 0,0080 (1,1); -0,0002 (34,2); -0,0086 (1,0)
II-36	 (hợp chất tham khảo)	II-36: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 10,6283 (2,3); 9,3726 (1,3); 9,3549 (1,4); 8,3753 (2,7); 8,3612 (2,8); 8,1635 (2,8); 8,1592 (2,9); 8,1214 (8,8); 8,0691 (2,6); 8,0514 (2,3); 7,5238 (1,8); 7,5190 (1,8); 7,5097 (1,7); 7,5049 (1,8); 6,0341 (1,0); 6,0166 (1,6); 5,9991 (1,0); 5,7563 (4,2); 4,0570 (0,3); 4,0393 (1,0); 4,0215 (1,0); 4,0036 (0,4); 3,3271 (22,6); 2,5268 (0,8); 2,5221 (1,2); 2,5133 (15,3); 2,5089 (31,4); 2,5044 (41,4); 2,4998 (29,7); 2,4953 (14,1); 2,1250 (16,0); 1,9901 (4,4); 1,6281 (5,8); 1,6107 (5,8); 1,3973 (0,9); 1,1941 (1,2); 1,1763 (2,4); 1,1585 (1,2); 0,0080 (0,8); -0,0002 (26,8); -0,0085 (0,9)

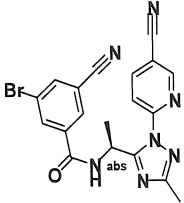
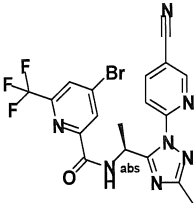
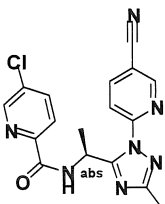
II-37	 (hợp chất tham khảo)	II-37: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta = 9,5781$ (2,8); $9,5605$ (2,9); $8,9427$ (5,2); $8,9384$ (5,2); $8,7310$ (2,9); $8,7208$ (2,9); $8,4365$ (14,1); $8,4151$ (3,8); $8,4093$ (3,8); $8,3158$ (0,9); $8,3032$ (4,7); $8,2036$ (13,7); $7,9670$ (5,2); $7,9661$ (5,2); $7,9458$ (4,8); $7,9447$ (4,8); $6,1554$ (0,4); $6,1382$ (2,0); $6,1208$ (3,2); $6,1033$ (2,0); $6,0859$ (0,4); $4,0567$ (1,2); $4,0389$ (3,6); $4,0211$ (3,6); $4,0034$ (1,2); $3,3241$ (81,3); $2,9105$ (0,3); $2,9005$ (1,0); $2,8908$ (1,4); $2,8823$ (2,2); $2,8724$ (2,2); $2,8639$ (1,4); $2,8544$ (1,1); $2,8443$ (0,4); $2,6813$ (0,3); $2,6770$ (0,7); $2,6724$ (1,0); $2,6679$ (0,7); $2,6634$ (0,4); $2,5259$ (2,9); $2,5210$ (4,8); $2,5125$ (59,5); $2,5080$ (119,1); $2,5035$ (154,6); $2,4989$ (110,1); $2,4945$ (52,6); $2,3349$ (0,6); $2,3304$ (0,9); $2,3258$ (0,7); $1,9896$ (16,0); $1,6763$ (12,1); $1,6590$ (12,0); $1,3977$ (1,8); $1,1938$ (4,3); $1,1760$ (8,6); $1,1582$ (4,2); $0,7551$ (1,3); $0,7423$ (3,6); $0,7371$ (5,2); $0,7251$ (4,8); $0,7189$ (4,0); $0,7077$ (1,7); $0,6115$ (1,8); $0,6009$ (5,3); $0,5943$ (4,7); $0,5910$ (4,4); $0,5851$ (3,9); $0,5730$ (1,2); $0,1460$ (0,4); $0,0080$ (3,5); $-0,0001$ (96,2); $-0,0085$ (3,5); $-0,1495$ (0,4)
II-38		II-38: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta = 9,5774$ (1,2); $9,5597$ (1,2); $8,6980$ (1,1); $8,4692$ (4,2); $8,3087$ (1,9); $8,2194$ (0,6); $8,2015$ (5,9); $7,9183$ (2,2); $7,8972$ (2,0); $6,1698$ (0,7); $6,1523$ (1,0); $6,1347$ (0,7); $4,0574$ (1,2); $4,0396$ (3,7); $4,0218$ (3,8); $4,0040$ (1,3); $3,3261$ (21,0); $3,0046$ (2,0); $2,5268$ (0,7); $2,5134$ (13,4); $2,5091$ (27,3); $2,5046$ (36,0); $2,5001$ (26,1); $2,4957$ (12,8); $1,9904$ (16,0); $1,6728$ (4,9); $1,6554$ (4,8); $1,3974$ (0,4); $1,1943$ (4,3); $1,1766$ (8,6); $1,1588$ (4,2); $0,4886$ (0,7); $0,3952$ (0,7); $0,0078$ (0,6); $-0,0002$ (17,5); $-0,0085$ (0,6)
II-39	 (hợp chất tham khảo)	II-39: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta = 9,6456$ (0,3); $9,6290$ (0,4); $8,4968$ (1,3); $8,3362$ (0,6); $8,2368$ (1,6); $7,9461$ (1,9); $6,0078$ (0,4); $3,3219$ (9,7); $2,5249$ (0,6); $2,5201$ (0,9); $2,5115$ (11,5); $2,5070$ (23,8); $2,5025$ (31,6); $2,4979$ (0,7); $2,4935$ (11,0); $1,6407$ (1,4); $1,6232$ (1,4); $1,3979$ (16,0); $0,0080$ (0,7); $-0,0002$ (0,7); $-0,0085$ (0,7)
II-40		II-40: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta = 9,6603$ (0,8); $9,6437$ (0,8); $8,5060$ (3,2); $8,3393$ (1,5); $8,2505$ (4,0); $7,9541$ (4,2); $7,8971$ (4,4); $6,0194$ (0,6); $6,0023$ (1,0); $5,9850$ (0,6); $3,3299$

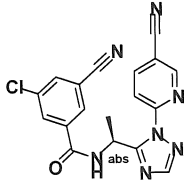
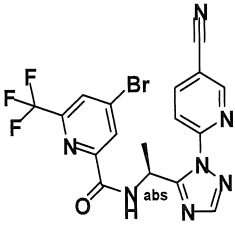
	(hợp chất tham khảo)	(13,3); 2,8928 (5,4); 2,7332 (4,6); 2,5264 (0,6); 2,5129 (12,6); 2,5086 (25,9); 2,5041 (34,1); 2,4995 (24,4); 2,4950 (11,7); 1,9900 (0,5); 1,6511 (4,2); 1,6337 (4,2); 1,3976 (16,0); 0,0078 (0,6); -0,0002 (17,4); -0,0086 (0,6)
II-41	 (hợp chất tham khảo)	II-41: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,6557 (2,6); 9,6390 (2,5); 8,5025 (8,9); 8,3394 (4,0); 8,3158 (0,5); 8,2504 (11,6); 7,9411 (16,0); 6,0376 (0,5); 6,0207 (1,8); 6,0037 (2,7); 5,9865 (1,8); 5,9694 (0,4); 3,3236 (169,3); 2,6804 (0,6); 2,6761 (1,1); 2,6715 (1,4); 2,6670 (1,0); 2,5116 (105,5); 2,5071 (187,3); 2,5025 (233,4); 2,4980 (160,8); 2,4934 (73,6); 2,3383 (0,6); 2,3339 (1,0); 2,3294 (1,4); 2,3248 (0,9); 1,6481 (10,9); 1,6307 (10,6); 1,3979 (8,0); 0,1461 (0,5); 0,0081 (8,5); -0,0001 (126,3); -0,0084 (4,0); -0,1496 (0,5)
II-42	 (hợp chất tham khảo)	II-42: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,3995 (3,2); 9,3818 (3,3); 9,0886 (3,8); 9,0865 (4,1); 9,0820 (4,2); 8,7021 (6,2); 8,7016 (6,1); 8,6881 (6,5); 8,6873 (6,5); 8,6691 (0,3); 8,6549 (0,3); 8,3294 (6,7); 8,3249 (6,8); 8,3161 (1,0); 8,2419 (0,4); 8,2261 (16,0); 8,1080 (5,9); 8,0661 (0,4); 8,0502 (6,2); 8,0463 (7,5); 8,0410 (4,6); 8,0320 (8,3); 8,0270 (8,8); 7,2217 (0,3); 7,2090 (5,7); 7,2024 (5,6); 6,9690 (0,4); 6,0991 (0,5); 6,0815 (2,3); 6,0640 (3,6); 6,0465 (2,3); 6,0290 (0,5); 3,3238 (69,8); 2,6776 (0,6); 2,6731 (0,9); 2,6685 (0,6); 2,5266 (2,3); 2,5219 (3,5); 2,5132 (53,7); 2,5087 (111,4); 2,5041 (147,4); 2,4995 (103,8); 2,4950 (48,3); 2,3355 (0,6); 2,3310 (0,9); 2,3263 (0,6); 2,0762 (0,5); 1,6675 (13,6); 1,6501 (13,6); 1,6297 (0,4); 1,4345 (0,6); 1,4172 (0,6); 0,1459 (0,4); 0,0080 (3,8); -0,0002 (117,7); -0,0086 (3,7); -0,1496 (0,4)
II-43	 (hợp chất tham khảo)	II-43: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,6743 (14,4); 9,4220 (3,0); 9,4043 (3,0); 8,7154 (5,8); 8,7015 (6,1); 8,4000 (16,0); 8,3453 (6,5); 8,3412 (6,5); 8,2287 (14,2); 8,1269 (5,6); 8,0705 (5,6); 8,0405 (5,2); 8,0306 (4,7); 8,0256 (4,3); 8,0167 (4,2); 8,0116 (4,1); 6,1175 (0,5); 6,1002 (2,2); 6,0828 (3,4); 6,0653 (2,2); 6,0479 (0,5); 3,3232 (41,3); 2,6786 (0,3); 2,6742 (0,5); 2,6695 (0,4); 2,5277 (1,4); 2,5142 (30,0); 2,5098 (60,4); 2,5052 (78,9); 2,5006 (56,4); 2,4961 (27,1); 2,3367 (0,3); 2,3321 (0,5); 2,3274 (0,4);

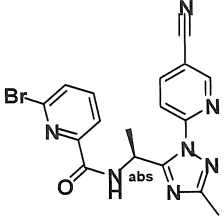
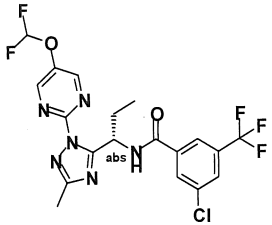
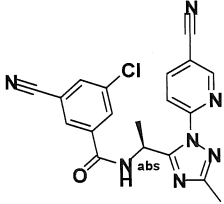
		2,0769 (8,4); 1,6713 (13,0); 1,6539 (12,9); 0,0080 (2,4); -0,0001 (62,2); -0,0085 (2,2)
II-44	 (hợp chất tham khảo)	II-44: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,6223 (3,6); 9,6050 (3,6); 9,0544 (6,6); 9,0493 (6,5); 8,5852 (4,6); 8,5791 (4,4); 8,5636 (5,0); 8,5575 (4,9); 8,4700 (13,2); 8,3131 (5,8); 8,2631 (16,0); 8,1593 (6,6); 8,1376 (6,1); 6,1928 (0,6); 6,1761 (2,6); 6,1587 (4,0); 6,1413 (2,5); 6,1240 (0,5); 3,3833 (41,4); 3,3213 (17,9); 3,2253 (0,4); 2,6776 (0,5); 2,6732 (0,7); 2,6687 (0,5); 2,5266 (2,3); 2,5131 (43,8); 2,5088 (86,9); 2,5043 (112,7); 2,4997 (81,2); 2,4953 (39,6); 2,3355 (0,5); 2,3311 (0,7); 2,3267 (0,5); 1,6909 (15,1); 1,6735 (15,2); 0,0079 (2,1); -0,0002 (60,1); -0,0085 (2,4)
II-46	 (hợp chất tham khảo)	II-46: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, CDCl_3): δ= 8,8675 (6,0); 8,8655 (6,0); 8,3134 (6,6); 8,2000 (1,2); 8,1953 (1,0); 8,1785 (6,6); 8,1735 (7,5); 8,1688 (9,2); 8,1474 (1,5); 8,0871 (6,2); 8,0158 (15,1); 7,3952 (1,8); 7,3757 (1,8); 7,2622 (31,7); 6,9912 (0,4); 6,4395 (0,6); 6,4225 (2,2); 6,4049 (3,0); 6,3863 (2,2); 6,3686 (0,6); 5,3012 (0,8); 1,7240 (16,0); 1,7072 (15,9); 1,5994 (16,4); 1,5733 (0,4); 1,4273 (3,9); 1,4143 (3,7); 1,3334 (0,7); 1,3190 (0,8); 1,2935 (4,2); 1,2847 (1,3); 1,2548 (6,0); 1,2366 (0,7); 0,8965 (0,4); 0,8797 (0,7); 0,8622 (0,4); 0,0709 (1,3); -0,0001 (50,0)
II-47		II-47: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,3479 (1,2); 9,3303 (1,2); 9,0228 (2,3); 9,0189 (2,3); 9,0172 (2,2); 8,5402 (1,8); 8,5346 (1,7); 8,5187 (1,9); 8,5131 (1,9); 8,1130 (1,7); 8,1092 (2,9); 8,1054 (1,8); 8,0225 (2,3); 8,0209 (2,4); 8,0010 (2,2); 7,9993 (2,2); 7,8826 (1,8); 7,7799 (1,7); 7,7773 (1,9); 7,7746 (1,6); 6,0855 (1,0); 6,0680 (1,5); 6,0505 (1,0); 4,0385 (0,7); 4,0207 (0,7); 3,3175 (80,4); 2,6756 (0,6); 2,6710 (0,9); 2,6664 (0,6); 2,5245 (2,6); 2,5197 (3,9); 2,5111 (53,0); 2,5066 (109,7); 2,5020 (144,9); 2,4974 (101,4); 2,4929 (47,2); 2,3434 (16,0); 2,3336 (1,0); 2,3289 (1,0); 2,3242 (0,7); 1,9886 (3,2); 1,6156 (5,4); 1,5983 (5,4); 1,3981 (0,9); 1,1933 (0,9); 1,1755 (1,7); 1,1577 (0,8); -0,0001 (9,9)

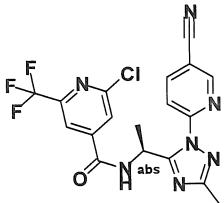
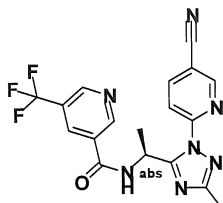
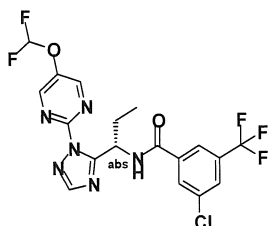
II-48	 (hợp chất tham khảo)	II-48: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta = 9,1629$ (1,3); $9,1437$ (1,4); $9,0614$ (2,5); $9,0568$ (2,6); $8,5451$ (1,6); $8,5396$ (1,6); $8,5237$ (1,7); $8,5181$ (1,8); $8,3195$ (0,6); $8,3137$ (0,6); $8,3004$ (1,9); $8,2815$ (2,1); $8,2681$ (2,7); $8,2515$ (1,0); $8,1477$ (1,9); $8,1445$ (1,9); $8,1292$ (1,5); $8,1260$ (1,5); $8,0371$ (2,5); $8,0155$ (2,4); $6,1369$ (1,0); $6,1182$ (1,4); $6,1003$ (1,0); $3,3225$ (379,3); $2,6751$ (1,6); $2,6707$ (2,2); $2,6665$ (1,6); $2,5241$ (7,1); $2,5063$ (292,2); $2,5019$ (384,2); $2,4975$ (281,7); $2,3653$ (16,0); $2,3331$ (1,6); $2,3287$ (2,3); $2,3245$ (1,7); $1,9887$ (0,5); $1,6392$ (6,4); $1,6220$ (6,3); $1,3980$ (3,1); $1,2344$ (0,3); $-0,0001$ (5,1)
II-49	 (hợp chất tham khảo)	II-49: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta = 9,3606$ (1,2); $9,3429$ (1,2); $9,0343$ (2,4); $9,0303$ (2,3); $9,0288$ (2,2); $8,9234$ (3,1); $8,9188$ (3,2); $8,8565$ (3,1); $8,8509$ (3,2); $8,5447$ (1,8); $8,5391$ (1,7); $8,5232$ (1,9); $8,5176$ (1,9); $8,4278$ (1,9); $8,4227$ (3,1); $8,4175$ (1,8); $8,0288$ (2,3); $8,0272$ (2,4); $8,0073$ (2,2); $8,0057$ (2,3); $6,1039$ (1,0); $6,0864$ (1,6); $6,0688$ (1,0); $5,7542$ (1,3); $3,3190$ (46,8); $2,6902$ (0,6); $2,6755$ (0,6); $2,6710$ (0,8); $2,6665$ (0,6); $2,5245$ (2,5); $2,5197$ (3,9); $2,5110$ (49,3); $2,5066$ (101,5); $2,5021$ (133,9); $2,4975$ (94,4); $2,4930$ (44,2); $2,3457$ (16,0); $2,3335$ (0,8); $2,3289$ (0,8); $2,3243$ (0,6); $1,6156$ (5,8); $1,5982$ (5,7); $-0,0001$ (2,2)
II-50	 (hợp chất tham khảo)	II-50: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta = 9,2878$ (1,3); $9,2703$ (1,3); $9,0294$ (2,3); $9,0254$ (2,3); $8,5431$ (1,8); $8,5375$ (1,7); $8,5215$ (1,9); $8,5161$ (1,8); $8,3147$ (0,8); $8,0224$ (2,4); $8,0136$ (0,4); $8,0010$ (2,2); $7,9994$ (2,2); $7,9869$ (1,8); $7,9830$ (3,2); $7,9791$ (2,0); $7,9269$ (1,8); $7,9224$ (3,5); $7,9178$ (2,3); $7,8814$ (2,2); $7,8775$ (3,0); $7,8732$ (1,7); $6,0737$ (1,0); $6,0564$ (1,6); $6,0390$ (1,0); $3,3206$ (181,3); $2,6751$ (2,0); $2,6707$ (2,8); $2,6661$ (2,0); $2,6618$ (1,0); $2,5242$ (8,0); $2,5194$ (12,3); $2,5106$ (176,1); $2,5062$ (362,2); $2,5017$ (475,8); $2,4972$ (335,7); $2,4927$ (157,4); $2,3408$ (16,0); $2,3332$ (2,5); $2,3285$ (3,0); $2,3239$ (2,1); $1,6025$ (5,6); $1,5851$ (5,6); $1,3980$ (8,3); $-0,0001$ (7,9)

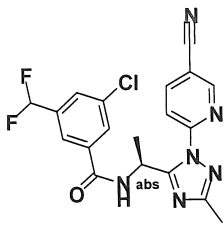
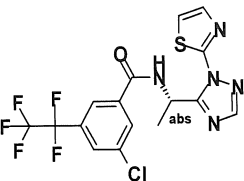
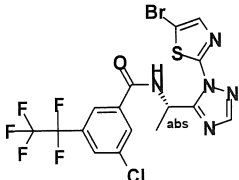
II-51	 (hợp chất tham khảo)	II-51: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta = 9,0798$ (2,3); $9,0780$ (2,6); $9,0742$ (3,0); $9,0724$ (3,3); $9,0519$ (1,1); $8,5468$ (1,9); $8,5412$ (1,8); $8,5252$ (2,0); $8,5196$ (2,0); $8,3135$ (0,4); $8,0726$ (1,5); $8,0533$ (3,1); $8,0457$ (0,3); $8,0362$ (2,6); $8,0341$ (4,4); $8,0148$ (2,3); $8,0129$ (2,3); $7,9772$ (2,3); $7,9750$ (2,6); $7,9583$ (1,7); $7,9560$ (1,6); $7,7669$ (2,2); $7,7646$ (2,3); $7,7472$ (2,1); $7,7449$ (2,0); $6,1262$ (1,0); $6,1088$ (1,1); $6,1068$ (1,1); $6,0893$ (1,0); $4,0382$ (0,6); $4,0205$ (0,6); $3,3150$ (5,4); $2,6796$ (0,5); $2,6750$ (1,0); $2,6704$ (1,3); $2,6659$ (1,0); $2,6614$ (0,4); $2,5240$ (3,9); $2,5193$ (5,7); $2,5106$ (79,4); $2,5061$ (166,5); $2,5015$ (221,7); $2,4969$ (156,4); $2,4923$ (73,6); $2,3666$ (16,0); $2,3376$ (0,4); $2,3330$ (1,0); $2,3283$ (1,3); $2,3237$ (0,9); $2,3193$ (0,4); $1,9884$ (2,6); $1,6160$ (5,7); $1,5988$ (5,7); $1,3981$ (4,7); $1,2479$ (0,5); $1,2313$ (0,5); $1,1930$ (0,7); $1,1752$ (1,4); $1,1574$ (0,7); $0,0081$ (0,5); $-0,0001$ (18,6); $-0,0084$ (0,6)
II-52	 (hợp chất tham khảo)	II-52: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta = 9,2829$ (1,1); $9,2651$ (1,2); $9,0292$ (2,1); $9,0274$ (2,4); $9,0237$ (2,3); $9,0218$ (2,3); $8,5417$ (2,0); $8,5362$ (1,9); $8,5202$ (2,1); $8,5146$ (2,1); $8,3130$ (0,8); $8,0500$ (0,9); $8,0456$ (1,3); $8,0344$ (1,3); $8,0299$ (3,0); $8,0257$ (3,3); $8,0214$ (2,9); $8,0197$ (3,0); $8,0122$ (9,1); $8,0078$ (5,7); $8,0000$ (2,3); $7,9981$ (2,4); $6,0711$ (1,0); $6,0536$ (1,6); $6,0361$ (1,0); $3,3161$ (174,2); $2,6794$ (0,7); $2,6748$ (1,6); $2,6703$ (2,2); $2,6657$ (1,6); $2,6612$ (0,8); $2,5238$ (6,4); $2,5191$ (9,3); $2,5105$ (132,5); $2,5059$ (279,7); $2,5014$ (373,2); $2,4967$ (262,2); $2,4921$ (122,4); $2,3407$ (16,0); $2,3328$ (1,9); $2,3282$ (2,4); $2,3236$ (1,6); $2,3189$ (0,8); $1,6007$ (5,3); $1,5833$ (5,3); $1,3981$ (9,6); $-0,0002$ (5,7)
II-53	 (hợp chất tham khảo)	II-53: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta = 9,4980$ (1,3); $9,4804$ (1,3); $9,0343$ (2,2); $9,0328$ (2,4); $9,0289$ (2,5); $9,0273$ (2,3); $8,5689$ (2,7); $8,5424$ (3,8); $8,5368$ (2,1); $8,5207$ (2,0); $8,5151$ (2,0); $8,4417$ (2,3); $8,3125$ (0,4); $8,0284$ (2,4); $8,0269$ (2,5); $8,0069$ (2,2); $8,0053$ (2,3); $6,1334$ (1,0); $6,1159$ (1,6); $6,0984$ (1,0); $4,0384$ (0,7); $4,0206$ (0,7); $3,3126$ (64,5); $2,6901$ (0,6); $2,6749$ (1,0); $2,6703$ (1,4); $2,6658$ (1,0); $2,5238$ (4,1); $2,5190$ (6,1); $2,5104$ (81,3); $2,5059$ (169,0); $2,5014$ (225,2); $2,4968$ (161,2); $2,4924$ (77,7); $2,3457$ (16,0); $2,3329$ (1,1); $2,3282$ (1,4); $2,3237$

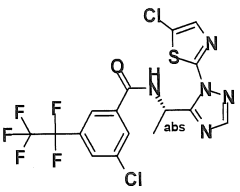
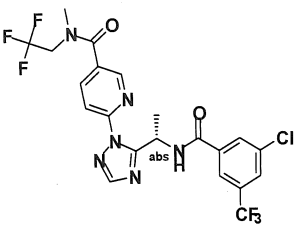
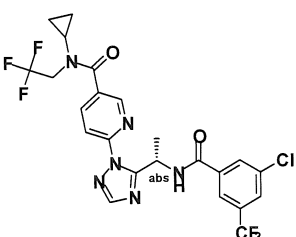
		(1,0); 1,9882 (3,2); 1,6356 (5,7); 1,6182 (5,7); 1,3981 (4,1); 1,1931 (0,9); 1,1753 (1,7); 1,1575 (0,8); 0,0080 (0,4); -0,0001 (12,9); -0,0084 (0,4)
II-54	 (hợp chất tham khảo)	II-54: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta =$ 9,3508 (1,2); 9,3331 (1,2); 9,0311 (2,2); 9,0297 (2,3); 9,0258 (2,3); 9,0242 (2,2); 8,5418 (1,8); 8,5363 (1,7); 8,5203 (1,9); 8,5147 (1,9); 8,3471 (1,6); 8,3429 (2,8); 8,3392 (2,4); 8,3129 (2,1); 8,3090 (3,2); 8,3046 (1,8); 8,2681 (2,1); 8,2645 (3,5); 8,2609 (1,8); 8,0253 (2,3); 8,0237 (2,4); 8,0037 (2,2); 8,0021 (2,2); 6,0971 (1,0); 6,0796 (1,6); 6,0622 (1,0); 4,0384 (0,7); 4,0206 (0,6); 3,3140 (125,3); 2,6902 (1,8); 2,6797 (0,4); 2,6750 (0,9); 2,6705 (1,3); 2,6659 (0,9); 2,6613 (0,4); 2,5239 (3,7); 2,5192 (5,6); 2,5105 (75,8); 2,5061 (157,7); 2,5015 (209,2); 2,4969 (148,3); 2,4924 (70,2); 2,3431 (16,0); 2,3330 (1,2); 2,3283 (1,4); 2,3237 (1,0); 1,9882 (2,9); 1,6123 (5,6); 1,5950 (5,6); 1,3982 (2,2); 1,1931 (0,8); 1,1753 (1,6); 1,1575 (0,8); 0,0080 (0,4); -0,0001 (13,0); -0,0084 (0,4)
II-55	 (hợp chất tham khảo)	II-55: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta =$ 9,3053 (1,4); 9,2858 (1,5); 9,0512 (2,6); 9,0465 (2,6); 9,0061 (2,5); 9,0014 (2,6); 8,5870 (2,7); 8,5822 (2,6); 8,5512 (1,7); 8,5458 (1,6); 8,5297 (1,8); 8,5241 (1,8); 8,3110 (0,4); 8,0229 (2,6); 8,0011 (2,4); 6,1466 (1,1); 6,1284 (1,5); 6,1104 (1,0); 3,3109 (216,6); 2,6741 (1,3); 2,6699 (1,8); 2,6656 (1,3); 2,5232 (5,2); 2,5053 (236,1); 2,5010 (308,6); 2,4966 (223,3); 2,3641 (16,0); 2,3321 (1,4); 2,3278 (1,8); 2,3235 (1,4); 2,2559 (0,4); 1,9877 (0,4); 1,5681 (6,3); 1,5508 (6,2); 1,3981 (0,6); 1,2352 (0,6); 0,1459 (0,9); 0,0077 (6,6); -0,0002 (190,5); -0,0083 (7,5); -0,1496 (0,9)
II-56	 (hợp chất tham khảo)	II-56: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta =$ 9,1484 (1,1); 9,1291 (1,1); 9,0866 (2,0); 9,0849 (2,3); 9,0812 (2,3); 9,0794 (2,2); 8,7495 (2,3); 8,7449 (2,3); 8,7434 (2,3); 8,5455 (1,8); 8,5400 (1,7); 8,5240 (1,9); 8,5184 (1,9); 8,3118 (1,7); 8,1411 (1,6); 8,1351 (1,5); 8,1201 (2,1); 8,1141 (2,1); 8,0375 (2,2); 8,0359 (2,4); 8,0160 (2,1); 8,0142 (2,4); 8,0109 (2,8); 8,0095 (2,8); 7,9899 (1,9); 7,9884 (2,0); 6,1351 (1,0); 6,1159 (1,1); 6,0984 (1,0); 3,3152 (281,9); 3,2916 (1,1); 2,6793 (0,6); 2,6749 (1,4); 2,6703 (2,0); 2,6657 (1,5); 2,6611 (0,7); 2,5238 (5,6); 2,5191 (8,3); 2,5104

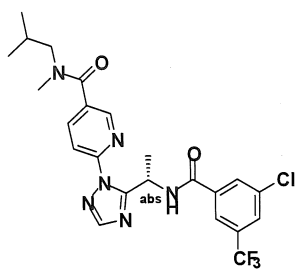
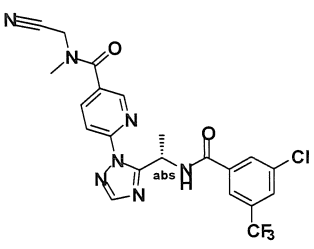
		(120,9); 2,5059 (255,8); 2,5014 (343,0); 2,4967 (244,0); 2,4922 (116,0); 2,3605 (16,0); 2,3327 (1,4); 2,3281 (2,0); 2,3236 (1,5); 2,3190 (0,7); 1,5953 (5,8); 1,5782 (5,8); 1,3982 (15,8); 0,1459 (1,0); 0,0081 (8,5); -0,0001 (280,1); -0,0084 (9,9); -0,1495 (1,0)
II-57	 (hợp chất tham khảo)	II-57: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta =$ 9,3759 (3,3); 9,3586 (3,4); 9,0655 (6,5); 9,0615 (6,2); 9,0602 (6,2); 8,5853 (4,5); 8,5798 (4,3); 8,5638 (4,8); 8,5583 (4,8); 8,3133 (0,5); 8,2464 (16,0); 8,2405 (4,4); 8,2364 (7,1); 8,2321 (6,2); 8,2240 (5,8); 8,2205 (9,2); 8,2171 (4,3); 8,1617 (5,4); 8,1571 (7,7); 8,1529 (4,3); 8,0861 (6,4); 8,0645 (5,9); 6,1178 (0,6); 6,1009 (2,5); 6,0836 (4,0); 6,0662 (2,5); 6,0489 (0,5); 5,7538 (6,6); 4,0563 (0,8); 4,0385 (2,6); 4,0207 (2,7); 4,0029 (0,9); 3,8975 (0,8); 3,7127 (0,4); 3,6994 (0,5); 3,6800 (0,5); 3,6673 (0,4); 3,4977 (0,4); 3,4743 (0,5); 3,4631 (0,4); 3,3194 (110,5); 2,6758 (0,8); 2,6712 (1,1); 2,6668 (0,8); 2,5248 (3,4); 2,5111 (70,5); 2,5069 (141,7); 2,5025 (184,9); 2,4979 (130,8); 2,4936 (62,0); 2,3338 (0,8); 2,3293 (1,1); 2,3248 (0,8); 1,9888 (11,6); 1,6366 (15,1); 1,6192 (15,0); 1,2342 (0,4); 1,1934 (3,0); 1,1756 (6,0); 1,1578 (3,0); 0,1456 (0,6); 0,0079 (4,4); -0,0002 (129,0); -0,0085 (4,6); -0,1497 (0,6)
II-58	 (hợp chất tham khảo)	II-58: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta =$ 9,3566 (3,5); 9,3375 (3,6); 9,0850 (6,5); 9,0807 (6,6); 9,0035 (6,3); 8,9989 (6,6); 8,5952 (8,8); 8,5909 (10,1); 8,5751 (0,95); 8,5695 (4,7); 8,3147 (0,6); 8,2854 (15,2); 8,0819 (0,95); 8,0603 (0,37); 6,1731 (0,6); 6,1558 (2,6); 6,1379 (3,8); 6,1200 (2,6); 6,1026 (0,6); 4,0379 (0,6); 4,0199 (0,6); 3,3203 (143,6); 2,6898 (1,0); 2,6751 (2,0); 2,6708 (2,8); 2,6665 (2,0); 2,5240 (8,0); 2,5062 (356,6); 2,5018 (468,1); 2,4974 (340,8); 2,3329 (2,0); 2,3286 (2,7); 2,3242 (2,0); 1,9886 (2,6); 1,5912 (16,0); 1,5740 (16,0); 1,3978 (0,5); 1,2353 (0,6); 1,1931 (0,7); 1,1751 (1,3); 1,1574 (0,6); 0,1459 (1,3); 0,0080 (9,7); -0,0001 (283,2); -0,0081 (12,3); -0,1497 (0,37)

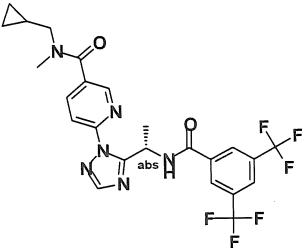
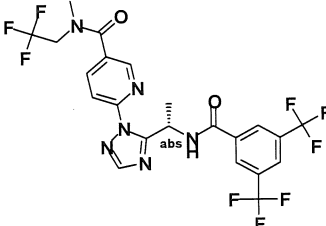
II-59	 (hợp chất tham khảo)	II-59: $^1\text{H-NMR}$(600,1 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta =$ 9,0789 (1,8); 9,0777 (2,1); 9,0752 (2,1); 9,0740 (2,3); 9,0711 (1,3); 9,0579 (1,2); 8,5434 (1,7); 8,5397 (1,7); 8,5291 (1,8); 8,5253 (1,8); 8,0342 (2,2); 8,0330 (2,2); 8,0198 (2,1); 8,0186 (2,2); 7,9999 (1,4); 7,9982 (1,6); 7,9873 (2,4); 7,9857 (2,4); 7,9519 (1,8); 7,9389 (3,0); 7,9263 (1,8); 7,8867 (2,2); 7,8851 (2,4); 7,8736 (1,5); 7,8720 (1,5); 6,1167 (1,0); 6,1051 (1,1); 6,1037 (1,1); 6,0920 (1,0); 4,0354 (0,6); 4,0235 (0,6); 3,3259 (75,1); 3,3230 (219,4); 3,3043 (0,3); 2,6173 (0,6); 2,6143 (0,8); 2,6112 (0,6); 2,5233 (1,8); 2,5202 (2,2); 2,5171 (2,1); 2,5083 (41,0); 2,5053 (91,5); 2,5022 (129,1); 2,4991 (92,5); 2,4961 (41,8); 2,3891 (0,6); 2,3861 (0,8); 2,3830 (0,6); 2,3670 (16,0); 1,9886 (2,6); 1,6145 (5,8); 1,6030 (5,8); 1,3980 (2,9); 1,1874 (0,7); 1,1755 (1,5); 1,1637 (0,7); 0,0968 (0,4); 0,0053 (2,8); -0,0001 (95,8); -0,0057 (2,8); -0,1003 (0,4)
II-60	 (hợp chất tham khảo)	II-60: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta =$ 9,3281 (1,4); 9,3088 (1,5); 8,9474 (11,1); 8,1716 (2,7); 8,1139 (2,7); 8,0664 (2,5); 7,6283 (1,6); 7,4471 (3,4); 7,2660 (0,9); 5,8402 (0,35); 5,8266 (0,6); 5,8189 (0,9); 5,8065 (0,35); 5,7991 (0,7); 5,7855 (0,5); 3,3248 (24,6); 2,6764 (0,9); 2,6722 (0,5); 2,6674 (0,4); 2,5254 (2,1); 2,5120 (31,8); 2,5076 (62,4); 2,5030 (83,4); 2,4985 (63,3); 2,4942 (0,81); 2,3327 (16,0); 2,0818 (0,4); 2,0631 (0,8); 2,0483 (0,6); 2,0441 (0,7); 2,0305 (0,6); 2,0124 (0,81); 1,9897 (1,8); 1,9727 (0,6); 1,9563 (0,4); 1,1934 (0,3); 1,1756 (0,7); 1,1578 (0,3); 1,0352 (2,9); 1,0170 (6,2); 0,9986 (2,7); 0,0080 (1,2); -0,0002 (32,0); -0,0084 (1,2)
II-61	 (hợp chất tham khảo)	II-61: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta =$ 9,3630 (1,0); 9,3454 (1,0); 9,0337 (1,8); 9,0293 (1,8); 8,5447 (1,3); 8,5392 (1,3); 8,5232 (1,4); 8,5176 (1,4); 8,2427 (4,6); 8,2384 (5,0); 8,1835 (1,6); 8,1792 (2,4); 8,1748 (1,3); 8,0257 (1,9); 8,0042 (1,8); 6,1002 (0,8); 6,0827 (1,2); 6,0653 (0,8); 3,8982 (0,4); 3,3258 (48,2); 2,6900 (16,0); 2,6761 (0,4); 2,6715 (0,6); 2,6670 (0,4); 2,5248 (2,1); 2,5114 (29,6); 2,5071 (58,4); 2,5025 (78,5); 2,4980 (60,4); 2,4937 (31,6); 2,3433 (11,8); 2,3295 (0,6); 2,3251 (0,4); 1,9891 (1,0); 1,6144 (4,3); 1,5971 (4,2); 1,3977 (1,3); 1,1753 (0,5); 0,0080 (1,1); -0,0002 (29,8); -0,0084 (1,3)

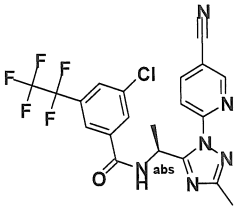
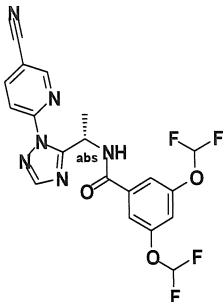
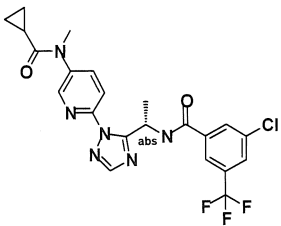
II-62	 (hợp chất tham khảo)	II-62: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta = 9,6731$ (1,3); $9,6555$ (1,3); $9,0347$ (2,2); $9,0332$ (2,3); $9,0294$ (2,3); $9,0277$ (2,2); $8,5475$ (1,9); $8,5419$ (1,8); $8,5259$ (2,0); $8,5203$ (2,0); $8,3158$ (0,3); $8,2441$ (3,3); $8,2417$ (3,4); $8,1923$ (3,3); $8,0295$ (2,4); $8,0279$ (2,4); $8,0080$ (2,3); $8,0064$ (2,3); $6,1320$ (1,0); $6,1146$ (1,6); $6,0972$ (1,0); $4,0378$ (0,6); $4,0200$ (0,6); $3,3267$ (191,0); $2,6799$ (0,4); $2,6758$ (0,9); $2,6712$ (1,3); $2,6667$ (0,9); $2,6620$ (0,4); $2,5247$ (4,2); $2,5199$ (6,3); $2,5113$ (72,8); $2,5068$ (145,2); $2,5022$ (191,5); $2,4976$ (140,7); $2,4932$ (68,6); $2,3515$ (16,0); $2,3384$ (0,6); $2,3337$ (1,0); $2,3291$ (1,3); $2,3245$ (0,9); $2,3202$ (0,4); $1,9890$ (2,6); $1,6327$ (5,7); $1,6153$ (5,7); $1,3977$ (2,8); $1,1929$ (0,7); $1,1751$ (1,4); $1,1573$ (0,7); $0,0079$ (2,6); $-0,0002$ (78,1); $-0,0086$ (2,5)
II-63	 (hợp chất tham khảo)	II-63: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta = 9,5216$ (1,3); $9,5038$ (1,3); $9,2296$ (2,2); $9,2251$ (2,3); $9,1327$ (2,0); $9,1298$ (2,0); $9,0421$ (2,1); $9,0403$ (2,4); $9,0366$ (2,4); $9,0348$ (2,3); $8,5672$ (2,1); $8,5475$ (1,9); $8,5419$ (1,8); $8,5259$ (2,0); $8,5204$ (2,0); $8,3162$ (0,3); $8,0334$ (2,4); $8,0317$ (2,5); $8,0118$ (2,2); $8,0101$ (2,3); $6,1427$ (1,0); $6,1252$ (1,6); $6,1078$ (1,0); $3,3239$ (102,2); $2,6897$ (0,8); $2,6756$ (1,0); $2,6710$ (1,4); $2,6665$ (1,0); $2,6621$ (0,5); $2,5244$ (4,7); $2,5196$ (7,7); $2,5110$ (81,5); $2,5066$ (161,9); $2,5020$ (213,6); $2,4974$ (158,7); $2,4930$ (78,4); $2,3485$ (16,0); $2,3384$ (0,8); $2,3334$ (1,1); $2,3289$ (1,5); $2,3244$ (1,0); $1,9889$ (0,6); $1,6385$ (5,8); $1,6211$ (5,8); $1,3977$ (0,7); $1,1750$ (0,3); $0,1458$ (0,4); $0,0080$ (3,1); $-0,0002$ (84,4); $-0,0085$ (2,8); $-0,1495$ (0,4)
II-64	 (hợp chất tham khảo)	II-64: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta = 9,3385$ (2,0); $9,3196$ (2,1); $8,9805$ (16,0); $8,1921$ (9,6); $8,1454$ (3,8); $8,0831$ (3,9); $8,0630$ (3,5); $7,6388$ (2,4); $7,4578$ (5,0); $7,2769$ (2,5); $5,8366$ (0,7); $5,8229$ (0,9); $5,8153$ (1,2); $5,8028$ (1,1); $5,7959$ (1,0); $5,7821$ (0,7); $3,3270$ (22,9); $2,6732$ (0,4); $2,5267$ (1,3); $2,5218$ (2,0); $2,5132$ (24,0); $2,5088$ (48,4); $2,5042$ (64,4); $2,4996$ (48,3); $2,4952$ (24,3); $2,3311$ (0,4); $2,1307$ (0,4); $2,1164$ (0,6); $2,1126$ (0,6); $2,0971$ (1,2); $2,0826$ (0,9); $2,0768$ (1,6); $2,0643$ (0,8); $2,0401$ (0,8); $2,0216$ (1,0); $2,0182$ (1,0); $2,0054$ (0,7); $1,9998$ (1,0); $1,9901$ (1,0); $1,9839$ (0,6); $1,9658$ (0,4);

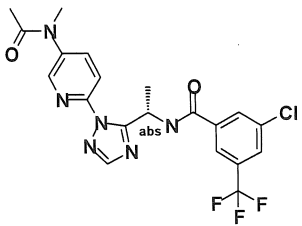
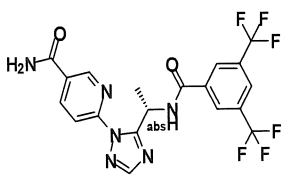
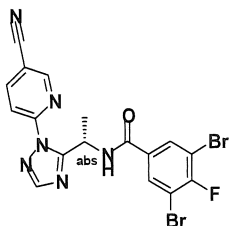
		1,1763 (0,4); 1,0445 (4,3); 1,0264 (9,4); 1,0079 (4,0); 0,0079 (0,9); -0,0002 (30,5); -0,0086 (1,1)
II-65	 (hợp chất tham khảo)	II-65: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,3651 (1,3); 9,3474 (1,3); 9,0324 (2,4); 9,0276 (2,4); 8,5436 (1,7); 8,5381 (1,7); 8,5221 (1,8); 8,5165 (1,8); 8,3157 (0,4); 8,0592 (2,2); 8,0257 (2,5); 8,0030 (3,2); 7,9977 (2,5); 7,8296 (2,2); 7,2314 (1,1); 7,0929 (2,4); 6,9545 (1,2); 6,0982 (1,0); 6,0807 (1,6); 6,0632 (1,0); 4,0379 (0,7); 4,0200 (0,7); 3,3248 (121,1); 2,6756 (1,2); 2,6710 (1,6); 2,6665 (1,2); 2,6620 (0,6); 2,5244 (5,4); 2,5196 (8,3); 2,5110 (93,0); 2,5066 (184,4); 2,5020 (243,2); 2,4975 (180,4); 2,4931 (89,6); 2,3409 (16,0); 2,3339 (1,8); 2,3289 (1,9); 2,3245 (1,2); 1,9889 (3,1); 1,6168 (5,8); 1,5995 (5,8); 1,3979 (2,4); 1,1929 (0,8); 1,1751 (1,7); 1,1573 (0,8); 0,1460 (0,4); 0,0080 (3,0); -0,0002 (89,8); -0,0085 (3,1); -0,1494 (0,4)
II-66	 (hợp chất tham khảo)	II-66: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,5432 (3,4); 9,5265 (3,5); 8,2821 (2,79); 8,2069 (15,6); 8,1047 (6,6); 8,0267 (6,3); 7,7949 (7,8); 7,7862 (12,8); 7,7601 (13,0); 7,7513 (7,9); 6,0891 (0,6); 6,0718 (2,6); 6,0547 (4,0); 6,0375 (2,6); 6,0203 (0,6); 3,3262 (109,7); 2,6774 (0,6); 2,6730 (2,79); 2,6683 (0,6); 2,5263 (2,6); 2,5127 (51,7); 2,5084 (104,0); 2,5039 (135,7); 2,4994 (97,7); 2,4949 (47,1); 2,3352 (0,6); 2,3307 (0,8); 2,3262 (0,6); 1,6433 (16,0); 1,6258 (15,9); 1,3975 (7,0); 0,1459 (0,5); 0,0079 (4,0); -0,0002 (113,2); -0,0086 (3,7); -0,1497 (0,5)
II-67	 (hợp chất tham khảo)	II-67: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,5358 (2,8); 9,5193 (2,9); 8,2768 (5,3); 8,2440 (12,5); 8,1001 (5,1); 8,0303 (4,9); 7,9343 (16,0); 6,0028 (0,4); 5,9857 (2,0); 5,9686 (3,0); 5,9515 (2,0); 5,9339 (0,4); 3,3227 (64,5); 2,6808 (0,4); 2,6765 (0,8); 2,6719 (1,1); 2,6674 (0,8); 2,6631 (0,4); 2,5253 (3,7); 2,5205 (6,3); 2,5120 (66,1); 2,5075 (131,1); 2,5030 (170,3); 2,4984 (122,4); 2,4940 (59,2); 2,3387 (0,4); 2,3344 (0,7); 2,3298 (1,0); 2,3253 (0,7); 1,6313 (11,8); 1,6138 (11,7); 1,3978 (5,6); 0,0081 (2,8); -0,0001 (68,8); -0,0084 (2,4)

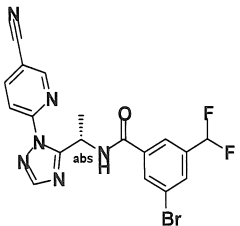
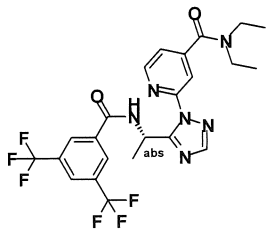
II-68	 (hợp chất tham khảo)	II-68: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta = 9,5383$ (2,4); $9,5219$ (2,5); $8,3230$ (0,3); $8,3161$ (0,3); $8,2956$ (0,4); $8,2799$ (4,8); $8,2432$ (11,3); $8,1021$ (4,5); $8,0304$ (4,4); $7,8893$ (16,0); $7,0039$ (0,3); $6,6362$ (0,3); $5,9997$ (0,4); $5,9827$ (1,8); $5,9656$ (2,7); $5,9486$ (1,8); $5,9313$ (0,4); $3,3290$ (43,8); $2,6768$ (0,6); $2,6722$ (0,8); $2,6676$ (0,6); $2,5258$ (2,6); $2,5210$ (3,9); $2,5123$ (47,9); $2,5079$ (96,8); $2,5033$ (126,2); $2,4987$ (90,1); $2,4942$ (42,9); $2,3348$ (0,5); $2,3301$ (0,7); $2,3256$ (0,5); $1,6331$ (10,9); $1,6157$ (11,0); $1,6024$ (0,6); $1,3978$ (8,2); $0,0080$ (1,7); $-0,0002$ (50,1); $-0,0085$ (1,6)
II-69	 (hợp chất tham khảo)	II-69: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta = 9,4130$ (3,4); $9,3953$ (3,4); $8,6356$ (1,6); $8,3157$ (0,6); $8,2016$ (16,0); $8,1724$ (1,1); $8,1446$ (5,8); $8,0938$ (5,4); $8,0566$ (5,6); $7,9599$ (6,1); $7,9390$ (5,1); $7,9377$ (5,1); $6,1192$ (0,4); $6,1025$ (1,5); $6,0849$ (2,3); $6,0675$ (1,5); $6,0512$ (0,4); $4,4009$ (1,2); $4,3804$ (1,3); $4,3125$ (0,5); $4,2890$ (1,0); $4,2656$ (1,0); $4,2418$ (0,5); $4,1687$ (0,8); $4,1446$ (2,0); $4,1202$ (1,9); $4,0958$ (0,7); $4,0383$ (0,4); $4,0204$ (0,4); $3,3221$ (107,6); $3,0745$ (6,4); $3,0427$ (4,8); $2,8850$ (2,2); $2,6758$ (1,3); $2,6712$ (1,8); $2,6667$ (1,3); $2,5247$ (5,8); $2,5199$ (8,9); $2,5113$ (108,8); $2,5069$ (218,4); $2,5023$ (284,5); $2,4977$ (203,4); $2,4933$ (97,4); $2,3382$ (0,6); $2,3336$ (1,2); $2,3291$ (1,7); $2,3245$ (1,2); $2,0691$ (9,2); $2,0506$ (2,9); $1,9890$ (1,5); $1,6553$ (13,3); $1,6379$ (13,3); $1,3977$ (0,5); $1,2344$ (0,3); $1,1930$ (0,4); $1,1753$ (0,8); $1,1575$ (0,4); $0,1459$ (0,4); $0,0079$ (3,4); $-0,0002$ (96,8); $-0,0085$ (3,2); $-0,1496$ (0,4)
II-70	 (hợp chất tham khảo)	II-70: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta = 9,4172$ (3,8); $9,3994$ (3,8); $8,7230$ (5,4); $8,7180$ (5,4); $8,3154$ (1,0); $8,2854$ (2,8); $8,2800$ (2,7); $8,2643$ (3,2); $8,2589$ (3,1); $8,2070$ (16,0); $8,1613$ (6,5); $8,1124$ (6,5); $8,0568$ (6,2); $7,9503$ (6,9); $7,9292$ (5,8); $6,1542$ (0,6); $6,1368$ (2,4); $6,1194$ (3,8); $6,1018$ (2,5); $6,0846$ (0,5); $5,3355$ (0,5); $5,3238$ (0,8); $5,3125$ (0,5); $4,3829$ (1,2); $4,3600$ (3,5); $4,3360$ (3,5); $4,3114$ (1,3); $4,1263$ (1,3); $4,1020$ (3,5); $4,0776$ (3,4); $4,0536$ (1,3); $4,0381$ (1,0); $4,0204$ (1,0); $3,3818$ (0,4); $3,3727$ (0,3); $3,3229$ (332,7); $3,0331$ (1,8); $2,8913$ (3,1); $2,7974$ (0,8); $2,7871$ (1,1); $2,7319$ (2,8); $2,6755$

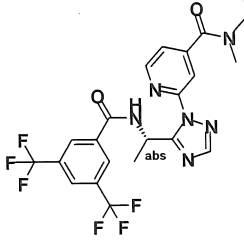
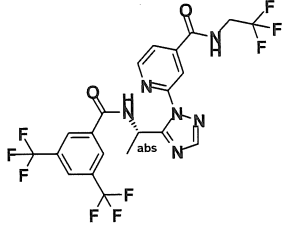
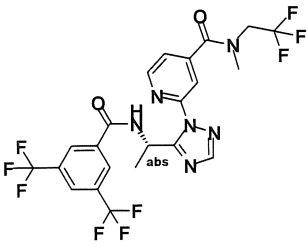
		(1,8); 2,6711 (2,5); 2,6668 (1,9); 2,5242 (9,3); 2,5109 (158,1); 2,5067 (310,2); 2,5022 (404,4); 2,4978 (293,3); 2,4935 (146,3); 2,3335 (1,7); 2,3289 (2,4); 2,3245 (1,8); 2,1954 (16,0); 2,0270 (0,9); 2,0089 (1,7); 1,9889 (5,9); 1,9750 (0,8); 1,9596 (0,4); 1,6549 (14,2); 1,6376 (14,1); 1,4735 (0,6); 1,4544 (0,6); 1,2981 (1,4); 1,2588 (3,0); 1,2351 (13,2); 1,1932 (1,4); 1,1753 (2,4); 1,1576 (1,2); 0,9002 (0,5); 0,8773 (2,2); 0,8699 (3,2); 0,8542 (4,6); 0,8427 (2,5); 0,8331 (3,7); 0,8031 (0,5); 0,5814 (3,4); 0,5467 (6,0); 0,1459 (2,1); 0,0077 (19,6); -0,0001 (448,5); -0,0083 (22,4); -0,1496 (2,2)
II-71	 (hợp chất tham khảo)	II-71: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,4045 (2,0); 9,3900 (2,6); 8,5857 (2,7); 8,5200 (1,8); 8,3153 (0,8); 8,1902 (11,6); 8,1439 (7,1); 8,0960 (6,8); 8,0712 (1,2); 8,0528 (8,4); 7,9237 (5,6); 7,9027 (4,5); 6,1037 (1,3); 6,0898 (1,6); 6,0745 (1,7); 6,0578 (1,0); 5,7552 (10,3); 4,0386 (0,8); 4,0207 (0,8); 3,3198 (48,5); 3,3047 (3,7); 3,0580 (2,1); 3,0400 (2,2); 3,0099 (0,6); 3,0035 (0,6); 2,9787 (6,4); 2,9250 (0,5); 2,8913 (1,3); 2,8727 (10,6); 2,7325 (0,4); 2,7158 (0,9); 2,6758 (0,9); 2,6715 (1,3); 2,6671 (1,0); 2,5246 (4,1); 2,5070 (156,4); 2,5026 (205,8); 2,4981 (153,9); 2,3338 (0,9); 2,3293 (1,3); 2,3250 (1,0); 2,0731 (0,4); 2,0557 (0,8); 2,0383 (1,0); 2,0221 (0,8); 2,0045 (0,5); 1,9890 (3,7); 1,9749 (0,4); 1,8883 (0,6); 1,8723 (0,7); 1,8567 (0,6); 1,6524 (16,0); 1,6351 (16,0); 1,2351 (0,5); 1,1934 (1,0); 1,1756 (1,8); 1,1578 (0,9); 0,9335 (10,8); 0,9172 (10,7); 0,8621 (0,4); 0,8543 (0,4); 0,8460 (0,4); 0,8232 (0,7); 0,8161 (1,2); 0,8068 (0,7); 0,7994 (1,2); 0,7933 (0,4); 0,6520 (6,8); 0,6366 (6,6); 0,1458 (1,2); 0,0076 (10,1); -0,0002 (239,8); -0,0083 (14,0); -0,1497 (1,2)
II-72	 (hợp chất tham khảo)	II-72: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,4255 (2,5); 9,4080 (2,6); 8,6763 (2,6); 8,3152 (0,4); 8,2182 (1,3); 8,2025 (16,0); 8,1526 (4,5); 8,1044 (4,3); 8,0600 (5,0); 7,9718 (3,3); 7,9507 (2,8); 6,1253 (0,4); 6,1084 (2,0); 6,0910 (3,1); 6,0735 (2,0); 6,0565 (0,4); 4,5806 (6,5); 4,0561 (1,1); 4,0383 (3,3); 4,0205 (3,4); 4,0028 (1,1); 3,3198 (37,8); 3,0383 (10,2); 2,8914 (0,4); 2,7318 (0,4); 2,6758 (0,8); 2,6712 (1,1); 2,6666 (0,8); 2,6623 (0,4); 2,5247 (3,8); 2,5197 (6,1); 2,5113 (65,7); 2,5069 (131,9); 2,5023 (173,6);

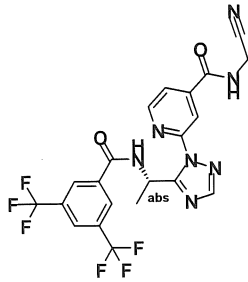
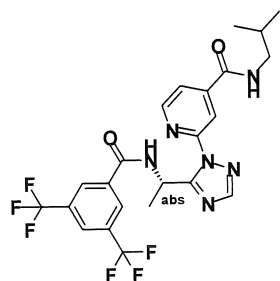
		2,4977 (125,4); 2,4932 (61,9); 2,3382 (0,4); 2,3337 (0,8); 2,3291 (1,0); 2,3245 (0,8); 2,3200 (0,4); 1,9889 (15,1); 1,8962 (0,6); 1,6562 (12,4); 1,6389 (12,4); 1,3977 (0,4); 1,2354 (0,3); 1,1932 (3,9); 1,1754 (7,8); 1,1576 (3,8); 0,1458 (1,0); 0,0078 (9,3); -0,0002 (230,7); -0,0086 (10,7); -0,1497 (1,0)
II-73	 (hợp chất tham khảo)	II-73: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,5672 (2,6); 9,5493 (2,6); 8,5776 (1,6); 8,4458 (8,8); 8,3097 (4,5); 8,1998 (13,0); 8,1094 (1,2); 7,9315 (4,6); 7,9103 (3,7); 6,1340 (0,9); 6,1184 (1,3); 6,1016 (0,9); 4,0559 (1,2); 4,0381 (3,5); 4,0203 (3,6); 4,0025 (1,2); 3,3630 (1,3); 3,3239 (276,5); 3,0732 (3,6); 3,0209 (0,4); 3,0111 (0,3); 2,9267 (2,7); 2,8976 (0,5); 2,6758 (1,5); 2,6713 (2,1); 2,6667 (1,5); 2,6623 (0,7); 2,5247 (6,4); 2,5198 (10,2); 2,5112 (130,8); 2,5068 (266,7); 2,5023 (350,3); 2,4977 (251,0); 2,4933 (120,3); 2,3382 (0,7); 2,3337 (1,5); 2,3291 (2,1); 2,3245 (1,5); 1,9889 (16,0); 1,6734 (10,2); 1,6561 (10,2); 1,3978 (2,6); 1,1931 (4,2); 1,1753 (8,4); 1,1575 (4,2); 1,0680 (0,4); 1,0540 (0,4); 0,9496 (0,4); 0,9148 (0,3); 0,5052 (1,0); 0,4302 (1,0); 0,4141 (0,9); 0,2981 (1,2); 0,1459 (0,7); 0,0211 (1,2); 0,0079 (7,3); -0,0002 (185,7); -0,0085 (7,0); -0,1497 (0,8)
II-74	 (hợp chất tham khảo)	II-74: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,5650 (1,5); 9,5475 (1,6); 8,6352 (0,9); 8,4407 (6,2); 8,3022 (2,8); 8,2131 (8,5); 8,1896 (0,5); 8,1721 (0,6); 7,9632 (3,4); 7,9419 (2,8); 6,1396 (0,8); 6,1224 (1,2); 6,1048 (0,8); 4,3962 (0,6); 4,3759 (0,7); 4,3135 (0,5); 4,2900 (1,2); 4,2665 (1,2); 4,2427 (0,4); 4,1704 (1,0); 4,1460 (2,6); 4,1216 (2,6); 4,0973 (0,9); 4,0574 (1,2); 4,0396 (3,8); 4,0218 (3,8); 4,0039 (1,3); 3,3256 (23,2); 3,0763 (7,8); 3,0303 (2,4); 2,8871 (2,9); 2,6917 (3,4); 2,6733 (0,4); 2,5267 (0,9); 2,5220 (1,5); 2,5134 (22,5); 2,5089 (45,8); 2,5044 (60,1); 2,4998 (42,6); 2,4954 (20,2); 2,3311 (0,4); 2,0709 (12,9); 2,0524 (4,1); 1,9902 (16,0); 1,6793 (7,3); 1,6619 (7,3); 1,3976 (0,4); 1,1944 (4,4); 1,1766 (8,8); 1,1588 (4,3); 0,0079 (1,3); -0,0002 (38,4); -0,0085 (1,3)

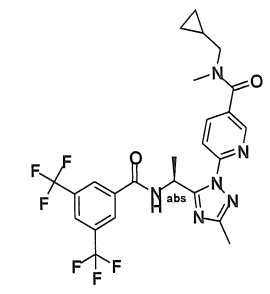
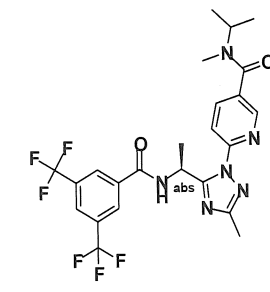
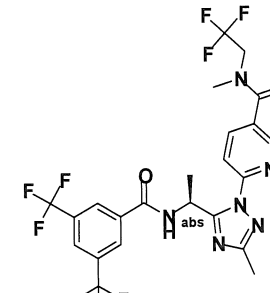
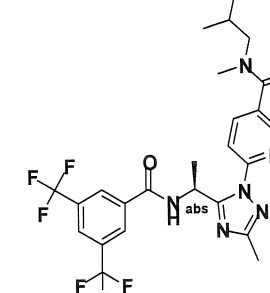
II-75	 (hợp chất tham khảo)	II-75: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,4564 (1,3); 9,4391 (1,3); 9,0189 (2,4); 9,0137 (2,5); 8,5370 (1,7); 8,5314 (1,6); 8,5155 (1,7); 8,5098 (1,8); 8,3110 (0,7); 8,2492 (2,5); 8,0584 (2,8); 8,0206 (2,6); 8,0052 (2,5); 7,9996 (3,4); 6,1072 (1,0); 6,0894 (1,6); 6,0721 (1,0); 3,3100 (336,0); 2,6784 (1,2); 2,6741 (2,5); 2,6696 (3,5); 2,6652 (2,6); 2,5230 (9,4); 2,5182 (14,3); 2,5096 (221,1); 2,5052 (457,5); 2,5007 (608,2); 2,4962 (432,8); 2,4918 (208,0); 2,3449 (16,0); 2,3367 (1,7); 2,3321 (2,7); 2,3276 (3,6); 2,3231 (2,7); 1,6311 (5,8); 1,6136 (5,8); 1,3981 (4,2); 1,2361 (0,8); 0,1458 (1,9); 0,0079 (13,4); -0,0002 (433,5); -0,0085 (15,6); -0,1498 (1,9)
II-77	 (hợp chất tham khảo)	II-77: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,2657 (3,3); 9,2484 (3,4); 9,0641 (5,9); 9,0600 (5,9); 9,0587 (5,7); 8,5857 (4,6); 8,5801 (4,5); 8,5642 (5,0); 8,5587 (4,9); 8,3159 (0,5); 8,2411 (15,8); 8,0854 (6,2); 8,0841 (6,3); 8,0640 (5,7); 8,0626 (5,8); 7,5116 (7,9); 7,5019 (14,3); 7,4964 (14,8); 7,3282 (16,0); 7,2279 (3,7); 7,2225 (6,7); 7,2171 (3,5); 7,1448 (8,0); 6,1072 (0,5); 6,0902 (2,4); 6,0728 (3,9); 6,0555 (2,5); 6,0381 (0,5); 3,9235 (0,4); 3,3275 (213,5); 2,6805 (0,5); 2,6760 (1,1); 2,6714 (1,6); 2,6668 (1,2); 2,6622 (0,6); 2,5249 (4,8); 2,5201 (7,1); 2,5114 (90,0); 2,5070 (182,9); 2,5024 (241,7); 2,4978 (176,8); 2,4933 (86,1); 2,3383 (0,5); 2,3338 (1,1); 2,3293 (1,5); 2,3247 (1,1); 2,3202 (0,5); 1,6407 (14,7); 1,6233 (14,7); 0,1459 (0,3); 0,0080 (2,5); -0,0002 (81,7); -0,0085 (2,7); -0,1497 (0,3)
II-79	 (hợp chất tham khảo)	II-79: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,3791 (1,8); 9,3612 (1,8); 8,5744 (3,2); 8,5686 (2,7); 8,5139 (0,7); 8,3161 (0,6); 8,2468 (1,1); 8,1764 (7,4); 8,1493 (0,5); 8,1237 (1,5); 8,1173 (1,4); 8,1017 (4,2); 8,0978 (4,4); 8,0609 (5,8); 8,0588 (5,7); 7,9910 (0,5); 7,9673 (0,9); 7,9320 (2,6); 7,9104 (2,1); 7,4833 (0,9); 7,4460 (0,8); 6,4342 (0,4); 6,4165 (0,4); 6,0404 (1,2); 6,0228 (1,8); 6,0053 (1,2); 5,9879 (0,3); 3,3257 (95,2); 3,3023 (0,5); 3,2378 (4,4); 2,6856 (3,0); 2,6766 (1,3); 2,6718 (1,3); 2,6673 (0,8); 2,5118 (93,1); 2,5074 (147,2); 2,5028 (167,4); 2,4982 (113,5); 2,4937 (50,6); 2,3387 (0,6); 2,3342 (0,9); 2,3297 (1,1); 2,3250 (0,7); 2,3205 (0,3);

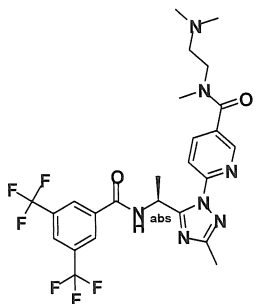
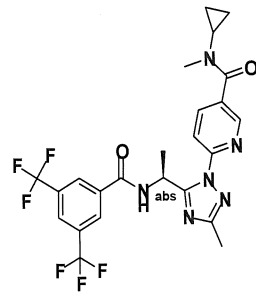
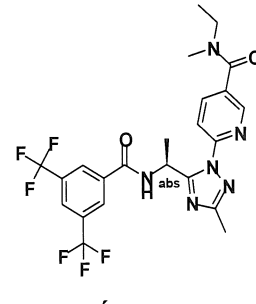
		2,0801 (2,6); 2,0752 (16,0); 1,6662 (2,7); 1,6529 (8,6); 1,6357 (7,1); 1,3370 (0,4); 0,8365 (2,3); 0,8323 (2,3); 0,8252 (3,8); 0,8138 (2,4); 0,8007 (1,1); 0,6100 (1,6); 0,0048 (8,0); -0,0001 (43,1); -0,0084 (1,4)
II-80	 (hợp chất tham khảo)	II-80: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,3940 (2,2); 9,3763 (2,3); 8,5603 (2,4); 8,5243 (1,2); 8,3163 (0,7); 8,2387 (2,4); 8,1693 (5,9); 8,1300 (4,9); 8,0845 (5,7); 8,0593 (5,7); 7,9565 (2,3); 7,9001 (2,2); 7,8790 (1,8); 7,7173 (0,6); 7,4954 (2,0); 7,4570 (1,7); 7,3632 (0,5); 6,4641 (0,3); 6,4118 (0,6); 6,3956 (0,6); 6,0524 (0,3); 6,0352 (1,3); 6,0179 (2,1); 6,0004 (1,4); 5,9827 (0,5); 5,9573 (0,3); 3,3260 (156,0); 3,2335 (2,8); 3,1924 (2,5); 2,7179 (6,6); 2,6761 (1,4); 2,6716 (2,0); 2,6671 (1,5); 2,5250 (5,8); 2,5115 (113,1); 2,5071 (228,9); 2,5026 (303,8); 2,4981 (226,2); 2,4938 (114,6); 2,3339 (1,4); 2,3295 (2,0); 2,3249 (1,5); 2,0752 (3,7); 1,7702 (1,4); 1,6724 (8,8); 1,6529 (16,0); 1,6349 (11,1); 0,1457 (0,3); 0,0079 (2,6); -0,0002 (77,4); -0,0084 (2,9); -0,1498 (0,4)
II-81	 (hợp chất tham khảo)	II-81: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,5936 (3,8); 9,5761 (3,9); 9,0034 (6,8); 8,9991 (6,7); 8,9979 (6,6); 8,4888 (4,2); 8,4831 (4,2); 8,4675 (4,7); 8,4617 (4,8); 8,4450 (14,3); 8,3052 (6,3); 8,2505 (3,7); 8,2081 (16,0); 7,9792 (6,8); 7,9579 (6,4); 7,7065 (3,6); 6,1727 (0,6); 6,1556 (2,6); 6,1382 (4,1); 6,1207 (2,6); 6,1032 (0,6); 5,7576 (0,4); 3,3334 (110,0); 2,6791 (0,4); 2,6746 (0,6); 2,6701 (0,4); 2,5281 (1,6); 2,5144 (34,1); 2,5102 (69,2); 2,5057 (92,2); 2,5013 (69,5); 2,3368 (0,4); 2,3326 (0,6); 2,3282 (0,4); 1,6827 (15,0); 1,6653 (15,0); 1,2599 (0,3); 0,1458 (0,4); 0,0079 (2,7); -0,0002 (81,0); -0,0085 (3,5); -0,1499 (0,4)
II-82	 (hợp chất tham khảo)	II-82: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,3000 (3,7); 9,2827 (3,7); 9,0649 (6,2); 9,0607 (6,4); 8,5866 (4,7); 8,5811 (4,5); 8,5651 (5,0); 8,5596 (4,9); 8,3164 (0,4); 8,2405 (15,4); 8,1590 (16,0); 8,1437 (16,0); 8,0827 (6,5); 8,0612 (6,0); 7,8005 (0,4); 7,7852 (0,4); 6,0901 (0,6); 6,0731 (2,6); 6,0558 (4,0); 6,0385 (2,6); 6,0215 (0,6); 4,0382 (0,4); 4,0204 (0,4); 3,3256 (124,9); 2,9652 (0,4); 2,8974 (0,4); 2,6763 (1,1); 2,6718 (1,5); 2,6675 (1,1); 2,5252 (4,5); 2,5116

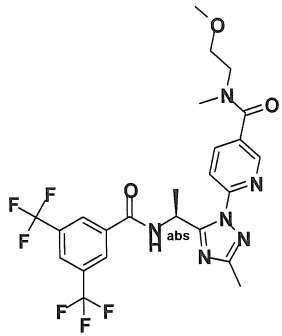
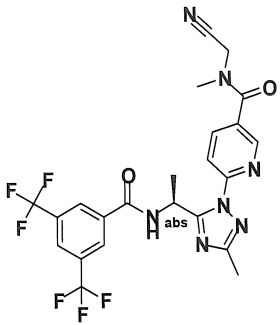
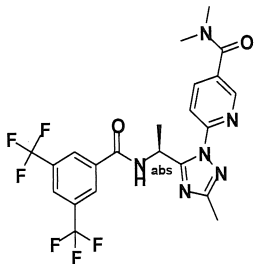
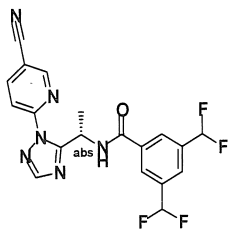
		(91,2); 2,5074 (179,6); 2,5029 (232,7); 2,4984 (170,6); 2,4942 (85,1); 2,3342 (1,0); 2,3298 (1,4); 2,3252 (1,1); 1,9894 (1,8); 1,6250 (15,5); 1,6076 (15,4); 1,2337 (0,7); 1,2127 (0,7); 1,1934 (0,8); 1,1754 (1,0); 1,1577 (0,5); 0,1460 (0,8); 0,0079 (6,6); -0,0002 (179,2); -0,0084 (7,7); -0,1495 (0,8)
II-83	 (hợp chất tham khảo)	II-83: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,3838 (3,5); 9,3665 (3,6); 9,0666 (5,7); 9,0650 (6,4); 9,0612 (6,4); 9,0595 (6,2); 8,5860 (4,9); 8,5804 (4,8); 8,5645 (5,3); 8,5589 (5,3); 8,3158 (0,6); 8,2418 (16,0); 8,1681 (6,0); 8,0861 (6,4); 8,0845 (6,6); 8,0646 (5,9); 8,0629 (6,2); 8,0031 (6,2); 7,9480 (5,8); 7,2198 (2,9); 7,0814 (6,4); 6,9430 (3,1); 6,1110 (0,6); 6,0937 (2,6); 6,0764 (4,0); 6,0591 (2,6); 6,0417 (0,5); 3,3286 (356,4); 2,9883 (0,4); 2,8895 (0,4); 2,6807 (0,6); 2,6761 (1,3); 2,6716 (1,8); 2,6671 (1,4); 2,5251 (5,4); 2,5203 (8,0); 2,5116 (105,8); 2,5072 (218,5); 2,5026 (290,7); 2,4981 (213,2); 2,4936 (105,0); 2,3340 (1,2); 2,3295 (1,7); 2,3248 (1,3); 1,9891 (1,1); 1,6365 (15,4); 1,6191 (15,3); 1,1752 (0,6); 0,1459 (0,7); 0,0079 (5,4); -0,0002 (168,4); -0,0085 (6,1); -0,1496 (0,7)
II-85	 (hợp chất tham khảo)	II-85: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,5895 (3,4); 9,5717 (3,6); 8,6415 (5,5); 8,6290 (5,7); 8,4638 (13,7); 8,3174 (6,8); 8,1883 (12,6); 8,0977 (0,5); 7,7559 (8,6); 7,4806 (4,3); 7,4774 (4,6); 7,4681 (4,5); 7,4649 (4,7); 6,1364 (0,5); 6,1189 (2,2); 6,1015 (3,6); 6,0839 (2,4); 6,0675 (0,6); 3,4677 (24,1); 3,4502 (21,8); 3,1579 (2,6); 3,1404 (5,7); 3,1226 (5,8); 3,1050 (2,7); 2,8801 (0,5); 2,6715 (4,3); 2,6674 (3,4); 2,5068 (543,1); 2,5026 (699,9); 2,4982 (560,5); 2,3294 (4,8); 2,3250 (3,9); 1,8602 (0,5); 1,8414 (0,7); 1,8202 (0,7); 1,7956 (0,6); 1,7744 (0,6); 1,6792 (13,4); 1,6619 (13,6); 1,5907 (0,9); 1,5710 (1,0); 1,5512 (1,1); 1,4788 (7,3); 1,4718 (8,1); 1,2109 (8,7); 1,1816 (11,9); 1,1640 (16,0); 1,1465 (8,5); 1,0443 (6,8); 1,0266 (12,2); 1,0088 (6,0); 0,9838 (1,7); 0,9361 (8,1); 0,9192 (11,4); 0,1457 (2,9); 0,0077 (31,0); -0,0002 (599,2); -0,1497 (2,9)

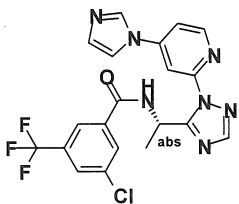
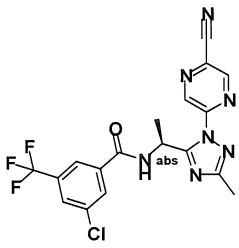
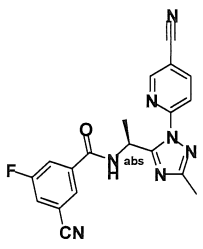
II-86	 (hợp chất tham khảo)	II-86: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta = 9,5668$ (1,8); $8,6422$ (2,9); $8,6297$ (3,0); $8,4589$ (6,9); $8,3138$ (3,0); $8,1866$ (7,0); $8,1404$ (0,4); $7,8090$ (4,4); $7,5003$ (2,4); $7,4971$ (2,3); $7,4877$ (2,3); $7,4846$ (2,3); $6,1141$ (1,2); $6,0966$ (1,9); $6,0790$ (1,2); $3,3324$ (172,4); $3,0117$ (15,0); $2,8935$ (0,6); $2,8580$ (16,0); $2,6759$ (1,0); $2,6718$ (1,3); $2,6675$ (1,0); $2,5071$ (158,8); $2,5029$ (202,9); $2,4986$ (154,1); $2,3340$ (0,9); $2,3297$ (1,2); $2,3254$ (1,0); $1,9893$ (0,8); $1,6773$ (7,0); $1,6599$ (7,0); $1,1754$ (0,4); $0,1458$ (0,9); $0,0073$ (8,0); $-0,0002$ (188,3); $-0,1498$ (0,9)
II-87	 (hợp chất tham khảo)	II-87: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta = 9,6559$ (1,8); $9,6408$ (3,8); $9,6253$ (1,9); $9,5682$ (3,9); $9,5506$ (4,0); $8,7390$ (6,6); $8,7262$ (6,9); $8,4054$ (14,2); $8,3178$ (0,8); $8,3020$ (6,2); $8,2783$ (8,7); $8,2284$ (16,0); $7,8878$ (4,7); $7,8844$ (4,7); $7,8750$ (4,6); $7,8715$ (4,7); $6,1075$ (0,6); $6,0908$ (2,6); $6,0735$ (4,2); $6,0562$ (2,6); $6,0394$ (0,6); $4,1945$ (1,0); $4,1708$ (3,4); $4,1550$ (3,5); $4,1466$ (3,7); $4,1308$ (3,4); $4,1228$ (1,5); $4,1068$ (1,1); $3,3322$ (404,9); $2,6761$ (2,3); $2,6717$ (3,1); $2,6673$ (2,3); $2,5249$ (10,1); $2,5112$ (191,4); $2,5072$ (373,2); $2,5027$ (486,3); $2,4983$ (361,9); $2,4942$ (183,7); $2,3338$ (2,2); $2,3296$ (3,1); $2,3252$ (2,3); $1,6790$ (15,2); $1,6616$ (15,2); $0,1456$ (2,4); $0,0075$ (18,8); $-0,0003$ (476,7); $-0,0084$ (20,7); $-0,1499$ (2,4)
II-88	 (hợp chất tham khảo)	II-88: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta = 9,5779$ (3,3); $9,5611$ (3,3); $8,6800$ (4,4); $8,6678$ (4,8); $8,4537$ (14,8); $8,3109$ (6,8); $8,1997$ (10,7); $7,8312$ (5,8); $7,5437$ (2,8); $7,5333$ (2,9); $7,4744$ (0,8); $6,1339$ (0,6); $6,1170$ (2,5); $6,0994$ (4,0); $6,0820$ (2,6); $6,0649$ (0,6); $4,4196$ (1,2); $4,3953$ (3,7); $4,3715$ (3,8); $4,3470$ (1,5); $4,1551$ (0,9); $4,1359$ (0,9); $4,0375$ (0,9); $4,0197$ (0,8); $3,7931$ (0,5); $3,7763$ (0,5); $3,3313$ (1009,5); $3,2703$ (0,5); $3,1477$ (0,4); $3,1208$ (3,6); $2,9738$ (16,0); $2,6758$ (5,0); $2,6714$ (7,0); $2,6670$ (5,3); $2,5248$ (22,2); $2,5069$ (842,2); $2,5025$ (1103,7); $2,4980$ (847,8); $2,3794$ (0,4); $2,3338$ (5,1); $2,3293$ (7,0); $2,3248$ (5,4); $2,0117$ (1,4); $2,0001$ (0,6); $1,9892$ (3,8); $1,6789$ (15,6); $1,6615$ (15,7); $1,2351$ (0,8); $1,1929$ (1,1); $1,1751$ (2,0); $1,1573$ (1,0); $0,8884$ (1,6); $0,8716$ (1,5); $0,1458$ (4,9);

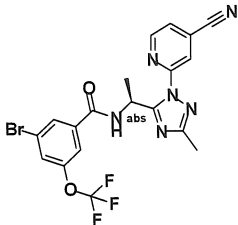
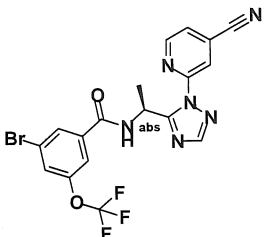
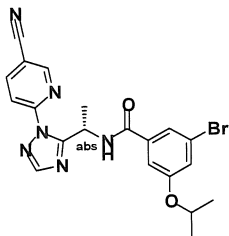
		0,0079 (45,8); -0,0002 (1148,6); -0,0084 (72,3); -0,0567 (0,5); -0,1497 (5,1)
II-89	 (hợp chất tham khảo)	II-89: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,8606 (2,1); 9,8472 (4,0); 9,8336 (1,9); 9,5950 (3,9); 9,5778 (4,1); 9,5573 (0,4); 8,7459 (6,0); 8,7331 (6,2); 8,5508 (1,2); 8,4622 (0,4); 8,4254 (14,9); 8,3877 (0,5); 8,3313 (1,2); 8,3041 (6,8); 8,2715 (8,6); 8,2461 (0,4); 8,2274 (15,0); 8,2074 (0,5); 8,1584 (0,7); 7,8976 (5,0); 7,8940 (5,0); 7,8847 (4,9); 7,8811 (4,8); 6,1212 (0,6); 6,1039 (2,7); 6,0866 (4,2); 6,0693 (2,7); 6,0513 (0,6); 4,4131 (1,1); 4,3942 (10,7); 4,3807 (10,6); 4,0557 (0,4); 4,0378 (1,2); 4,0200 (1,2); 4,0022 (0,4); 3,6780 (0,3); 3,5909 (0,9); 3,4820 (0,5); 3,3468 (311,3); 3,2024 (0,3); 3,1298 (0,9); 3,1156 (0,9); 2,6772 (4,0); 2,6728 (5,4); 2,6684 (4,1); 2,5261 (17,5); 2,5083 (664,6); 2,5038 (854,6); 2,4994 (655,1); 2,3350 (4,1); 2,3307 (5,4); 2,3263 (4,2); 2,0119 (0,3); 1,9896 (5,1); 1,6775 (15,1); 1,6602 (16,0); 1,6441 (1,5); 1,4770 (1,2); 1,2929 (4,9); 1,2768 (5,9); 1,1930 (1,7); 1,1752 (3,0); 1,1574 (1,6); 0,9517 (0,7); 0,9365 (1,4); 0,9205 (1,6); 0,9028 (0,8); 0,8887 (0,5); 0,8719 (0,4); 0,1460 (3,7); 0,0079 (33,4); -0,0002 (831,5); -0,0083 (51,2); -0,0698 (0,4); -0,1496 (3,8)
II-90	 (hợp chất tham khảo)	II-90: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,5745 (1,4); 9,5568 (1,4); 8,9895 (0,6); 8,9753 (1,2); 8,9608 (0,6); 8,6964 (2,3); 8,6837 (2,4); 8,4147 (4,9); 8,3210 (0,5); 8,3032 (2,2); 8,2299 (3,0); 8,2285 (3,0); 8,2127 (6,3); 7,8581 (1,9); 7,8544 (1,8); 7,8453 (1,8); 7,8416 (1,8); 6,0806 (1,0); 6,0631 (1,5); 6,0457 (0,9); 3,3553 (32,0); 3,1348 (2,2); 3,1193 (3,0); 3,1028 (2,0); 2,6764 (1,1); 2,6719 (1,4); 2,6673 (1,1); 2,6629 (0,5); 2,5253 (4,8); 2,5205 (7,6); 2,5119 (86,1); 2,5075 (169,8); 2,5029 (220,2); 2,4983 (160,4); 2,4938 (78,1); 2,3343 (1,0); 2,3297 (1,4); 2,3252 (1,0); 1,8987 (0,4); 1,8817 (0,8); 1,8650 (1,0); 1,8481 (0,8); 1,8313 (0,4); 1,6764 (5,6); 1,6590 (5,6); 1,2874 (1,4); 1,2675 (2,5); 1,2516 (1,9); 0,9384 (0,4); 0,9280 (0,8); 0,9189 (1,5); 0,9065 (16,0); 0,8898 (15,3); 0,1458 (1,1); 0,0147 (0,8); 0,0079 (10,2); -0,0003 (269,0); -0,0086 (9,8); -0,0230 (0,4); -0,1496 (1,1)

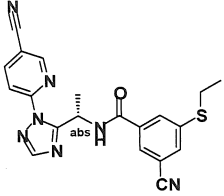
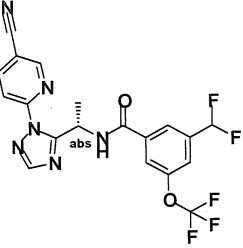
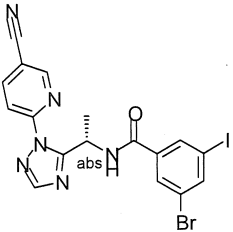
II-91	 (hợp chất tham khảo)	II-91: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta = 9,5588$ (1,6); $9,5408$ (1,6); $8,5523$ (0,9); $8,4698$ (5,5); $8,3136$ (2,6); $8,0776$ (0,8); $7,8841$ (2,9); $7,8632$ (2,4); $7,8619$ (2,3); $6,1383$ (0,8); $6,1210$ (1,1); $6,1038$ (0,7); $3,3320$ (69,6); $3,0685$ (2,3); $2,9296$ (1,7); $2,6769$ (0,6); $2,6725$ (0,7); $2,6679$ (0,5); $2,5122$ (54,2); $2,5079$ (91,7); $2,5034$ (111,4); $2,4989$ (78,9); $2,4946$ (37,6); $2,3437$ (16,0); $2,3305$ (1,0); $2,3260$ (0,6); $2,0763$ (1,0); $1,6521$ (5,9); $1,6348$ (5,7); $0,5037$ (0,7); $0,4279$ (0,7); $0,2991$ (0,8); $0,0078$ (5,9); $-0,0002$ (58,3); $-0,0085$ (2,3)
II-92	 (hợp chất tham khảo)	II-92: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta = 9,5514$ (1,3); $9,5333$ (1,3); $8,5562$ (0,4); $8,5033$ (0,7); $8,4607$ (4,5); $8,3173$ (2,6); $8,0553$ (0,7); $8,0396$ (0,5); $7,8813$ (1,4); $7,8608$ (1,2); $6,1299$ (1,1); $6,1122$ (1,7); $6,0945$ (1,1); $3,3345$ (94,0); $2,8416$ (1,9); $2,6993$ (1,2); $2,6774$ (0,6); $2,6730$ (0,7); $2,6685$ (0,5); $2,5261$ (2,0); $2,5084$ (69,5); $2,5039$ (88,1); $2,4994$ (65,1); $2,3447$ (16,0); $2,3311$ (0,9); $2,0765$ (0,3); $1,6522$ (6,3); $1,6348$ (6,2); $1,1522$ (1,8); $1,0711$ (2,6); $0,0079$ (1,8); $-0,0002$ (42,6); $-0,0084$ (1,8)
II-93	 (hợp chất tham khảo)	II-93: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta = 9,5550$ (1,1); $9,5370$ (1,1); $8,6058$ (0,7); $8,4616$ (5,0); $8,3075$ (2,2); $8,1491$ (0,4); $8,1344$ (0,4); $7,9120$ (2,6); $7,8907$ (2,2); $6,1398$ (0,8); $6,1222$ (1,2); $6,1046$ (0,8); $4,3926$ (0,5); $4,3809$ (0,5); $4,3744$ (0,5); $3,3314$ (117,2); $3,0309$ (2,0); $2,6763$ (0,7); $2,6718$ (1,0); $2,6673$ (0,8); $2,6628$ (0,4); $2,5253$ (3,3); $2,5204$ (5,0); $2,5118$ (61,1); $2,5074$ (123,6); $2,5028$ (162,7); $2,4983$ (119,2); $2,4938$ (58,6); $2,3470$ (16,0); $2,3344$ (1,0); $2,3297$ (1,1); $2,3253$ (0,8); $2,0757$ (0,4); $1,6546$ (5,4); $1,6372$ (5,4); $0,1457$ (0,4); $0,0080$ (3,0); $-0,0002$ (86,9); $-0,0085$ (3,1); $-0,1497$ (0,4)
II-94	 (hợp chất tham khảo)	II-94: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta = 9,5548$ (0,8); $9,5385$ (1,2); $8,5585$ (1,2); $8,4906$ (0,8); $8,4640$ (6,9); $8,3089$ (3,0); $8,0979$ (0,6); $8,0802$ (0,7); $8,0362$ (0,4); $8,0151$ (0,5); $7,8772$ (3,5); $7,8561$ (2,8); $6,1326$ (0,8); $6,1138$ (0,8); $6,0965$ (0,5); $3,3316$ (140,0); $3,3159$ (2,0); $3,2958$ (1,5); $3,0445$ (0,9); $3,0277$ (0,9); $2,9688$ (2,8); $2,8599$ (4,6); $2,6766$ (0,9); $2,6720$ (1,2); $2,6676$ (0,9); $2,5254$ (4,1); $2,5118$ (70,8); $2,5076$

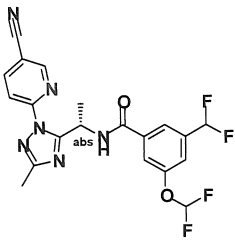
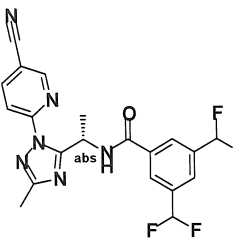
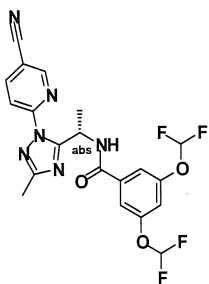
		(139,4); 2,5031 (181,8); 2,4986 (134,5); 2,4943 (67,5); 2,3453 (16,0); 2,3300 (1,4); 2,3255 (1,0); 2,0760 (0,5); 2,0292 (0,4); 2,0110 (0,4); 1,6514 (6,8); 1,6341 (6,8); 0,9262 (4,6); 0,9098 (4,5); 0,6273 (2,8); 0,6120 (2,7); 0,1459 (0,4); 0,0080 (3,4); -0,0001 (96,2); -0,0084 (4,0); -0,1495 (0,4)
II-95	 (hợp chất tham khảo)	II-95: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,5552 (1,5); 9,5371 (1,5); 8,5300 (2,5); 8,5257 (2,4); 8,4732 (2,6); 8,3174 (2,2); 8,3133 (2,3); 8,1521 (7,4); 8,0731 (0,9); 8,0675 (0,35); 8,0521 (2,0); 8,0465 (2,0); 7,8779 (0,35); 7,8568 (1,8); 6,1377 (0,5); 6,1216 (0,7); 6,1036 (0,9); 3,5507 (0,6); 3,3319 (24,0); 2,9859 (1,1); 2,8873 (1,1); 2,6760 (1,7); 2,6714 (2,3); 2,6669 (1,7); 2,5248 (0,81); 2,5112 (142,9); 2,5069 (283,5); 2,5024 (368,1); 2,4978 (269,5); 2,4934 (132,5); 2,3417 (16,0); 2,3341 (0,81); 2,3293 (3,0); 2,3248 (2,3); 2,2303 (2,0); 2,1805 (0,3); 1,9151 (2,1); 1,6459 (4,5); 1,6286 (4,5); 0,1459 (0,8); 0,0080 (6,9); -0,0001 (201,7); -0,0084 (7,6); -0,1497 (0,8)
II-96	 (hợp chất tham khảo)	II-96: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,5655 (1,4); 9,5475 (1,5); 8,6676 (1,3); 8,4890 (5,1); 8,3126 (2,3); 8,1853 (0,7); 8,1663 (0,8); 7,8652 (2,6); 7,8441 (2,3); 6,1669 (0,9); 6,1493 (1,4); 6,1316 (0,9); 3,3335 (73,0); 2,9986 (2,5); 2,6774 (0,4); 2,6730 (0,5); 2,6686 (0,4); 2,5263 (1,5); 2,5128 (29,9); 2,5085 (59,7); 2,5039 (77,7); 2,4994 (56,6); 2,4949 (27,7); 2,3448 (16,0); 2,3308 (0,7); 2,3263 (0,5); 1,6493 (5,7); 1,6320 (5,7); 0,4812 (0,8); 0,3855 (0,8); 0,0079 (1,4); -0,0002 (41,1); -0,0085 (1,6)
II-97	 (hợp chất tham khảo)	II-97: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,5533 (1,1); 9,5353 (1,1); 8,5608 (0,6); 8,5191 (0,6); 8,4620 (4,8); 8,3137 (2,3); 8,0698 (0,7); 8,0494 (0,4); 7,8780 (2,4); 7,8571 (2,0); 6,1291 (1,0); 6,1116 (1,6); 6,0939 (1,1); 3,4839 (0,5); 3,4687 (0,6); 3,3320 (118,7); 3,1603 (0,5); 3,1428 (0,5); 2,9655 (1,8); 2,8598 (1,8); 2,6765 (0,7); 2,6721 (0,9); 2,6675 (0,7); 2,5255 (2,9); 2,5206 (4,6); 2,5119 (55,5); 2,5076 (110,5); 2,5030 (143,6); 2,4985 (104,6); 2,4941 (51,2); 2,3429 (16,0); 2,3300 (1,2); 2,3254 (0,8); 1,6505 (5,8); 1,6331 (5,8); 1,1433 (1,0); 1,1271 (0,7);

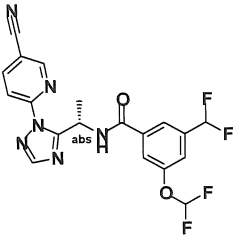
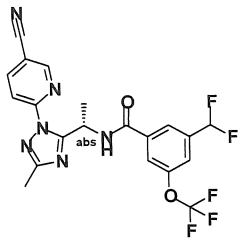
		1,0355 (0,7); 1,0201 (1,1); 0,1459 (0,3); 0,0080 (2,8); -0,0002 (79,8); -0,0085 (3,0)
II-98	 (hợp chất tham khảo)	II-98: $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ = 9,5579 (0,5); 9,5399 (1,7); 8,5237 (1,1); 8,4683 (0,5); 8,3133 (2,9); 8,0647 (1,0); 7,8776 (0,4); 7,8567 (1,7); 6,1289 (1,3); 6,1113 (1,9); 6,0937 (1,2); 3,6253 (0,8); 3,5687 (0,9); 3,3741 (1,6); 3,3318 (158,0); 3,2981 (2,1); 3,2732 (0,7); 3,1617 (2,8); 2,9977 (2,6); 2,9104 (1,8); 2,6762 (1,0); 2,6718 (1,3); 2,6676 (0,9); 2,5071 (161,6); 2,5028 (0,4); 2,4984 (144,5); 2,3410 (16,0); 1,6489 (6,3); 1,6315 (6,2); 0,1457 (0,4); -0,0002 (85,3); -0,1494 (0,4)
II-99	 (hợp chất tham khảo)	II-99: $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ = 9,5749 (1,3); 9,5571 (1,3); 8,6507 (1,3); 8,4763 (4,7); 8,3171 (2,5); 8,1882 (0,6); 8,1677 (0,7); 7,9265 (1,8); 7,9052 (1,6); 6,1490 (1,0); 6,1314 (1,6); 6,1139 (1,0); 5,7578 (2,2); 4,5719 (3,4); 3,3318 (233,2); 3,0294 (5,3); 2,6762 (1,2); 2,6717 (1,6); 2,6671 (1,1); 2,6632 (0,6); 2,5251 (5,1); 2,5202 (8,1); 2,5115 (94,7); 2,5072 (187,4); 2,5027 (243,1); 2,4981 (176,6); 2,4937 (86,6); 2,3450 (16,0); 2,3342 (1,6); 2,3296 (1,7); 2,3250 (1,3); 1,6552 (5,8); 1,6378 (5,8); 0,1460 (0,5); 0,0080 (4,6); -0,0002 (134,8); -0,0085 (5,1); -0,1496 (0,5)
II-100	 (hợp chất tham khảo)	II-100: $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ = 9,5604 (1,4); 9,5423 (1,4); 8,5699 (2,6); 8,5657 (2,5); 8,5644 (2,5); 8,4669 (5,2); 8,3111 (2,3); 8,1033 (1,7); 8,0977 (1,6); 8,0823 (2,0); 8,0767 (2,0); 7,8789 (2,7); 7,8578 (2,3); 6,1320 (1,0); 6,1144 (1,6); 6,0968 (1,0); 3,3291 (135,6); 3,0047 (4,7); 2,8904 (5,0); 2,6759 (1,1); 2,6713 (1,5); 2,6668 (1,1); 2,6625 (0,6); 2,5248 (4,6); 2,5112 (89,7); 2,5069 (178,0); 2,5024 (231,9); 2,4978 (169,2); 2,4934 (83,0); 2,3410 (16,0); 2,3293 (1,8); 2,3248 (1,2); 1,6508 (5,7); 1,6335 (5,7); 0,1457 (0,5); 0,0079 (4,4); -0,0002 (122,2); -0,0085 (4,5); -0,1498 (0,5)
II-101		II-101: $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ = 9,4692 (3,5); 9,4518 (3,6); 9,0685 (6,4); 9,0636 (6,4); 8,5864 (4,5); 8,5809 (4,3); 8,5649 (4,9); 8,5594 (4,8); 8,2449 (15,7); 8,1854 (12,7); 8,0898 (6,8); 8,0684 (6,2); 7,9345 (5,8); 7,3140 (5,5); 7,1753 (12,5); 7,1599 (0,4); 7,0368 (6,0);

	(hợp chất tham khảo)	6,1370 (0,6); 6,1197 (2,7); 6,1024 (4,2); 6,0850 (2,7); 6,0677 (0,6); 3,3314 (76,8); 2,6769 (0,8); 2,6724 (1,0); 2,6677 (0,7); 2,5257 (3,2); 2,5122 (61,0); 2,5079 (120,0); 2,5035 (155,1); 2,4990 (112,8); 2,4947 (55,4); 2,3391 (0,3); 2,3346 (0,7); 2,3303 (0,9); 2,3258 (0,7); 1,9899 (0,9); 1,6520 (16,0); 1,6346 (16,0); 1,1755 (0,5); 0,1459 (0,4); 0,0079 (2,8); -0,0002 (81,2); -0,0084 (3,0); -0,1495 (0,4)
II-102	 (hợp chất tham khảo)	II-102: $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ = 9,4375 (3,6); 9,4197 (3,7); 8,6731 (2,8); 8,6504 (7,3); 8,6363 (7,4); 8,2180 (16,0); 8,1689 (7,1); 8,1641 (7,3); 8,1228 (7,0); 8,0991 (4,0); 8,0789 (7,1); 8,0485 (6,2); 8,0338 (0,4); 7,9052 (4,1); 7,9000 (4,1); 7,8911 (4,0); 7,8859 (3,9); 7,2078 (2,8); 6,0775 (0,6); 6,0603 (2,6); 6,0428 (4,1); 6,0252 (2,6); 6,0078 (0,6); 3,3397 (24,6); 2,6760 (0,4); 2,5293 (1,5); 2,5158 (25,7); 2,5116 (50,7); 2,5071 (66,0); 2,5025 (48,2); 2,4981 (23,7); 2,3339 (0,4); 2,0797 (0,6); 1,6675 (15,1); 1,6501 (15,0); 0,0079 (2,6); -0,0002 (65,2); -0,0085 (2,6)
II-104	 (hợp chất tham khảo)	II-104: $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, CD_3CN): δ = 9,2832 (2,8); 9,2800 (2,9); 8,8841 (2,9); 8,8809 (2,8); 8,0350 (2,1); 7,9960 (2,2); 7,8789 (2,0); 7,8181 (0,6); 7,8013 (0,6); 6,1226 (1,0); 6,1050 (1,5); 6,0873 (1,0); 4,0678 (0,3); 4,0500 (0,3); 2,3887 (16,0); 2,1475 (6,9); 1,9723 (1,7); 1,9653 (6,4); 1,9591 (1,5); 1,9533 (8,1); 1,9471 (14,9); 1,9410 (20,4); 1,9348 (14,2); 1,9287 (7,4); 1,6495 (6,9); 1,6321 (6,8); 1,2851 (0,5); 1,2686 (0,9); 1,2218 (0,4); 1,2040 (0,8); 1,1861 (0,4); -0,0002 (16,4); -0,0083 (0,8)
II-105	 (hợp chất tham khảo)	II-105: $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ = 9,3451 (1,3); 9,3275 (1,4); 9,0367 (2,5); 9,0329 (2,5); 9,0313 (2,4); 8,5473 (1,8); 8,5418 (1,8); 8,5258 (2,0); 8,5202 (2,0); 8,1758 (2,0); 8,1727 (3,5); 8,1694 (2,2); 8,0863 (0,9); 8,0831 (1,0); 8,0801 (1,0); 8,0772 (0,9); 8,0654 (0,9); 8,0622 (1,0); 8,0593 (1,0); 8,0563 (0,9); 8,0294 (2,5); 8,0277 (2,5); 8,0078 (2,4); 8,0061 (2,4); 7,9962 (1,0); 7,9926 (1,1); 7,9901 (1,0); 7,9865 (0,8); 7,9725 (1,0); 7,9689 (1,1); 7,9664 (1,0); 7,9627 (0,8); 6,1047 (1,0); 6,0872 (1,6); 6,0698 (1,0); 3,9061 (0,4); 3,3397 (41,8); 2,5455 (1,4); 2,5285 (0,6); 2,5149 (11,8); 2,5106 (23,5);

		2,5061 (30,6); 2,5015 (22,2); 2,4971 (10,8); 2,3452 (16,0); 2,0793 (5,6); 1,6203 (5,8); 1,6029 (5,7)
II-106	 (hợp chất tham khảo)	II-106: $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta = 9,3159$ (1,4); $8,7777$ (2,2); $8,7760$ (2,3); $8,7650$ (2,3); $8,7633$ (2,4); $8,2452$ (3,4); $8,0836$ $(1,9)$; $8,0799$ (3,2); $8,0763$ (2,0); $7,9262$ (2,0); $7,9229$ (2,0); $7,9136$ (2,0); $7,9103$ (1,9); $7,8897$ $(2,0)$; $7,7547$ (1,9); $7,7522$ (2,1); $6,0178$ (1,0); $6,0004$ (1,6); $5,9828$ (1,0); $3,3377$ (124,2); $2,6796$ (0,4); $2,6751$ (0,6); $2,6705$ (0,4); $2,5284$ $(1,8)$; $2,5149$ (36,3); $2,5106$ (71,0); $2,5061$ $(91,5)$; $2,5015$ (66,2); $2,4971$ (32,0); $2,3484$ $(16,0)$; $2,3380$ (0,8); $2,3330$ (0,7); $2,3284$ (0,5); $2,0795$ (4,3); $1,6151$ (5,6); $1,5977$ (5,6)
II-107	 (hợp chất tham khảo)	II-107: $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta = 9,3480$ (3,6); $9,3307$ (3,6); $8,8059$ (5,9); $8,8041$ (6,2); $8,7933$ (6,1); $8,7914$ (6,5); $8,3185$ $(9,1)$; $8,2364$ (16,0); $8,0537$ (5,1); $8,0501$ (8,4); $8,0465$ (5,3); $7,9689$ (5,4); $7,9656$ (5,2); $7,9563$ $(5,1)$; $7,9530$ (5,0); $7,8876$ (5,5); $7,7276$ (5,6); $6,0308$ (0,6); $6,0135$ (2,6); $5,9961$ (4,0); $5,9788$ $(2,6)$; $5,9612$ (0,6); $3,5694$ (0,3); $3,5477$ (0,4); $3,5111$ (0,5); $3,3561$ (2202,2); $3,2790$ (0,7); $2,6797$ (2,5); $2,6752$ (3,4); $2,6707$ (2,5); $2,5828$ $(0,3)$; $2,5456$ (2,1); $2,5286$ (10,1); $2,5148$ $(219,9)$; $2,5107$ (433,5); $2,5062$ (562,9); $2,5016$ $(412,4)$; $2,4973$ (203,4); $2,4524$ (0,5); $2,3374$ $(2,5)$; $2,3329$ (3,4); $2,3285$ (2,5); $2,0778$ (7,3); $2,0197$ (0,8); $2,0109$ (0,5); $1,9850$ (0,7); $1,6351$ $(15,5)$; $1,6177$ (15,5); $1,2324$ (1,0); $0,0025$ (1,2)
II-108	 (hợp chất tham khảo)	II-108: $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): $\delta = 9,1455$ (1,2); $9,1282$ (1,2); $9,0626$ (2,2); $9,0609$ (2,3); $9,0572$ (2,3); $9,0554$ (2,1); $8,5832$ $(1,8)$; $8,5777$ (1,7); $8,5618$ (0,95); $8,5562$ (1,9); $8,2320$ (6,0); $8,0780$ (2,4); $8,0763$ (0,95); $8,0566$ $(0,37)$; $8,0549$ (2,1); $7,5255$ (1,8); $7,5218$ (3,0); $7,5181$ (1,8); $7,3050$ (1,3); $7,2993$ (2,3); $7,2959$ $(1,9)$; $7,2817$ (2,0); $7,2772$ (2,5); $7,2717$ (1,2); $6,0564$ (0,9); $6,0390$ (1,4); $6,0216$ (0,9); $4,7173$ $(0,4)$; $4,7022$ (1,0); $4,6872$ (1,4); $4,6721$ (1,0); $4,6572$ (0,4); $3,3331$ (37,6); $2,5266$ (0,6); $2,5132$ $(13,2)$; $2,5088$ (26,3); $2,5042$ (33,9); $2,4996$ $(24,0)$; $2,4952$ (11,3); $1,6206$ (5,3); $1,6032$ (5,3);

		1,2619 (16,0); 1,2468 (15,8); 0,0081 (0,5); -0,0002 (13,1); -0,0084 (0,37)
II-109	 (hợp chất tham khảo)	II-109: $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, CD_3CN): δ = 8,8592 (3,3); 8,8574 (3,7); 8,8538 (3,8); 8,8520 (3,5); 8,3154 (2,6); 8,3099 (2,6); 8,2939 (3,1); 8,2884 (3,1); 8,0819 (0,9); 8,0800 (0,35); 8,0604 (3,2); 8,0585 (3,3); 8,0241 (0,35); 7,8511 (9,5); 7,8472 (11,6); 7,7781 (1,0); 7,7609 (0,9); 7,7430 (3,4); 7,7390 (5,5); 7,7350 (3,3); 6,2236 (0,4); 6,2064 (1,7); 6,1887 (2,6); 6,1710 (1,7); 6,1533 (0,81); 3,0777 (2,3); 3,0593 (7,2); 3,0410 (7,4); 3,0226 (2,5); 2,1622 (18,1); 1,9656 (2,9); 1,9595 (0,81); 1,9537 (13,6); 1,9475 (25,3); 1,9414 (34,8); 1,9352 (24,2); 1,9290 (12,6); 1,6639 (12,4); 1,6466 (12,3); 1,3117 (8,0); 1,2934 (16,0); 1,2750 (7,6); 0,0081 (1,3); -0,0002 (30,8)
II-111	 (hợp chất tham khảo)	II-111: $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ = 9,4571 (3,6); 9,4398 (3,7); 9,0638 (6,3); 9,0621 (6,8); 9,0584 (6,9); 9,0567 (6,2); 8,5850 (4,9); 8,5795 (4,7); 8,5636 (0,9); 8,5580 (0,35); 8,2491 (16,0); 8,0951 (7,1); 8,0890 (0,35); 8,0674 (6,2); 8,0657 (6,2); 7,9383 (5,3); 7,7776 (0,9); 7,2859 (2,9); 7,1476 (6,5); 7,0094 (3,1); 6,1270 (0,6); 6,1101 (2,6); 6,0927 (4,1); 6,0754 (2,6); 6,0580 (0,81); 3,3317 (103,9); 2,6777 (0,7); 2,6731 (1,0); 2,6686 (0,7); 2,5265 (3,4); 2,5129 (61,1); 2,5087 (0,81); 2,5042 (151,7); 2,4996 (109,8); 2,4953 (54,1); 2,3356 (0,7); 2,3310 (0,9); 2,3265 (0,7); 2,0766 (0,4); 1,6525 (15,6); 1,6351 (15,6); 0,0080 (2,1); -0,0001 (55,8); -0,0084 (2,2)
II-112	 (hợp chất tham khảo)	II-112: $^1\text{H-NMR}$ (400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ = 9,2822 (3,8); 9,2648 (3,9); 9,0626 (7,0); 9,0572 (6,8); 8,5864 (4,5); 8,5809 (4,4); 8,5649 (4,9); 8,5594 (4,9); 8,2380 (15,9); 8,1352 (9,8); 8,1305 (10,7); 8,1257 (9,4); 8,0802 (7,1); 8,0587 (6,6); 7,9750 (5,5); 7,9711 (8,9); 7,9674 (5,2); 6,0793 (0,6); 6,0620 (2,7); 6,0446 (4,2); 6,0272 (2,7); 6,0098 (0,6); 3,3269 (75,8); 2,6767 (0,6); 2,6723 (0,8); 2,6676 (0,6); 2,5253 (2,4); 2,5117 (48,6); 2,5077 (94,7); 2,5033 (122,9); 2,4989 (90,1); 2,3347 (0,5); 2,3301 (0,7); 2,3258 (0,6); 2,0760 (3,0); 1,6178 (16,0); 1,6004 (15,9);

		0,1457 (0,4); 0,0072 (3,7); -0,0003 (93,8); -0,0085 (3,6); -0,1499 (0,4)
II-113	 (hợp chất tham khảo)	II-113: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,3529 (1,6); 9,3351 (1,6); 9,0320 (2,9); 9,0278 (2,8); 8,5436 (1,8); 8,5381 (1,8); 8,5220 (1,9); 8,5166 (1,9); 8,0267 (2,8); 8,0051 (2,6); 7,9459 (3,1); 7,7855 (2,6); 7,5538 (2,6); 7,5401 (1,7); 7,3567 (3,0); 7,2484 (1,2); 7,1733 (1,5); 7,1099 (2,6); 6,9714 (1,2); 6,1077 (1,1); 6,0902 (1,8); 6,0727 (1,2); 3,3295 (46,0); 2,9961 (0,5); 2,8916 (4,5); 2,7320 (3,9); 2,6763 (0,4); 2,6722 (0,5); 2,5074 (64,2); 2,5031 (80,1); 2,4989 (60,9); 2,3411 (16,0); 1,9895 (0,4); 1,6246 (6,4); 1,6073 (6,3); 1,2369 (0,3); 1,2271 (0,3); -0,0002 (12,6)
II-114	 (hợp chất tham khảo)	II-114: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,4310 (1,3); 9,0331 (2,4); 9,0292 (2,4); 8,5435 (1,7); 8,5379 (1,6); 8,5219 (1,8); 8,5164 (1,8); 8,3160 (0,6); 8,2113 (4,7); 8,0281 (2,4); 8,0065 (2,3); 7,9345 (2,1); 7,3146 (2,0); 7,1760 (4,5); 7,0373 (2,2); 6,1212 (1,0); 6,1037 (1,6); 6,0862 (1,0); 3,3253 (98,9); 2,6753 (1,5); 2,6710 (2,0); 2,6666 (1,5); 2,5243 (6,4); 2,5107 (131,2); 2,5065 (258,3); 2,5021 (333,2); 2,4975 (240,3); 2,4933 (117,5); 2,3408 (16,0); 2,3290 (2,2); 2,3245 (1,5); 1,6296 (5,7); 1,6122 (5,7); 0,0078 (0,6); -0,0002 (16,5); -0,0084 (0,6)
II-115	 (hợp chất tham khảo)	II-115: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,2449 (1,3); 9,2272 (1,4); 9,0309 (2,4); 9,0295 (2,4); 9,0256 (2,5); 8,5435 (1,8); 8,5380 (1,7); 8,5220 (1,9); 8,5164 (1,9); 8,0255 (2,6); 8,0239 (2,4); 8,0040 (2,4); 8,0023 (2,2); 7,5233 (5,7); 7,5178 (6,1); 7,5139 (3,8); 7,3303 (6,1); 7,2296 (1,5); 7,2243 (2,6); 7,2189 (1,4); 7,1470 (3,0); 6,0925 (1,0); 6,0751 (1,6); 6,0575 (1,0); 3,3280 (60,1); 2,6762 (0,5); 2,6717 (0,6); 2,6673 (0,4); 2,5251 (1,8); 2,5116 (39,0); 2,5073 (76,8); 2,5028 (98,1); 2,4982 (70,0); 2,4938 (33,3); 2,3406 (16,0); 2,3301 (1,0); 2,3255 (0,6); 1,6195 (5,7); 1,6021 (5,6); -0,0002 (6,3)

II-116	 (hợp chất tham khảo)	II-116: $^1\text{H-NMR}$(400,2 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,3722 (3,8); 9,3549 (3,8); 9,0661 (7,1); 9,0619 (6,8); 8,5859 (4,4); 8,5804 (4,1); 8,5644 (4,7); 8,5590 (4,5); 8,3168 (0,5); 8,2423 (14,9); 8,0874 (6,7); 8,0657 (6,2); 7,9193 (7,3); 7,7625 (6,1); 7,5521 (6,2); 7,5388 (4,0); 7,3553 (7,4); 7,2460 (2,9); 7,1720 (3,7); 7,1074 (6,3); 6,9690 (3,1); 6,1221 (0,6); 6,1048 (2,7); 6,0876 (4,2); 6,0702 (2,7); 6,0525 (0,6); 5,7573 (0,8); 3,3277 (66,4); 2,6762 (1,1); 2,6718 (1,4); 2,5071 (180,5); 2,5029 (220,2); 2,4985 (159,7); 2,3338 (1,0); 2,3296 (1,3); 1,6457 (16,0); 1,6283 (15,9); 0,9046 (0,5); -0,0002 (45,4); -0,0082 (2,0)
II-117	 (hợp chất tham khảo)	II-117: $^1\text{H-NMR}$(600,1 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$): δ= 9,4266 (1,4); 9,4148 (1,5); 9,0255 (2,2); 9,0220 (2,3); 8,5360 (1,7); 8,5324 (1,6); 8,5217 (1,8); 8,5180 (1,8); 8,1162 (2,6); 8,0217 (2,5); 8,0074 (2,4); 7,9565 (1,9); 7,7776 (1,9); 7,2404 (1,0); 7,1481 (2,3); 7,0560 (1,1); 6,1026 (1,1); 6,0909 (1,7); 6,0793 (1,1); 5,7564 (1,0); 3,3188 (79,0); 2,6168 (0,5); 2,6139 (0,7); 2,6109 (0,5); 2,5228 (1,7); 2,5198 (2,1); 2,5167 (2,2); 2,5077 (38,3); 2,5048 (79,2); 2,5018 (109,8); 2,4988 (82,5); 2,4959 (39,9); 2,3887 (0,5); 2,3857 (0,7); 2,3827 (0,5); 2,3433 (16,0); 1,6267 (6,0); 1,6151 (6,0); 0,9060 (0,6); -0,0001 (1,4)

1) ‘lowT’ biểu thị phép đo được tiến hành ở nhiệt độ 260 Kelvin.

2) ‘abs’ biểu thị hợp chất thu được ở dạng đồng phân đối ảnh được làm giàu hoặc tinh khiết với chất đồng phân lập thể chính có cấu hình tuyệt đối được mô tả trong các hình vẽ.

Các ví dụ sinh học

Rhipicephalus (Boophilus) microplus – thử nghiệm tiêu (tiêm BOOPMI)

Dung môi: dimetyl sulfoxit

Để tạo ra chế phẩm thích hợp chứa hoạt chất, 10 mg hoạt chất được hòa tan trong 0,5mL dung môi, và chất cô đặc được pha loãng bằng dung môi tới nồng độ mong muốn.

Năm tích cái trưởng thành đã hút căng máu (*Rhipicephalus microplus*) được tiêm bằng 1 μL hợp chất dung dịch vào bụng. Các tích này được chuyển vào các đĩa lặp lại và ủ trong tủ kiểm soát môi trường.

Sau 7 ngày, theo dõi việc đặt trứng có thể nở. Các trứng không quan sát thấy có thể nở được bảo quản trong tủ kiểm soát môi trường cho đến khi nở sau khoảng 42 ngày. Hiệu quả 100% có nghĩa là toàn bộ số trứng không nở được; 0% có nghĩa là toàn bộ số trứng được nở.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế có hoạt tính tốt là 100% với tỷ lệ áp dụng 20 μg /tích: I-1, I-2, I-3, I-4, I-5, I-6, I-7, I-8, I-9, I-10, I-11, I-12, I-13, I-14, I-15, I-16, I-17, I-18, I-19, I-21, I-22, I-23, I-24, I-25, I-26, I-27, I-28, I-30, I-31, I-32, I-33, I-34, I-35, I-37, I-38, I-39, I-40, II-1, II-2, II-3, II-4, II-5, II-7, II-8, II-9, II-10, II-11, II-12, II-13, II-14, II-15, II-16, II-17, II-18, II-19, II-20, II-21, II-22, II-23, II-24, II-25, II-26, II-27, II-28, II-29, II-30, II-31, II-32, II-33, II-34, II-36, II-37, II-38, II-39, II-40, II-41, II-43, II-44, II-46, II-47, II-48, II-49, II-50, II-51, II-52, II-53, II-54, II-55, II-56, II-57, II-59, II-60, II-61, II-62, II-63, II-64, II-65, II-66, II-67, II-68, II-69, II-70, II-71, II-72, II-73, II-74, II-75.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế có hoạt tính tốt là 0% với tỷ lệ áp dụng 20 μg /tích: II-42, II-58.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế có hoạt tính tốt là 100% với tỷ lệ áp dụng 4 μg /tích: I-1, I-2, I-3, I-4, I-5, I-6, I-7, I-8, I-9, I-10, I-11, I-13, I-14, I-15, I-16, I-17, I-19, I-21, I-24, I-25, I-26, I-27, I-28, I-30, I-31, I-32, I-33, I-34, I-35, I-36, I-37, I-38, I-39, I-40, I-41, I-42, I-43, I-44, I-45, I-46, I-47, I-48, I-61, I-62, II-1, II-2, II-3, II-5, II-7, II-8, II-10, II-11, II-12, II-13, II-14, II-15, II-16, II-17, II-18, II-19, II-20, II-21, II-22, II-23, II-25, II-26, II-27, II-28, II-29, II-30, II-31, II-33, II-34, II-36, II-37, II-38, II-39, II-40, II-41, II-43, II-44, II-46, II-47, II-48, II-49, II-50, II-51, II-52, II-53, II-54, II-55, II-57, II-59, II-60, II-61, II-62, II-63, II-64, II-65, II-66, II-67, II-69, II-70, II-71, II-72, II-73, II-74, II-75, II-79, II-81, II-82, II-83, II-91, II-92, II-93, II-94, II-96, II-97, II-98, II-99, II-100, II-101, II-102, II-104, II-105, II-106, II-107, II-109, II-111, II-112, II-113, II-116, II-117.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế có hoạt tính tốt là 80% với tỷ lệ áp dụng 4 $\mu\text{g}/\text{tích}$: I-22, I-23, I-59, II-24, II-32, II-42, II-56, II-68, II-77, II-80, II-89, II-95, II-108.

Rhipicephalus (Boophilus) microplus – các thử nghiệm tiếp xúc in-vitro ấu trùng tích ở trâu bò (Strain Parkhurst, có tính kháng với pyrethroid tổng hợp) (BOOPMI Cont)

9 mg hợp chất được hòa tan trong 1mL axeton và được pha loãng bằng axeton tới nồng độ mong muốn. 250 μL dung dịch thử nghiệm được nạp vào ống thử nghiệm thủy tinh 25mL và được phân bố đồng nhất trên thành trong bằng cách quay và nghiêng trên thiết bị lắc (2 h ở 30 vòng/phút). Với nồng độ hợp chất là 900ppm, bề mặt trong là 44,7 cm^2 và quá trình phân bố đồng nhất, thu được liều 5 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$.

Sau khi dung môi được làm bay hơi, mỗi ống thử nghiệm được nạp 20-50 ấu trùng tích ở trâu bò (*Rhipicephalus microplus*), được đóng bằng nắp đục lỗ và được ủ ở vị trí nằm ngang ở độ ẩm tương đối 85% và 27°C trong tủ áp. Hiệu quả được xác định sau thời gian 48 giờ. Ấu trùng được vỗ nhẹ ở đáy ống và hành vi hướng đất âm được ghi lại. Ấu trùng trèo từ thành lên đỉnh lọ theo cách được so sánh như với ấu trùng đối chứng không được xử lý được đánh dấu là còn sống, ấu trùng không trèo lên thành so với như ấu trùng đối chứng không được xử lý nhưng di chuyển không khóp hoặc hoặc chỉ co chân được đánh dấu là gần chết, tích ấu trùng còn lại dưới đáy và không di chuyển toàn bộ được tính là chết.

Hợp chất có hiệu quả tốt chống lại *Rhipicephalus microplus*, nếu ở nồng độ hợp chất là 5 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ hiệu quả ít nhất là 80% được kiểm tra. Hiệu quả 100% có nghĩa là toàn bộ ấu trùng đã chết hoặc gần chết; 0% có nghĩa là không có ấu trùng chết hoặc gần chết.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả tốt là 100% với tỷ lệ áp dụng 5 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ (= 500 g/ha): I-1, I-2, I-3, I-4, I-5, I-6, I-7, I-9, I-10, I-11, I-12, I-13, I-14, I-15, I-16, I-17, I-19, I-21, I-24, I-25, I-26, I-28, I-30, I-31, I-32, I-33, I-35, I-36, I-37, I-38, I-39, I-40, I-41, I-42, I-43, I-44, I-45, I-46, I-47, I-48, I-49, I-50, I-52, I-53, I-54, I-56, I-57, I-58, I-59, I-60, I-61, I-63, I-64, I-65, II-2, II-5, II-8, II-10, II-11, II-12, II-13, II-14, II-15, II-16, II-18, II-19, II-21, II-23, II-24, II-25, II-26, II-27, II-29, II-30, II-31, II-32, II-33, II-34, II-36, II-37, II-38, II-39, II-40, II-41, II-43, II-44, II-

46, II-47, II-48, II-49, II-50, II-52, II-53, II-54, II-55, II-57, II-60, II-61, II-62, II-63, II-64, II-65, II-66, II-67, II-68, II-69, II-70, II-71, II-72, II-73, II-74, II-75, II-79, II-80, II-81, II-82, II-85, II-86, II-88, II-90, II-91, II-92, II-93, II-94, II-96, II-97, II-98, II-99, II-100, II-101, II-104, II-105, II-106, II-107, II-109, II-111, II-112, II-113, II-114, II-115, II-116, II-117.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả tốt là 90% với tỷ lệ áp dụng $5 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ (= 500 g/ha): I-18, I-27, I-34, I-62, II-1, II-17, II-28, II-42, II-51, II-77, II-83, II-95, II-102, II-108.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả tốt là 80% với tỷ lệ áp dụng $5 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ (= 500 g/ha): I-8, I-51, I-55, II-9, II-22, II-56, II-87, II-89.

Rhipicephalus (Boophilus) microplus – thử nghiệm nhúng (BOOPMI Dip)

Động vật thử nghiệm: chủng của tích ở trâu bò (*Rhipicephalus microplus*)

Parkhurst, kháng SP

Dung môi: dimetyl sulfoxit

Để tạo ra chế phẩm thích hợp chứa hoạt chất, 10 mg hoạt chất được hòa tan trong 0,5mL dung môi, và chất cô đặc được pha loãng bằng nước tới nồng độ mong muốn.

Dung dịch hợp chất này được chuyển bằng pipet vào trong các ống. 8-10 tích cái trưởng thành, đã hút căng máu ở trâu bò cái (*Rhipicephalus microplus*) được đặt vào ống đục lỗ. Các ống này được ngâm trong dung dịch nước chứa hợp chất cho đến khi tích bị ướt hoàn toàn. Sau khi chất lỏng đã ráo hết, tích được đưa vào giấy lọc trên khay nhựa và được lưu trong tủ kiểm soát môi trường.

Sau 7 ngày, theo dõi việc đặt trứng có thể nở. Các trứng không quan sát thấy có thể nở được bảo quản trong tủ kiểm soát môi trường cho đến khi nở sau khoảng 42 ngày. Hiệu quả 100% có nghĩa là toàn bộ số trứng không nở được; 0% có nghĩa là toàn bộ số trứng được nở.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hoạt tính tốt ở mức 100% với tỷ lệ áp dụng 100ppm: I-1, I-2, I-7, I-8, II-5, II-43, II-50, II-53, II-63, II-73, II-96, II-97.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hoạt tính tốt ở mức 80% với tỷ lệ áp dụng 100ppm: II-38, II-47, II-54.

Ctenocephalides felis – các thử nghiệm tiếp xúc in-vitro ở bọ chết mèo trưởng thành (CTECFE Cont)

9 mg hợp chất được hòa tan trong 1mL axeton và được pha loãng bằng axeton tới nồng độ mong muốn. 250 μ L dung dịch thử nghiệm được nạp vào ống thử nghiệm thủy tinh 25mL và được phân bố đồng nhất trên thành trong bằng cách quay và nghiêng trên thiết bị lắc (2 h ở 30 vòng/phút). Với nồng độ hợp chất là 900ppm, bề mặt trong là 44,7 cm^2 và sự phân bố đồng nhất, thu được liều 5 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$.

Sau khi dung môi bay hơi, mỗi ống nghiệm được cho vào 5-10 con bọ chết mèo trưởng thành (*Ctenocephalides felis*), đậy nắp bằng nắp có đục lỗ và ủ ở vị trí nằm ngang ở nhiệt độ phòng và độ ẩm tương đối. Hiệu quả được xác định sau thời gian 48 giờ. Bọ chết được vỗ rơi xuống đáy ống và được ủ trên đĩa có gia nhiệt ở 45-50°C trong khoảng 5 phút. Bọ chết bị bất động hoặc di chuyển theo kiểu không điều khiển được, là những bọ chết không có khả năng thoát khỏi nguồn nhiệt bằng cách bò lên trên, được đánh dấu là bị chết hoặc gần chết.

Hợp chất thể hiện hiệu quả tốt chống lại *Ctenocephalides felis*, nếu ở nồng độ hợp chất là 5 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ hiệu quả đạt được ít nhất là 80%. Hiệu quả là 100% có nghĩa là tất cả bọ chết bị chết hoặc gần chết; 0% có nghĩa là không có bọ chết nào bị chết hoặc gần chết.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả tốt là 100% với tỷ lệ áp dụng 5 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ (= 500 g/ha): I-2, I-3, II-5, II-11, II-12, II-13, II-14, II-16, II-17, II-18, II-19, II-22, II-26, II-27, II-28, II-29, II-30, II-31, II-32, II-37, II-38, II-40, II-43, II-47, II-50, II-52, II-53, II-54, II-57, II-61, II-62, II-63, II-65, II-70, II-71, II-72, II-73, II-74, II-77, II-79, II-80, II-81, II-83, II-85, II-86, II-88, II-91, II-92, II-94, II-96, II-97, II-99, II-100, II-101, II-104, II-105, II-107, II-109, II-111, II-113, II-114, II-116, II-117.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả tốt là 90% với tỷ lệ áp dụng $5 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ ($= 500 \text{ g/ha}$): I-1, I-64, II-1, II-2, II-7, II-8, II-33, II-69, II-75, II-93, II-106, II-115.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả tốt là 80% với tỷ lệ áp dụng $5 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ ($= 500 \text{ g/ha}$): I-8, I-15, I-20, I-24, I-30, I-61, II-15, II-21, II-23, II-36, II-90, II-102, II-112.

Ctenocephalides felis – thử nghiệm uống (CTECFE uống)

Dung môi: dimethyl sulfoxit

Để tạo ra chế phẩm thích hợp chứa hoạt chất, 10 mg hoạt chất được hòa tan trong 0,5mL dung môi, và chất cô đặc được pha loãng bằng máu trâu bò tới nồng độ mong muốn.

Khoảng 20 bộ chết mèo đối trưởng thành (*Ctenocephalides felis*) được cho vào tủ nuôi bộ chết. Tủ trữ máu, được bịt màng parafilm ở đáy, được đổ máu gia súc cùng với dung dịch chứa hợp chất và được đặt lên miếng gạc dày nắp tủ nuôi bộ chết, sao cho bộ chết có thể hút máu. Tủ trữ máu được đun nóng đến 37°C trong khi tủ nuôi bộ chết được giữ ở nhiệt độ trong phòng.

Sau 2 ngày, tỷ lệ chết theo % được xác định. 100% có nghĩa là, tất cả số bộ chết đã bị tiêu diệt; 0% có nghĩa là, không có bộ chết nào bị tiêu diệt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hoạt tính tốt ở mức 100% với tỷ lệ áp dụng 100ppm: I-3, I-5, I-7, I-9, I-10, I-11, I-13, I-15, I-19, I-21, I-24, I-25, I-27, I-28, I-30, I-31, I-32, I-34, I-35, I-41, I-42, I-43, I-44, I-46, I-48, II-1, II-2, II-7, II-8, II-10, II-11, II-12, II-13, II-14, II-15, II-16, II-17, II-19, II-20, II-21, II-22, II-28, II-29, II-30, II-46, II-47, II-49, II-50, II-52, II-53, II-57, II-60, II-61, II-62, II-63, II-64, II-65, II-69, II-75, II-77, II-79, II-80, II-81, II-82, II-83, II-86, II-91, II-95, II-96, II-97, II-98, II-102, II-104, II-105, II-106, II-107, II-112, II-113.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hoạt tính tốt ở mức 90% với tỷ lệ áp dụng 100ppm: I-1, I-2, I-12, I-36, I-47, II-5, II-9, II-18, II-48, II-51, II-54, II-59, II-93, II-94.

Rhipicephalus sanguineus - các thử nghiệm tiếp xúc in-vitro ở tích chó nâu trưởng thành (RHIPSA Cont)

9 mg hợp chất được hòa tan trong 1mL axeton và được pha loãng bằng axeton tới nồng độ mong muốn. 250 μ L dung dịch thử nghiệm được nạp vào ống thử nghiệm thủy tinh 25mL và được phân bố đồng nhất trên thành trong bằng cách quay và nghiêng trên thiết bị lắc (2 h ở 30 vòng/phút). Với nồng độ hợp chất là 900ppm, bề mặt trong là 44,7 cm^2 và sự phân bố đồng nhất, thu được liều 5 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$.

Sau khi dung môi bay hơi, mỗi ống nghiệm được cho vào 5-10 tích chó nâu trưởng thành (*Rhipicephalus sanguineus*), đậy nắp bằng nắp có đục lỗ và ủ ở vị trí nằm ngang ở nhiệt độ phòng và độ ẩm tương đối. Hiệu quả được xác định sau thời gian 48 giờ. Tích được vỗ rơi xuống đáy ống và được ủ trên đĩa có gia nhiệt ở 45-50°C trong khoảng 5 phút. Tích bị bất động hoặc di chuyển theo kiểu không điều khiển được, là những tích không có khả năng thoát khỏi nguồn nhiệt bằng cách bò lên trên, được đánh dấu là bị chết hoặc gần chết.

Hợp chất thể hiện hiệu quả tốt chống lại *Rhipicephalus sanguineus*, nếu ở nồng độ hợp chất là 5 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ hiệu quả đạt được ít nhất là 80%. Hiệu quả là 100% có nghĩa là tất cả tích bị chết hoặc gần chết; 0% có nghĩa là không có tích nào bị chết hoặc gần chết.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả tốt là 100% với tỷ lệ áp dụng 5 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ (= 500 g/ha): I-1, I-2, I-19, I-21, I-24, I-26, I-27, I-28, I-32, I-37, I-40, I-61, II-4, II-5, II-8, II-10, II-12, II-16, II-17, II-18, II-19, II-27, II-28, II-29, II-30, II-31, II-32, II-34, II-38, II-39, II-41, II-43, II-44, II-46, II-47, II-48, II-49, II-50, II-51, II-52, II-53, II-54, II-57, II-61, II-62, II-63, II-65, II-68, II-69, II-70, II-71, II-72, II-73, II-74, II-75, II-77, II-83, II-85, II-91, II-92, II-93, II-94, II-96, II-97, II-98, II-99, II-100, II-101, II-104, II-105, II-106, II-107, II-109, II-111, II-112, II-113, II-114, II-115, II-116, II-117.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả tốt là 80% với tỷ lệ áp dụng 5 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ (= 500 g/ha): I-7, I-15, I-23, I-25, I-31, I-38, I-47, I-64, I-65, II-1, II-9, II-11, II-13, II-14, II-25, II-26, II-33, II-37, II-59, II-64, II-79, II-82, II-86.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả tốt là 100% với tỷ lệ áp dụng $1 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ ($= 100 \text{ g/ha}$): I-2, I-7, I-19, I-21, I-24, I-25, I-27, I-28, I-36, I-37, I-38, I-47, I-61, II-4, II-5, II-8, II-12, II-13, II-16, II-18, II-19, II-26, II-27, II-28, II-29, II-30, II-31, II-32, II-34, II-38, II-39, II-41, II-43, II-44, II-46, II-47, II-48, II-50, II-51, II-52, II-54, II-57, II-61, II-62, II-63, II-65, II-69, II-70, II-72, II-73, II-74, II-75, II-83, II-85, II-86, II-91, II-92, II-93, II-94, II-95, II-96, II-97, II-98, II-99, II-100, II-101, II-104, II-105, II-106, II-107, II-109, II-111, II-112, II-114, II-116, II-117.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả tốt là 80% với tỷ lệ áp dụng $1 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ ($= 100 \text{ g/ha}$): I-1, I-26, I-30, I-32, II-10, II-13, II-14, II-17, II-24, II-33, II-40, II-53, II-59, II-79, II-82, II-108, II-113.

Diabrotica balteata – thử nghiệm phun

Dung môi: 78,0 phần khối lượng axeton

1,5 phần theo khối lượng của dimethylformamit

Chất nhũ hóa: alkylarylpolyglycol etc

Để tạo ra chế phẩm chứa hoạt chất thích hợp, 1 phần khối lượng hoạt chất được trộn với lượng dung môi xác định, và chất cô đặc được pha loãng bằng nước chứa chất nhũ hóa nồng độ 1000ppm cho tới khi đạt được nồng độ mong muốn. Các nồng độ thử nghiệm khác được điều chế bằng cách pha loãng với nước chứa chất nhũ hóa.

Hạt giống lúa mì đã ngâm nước (*Triticum aestivum*) được đặt trong một đĩa nhiều lỗ được nạp đầy thạch và một ít nước và được ủ trong 1 ngày để nảy mầm (mỗi lỗ 5 hạt). Hạt lúa mì nảy mầm được phun dung dịch thử nghiệm chứa nồng độ hoạt chất mong muốn. Sau đó, mỗi đơn vị bị nhiễm 10-20 ấu trùng của bọ cánh cứng hại dưa chuột có sọc (*Diabrotica balteata*).

Sau 7 ngày, hiệu quả tính bằng% được xác định. 100% có nghĩa là tất cả các cây con đã mọc lên như trong mẫu đối chứng không được xử lý, không bị nhiễm bệnh; 0% có nghĩa là không có cây con nào mọc lên.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế có hoạt tính tốt là 100% với tỷ lệ áp dụng 500 g/ha ($= 160 \mu\text{g}/\text{lỗ}$): I-1, I-2, I-3, I-4, I-5, I-6, I-7, I-8, I-9, I-10, I-11, I-12, I-13, I-14, I-15, I-16, I-17, I-18, II-1, II-2, II-3, II-4, II-5, II-7, II-8, II-9, II-

10, II-11, II-12, II-13, II-14, II-15, II-16, II-17, II-18, II-19, II-21, II-22, II-23, II-27, II-28, II-29, II-30, II-31, II-32, II-33, II-34, II-37, II-38, II-39, II-40, II-41, II-42, II-43, II-44, II-46, II-66, II-67, II-68, II-70, II-71, II-72, II-73, II-74.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế có hoạt tính tốt là 80% với tỷ lệ áp dụng 500 g/ha (= 160 µg/lỗ): II-24, II-25.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế có hoạt tính tốt là 100% với tỷ lệ áp dụng 100 g/ha (= 32 µg/lỗ): I-1, I-2, I-3, I-4, I-5, I-6, I-7, I-8, I-9, I-10, I-11, I-12, I-13, I-14, I-15, I-17, I-19, I-22, I-24, I-25, I-26, I-28, I-30, I-31, I-32, I-33, I-34, I-35, I-36, I-37, I-38, I-39, I-40, I-42, I-43, I-44, I-45, I-46, I-48, I-49, I-52, I-53, I-55, I-56, I-57, I-60, I-61, I-62, I-63, I-64, I-65, II-2, II-5, II-7, II-8, II-9, II-10, II-11, II-12, II-13, II-14, II-15, II-16, II-17, II-18, II-19, II-21, II-23, II-28, II-29, II-30, II-31, II-32, II-33, II-34, II-37, II-38, II-39, II-40, II-41, II-42, II-43, II-44, II-46, II-47, II-48, II-49, II-50, II-52, II-53, II-54, II-61, II-62, II-63, II-64, II-66, II-68, II-70, II-71, II-72, II-73, II-74, II-75, II-77, II-79, II-83, II-85, II-86, II-87, II-88, II-89, II-91, II-93, II-94, II-96, II-97, II-99, II-101, II-105, II-106, II-107, II-108, II-109, II-111, II-112, II-113, II-114, II-115, II-116, II-117.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế có hoạt tính tốt là 80% với tỷ lệ áp dụng 100 g/ha (= 32 µg/lỗ): I-21, I-47, II-4, II-65, II-69, II-81, II-82.

Thử nghiệm với *Meloidogyne incognita*

Dung môi: 125,0 phần khối lượng axeton

Để tạo ra chế phẩm thích hợp chứa hoạt chất, 1 phần khối lượng hoạt chất được trộn với một lượng được nêu của dung môi, và chế phẩm đặc được pha loãng bằng nước đến nồng độ mong muốn.

Các bình được đổ đầy cát, dung dịch chứa hoạt chất, huyền phù chứa trứng và ấu trùng giun tròn đôt rễ miền nam (*Meloidogyne incognita*) và hạt salad. Các hạt salad nảy mầm và cây giống con phát triển. Các nốt sần phát triển ở rễ.

Sau 14 ngày, hoạt tính diệt giun tròn được xác định trên cơ sở phân trăm hình thành nốt sần. 100% nghĩa là không phát hiện thấy nốt sần và 0% nghĩa là số nốt sần phát hiện được

trên rễ của thực vật được xử lý bằng với số nốt sần phát hiện được trên rễ của thực vật đối chứng không được xử lý.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hoạt tính tốt ở mức 100% với tỷ lệ áp dụng 20ppm: I-14, II-24.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hoạt tính tốt ở mức 100% với tỷ lệ áp dụng 20ppm: I-12, I-13, I-19, I-23, II-3, II-25.

Myzus persicae – thử nghiệm uống

Dung môi: 100 phần khối lượng axeton

Để tạo ra chế phẩm thích hợp chứa hoạt chất, 1 phần khối lượng hoạt chất được trộn với một lượng được nêu của dung môi, và chế phẩm đặc được pha loãng bằng nước đến nồng độ mong muốn.

50 µl dung dịch hợp chất được nạp đầy trong các đĩa vi chuẩn độ và 150 µl môi trường côn trùng IPL41 (33% + 15% đường) được thêm vào để thu được tổng thể tích 200 µl mỗi lỗ. Sau đó, các đĩa này được gắn kín bằng parafilm, qua đó một quần thể hỗn hợp của rệp đào xanh (*Myzus persicae*) có thể hút chế phẩm hợp chất.

Sau 5 ngày, tỷ lệ chết theo % được xác định. 100% có nghĩa là toàn bộ số rệp bị tiêu diệt; 0% có nghĩa là không có con rệp nào bị tiêu diệt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hoạt tính tốt ở mức 100% với tỷ lệ áp dụng 4ppm: I-1, I-7, I-9, I-10, I-11, I-15, I-31, I-32, I-50, I-61, I-63, I-64, I-65, II-5, II-7, II-11, II-12, II-14, II-18, II-19, II-25, II-27, II-30, II-31, II-32, II-33, II-37, II-38, II-41, II-44, II-47, II-50, II-52, II-53, II-54, II-61, II-62, II-63, II-65, II-69, II-72, II-73, II-74, II-75, II-77, II-81, II-83, II-85, II-86, II-87, II-88, II-89, II-90, II-91, II-92, II-93, II-94, II-96, II-97, II-98, II-99, II-100, II-101, II-104, II-105, II-106, II-107, II-109, II-111, II-113, II-114, II-115, II-116, II-117.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hoạt tính tốt ở mức 90% với tỷ lệ áp dụng 4ppm: I-3, I-28, I-30, I-48, II-13, II-28, II-71, II-95.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hoạt tính tốt ở mức 100% với tỷ lệ áp dụng 0,8ppm: I-64, II-19, II-32, II-37, II-47, II-50, II-52, II-53, II-54, II-79, II-80, II-81, II-86, II-89, II-91, II-99, II-100, II-101, II-113, II-114, II-115, II-116, II-117.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hoạt tính tốt ở mức 90% với tỷ lệ áp dụng 0,8ppm: I-44, II-77, II-109, II-111.

Myzus persicae – thử nghiệm phun

Dung môi: 78,0 phần khối lượng axeton
1,5 phần khối lượng dimethylformamit
Chất nhũ hóa: alkylaryl polyglycol etc

Để tạo ra chế phẩm chứa hoạt chất thích hợp, 1 phần khối lượng hoạt chất được trộn với lượng dung môi xác định và được pha loãng bằng nước chứa chất nhũ hóa nồng độ 1000ppm cho tới khi đạt được nồng độ mong muốn. Các nồng độ thử nghiệm khác được điều chế bằng cách pha loãng với nước chứa chất nhũ hóa.

Các đĩa lá cải bắp Trung quốc (*Brassica pekinensis*) đã được cho nhiễm rệp đào xanh (*Myzus persicae*) ở tất cả các vòng đời, được phun chế phẩm chứa hoạt chất có nồng độ mong muốn.

Sau 5 ngày, tỷ lệ chết theo% được xác định. 100% có nghĩa là toàn bộ số rệp bị tiêu diệt; 0% có nghĩa là không có con rệp nào bị tiêu diệt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hoạt tính tốt ở mức 100% với tỷ lệ áp dụng 500 g/ha: I-2, II-7, II-26, II-31, II-37, II-38, II-39, II-40, II-73.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hoạt tính tốt ở mức 90% với tỷ lệ áp dụng 500 g/ha: I-3, II-2, II-5, II-8, II-12, II-27, II-32, II-36, II-71, I-74.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hoạt tính tốt ở mức 100% với tỷ lệ áp dụng 100 g/ha: I-2, II-2, II-31, II-32, II-38, II-47, II-50, II-53, II-62, II-63, II-73, II-79, II-91, II-97, II-100, II-104, II-117.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hoạt tính tốt ở mức 90% với tỷ lệ áp dụng 100 g/ha: I-3, I-37, I-64, I-65, II-12, II-16, II-32, II-47, II-52, II-54, II-57, II-61, II-65, II-71, II-77, II-80, II-81, II-83, II-92, II-93, II-94, II-96, II-98, II-99, II-101, II-105, II-106, II-109, II-113, II-114, II-115, II-116.

Nezara viridula – thử nghiệm phun

Dung môi: 78,0 phần khối lượng axeton

1,5 phần theo khối lượng của dimethylformamit

Chất nhũ hóa: alkylaryl polyglycol etc

Để tạo ra chế phẩm chứa hoạt chất thích hợp, 1 phần khối lượng hoạt chất được trộn với lượng dung môi xác định, và chất cô đặc được pha loãng bằng nước chứa chất nhũ hóa nồng độ 1000ppm cho tới khi đạt được nồng độ mong muốn. Các nồng độ thử nghiệm khác được điều chế bằng cách pha loãng với nước chứa chất nhũ hóa.

Cây lúa mạch (*Hordeum vulgare*) bị nhiễm ấu trùng của bọ xít xanh phương Nam (*Nezara viridula*) được phun dung dịch thử nghiệm chứa nồng độ hoạt chất mong muốn.

Sau 4 ngày, tỷ lệ chết theo % được xác định. 100% có nghĩa là tất cả bọ xít đã bị chết; 0% có nghĩa là không bọ xít nào bị chết.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế cho thấy hoạt tính tốt là 100% ở tỷ lệ áp dụng là 500 g/ha: I-6, I-7, I-64, I-65, II-5, II-8, II-9, II-11, II-12, II-14, II-16, II-27, II-30, II-32, II-37, II-38, II-40, II-44, II-46, II-47, II-71, II-72, II-73, II-74.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hoạt tính tốt ở mức 90% với tỷ lệ áp dụng 500 g/ha: I-2, I-4, I-11, II-2, II-7, II-13, II-15, II-21, II-28, II-31, II-36, II-39, II-70.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế cho thấy hoạt tính tốt là 100% ở tỷ lệ áp dụng là 100 g/ha: I-37, I-38, I-42, I-46, I-47, II-8, II-11, II-12, II-14, II-30, II-32, II-38, II-40, II-47, II-57, II-61, II-62, II-63, II-65, II-73, II-77, II-79, II-81, II-91, II-93, I-027, II-94, II-95, II-97, II-99, II-100, II-101, II-105, II-109, II-111, II-113, II-114, II-115, II-116, II-117.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hoạt tính tốt ở mức 90% với tỷ lệ áp dụng 100 g/ha: I-28, I-64, II-5, II-16, II-32, II-37, II-41, II-53, II-92.

Nilaparvata lugens – thử nghiệm phun

Dung môi: 78,0 phần khối lượng axeton
1,5 phần theo khối lượng của dimethylformamit

Chất nhũ hóa: alkylaryl polyglycol ete

Để tạo ra chế phẩm chứa hoạt chất thích hợp, 1 phần khối lượng hoạt chất được trộn với lượng dung môi xác định và được pha loãng bằng nước chứa chất nhũ hóa nồng độ 1000ppm cho tới khi đạt được nồng độ mong muốn. Các nồng độ thử nghiệm khác được điều chế bằng cách pha loãng với nước chứa chất nhũ hóa.

Cây lúa (*Oryza sativa*) được phun chế phẩm hoạt chất với nồng độ mong muốn và thực vật bị nhiễm rầy nâu (*Nilaparvata lugens*).

Sau 4 ngày, tỷ lệ chết theo % được xác định. 100% có nghĩa là toàn bộ rầy nâu đã bị tiêu diệt; 0% có nghĩa là không có con rầy nâu nào bị tiêu diệt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hoạt tính tốt ở mức 100% với tỷ lệ áp dụng 500 g/ha: II-8, II-73.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hoạt tính tốt ở mức 90% với tỷ lệ áp dụng 500 g/ha: II-43, II-44, II-74.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hoạt tính tốt ở mức 90% với tỷ lệ áp dụng 100 g/ha: I-26, I-43, II-95, II-96, II-99, II-104.

Spodoptera frugiperda – Thử nghiệm phun

Dung môi: 78,0 phần khối lượng axeton
1,5 phần khối lượng dimethylformamit

Chất nhũ hóa: alkylaryl polyglycol ete

Để tạo ra chế phẩm chứa hoạt chất thích hợp, 1 phần khối lượng hoạt chất được trộn với lượng dung môi xác định và được pha loãng bằng nước chứa chất nhũ hóa nồng độ

1000ppm cho tới khi đạt được nồng độ mong muốn. Các nồng độ thử nghiệm khác được điều chế bằng cách pha loãng với nước chứa chất nhũ hóa.

Các đoạn lá ngô (*Zea mays*) được phun chế phẩm chứa hoạt chất có nồng độ mong muốn. Ngay sau khi khô, các đĩa lá này được làm nhiễm ấu trùng sâu xanh (*Spodoptera frugiperda*).

Sau 7 ngày, tỷ lệ chết theo % được xác định. 100% có nghĩa là, toàn bộ số sâu bướm bị tiêu diệt; 0% có nghĩa là, không có con sâu bướm nào bị tiêu diệt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hoạt tính tốt ở mức 100% với tỷ lệ áp dụng 500 g/ha: I-1, I-2, I-3, I-4, I-5, I-6, I-8, I-10, I-11, I-12, I-13, I-14, I-15, I-16, I-17, II-1, II-3, II-4, II-5, II-7, II-8, II-9, II-10, II-11, II-12, II-13, II-14, II-15, II-17, II-18, II-19, II-20, II-21, II-23, II-24, II-25, II-26, II-28, II-29, II-30, II-31, II-32, II-33, II-34, II-36, II-37, II-38, II-39, II-40, II-42, II-43, II-44, II-46, II-66, II-67, II-69, II-70, II-71, II-72, II-73, II-74.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hoạt tính tốt ở mức 83% với tỷ lệ áp dụng 500 g/ha: I-7, I-18, II-22, II-27, II-68.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế cho thấy hoạt tính tốt là 100% ở tỷ lệ áp dụng là 100 g/ha: I-1, I-2, I-3, I-4, I-5, I-6, I-7, I-8, I-9, I-10, I-11, I-12, I-13, I-15, I-17, I-19, I-21, I-24, I-25, I-26, I-28, I-30, I-32, I-34, I-36, I-37, I-39, I-40, I-41, I-42, I-43, I-44, I-45, I-46, I-47, I-48, I-49, I-51, I-52, I-53, I-54, I-55, I-56, I-57, I-59, I-61, I-63, I-64, I-65, II-1, II-4, II-5, II-10, II-11, II-12, II-13, II-14, II-16, II-18, II-19, II-23, II-25, II-30, II-31, II-32, II-33, II-34, II-36, II-37, II-38, II-39, II-40, II-41, II-42, II-43, II-44, II-46, II-47, II-50, II-52, II-53, II-54, II-57, II-61, II-62, II-64, II-65, II-70, II-72, II-73, II-74, II-75, II-77, II-79, II-81, II-82, II-83, II-86, II-87, II-88, II-91, II-92, II-93, II-96, II-97, II-100, II-101, II-104, II-105, II-106, II-107, II-108, II-111, II-112, II-113, II-115, II-116, II-117.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hoạt tính tốt ở mức 83% với tỷ lệ áp dụng 100 g/ha: I-14, I-38, I-58, I-60, II-9, II-26, II-27, II-29, II-69, II-85, II-90, II-98, II-114.

Tetranychus urticae – thử nghiệm phun, kháng OP

Dung môi: 78,0 phần khối lượng axeton
 1,5 phần khối lượng dimethylformamit
 Chất nhũ hóa: alkylaryl polyglycol etc

Để tạo ra chế phẩm chứa hoạt chất thích hợp, 1 phần khối lượng hoạt chất được trộn với lượng dung môi xác định và được pha loãng bằng nước chứa chất nhũ hóa nồng độ 1000ppm cho tới khi đạt được nồng độ mong muốn. Các nồng độ thử nghiệm khác được điều chế bằng cách pha loãng với nước chứa chất nhũ hóa.

Các đĩa lá đậu tây (*Phaseolus vulgaris*) bị nhiễm toàn bộ các ấu trùng của nhện hai chấm (*Tetranychus urticae*), được phun chế phẩm chứa hoạt chất có nồng độ mong muốn.

Sau 6 ngày, tỷ lệ chết theo % được xác định. 100% có nghĩa là, toàn bộ số nhện bị chết; 0% có nghĩa là, không có con nhện nào bị chết.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hoạt tính tốt ở mức 90% với tỷ lệ áp dụng 500 g/ha: II-80.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau từ các ví dụ điều chế thể hiện hoạt tính tốt ở mức 90% với tỷ lệ áp dụng 100 g/ha: II-12, II-38, II-99.

Thử nghiệm Aedes aegypti (thử nghiệm tiếp xúc & xử lý bề mặt AEDSAE)

Dung môi: axeton + 2000ppm methyl este dầu cải dầu (RME)

Để tạo ra dung dịch chứa hoạt chất đủ, cần phải hòa tan hợp chất thử trong hỗn hợp dung môi (axeton ở mức 2 mg/ml / RME 2000ppm). Dung dịch này được hút bằng pipet lên gạch men và sau khi làm bay hơi axeton, các muỗi trưởng thành thuộc loài *Aedes aegypti* chủng MONHEIM được đặt lên bề mặt đã làm khô. Thời gian tiếp xúc là 30 phút. Tỷ lệ chết tính bằng phần trăm (%) được xác định 24 giờ sau khi côn trùng tiếp xúc với bề mặt được xử lý. Tỷ lệ chết 100% có nghĩa là tất cả côn trùng thử nghiệm đều chết, trong khi 0% có nghĩa là không có một con côn trùng nào bị chết.

Các ví dụ sau đây thể hiện hiệu quả của thử nghiệm này đạt 80-100% ở nồng độ bề mặt 20 mg/m²: I-1, I-3, I-8, I-9, I-19, I-26, I-27, I-30, I-35, I-37, I-42, I-44, II-1, II-3, II-4, II-

5, II-7, II-8, II-11, II-12, II-13, II-14, II-16, II-17, II-19, II-22, II-23, II-25, II-26, II-27, II-28, II-29, II-30, II-31, II-32, II-33, II-34, II-36, II-37, II-38, II-39, II-40, II-41, II-43, II-46, II-47, II-48, II-50, II-52, II-53, II-54, II-57, II-61, II-62, II-63, II-64, II-65, II-77, II-79, II-80, II-81, II-82, II-83, II-96, II-97, II-99, II-101, II-111, II-116, II-117.

Các ví dụ sau đây thể hiện hiệu quả của thử nghiệm này đạt 80-100% ở nồng độ bề mặt 4 mg/m²: I-1, I-3, I-9, I-15, I-30, I-42, I-44, I-47, II-1, II-3, II-5, II-8, II-11, II-12, II-13, II-14, II-17, II-19, II-22, II-25, II-27, II-29, II-30, II-32, II-33, II-34, II-36, II-37, II-38, II-40, II-41, II-43, II-46, II-47, II-48, II-49, II-50, II-52, II-53, II-54, II-57, II-61, II-62, II-63, II-65, II-77, II-79, II-80, II-81, II-82, II-83, II-96, II-101, II-111, II-116, II-117.

Thử nghiệm *Culex quinquefasciatus* (thử nghiệm tiếp xúc & xử lý bề mặt CULXFA)

Dung môi: axeton + 2000ppm methyl este dầu cải dầu (RME)

Để tạo ra dung dịch chứa hoạt chất đủ, cần phải hòa tan hợp chất thử trong hỗn hợp dung môi (axeton ở mức 2 mg/ml / RME 2000ppm). Dung dịch này được hút bằng pipet lên gạch men và sau khi làm bay hơi axeton, các muỗi trưởng thành thuộc loài *Culex quinquefasciatus* chủng P00 được đặt lên bề mặt đã làm khô. Thời gian tiếp xúc là 30 phút. Tỷ lệ chết tính bằng phần trăm (%) được xác định 24 giờ sau khi côn trùng tiếp xúc với bề mặt được xử lý. Tỷ lệ chết 100% có nghĩa là tất cả côn trùng thử nghiệm đều chết, trong khi 0% có nghĩa là không có một con côn trùng nào bị chết.

Các ví dụ sau đây thể hiện hiệu quả của thử nghiệm này đạt 80-100% ở nồng độ bề mặt 20 mg/m²: II-1, II-2, II-3, II-4, II-5, II-7, II-8, II-9, II-11, II-12, II-13, II-16, II-17, II-18, II-19, II-22, II-27, II-28, II-30, II-31, II-36, II-37, II-38, II-40, II-41, II-42, II-57, II-62, II-63.

Các ví dụ sau đây thể hiện hiệu quả của thử nghiệm này đạt 80-100% ở nồng độ bề mặt 4 mg/m²: II-8, II-11, II-12, II-22, II-28, II-30, II-36, II-40, II-41, II-43, II-50, II-52, II-57.

Thử nghiệm *Anopheles funestus* (thử nghiệm tiếp xúc & xử lý bề mặt ANPHFU)

Dung môi: axeton + 2000ppm methyl este dầu cải dầu (RME)

Để tạo ra dung dịch chứa hoạt chất đủ, cần phải hòa tan hợp chất thử trong hỗn hợp dung môi (axeton ở mức 2 mg/ml / RME 2000ppm). Dung dịch này được hút bằng pipet lên gạch men và sau khi làm bay hơi axeton, muỗi trưởng thành thuộc loài *Anopheles funestus* chủng FUMOS-R (Hunt et al., Med. Vet. Entomol. 2005 Sep; 19(3): 271-275) được đặt lên bề mặt đã làm khô. Thời gian tiếp xúc là 30 phút. Tỷ lệ chết tính bằng phần trăm (%) được xác định 24 giờ sau khi côn trùng tiếp xúc với bề mặt được xử lý. Tỷ lệ chết 100% có nghĩa là tất cả côn trùng thử nghiệm đều chết, trong khi 0% có nghĩa là không có một con côn trùng nào bị chết.

Các ví dụ sau đây thể hiện hiệu quả của thử nghiệm này đạt 80-100% ở nồng độ bề mặt 20 mg/m²: II-3, II-4, II-5, II-8, II-9, II-10, II-12, II-16, II-17, II-22, II-23, II-26, II-27, II-31, II-36, II-38, II-40, II-42, II-43, II-47, II-48, II-52, II-77, II-79, II-80, II-81, II-83, II-101, II-116.

Các ví dụ sau đây thể hiện hiệu quả của thử nghiệm này đạt 80-100% ở nồng độ bề mặt 4 mg/m²: II-3, II-4, II-5, II-8, II-9, II-10, II-12, II-14, II-17, II-22, II-31, II-36, II-48, II-50, II-52, II-77, II-79, II-81, II-83, II-101.

Thử nghiệm *Musca domestica* (thử nghiệm tiếp xúc & xử lý bề mặt MUSCDO)

Dung môi: axeton + 2000ppm metyl este dầu cải dầu (RME)

Để tạo ra dung dịch chứa hoạt chất đủ, cần phải hòa tan hợp chất thử trong hỗn hợp dung môi (axeton ở mức 2 mg/ml / RME 2000ppm). Dung dịch này được hút bằng pipet lên gạch men và sau khi làm bay hơi axeton, các con ruồi trưởng thành thuộc loài *Musca domestica* chủng WHO-N được đặt lên bề mặt đã làm khô. Thời gian tiếp xúc là 30 phút. Tỷ lệ chết tính bằng phần trăm (%) được xác định 24 giờ sau khi côn trùng tiếp xúc với bề mặt được xử lý. Tỷ lệ chết 100% có nghĩa là tất cả côn trùng thử nghiệm đều chết, trong khi 0% có nghĩa là không có một con côn trùng nào bị chết.

Các ví dụ sau đây thể hiện hiệu quả của thử nghiệm này đạt 80-100% ở nồng độ bề mặt 20 mg/m²: I-1, I-3, I-4, I-6, I-9, I-10, I-11, I-28, I-30, I-31, I-34, I-35, I-37, I-38, I-42, I-44, I-46, I-47, II-4, II-5, II-7, II-8, II-9, II-11, II-12, II-13, II-14, II-15, II-16, II-17, II-18, II-19, II-21, II-22, II-23, II-25, II-28, II-30, II-31, II-32, II-33, II-36, II-39, II-40, II-41,

II-43, II-46, II-47, II-50, II-52, II-53, II-54, II-57, II-61, II-62, II-63, II-65, II-77, II-81, II-83, II-96, II-97, II-99, II-101, II-111, II-116, II-117.

Các ví dụ sau đây thể hiện hiệu quả của thử nghiệm này đạt 80-100% ở nồng độ bề mặt 4 mg/m²: I-2, I-3, I-33, I-37, I-44, I-47, II-5, II-8, II-11, II-12, II-13, II-14, II-17, II-18, II-21, II-22, II-30, II-32, II-33, II-39, II-41, II-46, II-47, II-50, II-52, II-53, II-54, II-57, II-61, II-62, II-65, II-77, II-83, II-96, II-97, II-99, II-101, II-111, II-116, II-117.

Thử nghiệm *Blattella germanica* (thử nghiệm tiếp xúc & xử lý bề mặt BLTTGE)

Dung môi: axeton + 2000ppm metyl este dầu cải dầu (RME)

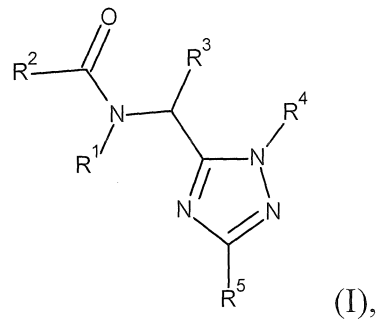
Để tạo ra dung dịch chứa hoạt chất đủ, cần phải hòa tan hợp chất thử trong hỗn hợp dung môi (axeton ở mức 2 mg/ml / RME 2000ppm). Dung dịch này được hút bằng pipet lên gạch men và sau khi làm bay hơi axeton, các con vật trưởng thành thuộc loài *Blattella germanica* chủng PAULINIA được đặt lên bề mặt đã làm khô. Thời gian tiếp xúc là 30 phút. Tỷ lệ chết tính bằng phần trăm (%) được xác định 24 giờ sau khi côn trùng tiếp xúc với bề mặt được xử lý. Tỷ lệ chết 100% có nghĩa là tất cả côn trùng thử nghiệm đều chết, trong khi 0% có nghĩa là không có một con côn trùng nào bị chết.

Các ví dụ sau đây thể hiện hiệu quả của thử nghiệm này đạt 80-100% ở nồng độ bề mặt 20 mg/m²: II-77, II-80, II-83, II-101, II-111, II-116.

Các ví dụ sau đây thể hiện hiệu quả của thử nghiệm này đạt 80-100% ở nồng độ bề mặt 4mg/m²: II-111, II-116.

YÊU CẦU BẢO HỘ

1. Hợp chất có công thức (I)



trong đó

R^1 là hydro;

R^2 là phenyl hoặc pyridin, trong đó phenyl hoặc pyridin tùy ý được thế bằng một đến hai phần tử thế, với điều kiện (các) phần tử thế không ở trên mỗi cacbon liền kề với cacbon được liên kết với nhóm C=O, mỗi nhóm độc lập được chọn từ nhóm bao gồm flo, clo, brom, -CN, -NO₂, -SF₅, metyl, diflometyl, triflometyl, pentafloretyl, metoxy, diflometoxy, triflometoxy, diflometylthio, triflometylthio, difloretylthio, và trifloretylthio;

R^3 là C₁-C₃-alkyl;

R^4 là pyridin, pyrimidin hoặc pyrazin, trong đó pyridin, pyrimidin hoặc pyrazin được thế bằng CN.

R^5 là etyl, iso-propyl, tert-butyl, diflometyl, xyclopropyl, metoxy, etoxy, iso-propoxy, hoặc halogen.

2. Hợp chất theo điểm 1, trong đó

R^1 là hydro;

R^2 là 3-clo-5-(triflometyl)phenyl, 3-clo-5-(diflometyl)phenyl, 3-clo-5-(pentafloretyl)phenyl, 3-clo-5-(triflometoxy)phenyl, 3-clo-5-

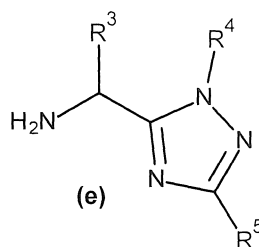
(triflometylthio)phenyl, 3-clo-5-(diflometylthio)phenyl, 3-clo-5-(diflometoxy)phenyl, 3-bromo-5-(triflometoxy)phenyl, 3-bromo-5-clophenyl, 3,5-diclophenyl, 3,5-dibromophenyl, 3,5-bis(triflometyl)phenyl, 3-xyano-5-(triflometyl)phenyl, 3,5-bis(diflometoxy)phenyl, 5-bromopyridin-3-yl, 3-bromo-5-(triflometyl)phenyl, 3-flo-5-xyanophenyl, 3-bromo-5-xyanophenyl, 3-(diflometyl)-5-(triflometoxy)phenyl, 3-(diflometoxy)-5-(diflometyl)phenyl, 6-bromopyridin-2-yl, 5-(triflometyl)pyridin-3-yl, 6-(triflometyl)pyridin-2-yl, 2-clo-6-(triflometyl)pyridin-4-yl hoặc 4-bromo-6-(triflometyl)pyridin-2-yl;

R^3 là metyl;

R^4 là 5-xyanopyridin-2-yl,

R^5 là etyl, iso-propyl, tert-butyl, diflometyl, xyclopropyl, metoxy, etoxy, iso-propoxy, clo hoặc brom.

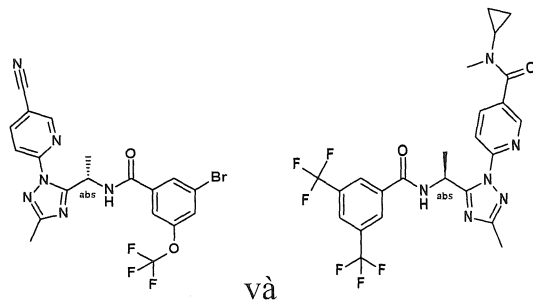
3. Hợp chất có công thức (e)



trong đó các yếu tố cấu trúc R^3 , R^4 và R^5 có nghĩa như được xác định theo điểm 1 hoặc theo điểm 2, bao gồm hợp chất được chọn từ nhóm bao gồm 6-[5-[(1S)-1-aminoethyl]-3-etyl-1,2,4-triazol-1-yl]pyridin-3-carbonitril, 6-[5-[(1S)-1-aminoethyl]-3-isopropyl-1,2,4-triazol-1-yl]pyridin-3-carbonitril, 6-[5-[(1S)-1-aminoethyl]-3-xyclopropyl-1,2,4-triazol-1-yl]pyridin-3-carbonitril, 6-[5-[(1S)-1-aminoethyl]-3-(diflometyl)-1,2,4-triazol-1-yl]pyridin-3-carbonitril, 6-[5-[(1S)-1-aminoethyl]-3-metoxyl-1,2,4-triazol-1-yl]pyridin-3-carbonitril, 6-[5-[(1S)-1-aminoethyl]-3-etoxyl-1,2,4-triazol-1-yl]pyridin-3-carbonitril, 6-[5-[(1S)-1-aminoethyl]-3-isopropoxyl-1,2,4-triazol-1-yl]pyridin-3-carbonitril, 6-

[5-[(1S)-1-aminoethyl]-3-tert-butyl-1,2,4-triazol-1-yl]pyridin-3-carbonitril, 6-[5-(1-aminoethyl)-3-clo-1,2,4-triazol-1-yl]pyridin-3-carbonitril, và 6-[5-(1-aminoethyl)-3-bromo-1,2,4-triazol-1-yl]pyridin-3-carbonitril và hydroclorua của chúng.

4. Hợp chất



5. Chế phẩm, đặc biệt là chế phẩm hóa nông, chứa ít nhất một hợp chất có công thức (I) theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 2.
6. Chế phẩm theo điểm 5, còn chứa ít nhất một chất độn và/hoặc ít nhất một chất hoạt động bề mặt.
7. Chế phẩm theo điểm 5 hoặc 6, khác biệt ở chỗ hợp chất có công thức (I) kết hợp với ít nhất một hoạt chất khác.
8. Phương pháp phòng trừ sinh vật gây hại, đặc biệt là động vật gây hại, khác biệt ở chỗ hợp chất có công thức (I) theo điểm bất kỳ trong số các điểm 1 đến 2 hoặc chế phẩm theo điểm bất kỳ trong số các điểm 5 đến 7 được cho tác động lên sinh vật gây hại và/hoặc nơi sống của chúng, trong khi các phương pháp điều trị cho cơ thể người hoặc động vật bằng cách phẫu thuật hoặc các phương pháp trị liệu và chẩn đoán được thực hiện trên cơ thể người hoặc động vật được loại trừ.
9. Phương pháp theo điểm 8, khác biệt ở chỗ sinh vật gây hại là động vật gây hại và bao gồm côn trùng, động vật thuộc lớp nhện hoặc giun tròn, hoặc khác biệt ở chỗ sinh vật gây hại là côn trùng, động vật thuộc lớp nhện hoặc giun tròn, trong khi các phương pháp điều trị cho cơ thể người hoặc động vật bằng

cách phẫu thuật hoặc các phương pháp trị liệu và chẩn đoán được thực hiện trên cơ thể người hoặc động vật được loại trừ.

10. Phương pháp bảo vệ hạt hoặc thực vật nảy mầm khỏi sinh vật gây hại, đặc biệt là động vật gây hại, bao gồm các bước trong phương pháp trong đó hạt được cho tiếp xúc với hợp chất có công thức (I) theo điểm bất kỳ trong số các điểm 1 đến 2 hoặc với chế phẩm theo điểm bất kỳ trong số các điểm 5 đến 7, trong khi các phương pháp điều trị cho cơ thể người hoặc động vật bằng cách phẫu thuật hoặc các phương pháp trị liệu và chẩn đoán được thực hiện trên cơ thể người hoặc động vật được loại trừ.