



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

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

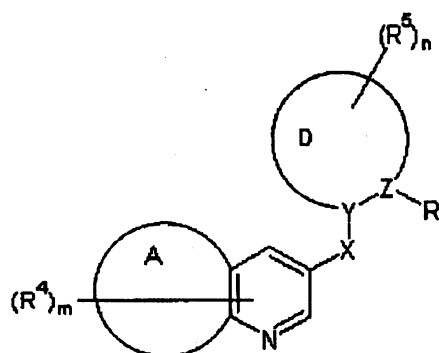
(11) 
1-0020481

(51)⁷ **C07D 215/60, A01N 43/42, 43/40, C07D 215/18, 215/20** (13) **B**

-
- | | |
|--|-------------------------------|
| (21) 1-2012-01871 | (22) 28.12.2010 |
| (86) PCT/JP2010/073683 28.12.2010 | (87) WO2011/081174 07.07.2011 |
| (30) 2010-000194 04.01.2010 JP | |
| (45) 25.02.2019 371 | (43) 25.02.2013 299 |
| (73) Nippon Soda Co., Ltd. (JP)
2-1, Ohtemachi 2-chome, Chiyoda-ku, Tokyo 100-8165 Japan | |
| (72) SHIBAYAMA Kotaro (JP), INAGAKI Jun (JP), SAIKI Yuto (JP), MITANI Akira (JP), KUWAHARA Raito (JP), SATO Motoaki (JP), NISHIMURA Satoshi (JP), KUBOKI Mami (JP) | |
| (74) Công ty TNHH Tâm nhìn và Liên danh (VISION & ASSOCIATES CO.LTD.) | |
-

(54) **HỢP CHẤT DỊ VÒNG CHỨA NITƠ VÀ THUỐC DIỆT NẤM DÙNG TRONG NÔNG NGHIỆP**

(57) Sáng chế đề cập đến thuốc diệt nấm dùng trong nông nghiệp chứa ít nhất một hợp chất được chọn từ nhóm bao gồm hợp chất dị vòng chứa nitơ mới được biểu diễn bằng công thức (I), muối của nó, hoặc hợp chất N-oxit của nó. Trong công thức (I), R là nhóm được biểu diễn bằng $CR^1R^2R^3$ hoặc nhóm xyano. Mỗi R^1 đến R^3 độc lập là nguyên tử hydro, nhóm C_{1-8} alkyl được thế hoặc không được thế, nhóm hydroxyl được thế hoặc không được thế, hoặc các nhóm tương tự. R^4 hoặc R^5 là nhóm halogeno hoặc các nhóm tương tự. Y hoặc Z là nguyên tử cacbon hoặc các nguyên tử tương tự, và A hoặc D là vòng benzen hoặc các vòng tương tự. X là nguyên tử oxy hoặc nguyên tử nitơ hoặc các vòng tương tự.



Công thức (I)

Lĩnh vực kỹ thuật được đề cập

Sáng chế đề cập đến hợp chất dị vòng chứa nitơ mới và thuốc diệt nấm dùng trong nông nghiệp chứa hoạt chất là ít nhất một hợp chất được chọn từ nhóm bao gồm hợp chất dị vòng chứa nitơ.

Tình trạng kỹ thuật của sáng chế

Trong lĩnh vực trồng trọt cây nông nghiệp, nhiều chất kiểm soát khác nhau đã được sử dụng để xử lý bệnh cây. Tuy nhiên, có rất ít chất thỏa mãn đầy đủ các yêu cầu để sử dụng làm chất kiểm soát do nhiều nguyên nhân khác nhau như tác dụng kiểm soát không đủ, sử dụng hạn chế do sự xuất hiện mầm bệnh kháng chất này, tác động gây độc thực vật hoặc nhiễm tạp đối với cây, hoặc độc tính đối với người, vật nuôi, và cá, và tác động bất lợi đến môi trường. Do đó, có nhu cầu đối với các chất có ít nhược điểm hơn thuộc loại này và an toàn khi sử dụng.

Liên quan đến sáng chế, tài liệu patent 1 hoặc 2 sau đã bộc lộ dẫn xuất quinolin có cấu trúc hóa học tương tự với các hợp chất theo sáng chế, và thuốc diệt nấm dùng trong nông nghiệp chứa dẫn xuất quinolin này làm hoạt chất.

Tài liệu kỹ thuật có liên quan

Tài liệu sáng chế

[Tài liệu patent 1] Công bố đơn quốc tế số WO2005/070917

[Tài liệu patent 2] Công bố đơn quốc tế số WO2007/011022

Bản chất kỹ thuật của sáng chế

Vấn đề cần được giải quyết bởi sáng chế

Mục đích của sáng chế là đề xuất hợp chất dị vòng chứa nitơ mới, và muối của nó hoặc hợp chất N-oxit của nó, và thuốc diệt nấm dùng trong nông

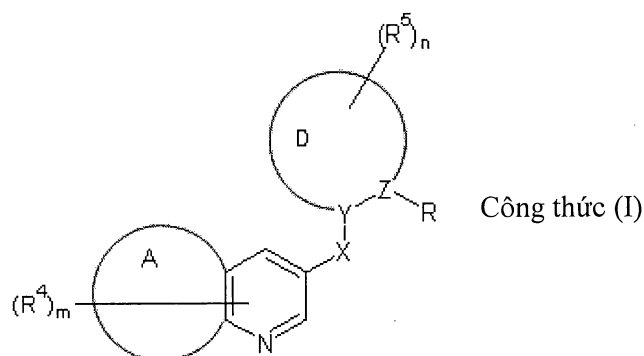
nghiệp, có tác dụng đáng tin cậy, an toàn khi sử dụng và chứa hoạt chất là ít nhất một hợp chất được chọn từ nhóm bao gồm hợp chất dị vòng chứa nitơ này, muối và hợp chất N-oxit của nó.

Cách thức giải quyết vấn đề

Các tác giả sáng chế đã nghiên cứu kỹ lưỡng để giải quyết các vấn đề nêu trên. Kết quả là, các tác giả sáng chế đã thu được hợp chất dị vòng chứa nitơ được biểu diễn bằng công thức (I), muối của nó hoặc hợp chất N-oxit của nó. Cũng đã phát hiện ra rằng hợp chất dị vòng chứa nitơ, muối của nó hoặc hợp chất N-oxit của nó là hữu ích dùng làm hoạt chất của thuốc diệt nấm dùng trong nông nghiệp, có tác dụng đáng tin cậy và an toàn khi sử dụng. Sáng chế được hoàn thành với các nghiên cứu khác nữa dựa trên các phát hiện này.

Cụ thể, sáng chế bao gồm các khía cạnh sau.

<1> Hợp chất dị vòng chứa nitơ được biểu diễn bằng công thức (I), muối của nó, hoặc hợp chất N-oxit của nó.



Trong công thức (I), R là nhóm được biểu diễn bằng $CR^1R^2R^3$, nhóm C_{6-10} aryl được thế hoặc không được thế, hoặc nhóm xiano;

Mỗi R^1 đến R^3 độc lập là nguyên tử hydro, nhóm C_{1-8} alkyl được thế hoặc không được thế, nhóm C_{2-8} alkenyl được thế hoặc không được thế, nhóm C_{2-8} alkynyl được thế hoặc không được thế, nhóm C_{3-8} xycloalkyl được thế hoặc không được thế, nhóm C_{4-8} xycloalkenyl được thế hoặc không được thế, nhóm C_{6-10} aryl được thế hoặc không được thế, nhóm dị vòng được thế hoặc

không được thế, nhóm C_{1-8} axyl được thế hoặc không được thế, nhóm (1-imino) C_{1-8} alkyl được thế hoặc không được thế, nhóm carboxyl được thế hoặc không được thế, nhóm carbamoyl được thế hoặc không được thế, nhóm hydroxyl được thế hoặc không được thế, nhóm amino được thế hoặc không được thế, nhóm mercapto được thế hoặc không được thế, nhóm sulfonyl được thế, nhóm halogeno, nhóm xyano, hoặc nhóm nitro;

ngoại trừ trong đó: R^1 đến R^3 tất cả đều là nguyên tử hydro; R^1 đến R^3 tất cả đều là nhóm C_{1-8} alkyl không được thế; bất kỳ một trong số R^1 đến R^3 là nguyên tử hydro và cả hai gốc còn lại đều là nhóm C_{1-8} alkyl không được thế; và, bất kỳ một trong số R^1 đến R^3 là nhóm C_{1-8} alkyl không được thế và cả hai gốc còn lại đều là nguyên tử hydro;

R^1 và R^2 có thể được nối để tạo thành vòng có 5 đến 8 cạnh được thế hoặc không được thế, hoặc để tạo thành $O=$, $R^a R^b C=$, hoặc $R'-N=$;

R^a là nguyên tử hydro hoặc nhóm C_{1-8} alkyl được thế hoặc không được thế;

R^b là nguyên tử hydro hoặc nhóm C_{1-8} alkyl được thế hoặc không được thế;

R' là nhóm hydroxyl được thế hoặc không được thế, hoặc nhóm C_{1-8} alkyl được thế hoặc không được thế;

Mỗi R^4 độc lập là nhóm C_{1-8} alkyl được thế hoặc không được thế, nhóm C_{2-8} alkenyl được thế hoặc không được thế, nhóm C_{2-8} alkynyl được thế hoặc không được thế, nhóm C_{3-8} xycloalkyl được thế hoặc không được thế, nhóm C_{4-8} xycloalkenyl được thế hoặc không được thế, nhóm C_{6-10} aryl được thế hoặc không được thế, nhóm dị vòng được thế hoặc không được thế, nhóm C_{1-8} axyl được thế hoặc không được thế, nhóm (1-imino) C_{1-8} alkyl được thế hoặc không được thế, nhóm carboxyl được thế hoặc không được thế, nhóm carbamoyl được thế hoặc không được thế, nhóm hydroxyl được thế hoặc không được thế, nhóm amino được thế hoặc không được thế, nhóm mercapto được thế hoặc không được thế, nhóm sulfonyl được thế, nhóm halogeno, nhóm xyano, hoặc nhóm

nitro;

m biểu thị số lượng R^4 và là số nguyên nằm trong khoảng từ 0 đến 6;

mỗi R^5 độc lập là nhóm C_{1-8} alkyl được thế hoặc không được thế, nhóm C_{2-8} alkenyl được thế hoặc không được thế, nhóm C_{2-8} alkynyl được thế hoặc không được thế, nhóm C_{3-8} xycloalkyl được thế hoặc không được thế, nhóm C_{4-8} xycloalkenyl được thế hoặc không được thế, nhóm C_{6-10} aryl được thế hoặc không được thế, nhóm dị vòng được thế hoặc không được thế, nhóm C_{1-8} axyl được thế hoặc không được thế, nhóm (1-imino) C_{1-8} alkyl được thế hoặc không được thế, nhóm carboxyl được thế hoặc không được thế, nhóm carbamoyl được thế hoặc không được thế, nhóm hydroxyl được thế hoặc không được thế, nhóm amino được thế hoặc không được thế, nhóm mercapto được thế hoặc không được thế, nhóm sulfonyl được thế, nhóm halogeno, nhóm xyno, hoặc nhóm nitro;

n biểu thị số lượng R^5 và là số nguyên nằm trong khoảng từ 0 đến 5;

bất kỳ một trong số R^1 đến R^3 và bất kỳ một trong số R^5 có thể được nối để tạo thành vòng có từ 5 đến 8 cạnh được thế hoặc không được thế;

A là: vòng hydrocacbon có từ 5 đến 7 cạnh hoặc vòng dị vòng có từ 5 đến 7 cạnh khi R là nhóm được biểu diễn bằng $CR^1R^2R^3$; hoặc vòng benzen khi R là nhóm C_{6-10} aryl được thế hoặc không được thế hoặc nhóm xyano;

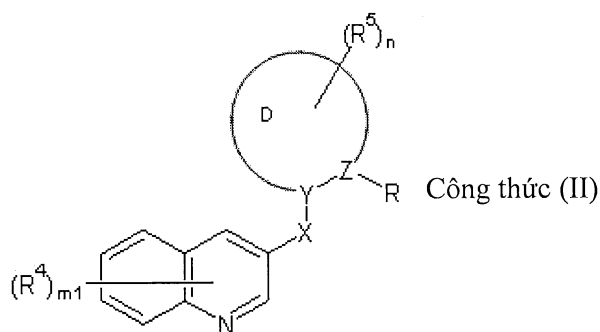
D là vòng hydrocacbon có từ 5 đến 7 cạnh hoặc vòng dị vòng có từ 5 đến 7 cạnh;

X là nguyên tử oxy, nguyên tử lưu huỳnh, nhóm sulfenyl, nhóm sulfonyl, nguyên tử cacbon được thế hoặc không được thế, hoặc nguyên tử nitơ được thế hoặc không được thế;

Y là nguyên tử cacbon hoặc nguyên tử nitơ; và

Z là nguyên tử cacbon hoặc nguyên tử nitơ.

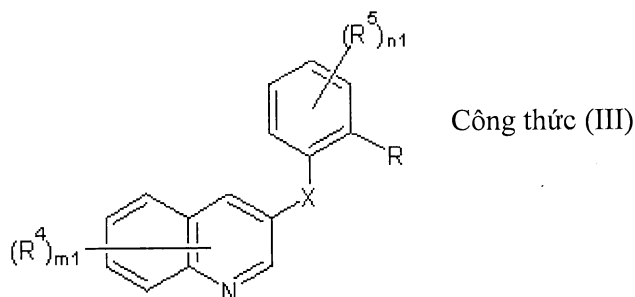
<2> Hợp chất dị vòng chứa nitơ được biểu diễn bằng công thức (II), muối của nó, hoặc hợp chất N-oxit của nó.



Trong công thức (II), mỗi trong số R , R^4 , R^5 , n , D , X , Y , và Z có cùng nghĩa như trong công thức (I) được mô tả ở trên trong mục <1>; và

m_1 biểu thị số lượng R^4 và là số nguyên nằm trong khoảng từ 0 đến 6.

<3> Hợp chất dị vòng chứa nitơ được biểu diễn bằng công thức (III), muối của nó, hoặc hợp chất N-oxit của nó.



Trong công thức (III), mỗi trong số R , R^4 , R^5 , m_1 và X có cùng nghĩa như trong công thức (II) được mô tả ở trên trong mục <2>; và

n_1 biểu thị số lượng R^5 và là số nguyên nằm trong khoảng từ 0 đến 4.

<4> Thuốc diệt nấm dùng trong nông nghiệp chứa hoạt chất là ít nhất một hợp chất được chọn từ nhóm bao gồm hợp chất dị vòng chứa nitơ, muối của nó, và hợp chất N-oxit của nó, theo mục bất kỳ trong số các mục từ <1> đến <3>.

<5> Sản phẩm trung gian của hợp chất dị vòng chứa nitơ được biểu diễn bằng công thức (I), muối của nó, hoặc hợp chất N-oxit của nó, được mô tả ở trên trong mục <1>, sản phẩm trung gian này được chọn từ nhóm bao gồm

8-flo-3-hydroxyquinolin, 7,8-diflo-3-hydroxyquinolin, 7,8-diflo-3-iodoquinolin, 8-flo-3-hydroxy-2-metylquinolin, và 7,8-diflo-3-hydroxy-2-metylquinolin.

Hiệu quả của sáng chế

Hợp chất dị vòng chứa nitơ, muối của nó, và hợp chất N-oxit của nó theo sáng chế là hợp chất mới hữu ích làm hoạt chất của thuốc diệt nấm dùng trong nông nghiệp có tác dụng đáng tin cậy và an toàn khi sử dụng.

Thuốc diệt nấm dùng trong nông nghiệp theo sáng chế là chất mà có tác dụng kiểm soát tuyệt vời, không gây ra tính độc thực vật ở cây, và có ít độc tính đối với người, vật nuôi, và cá hoặc môi trường.

Mô tả chi tiết sáng chế

Sau đây, sáng chế sẽ được chia thành 1) hợp chất dị vòng chứa nitơ được biểu diễn bằng công thức (I), và muối của nó hoặc hợp chất N-oxit của nó, và 2) thuốc diệt nấm dùng trong nông nghiệp và sẽ được mô tả chi tiết.

1) Hợp chất dị vòng chứa nitơ được biểu diễn bằng công thức (I), và muối của nó, hoặc hợp chất N-oxit của nó.

Hợp chất dị vòng chứa nitơ theo sáng chế được biểu diễn bằng công thức (I) (sau đây, đôi khi được gọi là “hợp chất (I)”), tốt hơn nếu được biểu diễn bằng công thức (II) (sau đây, đôi khi được gọi là “hợp chất (II)”), và tốt hơn nữa nếu được biểu diễn bằng công thức (III) (sau đây, đôi khi được gọi là “hợp chất (III)”).

Hợp chất dị vòng chứa nitơ, muối của nó, hoặc hợp chất N-oxit của nó theo sáng chế có thể là hydrat, solvat, dạng đa hình tinh thể, hoặc các dạng tương tự. Ngoài ra, nguyên tử cacbon không đối xứng, chất đồng phân lập thể dựa trên liên kết kép hoặc dạng tương tự, hoặc hỗn hợp của chúng, có thể có mặt trong hợp chất dị vòng chứa nitơ, muối của nó, hoặc hợp chất N-oxit của nó theo sáng chế.

Trước hết, nghĩa của cụm từ “không được thể” và “không được thể” trong các Công thức (I), (II), và (III) sẽ được giải thích. Thuật ngữ “không được thể” trong bản mô tả này có nghĩa là nhóm đã nêu được tạo thành duy

nhất từ nhóm đóng vai trò làm nhân mẹ. Khi chỉ có tên của nhóm đóng vai trò làm nhân mẹ này được đề cập mà không đề cập là “được thế”, nó có nghĩa là “không được thế” trừ khi có quy định khác.

Mặt khác, thuật ngữ “được thế” có nghĩa là nguyên tử hydro của nhóm đóng vai trò làm nhân mẹ đã được thế bằng phần tử thế có cùng cấu trúc như hoặc cấu trúc khác với nhân mẹ. “Phần tử thế” này là nhóm khác mà được liên kết với nhóm đóng vai trò làm nhân mẹ. “Phần tử thế” này có thể là một hoặc nhiều phần tử thế. Ít nhất hai phần tử thế có thể là giống nhau hoặc khác nhau.

Các thuật ngữ như “C₁₋₆” hoặc các thuật ngữ tương tự biểu thị rằng số lượng nguyên tử cacbon trong nhóm đóng vai trò làm nhân mẹ nằm trong khoảng từ 1 đến 6 hoặc khoảng tương tự. Số lượng nguyên tử cacbon không bao gồm các nguyên tử cacbon trong phần tử thế. Ví dụ, nhóm butyl có nhóm epoxy làm phần tử thế được phân loại là nhóm C₂ alkoxy C₄ alkyl.

“Phần tử thế” không bị giới hạn một cách cụ thể miễn là nó chấp nhận được về mặt hóa học và có hiệu quả theo sáng chế.

Ví dụ về “phần tử thế” bao gồm: nguyên tử halogen như nguyên tử flo, nguyên tử clo, nguyên tử brom, hoặc nguyên tử iot; nhóm C₁₋₆ alkyl như nhóm metyl, nhóm etyl, nhóm n-propyl, nhóm i-propyl, nhóm n-butyl, nhóm s-butyl, nhóm i-butyl, nhóm t-butyl, nhóm n-pentyl, hoặc nhóm n-hexyl; nhóm C₃₋₆ xycloalkyl như nhóm xyclopropyl, nhóm xyclobutyl, nhóm xyclopentyl, hoặc nhóm xyclohexyl; nhóm C₂₋₆ alkenyl như nhóm vinyl, nhóm 1-propenyl, nhóm 2-propenyl, nhóm 1-butenyl, nhóm 2-butenyl, nhóm 3-butenyl, nhóm 1-metyl-2-propenyl, nhóm 2-metyl-2-propenyl, nhóm 1-pentenyl, nhóm 2-pentenyl, nhóm 3-pentenyl, nhóm 4-pentenyl, nhóm 1-metyl-2-butenyl, nhóm 2-metyl-2-butenyl, nhóm 1-hexenyl, nhóm 2-hexenyl, nhóm 3-hexenyl, nhóm 4-hexenyl, và nhóm 5-hexenyl; nhóm C₃₋₆ xycloalkenyl như nhóm 2-xyclopropenyl, nhóm 2-xyclopentenyl, hoặc nhóm 3-xyclohexenyl; nhóm C₂₋₆ alkynyl như nhóm etynyl, nhóm 1-propynyl, nhóm 2-propynyl, nhóm 1-butynyl, nhóm 2-butynyl, nhóm 3-butynyl, nhóm 1-metyl-2-propynyl, nhóm 2-metyl-3-butynyl, nhóm 1-pentynyl, nhóm 2-pentynyl, nhóm 3-pentynyl,

nhóm 4-pentynyl, nhóm 1-metyl-2-butynyl, nhóm 2-metyl-3-pentynyl, nhóm 1-hexynyl, hoặc nhóm 1,1-dimetyl-2-butynyl;

nhóm C_{1-6} alkoxy như nhóm metoxy, nhóm etoxy, nhóm n-propoxy, nhóm i-propoxy, nhóm n-butoxy, nhóm s-butoxy, nhóm i-butoxy, hoặc nhóm t-butoxy; nhóm C_{2-6} alkenyloxy như nhóm vinyloxy, nhóm alyloxy, nhóm propenyloxy, hoặc nhóm butenyloxy; nhóm C_{2-6} alkynyloxy như nhóm etynyloxy hoặc nhóm propargyloxy; nhóm C_{6-10} aryl như nhóm phenyl hoặc nhóm naphtyl; nhóm C_{6-10} aryloxy như nhóm phenoxy hoặc nhóm 1-naphtoxy; nhóm C_{7-11} aralkyl như nhóm benzyl hoặc nhóm phenetyl; nhóm C_{7-11} aralkyloxy như nhóm benzyloxy hoặc nhóm phenetyloxy; nhóm C_{1-7} axyl như nhóm formyl, nhóm axetyl, nhóm propionyl, nhóm benzoyl, hoặc nhóm xyclohexylcacbonyl; nhóm C_{1-7} axyloxy như nhóm formyloxy, nhóm axetyloxy, nhóm propionyloxy, nhóm benzoyloxy, hoặc nhóm xyclohexylcacbonyloxy; nhóm C_{1-6} alkoxycacbonyl như nhóm metoxycacbonyl, nhóm etoxycacbonyl, nhóm n-propoxycacbonyl, nhóm i-propoxycacbonyl, nhóm n-butoxycacbonyl, và nhóm t-butoxycacbonyl; nhóm carboxyl;

nhóm hydroxyl; nhóm oxo; nhóm C_{1-6} haloalkyl như nhóm clometyl, nhóm cloetyl, nhóm triflometyl, nhóm 1,2-diclo-n-propyl, nhóm 1-flo-n-butyl, hoặc nhóm perflo-n-pentyl; nhóm C_{2-6} haloalkenyl như nhóm 2-clo-1-propenyl hoặc nhóm 2-flo-1-butenyl; nhóm C_{2-6} haloalkynyl như nhóm 4,4-diclo-1-butynyl, nhóm 4-flo-1-pentynyl hoặc nhóm 5-brom-2-pentynyl; nhóm C_{1-6} haloalkoxy như nhóm 2-clo-n-propoxy hoặc nhóm 2,3-diclobutoxy; nhóm C_{2-6} haloalkenyloxy như nhóm 2-clopropenyloxy hoặc nhóm 3-brombutenyloxy; nhóm C_{6-10} haloaryl như nhóm 4-clophenyl, nhóm 4-flophenyl, hoặc nhóm 2,4-diclophenyl; nhóm C_{6-10} haloaryloxy như nhóm 4-flophenyloxy, hoặc nhóm 4-clo-1-naphtoxy; nhóm C_{1-7} haloaxyl như nhóm cloaxetyl, nhóm trifloaxetyl, nhóm tricloaxetyl, hoặc nhóm 4-clobenzoyl;

nhóm xyano; nhóm isoxyano; nhóm nitro; nhóm isoxyanat; nhóm xyanat; nhóm azit; nhóm amino; nhóm C_{1-6} alkylamino như nhóm metylamino, nhóm dimetylamino, hoặc nhóm dietylamino; nhóm C_{6-10} arylamino như nhóm

anilino hoặc nhóm naphtylamino; nhóm C₇₋₁₁ aralkylamino như nhóm benzylamino hoặc nhóm phenyletylamino; nhóm C₁₋₇ axylamino như nhóm formylamino, nhóm axetylamin, nhóm propanoylamino, nhóm butyrylamino, nhóm i-propylcacbonylamino, hoặc nhóm benzoylamino; nhóm C₁₋₆ alkoxycacbonylamino như nhóm metoxycacbonylamino, nhóm etoxycacbonylamino, nhóm n-propoxycacbonylamino, hoặc nhóm i-propoxycacbonylamino; nhóm carbamoyl; nhóm carbamoyl được thế như nhóm dimethylcarbamoyl, nhóm phenylcarbamoyl, hoặc nhóm N-phenyl-N-methylcarbamoyl; nhóm imino C₁₋₆ alkyl như nhóm iminometyl, nhóm (1-imino)etyl, hoặc nhóm (1-imino)-n-propyl; nhóm hydroxyimino C₁₋₆ alkyl như nhóm hydroxyiminometyl, nhóm (1-hydroxyimino)etyl, hoặc nhóm (1-hydroxyimino)propyl; nhóm C₁₋₆ alkoxyimino C₁₋₆ alkyl như nhóm metoxyiminometyl hoặc nhóm (1-metoxyimino)etyl;

nhóm mercapto; nhóm isothioxyanat; nhóm thioxyanat; nhóm C₁₋₆ alkylthio như nhóm metylthio, nhóm etylthio, nhóm n-propylthio, nhóm i-propylthio, nhóm n-butylthio, nhóm i-butylthio, nhóm s-butylthio, hoặc nhóm t-butylthio; nhóm C₂₋₆ alkenylthio như nhóm vinylthio hoặc nhóm alylthio; nhóm C₂₋₆ alkynylthio như nhóm etynylthio hoặc nhóm propargylthio; nhóm C₆₋₁₀ arylthio như nhóm phenylthio hoặc nhóm naphtylthio; nhóm heteroarylthio như nhóm thiazolylthio hoặc nhóm pyridylthio; nhóm C₇₋₁₁ aralkylthio như nhóm benzylthio hoặc nhóm phenetylthio; nhóm (C₁₋₆ alkylthio)cacbonyl như nhóm (metylthio)cacbonyl, nhóm (etylthio)cacbonyl, nhóm (n-propylthio)cacbonyl, nhóm (i-propylthio)cacbonyl, nhóm (n-butylthio)cacbonyl, nhóm (i-butylthio)cacbonyl, nhóm (s-butylthio)cacbonyl, hoặc nhóm (t-butylthio)cacbonyl;

nhóm C₁₋₆ alkylsulfinyl như nhóm metylsulfinyl, nhóm etylsulfinyl, hoặc nhóm t-butylsulfinyl; nhóm C₂₋₆ alkenylsulfinyl như nhóm alylsulfinyl; nhóm C₂₋₆ alkynylsulfinyl như nhóm propargylsulfinyl; nhóm C₆₋₁₀ arylsulfinyl như nhóm phenylsulfinyl; nhóm heteroarylsulfinyl như nhóm thiazolylsulfinyl hoặc nhóm pyridylsulfinyl; nhóm C₇₋₁₁ aralkylsulfinyl như nhóm benzylsulfinyl hoặc

nhóm phenetylsulfonyl; nhóm C_{1-6} alkylsulfonyl như nhóm metylsulfonyl, nhóm etylsulfonyl, hoặc nhóm t-butylsulfonyl; nhóm C_{2-6} alkenylsulfonyl như nhóm allylsulfonyl; nhóm C_{2-6} alkynylsulfonyl như nhóm propargylsulfonyl; nhóm C_{6-10} arylsulfonyl như nhóm phenylsulfonyl; nhóm heteroarylsulfonyl như nhóm thiazolylsulfonyl hoặc nhóm pyridylsulfonyl; nhóm C_{7-11} aralkylsulfonyl như nhóm benzylsulfonyl hoặc nhóm phenetylsulfonyl;

nhóm heteroaryl có 5 cạnh như nhóm pyrrolyl, nhóm furyl, nhóm thienyl, nhóm imidazolyl, nhóm pyrazolyl, nhóm oxazolyl, nhóm isoxazolyl, nhóm thiazolyl, nhóm isothiazolyl, nhóm triazolyl, nhóm oxadiazolyl, nhóm thiadiazolyl, hoặc nhóm tetrazolyl; nhóm heteroaryl có 6 cạnh như nhóm pyridyl, nhóm pyrazinyl, nhóm pyrimidinyl, nhóm pyridazinyl, hoặc nhóm triazinyl; nhóm dị vòng no như nhóm aziridinyl, nhóm epoxy, nhóm pyrrolidinyl, nhóm tetrahydrofuranyl, nhóm piperidyl, nhóm piperazinyl, hoặc nhóm morpholinyl; nhóm tri C_{1-6} alkylsilyl như nhóm trimetylsilyl, nhóm trietylsilyl, hoặc nhóm t-butyltrimetylsilyl; nhóm triphenylsilyl; và các nhóm tương tự.

“Phần tử thế” có thể có “phần tử thế” khác.

[R]

R là nhóm được biểu diễn bằng $CR^1R^2R^3$, nhóm C_{6-10} aryl được thế hoặc không được thế, hoặc nhóm xyano.

Mỗi R^1 đến R^3 độc lập là nguyên tử hydro, nhóm C_{1-8} alkyl được thế hoặc không được thế, nhóm C_{2-8} alkenyl được thế hoặc không được thế, nhóm C_{2-8} alkynyl được thế hoặc không được thế, nhóm C_{3-8} xycloalkyl được thế hoặc không được thế, nhóm C_{4-8} xycloalkenyl được thế hoặc không được thế, nhóm C_{6-10} aryl được thế hoặc không được thế, nhóm dị vòng được thế hoặc không được thế, nhóm C_{1-8} axyl được thế hoặc không được thế, nhóm (1-imino) C_{1-8} alkyl được thế hoặc không được thế, nhóm carboxyl được thế hoặc không được thế, nhóm carbamoyl được thế hoặc không được thế, nhóm hydroxyl được thế hoặc không được thế, nhóm amino được thế hoặc không được thế, nhóm mercapto được thế hoặc không được thế, nhóm sulfonyl được thế, nhóm halogeno, nhóm xyano, hoặc nhóm nitro.

Tuy nhiên, không có trường hợp trong đó R^1 đến R^3 tất cả đều là nguyên tử hydro. Ngoài ra, không có trường hợp trong đó R^1 đến R^3 tất cả đều là nhóm C_{1-8} alkyl không được thế. Ngoài ra, khi bất kỳ một trong số R^1 đến R^3 là nguyên tử hydro, thì không có trường hợp trong đó cả hai gốc còn lại đều là nhóm C_{1-8} alkyl không được thế. Ngoài ra, khi bất kỳ một trong số R^1 đến R^3 là nhóm C_{1-8} alkyl không được thế, thì không có trường hợp trong đó cả hai gốc còn lại đều là nguyên tử hydro.

“Nhóm C_{1-8} alkyl” là hydrocacbon no có từ 1 đến 8 nguyên tử cacbon. Nhóm C_{1-8} alkyl có thể là mạch thẳng hoặc mạch nhánh. Ví dụ về nhóm C_{1-8} alkyl bao gồm nhóm methyl, nhóm ethyl, nhóm n-propyl, nhóm n-butyl, nhóm n-pentyl, nhóm n-hexyl, nhóm n-heptyl, nhóm n-octyl, nhóm i-propyl, nhóm i-butyl, nhóm s-butyl, nhóm t-butyl, nhóm i-pentyl, nhóm neopentyl, nhóm 2-methylbutyl, nhóm 2,2-dimethylpropyl, nhóm i-hexyl và các nhóm tương tự. Trong số các nhóm này, nhóm C_{1-6} alkyl là được ưu tiên.

Ví dụ về “nhóm C_{1-8} alkyl được thế” bao gồm:

nhóm xycloalkylalkyl như nhóm xyclopropylmetyl, nhóm 2-xyclopropyletyl, nhóm xyclopentylmetyl, hoặc nhóm 2-xyclohexyletyl, tốt hơn nếu là nhóm C_{3-6} xycloalkyl C_{1-6} alkyl;

nhóm xycloalkenylalkyl như nhóm xyclopentenylmetyl, nhóm 3-xyclopentenylmetyl, nhóm 3-xyclohexenylmetyl, hoặc nhóm 2-(3-xyclohexenyl)etyl, tốt hơn nếu là nhóm C_{4-6} xycloalkenyl C_{1-6} alkyl;

nhóm haloalkyl như nhóm flometyl, nhóm clometyl, nhóm brommetyl, nhóm diflometyl, nhóm diclometyl, nhóm dibrommetyl, nhóm triflometyl, nhóm triclometyl, nhóm tribrommetyl, nhóm 2,2,2-trifloetyl, nhóm 2,2,2-tricloetyl, nhóm pentaflloetyl, nhóm 4-flobutyl, nhóm 4-clobutyl, nhóm 3,3,3-triflopropyl, nhóm 2,2,2-triflo-1-triflometyletyl, nhóm perflohexyl, nhóm perclohexyl, nhóm perflooctyl, nhóm perclooctyl, nhóm 2,4,6-triclohexyl, nhóm perflodexyl, hoặc nhóm 2,2,4,4,6,6-hexaclooctyl, tốt hơn nếu là nhóm C_{1-6} haloalkyl;

nhóm arylalkyl (nhóm aralkyl) như nhóm benzyl, nhóm phenetyl, nhóm 3-phenylpropyl, nhóm 1-naphtylmetyl, hoặc nhóm 2-naphtylmetyl, tốt hơn nếu là nhóm C₆₋₁₀ aryl C₁₋₆ alkyl;

nhóm heteroarylalkyl như nhóm 2-pyridylmetyl, nhóm 3-pyridylmetyl, nhóm 4-pyridylmetyl, nhóm 2-(2-pyridyl)etyl, nhóm 2-(3-pyridyl)etyl, nhóm 2-(4-pyridyl)etyl, nhóm 3-(2-pyridyl)propyl, nhóm 3-(3-pyridyl)propyl, nhóm 3-(4-pyridyl)propyl, nhóm 2-pyrazinylmetyl, nhóm 3-pyrazinylmetyl, nhóm 2-(2-pyrazinyl)etyl, nhóm 2-(3-pyrazinyl)etyl, nhóm 3-(2-pyrazinyl)propyl, nhóm 3-(3-pyrazinyl)propyl, nhóm 2-pyrimidylmetyl, nhóm 4-pyrimidylmetyl, nhóm 2-(2-pyrimidyl)etyl, nhóm 2-(4-pyrimidyl)etyl, nhóm 3-(2-pyrimidyl)propyl, nhóm 3-(4-pyrimidyl)propyl, nhóm 2-furylmetyl, nhóm 3-furylmetyl, nhóm 2-(2-furyl)etyl, nhóm 2-(3-furyl)etyl, nhóm 3-(2-furyl)propyl, hoặc nhóm 3-(3-furyl)propyl, tốt hơn nếu là nhóm heteroaryl C₁₋₆ alkyl có từ 5 đến 6 cạnh;

nhóm hydroxyalkyl như nhóm hydroxymetyl, nhóm 1-hydroxyetyl, nhóm 2-hydroxyetyl, nhóm 1-hydroxypropyl, nhóm 3-hydroxypropyl, nhóm 1-hydroxy-1-metyletyl, nhóm 2-hydroxy-1,1-dimetyletyl, nhóm 2-hydroxy-1,1-dimetylpropyl, hoặc nhóm 2-hydroxy-2-metylpropyl, tốt hơn nếu là nhóm hydroxyl C₁₋₆ alkyl;

nhóm alkoxyalkyl như nhóm metoxymetyl, nhóm etoxymetyl, nhóm 2-metoxetyl, nhóm 2-etoxetyl, nhóm metoxy-n-propyl, nhóm n-propoxymetyl, nhóm i-propoxetyl, nhóm s-butoxymetyl, nhóm t-butoxetyl, nhóm 2,2-dimetoxetyl, hoặc nhóm 2,2-dimetoxyl-1,1-dimetyletyl, tốt hơn nếu là nhóm C₁₋₆ alkoxy C₁₋₆ alkyl;

nhóm axyloxyalkyl như nhóm formyloxymetyl, nhóm axetoxymetyl, nhóm 2-axetoxetyl, nhóm propionyloxymetyl, hoặc nhóm propionyloxyetyl, tốt hơn nếu là nhóm C₁₋₇ axyloxy C₁₋₆ alkyl;

nhóm trialkylsilyloxyalkyl như nhóm trimetylsilyloxymetyl hoặc nhóm t-butyltrimetylsilyloxymetyl, tốt hơn nếu là nhóm tri C₁₋₆ alkylsilyloxy C₁₋₆ alkyl;

nhóm arylsulfonyloxyalkyl như nhóm tosyloxymetyl hoặc nhóm 2-tosyloxy-1,1-dimetyletyl, tốt hơn nếu là nhóm C_{6-10} arylsulfonyloxy C_{1-6} alkyl được thể C_{1-6} alkyl;

nhóm xyanoalkyl như nhóm xyanometyl, nhóm 2-xyanoetyl, hoặc nhóm 1-xyano-1-metyletyl, tốt hơn nếu là nhóm xyano C_{1-6} alkyl;

nhóm axylalkyl như nhóm formylmetyl, nhóm 2-formyletyl, nhóm 3-formylpropyl, nhóm 1-formyl-1-metyletyl, nhóm 2-formyl-1,1-dimetyletyl, nhóm axetylmetyl, nhóm 2-axetyletyl, nhóm 3-axetylpropyl, nhóm 1-axetyl-1-metyletyl, hoặc nhóm 2-axetyl-1,1-dimetyletyl, tốt hơn nếu là nhóm C_{1-6} axyl C_{1-6} alkyl;

nhóm 2-hydroxyiminoalkyl như nhóm 2-hydroxyiminoetyl, nhóm 2-hydroxyimino-1-metyletyl, nhóm 2-hydroxy-1,1-dimetyletyl, hoặc nhóm 2-hydroxyiminopropyl, tốt hơn nếu là nhóm 2-hydroxyimino C_{2-6} alkyl;

nhóm axylalkyl như nhóm axetylmetyl, nhóm 2-axetyletyl, nhóm 3-axetylpropyl, nhóm 1-axetyl-1-metyletyl, hoặc nhóm 2-axetyl-1,1-dimetyletyl, tốt hơn nếu là nhóm formyl C_{1-6} alkyl;

nhóm carboxyalkyl như nhóm carboxymetyl, nhóm 2-carboxyetyl, nhóm 3-carboxypropyl, nhóm 1-carboxy-1-metyletyl, hoặc nhóm 2-carboxy-1,1-dimetyletyl, tốt hơn nếu là nhóm carboxy C_{1-6} alkyl;

nhóm alkoxycarbonylalkyl như nhóm metoxycarbonylmetyl, nhóm 2-metoxycarbonyletyl, nhóm 3-metoxycarbonylpropyl, nhóm 1-metoxycarbonyl-1-metyletyl, hoặc nhóm 2-metoxycarbonyl-1,1-dimetyletyl, tốt hơn nếu là nhóm C_{1-6} alkoxycarbonyl C_{1-6} alkyl;

nhóm azidoalkyl như nhóm azidometyl, nhóm 2-azidoetyl, hoặc nhóm 1-azido-1-metyletyl, tốt hơn nếu là nhóm azido C_{1-6} alkyl; và các nhóm tương tự.

“Nhóm C_{2-8} alkenyl” là nhóm hydrocacbon chưa no có từ 2 đến 8 nguyên tử cacbon có ít nhất một liên kết đôi cacbon-cacbon. Nhóm C_{2-8} alkenyl có thể là mạch thẳng hoặc mạch nhánh. Ví dụ về nhóm C_{2-8} alkenyl bao gồm

nhóm vinyl, nhóm 1-propenyl, nhóm isopropenyl, nhóm allyl, nhóm 1-butenyl, nhóm 2-butenyl, nhóm 3-butenyl, nhóm 1-pentenyl, nhóm 2-pentenyl, nhóm 3-pentenyl, nhóm 4-pentenyl, nhóm 1-hexenyl, nhóm 2-hexenyl, nhóm 3-hexenyl, nhóm 4-hexenyl, nhóm 5-hexenyl, nhóm 1-heptenyl, nhóm 6-heptenyl, nhóm 1-octenyl, nhóm 7-octenyl, nhóm 1-metyl-allyl, nhóm 2-metyl-allyl, nhóm 1-metyl-2-butenyl, nhóm 2-metyl-2-butenyl, và các nhóm tương tự. Trong số này, nhóm C_{2-6} alkenyl là được ưu tiên.

Ví dụ về “nhóm C_{2-8} alkenyl được thế” bao gồm: nhóm haloalkenyl như nhóm 3-clo-2-propenyl, nhóm 4-clo-2-butenyl, nhóm 4,4-diclo-3-butenyl, nhóm 4,4-diflo-3-butenyl, nhóm 3,3-diclo-2-propenyl, nhóm 2,3-diclo-2-propenyl, nhóm 3,3-diflo-2-propenyl, hoặc nhóm 2,4,6-triclo-2-hexenyl, tốt hơn nếu nhóm C_{2-6} haloalkenyl;

nhóm hydroxyalkenyl như nhóm 3-hydroxy-1-propenyl, nhóm 4-hydroxy-1-butenyl, nhóm 1-hydroxyallyl, hoặc nhóm 1-hydroxy-2-metylallyl, tốt hơn nếu là nhóm hydroxy C_{2-6} alkenyl; và các nhóm tương tự.

“Nhóm C_{2-8} alkynyl” là nhóm hydrocacbon chưa no có từ 2 đến 8 nguyên tử cacbon có ít nhất một liên kết ba cacbon-cacbon. Nhóm C_{2-8} alkynyl có thể là mạch thẳng hoặc mạch nhánh. Ví dụ về nhóm C_{2-8} alkynyl bao gồm nhóm etynyl, nhóm 1-propynyl, nhóm propargyl, nhóm 1-butynyl, nhóm 2-butynyl, nhóm 3-butynyl, nhóm 1-pentynyl, nhóm 2-pentynyl, nhóm 3-pentynyl, nhóm 4-pentynyl, nhóm 1-hexynyl, nhóm 1-metyl-2-propynyl, nhóm 2-metyl-3-butynyl, nhóm 1-metyl-2-butynyl, nhóm 2-metyl-3-pentynyl, nhóm 1,1-dimetyl-2-butynyl, và các nhóm tương tự. Trong số này, nhóm C_{2-6} alkynyl là được ưu tiên.

Ví dụ về “nhóm C_{2-8} alkynyl được thế” bao gồm nhóm haloalkynyl như nhóm 3-clo-1-propynyl, nhóm 3-clo-1-butynyl, nhóm 3-brom-1-butynyl, nhóm 3-brom-2-propynyl, nhóm 3-iodo-2-propynyl, nhóm 3-brom-1-hexynyl, nhóm 4,4,6,6-tetraflo-1-dodexynyl, nhóm 5,5-diclo-2-metyl-3-pentynyl, hoặc nhóm 4-clo-1,1-dimetyl-2-butynyl, tốt hơn nếu là nhóm C_{2-6} haloalkynyl, và các nhóm tương tự.

“Nhóm C_{3-8} xycloalkyl” là nhóm alkyl có từ 3 đến 8 nguyên tử cacbon có gốc vòng. Ví dụ về nhóm C_{3-8} xycloalkyl bao gồm nhóm xyclopropyl, nhóm xyclobutyl, nhóm xyclopentyl, nhóm xyclohexyl, nhóm xycloheptyl, nhóm xyclooctyl, và các nhóm tương tự. Trong số này, nhóm C_{3-6} xycloalkyl là được ưu tiên.

Ví dụ về “nhóm C_{3-8} xycloalkyl được thế” bao gồm nhóm xycloalkyl được thế alkyl như nhóm 2,3,3-trimetylxyclobutyl, nhóm 4,4,6,6-tetrametylxyclohexyl, hoặc nhóm 1,3-dibutylycyclohexyl, tốt hơn nếu là nhóm C_{3-6} xycloalkyl trong đó từ 1 đến 3 nhóm C_{1-6} alkyl là được thế, và các nhóm tương tự.

“Nhóm C_{4-8} xycloalkenyl” là nhóm alkenyl có từ 4 đến 8 nguyên tử cacbon có gốc vòng. Ví dụ về nhóm C_{4-8} xycloalkenyl bao gồm nhóm 1-xyclobutenyl, nhóm 1-xyclopentenyl, nhóm 3-xyclopentenyl, nhóm 1-xyclohexenyl, nhóm 3-xyclohexenyl, nhóm 3-xycloheptenyl, nhóm 4-xyclooctenyl, và các nhóm tương tự.

Ví dụ về “nhóm C_{4-8} xycloalkenyl được thế” bao gồm nhóm xycloalkenyl được thế alkyl như nhóm 2-metyl-3-xyclohexenyl hoặc nhóm 3,4-dimetyl-3-xyclohexenyl, tốt hơn nếu là nhóm C_{4-6} xycloalkenyl trong đó từ 1 đến 3 nhóm C_{1-6} alkyl được thế, và các nhóm tương tự.

“Nhóm C_{6-10} aryl” là nhóm aryl đơn vòng hoặc đa vòng có từ 6 đến 10 nguyên tử cacbon. Trong nhóm aryl đa vòng, nếu ít nhất một vòng là vòng thơm, (các) vòng còn lại có thể là vòng bất kỳ trong số vòng béo no, vòng béo chưa no, và vòng thơm. Ví dụ về nhóm C_{6-10} aryl gồm nhóm phenyl, nhóm naphthyl, nhóm azulenyl, nhóm indenyl, nhóm indanyl, nhóm tetralinyl, và các nhóm tương tự. Trong số này, nhóm phenyl là được ưu tiên.

Ví dụ về “nhóm C_{6-10} aryl được thế” bao gồm nhóm aryl được thế alkyl như nhóm 2-clophenyl, nhóm 3,5-diclophenyl, nhóm 4-flophenyl, nhóm 3,5-diflophenyl, nhóm 4-triflometylphenyl, hoặc nhóm 2-metoxi-1-naphthyl, nhóm aryl được thế halogen, và nhóm aryl được thế alkoxy, tốt hơn nếu là nhóm C_{6-10} aryl được thế C_{1-6} alkyl, nhóm C_{6-10} aryl được thế halogen, và nhóm

aryl được thế C_{1-6} alkoxy.

“Nhóm dị vòng” bao gồm từ 1 đến 4 nguyên tử khác loại được chọn từ nhóm bao gồm nguyên tử nitơ, nguyên tử oxy, và nguyên tử lưu huỳnh, làm nguyên tử cấu tạo của vòng. Nhóm dị vòng có thể là đơn vòng hoặc đa vòng.

Ví dụ về nhóm dị vòng gồm nhóm heteroaryl có 5 cạnh, nhóm heteroaryl có 6 cạnh, nhóm heteroaryl ngưng tụ, nhóm dị vòng no, nhóm dị vòng chưa no một phần và các nhóm tương tự.

Ví dụ về nhóm heteroaryl có 5 cạnh bao gồm: nhóm pyrrolyl như nhóm pyrol-1-yl, nhóm pyrol-2-yl, hoặc nhóm pyrol-3-yl; nhóm furyl như nhóm furan-2-yl hoặc nhóm furan-3-yl; nhóm thienyl như nhóm thiophen-2-yl, hoặc nhóm thiophen-3-yl; nhóm imidazolyl như nhóm imidazol-1-yl, nhóm imidazol-2-yl, nhóm imidazol-4-yl, hoặc nhóm imidazol-5-yl; nhóm pyrazolyl như nhóm pyrazol-1-yl, nhóm pyrazol-3-yl, nhóm pyrazol-4-yl, hoặc nhóm pyrazol-5-yl; nhóm oxazolyl như nhóm oxazol-2-yl, nhóm oxazol-4-yl, hoặc nhóm oxazol-5-yl; nhóm isoxazolyl như nhóm isoxazol-3-yl, nhóm isoxazol-4-yl, hoặc nhóm isoxazol-5-yl; nhóm thiazolyl như nhóm thiazol-2-yl, nhóm thiazol-4-yl, hoặc nhóm thiazol-5-yl; nhóm isothiazolyl như nhóm isothiazol-3-yl, nhóm isothiazol-4-yl, hoặc nhóm thiazol-5-yl; nhóm triazolyl như nhóm 1,2,3-triazol-1-yl, nhóm 1,2,3-triazol-4-yl, nhóm 1,2,3-triazol-5-yl, nhóm 1,2,4-triazol-1-yl, nhóm 1,2,4-triazol-3-yl, hoặc nhóm 1,2,4-triazol-5-yl; nhóm oxadiazolyl như nhóm 1,2,4-oxadiazol-3-yl, nhóm 1,2,4-oxadiazol-5-yl, hoặc nhóm 1,3,4-oxadiazol-2-yl; nhóm thiadiazolyl như nhóm 1,2,4-thiadiazol-3-yl, nhóm 1,2,4-thiadiazol-5-yl, hoặc nhóm 1,3,4-thiadiazol-2-yl; nhóm tetrazolyl như nhóm tetrazol-1-yl hoặc nhóm tetrazol-2-yl; và các nhóm tương tự.

Ví dụ về nhóm heteroaryl có 6 cạnh bao gồm: nhóm pyridyl như nhóm pyridin-2-yl, nhóm pyridin-3-yl, hoặc nhóm pyridin-4-yl; nhóm pyrazinyl như nhóm pyrazin-2-yl hoặc nhóm pyrazin-3-yl; nhóm pyrimidinyl như nhóm pyrimidin-2-yl, nhóm pyrimidin-4-yl, hoặc nhóm pyrimidin-5-yl; nhóm pyridazinyl như nhóm pyridazin-3-yl hoặc nhóm pyridazin-4-yl; nhóm

triazinyl; và các nhóm tương tự.

Ví dụ về nhóm heteroaryl ngưng tụ bao gồm: nhóm indol-1-yl, nhóm indol-2-yl, nhóm indol-3-yl, nhóm indol-4-yl, nhóm indol-5-yl, nhóm indol-6-yl, nhóm indol-7-yl; nhóm benzofuran-2-yl, nhóm benzofuran-3-yl, nhóm benzofuran-4-yl, nhóm benzofuran-5-yl, nhóm benzofuran-6-yl, nhóm benzofuran-7-yl; nhóm benzothiophen-2-yl, nhóm benzothiophen-3-yl, nhóm benzothiophen-4-yl, nhóm benzothiophen-5-yl, nhóm benzothiophen-6-yl, nhóm benzothiophen-7-yl; nhóm benzoimidazol-1-yl, nhóm benzoimidazol-2-yl, nhóm benzoimidazol-4-yl, nhóm benzoimidazol-5-yl, nhóm benzoxazol-2-yl, nhóm benzoxazol-4-yl, nhóm benzoxazol-5-yl, nhóm benzothiazol-2-yl, nhóm benzothiazol-4-yl, nhóm benzothiazol-5-yl; nhóm quinolin-2-yl, nhóm quinolin-3-yl, nhóm quinolin-4-yl, nhóm quinolin-5-yl, nhóm quinolin-6-yl, nhóm quinolin-7-yl, nhóm quinolin-8-yl; và các nhóm tương tự.

Ví dụ về nhóm dị vòng khác bao gồm: vòng dị vòng no có 3 cạnh như nhóm aziridin-1-yl, nhóm aziridin-2-yl, hoặc nhóm oxiranyl; vòng dị vòng no có 5 cạnh như nhóm pyrrolidin-1-yl, nhóm pyrrolidin-2-yl, nhóm pyrrolidin-3-yl, nhóm tetrahydrofuran-2-yl, nhóm tetrahydrofuran-3-yl, hoặc nhóm [1,3]dioxiran-2-yl; vòng dị vòng no có 6 cạnh như nhóm piperidin-1-yl, nhóm piperidin-2-yl, nhóm piperidin-3-yl, nhóm piperidin-4-yl, nhóm piperazin-1-yl, nhóm piperazin-2-yl, nhóm morpholin-2-yl, nhóm morpholin-3-yl, hoặc nhóm morpholin-4-yl; nhóm 1,3-benzodioxol-4-yl, nhóm 1,3-benzodioxol-5-yl, nhóm 1,4-benzodioxan-5-yl, nhóm 1,4-benzodioxan-6-yl, nhóm 3,4-dihydro-2H-1,5-benzodioxepin-6-yl, nhóm 3,4-dihydro-2H-1,5-benzodioxepin-7-yl, nhóm 2,3-dihydrobenzofuran-4-yl, nhóm 2,3-dihydrobenzofuran-5-yl, nhóm 2,3-dihydrobenzofuran-6-yl, hoặc nhóm 2,3-dihydrobenzofuran-7-yl; và các nhóm tương tự.

Ví dụ về “nhóm dị vòng được thế” bao gồm: nhóm 4-clo-2-pyridinyl, nhóm 3-clo-2-pyrazinyl, nhóm 4-metyl-2-pyridinyl, nhóm 5-triflometyl-2-pyrimidinyl, nhóm 3-metyl-2-quinolyl, và các nhóm tương tự.

“Nhóm C_{1-8} axyl” là nhóm trong đó nguyên tử hydro, nhóm C_{1-7} alkyl, nhóm C_{2-7} alkenyl, nhóm C_{2-7} alkynyl, nhóm C_{6-7} aryl, hoặc nhóm dị vòng có từ 5 đến 7 cạnh được liên kết với nhóm cacbonyl.

Ví dụ về nhóm C_{1-8} axyl bao gồm: nhóm formyl; nhóm alkylcacbonyl như nhóm axetyl, nhóm propionyl, nhóm n-propylcacbonyl, nhóm n-butylcacbonyl, nhóm pentanoyl, nhóm valeryl, nhóm octanoyl, nhóm i-propylcacbonyl, nhóm i-butylcacbonyl, nhóm pivaloyl, hoặc nhóm isovaleryl, tốt hơn nếu là nhóm C_{1-6} alkylcacbonyl; nhóm alkenylcacbonyl như nhóm acryloyl, hoặc nhóm metacryloyl, tốt hơn nếu nhóm C_{2-6} alkenylcacbonyl; nhóm alkynylcacbonyl như nhóm propioloyl, tốt hơn nếu là nhóm C_{2-6} alkynylcacbonyl; nhóm arylcacbonyl như nhóm benzoyl; nhóm cacbonyl dị vòng như nhóm 2-pyridylcacbonyl hoặc nhóm thienylcacbonyl; và các nhóm tương tự.

Ví dụ về “nhóm C_{1-8} axyl được thế” bao gồm: nhóm haloaxyl như nhóm monofloaxetyl, nhóm monocloaxetyl, nhóm monobromaxetyl, nhóm difloaxetyl, nhóm dicloaxetyl, nhóm dibromaxetyl, nhóm trifloaxetyl, nhóm tricloaxetyl, nhóm tribromaxetyl, nhóm 3,3,3-triflopropionyl, nhóm 3,3,3-triclopropionyl, hoặc nhóm 2,2,3,3,3-pentaflopropionyl, tốt hơn nếu là nhóm C_{1-7} haloaxyl; và các nhóm tương tự.

“Nhóm (1-imino) C_{1-8} alkyl” là nhóm iminometyl hoặc nhóm trong đó nhóm C_{1-7} alkyl được liên kết với nhóm iminometyl. Ví dụ về nhóm (1-imino) C_{1-8} alkyl bao gồm nhóm iminometyl, nhóm (1-imino)etyl, nhóm (1-imino)propyl, nhóm (1-imino)butyl, nhóm (1-imino)pentyl, nhóm (1-imino)hexyl, nhóm (1-imino)heptyl, và các nhóm tương tự. Trong số này, nhóm (1-imino) C_{1-6} alkyl là được ưu tiên.

Ví dụ về “nhóm (1-imino) C_{1-8} alkyl được thế” bao gồm: nhóm (1-hydroxyimino)alkyl như nhóm hydroxyiminometyl, nhóm (1-hydroxyimino)etyl, nhóm (1-hydroxyimino)propyl, hoặc nhóm (1-hydroxyimino)butyl, tốt hơn nếu là nhóm (1-hydroxyimino) C_{1-6} alkyl; nhóm (1-alkoxyimino)alkyl như nhóm metoxyiminometyl, nhóm

(1-etoxyimino)metyl, nhóm (1-metoxyimino)etyl, nhóm (1-t-butoxyimino)etyl, hoặc nhóm (1-etoxyimino)etyl, tốt hơn nếu là nhóm (1-(C₁₋₆ alkoxy)imino)C₁₋₆ alkyl; và các nhóm tương tự.

“Nhóm carboxyl được thế” là nhóm trong đó nhóm C₁₋₆ alkyl, nhóm C₂₋₆ alkenyl, nhóm C₂₋₆ alkynyl, nhóm C₆₋₁₀ aryl, nhóm C₆₋₁₀ aryl C₁₋₆ alkyl, hoặc nhóm dị vòng có từ 5 đến 6 cạnh được liên kết với nhóm cacbonyl.

Ví dụ về “nhóm carboxyl được thế” bao gồm: nhóm alkoxycarbonyl như nhóm metoxycarbonyl, nhóm etoxycarbonyl, nhóm n-propoxycarbonyl, nhóm i-propoxycarbonyl, nhóm n-butoxycarbonyl, nhóm i-butoxycarbonyl, nhóm t-butoxycarbonyl, nhóm n-pentyloxycarbonyl, hoặc nhóm n-hexyloxycarbonyl, tốt hơn nếu là nhóm C₁₋₆ alkoxycarbonyl;

nhóm alkenyloxycarbonyl như nhóm vinyloxycarbonyl hoặc nhóm alyloxycarbonyl, tốt hơn nếu là nhóm C₂₋₆ alkenyloxycarbonyl;

nhóm alkynyloxycarbonyl như nhóm etynyloxycarbonyl hoặc nhóm propargyloxycarbonyl, tốt hơn nếu là nhóm C₂₋₆ alkynyloxycarbonyl;

nhóm aryloxycarbonyl như nhóm phenoxycarbonyl hoặc nhóm naphtoxycarbonyl, tốt hơn nếu là nhóm C₆₋₁₀ aryloxycarbonyl;

nhóm aralkyloxycarbonyl như nhóm benzyloxycarbonyl, tốt hơn nếu là nhóm C₆₋₁₀ aryl C₁₋₆ alkoxycarbonyl; và các nhóm tương tự.

“Nhóm carbamoyl được thế” là nhóm trong đó nhóm C₁₋₆ alkyl, nhóm C₂₋₆ alkenyl, nhóm C₂₋₆ alkynyl, nhóm C₆₋₁₀ aryl, nhóm C₆₋₁₀ aryl C₁₋₆ alkyl, hoặc nhóm dị vòng có từ 5 đến 6 cạnh được liên kết với nhóm carbamoyl.

Ví dụ về “nhóm carbamoyl được thế” bao gồm: nhóm monoalkylcarbamoyl hoặc nhóm dialkylcarbamoyl, như nhóm methylcarbamoyl, nhóm etylcarbamoyl, nhóm dimethylcarbamoyl, hoặc nhóm diethylcarbamoyl, tốt hơn nếu là nhóm mono C₁₋₆ alkylcarbamoyl hoặc nhóm di C₁₋₆ alkylcarbamoyl; nhóm monoarylcabamoyl như nhóm phenylcarbamoyl hoặc nhóm 4-methylphenylcarbamoyl, tốt hơn nếu nhóm mono C₆₋₁₀ arylcarbamoyl; và các nhóm tương tự.

Ví dụ về “nhóm hydroxyl được thế” bao gồm: nhóm alkoxy như nhóm metoxy, nhóm etoxy, nhóm n-propoxy, nhóm n-butoxy, nhóm n-pentyloxy, nhóm n-hexyloxy, nhóm dextyloxy, nhóm dodecylloxy, nhóm lauryloxy, nhóm i-propoxy, nhóm i-butoxy, nhóm s-butoxy, nhóm t-butoxy, nhóm 1-ethylpropoxy, nhóm i-hexyloxy, nhóm 4-methylpentyloxy, nhóm 3-methylpentyloxy, nhóm 2-methylpentyloxy, nhóm 1-methylpentyloxy, nhóm 3,3-dimethylbutoxy, nhóm 2,2-dimethylbutoxy, nhóm 1,1-dimethylbutoxy, nhóm 1,2-dimethylbutoxy, nhóm 1,3-dimethylbutoxy, nhóm 2,3-dimethylbutoxy, nhóm 1-ethylbutoxy, hoặc nhóm 2-ethylbutoxy, tốt hơn nếu là nhóm C_{1-6} alkoxy;

nhóm xycloalkylalkoxy như nhóm xyclopropylmetyloxy hoặc nhóm 2-xyclopentyletyloxy, tốt hơn nếu là nhóm C_{3-8} xycloalkyl C_{1-6} alkoxy; nhóm aralkyloxy như nhóm benzyloxy, tốt hơn nếu là nhóm C_{6-10} aryl C_{1-6} alkoxy; nhóm haloalkoxy như nhóm clometoxy, nhóm diclometoxy, nhóm triclometoxy, nhóm triflometoxy, nhóm 1-floetoxi, nhóm 1,1-difloetoxi, nhóm 2,2,2-trifloetoxi, hoặc nhóm pentaflorotoxi, tốt hơn nếu là nhóm C_{1-6} haloalkoxy; nhóm alkenyloxy như nhóm vinyloxy, nhóm 1-propenyloxy, nhóm allyloxy, nhóm 1-butenyloxy, nhóm 2-butenyloxy, nhóm 3-butenyloxy, nhóm 1-pentyloxy, nhóm 2-pentyloxy, nhóm 3-pentyloxy, nhóm 4-pentyloxy, nhóm 1-hexenyloxy, nhóm 2-hexenyloxy, nhóm 3-hexenyloxy, nhóm 4-hexenyloxy, nhóm 5-hexenyloxy, nhóm 1-metyl-2-propenyloxy, nhóm 2-metyl-2-propenyloxy, nhóm 1-metyl-2-butenyloxy, hoặc nhóm 2-metyl-2-butenyloxy, tốt hơn nếu nhóm C_{2-6} alkenyloxy;

nhóm alkynyloxy như nhóm etynyloxy, nhóm propynyloxy, nhóm propargyloxy, nhóm 1-butyloxy, nhóm 2-butyloxy, nhóm 3-butyloxy, nhóm 1-pentyloxy, nhóm 2-pentyloxy, nhóm 3-pentyloxy, nhóm 4-pentyloxy, nhóm 1-hexynyloxy, nhóm 1-metyl-2-propynyloxy, nhóm 2-metyl-3-butyloxy, nhóm 1-metyl-2-butyloxy, nhóm 2-metyl-3-pentyloxy, hoặc nhóm 1,1-dimetyl-2-butyloxy, tốt hơn nếu là nhóm C_{2-6} alkynyloxy; nhóm xycloalkyloxy như nhóm xyclopropyloxy, nhóm xyclobutyloxy, nhóm xyclopentyloxy, nhóm xyclohexyloxy, nhóm

xycloheptyloxy, nhóm xyclooctyloxy, nhóm 2-metylxcyclopropyloxy, nhóm 2-etylxcyclopropyloxy, nhóm 2,3,3-trimetylxcyclobutyloxy, nhóm 2-metylxcyclopentyloxy, nhóm 2-etylxcyclohexyloxy, nhóm 2-etylxcyclooctyloxy, nhóm 4,4,6,6-tetrametylxcyclohexyloxy, hoặc nhóm 1,3-dibetylxcyclohexyloxy, tốt hơn nếu là nhóm C_{3-6} xycloalkyloxy; nhóm aryloxy như nhóm phenyloxy, nhóm naphtyloxy, nhóm azulenyloxy, nhóm indenyloxy, nhóm indanyloxy, hoặc nhóm tetralinyloxy, tốt hơn nếu là nhóm C_{6-10} aryloxy;

nhóm arylalkyloxy (nhóm aralkyloxy) như nhóm benzyloxy, nhóm phenetyloxy, hoặc nhóm 2-naphtylmetyloxy, tốt hơn nếu là nhóm C_{6-10} aryl C_{1-6} alkyloxy;

nhóm axyloxy như nhóm axetyloxy, nhóm propionyloxy, nhóm n-propylcacbonyloxy, nhóm i-propylcacbonyloxy, nhóm n-butylcacbonyloxy, nhóm i-butylcacbonyloxy, nhóm pentanoyloxy, hoặc nhóm pivaloyloxy, tốt hơn nếu là nhóm C_{1-7} axyloxy;

nhóm alkoxycacbonylalkyloxy như nhóm metoxycacbonylmetyloxy hoặc nhóm 1-metoxycacbonyl-1-metyletyloxy, tốt hơn nếu là nhóm C_{1-6} alkoxycacbonyl C_{1-6} alkoxy;

nhóm trialkylsilyloxy như nhóm trimetylsilyloxy hoặc nhóm t-butyltrimetylsilyloxy, tốt hơn nếu là nhóm tri C_{1-6} alkylsilyloxy;

và các nhóm tương tự.

Ví dụ về “nhóm amino được thế” bao gồm: nhóm alkylamino như nhóm methylamino, nhóm etylamino, nhóm n-propylamino, nhóm n-butylamino, nhóm dimethylamino, hoặc nhóm diethylamino, tốt hơn nếu là nhóm mono C_{1-6} alkylamino hoặc nhóm di C_{1-6} alkylamino; nhóm mono C_{1-6} alkylideneamino như nhóm metylidenamino, hoặc nhóm etylidenamino; nhóm monoarylamino như nhóm phenylamino hoặc nhóm 4-metylphenylamino, tốt hơn nếu là nhóm mono C_{6-10} arylamino; nhóm diarylamino như nhóm di-1-naphtylamino, tốt hơn nếu là nhóm di C_{6-10} arylamino; nhóm aralkylamino như nhóm benzylamino, tốt hơn nếu là nhóm C_{6-10} aryl C_{1-6} alkylamino; nhóm axylamino như nhóm

axetylamino, nhóm trifloaxetylamin, hoặc nhóm benzoylamino, tốt hơn nếu là nhóm C_{1-6} axylamino; nhóm alkoxycarbonylamino như nhóm metoxycarbonylamino hoặc nhóm t-butoxycarbonylamino, tốt hơn nếu là nhóm C_{1-6} alkoxycarbonylamino; và các nhóm tương tự.

Ví dụ về “nhóm mercapto được thế” bao gồm: nhóm alkylthio như nhóm methylthio hoặc nhóm ethylthio, tốt hơn nếu là nhóm C_{1-6} alkylthio; nhóm arylthio như nhóm phenylthio hoặc nhóm 4-methylphenylthio, tốt hơn nếu là nhóm C_{6-10} arylthio; nhóm axylthio như nhóm axetylthio hoặc nhóm benzoylthio, tốt hơn nếu là nhóm C_{1-6} axylthio; và các nhóm tương tự.

Ví dụ về “nhóm sulfonyl được thế” bao gồm: nhóm alkylsulfonyl như nhóm methylsulfonyl, nhóm ethylsulfonyl, nhóm n-propylsulfonyl, nhóm i-propylsulfonyl, nhóm n-butylsulfonyl, nhóm i-butylsulfonyl, nhóm s-butylsulfonyl, nhóm t-butylsulfonyl, nhóm n-pentylsulfonyl, nhóm i-pentylsulfonyl, nhóm neopentylsulfonyl, nhóm 1-ethylpropylsulfonyl, nhóm n-hexylsulfonyl, hoặc nhóm i-hexylsulfonyl, tốt hơn nếu là nhóm C_{1-6} alkylsulfonyl; nhóm haloalkylsulfonyl như nhóm triflometylsulfonyl, tốt hơn nếu là nhóm C_{1-6} haloalkylsulfonyl; nhóm arylsulfonyl như nhóm phenylsulfonyl hoặc nhóm 4-methylphenylsulfonyl, tốt hơn nếu là nhóm C_{6-10} arylsulfonyl; nhóm sulfo; nhóm alkoxysulfonyl như nhóm metoxysulfonyl hoặc nhóm etoxysulfonyl, tốt hơn nếu là nhóm C_{1-6} alkoxysulfonyl; nhóm sulfamoyl; nhóm sulfamoyl như nhóm N-methylsulfamoyl, nhóm N-ethylsulfamoyl, nhóm N,N-dimethylsulfamoyl, hoặc nhóm N,N-diethylsulfamoyl, tốt hơn nếu là nhóm mono C_{1-6} alkylsulfamoyl hoặc nhóm di C_{1-6} alkylsulfamoyl; nhóm monoaryl sulfamoyl như nhóm phenylsulfamoyl hoặc nhóm 4-methylsulfamoyl, tốt hơn nếu là nhóm mono C_{6-10} arylsulfamoyl; và các nhóm tương tự.

Ví dụ về “nhóm halogeno” bao gồm nguyên tử flo, nguyên tử clo, nguyên tử brom, nguyên tử iot, và các nguyên tử tương tự.

Để làm sự kết hợp được ưu tiên của nhóm được biểu diễn bằng $CR^1R^2R^3$, sự kết hợp sau có thể được bao gồm.

R^1 là nhóm hydroxyl được thế hoặc không được thế;

R^2 là nguyên tử hydro hoặc nhóm C_{1-8} alkyl được thế hoặc không được thế; và

R^3 là nguyên tử hydro, nhóm C_{1-8} alkyl được thế hoặc không được thế, nhóm C_{2-8} alkenyl được thế hoặc không được thế, nhóm C_{2-8} alkynyl được thế hoặc không được thế, nhóm C_{3-8} xycloalkyl được thế hoặc không được thế, nhóm C_{6-10} aryl được thế hoặc không được thế, nhóm dị vòng được thế hoặc không được thế, nhóm C_{1-8} axyl được thế hoặc không được thế, nhóm (1-imino) C_{1-8} alkyl được thế hoặc không được thế, nhóm C_{1-8} alkoxycarbonyl được thế hoặc không được thế, nhóm hydroxyl được thế hoặc không được thế, hoặc nhóm xyano.

Sự kết hợp sau cũng có thể được bao gồm làm ví dụ được ưu tiên.

R^1 là nhóm C_{1-8} alkyl được thế hoặc không được thế;

R^2 là nhóm C_{1-8} alkyl được thế hoặc không được thế; và

R^3 là nhóm C_{1-8} alkyl được thế, nhóm C_{2-8} alkenyl được thế hoặc không được thế, nhóm C_{2-8} alkynyl được thế hoặc không được thế, nhóm C_{3-8} xycloalkyl được thế hoặc không được thế, nhóm C_{6-10} aryl được thế hoặc không được thế, nhóm dị vòng được thế hoặc không được thế, nhóm C_{1-8} axyl được thế hoặc không được thế, nhóm (1-imino) C_{1-8} alkyl được thế hoặc không được thế, nhóm C_{1-8} alkoxycarbonyl được thế hoặc không được thế, nhóm carbamoyl được thế hoặc không được thế, nhóm sulfonyl được thế hoặc không được thế, hoặc nhóm xyano.

R^1 và R^2 có thể được nối để tạo thành vòng có từ 5 đến 8 cạnh được thế hoặc không được thế, hoặc để tạo thành $O=$, $R^aR^bC=$, hoặc $R'N=$.

Ở đây, R^a là nguyên tử hydro hoặc nhóm C_{1-8} alkyl được thế hoặc không được thế. R^b là nguyên tử hydro hoặc nhóm C_{1-8} alkyl được thế hoặc không được thế. R' là nhóm hydroxyl được thế hoặc không được thế, hoặc nhóm C_{1-8} alkyl được thế hoặc không được thế.

Nhóm C_{1-8} alkyl không được thế hoặc được thế trong R^a , R^b , và R' có thể giống như “nhóm C_{1-8} alkyl” được đưa ra làm ví dụ trong R^1 đến R^3 nêu

trên.

Nhóm hydroxyl được thế trong R' có thể giống như “nhóm hydroxyl được thế” được đưa ra làm ví dụ trong R¹ đến R³ nêu trên.

Ví dụ về vòng có 5 đến 8 cạnh không được thế hoặc được thế, mà có thể được tạo thành từ R¹ và R² được nối, bao gồm: vòng hydrocacbon béo như vòng xyclopropan, vòng xyclobutan, vòng xyclopentan, vòng xyclohexan, vòng xycloheptan, hoặc vòng xyclooctan, tốt hơn nếu là vòng C₃₋₈ xycloalkan; vòng dị vòng chưa no như vòng oxiran, vòng [1,3]dioxiran, vòng dihydro-2H-pyran, vòng dihydro-2H-thiopyran, và vòng tetrahydropyridin, tốt hơn nếu là vòng dị vòng chưa no có từ 3 đến 5 cạnh chứa oxy.

Nhóm C₆₋₁₀ aryl không được thế hoặc được thế trong R có thể giống như “nhóm C₆₋₁₀ aryl” được đưa ra làm ví dụ trong R¹ đến R³ nêu trên. Tốt hơn nếu nó là nhóm phenyl.

[R⁴]

Mỗi R⁴ độc lập là nhóm C₁₋₈ alkyl được thế hoặc không được thế, nhóm C₂₋₈ alkenyl được thế hoặc không được thế, nhóm C₂₋₈ alkynyl được thế hoặc không được thế, nhóm C₃₋₈ xycloalkyl được thế hoặc không được thế, nhóm C₄₋₈ xycloalkenyl được thế hoặc không được thế, nhóm C₆₋₁₀ aryl được thế hoặc không được thế, nhóm dị vòng được thế hoặc không được thế, nhóm C₁₋₈ axyl được thế hoặc không được thế, nhóm (1-imino)C₁₋₈ alkyl được thế hoặc không được thế, nhóm carboxyl được thế hoặc không được thế, nhóm carbamoyl được thế hoặc không được thế, nhóm hydroxyl được thế hoặc không được thế, nhóm amino được thế hoặc không được thế, nhóm mercapto được thế hoặc không được thế, nhóm sulfonyl được thế, nhóm halogeno, nhóm xyano, hoặc nhóm nitro.

Nhóm được biểu diễn bằng R⁴ có thể là giống như các ví dụ được đưa ra trong nhóm được biểu diễn bằng R¹ đến R³.

Trong công thức (I), (II) và (III), m và m₁ là số lượng R⁴ và là số nguyên nằm trong khoảng từ 0 đến 6.

R^4 tốt hơn nếu là nhóm C_{1-6} alkyl, nhóm C_{1-6} haloalkyl, nhóm C_{2-6} alkenyl, nhóm C_{3-8} xycloalkyl, nhóm hydroxyl, nhóm C_{1-6} alkoxy, hoặc nhóm halogeno.

$[R^5]$

Mỗi R^5 độc lập là nhóm C_{1-8} alkyl được thế hoặc không được thế, nhóm C_{2-8} alkenyl được thế hoặc không được thế, nhóm C_{2-8} alkynyl được thế hoặc không được thế, nhóm C_{3-8} xycloalkyl được thế hoặc không được thế, nhóm C_{4-8} xycloalkenyl được thế hoặc không được thế, nhóm C_{6-10} aryl được thế hoặc không được thế, nhóm dị vòng được thế hoặc không được thế, nhóm C_{1-8} axyl được thế hoặc không được thế, nhóm (1-imino) C_{1-8} alkyl được thế hoặc không được thế, nhóm carboxyl được thế hoặc không được thế, nhóm carbamoyl được thế hoặc không được thế, nhóm hydroxyl được thế hoặc không được thế, nhóm amino được thế hoặc không được thế, nhóm mercapto được thế hoặc không được thế, sulfonyl được thế, nhóm halogeno, nhóm xyano, hoặc nhóm nitro.

Nhóm được biểu diễn bằng R^5 có thể là giống như các ví dụ được đưa ra trong nhóm được biểu diễn bằng R^1 đến R^3 .

Trong công thức (I) và (II), n là số lượng R^5 và là số nguyên nằm trong khoảng từ 0 đến 5. Trong công thức (III), n_1 là số lượng R^5 và là số nguyên nằm trong khoảng từ 0 đến 4.

R^5 tốt hơn nếu là nhóm C_{1-6} alkyl, nhóm C_{1-6} haloalkyl, nhóm C_{6-10} aryl C_{1-6} alkyl, nhóm C_{3-8} xycloalkyl, nhóm C_{6-10} aryl, nhóm C_{1-7} axyl, nhóm C_{1-6} alkoxycarbonyl, nhóm C_{1-6} alkoxy, nhóm amino, nhóm mono C_{1-6} alkylamino, nhóm di C_{1-6} alkylamino, nhóm C_{1-6} alkoxycarbonylamino, nhóm C_{1-6} alkylthio, nhóm C_{1-6} alkylsulfonyl, nhóm halogeno, nhóm xyano hoặc nhóm nitro.

Bất kỳ một trong số R^1 đến R^3 và bất kỳ một trong số R^5 có thể được nối để tạo thành vòng có 5 đến 8 cạnh được thế hoặc không được thế.

Ví dụ về vòng có 5 đến 8 cạnh bao gồm: vòng hydrocacbon thơm như vòng benzen; vòng C_{5-8} xycloalken như vòng xyclopenten, vòng xyclopentadien, vòng xyclohexen, vòng xyclohepten, hoặc vòng xycloocten; và

các vòng tương tự.

[A, D]

Khi R là nhóm được biểu diễn bằng $CR^1R^2R^3$, A là vòng hydrocacbon có từ 5 đến 7 cạnh hoặc vòng dị vòng có từ 5 đến 7 cạnh.

Ví dụ về vòng hydrocacbon có từ 5 đến 7 cạnh bao gồm: vòng hydrocacbon thơm như vòng benzen; vòng C_{5-7} xycloalken như vòng xyclopenten, vòng xyclohexen, vòng xyclohepten; vòng dị vòng thơm có từ 5 đến 7 cạnh như vòng furan, vòng thiophen, vòng pyrol, vòng imidazol, vòng pyrazol, vòng thiazol, vòng oxazol, vòng isoxazol, vòng pyridin, vòng pyrazin, vòng pyrimidin, vòng pyridazin, vòng azepin, hoặc vòng diazepin; vòng dị vòng chưa no có từ 5 đến 7 cạnh như vòng dihydro-2H-pyran, vòng dihydro-2H-thiopyran, hoặc vòng tetrahydropyridin; và các vòng tương tự. Trong số này, vòng hydrocacbon thơm là được ưu tiên và vòng benzen được ưu tiên hơn.

Khi R là nhóm C_{6-10} aryl được thế hoặc không được thế hoặc nhóm xyano, A là vòng benzen.

Tức là, được ưu tiên nếu hợp chất theo sáng chế là hợp chất (II) hoặc (III).

D là vòng hydrocacbon có từ 5 đến 7 cạnh hoặc vòng dị vòng có từ 5 đến 7 cạnh. Ví dụ về vòng hydrocacbon có từ 5 đến 7 cạnh và vòng dị vòng có từ 5 đến 7 cạnh bao gồm các vòng giống như các ví dụ được đưa ra trên đây đối với A, và trong số này, vòng hydrocacbon thơm là được ưu tiên và vòng benzen được ưu tiên hơn.

Tức là, được ưu tiên nếu hợp chất theo sáng chế là hợp chất (III).

[X, Y, Z]

X là nguyên tử oxy, nguyên tử lưu huỳnh, nhóm sulfenyl, nhóm sulfonyl, nguyên tử cacbon được thế hoặc không được thế, hoặc nguyên tử nitơ được thế hoặc không được thế.

Ví dụ về phần tử thể của nguyên tử cacbon bao gồm nhóm oxo, nhóm C₂₋₆ alkenylamino, và nhóm hydroxyl.

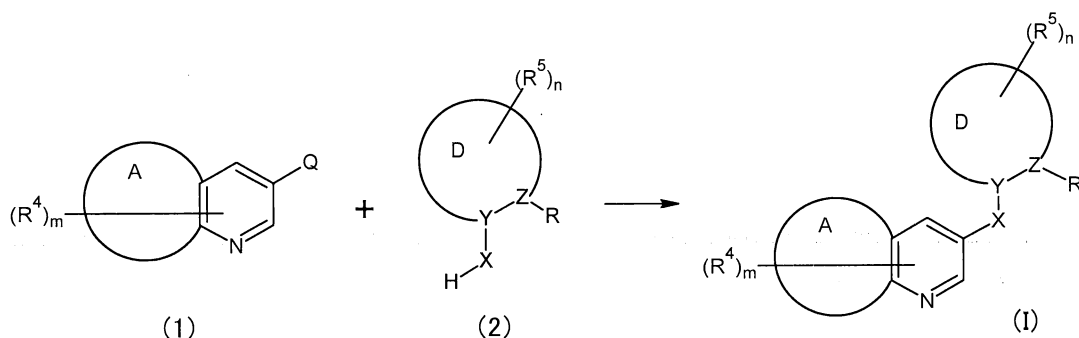
Y là nguyên tử cacbon hoặc nguyên tử nitơ. Z là nguyên tử cacbon hoặc nguyên tử nitơ. Được ưu tiên nếu Y và Z cả hai đều là các nguyên tử cacbon, và D là vòng thơm bao gồm cả Y và Z.

Muối hoặc hợp chất N-oxit theo sáng chế không bị giới hạn một cách cụ thể miễn là nó là muối chấp nhận được trong nông nghiệp hoặc hợp chất N-oxit. Ví dụ về muối này bao gồm: muối của axit vô cơ như axit clohydric hoặc axit sulfuric; muối của axit hữu cơ như axit axetic hoặc axit lactic; muối của kim loại kiềm như lithi, natri, hoặc kali; muối của kim loại kiềm thổ như canxi hoặc magie; muối của kim loại chuyển tiếp như sắt hoặc đồng; muối của bazơ hữu cơ như amoniac, trietylamin, tributylamin, pyridin, hoặc hydrazin; và các muối tương tự.

(Sản xuất hợp chất theo sáng chế)

Hợp chất theo sáng chế có thể được tạo ra theo các phương pháp tổng hợp sau.

(Phương pháp tổng hợp 1)

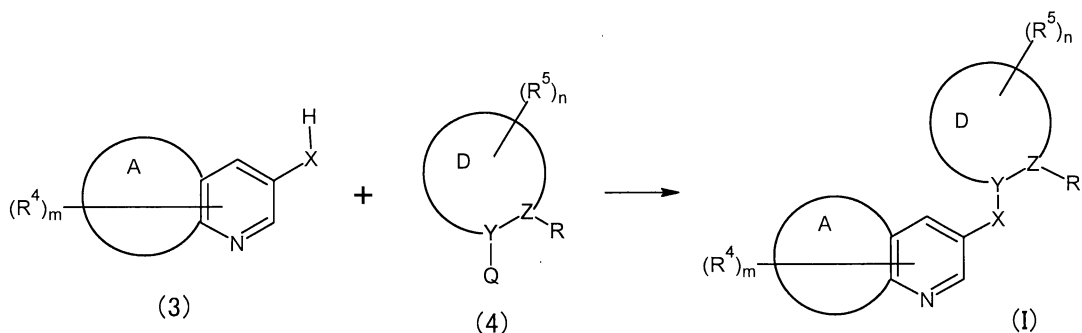


(Trong các công thức, R, R⁴, R⁵, A, D, X, Y, Z, m và n có cùng nghĩa như được mô tả ở trên. Q là nguyên tử halogen.)

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức (I) có thể được tạo ra bằng cách cho phản ứng hợp chất được biểu diễn bằng công thức (1) và hợp chất được biểu diễn bằng công thức (2) nhờ các phương pháp thông thường.

Theo sáng chế, 7,8-diflo-3-iodo-quinolin là sản phẩm trung gian hữu ích.

(Phương pháp tổng hợp 2)

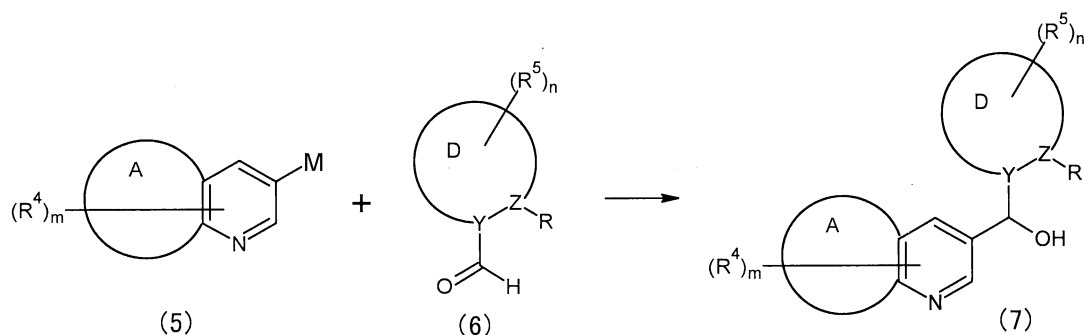


(Trong các công thức, R, R⁴, R⁵, A, D, Q, X, Y, Z, m và n có cùng nghĩa như được mô tả ở trên.)

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức (I) có thể được tạo ra bằng cách cho phản ứng hợp chất được biểu diễn bằng công thức (3) và hợp chất được biểu diễn bằng công thức (4) nhờ các phương pháp thông thường.

Theo sáng chế, 8-flo-3-hydroxyquinolin, 7,8-diflo-3-hydroxyquinolin, 8-flo-3-hydroxy-2-metylquinolin, hoặc 7,8-diflo-3-hydroxy-2-metylquinolin là sản phẩm trung gian hữu ích.

(Phương pháp tổng hợp 3)



(Trong các công thức, R, R⁴, R⁵, A, D, X, Y, Z, m và n có cùng nghĩa như được mô tả ở trên. M là lithi hoặc magie.)

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức (5) thu được bằng cách lithi hóa hoặc tạo phức magie sử dụng chất phản ứng alkyllithi hoặc chất phản ứng

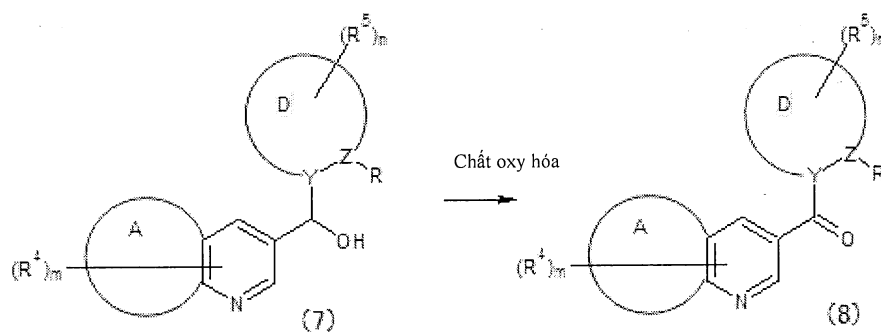
Grignard hoặc phức hợp được điều chế từ chất phản ứng alkylolithi hoặc chất phản ứng Grignard, và sau đó hợp chất được biểu diễn bằng công thức (6) được bổ sung vào đó, tạo ra hợp chất được biểu diễn bằng công thức (7).

Ví dụ về chất phản ứng alkylolithi được sử dụng trong quá trình lithi hóa gồm metyllithi, n-butyllithi, s- butyllithi, t-butyllithi, và các chất tương tự.

Ví dụ về chất phản ứng Grignard được sử dụng trong tạo phức magie bao gồm metylmagie clorua, etylmagie clorua, n-butylnmagie clorua, i-propylmagie clorua, và các chất tương tự. Ngoài ra, ví dụ, phức hợp được điều chế từ n-butylnmagie clorua và n-butyllithi có thể được sử dụng.

Dung môi được sử dụng trong quá trình lithi hóa hoặc sự tạo phức magie không bị giới hạn một cách cụ thể miễn là nó tạo thành hệ phản ứng khan mà không hòa tan hợp chất phản ứng với nó hoặc thể hiện tương tác cụ thể bất kỳ với nó. Các ví dụ thích hợp về dung môi như vậy bao gồm: dung môi gốc alkan như pentan, hexan, heptan, ISOPAR (tên thương mại đã được đăng ký) E, hoặc ISOPAR (tên thương mại đã được đăng ký) G; dung môi gốc thơm như benzen, toluen, hoặc ortho-xylene; dung môi gốc ete như dietyl ete hoặc tetrahydrofuran; và hỗn hợp của chúng. Trong số này, dung môi gốc ete như dietyl ete hoặc tetrahydrofuran là được ưu tiên. Phản ứng có thể được thực hiện trong môi trường khí nitơ và hệ khan, và được điều chế ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ -10°C đến -78°C .

(Phương pháp tổng hợp 4)

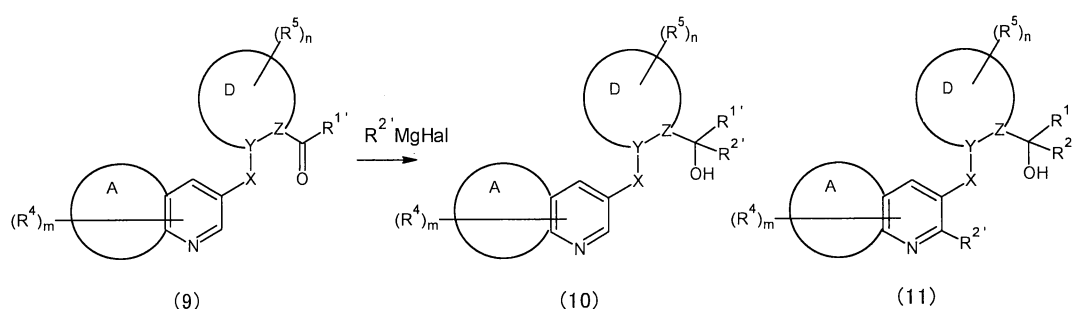


(Trong các công thức này, R, R^4 , R^5 , A, D, Y, Z, m và n có cùng nghĩa)

như được mô tả ở trên.)

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức (8) được tạo ra nhờ quá trình oxy hóa bằng cách cho chất oxy hóa phản ứng với hợp chất được biểu diễn bằng công thức (7). Phản ứng oxy hóa nêu trên có thể được thực hiện mà không có hạn chế cụ thể miễn là phản ứng này oxy hóa nhóm hydroxyl bậc hai. Ví dụ, phương pháp oxy hóa như oxy hóa Jones, oxy hóa ozon, hoặc oxy hóa Swern, hoặc sử dụng chất phản ứng oxy hóa, như mangan dioxit, hoặc chất phản ứng Dess-Martin, có thể được chấp nhận.

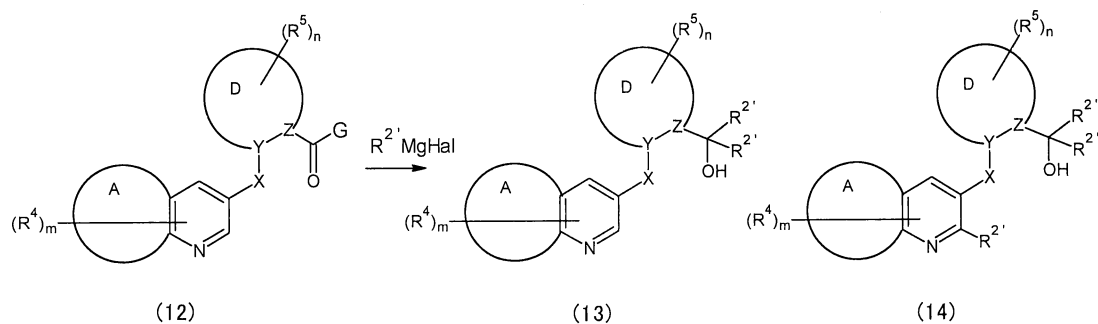
(Phương pháp tổng hợp 5)



(Trong các công thức này, R^4 , R^5 , A, D, X, Y, Z, m và n có cùng nghĩa như được mô tả ở trên. $R^{1'}$ và $R^{2'}$, trong số các R^1 đến R^3 nêu trên, là nhóm alkyl được thế hoặc không được thế, nhóm alkenyl được thế hoặc không được thế, nhóm alkynyl được thế hoặc không được thế, nhóm aryl được thế hoặc không được thế, hoặc vòng dị vòng được thế hoặc không được thế. Hal là nguyên tử halogen.)

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức (10) có thể được tạo ra bằng cách cho đương lượng của chất phản ứng Grignard phản ứng với hợp chất được biểu diễn bằng công thức (9). Tương tự, hợp chất được biểu diễn bằng công thức (11) có thể được tạo ra bằng cách cho ít nhất hai đương lượng của chất phản ứng Grignard phản ứng với hợp chất được biểu diễn bằng công thức (9).

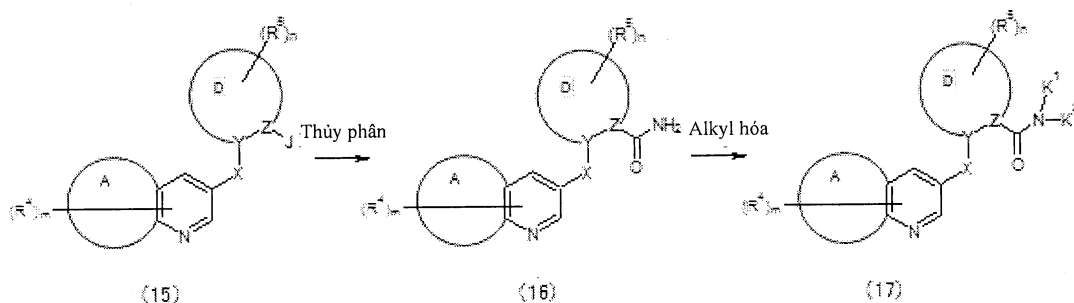
(Phương pháp tổng hợp 6)



(Trong các công thức này, R^4 , R^5 , $R^{2'}$, A, D, X, Y, Z, m, n và Hal có cùng nghĩa như được mô tả ở trên. G là nhóm rời chuyển, như nhóm alkoxy, hoặc nguyên tử halogen.)

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức (13) có thể được tạo ra bằng cách cho một đương lượng của chất phản ứng Grignard phản ứng với hợp chất được biểu diễn bằng công thức (12). Tương tự, hợp chất được biểu diễn bằng công thức (14) có thể được tạo ra bằng cách cho ít nhất hai đương lượng của chất phản ứng Grignard phản ứng với hợp chất được biểu diễn bằng công thức (12).

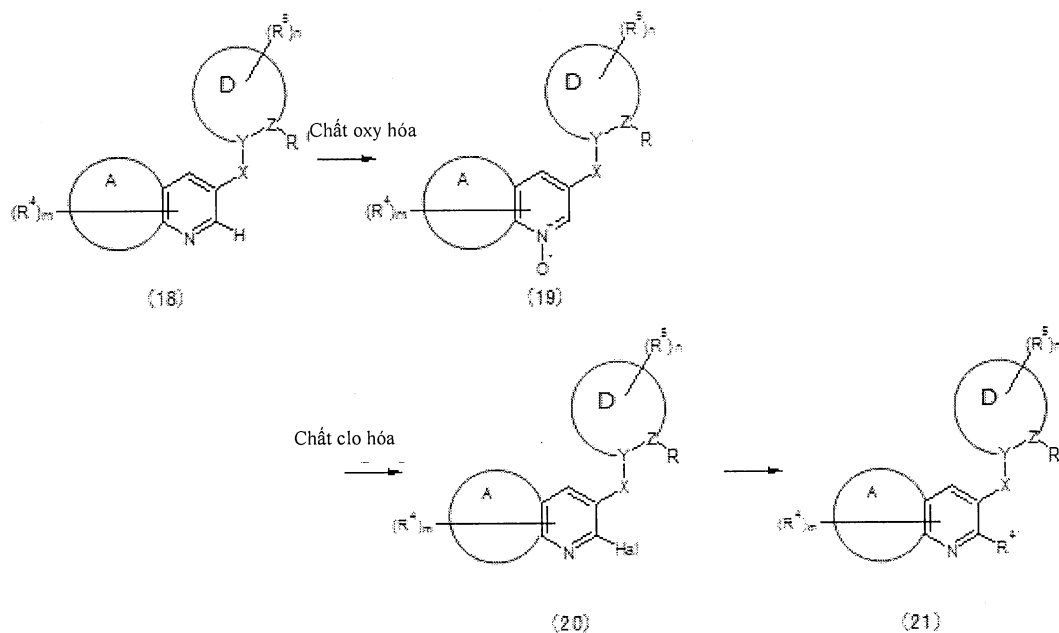
(Phương pháp tổng hợp 7)



(Trong các công thức này, R^4 , R^5 , A, D, X, Y, Z, m, và n có cùng nghĩa như được mô tả ở trên. J là nhóm alkoxy carbonyl hoặc nhóm cyano. K^1 và K^2 là nhóm alkyl.)

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức (16) có thể được tạo ra bằng cách thủy phân sử dụng các phương pháp thông thường. Ngoài ra, hợp chất được biểu diễn bằng công thức (17) có thể được tạo ra bằng cách cho phản ứng chất alkyl hóa trong điều kiện có mặt bazơ.

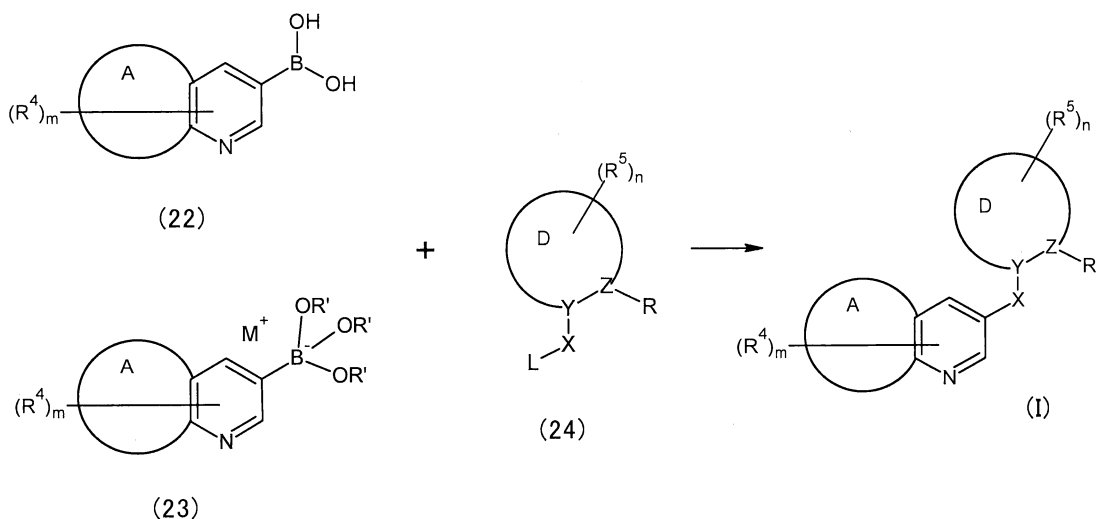
(Phương pháp tổng hợp 8)



(Trong các công thức này, R , R^4 , R^5 , A , D , X , Y , Z , m , n và Hal có cùng nghĩa như được mô tả ở trên. R^4 là nhóm alkoxy được thế hoặc không được thế, nhóm alkyl được thế hoặc không được thế, nhóm alkenyl được thế hoặc không được thế, nhóm alkynyl được thế hoặc không được thế, nhóm aryl được thế hoặc không được thế, hoặc vòng dị vòng được thế hoặc không được thế, nhóm amino được thế hoặc không được thế, hoặc nhóm thioalkyl được thế hoặc không được thế.)

Hợp chất N-oxit được biểu diễn bằng công thức (19) có thể được tạo ra bằng cách oxy hóa hợp chất được biểu diễn bằng công thức (18) sử dụng các phương pháp thông thường như sử dụng chất oxy hóa. Hợp chất được biểu diễn bằng công thức (20) có thể được tạo ra bằng cách cho chất halogen hóa thông thường như phospho oxyclohua phản ứng với hợp chất được biểu diễn bằng công thức (19). Và sau đó, hợp chất được biểu diễn bằng công thức (20) được thực hiện phản ứng thế ái nhân hoặc phản ứng liên hợp sử dụng chất xúc tác kim loại hữu cơ để tổng hợp hợp chất được biểu diễn bằng công thức (21).

(Phương pháp tổng hợp 9)



(Trong các công thức này, R, R^4 , R^5 , A, D, X, Y, Z, m, và n có cùng nghĩa như được mô tả ở trên. R' là nhóm C_{1-8} alkyl. M là kim loại kiềm như lithi, natri, hoặc kali. L là nguyên tử halogen.

Hợp chất được biểu diễn bằng công thức (I) có thể được điều chế bằng phản ứng liên hợp Suzuki của dẫn xuất axit boronic được biểu diễn bằng công thức (22) hoặc Công thức (23) và dẫn xuất halogenua được biểu diễn bằng công thức (24).

Hợp chất N-oxit có thể được điều chế bằng phản ứng oxy hóa thông thường. Ví dụ, trong dung môi hoặc trong điều kiện không có dung môi, hợp chất này có thể được điều chế bằng cách tạo ra sự tiếp xúc giữa hợp chất được biểu diễn bằng công thức (I) và peroxit như hydro peroxit.

Trong phản ứng bất kỳ, sau khi phản ứng hoàn thành, sản phẩm phản ứng được thực hiện công đoạn sau phản ứng thông thường trong hóa học tổng hợp hữu cơ, sau đó là tiến hành phân tách và tinh chế thông thường, nếu cần, để phân tách một cách hiệu quả sản phẩm mong muốn.

Cấu trúc của sản phẩm mong muốn có thể được nhận biết và xác nhận bằng cách sử dụng phổ 1H -NMR, phổ IR, hoặc phép đo phổ khối, hoặc bằng phân tích nguyên tố hoặc các cách tương tự.

2) Thuốc diệt nấm dùng trong nông nghiệp

Thuốc diệt nấm dùng trong nông nghiệp theo sáng chế chứa hoạt chất

là ít nhất một hợp chất được chọn từ nhóm bao gồm hợp chất dị vòng chứa nitơ, muối của nó, và hợp chất N-oxit của nó.

Thuốc diệt nấm theo sáng chế có khả năng diệt nấm tuyệt vời đối với nhiều loại nấm dạng sợi, như vi khuẩn thuộc nhóm nấm noãn (Oomycetes), nấm túi (Ascomycetes), nấm bất toàn (Deuteromycetes), hoặc nấm đảm (Basidiomycetes).

Thuốc diệt nấm theo sáng chế có thể được sử dụng để ngăn ngừa các bệnh khác nhau mà xuất hiện trong trồng trọt các cây nông nghiệp bao gồm cây hoa, cỏ rậm, và cỏ thông qua sự xử lý hạt, phun lá, ứng dụng cho đất hoặc ứng dụng ngâm.

Ví dụ, thuốc diệt nấm theo sáng chế có thể được sử dụng để ngăn ngừa:

cây củ cải đường: bệnh đốm lá (*Cercospora beticola*), bệnh thối rễ màu đen (*Aphanomyces cochlioides*), bệnh thối rễ (*Thanatephorus cucumeris*), bệnh thối lá (*Thanatephorus cucumeris*);

cây lạc: bệnh đốm lá màu nâu (*Mycosphaerella arachidis*), bệnh gỉ sắt màu đen (*Mycosphaerella berkeleyi*);

cây dưa chuột: bệnh mốc sương dạng bột (*Sphaerotheca fuliginea*), bệnh mốc sương như lông tơ (*Pseudoperonospora cubensis*), bệnh tàn rụi thân có nhựa dính (*Mycosphaerella melonis*), bệnh tàn héo (*Fusarium oxysporum*), bệnh thối rữa Sclerotinia (*Sclerotinia sclerotiorum*), bệnh mốc xám (*Botrytis cinerea*), bệnh loét (*Colletotrichum orbiculare*), bệnh nấm vảy (*Cladosporium cucumerinum*), bệnh đốm lá Target (*Corynespora cassicola*), chết do ngập nước (*Pythium debaryanum*, *Rhizoctonia solani* Kuhn), đốm do vi khuẩn (*Pseudomonas syringae* pv. *Lecrymans*);

cây cà chua: bệnh mốc xám (*Botrytis cinerea*), bệnh mốc lá (*Cladosporium fulvum*), bệnh thối rễ Phytophthora (*Phytophthora infestans*);

cây cà tím: bệnh mốc xám (*Botrytis cinerea*), bệnh thối rữa màu đen (*Corynespora melongenae*), bệnh mốc sương dạng bột (*Erysiphe cichoracearum*), bệnh mốc đen như bồ hóng (*Mycovellosiella nattrassii*);

cây dâu tây: bệnh mốc xám (*Botrytis cinerea*), bệnh mốc sương dạng bột (*Sphaerotheca humuli*), bệnh loét (*Colletotrichum acutatum*, *Colletotrichum fragariae*), bệnh thối rễ Phytophthora (*Phytophthora cactorum*);

cây hành: bệnh thối rửa cổ mốc xám (*Botrytis allii*), bệnh mốc xám (*Botrytis cinerea*), bệnh tàn rụi lá (*Botrytis squamosa*), bệnh mốc sương như lông tơ (*Peronospora destructor*);

cải bắp: bệnh sùi rễ (*Plasmodiophora brassicae*), bệnh mục mềm (*Erwinia carotovora*), bệnh mốc sương như lông tơ (*Peronospora parasitica*);

đậu tây: bệnh thối rửa Sclerotinia (*Sclerotinia sclerotiorum*), bệnh mốc xám (*Botrytis cinerea*);

cây táo: bệnh mốc sương dạng bột (*Podosphaera leucotricha*), bệnh nấm vảy (*Venturia inaequalis*), bệnh Monilia (*Monilinia mali*), bệnh đốm quả Brooks (*Mycosphaerella pomi*), bệnh thối mục màu nâu (*Valsa mali*), bệnh đốm Alternaria (*Alternaria mali*), bệnh gỉ sắt ở cây táo Cedar (*Gymnosporangium yamadae*), bệnh thối rửa màu trắng (*Botryosphaeria berengeriana*), bệnh loét (*Glomerella cingulata*, *Collectotrichum acutatum*), bệnh đốm Marssonina (*Diplocarpon mali*), bệnh đốm ruồi (*Zygophiala jamaicensis*), bệnh đốm đen như bồ hóng (*Gloeodes pomigena*);

cây hồng vàng: bệnh mốc sương dạng bột (*Phyllactinia kakicola*), bệnh loét (*Gloeosporium kaki*), bệnh đốm lá ở góc (*Cercospora kaki*);

cây đào: bệnh thối rửa màu nâu (*Monilinia fructicola*), bệnh nấm vảy (*Cladosporium carpophilum*), bệnh thối rửa do vi khuẩn Phomopsis (*Phomopsis sp.*);

cây anh đào: bệnh thối rửa màu nâu (*Monilinia fructicola*);

cây nho: bệnh mốc xám (*Botrytis cinerea*), bệnh mốc sương dạng bột (*Uncinula necator*), bệnh thối rửa ở quả chín (*Glomerella cingulata*, *Colletotrichum acutatum*), bệnh mốc sương như lông tơ (*Plasmopara viticola*), bệnh thối rửa giống mắt chim (*Elsinoe ampelina*), bệnh đốm lá

(*Pseudocercospora vitis*), bệnh thối rửa màu đen (*Guignardia bidwellii*);

cây lê: bệnh nấm vảy (*Venturia nashicola*), bệnh gỉ sắt ở cây táo Cedar (*Gymnosporangium asiaticum*), bệnh đốm lá (*Alternaria kikuchiana*), bệnh thối rửa màu đen (*Botryosphaeria berenengeriana*), bệnh mốc sương dạng bột (*Phyllactinia mali*);

cây chè: bệnh lở cổ rễ (*Pestalotia theae*), bệnh loét (*Colletotrichum theae-sinensis*);

cây cam quýt: bệnh nấm vảy (*Elsinoe fawcetti*), bệnh mốc xanh (*Penicillium italicum*), bệnh mốc xanh lá cây (*Penicillium digitatum*), bệnh mốc xám (*Botrytis cinerea*), Melanose (*Diaporthe citri*), bệnh thối mục do vi khuẩn (*Xanthomonas campestris* pv. *Citri*);

cây lúa mì: bệnh mốc sương dạng bột (*Erysiphe graminis* f.sp. *tritici*), Petch (*Gibberella zeae*), bệnh gỉ sắt lá (*Puccinia recondita*), bệnh mốc tuyết màu nâu (*Pythium iwayamai*), bệnh mốc tuyết màu đỏ (*Monographella nivalis*), bệnh đốm mắt màu đen (*Pseudocercospora herpotrichoides*), bệnh tàn rụi lá (*Septoria tritici*), bệnh đốm mây (*Leptosphaeria nodorum*), bệnh tàn rụi roi như tuyết Typhula (*Typhula incarnata*), bệnh tàn rụi roi như tuyết Sclerotinia (*Myriosclerotinia borealis*), bệnh thối rễ chính (*Gaeumanomyces graminis*);

cây lúa mạch: Bệnh sọc lá (*Pyrenophora graminea*), bệnh bông Rhynchosporium (*Rhynchosporium secalis*), bệnh than xốp (*Ustilago tritici*, *U.nuda*);

cây lúa: bệnh thối rửa cổ (*Pyricularia oryzae*), bệnh tàn rụi vỏ (*Rhizoctonia solani*), bệnh Bakanae (*Gibberella fujikuroi*), bệnh tàn rụi Helminthosporium (*Cochliobolus niyabeanus*), chết do ngập nước (*Pythium graminicolum*), bệnh tàn rụi do vi khuẩn (*Xanthomonas oryzae*), chết do ngập nước do vi khuẩn (*Burkholderia plantarii*), sọc màu nâu (*Acidovorax avenae*), bệnh thối rửa hạt do vi khuẩn (*Burkholderia glumae*);

cây thuốc lá: bệnh thối rửa Sclerotinia (*Sclerotinia sclerotiorum*), bệnh mốc sương dạng bột (*Erysiphe cichoracearum*);

cây tulip: bệnh mốc xám (*Botrytis cinerea*);

cỏ ống: bệnh tàn rụi rơi như tuyết *Sclerotinia* (*Sclerotinia borealis*),
bệnh tàn rụi màu nâu (*Pythium asphanidermatum*);

cỏ ở vườn cây ăn quả: bệnh mốc sương dạng bột (*Erysiphe graminis*);

cây đậu tương: bệnh đốm màu tía (*Cercospora kikuchii*), bệnh mốc sương như lông tơ (*Peronospora Manshurica*), bệnh thối rửa thân (*Phytophthora sojae*);

cây khoai tây · cây cà chua: bệnh thối rễ *Phytophthora* (*phytophthora infestans*);

hoặc các bệnh tương tự.

Ngoài ra, thuốc diệt nấm theo sáng chế cũng thể hiện tác dụng diệt nấm tuyệt vời đối với vi khuẩn có khả năng kháng. Ví dụ về vi khuẩn có khả năng kháng bao gồm: vi khuẩn gây bệnh mốc xám (*Botrytis cinerea*), vi khuẩn gây bệnh đốm nâu ở cây củ cải đường (*Cercospora beticola*), vi khuẩn gây bệnh nấm vẩy ở cây táo (*Venturia inaequalis*), vi khuẩn gây bệnh nấm vẩy ở cây lê (*Venturia nashicola*), có khả năng kháng với thuốc diệt nấm gốc benzimidazol như thiophanat-metyl, benomyl, hoặc carbendazim; vi khuẩn gây bệnh mốc xám (*Botrytis cinerea*) có khả năng kháng với thuốc diệt nấm gốc dicarboximit (như vinclozolin, procymidon, hoặc iprodion), và các vi khuẩn tương tự.

Ví dụ về bệnh trong đó việc áp dụng thuốc diệt nấm theo sáng chế được ưu tiên hơn bao gồm bệnh nấm vẩy ở cây táo, bệnh mốc xám ở cây dưa chuột, bệnh mốc sương dạng bột ở cây lúa mì, bệnh tàn rụi muện ở cây cà chua, bệnh gỉ sắt lá ở cây lúa mì, bệnh thối rửa cổ ở cây lúa, bệnh tàn héo ở cây dưa chuột, và các bệnh tương tự.

Ngoài ra, thuốc diệt nấm theo sáng chế là chất có tính gây độc thực vật thấp, tính độc thấp đối với cá hoặc động vật máu nóng, và có độ an toàn cao.

Thuốc diệt nấm theo sáng chế có thể được sử dụng ở dạng chất nhận được về mặt hóa nông, tức là, ở dạng chế phẩm hóa nông, như bột phân tán

trong nước, hạt, bột, nhũ tương, bột hòa tan trong nước, hỗn dịch, hoặc hạt phân tán được trong nước.

Ví dụ về chất phụ gia và chất mang được sử dụng trong chế phẩm của chất rắn bao gồm: bột thực vật như bột đậu tương hoặc bột lúa mì; bột khoáng mịn như diatomit, apatit, thạch cao, bột talc, bentonit, pyrophyllit, hoặc đất sét; hợp chất vô cơ hoặc hữu cơ như natri benzoat, ure, hoặc sulfat của xô-đa; và các chất tương tự.

Ví dụ về dung môi được sử dụng trong chế phẩm chứa chất lỏng bao gồm: hydrocacbon thơm như kerosen, xylen, hoặc hydrocacbon thơm gốc dầu mỏ; xyclohexan, xyclohexanon, dimetyl formamit, dimetyl sulfoxit, rượu, axeton, tricloetylen, metylisobutylketon, dầu khoáng, dầu thực vật, nước, và các chất tương tự.

Ngoài ra, trong các chế phẩm này, để đạt được dạng đồng đều và ổn định, chất hoạt động bề mặt có thể được bổ sung nếu cần.

Chất hoạt động bề mặt có thể được bổ sung không bị giới hạn một cách cụ thể. Ví dụ về chất hoạt động bề mặt bao gồm: chất hoạt động bề mặt không ion như alkylphenylete được cộng polyoxyetylen, alkylete được cộng polyoxyetylen, este của axit béo bậc cao được cộng polyoxyetylen, sorbitan este được cộng polyoxyetylen của axit béo bậc cao, tristyrilphenylete được cộng polyoxyetylen; muối este sulfuric của alkylphenylete được cộng polyoxyetylen, alkylbenzen sulfonat, muối este sulfuric của rượu bậc cao, alkylnaphtalen sulfonat, polycarboxylat, lignin sulfonat, phản ngưng formaldehyt của alkylnaphtalen sulfonat, copolyme isobutylene-axit maleic khan, và các chất tương tự.

Bột phân tán trong nước thu được theo cách như vậy, nhũ tương, chất chảy được, bột hòa tan được trong nước, hoặc hạt phân tán được trong nước được pha loãng với nước đến nồng độ đã được xác định trước và được sử dụng dưới dạng dung dịch, hỗn dịch, hoặc nhũ tương được phun lên trên lá. Ngoài ra, bột và hạt được sử dụng được phun lên trên cây dưới dạng như vậy.

Lượng thuốc diệt nấm theo sáng chế, thông thường, so với tổng lượng của chế phẩm, tốt hơn nếu nằm trong khoảng từ 0,01 đến 90% khối lượng, và tốt hơn nữa nếu nằm trong khoảng từ 0,05 đến 85% khối lượng.

Tỷ lệ áp dụng của thuốc diệt nấm theo sáng chế, mặc dù khác nhau tùy thuộc vào điều kiện thời tiết, dạng chế phẩm, thời gian áp dụng, phương pháp áp dụng, diện tích áp dụng, bệnh mục tiêu cần khống chế, hoặc cây mục tiêu, thường ở dạng lượng hợp chất hoạt chất cho mỗi 1 hecta, nằm trong khoảng từ 1 đến 1000 g, và tốt hơn nếu nằm trong khoảng từ 10 đến 100 g.

Khi bột phân tán trong nước, nhũ tương, hỗn dịch, bột hòa tan được trong nước, hoặc hạt phân tán được trong nước được pha loãng với nước, nồng độ được áp dụng nằm trong khoảng từ 1 đến 1000 ppm, và tốt hơn nếu nằm trong khoảng từ 10 đến 250 ppm.

Thuốc diệt nấm theo sáng chế có thể được trộn với các thuốc diệt nấm khác hoặc thuốc diệt côn trùng/thuốc diệt ve bét, hoặc chất hiệp đồng.

Ví dụ tiêu biểu về các thuốc diệt nấm khác, thuốc diệt côn trùng, thuốc diệt ve bét, và chất điều hòa sinh trưởng của cây mà có thể được trộn và được sử dụng với thuốc diệt nấm theo sáng chế được thể hiện dưới đây.

Thuốc diệt nấm:

dãy benzoimidazol như benomyl, carbendazim, fuberidazol, thiabendazol, hoặc thiophanat-metyl;

dãy dicarboximit như chlozolinat, iprodion, procymidon, hoặc vinclozolin;

thuốc diệt nấm DMI như imazalil, oxpoconazol, perfrazoat, prochloraz, triflumizol, triforin, pyrifenox, fenarimol, nuarimol, azaconazol, bitertanol, bromuconazol, cyproconazol, difenoconazol, diniconazol, epoxyconazol, fenbuconazol, fluquinconazol, fulsilazol, flutriafol, hexaconazol, imibenconazol, ipconazol, metconazol, myclobutanil, penconazol, propiconazol, prothioconazol, simeconazol, tebuconazol, tetraconazole, triadimefon, triadimenol, triticonazol, etaconazol, furconazol-cis, ipconazol, hoặc

imibenconazol;

dãy phenylamit như benalaxyl, furalaxyl, metalaxyl, metalaxyl-M, oxadixyl, hoặc ofurace;

dãy amin như aldimorph, dodemorph, fenpropimorph, tridemorph, fenpropidin, piperalin, hoặc spiroxamin;

dãy phosphorothiolat như EDDP, iprobenfos, pyrazophos;

dãy dithiolan như isoprothiolan;

dãy carboxamit như benodanil, boscalid, carboxin, fenfuran, flutolanil, furametpyr, mepronil, oxycarboxin, penthiopyrad, hoặc thifluzamit;

hydroxy-(2-amino)pyrimidin như bupurimat, dimethirimol, hoặc ethirimol;

thuốc diệt nấm AP (anilinopyrimidin) như cyprodinil, mepanipyrim, hoặc pyrimethanil;

N-phenylcarbamate như diethofencarb; thuốc diệt nấm QoI (Chất ức chế Qo) như azoxystrobin, picoxystrobin, pyraclostrobin, kresoxim-metyl, trifloxystrobin, dimoxystrobin, metominostrobin, orysastrobin, famoxadone, fluoxastrobin, fenamidone, metominofen, pyribencarb;

thuốc diệt nấm PP (phenylpyrol) như fenpiconyl, fludioxonil;

dãy quinolin như quinoxifen;

thuốc diệt nấm AH (hydrocacbon thơm) như biphenyl, cloneb, dicloran, quintozen, tecnazen, hoặc tolktfos-metyl;

MBI-R như phtalua, pyroquilon, hoặc tricyclazol;

MBI-D như carpropamid, diclocymet, hoặc fenoxanil;

Chất SBI như fenhexamid, pyributicarb, hoặc terbinafin;

phenylure như pencycuron;

thuốc diệt nấm QiI (chất ức chế Qi) như cyazofamid;

benzamid như zoxamid;

enopyranuron như blastixidin, mildiomyxin;

hexopyranosyl như kasugamyxin;

glucopyranoxyl như streptomycin, validamyxin;

xyanoaxetamid như cymoxanil;

carbamat như propamocarb, prothiocarb, hoặc polycarbamat;

chất khử cặp đôi như binapacryl, dinocap, ferimzon, hoặc fluazinam;

hợp chất hữu cơ-thiếc như triphenyl thiếc axetat, triphenyl thiếc clorua, hoặc triphenyl thiếc hydroxit;

phosphat hữu cơ như axit phosphoric, tolclofos-metyl, hoặc fosetyl;

axit phthalamic như techlofthalam;

benzotriazin như triazoxit;

benzensulfonamid như flusulfamid;

pyridazinon như diclomezin;

thuốc diệt nấm CAA (amid của axit carboxylic) như dimethomorph, flumorph, benthiavalicarb, iprovalicarb, hoặc mandipropamid;

tetracyclin như oxytetracyclin;

thiocarbamat như methasulfocarb; hoặc

các hợp chất khác như etridiazol, polyoxin, axit oxolinic, hydroxyisoxazol, oclthinolin, silthiofam, diflumetorim, acibenzolar-S-metyl, probenazol, tiadinil, ethaboxam, cyflufenamid, proquinazid, metrafenon, fluopicolit, đồng(II) hydroxit, đồng hữu cơ, lưu huỳnh, ferbam, manzeb, maneb, metiram, propineb, thiuram, zineb, ziram, captan, captafol, folpet, clothalonil, dichlofluanid, tolylfluanid, dodin, guazatin, iminoctadin, anilazin, dithianon, clopicrin, dazomet, metam-natri, chinomethionat, cyprofuram, silthiofam, agro-bacterium, hoặc floimit.

Thuốc diệt côn trùng · thuốc diệt ve bét:

thuốc diệt côn trùng dây phospho hữu cơ và carbamat:

fenthion, fenitrothion, diazinon, chlorpyrifos, ESP, vamidothion, phenthoat, dimethoat, formothion, malathon, trichlorhon, thiometon, phosmet, dichlorvos, axephat, EPBP, metyl parathion, oxydemeton-metyl, ethion, salithion, xyanophos, isoxathion, pyridaphenthion, phosalon, methidathion, sulprofos, chlorfenvinphos, tetrachlorvinphos, dimetylvinhos, propaphos, isofenphos, etylthiometon, profenofos, pyraclofos, monocrotophos, Azinphos-metyl, aldicarb, methomyl, thiodicarb, carbofuran, carbosulfan, benfuracarb, furathiocarb, propoxur, BPMC, MTMC, MIPC, carbaryl, pirimicarb, ethiofencarb, fenoxycarb, EDDP hoặc các chất tương tự.

thuốc diệt côn trùng dây pyrethroid:

permethrin, cypermethrin, Deltamethrin, fenvalerat, fenpropathrin, pyrethrin, allethrin, tetramethrin, resmethrin, dimethrin, propathrin, phenothrin, prothrin, fluvalinat, cyfluthrin, cyhalothrin, flucythrinate, ethofenprox, cycloprothrin, tralomethrin, silafluofen, brofenprox, acrinathrin hoặc các chất tương tự.

Các thuốc diệt côn trùng khác của dãy benzoyl ure:

chất hóa nông diệt vi khuẩn như diflubenzuron, chlorfluazuron, hexaflumuron, triflumuron, tetrabenzuron, flufenoxuron, fluxyclozuron, buprofezin, pyriproxyfen, methopren, benzoepin, diafenthiuron, axetamiprid, imidacloprid, nitenpyram, fipronil, cartap, thiocyclam, bensultap, nicotin sulfat, rotenon, metaldehyt, dầu máy, BT, virus gây bệnh cho côn trùng, hoặc các chất tương tự.

Thuốc diệt giun tròn:

Fenamiphos, fosthiazat hoặc các chất tương tự.

Thuốc diệt ve bét:

clobenzilat, phenisobromlat, dicofol, amitraz, BPPS, benzomat,

hexythiazox, fenbutatin oxit, polynactin, chinomethionat, CPCBS, tetradifon, avermectin, milbemectin, clofentezin, cyhexatin, pyridaben, fenpyroximat, tebufenpyrad, pyrimidifen, phenothiocarb, dienochlor hoặc các chất tương tự.

Chất điều hòa sinh trưởng của cây:

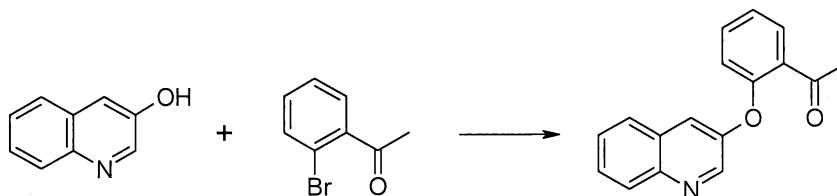
axit abscisic, axit indolebutyric, uniconazol, etylchlozat, ethephon, cloxyfonac, chlormequat, chất chiết rong tiêu câu, canxi peroxit, xyanamit, dichlorprop, gibberellin, daminozit, rượu dexyl, trinexapac-etyl, mepiquat clorua, paclobutrazol, paraffin, sáp, piperonyl butoxit, pyraflufen-etyl, flurprimidol, prohydrojasmon, prohexadion-canxi, benzylaminopurin, pendimethalin, forchlorfenuron, maleic hydrazit kali, 1-naphtylaxetamit, 4-CPA, MCPB, corrin, oxyquinolin sulfat, ethychlozat, butralin, 1-metylxcyclopropen, aviglyxin hydroclorua.

Ví dụ thực hiện sáng chế

Sau đây, sáng chế được mô tả chi tiết hơn dựa vào các ví dụ, tuy nhiên, sáng chế không bị giới hạn ở các ví dụ sau.

Ví dụ 1

Tổng hợp 1-[2-(quinolin-3-yloxy)-phenyl]-etanon

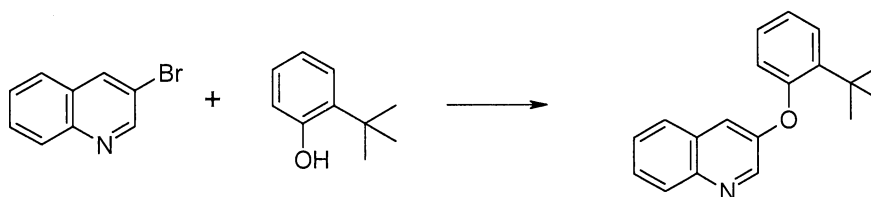


0,73 g 3-quinolinol, 1,8 g xesi cacbonat, 0,18 g dipivaloylmetan, 2,0 g 2-bromaxetophenon, và 0,50 g đồng(I) clorua được hòa tan trong 10 ml N-metylpyrrolidon, và hỗn hợp được khuấy trong 3 giờ ở nhiệt độ 130°C. Sản phẩm thu được được tinh chế bằng sắc ký cột silicagel, và thu được 0,82 g 1-[2-(quinolin-3-yloxy)-phenyl]-etanon (Hợp chất số 1).

Hợp chất được biểu diễn bằng hợp chất số 2 đến 13 được tổng hợp theo cách giống như của ví dụ 1.

Ví dụ 2

Tổng hợp 3-(2-t-butyl-phenoxy)-quinolin

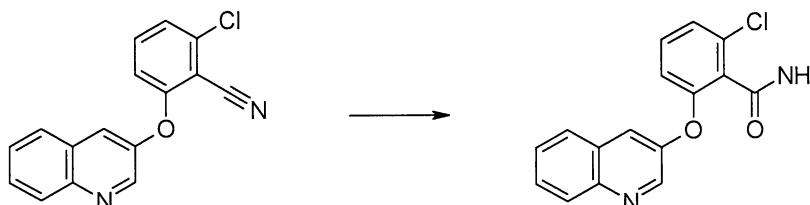


0,60 g 2-t-butylphenol, 1,3 g xesi cacbonat, 0,07 g dipivaloylmetan, 0,42 g 3-bromquinolin, và 0,20 g đồng(I) clorua được hòa tan trong 4 ml N-metylpyrrolidon, và hỗn hợp được khuấy trong một ngày ở nhiệt độ 130°C. Sản phẩm thu được được tinh chế bằng sắc ký cột silicagel, và thu được 0,04 g 3-(2-t-butyl-phenoxy)-quinolin (Hợp chất số 14).

Hợp chất được biểu diễn bằng hợp chất số 15 đến 19 được tổng hợp theo cách giống như của ví dụ 2.

Ví dụ 3

Tổng hợp 2-clo-6-(quinolin-3-yloxy)-benzamid

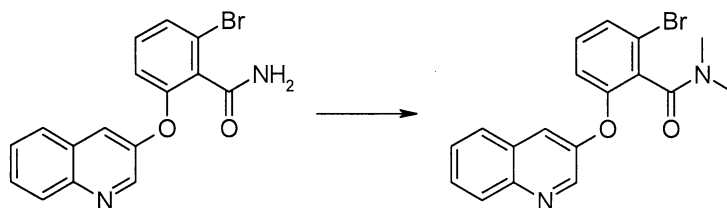


1,18 g 2-clo-6-(quinolin-3-yloxy)-benzonitril được hòa tan trong 5 ml axit sulfuric nồng độ 80% và hỗn hợp được khuấy trong 3 giờ ở nhiệt độ 100°C. Sau khi được trung hòa bằng dung dịch nước chứa natri hydroxit, chất lỏng được tách riêng bằng etyl axetat, lớp hữu cơ được cô và thu được 1,03 g 2-clo-6-(quinolin-3-yloxy)-benzamid (Hợp chất số 20).

Hợp chất được biểu diễn bằng hợp chất số 21 được tổng hợp theo cách giống như của ví dụ 3.

Ví dụ 4

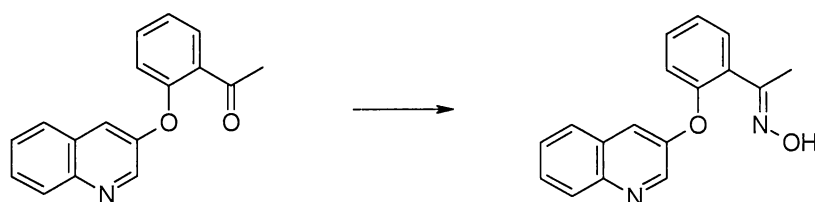
Tổng hợp 2-brom-N,N-dimetyl-6-(quinolin-3-yloxy)-benzamid



Sau khi 0,34 g 2-brom-6-(quinolin-3-yloxy)-benzamid được hòa tan trong 2 ml N-metylpyrrolidon, 47 mg natri hydrua được bổ sung vào đó ở nhiệt độ trong phòng. Sau khi 0,21 g metyl ioduua được bổ sung vào dung dịch phản ứng, hỗn hợp được gia nhiệt đến nhiệt độ 100°C và khuấy trong 4 giờ. Sau khi chất lỏng được tách riêng bằng etyl axetat, dung môi được làm bay hơi và sản phẩm thu được được tinh chế bằng sắc ký cột silicagel để thu được 0,11 g 2-brom-N,N-dimetyl-6-(quinolin-3-yloxy)-benzamid (Hợp chất số 22).

Ví dụ 5

Tổng hợp 1-[2-(quinolin-3-yloxy)-phenyl]-etanon oxim

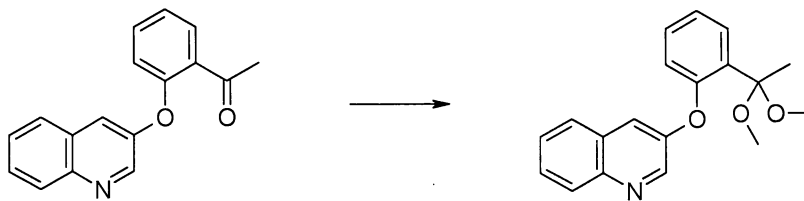


0,46 g 1-[2-(quinolin-3-yloxy)-phenyl]-etanon và 0,15 g hydroxylamin hydroclorua được hòa tan trong 3 ml pyridin và sau đó hỗn hợp được khuấy trong 24 giờ ở nhiệt độ trong phòng. Sau khi hỗn hợp phản ứng được xử lý bằng axit clohydric loãng và được tách riêng bằng etyl axetat, lớp hữu cơ được cô để thu được 0,54 g 1-[2-(quinolin-3-yloxy)-phenyl]-etanon oxim (Hợp chất số 23).

Hợp chất được biểu diễn bằng hợp chất số 24 đến 26 được tổng hợp theo cách giống như của ví dụ 5.

Ví dụ 6

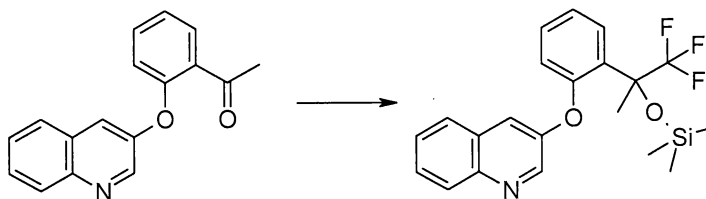
Tổng hợp 3-[2-(1,1-dimetoxy-etyl)-phenoxy]-quinolin



Sau khi 0,13 g 1-[2-(quinolin-3-yloxy)-phenyl]-etanon và 0,06 g trimetyl orthoformat được hòa tan trong 1,5 ml metanol, 0,02 g tetrabutylamoni tribromua được bổ sung và hỗn hợp được khuấy trong 4 ngày ở nhiệt độ trong phòng. Hỗn hợp phản ứng được cô và sau đó được tinh chế bằng sắc ký cột silicagel để thu được 0,08 g 3-[2-(1,1-dimethoxy-etyl)-phenoxy]-quinolin (Hợp chất số 27).

Ví dụ 7

Tổng hợp 3-[2-(2,2,2-triflo-1-metyl-1-trimetylsilanyloxy-etyl)-phenoxy]-quinolin

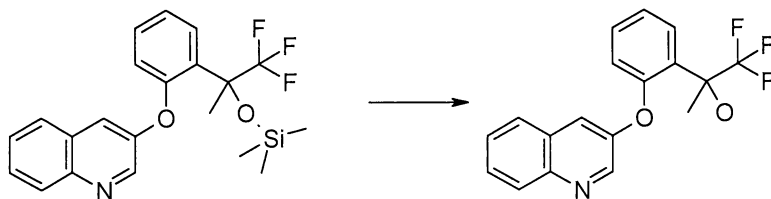


Sau khi 0,26 g 1-[2-(quinolin-3-yloxy)-phenyl]-etanon và 0,16 g (triflometyl)trimetylsilan được hòa tan trong 3 ml tetrahydrofuran, 2 giọt tetrabutylamoni florua (dung dịch tetrahydrofuran nồng độ 0,1 M) được bổ sung dưới điều kiện làm lạnh bằng đá và sau đó được khuấy trong 4 giờ. Sau đó, hỗn hợp phản ứng được cô và được tinh chế bằng sắc ký cột silicagel để thu được 0,34 g 3-[2-(2,2,2-triflo-1-metyl-1-trimetylsilanyloxy-etyl)-phenoxy]-quinolin.

(Hợp chất số 28).

Ví dụ 8

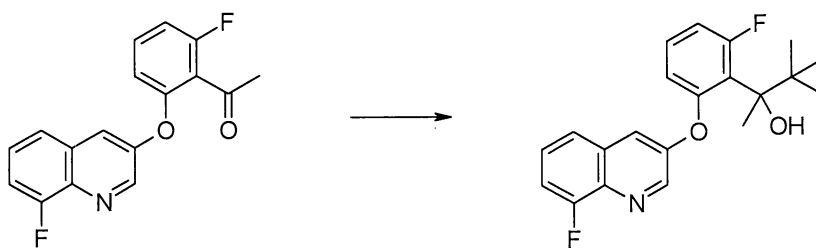
Tổng hợp 1,1,1-triflo-2-[2-(quinolin-3-yloxy)-phenyl]-propan-2-ol



Sau khi 0,17 g 3-[2-(2,2,2-triflo-1-metyl-1-trimetylsilanyloxy-ethyl)-phenoxy]-quinolin được hòa tan trong 1,5 ml tetrahydrofuran, 1 ml tetrabutylamoni florua (dung dịch tetrahydrofuran nồng độ 0,1 M) được bổ sung và hỗn hợp được khuấy trong 16 giờ. Hỗn hợp phản ứng được cô và sau đó được tinh chế bằng sắc ký cột silicagel để thu được 0,11 g 1,1,1-triflo-2-[2-(quinolin-3-yloxy)-phenyl]-propan-2-ol (Hợp chất số 29).

Ví dụ 9

Tổng hợp 2-[2-flo-6-(8-flo-quinolin-3-yloxy)-phenyl]-3,3-dimetyl-butanol

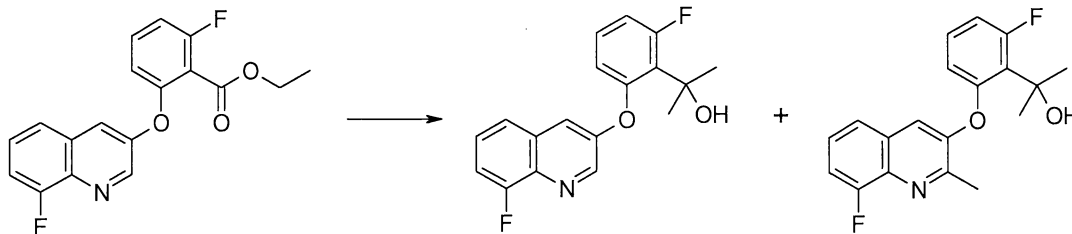


Sau khi 0,15 g 1-[2-flo-6-(8-flo-quinolin-3-yloxy)-phenyl]-etanon được hòa tan trong 1,5 ml tetrahydrofuran, và sau đó dung dịch được làm lạnh xuống nhiệt độ -78°C , 0,3 ml t-butylmagie clorua (dung dịch dietyl ete nồng độ 2,0 M) được bổ sung từng giọt. Sau khi nhiệt độ phản ứng được tăng đến nhiệt độ trong phòng, dung dịch phản ứng được xử lý bằng axit clohydric loãng, và sau đó chất lỏng được tách riêng bằng etyl axetat. Lớp hữu cơ được cô và sau đó được tinh chế bằng sắc ký cột silicagel để thu được 0,04 g 2-[2-flo-6-(8-flo-quinolin-3-yloxy)-phenyl]-3,3-dimetylbutan-2-ol (Hợp chất số 30).

Hợp chất được biểu diễn bằng hợp chất số 31 đến 35 được tổng hợp theo cách giống như của ví dụ 9.

Ví dụ 10

Tổng hợp 2-[2-flo-6-(8-floquinolin-3-yloxy)phenyl]propan-2-ol và 2-[2-flo-6-(8-flo-2-metylquinolin-3-yloxy)phenyl]propan-2-ol



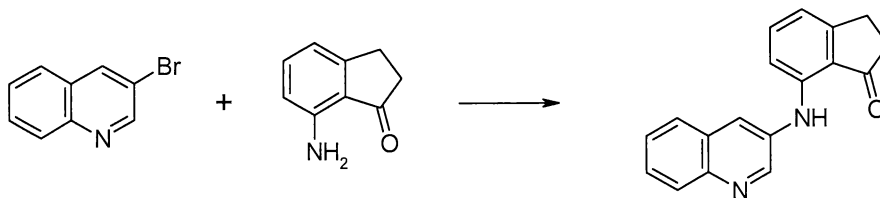
Sau khi 0,3 g etyl este của axit 2-flo-6-(8-floquinolin-3-yloxy)-benzoic được hòa tan trong 4,5 ml tetrahydrofuran, dung dịch được làm lạnh xuống nhiệt độ -78°C , và 0,77 ml metylmagie clorua (dung dịch dietyl ete nồng độ 3,0 M) được bổ sung từng giọt. Sau khi nhiệt độ phản ứng được tăng đến nhiệt độ trong phòng, dung dịch phản ứng được xử lý bằng axit clohydric loãng và chất lỏng được tách riêng bằng etyl axetat. Lớp hữu cơ được cô và sau đó được tinh chế bằng sắc ký cột silicagel để thu được 0,12 g 2-[2-flo-6-(8-floquinolin-3-yloxy)phenyl]propan-2-ol (Hợp chất số 36) và 0,05 g 2-[2-flo-6-(8-flo-2-metylquinolin-3-yloxy)phenyl]propan-2-ol

(Hợp chất số 37).

Hợp chất được biểu diễn bằng hợp chất số 38 đến 49 được tổng hợp theo cách giống như của ví dụ 10.

Ví dụ 11

Tổng hợp 7-(quinolin-3-ylamino)-indan-1-on



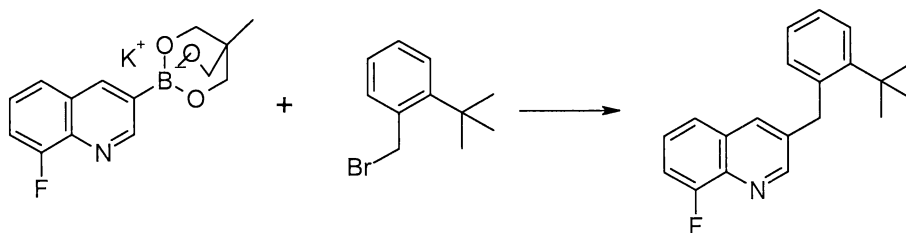
0,43 g 3-bromquinolin, 0,29 g 7-aminoindan-1-on, 0,08 g đồng(I) iotua, 0,41 g kali cacbonat, và 4 ml N-metylpyrrolidon được trộn, và sau đó hỗn hợp

được khuấy trong 2 giờ ở nhiệt độ 200°C. Hỗn hợp thu được được tinh chế bằng sắc ký cột silicagel để thu được 0,15 g 7-(quinolin-3-ylamino)-indan-1-on (Hợp chất số 50).

Hợp chất được biểu diễn bằng hợp chất số 51 được tổng hợp theo cách giống như của ví dụ 11.

Ví dụ 12

Tổng hợp 3-(t-butyl-benzyl)-8-floquinolin

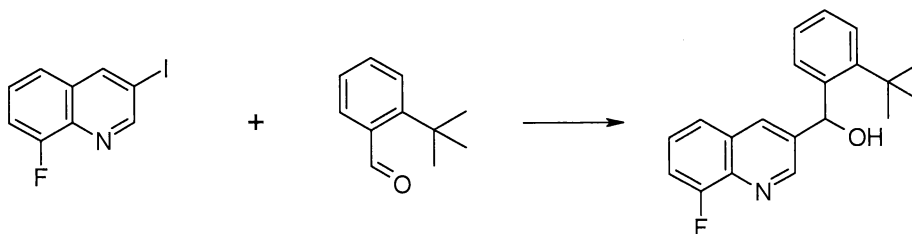


Sau khi hòa tan 0,69 g muối triol thu được từ axit 8-floquinolin-3-boric và 1,1,1-tris(hydroxymetyl)etan bằng phương pháp nêu trong tài liệu (Angew. Chem. Int. Ed., 2008, 47, 928-931) và 0,45 g 1-brommetyl-2-t-butylbenzen trong 10 ml toluen, bổ sung 0,46 g tetrakis triphenylphosphin paladi và hỗn hợp được khuấy trong 3 giờ. Sau khi làm bay hơi dung môi của hỗn hợp phản ứng, sản phẩm thu được được tinh chế bằng sắc ký cột silicagel để thu được 0,14 g 3-(t-butyl-benzyl)-8-floquinolin (Hợp chất số 52).

Hợp chất được biểu diễn bằng hợp chất số 53 được tổng hợp theo cách giống như của ví dụ 12.

Ví dụ 13

Tổng hợp (2-t-butyl-phenyl)-(8-flo-quinolin-3-yl)-metanol

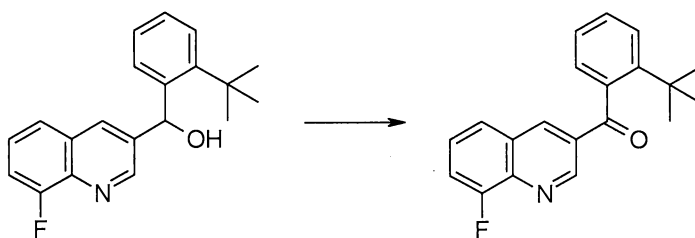


Sau khi làm lạnh 3 ml tetrahydrofuran xuống nhiệt độ -10°C , bổ sung 0,91 ml n-butyllithi (dung dịch hexan nồng độ 2,6 M) và 1,35 ml n-butyilmagie clorua (dung dịch tetrahydrofuran nồng độ 0,91 M). Sau khi khuấy 30 phút, bổ sung 0,98 g 8-flo-3-iodoquinolin và khuấy hỗn hợp trong 15 phút. 0,49 g 2-t-butylbenzaldehyt được bổ sung vào dung dịch phản ứng và hỗn hợp được khuấy trong 3 giờ. Sau khi bổ sung axit clohydric loãng vào hỗn hợp phản ứng, chất lỏng được tách riêng bằng etyl axetat. Sau khi cô lớp hữu cơ và tinh chế bằng sắc ký cột silicagel, thu được 0,55 g (2-t-butyl-phenyl)-(8-flo-quinolin-3-yl)-metanol (Hợp chất số 54).

Hợp chất được biểu diễn bằng hợp chất số 55 đến 56 được tổng hợp theo cách giống như của ví dụ 13.

Ví dụ 14

Tổng hợp (2-t-butyl-phenyl)-(8-flo-quinolin-3-yl)-metanon



Sau khi hòa tan 0,32 g (2-t-butyl-phenyl)-(8-flo-quinolin-3-yl)-metanol trong 3 ml diclometan, bổ sung 0,51 g chất phản ứng Dess-Martin và khuấy hỗn hợp trong 1 giờ ở nhiệt độ trong phòng. Sau đó, nước được bổ sung và chất lỏng được tách riêng bằng etyl axetat, lớp hữu cơ được cô và được tinh chế bằng sắc ký cột silicagel để thu được 0,21 g (2-t-butyl-phenyl)-(8-flo-quinolin-3-yl)-metanon (Hợp chất số 57).

Hợp chất được biểu diễn bằng hợp chất số 58 đến 59 được tổng hợp theo cách giống như của ví dụ 14.

Ví dụ 15

Tổng hợp 2-clo-3-(1,1-dimetylindan-7-yloxy) quinolin

Hòa tan 0,2 g 3-(1,1-dimetylindan-7-yloxy) quinolon trong 5 mL

cloroform, và bổ sung 0,2 g m-CPBA (70%) và khuấy qua đêm ở nhiệt độ trong phòng. Sau khi hỗn hợp phản ứng được pha loãng bằng cloroform và được rửa bằng nước natri bicacbonat bão hòa, magie sulfat được bổ sung để làm khô sản phẩm thu được. Dung môi được làm bay hơi dưới áp suất giảm để thu được 0,2 g 3-(1,1-dimetylinđan-7-yloxy) quinolin-N-oxit.

Sản phẩm thu được được hòa tan trong phospho oxyclorua và được gia nhiệt dưới điều kiện hồi lưu trong 4 giờ. Phospho oxyclorua được làm bay hơi dưới áp suất giảm và phần cặn được hòa tan trong etyl axetat và được rửa bằng nước natri bicacbonat bão hòa. Lớp hữu cơ được làm khô bằng magie sulfat và được làm bay hơi dưới áp suất giảm. Sản phẩm thô thu được được tinh chế bằng sắc ký cột silicagel, và thu được 0,13 g 2-clo-3-(1,1-dimetylinđan-7-yloxy) quinolin (Hợp chất số 60).

Hợp chất được biểu diễn bằng hợp chất số 61 được tổng hợp theo cách giống như của ví dụ 15.

Ví dụ 16

Tổng hợp 3-(2-xyanophenoxy)quinolin

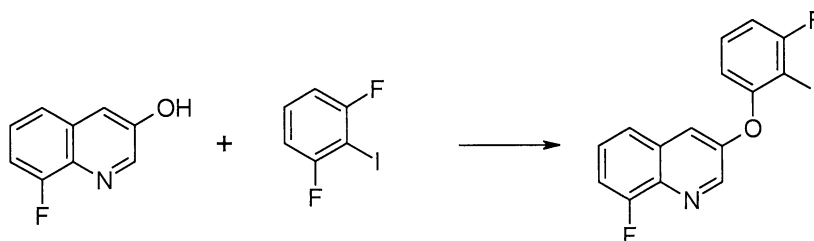
Sau khi hòa tan 0,27 g 3-hydroxyquinolin trong N-metyl-2-pyrrolidon, 0,087 g natri hydrua (thể phân tán dầu 60%) được bổ sung dưới điều kiện làm lạnh bằng đá, và hỗn hợp được khuấy trong 30 phút. Ở cùng nhiệt độ, 0,27 g 2-flobenzonitril được bổ sung và sau đó hỗn hợp được khuấy trong 6 giờ ở nhiệt độ trong phòng. Sau khi hỗn hợp phản ứng được rót vào nước đá, được chiết bằng etyl axetat, và được rửa bằng dung dịch nước muối bão hòa, sản phẩm thu được được làm khô bằng magie sulfat. Sau khi dung môi được làm bay hơi dưới áp suất giảm, sản phẩm thô được tinh chế bằng sắc ký cột silicagel để thu được 0,37 g 3-(2-xyanophenoxy)quinolin (Hợp chất số 62).

Hợp chất được biểu diễn bằng hợp chất số 63 đến 66 được tổng hợp theo cách giống như của ví dụ 16.

Ví dụ 17

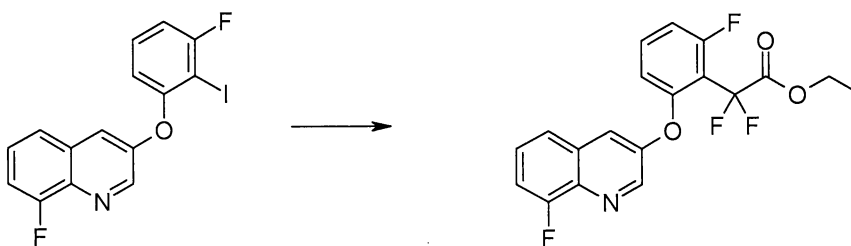
Tổng hợp diflo-[2-flo-6-(8-floquinolin-3-yloxy)-etyl axetat

Bước 1) Tổng hợp 8-flo-3-(3-flo-2-iodophenoxy)-quinolin



16 ml N-metylpyrrolidon được bổ sung vào 1,06 g 8-flo-3-hydroxyquinolin, 1,94 g 2,6-difloiodobenzen, và 1,7 g kali cacbonat, và hỗn hợp được khuấy trong 24 giờ ở nhiệt độ 130°C. Dung dịch phản ứng được tinh chế bằng sắc ký cột silicagel, và thu được 0,55 g 8-flo-3-(3-flo-2-iodophenoxy)-quinolin.

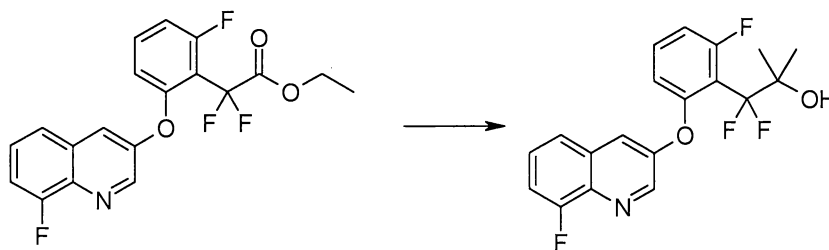
Bước 2) Tổng hợp diflo-[2-flo-6-(8-floquinolin-3-yloxy)-etyl axetat



Sau khi hòa tan 0,4 g 8-flo-3-(3-flo-2-iodophenoxy)-quinolin trong 4 ml dimetylsulfoxit, bổ sung 0,25 g đồng (bột) và 0,41 g bromdifloetyl axetat vào đó, và sau đó khuấy hỗn hợp trong 24 giờ ở nhiệt độ 40°C. Dung dịch phản ứng được tinh chế bằng sắc ký cột silicagel, và thu được 0,27 g diflo-[2-flo-6-(8-floquinolin-3-yloxy)-etyl axetat (Hợp chất số 292).

Ví dụ 18

Tổng hợp 1,1-diflo-1-[2-flo-6-(8-floquinolin-3-yloxy)-phenyl]-2-metyl-propan-2-ol

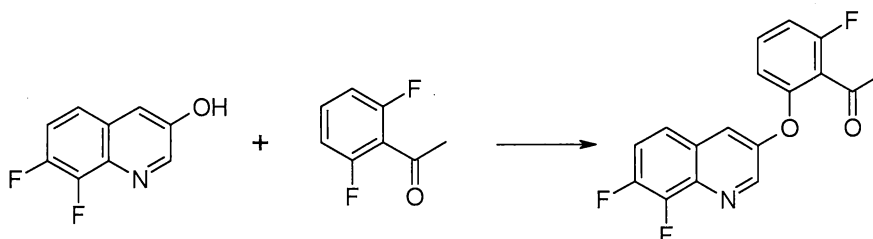


0,18 g diflo-[2-flo-6-(8-floquinolin-3-yloxy)-etyl axetat được hòa tan trong 3 ml tetrahydrofuran và 0,4 ml metylmagie clorua (dung dịch tetrahydrofuran nồng độ 3,0 M) được bổ sung từng giọt ở nhiệt độ 0°C. Sau khi hỗn hợp được khuấy trong 2 giờ ở nhiệt độ 0°C, axit clohydric loãng được bổ sung, và chất lỏng được tách riêng bằng etyl axetat. Lớp hữu cơ được cô và được tinh chế bằng sắc ký cột silicagel để thu được 0,10 g 1,1-diflo-1-[2-flo-6-(8-floquinolin-3-yloxy)-phenyl]-2-metyl-propan-2-ol

(Hợp chất số 293).

Ví dụ 19

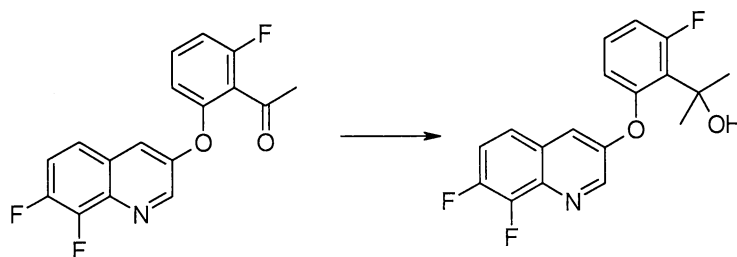
Tổng hợp 1-[2-(7,8-difloquinolin-3-yloxy)-6-flo-phenyl]etanon



Sau khi 0,91 g 7,8-diflo-3-hydroxyquinolin và 0,94 g 2,6-difloaxetophenon được hòa tan trong 10 ml dimetylformamit, 0,9 g kali cacbonat được bổ sung. Dung dịch phản ứng được gia nhiệt đến nhiệt độ 100°C và hỗn hợp được khuấy trong 4,5 giờ. Axit clohydric loãng được bổ sung vào dung dịch phản ứng và dung dịch được tách riêng bằng etyl axetat. Lớp hữu cơ được cô và được tinh chế bằng sắc ký cột silicagel để thu được 0,64 g 1-[2-(7,8-difloquinolin-3-yloxy)-6-flo-phenyl]-etanon (Hợp chất số 391).

Ví dụ 20

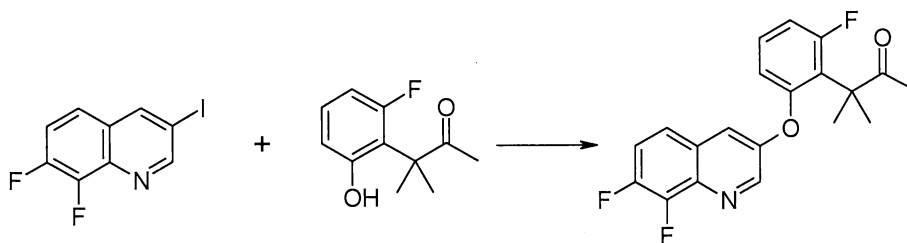
Tổng hợp 2-[2-(7,8-difloquinolin-3-yloxy)-6-flo-phenyl]-propan-2-ol



Sau khi 0,64 g 1-[2-(7,8-difloquinolin-3-yloxy)-6-flo-phenyl]-etanon được hòa tan trong 10 ml tetrahydrofuran, sản phẩm thu được được làm lạnh xuống nhiệt độ 0°C và 1,5 ml metylmagie clorua (dung dịch tetrahydrofuran nồng độ 3,0 M) được bổ sung từng giọt. Axit clohydric loãng được bổ sung vào dung dịch phản ứng, và chất lỏng được tách riêng bằng etyl axetat. Lớp hữu cơ được cô và được tinh chế bằng sắc ký cột silicagel để thu được 0,49 g 2-[2-(7,8-difloquinolin-3-yloxy)-6-flo-phenyl]-propan-2-ol (Hợp chất số 124).

Ví dụ 21

Tổng hợp 3-[2-(7,8-difloquinolin-3-yloxy)-6-flo-phenyl]-3-metyl-butan-2-on

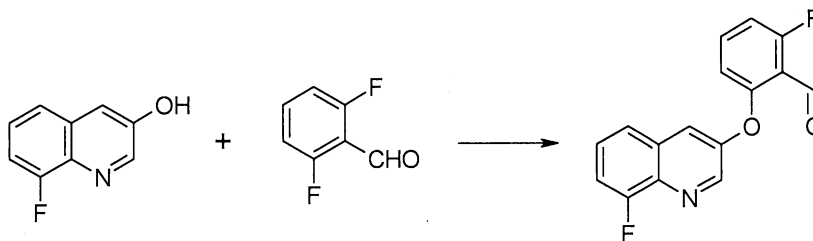


3 ml N-metylpyrrolidon được bổ sung vào 0,78 g 7,8-diflo-3-iodoquinolin, 0,26 g 3-(2-flo-6-hydroxyphenyl)-3-metyl-butan-2-on, 1,05 g xesi cacbonat, 53 mg dipivaloylmetan, và 0,27 g đồng(I) clorua. Sau 48 giờ khuấy ở nhiệt độ 130°C, dung dịch phản ứng được lọc bằng CELITE và chất lỏng được tách riêng bằng etyl axetat. Lớp hữu cơ được cô và được tinh chế bằng sắc ký cột silicagel để thu được 0,05 g 3-[2-(7,8-difloquinolin-3-yloxy)-6-flo-phenyl]-3-metyl-butan-2-on

(Hợp chất số 267).

Ví dụ 22

Tổng hợp 2-flo-6-(8-floquinolin-3-yloxy)-benzaldehyt

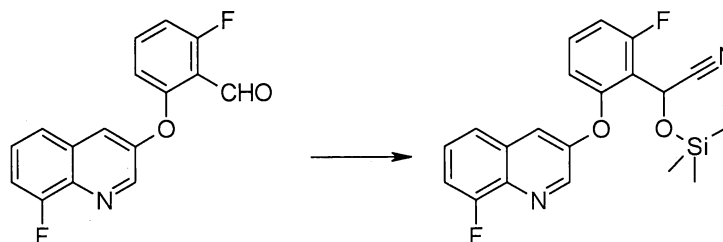


Sau khi 30 ml axetonitril được bổ sung vào 3,0 g 8-flo-3-hydroxyquinolin, 3,1 g kali cacbonat và 3,5 g 2,6-difloaxetophenon được bổ sung. Sau khi dung dịch phản ứng được gia nhiệt dưới điều kiện hồi lưu trong 3 giờ, dung dịch phản ứng được lọc bằng CELITE. Sau khi phần dịch lọc được chiết bằng etyl axetat, lớp hữu cơ được cô và được tinh chế bằng sắc ký cột silicagel để thu được 3,0 g 2-flo-6-(8-floquinolin-3-yloxy)-benzaldehyt (Hợp chất số 341).

Ví dụ 23

Tổng hợp 1-[2-flo-6-(8-floquinolin-3-yloxy)-phenyl]-propan-1,2-dion

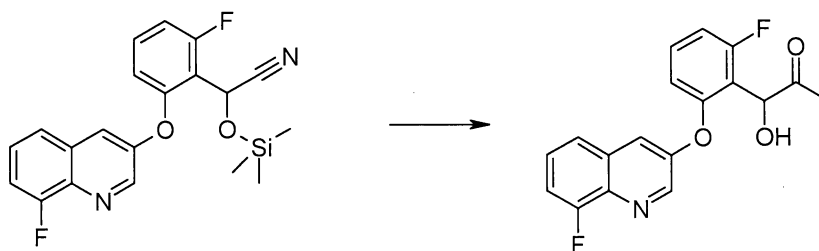
Bước 1) Tổng hợp [2-flo-6-(8-floquinolin-3-yloxy)-phenyl]-trimetylsilyloxy-axetonitril



Sau khi 3,2 g 2-flo-6-(8-floquinolin-3-yloxy)-benzaldehyt được hòa tan trong 70 ml diclometan và sản phẩm thu được được làm lạnh xuống nhiệt độ 0°C, 1,3 g titan tetraisopropoxit được bổ sung. Sau khi dung dịch phản ứng được làm ấm đến nhiệt độ trong phòng, 4,5 g trimetylsilyl xyanua được bổ sung vào đó, và hỗn hợp được khuấy trong 2 giờ. Axit clohydric loãng được bổ sung vào dung dịch phản ứng và dung dịch được chiết bằng diclometan. Lớp

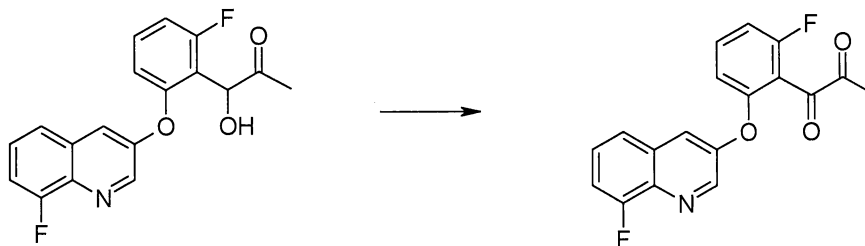
hữu cơ được cô và được tinh chế bằng sắc ký cột silicagel để thu được 3,1 g [2-flo-6-(8-floquinolin-3-yloxy)-phenyl]-trimetylsilyloxy-axetonitril (độ tinh khiết khoảng 90%).

Bước 2) Tổng hợp 1-[2-flo-6-(8-floquinolin-3-yloxy)-phenyl]-1-hydroxy-propan-2-on



3,3 g [2-flo-6-(8-floquinolin-3-yloxy)-phenyl]-trimetylsilyloxy-axetonitril (độ tinh khiết khoảng 90%) được hòa tan trong 50 ml dietyl ete và 5,7 ml metylmagie bromua (dung dịch dietyl ete nồng độ 3,0 M) được bổ sung từng giọt ở nhiệt độ trong phòng. Sau khi hỗn hợp được khuấy trong 1 giờ ở nhiệt độ trong phòng, sản phẩm thu được được gia nhiệt dưới điều kiện hồi lưu trong 3 giờ, và sau đó được xử lý bằng axit clohydric loãng. Sản phẩm thu được được chiết bằng etyl axetat, và sau đó lớp hữu cơ được cô để thu được 3,9 g sản phẩm thô. 20 ml axit clohydric nồng độ 2N và 10 ml tetrahydrofuran được bổ sung vào 1,9 g sản phẩm thô và hỗn hợp được khuấy trong 4 giờ ở nhiệt độ trong phòng. Dung dịch phản ứng được chiết bằng etyl axetat và sau đó được tinh chế bằng sắc ký cột silicagel để thu được 0,4 g 1-[2-flo-6-(8-floquinolin-3-yloxy)-phenyl]-1-hydroxy-propan-2-on.

Bước 3) Tổng hợp 1-[2-flo-6-(8-floquinolin-3-yloxy)-phenyl]-propan-1,2-dion

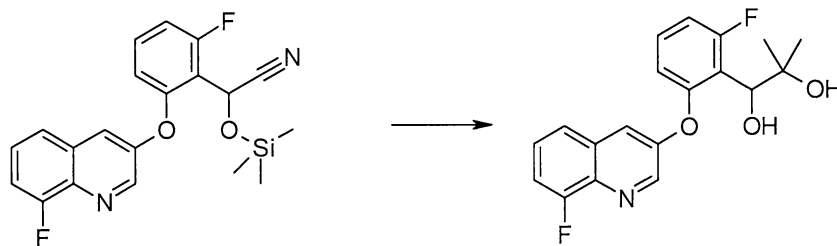


Sau khi 0,14 g 1-[2-flo-6-(8-floquinolin-3-yloxy)-phenyl]-1-hydroxy-propan-2-on được hòa tan trong 10 ml diclometan, 0,91 g chất phản ứng Dess-Martin được bổ sung vào đó ở nhiệt độ 0°C. Sau khi khuấy 3 giờ, dung dịch phản ứng được cô và được tinh chế bằng sắc ký cột silicagel để thu được 0,08 g 1-[2-flo-6-(8-floquinolin-3-yloxy)-phenyl]-propan-1,2-dion (Hợp chất số 396).

Ví dụ 24

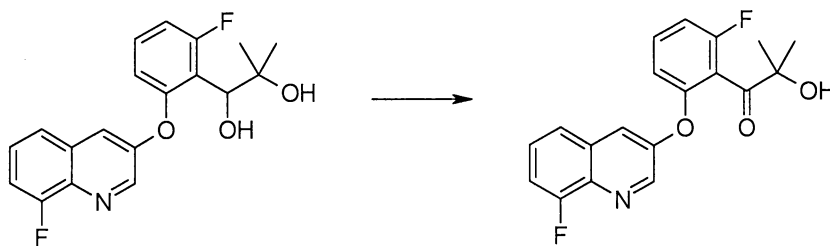
Tổng hợp 1-[2-flo-6-(8-floquinolin-3-yloxy)-phenyl]-2-hydroxy-2-metyl-propan-1-on

Bước 1) Tổng hợp 1-[2-flo-6-(8-floquinolin-3-yloxy)-phenyl]-2-hydroxy-2-metyl-propan-1,2-diol



3,3 g [2-flo-6-(8-floquinolin-3-yloxy)-phenyl]-trimethylsilyloxy-axetonitril được hòa tan trong 50 ml dietyl ete và 5,7 ml metylmagie bromua (dung dịch dietyl ete nồng độ 3,0 M) được bổ sung từng giọt ở nhiệt độ trong phòng. Sau khi hỗn hợp được khuấy trong 1 giờ ở nhiệt độ trong phòng, sản phẩm thu được được gia nhiệt dưới điều kiện hồi lưu trong 3 giờ, và sau đó được xử lý bằng axit clohydric loãng. Sản phẩm thu được được chiết bằng etyl axetat và sau đó lớp hữu cơ được cô để thu được 3,9 g sản phẩm thô. 1,9 g sản phẩm thô được hòa tan trong 20 ml tetrahydrofuran và 3,2 ml metylmagie bromua (dung dịch dietyl ete nồng độ 3,0 M) được bổ sung từng giọt ở nhiệt độ 0°C. Sau khi khuấy 3 giờ ở nhiệt độ 0°C, 20 ml axit clohydric nồng độ 2N được bổ sung và hỗn hợp được khuấy trong một ngày ở nhiệt độ trong phòng. Dung dịch phản ứng được chiết bằng etyl axetat và được tinh chế bằng sắc ký cột silicagel để thu được 0,25 g 1-[2-flo-6-(8-floquinolin-3-yloxy)-phenyl]-2-metyl-propan-1,2-diol dưới dạng sản phẩm thô.

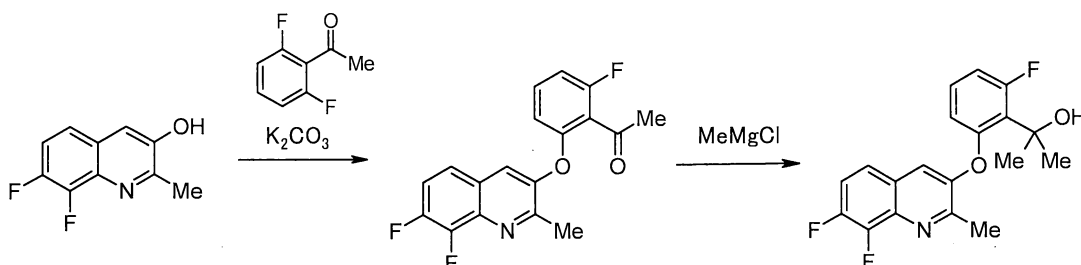
Bước 2) Tổng hợp 1-[2-flo-6-(8-floquinolin-3-yloxy)-phenyl]-2-hydroxy-2-metyl-propan-1-on



0,15 g 1-[2-flo-6-(8-floquinolin-3-yloxy)-phenyl]-2-metyl-propan-1,2-diol được hòa tan trong 10 ml diclometan, và 0,20 g chất phản ứng Dess-Martin được bổ sung vào đó ở nhiệt độ 0°C. Sau khi khuấy 2 giờ, dung dịch phản ứng được cô và được tinh chế bằng sắc ký cột silicagel để thu được 0,03 g 1-[2-flo-6-(8-floquinolin-3-yloxy)-phenyl]-2-hydroxy-2-metyl-propan-1-on (Hợp chất số 398).

Ví dụ 25

Tổng hợp 2-[2-flo-6-(7,8-diflo-2-metylquinolin-3-yloxy)phenyl]propan-2-ol

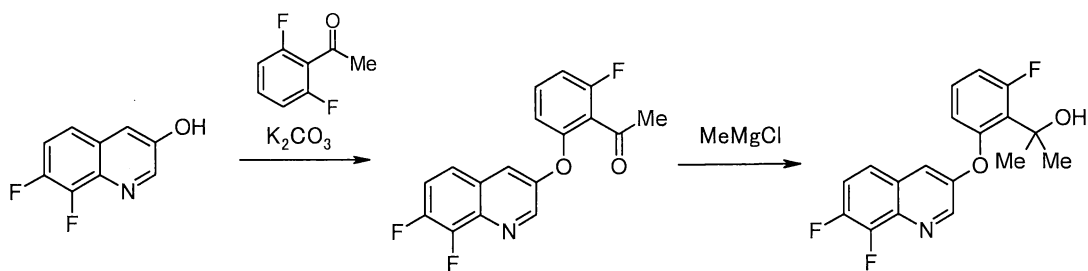


26,3 g 7,8-diflo-3-hydroxy-2-metylquinolin được hòa tan trong 200 mL dimetylformamit. 27,2 g 2,6-difloaxetophenon và 24,0 g kali cacbonat được bổ sung vào dung dịch và hỗn hợp được khuấy trong 4 giờ ở nhiệt độ 100°C. Sau khi dung dịch phản ứng thu được theo cách như vậy được rót vào nước đá, và được trung hòa bằng axit clohydric loãng, chất lỏng được tách riêng bằng etyl axetat. Lớp hữu cơ được cô và được tinh chế bằng sắc ký cột silicagel để thu được 17,0 g 1-[2-flo-6-(7,8-diflo-2-metylquinolin-3-yloxy)-phenyl]-etanon.

Sau khi 11,0 g 1-[2-fluoro-6-(7,8-difluoro-2-methylquinolin-3-yloxy)-phenyl]-etanon thu được được hòa tan trong 80 ml tetrahydrofuran và được làm lạnh xuống nhiệt độ 0°C, 16,6 ml metylmagie clorua (dung dịch tetrahydrofuran nồng độ 3,0 M) được bổ sung từng giọt. Sau khi sản phẩm thu được được làm ấm đến nhiệt độ trong phòng và được khuấy trong 2 giờ, dung dịch phản ứng được xử lý bằng axit clohydric loãng và chất lỏng được tách riêng bằng etyl axetat. Lớp hữu cơ được cô và được tinh chế bằng sắc ký cột silicagel để thu được 10,0 g 2-[2-fluoro-6-(7,8-difluoro-2-methylquinolin-3-yloxy)phenyl]propan-2-ol (Hợp chất số 125).

Ví dụ 26

Tổng hợp 2-[2-fluoro-6-(7,8-difluoroquinolin-3-yloxy)phenyl]propan-2-ol



0,5 g 7,8-difluoro-3-hydroxyquinolin được hòa tan trong 10 ml dimetylformamit. 0,52 g 2,6-difluoaxetophenon và 0,46 g kali cacbonat được bổ sung vào dung dịch, và hỗn hợp được khuấy trong 2,5 giờ ở nhiệt độ 100°C. Dung dịch phản ứng thu được theo cách như vậy được rót vào nước đá và sau đó được trung hòa bằng axit clohydric loãng, chất lỏng được tách riêng bằng etyl axetat. Lớp hữu cơ được cô và được tinh chế bằng sắc ký cột silicagel để thu được 0,38 g 1-[2-fluoro-6-(7,8-difluoquinolin-3-yloxy)-phenyl]-etanon (Hợp chất số 391).

Sau khi 0,38 g 1-[2-fluoro-6-(7,8-difluoquinolin-3-yloxy)-phenyl]-etanon thu được được hòa tan trong 5 ml tetrahydrofuran và được làm lạnh xuống nhiệt độ 0°C, 1,4 ml metylmagie bromua (dung dịch dietyl ete nồng độ 3,0 M) được bổ sung từng giọt. Sau khi sản phẩm thu được được làm ấm đến nhiệt độ

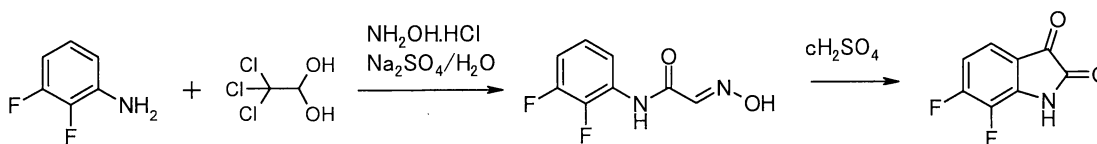
trong phòng và được khuấy trong 2 giờ, dung dịch phản ứng được xử lý bằng axit clohydric loãng và chất lỏng được tách riêng bằng etyl axetat. Lớp hữu cơ được cô và được tinh chế bằng sắc ký cột silicagel để thu được 0,33 g 2-[2-flo-6-(7,8-difloquinolin-3-yloxy)phenyl] propan-2-ol (Hợp chất số 124).

Sau đây, sản phẩm trung gian theo sáng chế được mô tả chi tiết hơn có dựa vào các ví dụ, tuy nhiên, sản phẩm trung gian theo sáng chế không bị giới hạn bởi các ví dụ này.

Ví dụ 27

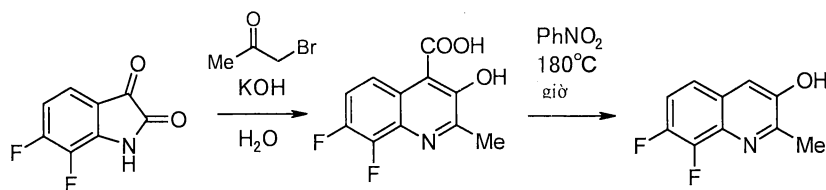
Tổng hợp 7,8-diflo-3-hydroxy-2-metylquinolin

Bước 1) Tổng hợp 6,7-difloisatin



Sau khi 15,7 g 2,3-difloanilin được bổ sung vào 825 mL nước, và sau đó 24,2 g tricloaxetaldehyt 1-hydrat, 30,8 g hydroxylamin hydroclorua, 138,6 g natri sulfat khan được bổ sung vào đó, hỗn hợp được khuấy trong 10 giờ ở nhiệt độ 50°C. Sau khi sản phẩm thu được được làm lạnh xuống nhiệt độ trong phòng, 44 mL axit clohydric nồng độ 2N được bổ sung, và sau đó được khuấy trong 30 phút, sau đó thu gom tinh thể bằng cách lọc. Sau khi tinh thể thu được theo cách như vậy được làm khô, và sau đó được bổ sung vào axit sulfuric đặc đã được gia nhiệt đến nhiệt độ 70°C, hỗn hợp được khuấy trong 1 giờ ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ 80 đến 90°C. Dung dịch phản ứng được rót vào đá, sau đó là chiết bằng etyl axetat, và sau đó rửa bằng dung dịch nước muối bão hòa. Sau khi lớp hữu cơ được làm khô bằng magie sulfat, dung môi được làm bay hơi dưới áp suất giảm để thu được 26 g sản phẩm thô 6,7-difloisatin.

Bước 2) Tổng hợp 7,8-diflo-3-hydroxy-2-metylquinolin



Sau khi 41 g sản phẩm thô 6,7-difloisatin được bổ sung vào 200 mL nước, 75,3 g kali hydroxit (6 đương lượng) được bổ sung vào đó dưới điều kiện làm lạnh bằng đá và hỗn hợp được khuấy trong 30 phút. 42 g bromaxetophenon (1,4 đương lượng) được bổ sung từng giọt vào hỗn dịch trong khi duy trì nhiệt độ bên trong của dung dịch phản ứng nằm trong khoảng từ 20 đến 25°C, và hỗn hợp được khuấy tiếp qua đêm ở nhiệt độ trong phòng. Sau khi sản phẩm thu được được trung hòa bằng axit clohydric đặc, tinh thể đã kết tủa được thu gom bằng cách lọc và được rửa bằng lượng nhỏ nước. Tinh thể thu được theo cách như vậy được làm khô đầy đủ, và sau đó được bổ sung ít một vào 100 mL nitrobenzen đã được gia nhiệt đến nhiệt độ nằm trong khoảng từ 130 đến 140°C, và hỗn hợp được khuấy tiếp trong 1 giờ ở nhiệt độ 150°C. Sau khi dung dịch phản ứng được làm lạnh xuống nhiệt độ trong phòng, tinh thể đã kết tủa được rửa bằng cloroform để thu được 26,3 g 7,8-diflo-3-hydroxy -2-metylquinolin.

^1H NMR (300 MHz, DMSO- d_6) δ 2,57 (s, 3H), 7,4 đến 7,7 (m, 3H), 10,60 (bs, 1H).

Hợp chất sau được tạo ra bằng cách sử dụng phương pháp giống như nêu trên.

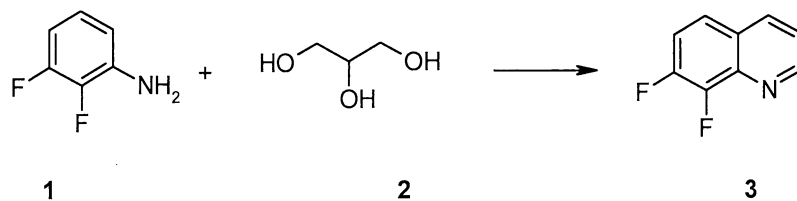
8-flo-3-hydroxy-2-metylquinolin

^1H NMR (300 MHz, DMSO- d_6) δ 2,56 (s, 3H), 7,2 đến 7,6 (m, 4H), 10,53 (bs, 1H).

Ví dụ 28

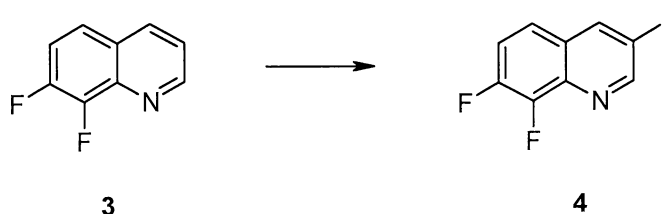
Tổng hợp 7,8-diflo-3-hydroxyquinolin

Bước 1) Tổng hợp 7,8-difloquinolin



Trong bình có hình quả cà tím dung tích 3 L chứa thanh khuấy, axit sulfuric nồng độ 80% (607,7 g, 49,57 mol) được đưa vào và được làm lạnh xuống nhiệt độ 0°C, và sau đó 2,3-difloanilin (160,0 g, 1,24 mol) được bổ sung từ từ. Sau khi bổ sung, hỗn hợp được khuấy trong 1 giờ ở nhiệt độ trong phòng, natri iđua (1,85 g, 12,3 mmol) được bổ sung tiếp vào đó, và sau đó hỗn hợp được gia nhiệt trong bể dầu cho đến khi nhiệt độ của nó đạt đến 150°C (nhiệt độ của bể). Khi nó đạt đến nhiệt độ này, glyxerin (125,5 g, 1,36 mol) được bổ sung từng giọt trong khoảng thời gian một giờ, và hỗn hợp được khuấy trong 1 giờ ở nhiệt độ 150°C. Nhiệt độ của bể được nâng tiếp đến 180°C, và nước được làm bay hơi trong khoảng thời gian 2 giờ sử dụng thiết bị chưng cất. Sau khi xác nhận rằng nguyên liệu ban đầu đã biến mất, hỗn hợp được trung hòa bằng cách sử dụng natri hydroxit trong nước nồng độ 10N trong khi làm lạnh bằng bể nước đá (nhiệt độ bên trong nằm trong khoảng từ 60 đến 70°C). Sau khi trung hòa, trước khi nhiệt độ bên trong quay trở lại nhiệt độ trong phòng, sản phẩm thu được được chiết bằng etyl axetat, và dịch chiết được làm khô bằng magie sulfat, được lọc, và cô. Sản phẩm thô thu được theo cách như vậy được tinh chế bằng sắc ký cột silicagel (hexan bình thường: etyl axetat) để thu được 185,5 g 7,8-difloquinolin (91%) dưới dạng chất rắn màu nâu đỏ.

Bước 2) Tổng hợp 7,8-diflo-3-iodoquinolin

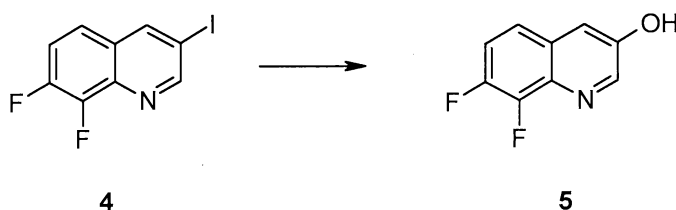


Trong bình có hình quả cà tím dung tích 3 L chứa thanh khuấy, 7,8-difloquinolin (185,5 g, 1,12 mol), N-iodosucinimit (505,4 g, 2,25 mol), và

axit axetic (927 mL) được bổ sung và hỗn hợp được khuấy trong 30 giờ ở nhiệt độ 90°C. Sau khi làm lạnh, tinh thể đã kết tủa được lọc và được làm khô. Mặt khác, phần dịch lọc được cô dưới áp suất giảm, axit axetic còn dư được trung hòa bằng natri hydro cacbonat, và sản phẩm thu được được chiết bằng etyl axetat. Ngoài ra, sau khi phần dịch lọc được làm khô bằng magie sulfat, được lọc và cô, sản phẩm thô thu được theo cách như vậy được tinh chế bằng sắc ký cột silicagel (hexan bình thường: etyl axetat) để thu được 227,2 g (70%), 7,8-diflo-3-iodoquinolin thu được dưới dạng chất rắn màu nâu đỏ được kết hợp với tinh thể thu được trước đây.

$^1\text{H-NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) δ 7,39 đến 7,51 (m, 2H), 8,55 (m, 1H), 9,08 (d, 1H, $J = 2,1$ Hz).

Bước 3) Tổng hợp 7,8-diflo-3-hydroxyquinolin



Trong bình có hình quả cà tím dung tích 3 L chứa thanh khuấy, 7,8-diflo-3-iodoquinolin (227,2 g, 0,78 mol), dimetylsulfoxit (600 mL), và nước (600 mL) được bổ sung và natri hydroxit (131,5 g, 2,34 mol), CuI (14,8 g, 0,078 mol), và 1,10-phenanthrolin (28,1 g, 0,156 mol) được bổ sung. Hỗn hợp được gia nhiệt tiếp đến nhiệt độ 100°C trong bể dầu và được khuấy trong 24 giờ. Sau khi làm lạnh, lớp hữu cơ được loại bỏ bằng cách bổ sung etyl axetat và nước. Lớp nước thu được theo cách như vậy được trung hòa bằng axit clohydric đặc, và sau đó tinh thể đã kết tủa được lọc và được làm khô. Mặt khác, sau khi phần dịch lọc được chiết bằng etyl axetat, được làm khô bằng magie sulfat, được lọc và được cô, sản phẩm thô thu được được tinh chế bằng sắc ký cột silicagel (hexan bình thường: etyl axetat) để thu được 133,7 g (95%) 7,8-diflo-3-hydroxyquinolin dưới dạng chất rắn màu nâu đỏ được kết hợp với tinh thể thu được trước đây.

$^1\text{H-NMR}$ (300 MHz, CD_3OD) δ 7,39 đến 7,60 (m, 3H), 8,59 (d, 1H, $J = 2,4$ Hz).

Hợp chất sau được tạo ra bằng cách sử dụng phương pháp giống như nêu trên.

8-flo-3-hydroxyquinolin

$^1\text{H-NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) δ 7,16 (m, 1H) δ 7,34 đến 7,49 (m, 3H), 8,71 (d, 1H, $J = 2,7$ Hz), 9,90 (bs, 1H).

Hợp chất dị vòng chứa nitơ thu được từ các ví dụ nêu trên được thể hiện trong các bảng từ 1 đến 19. Ngoài ra, hợp chất được tổng hợp theo cách giống như ví dụ bất kỳ trong số các ví dụ nêu trên được thể hiện tiếp trong bảng 20 đến bảng 28. Ngoài ra, Et là nhóm etyl, ^nPr là nhóm n-propyl, ^iPr là nhóm i-propyl, ^cPr là nhóm xyclopropyl, ^nBu là nhóm n-butyl, ^tBu là nhóm t-butyl, Ph là nhóm phenyl, Bn là nhóm benzyl, và Tos là nhóm toluen sulfonyl. $^1\text{H-NMR}$ của các hợp chất trong mỗi bảng cũng được thể hiện trong bảng 29 đến bảng 41.

Bảng 2

Hợp chất số	(R ⁴) _m	R ¹	R ²	R ³	R ^b	R ^c	R ^d	E	X-	Tính chất vật lý
17	-	-CH ₃	-CH ₃	-Et	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
18	8-F	-CH ₃	-CH ₃	-Et	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
19	8-F	-CH ₃	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ -		H	H	CH	-O-	104-106
20	-	=O		-NH ₂	Cl	H	H	CH	-O-	168-188
21	-	=O		-NH ₂	Br	H	H	CH	-O-	204-206
22	-	=O		-N(CH ₂) ₂	Br	H	H	CH	-O-	vô định hình
23	-	=N-OH		-CH ₃	H	H	H	CH	-O-	125-126
24	-	=N-OCH ₃		-CH ₃	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
25	-	=N-O ^t Bu		-CH ₃	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
26	8-F	=N-OH		-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	171-173
27	-	-OCH ₃	-CH ₃	-OCH ₃	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
28	-	-OSi(CH ₃) ₃	-CH ₃	-CF ₃	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
29	-	-OH	-CH ₃	-CF ₃	H	H	H	CH	-O-	158-160
30	8-F	-OH	-CH ₃	- ^t Bu	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
31	-	-OH	-CH ₃	- ^t Bu	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
32	-	-OH	-CH ₃	-Et	H	H	H	CH	-O-	129-131
33	8-F	-OH	-CH ₃	-Et	H	H	H	CH	-O-	122-124
34	8-F	-OH	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ -		H	H	CH	-O-	vô định hình
35	8-F	-OH	- ^t Bu	-(CH ₂) ₂ -		H	H	CH	-O-	vô định hình
36	8-F	-OH	-CH ₃	-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
37	2-CH ₃ , 8-F	-OH	-CH ₃	-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
38	-	-OH	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
39	2- ^t Bu	=O		-H	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
40	-	-OH	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	CF	-O-	vô định hình
41	-	-OH	-CH ₃	-CH ₃	H	H	F	CH	-O-	vô định hình
42	-	-OH	-CH ₃	-CH ₃	H	F	H	CH	-O-	vô định hình

Bảng 3

Hợp chất số	(R ⁴) _m	R ¹	R ²	R ³	R ^b	R ^c	R ^d	E	-X-	Tính chất vật lý
43	-	-OH	-CH ₃	-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
44	8-F	-OH	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	CH	-O-	128-130
45	-	-OH	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	N	-O-	146-147
46	2-Et	-OH	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
47	2 ⁿ Bu	-OH	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
48	8-F	-OH	-CH ₃	-Et	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
49	8-Cl	-OH	-CH ₃	-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
50	-	=O		-(CH ₂) ₂ -		H	H	CH	-NH-	130-132
51	-	=O		-Ph	H	H	H	CH	-NH-	: vô định hình
52	8-F	-CH ₃	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	CH	-CH ₂ -	108-111
53	8-F	=O		-OEt	F	H	H	CH	-CH ₂ -	: vô định hình
54	8-F	-CH ₃	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	CH	-CH(OH)-	173-175
55	-	-CH ₃	-CH ₃	-CH ₂ -OSi(CH ₃) ₂ - ^t Bu	H	H	H	CH	-CH(OH)-	140-143
56	-	-CH ₃	-CH ₃	-C(CH ₃) ₂ -CH ₂ OH	H	H	H	CH	-CH(OH)-	136-138
57	8-F	-CH ₃	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	CH	-CO-	182-183
58	-	-CH ₃	-CH ₃	-CH ₂ -OSi(CH ₃) ₂ - ^t Bu	H	H	H	CH	-CO-	105-108
59	-	-CH ₃	-CH ₃	-CH ₂ O-Tos	H	H	H	CH	-CO-	vô định hình
60	2-Cl	-CH ₃	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ -		H	H	CH	-O-	: vô định hình
61	1-Oxit, 8-F	-CH ₃	-CH ₃	-Et	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
62	-		≡N		H	H	H	CH	-O-	92-95
63	-		≡N		F	H	H	CH	-O-	149-151
64	-		≡N		Br	H	H	CH	-O-	167-169
65	-		≡N		Cl	H	H	CH	-O-	150-151
66	-		≡N		OMe	H	H	CH	-O-	120-122

Bảng 4

Hợp chất số	(R ⁴) _m	R ¹	R ²	R ³	R ^b	R ^c	R ^d	E	-X-	Tính chất vật lý
67	2-CH ₃	-OH	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
68	2- ⁱ Pr	-OH	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
69	2-OCH ₃	-OH	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
70	2-OEt	-OH	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
71	1-Oxit	-OH	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	CH	-O-	154-155
72	-	-OH	-CH ₃	-C(CH ₃) ₂ OH	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
73	-	-OH	-CH ₃	-CO ₂ Et	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
74	8-F	-OH	-CH ₃	-Ph	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
75	8-F	-OH	-CH ₃	-CH ₂ Ph	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
76	8-F	-OH	-CH ₃	-CH=CH ₂	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
77	8-F	-OH	-CH ₃	-CH ₂ -CH=CH ₂	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
78	2-CH=CH ₂ , 8-F	-OH	-CH ₃	-CH=CH ₂	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
79	2-CH ₂ CH=CH ₂ , 8-F	-OH	-CH ₃	-CH ₂ -CH=CH ₂	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
80	8-F	-OH	-CH ₃	- ⁱ Pr	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
81	8-F	-OH	-CH ₃	-C(CH ₃)=CH ₂	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
82	8-F	-OH	-CH ₃	-CH ₂ -(4-FPh)	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
83	8-F	-OH	-CH ₃	-CH(CH ₃)-CH=CH ₂	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
84	8-F	-OH	-CH ₃	-CH ₃	F	H	H	CF	-O-	149-150
85	2-CH ₃ , 8-F	-OH	-CH ₃	-CH ₃	F	H	H	CF	-O-	111-113
86	8-F	-OH	-CH ₃	- ^o Pr	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
87	2- ^o Pr, 8-F	-OH	-CH ₃	- ^o Pr	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
88	2-CH ₃ , 8-F	-OH	-CH ₃	-Et	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
89	2-CH ₃ , 8-F	-OH	-CH ₃	-OH=CH ₂	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
90	2-CH ₃ , 8-F	-OH	-CH ₃	- ^o Pr	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
91	2-CH ₃ , 8-F	-OH	-CH ₃	-CH ₂ -(4-CH ₃ OPh)	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
92	2-CH ₃ , 8-F	-OH	-CH ₃	-CH ₂ -(4-FPh)	F	H	H	CH	-O-	vô định hình

Bảng 4

Hợp chất số	(R ⁴) _m	R ¹	R ²	R ³	R ^b	R ^c	R ^d	E	-X-	Tính chất vật lý
67	2-CH ₃	-OH	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
68	2- ⁱ Pr	-OH	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
69	2-OCH ₃	-OH	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
70	2-OEt	-OH	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
71	1-Oxit	-OH	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	CH	-O-	154-155
72	-	-OH	-CH ₃	-C(CH ₃) ₂ OH	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
73	-	-OH	-CH ₃	-CO ₂ Et	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
74	8-F	-OH	-CH ₃	-Ph	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
75	8-F	-OH	-CH ₃	-CH ₂ Ph	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
76	8-F	-OH	-CH ₃	-CH=CH ₂	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
77	8-F	-OH	-CH ₃	-CH ₂ -CH=CH ₂	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
78	2-CH=CH ₂ , 8-F	-OH	-CH ₃	-CH=CH ₂	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
79	2-CH ₂ CH=CH ₂ , 8-F	-OH	-CH ₃	-CH ₂ -CH=CH ₂	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
80	8-F	-OH	-CH ₃	- ⁱ Pr	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
81	8-F	-OH	-CH ₃	-C(CH ₃)=CH ₂	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
82	8-F	-OH	-CH ₃	-CH ₂ -(4-FPh)	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
83	8-F	-OH	-CH ₃	-CH(CH ₃)-CH=CH ₂	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
84	8-F	-OH	-CH ₃	-CH ₃	F	H	H	CF	-O-	149-150
85	2-CH ₃ , 8-F	-OH	-CH ₃	-CH ₃	F	H	H	CF	-O-	111-113
86	8-F	-OH	-CH ₃	- ^o Pr	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
87	2- ^o Pr, 8-F	-OH	-CH ₃	- ^o Pr	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
88	2-CH ₃ , 8-F	-OH	-CH ₃	-Et	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
89	2-CH ₃ , 8-F	-OH	-CH ₃	-CH=CH ₂	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
90	2-CH ₃ , 8-F	-OH	-CH ₃	- ^o Pr	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
91	2-CH ₃ , 8-F	-OH	-CH ₃	-CH ₂ -(4-CH ₃ OPh)	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
92	2-CH ₃ , 8-F	-OH	-CH ₃	-CH ₂ -(4-FPh)	F	H	H	CH	-O-	vô định hình

Bảng 5

Hợp chất số	$(R^4)_m$	R^1	R^2	R^3	R^b	R^c	R^d	E	X-	Tính chất vật lý
93	2-CH ₃ , 8-Cl	-OH	-CH ₃	-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	96-98
94	2,8-(CH ₃) ₂	-OH	-CH ₃	-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
95	8-F	-OH	-CH ₃	-CH ₃	Cl	H	H	CH	-O-	120-123
96	8-F	-OH	-CH ₃	-Et	Cl	H	H	CH	-O-	39-42
97	2-CH ₃ , 8-F	-OH	-CH ₃	-CH ₃	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình
98	8-F	-OH	-CH ₃	-CH ₃	Br	H	H	CH	-O-	107-110
99	8-F	-OH	-CH ₃	-CH ₃	H	Cl	H	CH	-O-	124-126
100	2-CH ₃ , 8-F	-OH	-CH ₃	-CH ₃	Br	H	H	CH	-O-	93-94
101	8-F	-OH	-CH ₃	-CH ₃	H	CH ₃	H	CH	-O-	vô định hình
102	8-F	-OH	-CH ₃	-CH ₃	Cl	F	H	CH	-O-	135-137
103	-	-OH	-CH ₃	-CH ₃	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình
104	8-F	-OH	-CH ₃	-CH ₃	H	F	H	CH	-O-	122-124
105	2-CH ₃ , 6-F	-OH	-CH ₃	-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
106	2-CH ₃ , 7-F	-OH	-CH ₃	-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	98-100
107	2-CH ₃	-OH	-CH ₃	-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
108	2-CH ₃	-OH	-CH ₃	-CH ₃	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình
109	-	-OCH ₃	-CH ₃	-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	93-94
110	2-CH ₃ , 8-F	-OH	-CH ₃	-CH ₃	Cl	F	H	CH	-O-	138-140
111	-	-OH	-CH ₃	-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
112	-	-OH	-CF ₃	-CF ₃	H	H	H	CH	-O-	170-172
113	-	-OS(CH ₃) ₃	-CF ₃	-CF ₃	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
114	-	-OH	-CF ₃	-CF ₃	F	H	H	CH	-O-	130-132
115	-	-OH	-CH ₃	-CH ₃	Cl	F	H	CH	-O-	115-116
116	5,8-F ₂	-OH	-CH ₃	-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	154-155
117	2-CH ₃ , 5,8-F ₂	-OH	-CH ₃	-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	124-126
118	2-CH ₃ , 7-Cl	-OH	-CH ₃	-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	vô định hình

Bảng 6

Hợp chất số	(R ⁴) _m	R ¹	R ²	R ³	R ^b	R ^c	R ^d	E	X-	Tính chất vật lý
119	-	-OH	-CH ₃	-CH ₃	F	F	H	CH	-O-	vô định hình
120	5-F	-OH	-CH ₃	-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	90-92
121	2-CH ₃ , 5-F	-OH	-CH ₃	-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	95-97
122	8-F	-OH	-CF ₃	-CF ₃	F	H	H	CH	-O-	151-153
123	8-F	-OH	-CH ₃	-CH ₃	F	CH ₃	H	CH	-O-	118-120
124	7,8-F ₂	-OH	-CH ₃	-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	78-80
125	2-CH ₃ , 7,8-F ₂	-OH	-CH ₃	-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	108-110
126	7-F	-OH	-CH ₃	-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
127	2-CH ₃ , 4,8-F ₂	-OH	-CH ₃	-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	130-132
128	2-CH ₃ , 7-F	-OH	-CH ₃	-Et	F	H	H	CH	-O-	n _D ²⁰ 1,5580
129	8-F	-OSi(CH ₃) ₃	-CH ₃	-CN	F	H	H	CH	-O-	
130	8-F	-OH	-CH ₃	-COOCH ₃	F	H	H	CH	-O-	
131	-	-OCH ₃	-H	-(CH ₂) ₂ -		H	H	CH	-O-	vô định hình
132	-	-OCH ₃	-H	-CH ₃	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
133	-	-OEt	-H	-(CH ₂) ₂ -		H	H	CH	-O-	vô định hình
134	-	-O ⁱ Pr	-H	-(CH ₂) ₂ -		H	H	CH	-O-	vô định hình
135	-	-O ⁱ Bu	-H	-CH ₃	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
136	-	-OH	-H	- ^t Bu	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
137	-	-OH	-H	-(CH ₂) ₂ -		H	H	CH	-O-	vô định hình
138	8-F	-OH	-H	-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	149-151
139	2-CH ₃ , 8-F	-OH	-H	- ^t Bu	F	H	H	CH	-O-	104-106
140	8-F	-OCH ₃	-H	-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
141	8-F	-OH	-H	-CH ₃	Cl	F	H	CH	-O-	139-141
142	8-F	-OCH ₃	-H	-CH ₃	Cl	F	H	CH	-O-	vô định hình
143	8-F	-OH	-H	- ^o Pr	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình
144	8-F	-OH	-H	-C(CH ₃)=CH ₂	Cl	H	H	CH	-O-	103-104

Bảng 7

Hợp chất số	(R ⁴) _m	R ¹	R ²	R ³	R ^b	R ^c	R ^d	E	-X-	Tính chất vật lý
145	8-F	-OH	-H	^t Bu	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình
146	8-F	-OH	-H	-CH ₃	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình
147	8-F	-OCH ₃	-H	-CH ₃	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình
148	8-F	-OH	-H	-CH ₃	Br	H	H	CH	-O-	vô định hình
149	8-F	-OCH ₃	-H	-CH ₃	Br	H	H	CH	-O-	vô định hình
150	8-F	-OCH ₃	-H	-CH ₃	CH ₃	H	H	CH	-O-	vô định hình
151	2-CH ₃ , 8-F	-OH	-H	-CH ₃	Cl	H	H	CH	-O-	112-114
152	2-CH ₃ , 8-F	-OCH ₃	-H	-CH ₃	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình
153	8-F	-OCH ₃	-H	-CH ₃	CN	H	H	CH	-O-	vô định hình
154	8-OCH ₃	-OCH ₃	-H	-CH ₃	Br	H	H	CH	-O-	vô định hình
155	8-OCH ₃	-OCH ₃	-H	-CH ₃	OCH ₃	H	H	CH	-O-	vô định hình
156	8-F	-OCH ₂ CH=CH ₂	-H	-CH ₃	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình
157	8-F	-OH	-H	-Et	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình
158	8-F	-OSi(CH ₃) ₃	-H	-CF ₃	Cl	H	H	CH	-O-	115-117
159	8-F	-OH	-H	-CF ₃	Cl	H	H	CH	-O-	174-176
160	8-F	-OCH ₂ Ph	-H	-CH ₃	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình
161	8-F	-OH	-H	-Ph	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình
162	8-F	-OH	-H	-CH=CH ₂	Cl	H	H	CH	-O-	98-100
163	8-F	-OH	-H	ⁿ Bu	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình
164	8-F	-OH	-H	-C≡CH	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình
165	8-F	-OSi(CH ₃) ₃	-H	-CN	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình
166	8-F	-OH	-H	-CH ₃	NO ₂	H	H	CH	-O-	112-114
167	8-F	-OCH ₃	-H	-CH ₃	NO ₂	H	H	CH	-O-	vô định hình
168	8-F	-OCH ₃	-H	-CO ₂ CH ₃	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình
169	8-F	-OH	-H	-CN	Cl	H	H	CH	-O-	174-175
170	8-F	-OSi(CH ₃) ₃	-H	-COOCH ₃	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình

Bảng 8

Hợp chất số	$(R^4)_m$	R^1	R^2	R^3	R^b	R^c	R^d	E	X	Tính chất vật lý
171	8-F	-OH	-H	-COCH ₃	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình
172	8-F	-OCH ₃	-H	-COCH ₃	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình
173	8-F	-OH	-H	-C(CH ₃) ₂ OH	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình
174	8-F	-OH	-H	-CH ₂ Ph	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình
175	8-F	-OCH ₃	-H	-CH ₂ Ph	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình
176	8-F	-OH	-H	-CH ₃	Br	F	H	CH	-O-	148-150
177	8-F	-OCH ₃	-H	-CH ₃	Br	F	H	CH	-O-	vô định hình
178	2-CH ₃ , 8-F	-OH	-H	-CH ₃	Cl	F	H	CH	-O-	130-131
179	2-CH ₃ , 8-F	-OH	-H	-CH ₃	Br	F	H	CH	-O-	119-121
180	8-F	-OCH ₃	-H	-C(CH ₃) ₂ OH	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình
181	8-F	-OH	-H	-CO ₂ CH ₃	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình
182	8-F	-OH	-H	-CH ₂ CN	Cl	H	H	CH	-O-	123-125
183	2-CH ₃ , 8-F	-OCH ₃	-H	-CH ₃	Cl	F	H	CH	-O-	124-126
184	2-CH ₃ , 8-F	-OCH ₃	-H	-CH ₃	Br	F	H	CH	-O-	108-110
185	8-F	-OH	-H	-CH ₃	CF ₃	H	H	CH	-O-	vô định hình
186	8-F	-OCH ₃	-H	-CH ₃	CF ₃	H	H	CH	-O-	vô định hình
187	-	-OH	-H	-CH ₃	Cl	H	H	CH	-O-	77-80
188	-	-OCH ₃	-H	-CH ₃	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình
189	-	-OH	-H	-CH ₃	H	H	H	CF	-O-	vô định hình
190	-	-OH	-H	-CH ₃	Cl	H	H	CF	-O-	vô định hình
191	-	-OH	-H	-CF ₃	H	H	H	CH	-O-	157-159
192	-	-OH	-H	-CH ₃	Cl	F	H	CH	-O-	133-135
193	-	-OH	-H	-CF ₃	F	H	H	CH	-O-	129-131
194	5,8-F ₂	-OH	-H	-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	115-116
195	5-F	-OH	-H	-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	114-115
196	8-F	-OH	-H	-CF ₃	F	H	H	CH	-O-	100-101

Bảng 9

Hợp chất số	$(R^4)_m$	R^1	R^2	R^3	R^b	R^c	R^d	E	X-	Tính chất vật lý
197	7,8-F ₂	-OH	-H	-CH ₃	Cl	H	H	CH	-O-	99-102
198	7,8-F ₂	-OCH ₃	-H	-CH ₃	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình
199	2-CH ₃ , 7,8-F ₂	-OH	-H	-CH ₃	Cl	H	H	CH	-O-	135-136
200	2-CH ₃ , 7,8-F ₂	-OCH ₃	-H	-CH ₃	Cl	H	H	CH	-O-	127-129
201	7-F	-OH	-H	-CH ₃	Cl	H	H	CH	-O-	92-94
202	2-CH ₃ , 7-F	-OCH ₃	-H	-CH ₃	Cl	H	H	CH	-O-	98-100
203	7-F	-OCH ₃	-H	-CH ₃	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình
204	8-F	-OH	-H	-C(=N-OCH ₃)-CH ₃	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình
205	8-F	-OH	-H	-CH ₃	I	H	H	CH	-O-	116-118
206	2-CH ₃ , 4,8-F ₂	-OH	-H	-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
207	8-F	-N(CH ₃) ₂	-H	-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	²⁰³ _n 1,5836
208	8-F	-OCH ₃	-H	-CH ₃	I	H	H	CH	-O-	61-63
209	8-F	-OCH ₃	-H	-CH ₃	CO ₂ CH ₃	H	H	CH	-O-	vô định hình
210	8-F	-OCH ₃	-H	-CH ₃	COCH ₃	H	H	CH	-O-	vô định hình
211	8-F	-OCH ₃	-H	-CH ₃	SOCH ₃	H	H	CH	-O-	vô định hình
212	8-F	-OCH ₃	-H	-CH ₃	SO ₂ CH ₃	H	H	CH	-O-	vô định hình
213	8-F	-OCH ₃	-H	-CH ₃	OCH ₃	H	H	CH	-O-	
214	8-F	-OCH ₃	-H	-CH ₃	^o Pr	H	H	CH	-O-	
215	8-F	-OCH ₃	-H	-CH ₃	Ph	H	H	CH	-O-	vô định hình
216	8-F	-OCH ₃	-H	-CH ₃	N(CH ₃) ₂	H	H	CH	-O-	
217	8-F	-OCH ₃	-H	-OCH ₃	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
218	8-F	-OEt	-H	-OEt	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
219	8-F	-OH	-H	-H	Cl	H	H	CH	-O-	141-143
220	8-F	-OCH ₃	-H	-H	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình
221	8-F	-OCH ₂ CH=CH ₂	-H	-H	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình
222	8-F	-OH	-H	-H	Br	H	H	CH	-O-	142-144

Bảng 10

Hợp chất số	$(R^4)_m$	R^1	R^2	R^3	R^b	R^c	R^d	E	X-	Tính chất vật lý
223	8-F	-OCH ₃	-H	-H	Br	H	H	CH	-O-	vô định hình
224	8-F	-NH ⁿ Bu	-H	-H	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình
225	-	-CH ₃	-CH ₃	-O(CH ₂) ₂ -CH ₂ OH	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
226	-	-CH ₃	-CH ₃	-C(CH ₃) ₂ -CH ₂ O-Tos	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
227	-	-CH ₃	-CH ₃	-C(CH ₃) ₂ OH	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
228	-	-CH ₃	-CH ₃	-CH ₂ OH	H	H	H	CH	-O-	106-108
229	-	-CH ₃	-CH ₃	-C(CH ₃) ₂ -CHO	H	H	H	CH	-O-	121-123
230	-	-CH ₃	-CH ₃	-O(CH ₂) ₂ -CH(CH ₃)OH	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
231	-	-CH ₃	-CH ₃	-C(CH ₃) ₂ -CH=CH-OH	H	H	H	CH	-O-	158-169
232	-	-CH ₃	-CH ₃	-C(CH ₃) ₂ -CN	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
233	-	-CH ₃	-CH ₃	-O(CH ₂) ₂ -COOCH ₃	H	H	H	CH	-O-	107-109
234	-	-CH ₃	-CH ₃	-CHO	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
235	-	-CH ₃	-CH ₃	-C(CH ₃) ₂ -CH ₂ OH	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
236	8-F	-CH ₃	-CH ₃	-O(CH ₂) ₂ -CH ₂ OH	H	H	H	CH	-O-	130-131
237	8-F	-CH ₃	-CH ₃	-O(CH ₂) ₂ -CH ₂ OH	F	H	H	CH	-O-	136-138
238	8-F	-CH ₃	-CH ₃	-C(CH ₃) ₂ -CHO	H	H	H	CH	-O-	148-149
239	8-F	-CH ₃	-CH ₃	-C(CH ₃) ₂ -CHO	F	H	H	CH	-O-	156-158
240	8-F	-CH ₃	-CH ₃	-O(CH ₂) ₂ -COOCH ₃	F	H	H	CH	-O-	147-148
241	8-F	-CH ₃	-CH ₃	-CH ₂ OH	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
242	8-F	-CH ₃	-CH ₃	-C(CH ₃) ₂ OH	H	H	H	CH	-O-	120-122
243	-	-CH ₃	-CH ₃	-CH ₂ -C(CH ₃) ₂ OH	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
244	-	-CH ₃	-CH ₃	-CH ₂ CH ₂ OH	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
245	-	-CH ₃	-CH ₃	-CH ₂ CHO	H	H	H	CH	-O-	93-96
246	-	-CH ₃	-CH ₃	-CH ₂ CH(CH ₃)OH	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
247	-	-CH ₃	-CH ₃	-CH ₂ CH(OOCH ₃) ₂	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
248	-	-CH ₃	-CH ₃	-C(CH ₃) ₂ -CH(OOCH ₃) ₂	H	H	H	CH	-O-	vô định hình

Bảng 11

Hợp chất số	(R ⁴) _m	R ¹	R ²	R ³	R ^b	R ^c	R ^d	E	X-	Tính chất vật lý
249	-	-CH ₃	-CH ₃	-C(CH ₃) ₂ -CO ₂ H	H	H	H	CH	-O-	181-184
250	-	-CH ₃	-CH ₃	-C(CH ₃) ₂ -CO ₂ CH ₃	H	H	H	CH	-O-	123-125
251	2-CH ₃	-CH ₃	-CH ₃	-C(CH ₃) ₂ OH	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
252	2-CH ₃	-CH ₃	-CH ₃	-CH ₂ CH ₂ OH	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
253	-	-CH ₃	-CH ₃	-CH(CH ₃)OH	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
254	-	-CH ₃	-CH ₃	-CH(OH)Et	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
255	-	-CH ₃	-CH ₃	-CH(OH)-C(CH ₃)=CH ₂	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
256	2-CH ₃	-CH ₃	-CH ₃	-C(CH ₃) ₂ -CH(CH ₃)OH	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
257	2-CH ₃	-CH ₃	-CH ₃	-O(CH ₃) ₂ -COOCH ₃	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
258	8-F	-CH ₃	-CH ₃	-CH ₂ CH ₂ OH	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
259	2-CH ₃ , 8-F	-CH ₃	-CH ₃	-CH ₂ CH ₂ OH	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
260	-	-CH ₃	-CH ₃	-COOCH ₃	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
261	2-CH ₃ , 8-F	-CH ₃	-CH ₃	-CH ₂ CH ₂ OOCH ₃	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
262	8-F	-CH ₃	-CH ₃	-COOCH ₃	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
263	-	-CH ₃	-CH ₃	-C(CH ₃) ₂ OH	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
264	8-F	-CH ₃	-CH ₃	-C(CH ₃) ₂ OH	F	H	H	CH	-O-	139-141
265	-	-CH ₃	-CH ₃	-COOCH ₃	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
266	7-F	-CH ₃	-CH ₃	-COOCH ₃	F	H	H	CH	-O-	dầu nhớt
267	7,8-F ₂	-CH ₃	-CH ₃	-COOCH ₃	F	H	H	CH	-O-	dầu nhớt
268	8-F	-CH ₃	-CH ₃	-CH(CH ₃)OH	H	H	H	CH	-O-	dầu nhớt
269	8-F	-CH ₃	-CH ₃	-COOCH ₃	H	H	H	CH	-O-	dầu nhớt
270	2-CH ₃ , 8-F	-CH ₃	-CH ₃	-ON	H	H	H	CH	-O-	dầu nhớt
271	-	-CH ₃	-CH ₃	-CN	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
272	8-F	-CH ₃	-CH ₃	-CN	H	H	H	CH	-O-	126-128
273	8-F	-CH ₃	-CH ₃	-CONH ₂	H	H	H	CH	-O-	172-175
274	8-F	-CH ₃	-CH ₃	-CONC(CH ₃) ₂	H	H	H	CH	-O-	164-166

Bảng 12

Hợp chất số	(R ⁴) _m	R ¹	R ²	R ³	R ^b	R ^c	R ^d	E	-X-	Tính chất vật lý
275	8-F	-CH ₃	-CH ₃	-SO ₂ CH ₃	F	H	H	CH	-O-	175-177
276	-	-H	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	CH	-O-	96-98
277	-	-H	-CH ₃	-Et	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
278	-	-H	-CH ₃	-iPr	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
279	-	-H	-CH ₃	- ⁿ Bu	H	H	H	CH	-O-	²⁰ _D 1,6215
280	2-CH ₃ , 8-F	-OH	-H	-COCH ₃	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
281	-	-H	-H	-O(CH ₃) ₂ OH	H	H	H	CH	-O-	131-132
282	-	-H	-H	-H	H	H	H	CH	-O-	46-48
283	-	-H	-H	-H	F	H	H	CH	-O-	74-75
284	8-F	-H	-H	-H	F	H	H	CH	-O-	82-83
285	-			-CH=CH-CH=CH-		H	H	CH	-O-	105-106
286	-			-(CH ₂) ₄ -		H	H	CH	-O-	vô định hình
287	-			-(CH ₂) ₃ -		H	H	CH	-O-	68-70
288	-			-CH=CH-CH ₂ CH ₂ -		H	H	CH	-O-	67-59
289	-	-F	-F	-CO ₂ Et	F	H	H	CH	-O-	106-109
290	-	-F	-F	-CH ₂ OH	F	H	H	CH	-O-	129-131
291	-	-F	-F	-C(CH ₃) ₂ OH	F	H	H	CH	-O-	99-101
292	8-F	-F	-F	-CO ₂ Et	F	H	H	CH	-O-	²⁰ _D 1,5400
293	8-F	-F	-F	-C(CH ₃) ₂ OH	F	H	H	CH	-O-	114-116
294	8-F	-F	-F	-COCH ₃	F	H	H	CH	-O-	60-63
295	8-F	-F	-F	-CON(CH ₃)OCH ₃	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
296	2-CH ₃ , 8-F	-F	-F	-COCH ₃	F	H	H	CH	-O-	104-106
297	8-F	-(CH ₂) ₂ -		-OOCH ₂ Ph	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
298	8-F	-(CH ₂) ₂ -		-OH	F	H	H	CH	-O-	128-130
299	-	-(CH ₂) ₂ -		-OOCH ₂ Ph	F	H	H	CH	-O-	91-93
300	-	-(CH ₂) ₂ -		-OH	F	H	H	CH	-O-	123-124

Bảng 13

Hợp chất số	(R ⁴) _m	R ¹	R ²	R ³	R ^b	R ^c	R ^d	E	-X-	Tính chất vật lý
301	8-F	-(CH ₂) ₂ -		-OH	Cl	H	H	CH	-O-	
302	2-CH ₃ , 8-F	-(CH ₂) ₂ -		-OH	Cl	H	H	CH	-O-	
303	8-F	-(CH ₂) ₂ -		-OCH ₂ Ph	Cl	H	H	CH	-O-	
304	2-CH ₃ , 8-F	-(CH ₂) ₂ -		-OCH ₂ Ph	Cl	H	H	CH	-O-	
305	-	=CH ₂		-CH ₃	H	H	H	CH	-O-	72-74
306	2-Cl	=CH ₂		-CH ₃	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
307	2-OH	=CH ₂		-CH ₃	H	H	H	CH	-O-	135-139
308	8-F	-O-CH ₂ -		-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
309	-	-(CH ₂) ₄ -		-O(CH ₂) ₂ OH	H	H	H	CH	-O-	86-88
310	8-F	-(CH ₂) ₂ -		-CN	F	H	H	CH	-O-	142-144
311	2-CH ₃ , 8-F	-(CH ₂) ₂ -		-CN	F	H	H	CH	-O-	132-134
312	8-F	-(CH ₂) ₂ -		-COOCH ₃	F	H	H	CH	-O-	
313	2-CH ₃ , 8-F	-(CH ₂) ₂ -		-COOCH ₃	F	H	H	CH	-O-	
314	2-CH ₃ , 8-F	=N-OH		-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	168-170
315	8-F	=N-OH		-CH ₃	Cl	H	H	CH	-O-	155-158
316	8-F	=N-OH		-CH ₃	Br	H	H	CH	-O-	145-147
317	8-F	=N-OH		-CH ₃	Cl	F	H	CH	-O-	189-202
318	2-CH ₃ , 7-F	=N-OCH ₃		-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	²⁰⁶ ₁ , 5712
319	2-CH ₃ , 7-F	=N-OEt		-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	²⁰⁶ ₁ , 5629
320	-	=N-O ^t Bu		-H	F	H	H	CH	-O-	105-107
321	8-F		≡ N		F	H	H	CH	-O-	184-185
322	-		Ph		H	H	H	CH	-O-	85-86
323	-	-OH	-CH ₃	-CH ₃	F	H	H	CH	-CH ₂ -	148-149
324	8-F	-OH	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	CH	-CH ₂ -	114-116
325	2-CH ₃ , 8-F	-OH	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	CH	-CH ₂ -	159-161
326	-	-CH ₃	-CH ₃	-O(CH ₂) ₂ -CH ₂ OH	H	H	H	CH	-CH ₂ -	115-117

Bảng 14

Hợp chất số	$(R^4)_m$	R^1	R^2	R^3	R^b	R^c	R^d	E	X-	Tính chất vật lý
327	8-F	-OH	-H	-CH ₃	Cl	H	H	CH	-CH ₂ -	151-153
328	8-F	-OCH ₃	-H	-OCH ₃	Cl	H	H	CH	-CH ₂ -	vô định hình
329	8-F	=O		-OEt	H	H	H	CH	-CH ₂ -	vô định hình
330	-	=O		-OEt	F	H	H	CH	-CH ₂ -	vô định hình
331	7-F	=O		-OEt	F	H	H	CH	-CH ₂ -	dầu nhớt
332	8-F	=O		-H	Cl	H	H	CH	-CH ₂ -	111-112
333	8-F	-OH	-CH ₃	-CH ₃	F	H	H	CH	-CO-	192-193
334	-	-OH	-H	-CH ₂ CH ₂	H	H	H	CH	-CO-	vô định hình
335	8-F	=C(CH ₃) ₂		-H	F	H	H	CH	-CO-	43-45
336	-	-OCH ₂ CH ₂ O-		-H	H	H	H	CH	-CO-	134-136
337	-	=CH ₂		-H	H	H	H	CH	-CO-	92-95
338	-	=CH ₂		-CH ₃	H	H	H	CH	-CO-	125-128
339	-	=C(CH ₃) ₂		-H	H	H	H	CH	-CO-	vô định hình
340	-		-CH=CH-CH=CH-			H	H	CH	-CO-	dầu nhớt
341	8-F	=O		-H	F	H	H	CH	-CO-	179-181
342	-	=O		-H	H	H	H	CH	-CO-	120-122
343	-	=O		-CH=CH ₂	H	H	H	CH	-CO-	vô định hình
344	8-F	-H	-H	-C(CH ₃)=CH ₂	H	H	H	CH	-CO-	vô định hình
345	-	-H	-H	-CH ₂ -N ₃	H	H	H	CH	-CO-	vô định hình
346	-	-H	-H	-Ph	Cl	H	H	CH	-CO-	115-117
347	-	-H	-H	-C(CH ₃)=CH ₂	F	H	H	CH	-CO-	vô định hình
348	8-F	-H	-H	-C(CH ₃)=CH ₂	F	H	H	CH	-CO-	89-92
349	8-F	-OCH ₂ CH ₂ O-		-H	F	H	H	CH	-CH(OH)-	159-161
350	8-F	-OH	-CH ₃	-CH ₃	F	H	H	CH	-CH(OH)-	vô định hình
351	-	=CH ₂		-H	H	H	H	CH	*1	vô định hình
352	-	=O		-CO ₂ Et	H	H	H	CH	-O-	vô định hình

Bảng 15

Hợp chất số	$(R^4)_m$	R^1	R^2	R^3	R^b	R^c	R^d	E	-X-	Tính chất vật lý
353	8-F	=O		-CH ₃	Cl	H	H	OH	-O-	vô định hình
354	8-F	=O		-CH ₃	*2	H	H	OH	-O-	146-148
355	8-F	=O		-CH ₃	Br	H	H	CH	-O-	vô định hình
356	8-F	=O		-CH ₃	F	H	H	CF	-O-	103-104
357	8-F	=O		*3	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
358	2-CH ₃ , 8-F	=O		-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	96-100
359	2-CH ₃ , 8-F	=O		-CH ₃	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình
360	2-CH ₃ , 8-F	=O		-CH ₃	Br	H	H	CH	-O-	vô định hình
361	8-F	=O		-CH ₃	Cl	F	H	CH	-O-	vô định hình
362	2,4-(CH ₃) ₂ , 8-F	=O		-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	164-65
363	8-F	=O		- ^o Pr	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình
364	8-F	=O		-O(CH ₃)=CH ₂	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình
365	8-F	=O		- ^t Bu	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình
366	2-CH ₃ , 8-Cl	=O		-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	100-102
367	2,8-(CH ₃) ₂	=O		-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
368	8-F	=O		-Ph	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình
369	8-F	=O		-CH=CH ₂	Cl	H	H	CH	-O-	77-79
370	8-F	=O		-O≡CH	Cl	H	H	CH	-O-	121-123
371	8-F	=O		- ⁿ Bu	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình
372	8-F	=O		-CH ₂ Cl	F	H	H	CH	-O-	113-116
373	8-F	=O		-CHCl ₂	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
374	8-F	=O		-CCl ₃	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
375	8-F	=O		-COCH ₃	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình
376	8-F	=O		-O(CH ₂) ₂ OH	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình
377	8-F	=O		- ⁱ Pr	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình
378	8-F	=O		-CH ₃	Br	F	H	CH	-O-	132-135

Bảng 16

Hợp chất số	(R ⁴) _m	R ¹	R ²	R ³	R ^b	R ^c	R ^d	E	X-	Tính chất vật lý
379	2-CH ₃ , 8-F	=O		-CH ₃	Cl	F	H	CH	-O-	vô định hình
380	2-CH ₃ , 8-F	=O		-CH ₃	Br	F	H	CH	-O-	126-128
381	-	=O		-CH ₃	Cl	H	H	CH	-O-	38-40
382	2-CH ₃ , 6-F	=O		-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
383	2-CH ₃ , 7-F	=O		-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
384	8-F	=O		-CH ₂ O-COOCH ₃	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
385	-	=O		-CF ₃	F	H	H	CH	-O-	100-104
386	-	=O		-CH ₃	Cl	F	H	CH	-O-	112-124
387	5,8-F ₂	=O		-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	45-48
388	5-F	=O		-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
389	2-CH ₃ , 7-Cl	=O		-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
390	8-F	=O		-CF ₃	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
391	7,8-F ₂	=O		-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	128-130
392	7,8-F ₂	=O		-CH ₃	Cl	H	H	CH	-O-	105-107
393	2-CH ₃ , 8-F	=O		-OOCCH ₃	Cl	H	H	CH	-O-	113-114
394	7-F	=O		-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	97-99
395	2-CH ₃ , 8-F	=O		-OOCCH ₃	F	H	H	CH	-O-	169-170
396	8-F	=O		-OOCCH ₃	F	H	H	CH	-O-	96-98
397	2-CH ₃ , 8-F	=O		-C(CH ₃) ₂ OH	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
398	8-F	=O		-C(CH ₃) ₂ OH	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
399	8-F	=O		-C(=N-OCH ₃)-CH ₃	Cl	H	H	CH	-O-	118-119
400	2-CH ₃ , 4,8-F ₂	=O		-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	155-156
401	-	=O		-NPh	H	H	H	CH	-O-	vô định hình
402	-	=O		-OCH ₃	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình
403	-	=O		-OCH ₃	Br	H	H	CH	-O-	vô định hình
404	8-F	=O		-OEt	H	Cl	H	CH	-O-	88-90

Bảng 17

Hợp chất số	$(R^4)_m$	R^1	R^2	R^3	R^b	R^c	R^d	E	X-	Tính chất vật lý
405	8-F	=O		-OEt	H	CH ₃	H	CH	-O-	88-90
406	8-F	=O		-OCH ₃	Cl	H	H	CH	-O-	r_D^{208} 1,6008
407	8-F	=O		-O ^t Pr	Cl	H	H	CH	-O-	r_D^{207} 1,5809
408	8-F	=O		-O-CH ₂ Ph	Cl	H	H	CH	-O-	114-116
409	8-F	=O		-OEt	F	CH ₃	H	CH	-O-	vô định hình
410	8-F	=O		-O ^t Bu	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình
411	8-F	=O		-O-C(CH ₃) ₂ -CO ₂ Et	Cl	H	H	CH	-O-	r_D^{224} 1,5411
412	8-F	=O		-H	Cl	F	H	CH	-O-	153-155
413	8-F	=O		-H	Cl	H	H	CH	-O-	133-135
414	8-F	=O		-H	Br	H	H	CH	-O-	111-114
415	8-F	=O		-H	Bn	H	H	CH	-O-	92-94
416	8-F	=O		-H	NO ₂	H	H	CH	-O-	106-109
417	8-F	=O		-H	Br	F	H	CH	-O-	140-142
418	8-F	=O		-H	OF ₃	H	H	CH	-O-	125-127
419	-	=O		-H	Cl	H	H	CH	-O-	82-85
420	-	=O		-H	Cl	F	H	CH	-O-	136-138
421	5,8-F ₂	=O		-H	F	H	H	CH	-O-	118-121
422	5-F	=O		-H	F	H	H	CH	-O-	92-94
423	7,8-F ₂	=O		-H	Cl	H	H	CH	-O-	142-144
424	7-F	=O		-H	Cl	H	H	CH	-O-	122-123
425	2-CH ₃ , 8-F	-F	-F	-C(CH ₃) ₂ OH	F	H	H	CH	-O-	110-112
426	2-CH ₃ , 8-F	-F	-F	-CH(CH ₃)OH	F	H	H	CH	-O-	163-165
427	2-CH ₃ , 8-F	-F	-F	-CH(CH ₃)OCH ₃	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
428	2-CH ₃ , 8-F	-F	-F	-C(CH ₃)XEt)OH	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
429	2-CH ₃ , 8-F	-F	-F	-CH(CH ₃)OCH ₂ COCH ₃	F	H	H	CH	-O-	141-143
430	8-F	-C(CH ₃) ₂ -	-F	-CO ₂ Et	F	H	H	CH	-O-	vô định hình

Bảng 18

Hợp chất số	$(R^4)_m$	R^1	R^2	R^3	R^b	R^c	R^d	E	-X-	Tính chất vật lý
431	8-F	$-(CH_2)_2-$		$-C(CH_3)_2OH$	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
432	8-F	$-CH_3$	$-CH_3$	$-CN$	F	H	H	CH	-O-	110-112
433	8-F	$-NHCOC_2^tBu$	$-CH_3$	$-CH_3$	F	H	H	CH	-O-	127-129
434	8-F	$-(CH_2)_2-$		$-NHCOC_2^tBu$	F	H	H	CH	-O-	132-134
435	8-F	$-NH_2$	$-CH_3$	$-CH_3$	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
436	8-F	$-NHCOC_2^tBu$	$-CH_3$	$-CH_3$	F	H	H	CH	-O-	144-146
437	8-F	$-NHCOCF_3$	$-CH_3$	$-CH_3$	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
438	-	$-OCH_2CH_2O-$		$-H$	H	H	H	CH	$-CH(OH)-$	80-83
439	2-CH ₃ , 7,8-F ₂	$-OCH_3$	$-CH_3$	$-CH_3$	F	H	H	CH	-O-	97-98
440	2-CH ₃ , 8-F	$-OCH_3$	$-CH_3$	$-CH_3$	F	H	H	CH	-O-	94-95
441	2-CH ₃ , 7-F	$-OCH_3$	$-CH_3$	$-CH_3$	F	H	H	CH	-O-	104-105
442	8-F	$-N(CH_3)_2$	$-H$	$-CN$	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình
443	8-F	$-NHCOC_2^tBu$	$-H$	$-CN$	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình
444	8-F	$-N(Bn)COC_2^tBu$	$-CH_3$	$-CH_3$	F	H	H	CH	-O-	195-197
445	8-F	Pyrolidin-1-yl	$-H$	$-CH_3$	F	H	H	CH	-O-	n_D^{20} 1.5593
446	8-F	$-OCH_3$	$-H$	$-CH_3$	$NHCOC_2^tBu$	H	H	CH	-O-	vô định hình
447	8-F	$-OCH_3$	$-H$	$-CH_3$	NH_2	H	H	CH	-O-	vô định hình
448	8-F	$-OCH_3$	$-H$	$-CH_3$	$NHCH_3$	H	H	CH	-O-	vô định hình
449	2-CH ₃ , 8-F	$-CH_3$	$-CH_3$	$-SO_2CH_3$	F	H	H	CH	-O-	138-141
450	7,8-F ₂	$-CH_3$	$-CH_3$	$-SO_2CH_3$	F	H	H	CH	-O-	157-160
451	2-CH ₃ , 7,8-F ₂	$-CH_3$	$-CH_3$	$-SO_2CH_3$	F	H	H	CH	-O-	172-175

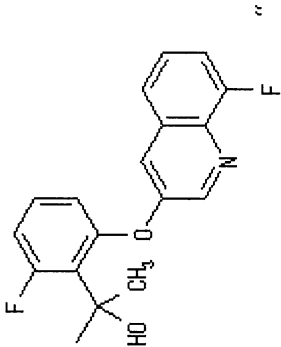
Bảng 19

Hợp chất số	(R ⁴) _m	R ¹	R ²	R ³	R ^b	R ^c	R ^d	E	-X-	Tính chất vật lý
452	8-F	-CH ₃	-CH ₃	-SO ₂ Et	F	H	H	CH	-O-	150-152
453	8-F	-CH ₃	-H	-SO ₂ CH ₃	Cl	H	H	CH	-O-	vô định hình

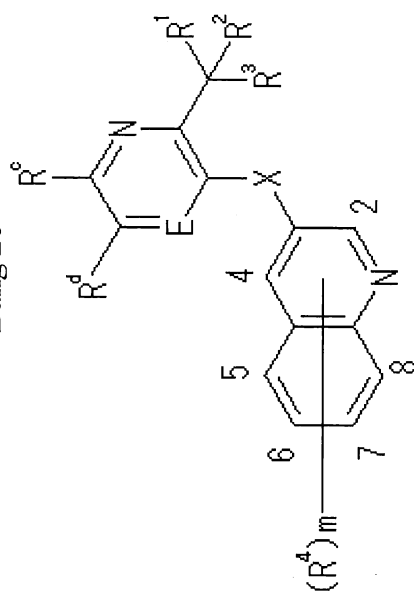
*1=" -O(=N-CH₂CH=CH₂)-"

*2="8-flo-quinolin-3-yloxy"

*3="

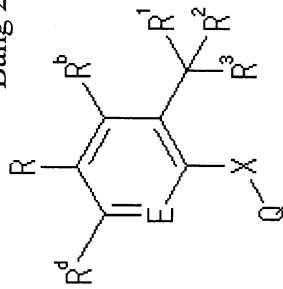


Bảng 20



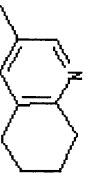
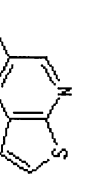
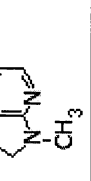
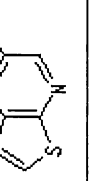
Hợp chất số	(R ⁴) _m	R ¹	R ²	R ³	R ^o	R ^d	E	-X-	Tính chất vật lý
a-1	-		≡ N		H	H	CH	-O-	149-150
a-2	-	-OH	-CH ₃	-CH ₃	H	H	CH	-O-	vô định hình
a-3	8-F		=O	-H	H	H	CH	-O-	138-140
a-4	2- ^t Bu, 8-F		=O	-H	H	H	CH	-O-	150-151
a-5	8-F	-OH	-CH ₃	- ^t Bu	H	H	CH	-O-	110-112
a-6	8-F		=O	- ^t Bu	H	H	CH	-O-	90-91
a-7	2-CH ₃ , 8-F	-OH	-CH ₃	-CH ₃	H	H	CH	-O-	vô định hình
a-8	8-F	-OH	-CH ₃	-CH ₃	H	H	CH	-O-	vô định hình
a-9	2-CH ₃ , 8-F		=O	-CH ₃	H	H	CH	-O-	133-134
a-10	2-CH ₃ , 8-F	-OH	-CH ₃	- ^t Bu	H	H	CH	-O-	133-136
a-11	8-F	-CH ₃	-CH ₃	-CN	H	H	CH	-O-	
a-12	8-F	-CH ₃	-CH ₃	-CO ₂ Et	H	H	CH	-O-	
a-13	8-F	-F	-F	-C(CH ₃) ₂ OH	H	H	CH	-O-	
a-14	8-F	-CH ₃	-CH ₃	-C(CH ₃) ₂ OH	H	H	CH	-O-	
a-15	8-F	-CH ₃	-CH ₃	-COCH ₃	H	H	CH	-O-	

Bảng 21

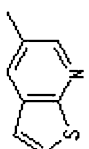
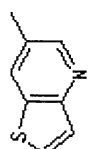
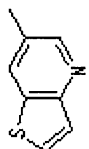
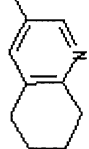
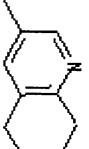
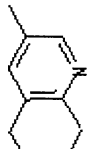


Hợp chất số	Q	R ¹	R ²	R ³	R ^b	R ^c	R ^d	E	-X-	Tính chất vật lý
b-1		-CH ₃	-CH ₃	-C(CH ₃) ₂ OH	H	H	H	CH	-O-	dầu nhớt
b-2		-CH ₃	-CH ₃	-C(CH ₃) ₂ OH	H	H	H	CH	-O-	133-135
b-3		-CH ₃	-CH ₃	-C(CH ₃) ₂ OH	F	H	H	CH	-O-	dầu nhớt
b-4		-CH ₃	-CH ₃	-C(CH ₃) ₂ OH	H	H	H	CH	-O-	dầu nhớt
b-5		-CH ₃	-CH ₃	-C(CH ₃) ₂ OH	H	H	H	CH	-O-	dầu nhớt
b-6		=O		-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	dầu nhớt

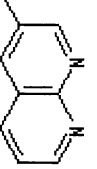
Bảng 22

Hợp chất số	Q	R ¹	R ²	R ³	R ^b	R ^c	R ^d	E	-X-	Tính chất vật lý
b-7		-OH	-CH ₃	-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	dầu nhớt
b-8		-OH	-CH ₃	- ^t Bu	F	H	H	CH	-O-	dầu nhớt
b-9		-OH	-H	-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	dầu nhớt
b-10		-OCH ₃	-H	-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	dầu nhớt
b-11		=O		-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	dầu nhớt
b-12				-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	dầu nhớt
b-13		-CH ₃	-CH ₃	-O(CH ₂) ₂ OH	H	H	H	CH	-O-	dầu nhớt
b-14		-OH	-H	-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	dầu nhớt

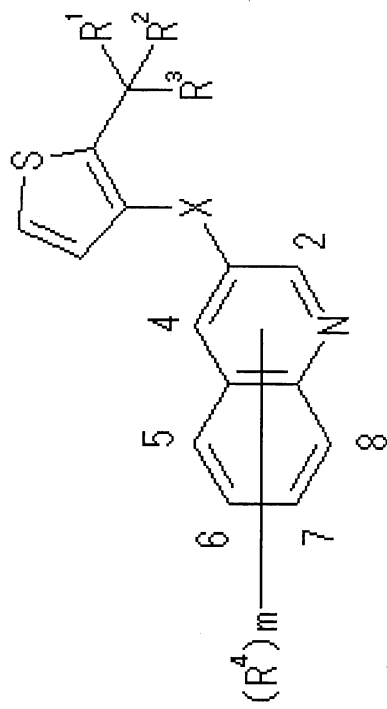
Bảng 23

Hợp chất số	Q	R ¹	R ²	R ³	R ^b	R ^c	R ^d	E	-X-	Tính chất vật lý
b-15		-OCH ₃	-H	-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	dầu nhớt
b-16		-OH	-CH ₃	- ^t Bu	F	H	H	CH	-O-	vô định hình
b-17		=O		-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	78-80
b-18		-OH	-CH ₃	-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	101-102
b-19		=C(CH ₃) ₂		-H	F	H	H	CH	-CO-	dầu nhớt
b-20		=C(CH ₃) ₂		-H	F	H	H	CH	-CO-	vô định hình
b-21		=O		-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	dầu nhớt
b-22		-OH	-CH ₃	-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	dầu nhớt

Bảng 24

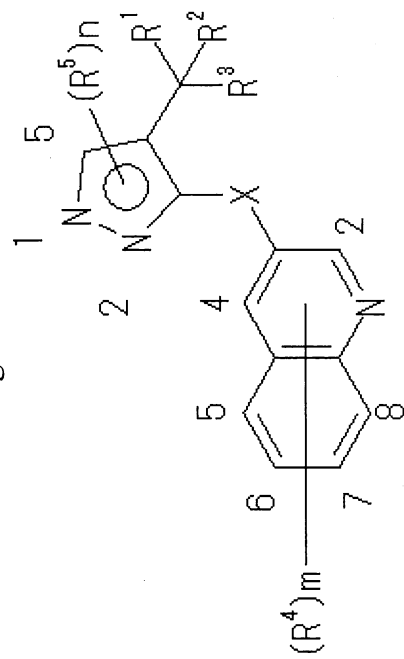
Hợp chất số	Q	R ¹	R ²	R ³	R ^b	R ^c	R ^d	E	-X-	Tính chất vật lý
b-23		=O	-CH ₃	-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	đầu nhớt
b-24										
b-25		-OH	-CH ₃	-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	87-89
b-26		-OH	-CH ₃	-CH ₃	F	H	H	CH	-O-	

Bảng 25



Hợp chất số	$(R^4)_m$	R^1	R^2	R^3	X	Tính chất vật lý
C-1	8-F	=O		$-OCH_3$	-O-	
C-2	8-F	=O		-H	-O-	135-137
C-3	8-F	=O		$-CH_3$	-O-	138-139
C-4	8-F	-OH	$-CH_3$	$-CH_3$	-O-	129-131
C-5	8-F	-OH	-H	$-CH_3$	-O-	96-98

Bảng 26



Hợp chất số	(R ⁴) _m	R ¹	R ²	R ³	(R ⁵) _n	X	Tính chất vật lý
d-1	8-F	=O		-OCH ₃	2-CH ₃ 5-OF ₃	-O-	
d-2	8-F	=O		-H	2-CH ₃ 5-OF ₃	-O-	
d-3	8-F	=O		-CH ₃	2-CH ₃ 5-OF ₃	-O-	
d-4	8-F	-OH	-H	-CH ₃	2-CH ₃ 5-OF ₃	-O-	160-162
d-5	8-F	-OCH ₃	-H	-CH ₃	2-CH ₃ 5-OF ₃	-O-	^{20,6} _D 1,5056
d-6	8-F	-OH	-H	-iPr	2-CH ₃ 5-OF ₃	-O-	
d-7	8-F	-OH	-H	- ^o Pr	2-CH ₃ 5-OF ₃	-O-	
d-8	8-F	-OH	-H	-OF ₃	2-CH ₃ 5-OF ₃	-O-	
d-9	8-F	-OH	-H	-C(CH ₃) ₂ OH	2-CH ₃ 5-OF ₃	-O-	
d-10	8-F	-OH	-H	-C(CH ₃) ₂ -COOCH ₃	2-CH ₃ 5-OF ₃	-O-	
d-11	8-F	-OH	-H	-C(CH ₃) ₂ -CO ₂ CH ₃	2-CH ₃ 5-OF ₃	-O-	

Bảng 27

Hợp chất số	$(R^4)_m$	R^1	R^2	R^3	$(R^5)_n$	$-X-$	Tính chất vật lý
d-12	8-F	-OH	-H	$-\text{CH}_2\text{Ph}$	$2-\text{CH}_3, 5-\text{CF}_3$	-O-	
d-13	8-F	-OH	-H	$-\text{CH}=\text{CH}_2$	$2-\text{CH}_3, 5-\text{CF}_3$	-O-	
d-14	8-F	-OH	-H	$-\text{C}\equiv\text{CH}$	$2-\text{CH}_3, 5-\text{CF}_3$	-O-	
d-15	8-F	-OH	-H	$-\text{COCH}_3$	$2-\text{CH}_3, 5-\text{CF}_3$	-O-	
d-16	$2-\text{CH}_3, 8-\text{F}$	-OH	-H	$-\text{CH}_3$	$2-\text{CH}_3, 5-\text{CF}_3$	-O-	
d-17	$2-\text{CH}_3, 8-\text{F}$	-OH	-H	-Pr	$2-\text{CH}_3, 5-\text{CF}_3$	-O-	
d-18	$2-\text{CH}_3, 8-\text{F}$	-OH	-H	^oPr	$2-\text{CH}_3, 5-\text{CF}_3$	-O-	
d-19	$2-\text{CH}_3, 8-\text{F}$	-OH	-H	$-\text{CF}_3$	$2-\text{CH}_3, 5-\text{CF}_3$	-O-	
d-20	$2-\text{CH}_3, 8-\text{F}$	-OH	-H	$-\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{OH}$	$2-\text{CH}_3, 5-\text{CF}_3$	-O-	
d-21	$2-\text{CH}_3, 8-\text{F}$	-OH	-H	$-\text{CH}=\text{CH}_2$	$2-\text{CH}_3, 5-\text{CF}_3$	-O-	
d-22	$2-\text{CH}_3, 8-\text{F}$	-OH	-H	$-\text{C}\equiv\text{CH}$	$2-\text{CH}_3, 5-\text{CF}_3$	-O-	
d-23	8-F	-OH	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	$2-\text{CH}_3, 5-\text{Cl}$	-O-	
d-24	8-F	-OH	$-\text{CH}_3$	-Pr	$2-\text{CH}_3, 5-\text{Cl}$	-O-	
d-25	8-F	-OH	$-\text{CH}_3$	^oPr	$2-\text{CH}_3, 5-\text{Cl}$	-O-	
d-26	8-F	-OH	$-\text{CH}_3$	$-\text{CF}_3$	$2-\text{CH}_3, 5-\text{Cl}$	-O-	
d-27	8-F	-OH	$-\text{CH}_3$	$-\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{OH}$	$2-\text{CH}_3, 5-\text{Cl}$	-O-	
d-28	8-F	-OH	$-\text{CH}_3$	$-\text{C}(\text{CH}_3)_2-\text{COCH}_3$	$2-\text{CH}_3, 5-\text{Cl}$	-O-	
d-29	8-F	-OH	$-\text{CH}_3$	$-\text{C}(\text{CH}_3)_2-\text{CO}_2\text{CH}_3$	$2-\text{CH}_3, 5-\text{Cl}$	-O-	
d-30	8-F	-OH	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2\text{Ph}$	$2-\text{CH}_3, 5-\text{Cl}$	-O-	
d-31	8-F	-OH	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}=\text{CH}_2$	$2-\text{CH}_3, 5-\text{Cl}$	-O-	
d-32	8-F	-OH	$-\text{CH}_3$	$-\text{C}\equiv\text{CH}$	$2-\text{CH}_3, 5-\text{Cl}$	-O-	
d-33	8-F	-OH	$-\text{CH}_3$	$-\text{COCH}_3$	$2-\text{CH}_3, 5-\text{Cl}$	-O-	
d-34	$2-\text{CH}_3, 8-\text{F}$	-OH	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	$2-\text{CH}_3, 5-\text{Cl}$	-O-	
d-35	$2-\text{CH}_3, 8-\text{F}$	-OH	$-\text{CH}_3$	-Pr	$2-\text{CH}_3, 5-\text{Cl}$	-O-	

Bảng 28

Hợp chất số	$(R^4)_m$	R^1	R^2	R^3	$(R^5)_n$	$-X-$	Tính chất vật lý
d-36	2-CH ₃ , 8-F	-OH	-CH ₃	- ⁱ Pr	2-CH ₃ , 5-Cl	-O-	
d-37	2-CH ₃ , 8-F	-OH	-CH ₃	-CF ₃	2-CH ₃ , 5-Cl	-O-	
d-38	2-CH ₃ , 8-F	-OH	-CH ₃	-C(CH ₃) ₂ OH	2-CH ₃ , 5-Cl	-O-	
d-39	2-CH ₃ , 8-F	-OH	-CH ₃	-CH=CH ₂	2-CH ₃ , 5-Cl	-O-	
d-40	2-CH ₃ , 8-F	-OH	-CH ₃	-C≡CH	2-CH ₃ , 5-Cl	-O-	

Bảng 29

Hợp chất số	¹ H-NMR
3	1.16(t, 3H), 4.23(q, 2H), 7.13(d, 1H), 7.29-7.64(m, 6H), 8.02(m, 1H), 8.08(d, 1H), 8.83(d, 1H), 1.19(t, 3H), 4.24(q, 2H), 6.80(m, 1H), 7.01(m, 1H), 7.43(d, 1H), 7.50-7.71(m, 3H), 8.04-8.16(m, 2H), 8.83(br, 1H)
5	1.22(t, 3H), 4.31(q, 2H), 6.79(d, 1H), 6.99(t, 1H), 7.38(m, 1H), 7.51-7.72(m, 4H), 8.11(d, 1H), 8.81(d, 1H)
7	1.20(t, 3H), 4.32(q, 2H), 6.85(d, 1H), 7.03(t, 1H), 7.30-7.54(m, 5H), 8.85(d, 1H)
8	7.03(d, 1H), 7.27(d, 1H), 7.30-7.77(m, 6H), 8.12(d, 1H), 8.81(d, 1H)
9	2.61(s, 3H), 6.79(m, 1H), 7.01(t, 1H), 7.31-7.49(m, 2H), 7.47-7.50(m, 2H), 7.58(m, 1H), 8.83(d, 1H)
10	1.28(s, 9H), 6.97(d, 1H), 7.17-7.26(m, 2H), 7.26(m, 1H), 7.52(t, 1H), 7.56(d, 1H), 7.63(m, 1H), 7.69(d, 1H), 8.09(d, 1H), 8.77(d, 1H)
11	1.28(s, 9H), 6.76(d, 1H), 6.98(t, 1H), 7.27-7.50(m, 4H), 7.59(m, 1H), 8.87(d, 1H)
12	7.13(m, 1H), 7.54(m, 1H), 7.69(m, 1H), 7.79(m, 1H), 7.96-8.04(m, 2H), 8.14(d, 1H), 8.25(br, 1H), 8.83(d, 1H)
13	1.35(d, 9H), 6.82(d, 1H), 7.03-7.14(m, 2H), 7.38-7.56(m, 5H), 8.02(d, 1H), 8.73(s, 1H)
14	0.71(t, 3H), 1.39(s, 6H), 1.84(q, 2H), 6.90(m, 1H), 7.12-7.23(m, 2H), 7.41(d, 1H), 7.43-7.68(m, 4H), 8.10(d, 1H), 8.80(br, 1H)
17	0.66(t, 3H), 1.37(s, 6H), 1.85(q, 2H), 6.64(d, 1H), 6.84-6.93(m, 2H), 7.07(m, 1H), 7.15-7.26(m, 2H), 7.41-7.47(m, 2H), 8.82(d, 1H)
18	2.98(s, 3H), 3.12(s, 3H), 6.88(d, 1H), 7.20(t, 1H), 7.41(d, 1H), 7.54(t, 1H), 7.63-7.73(m, 3H), 8.10(d, 1H), 8.79(d, 1H)
22	2.19(s, 3H), 3.89(s, 3H), 7.03(d, 1H), 7.26(m, 1H), 7.36-7.43(m, 2H), 7.48-7.55(m, 2H), 7.59-7.67(m, 2H), 8.08(d, 1H), 8.81(d, 1H)
24	1.18(s, 9H), 2.18(s, 3H), 7.05(d, 1H), 7.26(m, 1H), 7.35-7.64(m, 6H), 8.08(d, 1H), 8.80(d, 1H)
25	1.73(s, 3H), 3.17(s, 6H), 6.98(d, 1H), 7.19(t, 1H), 7.29(m, 1H), 7.48-7.68(m, 4H), 7.82(ddd, 1H), 8.08(d, 1H), 8.79(d, 1H)
27	0.20(s, 9H), 1.76(d, 1H), 4.57(br, 1H), 6.62(d, 1H), 6.92(m, 1H), 7.15(m, 1H), 7.33(m, 1H), 7.39(m, 1H), 7.46-7.51(m, 2H), 7.70(s, 1H), 8.83(br, 1H)
28	1.06(s, 9H), 1.76(d, 1H), 4.57(br, 1H), 6.62(d, 1H), 6.92(m, 1H), 7.15(m, 1H), 7.33(m, 1H), 7.46-7.51(m, 2H), 7.70(s, 1H), 8.83(br, 1H)
30	1.03(s, 9H), 1.60(s, 1H), 1.68(s, 3H), 6.86(m, 1H), 7.13-7.24(m, 2H), 7.51-7.71(m, 5H), 8.11(d, 1H), 8.79(d, 1H)
31	1.70(s, 3H), 2.22-2.37(m, 2H), 2.43(br, 1H), 2.91(m, 1H), 3.08(m, 1H), 6.72(d, 1H), 7.07(d, 1H), 7.24(t, 1H), 7.32(m, 1H), 7.45-7.49(m, 2H), 7.59(m, 1H), 8.88(d, 1H)
34	1.07(s, 9H), 2.13(m, 1H), 2.65(m, 1H), 2.93-2.99(m, 3H), 6.69(d, 1H), 7.03(d, 1H), 7.19(t, 1H), 7.33(m, 1H), 7.45-7.52(m, 2H), 7.67(m, 1H), 8.85(d, 1H)
35	

Bảng 30

Hợp chất số	¹ H-NMR
36	1.75(d, 6H), 3.79(d, 1H), 6.69(m, 1H), 6.958(m, 1H), 7.20(m, 1H), 7.35(m, 1H), 7.45-7.51(m, 2H), 7.59(d, 1H), 8.83(d, 1H).
37	1.76(d, 6H), 2.80(s, 3H), 3.87(br, 1H), 6.58(d, 1H), 6.93(m, 1H), 7.19(m, 1H), 7.29-7.45(m, 4H), 1.70(s, 6H), 3.01(br, 1H), 6.87(d, 1H), 7.15-7.25(m, 2H), 7.54(t, 1H), 7.60-7.71(m, 4H), 8.12(d, 1H), 8.81(d, 1H).
39	1.28(s, 9H), 7.03(s, 1H), 7.36(d, 1H), 7.52-7.72(m, 4H), 7.95(d, 1H), 8.13(d, 1H), 8.87(d, 1H), 10.42(s, 1H).
40	1.64(s, 6H), 2.53(s, 1H), 7.12(m, 1H), 7.21-7.32(m, 2H), 7.50-7.67(m, 4H), 8.11(d, 1H), 8.85(d, 1H), 1.70(s, 6H), 2.77(s, 1H), 6.56(m, 1H), 6.86(m, 1H), 7.54-7.75(m, 5H), 8.13(d, 1H), 8.80(d, 1H).
41	1.68(s, 6H), 2.88(s, 1H), 6.84-6.97(m, 2H), 7.44(m, 1H), 7.52-7.57(m, 2H), 7.62-7.71(m, 2H), 8.12(d, 1H), 8.79(d, 1H).
42	1.77(d, 6H), 4.00(d, 1H), 6.66(m, 1H), 6.90(m, 1H), 8.18(m, 1H), 8.53-7.73(m, 4H), 8.12(d, 1H), 8.79(d, 1H).
43	1.43(t, 3H), 1.72(s, 6H), 2.95(s, 1H), 3.14(d, 2H), 6.80(d, 1H), 7.16-7.25(m, 2H), 7.43-7.48(m, 2H), 7.60-7.67(m, 3H), 8.07(d, 1H).
46	0.94(t, 3H), 1.16(m, 2H), 1.72(s, 6H), 1.87(m, 2H), 2.92(s, 1H), 3.10(t, 2H), 6.81(d, 1H), 7.14-7.23(m, 2H), 7.43-7.48(m, 2H), 7.59-7.67(m, 3H), 8.07(d, 1H).
47	0.93(t, 3H), 1.72(d, 3H), 1.95(m, 1H), 2.03(m, 1H), 3.87(d, 1H), 6.68(d, 1H), 6.95(m, 1H), 7.21(m, 1H), 7.36(m, 1H), 7.44-7.51(m, 2H), 7.59(m, 1H), 8.82(d, 1H).
48	1.75(d, 6H), 3.76(d, 1H), 6.69(m, 1H), 6.94(m, 1H), 7.20(m, 1H), 7.47(m, 1H), 7.59-7.66(m, 2H), 7.78(d, 1H), 8.90(d, 1H).
49	6.81-6.84(m, 1H), 7.39-7.64(m, 8H), 7.72-7.76(m, 3H), 7.99(d, 1H), 8.07(d, 1H), 8.89(d, 1H), 10.29(s, 1H).
51	1.19(t, 3H), 4.25(d, 2H), 4.31(s, 2H), 7.04(d, 1H), 7.32-7.53(m, 5H), 7.86(s, 1H), 8.84(d, 1H).
53	0.94(s, 6H), 1.26(s, 6H), 2.45(s, 3H), 3.91(s, 2H), 7.03(m, 1H), 7.28-7.37(m, 3H), 7.40(m, 1H), 7.53(d, 1H), 7.61(t, 1H), 7.80-7.88(m, 4H), 8.16(d, 1H), 8.40(d, 1H), 9.27(d, 1H).
59	1.37(s, 6H), 1.98(t, 1H), 2.98(t, 1H), 6.72(d, 1H), 7.08(d, 1H), 7.17(t, 1H), 7.47-7.65(m, 3H), 8.02(d, 1H).
60	6.96(m, 1H), 7.16-7.32(m, 2H), 7.39-7.48(m, 3H), 7.57(m, 1H), 7.99(d, 1H), 8.45(br, 1H).
61	1.72(s, 6H), 2.77(s, 3H), 3.01(br, 1H), 6.79(d, 1H), 7.13-7.25(m, 2H), 7.43-7.49(m, 2H), 7.59-7.67(m, 3H), 8.05(d, 1H).
67	1.43(d, 6H), 1.73(s, 6H), 3.01(s, 1H), 3.64(m, 1H), 6.78(d, 1H), 7.12-7.25(m, 2H), 7.41-7.46(m, 2H), 7.58-7.65(m, 3H), 8.08(d, 1H).
68	1.70(s, 3H), 3.57(s, 1H), 4.11(s, 3H), 6.83(d, 1H), 7.11-7.23(m, 2H), 7.38(t, 1H), 7.54-7.62(m, 4H), 7.88(d, 1H).

Bảng 31

Hợp chất số	¹ H-NMR
70	1.35 (t, 3H), 1.71 (s, 6H), 3.61 (s, 1H), 4.56 (q, 2H), 6.84 (d, 1H), 7.11–7.20 (m, 2H), 7.39 (t, 1H), 7.53–7.63 (m, 4H), 7.85 (d, 1H).
72	1.26 (s, 3H), 1.36 (s, 3H), 1.76 (s, 3H), 2.17 (s, 1H), 4.01 (s, 1H), 6.89 (d, 1H), 7.17–7.28 (m, 2H), 7.54 (t, 1H), 7.60–7.71 (m, 4H), 8.11 (d, 1H), 8.78 (d, 1H).
73	1.15 (t, 3H), 1.86 (s, 3H), 3.80 (s, 1H), 3.94–4.08 (m, 2H), 6.95 (d, 1H), 7.23–7.37 (m, 2H), 7.49–7.55 (m, 2H), 7.61–7.71 (m, 3H), 8.10 (d, 1H), 8.72 (d, 1H).
74	2.04 (s, 3H), 4.27 (s, 1H), 6.60 (d, 1H), 6.94–7.04 (m, 3H), 7.10–7.46 (m, 8H), 8.31 (d, 1H).
75	1.84 (d, 3H), 3.12 (d, 1H), 3.36 (d, 1H), 4.17 (d, 1H), 6.50 (d, 1H), 6.89–7.50 (m, 11H), 8.51 (d, 1H).
76	1.83 (d, 3H), 3.92 (d, 1H), 5.01 (d, 1H), 5.16 (d, 1H), 6.25 (dd, 1H), 6.69 (d, 1H), 6.95 (dd, 1H), 7.22 (m, 1H), 7.33 (m, 1H), 7.47–7.50 (m, 2H), 7.56 (d, 1H), 8.76 (d, 1H).
77	1.74 (d, 3H), 2.62 (m, 1H), 2.89 (m, 1H), 3.87 (d, 1H), 5.10 (d, 1H), 5.78 (m, 1H), 6.69 (d, 1H), 6.94 (dd, 1H), 7.19 (m, 1H), 7.33 (m, 1H), 7.48–4.50 (m, 2H), 7.58 (d, 1H), 8.82 (d, 1H).
78	1.84 (d, 3H), 3.97 (d, 1H), 5.03 (d, 1H), 5.17 (d, 1H), 5.71 (dd, 1H), 6.27 (dd, 1H), 6.58 (d, 1H), 6.76 (dd, 1H), 6.93 (dd, 1H), 7.16–7.42 (m, 5H), 7.46 (d, 1H).
79	1.73 (d, 3H), 2.62 (m, 1H), 2.86 (m, 1H), 3.89–3.95 (m, 3H), 5.07–5.20 (m, 4H), 5.82 (m, 1H), 6.18 (m, 1H), 6.64 (d, 1H), 6.94 (dd, 1H), 7.16–7.41 (m, 5H).
80	0.95 (d, 3H), 0.99 (d, 3H), 1.67 (d, 3H), 2.30 (m, 1H), 3.81 (d, 1H), 6.67 (d, 1H), 6.94 (m, 1H), 7.17 (m, 1H), 7.33 (m, 1H), 7.45–7.51 (m, 2H), 7.61 (d, 1H), 8.81 (d, 1H).
81	1.75 (s, 3H), 1.85 (d, 3H), 4.00 (d, 1H), 4.77 (s, 1H), 4.95 (s, 1H), 6.68 (d, 1H), 6.95 (m, 1H), 7.22 (m, 1H), 7.35 (m, 1H), 7.48–7.51 (m, 2H), 7.57 (d, 1H), 8.72 (d, 1H).
82	1.81 (d, 3H), 3.09 (d, 1H), 3.35 (d, 1H), 4.13 (s, 1H), 6.57 (d, 1H), 6.80–7.04 (m, 6H), 7.10–7.51 (m, 4H), 8.65 (d, 1H).
83	1.08 (d, 3H), 1.67–1.70 (m, 3H), 2.84 (t, 2/3H), 2.95 (t, 1/3H), 3.72 (d, 1/3H), 3.94 (d, 2/3H), 4.97–5.10 (m, 2H), 5.78–5.95 (m, 1H), 6.68 (d, 1H), 6.90–6.96 (m, 1H), 7.16–7.25 (m, 1H), 7.31–7.38 (m, 1H), 7.47–7.50 (m, 2H), 7.59–7.62 (m, 1H), 8.81–8.83 (m, 1H).
86	0.39–0.45 (m, 3H), 0.55 (m, 1H), 1.51 (dd, 1H), 1.73 (d, 3H), 3.74 (d, 1H), 6.68 (m, 1H), 6.95 (m, 1H), 7.22 (m, 1H), 7.35 (m, 1H), 7.47–7.50 (m, 2H), 7.59 (d, 1H), 8.82 (d, 1H).
87	0.40–0.51 (m, 3H), 0.59 (m, 1H), 1.09 (m, 2H), 1.38 (m, 2H), 1.55 (m, 1H), 1.76 (d, 3H), 2.54 (m, 1H), 4.08 (d, 1H), 6.62 (d, 1H), 6.91 (dd, 1H), 7.13–7.40 (m, 4H), 7.45 (s, 1H).
88	0.95 (t, 3H), 1.73 (d, 3H), 1.98 (m, 1H), 2.08 (m, 1H), 2.79 (s, 3H), 3.96 (d, 1H), 6.58 (d, 1H), 6.92 (m, 1H), 7.19 (m, 1H), 7.29–7.46 (m, 4H).
89	1.74 (d, 3H), 2.76 (s, 3H), 3.99 (d, 1H), 5.02 (d, 1H), 5.18 (d, 1H), 6.28 (m, 1H), 6.58 (d, 1H), 6.94 (m, 1H), 7.21 (m, 1H), 7.29–7.42 (m, 4H).
90	0.39–0.47 (m, 3H), 0.58 (m, 1H), 1.50 (m, 1H), 1.74 (d, 3H), 2.80 (s, 3H), 3.85 (d, 1H), 6.59 (d, 1H), 6.95 (m, 1H), 7.18 (m, 1H), 7.28–7.46 (m, 4H).

Bảng 32

Hợp chất số	¹ H-NMR
91	1.83 (d, 3H), 2.63 (s, 3H), 3.06 (d, 1H), 3.30 (d, 1H), 3.67 (s, 3H), 4.21 (br, 1H), 6.43 (d, 1H), 6.68 (d, 2H), 6.89-6.96 (m, 3H), 7.16 (m, 1H), 7.27-7.41 (m, 4H)
92	1.82 (d, 3H), 2.64 (s, 3H), 3.10 (d, 1H), 3.34 (d, 1H), 4.25 (br, 1H), 6.45 (d, 1H), 6.81-7.02 (m, 6H), 7.17 (m, 1H), 7.26-7.42 (m, 3H)
94	1.78 (d, 6H), 2.74 (s, 3H), 2.81 (s, 3H), 4.23 (d, 1H), 6.52 (d, 1H), 6.86 (dd, 1H), 7.10 (m, 1H), 7.37 (t, 1H), 7.48-7.51 (m, 3H)
97	1.81 (s, 6H), 2.82 (s, 3H), 4.02 (s, 1H), 6.80 (dd, 1H), 7.17 (m, 1H), 7.26-7.32 (m, 3H), 7.37-7.40 (m, 2H)
101	1.68 (s, 6H), 2.40 (s, 3H), 6.82 (d, 1H), 7.07 (m, 1H), 7.2-7.6 (m, 5H), 8.86 (d, 1H)
103	1.82 (s, 6H), 4.12 (s, 1H), 6.86 (dd, 1H), 7.15 (m, 1H), 7.28 (m, 1H), 7.47-7.56 (m, 2H), 7.62-7.70 (m, 2H), 8.10 (d, 1H), 8.77 (d, 1H)
105	1.76 (d, 3H), 2.76 (s, 3H), 3.93 (d, 1H), 6.58 (d, 1H), 6.92 (m, 1H), 7.13-7.27 (m, 2H), 7.35-7.42 (m, 2H), 8.02 (m, 1H)
107	1.78 (d, 6H), 2.75 (s, 3H), 6.55 (m, 1H), 6.89 (m, 1H), 7.14 (m, 1H), 7.4-7.7 (m, 4H), 8.05 (dd, 1H)
108	1.82 (s, 6H), 2.77 (s, 3H), 4.18 (s, 1H), 6.77 (dd, 1H), 7.13 (m, 1H), 7.25-7.35 (m, 2H), 7.46 (m, 1H), 7.59-7.64 (m, 2H), 8.04 (d, 1H)
111	2.62 (s, 3H), 6.75 (d, 1H), 6.96 (t, 1H), 7.36 (m, 1H), 7.55 (t, 1H), 7.61 (d, 1H), 7.65-7.76 (m, 2H), 8.12 (d, 1H), 8.79 (d, 1H)
113	0.20 (s, 9H), 6.73 (d, 1H), 6.97 (m, 1H), 7.36 (m, 1H), 7.54-7.77 (m, 4H), 8.12 (d, 1H), 8.71 (d, 1H)
118	1.76 (d, 3H), 2.74 (s, 3H), 3.92 (d, 1H), 6.55 (m, 1H), 6.91 (m, 1H), 7.17 (m, 1H), 7.41-7.51 (m, 2H), 7.57 (d, 1H), 8.04 (d, 1H)
119	1.77 (d, 6H), 3.88 (d, 1H), 6.63 (m, 1H), 7.04 (m, 1H), 7.53-7.59 (m, 2H), 7.65-7.73 (m, 2H), 8.12 (d, 1H), 8.79 (d, 1H)
126	1.77 (d, 6H), 3.97 (d, 1H), 6.64 (m, 1H), 6.91 (m, 1H), 7.17 (dt, 1H), 7.36 (dt, 1H), 7.63 (d, 1H), 7.68-7.77 (m, 2H), 8.80 (d, 1H)
131	2.17-2.25 (m, 2H), 2.83-2.93 (m, 1H), 3.16-3.27 (m, 1H), 3.33 (s, 3H), 4.88 (t, 1H), 6.84 (d, 1H), 7.14 (d, 1H), 7.30 (d, 1H), 7.48-7.54 (m, 2H), 7.59-7.68 (m, 2H), 8.10 (d, 1H), 8.85 (d, 1H)
132	1.44 (d, 3H), 3.25 (s, 3H), 4.73 (d, 1H), 6.96-6.99 (m, 1H), 7.26-7.33 (m, 2H), 7.41 (d, 1H), 7.51 (t, 1H), 7.58-7.66 (m, 3H), 8.10 (d, 1H), 8.82 (d, 1H)
133	0.99 (t, 3H), 2.16-2.25 (m, 1H), 2.88-2.92 (m, 1H), 3.16-3.25 (m, 1H), 3.35-3.43 (m, 1H), 3.48-3.56 (m, 1H), 4.97 (dd, 1H), 6.87 (d, 1H), 7.13 (d, 1H), 7.29 (t, 1H), 7.46-7.52 (m, 2H), 7.58-7.67 (m, 2H), 8.09 (d, 1H), 8.84 (d, 1H)
134	0.74 (t, 3H), 1.35-1.43 (m, 2H), 2.17-2.25 (m, 2H), 2.89 (m, 1H), 3.22 (m, 1H), 3.29 (m, 1H), 3.44 (m, 1H), 4.98 (m, 1H), 6.85 (d, 1H), 7.13 (d, 1H), 7.29 (t, 1H), 7.46-7.52 (m, 2H), 7.58-7.67 (m, 2H), 8.10 (d, 1H), 8.84 (d, 1H)

Bảng 33

Hợp chất số	¹ H-NMR
135	0.87 (t, 3H), 1.43 (d, 3H), 1.54 (m, 2H), 3.28 (m, 2H), 4.81 (m, 1H), 6.95 (m, 1H), 7.26–7.30 (m, 2H), 7.39 (d, 1H), 7.51 (m, 1H), 7.59–7.66 (m, 3H), 8.10 (d, 1H), 8.82 (d, 1H)
136	1.00 (s, 9H), 1.99 (br, 1H), 4.89 (d, 1H), 6.91 (d, 1H), 7.23 (m, 1H), 7.48 (d, 1H), 7.53 (d, 1H), 7.60–7.68 (m, 4H), 8.10 (d, 1H), 8.80 (d, 1H)
137	2.11 (m, 1H), 2.49 (m, 1H), 2.85 (br, 1H), 2.91 (m, 1H), 3.20 (m, 1H), 5.50 (m, 1H), 6.76 (d, 1H), 7.11 (d, 1H), 7.26 (t, 1H), 7.52 (t, 1H), 7.55–7.71 (m, 3H), 8.13 (d, 1H), 8.82 (s, 1H)
140	1.60 (d, 3H), 3.24 (s, 3H), 4.86 (q, 1H), 6.78 (d, 1H), 7.01 (t, 1H), 7.25–7.35 (m, 2H), 7.42–7.50 (m, 3H), 8.83 (d, 1H)
142	1.61 (d, 3H), 3.18 (s, 3H), 5.03 (q, 1H), 6.94 (dd, 1H), 7.15 (t, 1H), 7.27–7.37 (m, 2H), 7.41–7.49 (m, 2H), 8.81 (d, 1H)
143	0.44–0.67 (m, 4H), 1.62 (m, 1H), 2.86 (d, 1H), 4.57 (t, 1H), 6.84 (dd, 1H), 7.20 (t, 1H), 7.26 (m, 1H), 7.34 (m, 1H), 7.47–7.50 (m, 2H), 7.61 (d, 1H), 8.86 (d, 1H)
145	1.10 (s, 9H), 3.32 (d, 1H), 5.18 (d, 1H), 6.76 (dd, 1H), 7.14 (t, 1H), 7.24 (m, 1H), 7.37 (m, 1H), 7.47–7.53 (m, 2H), 7.71 (d, 1H), 8.83 (d, 1H)
146	1.65 (d, 3H), 2.99 (d, 1H), 5.50 (m, 1H), 6.81 (d, 1H), 7.15–7.27 (m, 2H), 7.36 (m, 1H), 7.48–7.50 (m, 2H), 7.60 (m, 1H), 8.86 (d, 1H)
147	1.62 (d, 3H), 3.20 (s, 3H), 5.07 (q, 1H), 6.91 (dd, 1H), 7.22–7.35 (m, 3H), 7.41–7.49 (m, 3H), 8.81 (d, 1H)
148	1.65 (d, 3H), 3.00 (d, 1H), 5.47 (m, 1H), 6.84 (d, 1H), 7.10 (t, 1H), 7.30–7.51 (m, 4H), 7.61 (d, 1H), 8.86 (d, 1H)
149	1.61 (d, 3H), 3.19 (s, 3H), 5.06 (q, 1H), 6.96 (d, 1H), 7.17 (t, 1H), 7.28 (m, 1H), 7.43–7.51 (m, 4H), 8.81 (d, 1H)
150	1.50 (d, 3H), 2.54 (s, 3H), 3.16 (s, 3H), 4.92 (q, 1H), 6.84 (d, 1H), 7.08 (d, 1H), 7.21 (t, 1H), 7.26–7.34 (m, 2H), 7.38–7.46 (m, 2H), 8.84 (d, 1H)
152	1.61 (d, 3H), 2.83 (s, 3H), 3.16 (s, 3H), 5.05 (q, 1H), 6.85 (dd, 1H), 7.21–7.32 (m, 4H), 7.34–7.40 (m, 2H)
153	1.63 (d, 3H), 3.29 (s, 3H), 4.97 (q, 1H), 7.18 (d, 1H), 7.32–7.51 (m, 5H), 7.61 (d, 1H), 8.83 (d, 1H)
154	1.62 (d, 3H), 3.22 (s, 3H), 4.09 (s, 3H), 5.08 (q, 1H), 6.91 (d, 1H), 6.97 (m, 1H), 7.13 (t, 1H), 7.25 (m, 1H), 7.41–7.47 (m, 3H), 8.76 (d, 1H)
155	1.58 (d, 3H), 3.20 (s, 3H), 3.90 (s, 3H), 4.09 (s, 3H), 5.00 (q, 1H), 6.58 (d, 1H), 6.78 (d, 1H), 6.95 (d, 1H), 7.21–7.28 (m, 2H), 7.39–7.4 (m, 2H), 8.78 (br, 1H)
156	1.63 (d, 3H), 3.82 (d, 2H), 4.98 (dd, 1H), 5.15 (dd, 1H), 5.21 (q, 1H), 5.70 (m, 1H), 6.92 (dd, 1H), 7.24–7.33 (m, 3H), 7.39–7.49 (m, 3H), 8.82 (d, 1H)
157	1.02 (t, 3H), 1.92–2.08 (m, 2H), 2.84 (d, 1H), 5.23 (m, 1H), 6.80 (dd, 1H), 7.18 (t, 1H), 7.24 (m, 1H), 7.35 (m, 1H), 7.45–7.51 (m, 2H), 7.60 (m, 1H), 8.84 (d, 1H)

Bảng 34

Hợp chất số	¹ H-NMR
160	1.65 (d, 3H), 4.33 (d, 1H), 4.38 (d, 1H), 5.25 (d, 1H), 6.93 (dd, 1H), 7.13 (m, 5H), 7.25-7.42 (m, 6H), 8.79 (d, 1H).
161	6.56 (d, 1H), 6.78 (m, 1H), 7.2-7.5 (m, 11H), 8.50 (d, 1H).
163	0.85 (t, 3H), 1.2-1.4 (m, 4H), 1.9-2.1 (m, 2H), 2.90 (d, 1H), 5.31 (m, 1H), 6.80 (dd, 1H), 7.1-7.6 (m, 6H), 8.83 (d, 1H).
164	2.25 (m, 1H), 3.53 (d, 1H), 6.07 (dd, 1H), 6.86 (m, 1H), 7.2-7.7 (m, 6H), 8.85 (d, 1H).
165	0.13 (s, 9H), 6.45 (s, 1H), 6.94 (d, 1H), 7.29-7.38 (m, 3H), 7.48-7.50 (m, 2H), 7.59 (m, 1H), 8.86 (d, 1H).
167	1.62 (d, 3H), 3.20 (s, 3H), 5.08 (q, 1H), 6.91 (dd, 1H), 7.21-7.34 (m, 3H), 7.42-7.47 (m, 3H), 8.81 (d, 1H).
168	3.51 (s, 3H), 3.65 (s, 3H), 5.44 (s, 1H), 6.89 (m, 1H), 7.2-7.6 (m, 6H), 8.78 (d, 1H).
170	0.02 (s, 9H), 2.26 (s, 3H), 5.52 (s, 1H), 6.86 (dd, 1H), 7.2-7.6 (m, 6H), 8.75 (d, 1H).
171	2.22 (s, 3H), 4.13 (d, 1H), 5.66 (d, 1H), 6.91 (m, 1H), 7.3-7.6 (m, 6H), 8.76 (d, 1H).
172	2.34 (s, 3H), 3.46 (s, 3H), 5.28 (s, 1H), 6.9 (m, 1H), 7.2-7.26 (m, 6H), 8.81 (d, 1H).
173	1.26 (s, 3H), 1.45 (s, 3H), 3.67 (d, 1H), 5.27 (d, 1H), 6.83 (d, 1H), 7.1-7.5 (m, 6H), 7.66 (bs, 1H), 8.82 (d, 1H).
174	2.97 (d, 1H), 3.31 (m, 2H), 5.59 (m, 1H), 6.75 (d, 1H), 7.13-7.49 (m, 11H), 8.77 (br, 1H).
175	3.19 (s, 3H), 3.28-3.44 (m, 2H), 5.18 (t, 1H), 6.82 (d, 1H), 7.11-7.49 (m, 11H), 8.67 (br, 1H).
177	1.60 (d, 3H), 3.17 (s, 3H), 5.04 (q, 1H), 6.97 (dd, 1H), 7.13 (t, 1H), 7.26-7.36 (m, 2H), 7.42-7.49 (m, 2H), 8.81 (d, 1H).
180	1.23 (s, 3H), 1.40 (s, 3H), 3.20 (s, 3H), 4.87 (s, 1H), 6.94 (d, 1H), 7.26-7.35 (m, 3H), 7.45-7.48 (m, 3H), 8.75 (d, 1H).
181	3.59 (d, 1H), 3.70 (s, 3H), 5.79 (d, 1H), 6.8-6.95 (m, 1H), 7.2-7.6 (m, 6H), 8.77 (d, 1H).
185	1.71 (t, 3H), 3.06 (m, 1H), 5.34 (m, 1H), 7.08 (d, 1H), 7.32-7.41 (m, 2H), 7.49-7.52 (m, 3H), 7.67 (dd, 1H), 8.86 (d, 1H).
186	1.67 (d, 3H), 3.16 (s, 3H), 4.85 (q, 1H), 7.21 (d, 1H), 7.32 (m, 1H), 7.41-7.47 (m, 4H), 7.58 (d, 1H), 8.80 (d, 1H).
188	1.63 (d, 3H), 3.23 (s, 3H), 5.10 (q, 1H), 6.89 (dd, 1H), 7.18-7.29 (m, 2H), 7.45 (d, 1H), 7.52 (t, 1H), 7.60-7.69 (m, 2H), 8.10 (d, 1H), 8.78 (d, 1H).
189	1.48 (d, 3H), 1.97 (d, 1H), 5.17 (m, 1H), 7.15 (m, 1H), 7.24-7.35 (m, 2H), 7.45-7.52 (m, 2H), 7.58-7.63 (m, 2H), 8.09 (d, 1H), 8.87 (d, 1H).
190	1.61 (d, 3H), 2.69 (m, 1H), 5.43 (m, 1H), 7.09 (t, 1H), 7.27-7.34 (m, 2H), 7.52 (t, 1H), 7.60-7.67 (m, 2H), 8.10 (d, 1H), 8.87 (d, 1H).
198	1.61 (d, 3H), 2.83 (s, 3H), 3.16 (s, 3H), 5.04 (q, 1H), 6.84 (dd, 1H), 7.19-7.36 (m, 5H).

Bảng 35

Hợp chất số	¹ H-NMR
203	1.62 (d, 3H), 3.22 (s, 3H), 5.09 (q, 1H), 6.87 (dd, 1H), 7.1–7.4 (m, 3H), 7.46 (d, 1H), 7.6–7.8 (m, 2H), 8.78 (d, 1H).
204	1.78 (s, 3H), 3.74 (s, 3H), 4.14 (d, 1H), 5.85 (d, 1H), 6.93 (m, 1H), 7.2–7.5 (m, 6H), 8.78 (d, 1H).
206	1.77 (d, 1H), 2.71 (s, 3H), 5.52 (m, 1H), 6.24 (dd, 1H), 6.83 (m, 1H), 7.07 (m, 1H), 7.42–7.77 (m, 2H), 7.80 (m, 1H).
207	1.52 (dd, 3H), 2.29 (s, 6H), 3.95 (q, 1H), 6.78 (d, 1H), 6.97 (m, 1H), 7.23–7.34 (m, 2H), 7.43–7.47 (m, 3H), 8.84 (d, 1H).
209	1.60 (d, 3H), 3.19 (s, 3H), 3.92 (s, 3H), 4.82 (q, 1H), 7.0–7.1 (m, 1H), 7.2–7.5 (m, 6H), 8.84 (d, 1H).
210	1.59 (d, 3H), 2.59 (s, 3H), 3.23 (s, 3H), 4.76 (q, 1H), 6.99 (dd, 1H), 7.11 (dd, 1H), 7.2–7.5 (m, 5H), 8.85 (d, 1H).
211	1.60 (d, 3H), 2.51 (s, 3H), 3.23 (s, 3H), 5.04 (q, 1H), 6.78 (dd, 1H), 7.12 (d, 1H), 7.2–7.5 (m, 5H), 8.83 (d, 1H).
212	1.74 (d, 3H), 3.24 (s, 3H), 3.26 (s, 3H), 5.48 (q, 1H), 7.2–7.5 (m, 5H), 8.03 (d, 1H), 8.81 (d, 1H).
215	1.60 (d, 3H), 3.02 (s, 3H), 4.48 (q, 1H), 7.02 (dd, 1H), 7.12 (dd, 1H), 7.2–7.55 (m, 10H), 8.85 (d, 1H).
217	3.42 (s, 6H), 5.65 (s, 1H), 6.79 (d, 1H), 7.01 (t, 1H), 7.29–7.37 (m, 2H), 7.45–7.48 (m, 3H), 8.86 (d, 1H).
218	1.11 (t, 6H), 3.49 (m, 2H), 3.74 (m, 2H), 5.78 (s, 1H), 6.80 (d, 1H), 7.01 (t, 1H), 7.27–7.36 (m, 2H), 7.43–7.49 (m, 3H), 8.86 (d, 1H).
220	3.35 (s, 3H), 4.66 (s, 2H), 6.92 (dd, 1H), 7.29–7.35 (m, 3H), 7.44–7.46 (m, 3H), 8.88 (d, 1H).
221	3.99 (m, 2H), 4.70 (s, 2H), 5.08 (d, 1H), 5.17 (d, 1H), 5.78 (m, 1H), 6.93 (dd, 1H), 7.28–7.35 (m, 3H), 7.44–7.49 (m, 3H), 8.88 (d, 1H).
223	3.36 (s, 3H), 4.66 (s, 2H), 6.96 (d, 1H), 7.22 (t, 1H), 7.33 (m, 1H), 7.45–7.52 (m, 3H), 8.88 (d, 1H).
224	0.83 (t, 3H), 1.30 (m, 2H), 1.40 (m, 2H), 2.60 (t, 2H), 3.99 (s, 2H), 6.90 (d, 1H), 7.20–7.37 (m, 3H), 7.44–7.50 (m, 3H), 8.87 (d, 1H).
225	0.99 (s, 6H), 1.48 (s, 6H), 1.63 (d, 1H), 3.57 (d, 1H), 6.93 (d, 1H), 7.14–7.26 (m, 2H), 7.44–7.71 (m, 5H), 8.09 (d, 1H), 8.77 (br, 1H).
226	0.95 (s, 6H), 1.42 (s, 6H), 2.43 (s, 3H), 4.01 (s, 2H), 6.87 (d, 1H), 7.11 (m, 1H), 7.20 (m, 1H), 7.28 (d, 2H), 7.40–7.54 (m, 3H), 7.59–7.74 (m, 4H), 8.10 (d, 1H), 8.68 (d, 1H).
227	1.23 (s, 6H), 1.52 (s, 6H), 2.49 (s, 1H), 6.94 (d, 1H), 7.18–7.26 (m, 2H), 7.49–7.66 (m, 5H), 8.10 (d, 1H), 8.77 (d, 1H).
230	0.87 (s, 3H), 1.04 (s, 3H), 1.22 (d, 3H), 1.52 (d, 6H), 1.68 (d, 1H), 4.08 (m, 1H), 6.94 (m, 1H), 7.15–7.26 (m, 2H), 7.46–7.54 (m, 2H), 7.59–7.68 (m, 3H), 8.10 (d, 1H), 8.78 (d, 1H).
232	1.38 (s, 6H), 1.65 (s, 6H), 6.95 (m, 1H), 7.19–7.31 (m, 2H), 7.47 (d, 1H), 7.52 (m, 1H), 7.60–7.69 (m, 3H), 8.10 (d, 1H), 8.75 (d, 1H).

Bảng 36

Hợp chất số	¹ H-NMR
234	1.49 (s, 6H), 6.92 (m, 1H), 7.19–7.33 (m, 2H), 7.48–7.71 (m, 5H), 8.02 (d, 1H), 8.72 (d, 1H), 9.72 (s, 1H)
235	1.05 (s, 6H), 1.57 (s, 6H), 3.64 (d, 1H), 6.73 (d, 1H), 6.87 (m, 1H), 7.15 (m, 1H), 7.81–7.55 (m, 2H), 7.61–7.73 (m, 2H), 8.10 (d, 1H), 8.75 (d, 1H)
243	1.08 (s, 6H), 1.52 (s, 6H), 2.26 (s, 2H), 6.88 (m, 1H), 7.17 (m, 1H), 7.36 (s, 2H), 7.50–7.70 (m, 4H), 8.81 (d, 1H), 8.91 (d, 1H)
244	1.02 (br, 1H), 1.46 (s, 6H), 2.19 (t, 2H), 3.56 (m, 2H), 6.90 (d, 1H), 7.13–7.24 (m, 2H), 7.43 (d, 1H), 7.49–7.54 (m, 2H), 7.60–7.70 (m, 2H), 8.10 (d, 1H), 8.81 (d, 1H)
246	1.06 (d, 3H), 1.50 (d, 6H), 1.96 (dd, 1H), 2.15 (dd, 1H), 3.83 (m, 1H), 6.89 (dd, 1H), 7.13–7.26 (m, 2H), 7.46–7.55 (m, 2H), 7.59–7.70 (m, 3H), 8.11 (d, 1H), 8.82 (d, 1H)
247	1.47 (s, 6H), 2.21 (d, 2H), 3.16 (s, 6H), 4.19 (t, 1H), 6.87 (dd, 1H), 7.13–7.20 (m, 2H), 7.44 (m, 1H), 7.49 (t, 1H), 7.54–7.70 (m, 3H), 8.10 (d, 1H), 8.81 (d, 1H)
248	0.99 (s, 6H), 1.49 (s, 6H), 3.43 (s, 6H), 3.95 (s, 1H), 6.93 (d, 1H), 7.12–7.24 (m, 2H), 7.42 (d, 1H), 7.48–7.67 (m, 4H), 8.09 (d, 1H), 8.78 (d, 1H)
251	1.26 (s, 6H), 1.56 (s, 6H), 2.48 (s, 1H), 2.79 (s, 1H), 6.88 (m, 1H), 7.19–7.30 (m, 3H), 7.43 (t, 1H), 7.56–7.61 (m, 3H), 8.02 (d, 1H)
252	0.97 (t, 1H), 1.47 (s, 6H), 2.19 (t, 2H), 2.94 (s, 3H), 3.57 (m, 1H), 6.83 (dd, 1H), 7.11–7.23 (m, 2H), 7.37 (s, 1H), 7.41–7.46 (m, 2H), 7.56–7.62 (m, 2H), 8.02 (d, 1H)
253	1.09 (d, 3H), 1.40 (s, 3H), 1.45 (s, 3H), 1.72 (bs, 1H), 4.54 (m, 1H), 6.89 (dd, 1H), 7.1–7.3 (m, 2H), 7.4–7.7 (m, 5H), 8.09 (d, 1H), 8.77 (d, 1H)
254	0.91 (t, 3H), 1.2–1.5 (m, 8H), 1.6–1.7 (m, 1H), 4.1–4.2 (m, 1H), 6.90 (dd, 1H), 7.1–7.3 (m, 2H), 7.4–7.7 (m, 5H), 8.10 (d, 1H), 8.77 (d, 1H)
255	1.43 (s, 3H), 1.49 (s, 3H), 1.57 (s, 3H), 1.75 (d, 1H), 4.8–5.0 (m, 3H), 6.91 (dd, 1H), 7.1–7.3 (m, 2H), 7.4–7.7 (m, 5H), 8.10 (d, 1H), 8.81 (d, 1H)
256	0.89 (s, 3H), 1.05–1.10 (m, 6H), 1.23 (br, 6H), 2.81 (s, 3H), 4.09 (m, 1H), 6.88 (d, 1H), 7.18–7.26 (m, 3H), 7.42 (t, 1H), 7.55–7.64 (m, 3H), 8.01 (d, 1H)
257	1.24 (s, 6H), 1.53 (br, 6H), 1.88 (s, 3H), 2.83 (s, 3H), 6.87 (d, 1H), 7.13–7.26 (m, 3H), 7.41–7.46 (m, 2H), 7.56–7.60 (m, 2H), 8.03 (d, 1H)
258	1.11 (br, 1H), 1.45 (s, 6H), 2.37 (t, 2H), 3.55 (m, 2H), 6.90 (m, 1H), 7.15–7.34 (m, 3H), 7.42–7.46 (m, 3H), 7.53 (d, 1H), 8.84 (d, 1H)
259	0.98 (br, 1H), 1.46 (s, 6H), 2.17 (t, 2H), 2.86 (s, 3H), 3.57 (m, 2H), 6.86 (d, 1H), 7.15–7.30 (m, 3H), 7.36–7.37 (m, 3H), 7.45 (m, 1H)
260	1.51 (s, 6H), 2.11 (s, 3H), 6.91 (dd, 1H), 7.2–7.3 (m, 2H), 7.5–7.7 (m, 5H), 8.11 (d, 1H), 8.71 (d, 1H), 1.47 (s, 6H), 2.28 (t, 2H), 2.84 (s, 3H), 3.66 (s, 3H), 4.04 (t, 2H), 6.84 (m, 1H), 7.12–7.28 (m, 3H), 7.30–7.45 (m, 4H)
261	

Bảng 37

Hợp chất số	¹ H-NMR
262	1.59 (s, 6H), 2.18 (s, 3H), 6.72 (m, 1H), 6.96 (m, 1H), 7.2-7.6 (m, 5H), 8.73 (d, 1H)
263	1.3 (s, 6H), 1.63 (s, 6H), 6.74 (d, 1H), 6.91 (m, 1H), 7.18 (m, 1H), 7.5-7.8 (m, 4H), 8.10 (d, 1H), 8.75 (d, 1H)
265	1.60 (s, 6H), 2.18 (s, 3H), 6.70 (d, 1H), 6.92 (m, 1H), 7.20 (m, 1H), 7.5-7.8 (m, 2H), 8.10 (d, 1H), 8.69 (d, 1H)
266	1.59 (d, 6H), 2.18 (s, 3H), 6.68 (d, 2H), 6.92 (dd, 1H), 6.96-7.24 (m, 1H), 7.31-7.37 (m, 1H), 7.55 (d, 1H), 7.67-7.75 (m, 2H), 8.69 (d, 1H)
267	1.59 (d, 6H), 2.18 (s, 3H), 6.70 (d, 1H), 6.96 (dd, 1H), 7.19-7.25 (m, 1H), 7.40-7.49 (m, 2H), 7.53 (d, 1H), 8.75 (d, 1H)
268	0.87 (d, 3H), 1.39 (s, 3H), 1.44 (s, 3H), 1.85 (s, 1H), 4.50 (m, 1H), 6.91 (d, 1H), 7.16-7.33 (m, 3H), 7.43-7.52 (m, 3H), 8.81 (d, 1H)
269	1.51 (s, 6H), 2.14 (s, 3H), 6.92 (d, 1H), 7.22-7.36 (m, 3H), 7.44-7.48 (m, 2H), 7.50-7.58 (m, 2H), 8.73 (d, 1H)
270	1.88 (s, 6H), 2.86 (s, 3H), 6.88 (d, 1H), 7.18-7.43 (m, 5H), 7.50-7.56 (m, 2H)
271	1.89 (s, 6H), 6.93 (d, 1H), 7.20 (m, 1H), 7.31 (m, 1H), 7.54 (t, 1H), 7.63-7.73 (m, 2H), 8.12 (d, 1H), 8.83 (d, 1H)
277	0.82 (t, 3H), 1.20 (t, 3H), 1.64 (m, 1H), 3.04 (m, 1H), 6.98 (m, 1H), 7.19-7.26 (m, 2H), 7.32-7.39 (m, 2H), 7.49 (t, 1H), 7.52-7.65 (m, 2H), 8.10 (d, 1H), 8.83 (br, 1H)
278	0.79 (d, 3H), 0.94 (d, 3H), 1.21 (d, 3H), 1.78-1.90 (m, 1H), 2.80-2.90 (m, 1H), 6.94-6.99 (m, 1H), 7.18-7.4 (m, 2H), 7.35 (d, 1H), 7.49 (t, 1H), 7.58-7.65 (m, 3H), 8.09 (d, 1H), 8.93 (br, 1H)
280	2.24 (s, 3H), 2.72 (s, 3H), 4.13 (d, 1H), 5.51 (d, 1H), 6.69 (d, 1H), 7.02 (t, 1H), 7.2-7.6 (m, 5H)
286	1.73-1.82 (m, 4H), 2.66-2.70 (m, 2H), 2.82-2.84 (m, 2H), 6.82 (d, 1H), 6.98 (d, 1H), 7.13 (t, 1H), 7.31 (d, 1H), 7.48-7.76 (m, 4H), 8.07-8.14 (m, 2H), 8.83 (d, 1H)
289	1.26 (t, 3H), 4.25 (q, 2H), 6.73 (d, 1H), 7.01 (t, 1H), 7.41 (m, 1H), 7.56 (t, 1H), 7.63 (d, 1H), 7.66-7.75 (m, 2H), 8.12 (d, 1H), 8.74 (d, 1H)
295	3.13 (s, 3H), 3.63 (s, 3H), 6.76 (d, 1H), 7.03 (m, 1H), 7.31-7.52 (m, 4H), 7.60 (dd, 1H), 8.78 (d, 1H)
297	1.01 (m, 2H), 1.31 (m, 2H), 4.53 (s, 2H), 6.79 (d, 1H), 6.98 (t, 1H), 7.08-7.11 (m, 2H), 7.16-7.18 (m, 3H), 7.28-7.49 (m, 5H), 8.87 (d, 1H)
308	1.66 (s, 3H), 2.93 (d, 1H), 2.99 (d, 1H), 6.74 (d, 1H), 6.95 (t, 1H), 7.26-7.36 (m, 2H), 7.46-7.48 (m, 2H), 7.54 (d, 1H), 8.85 (d, 1H)
328	3.45 (s, 6H), 4.54 (s, 2H), 5.93 (s, 1H), 7.04 (d, 1H), 7.17 (t, 1H), 7.27 (m, 1H), 7.31 (m, 1H), 7.43 (m, 1H), 7.50 (m, 1H), 7.85 (s, 1H), 8.86 (d, 1H)
329	1.27 (t, 3H), 4.26 (q, 2H), 4.60 (s, 2H), 7.27-7.52 (m, 6H), 7.81 (s, 1H), 7.99 (d, 1H), 8.88 (d, 1H)
330	1.18 (t, 3H), 4.24 (q, 2H), 4.30 (s, 2H), 7.01-7.07 (m, 2H), 7.35 (m, 1H), 7.51 (t, 1H), 7.67 (t, 1H), 7.72 (d, 1H), 7.85 (s, 1H), 8.07 (d, 1H), 8.78 (d, 1H)

Bảng 38

Hợp chất số	¹ H-NMR
331	1.15 (t, 3H), 4.09 (q, 2H), 4.28 (s, 2H), 7.02-7.07 (m, 2H), 7.27-7.40 (m, 2H), 7.68-7.83 (m, 2H), 8.16 (d, 1H), 8.78 (d, 1H).
334	5.28-5.61 (m, 2H), 5.83-6.12 (m, 2H), 7.18-7.42 (m, 4H), 7.54-8.10 (m, 4H), 8.47 (dd, 1H), 9.02 (d, 1H).
339	1.55 (d, 3H), 1.68 (d, 3H), 6.14 (s, 1H), 7.32-7.41 (m, 2H), 7.51-7.63 (m, 3H), 7.81-7.88 (m, 2H), 8.16 (d, 1H), 8.44 (d, 1H), 9.24 (d, 1H).
340	7.52-7.67 (m, 5H), 7.83-7.88 (m, 2H), 7.96 (m, 1H), 8.08 (d, 1H), 8.18-8.21 (m, 2H), 8.53 (d, 1H), 9.42 (d, 1H).
343	5.94 (dd, 1H), 6.22 (dd, 1H), 6.89 (dd, 1H), 7.54-7.87 (m, 7H), 8.14 (m, 1H), 8.47 (d, 1H), 9.28 (d, 1H).
344	1.66 (s, 3H), 3.02 (s, 2H), 4.50 (m, 1H), 4.70 (m, 1H), 7.31-7.71 (m, 7H), 8.50 (m, 1H), 9.33 (d, 1H).
345	3.07 (t, 2H), 3.58 (t, 2H), 7.35-7.71 (m, 5H), 7.84-7.91 (m, 2H), 8.19 (d, 1H), 8.50 (d, 1H), 9.36 (d, 1H).
347	1.64 (s, 3H), 3.53 (s, 2H), 4.40 (m, 1H), 4.64 (m, 1H), 7.17 (dd, 1H), 7.26-7.42 (m, 2H), 7.63 (m, 1H), 7.82-7.90 (m, 2H), 8.18 (m, 1H), 8.46 (d, 1H), 9.30 (d, 1H).
350	1.67 (d, 3H), 1.75 (d, 3H), 2.60 (bs, 1H), 5.04 (bs, 1H), 6.54 (s, 1H), 7.02-7.10 (m, 2H), 7.18-7.55 (m, 5H), 8.04 (s, 1H), 8.85 (d, 1H).
351	3.94-4.00 (m, 2H), 5.12-5.26 (m, 3H), 5.75 (d, 1H), 6.09 (m, 1H), 6.49 (dd, 1H), 7.10 (m, 1H), 7.38-7.53 (m, 3H), 7.69-7.76 (m, 3H), 8.00 (d, 1H), 8.12 (d, 1H), 9.48 (d, 1H).
352	1.17 (t, 3H), 4.20 (q, 2H), 6.94 (d, 1H), 7.31 (t, 1H), 7.55-7.61 (m, 2H), 7.67-7.77 (m, 3H), 8.04 (d, 1H), 8.14 (d, 1H), 8.80 (br, 1H).
353	2.61 (s, 3H), 6.90 (d, 1H), 7.28-7.38 (m, 3H), 7.45-7.51 (m, 2H), 7.58 (m, 1H), 8.86 (d, 1H).
355	2.61 (s, 3H), 6.93 (d, 1H), 7.23-7.37 (m, 2H), 7.43-7.49 (m, 3H), 7.57 (s, 1H), 8.82 (br, 1H).
359	2.61 (s, 3H), 2.74 (s, 3H), 6.78 (dd, 1H), 7.24-7.46 (m, 5H), 7.46 (s, 1H).
360	1.24 (d, 6H), 3.16 (sep, 1H), 6.88 (d, 1H), 7.2-7.6 (m, 6H), 8.81 (d, 1H).
361	2.60 (s, 3H), 6.93 (dd, 1H), 7.21 (t, 1H), 7.35 (m, 1H), 7.47-7.51 (m, 3H), 8.83 (d, 1H).
363	1.06 (m, 2H), 1.25 (m, 2H), 2.29 (m, 1H), 6.96 (dd, 1H), 7.29-7.38 (m, 3H), 7.43-7.53 (m, 3H), 8.83 (d, 1H).
364	2.00 (s, 3H), 5.79 (s, 1H), 6.06 (s, 1H), 6.90 (d, 1H), 7.26-7.37 (m, 3H), 7.45-7.51 (m, 2H), 7.57 (m, 1H), 8.78 (br, 1H).
365	1.33 (s, 9H), 6.90 (dd, 1H), 7.26-7.37 (m, 3H), 7.46-7.51 (m, 2H), 7.54 (m, 1H), 8.81 (d, 1H).
367	2.62 (s, 3H), 2.65 (s, 3H), 2.80 (s, 3H), 6.59 (d, 1H), 6.92 (t, 1H), 7.26-7.39 (m, 2H), 7.48-7.51 (m, 3H).
368	6.95 (d, 1H), 7.2-7.7 (m, 10H), 7.87 (m, 1H), 8.64 (d, 1H).
371	0.91 (s, 3H), 1.38 (m, 2H), 1.70 (m, 2H), 2.89 (t, 2H), 6.88 (d, 1H), 7.2-7.6 (m, 6H), 8.82 (d, 1H).
373	6.66 (s, 1H), 6.76 (d, 1H), 7.04 (t, 1H), 7.36-7.56 (m, 4H), 7.73 (d, 1H), 8.84 (d, 1H).

Bảng 39

Hợp chất số	¹ H-NMR
374	6.79 (d, 1H), 7.04 (t, 1H), 7.35-7.56 (m, 4H), 7.74 (s, 1H), 8.82 (d, 1H).
375	2.46 (s, 3H), 6.86 (d, 1H), 7.2-7.7 (m, 6H), 8.80 (d, 1H).
376	1.57 (s, 6H), 2.7 (bs, 1H), 6.89 (dd, 1H), 7.2-7.7 (m, 6H), 8.82 (d, 1H).
377	1.24 (d, 6H), 3.16 (sep, 1H), 6.88 (d, 1H), 7.2-7.6 (m, 6H), 8.81 (d, 1H).
382	2.59 (s, 3H), 2.69 (s, 3H), 6.69 (d, 1H), 6.99 (t, 1H), 7.25 (m, 1H), 7.33-7.41 (m, 3H), 8.00 (m, 1H).
383	2.61 (s, 3H), 2.69 (s, 3H), 6.62 (d, 1H), 6.97 (t, 1H), 7.24-7.37 (m, 2H), 7.48 (s, 1H), 7.61-7.69 (m, 2H).
384	2.15 (s, 3H), 5.11 (s, 2H), 6.78 (d, 1H), 7.03 (t, 1H), 7.33-7.53 (m, 4H), 7.64 (d, 1H), 8.84 (d, 1H).
388	2.61 (s, 3H), 6.80 (d, 1H), 7.02 (m, 1H), 7.22 (m, 1H), 7.39 (m, 1H), 7.58 (m, 1H), 7.79 (d, 1H), 7.92 (d, 1H), 8.81 (d, 1H).
389	2.60 (s, 3H), 2.69 (s, 3H), 6.67 (d, 1H), 6.98 (t, 1H), 7.32-7.45 (m, 3H), 7.58 (d, 1H), 8.03 (s, 1H).
390	6.76 (d, 1H), 7.04 (t, 1H), 7.40 (m, 1H), 7.47-7.57 (m, 3H), 7.75 (s, 1H), 8.82 (d, 1H).
397	1.53 (bs, 6H), 2.73 (s, 3H), 6.67 (d, 1H), 6.99 (t, 1H), 7.2-7.7 (m, 5H).
398	1.53 (d, 6H), 6.98 (t, 1H), 7.3-7.7 (m, 5H), 8.81 (d, 1H).
401	6.97 (d, 1H), 7.10 (t, 1H), 7.26-7.38 (m, 3H), 7.46-7.75 (m, 7H), 8.14 (d, 1H), 8.35 (d, 1H), 8.91 (d, 1H), 9.36 (s, 1H).
402	3.94 (s, 3H), 6.87 (d, 1H), 7.24-7.35 (m, 2H), 7.56 (t, 1H), 7.61-7.73 (m, 3H), 8.11 (d, 1H), 8.79 (d, 1H).
403	3.89 (s, 3H), 6.92 (d, 1H), 7.26 (t, 1H), 7.43 (d, 1H), 7.54 (t, 1H), 7.61-7.74 (m, 3H), 8.11 (d, 1H), 8.79 (d, 1H).
409	1.19 (t, 3H), 2.33 (d, 3H), 4.27 (q, 2H), 6.78 (d, 1H), 7.29-7.35 (m, 2H), 7.44-7.48 (m, 3H), 8.84 (d, 1H).
410	1.41 (s, 9H), 6.97 (d, 1H), 7.28-7.38 (m, 3H), 7.45-7.49 (m, 3H), 8.85 (d, 1H).
427	1.33 (d, 3H), 2.80 (s, 3H), 3.38 (s, 3H), 4.00 (m, 1H), 6.77 (d, 1H), 7.03 (m, 1H), 7.25-7.45 (m, 5H).
428	1.02 (t, 3H), 1.36 (s, 3H), 1.79 (q, 2H), 2.18 (s, 1H), 2.79 (s, 3H), 6.75 (d, 1H), 7.03 (m, 1H), 7.28-7.45 (m, 5H).
430	1.03 (t, 3H), 1.28 (m, 2H), 1.68 (m, 2H), 3.90 (q, 2H), 6.79 (d, 1H), 6.97 (t, 1H), 7.26-7.35 (m, 2H), 7.40-7.50 (m, 3H), 8.83 (d, 1H).
431	0.66-0.87 (m, 2H), 1.12-1.19 (m, 2H), 1.26-1.29 (m, 8H), 1.99 (s, 1H), 6.67 (d, 1H), 6.89 (m, 1H), 7.18 (m, 1H), 7.34 (m, 1H), 7.47-7.50 (m, 2H), 7.62 (m, 1H), 8.82 (d, 1H).
435	1.82 (d, 6H), 5.28 (br, 2H), 6.62 (d, 1H), 6.87 (dd, 1H), 7.19 (m, 1H), 7.33 (m, 1H), 7.43-7.51 (m, 2H), 7.68 (m, 1H), 8.79 (d, 1H).
437	1.93 (d, 6H), 6.72 (m, 1H), 6.91-6.98 (m, 2H), 7.19-7.38 (m, 2H), 7.43-7.52 (m, 2H), 7.58 (m, 1H), 8.83 (d, 1H).
442	2.46 (s, 6H), 5.22 (s, 1H), 6.8-7.0 (m, 1H), 7.2-7.5 (m, 5H), 7.67 (dd, 1H), 8.84 (d, 1H).

Bảng 40

Hợp chất số	¹ H-NMR
443	2.07 (s, 3H), 6.78 (d, 1H), 6.80 (bs, 1H), 7.03 (d, 1H), 7.2-7.6 (m, 5H), 7.78 (m, 1H), 8.88 (d, 1H).
445	1.54 (dd, 3H), 1.61-1.69 (m, 4H), 2.34-2.39 (m, 2H), 2.54-2.59 (m, 2H), 3.92 (q, 1H), 6.79 (m, 1H), 6.97 (m, 1H), 7.22-7.33 (m, 2H), 7.39 (m, 1H), 7.43-7.47 (m, 2H), 8.83 (d, 1H).
446	1.47 (d, 3H), 1.54 (s, 9H), 3.29 (s, 3H), 4.97 (q, 1H), 6.67 (d, 1H), 7.2-7.5 (m, 5H), 8.04 (d, 1H), 8.66 (bs, 1H), 8.85 (d, 1H).
447	1.50 (d, 3H), 3.26 (s, 3H), 4.88 (bs, 2H), 4.93 (q, 2H), 6.33 (dd, 1H), 6.52 (dd, 1H), 7.07 (t, 1H), 7.2-7.5 (m, 4H), 8.84 (d, 1H).
448	1.47 (d, 3H), 2.89 (d, 3H), 3.23 (s, 3H), 4.94 (q, 2H), 5.78 (bs, 1H), 6.30 (dd, 1H), 6.51 (d, 1H), 7.19 (t, 1H), 7.24-7.43 (m, 5H), 8.84 (d, 1H).
449	2.11 (br, 6H), 2.84 (s, 3H), 2.92 (s, 3H), 6.68 (m, 1H), 6.96 (m, 1H), 7.27-7.44 (m, 4H), 7.49 (d, 1H).
450	2.11 (d, 6H), 2.91 (s, 3H), 6.74 (m, 1H), 6.97 (m, 1H), 7.29-7.51 (m, 3H), 7.67 (m, 1H), 8.82 (d, 1H).
451	2.16 (br, 6H), 2.81 (s, 3H), 2.92 (s, 3H), 6.65 (d, 1H), 6.98 (m, 1H), 7.26-7.42 (m, 3H), 7.50 (s, 1H).
452	1.38 (t, 3H), 2.11 (s, 6H), 3.08 (q, 2H), 6.76 (d, 1H), 6.98 (m, 1H), 7.30-7.38 (m, 2H), 7.47-7.54 (m, 2H), 7.70 (d, 1H), 8.84 (d, 1H).
453	1.99 (d, 3H), 2.95 (s, 3H), 5.20 (q, 1H), 6.84 (m, 1H), 7.23-7.55 (m, 5H), 7.78 (m, 1H), 8.83 (d, 1H).
a-2	1.67 (s, 6H), 6.00 (s, 1H), 7.54-7.61 (m, 2H), 7.66-7.74 (m, 2H), 8.14 (d, 1H), 8.38 (t, 1H), 8.80 (d, 1H).
a-7	1.66 (s, 6H), 2.81 (s, 3H), 6.02 (s, 1H), 7.19-7.43 (m, 6H), 8.40 (d, 1H).
a-8	1.65 (s, 6H), 5.96 (s, 1H), 7.25-7.39 (m, 3H), 7.48-7.58 (m, 3H), 8.41 (m, 1H), 8.85 (d, 1H).
b-1	1.18 (s, 6H), 1.50 (s, 6H), 1.75-1.93 (m, 4H), 2.73 (t, 2H), 2.84 (s, 1H), 2.89 (t, 2H), 6.82 (dd, 1H), 6.96 (d, 1H), 7.08-7.20 (m, 2H), 7.49 (dd, 1H), 8.10 (d, 1H).
b-3	1.27 (s, 6H), 1.60 (d, 6H), 1.76-1.94 (m, 4H), 2.49 (s, 1H), 2.74 (t, 2H), 2.90 (t, 2H), 6.62 (d, 1H), 6.79-6.86 (m, 1H), 6.97 (d, 1H), 7.08-7.15 (m, 1H), 8.10 (d, 1H).
b-4	1.19 (s, 6H), 1.50 (s, 6H), 2.11-2.21 (m, 2H), 2.83 (s, 1H), 2.90 (t, 2H), 2.95 (t, 2H), 6.81 (dd, 1H), 7.08-7.21 (m, 3H), 7.50 (dd, 1H), 8.08 (d, 1H).
b-5	1.19 (s, 6H), 1.50 (s, 6H), 1.62-1.73 (m, 4H), 1.83-1.90 (m, 2H), 2.70-2.73 (m, 2H), 2.92 (s, 1H), 3.00-3.04 (m, 2H), 6.84 (dd, 1H), 7.01 (d, 2H), 7.07-7.20 (m, 2H), 7.48 (dd, 1H), 8.00 (d, 1H).
b-6	1.76-1.95 (m, 4H), 2.59 (s, 3H), 2.75 (t, 2H), 2.91 (t, 2H), 6.63 (d, 1H), 6.88 (t, 1H), 7.03 (d, 1H), 7.24-7.32 (m, 1H), 8.16 (d, 1H).
b-7	1.74 (d, 6H), 1.74-1.95 (m, 4H), 2.76 (t, 2H), 2.92 (t, 2H), 4.26 (d, 1H), 6.55 (dd, 1H), 6.79-6.86 (m, 1H), 7.05 (d, 1H), 7.07-7.15 (m, 1H), 8.18 (d, 1H).
b-8	1.03 (s, 9H), 1.71 (d, 3H), 1.74-1.95 (m, 4H), 2.75 (t, 2H), 2.91 (t, 2H), 5.00 (s, 1H), 6.53 (d, 1H), 6.77-6.84 (m, 1H), 7.06 (s, 1H), 7.08-7.26 (m, 1H), 8.20 (d, 1H).
b-9	1.63 (d, 3H), 1.76-1.95 (m, 4H), 2.75 (t, 2H), 2.77-2.93 (m, 2H), 3.48 (s, 1H), 5.29-5.34 (m, 1H), 6.55 (d, 1H), 6.81 (dd, 1H), 7.03 (d, 1H), 7.13 (q, 1H), 8.16 (d, 1H).

Bảng 41

Hợp chất số	¹ H-NMR
b-10	1.59 (d, 3H), 1.65–1.94 (m, 4H), 2.74 (t, 2H), 2.90 (t, 2H), 3.27 (s, 3H), 4.90 (q, 1H), 6.62 (d, 1H), 6.84 (dd, 1H), 6.89 (d, 1H), 7.14–7.22 (m, 1H), 8.11 (d, 1H).
b-11	2.65 (s, 3H), 6.65 (d, 1H), 6.92 (t, 1H), 7.21 (d, 1H), 7.27–7.35 (m, 1H), 7.61 (d, 1H), 7.69 (d, 1H), 8.43 (d, 1H).
b-12	1.77 (d, 6H), 4.16 (d, 1H), 6.57 (d, 1H), 6.86 (dd, 1H), 7.09–7.18 (m, 1H), 7.20 (d, 1H), 7.61 (d, 1H), 7.69 (d, 1H), 8.44 (d, 1H).
b-13	1.17 (s, 6H), 1.53 (s, 6H), 2.92 (s, 3H), 2.92 (t, 2H), 3.41 (s, 1H), 3.48 (t, 2H), 6.78 (d, 1H), 6.91 (d, 1H), 6.92–7.15 (m, 2H), 7.42 (dd, 1H), 7.65 (d, 1H).
b-14	1.67 (d, 3H), 2.75 (dd, 1H), 5.31–5.41 (m, 1H), 6.58 (d, 1H), 6.87 (m, 1H), 7.12–7.21 (m, 2H), 7.61 (d, 1H), 7.67 (d, 1H), 8.44 (d, 1H).
b-15	1.59 (d, 3H), 3.29 (s, 3H), 4.93 (q, 1H), 6.65 (d, 1H), 6.90 (t, 1H), 7.07–7.25 (m, 2H), 7.58 (d, 1H), 7.64 (s, 1H), 8.41 (d, 1H).
b-16	1.06 (s, 9H), 1.75 (d, 3H), 4.93 (s, 1H), 6.54 (d, 1H), 6.84 (dd, 1H), 7.07–7.12 (m, 1H), 7.13 (d, 1H), 7.61 (d, 1H), 7.75 (d, 1H), 8.45 (d, 1H).
b-19	1.50 (s, 3H), 1.67 (s, 3H), 1.81–1.97 (m, 4H), 2.80 (m, 2H), 2.97 (m, 2H), 5.90 (s, 1H), 7.19–7.37 (m, 3H), 7.72 (m, 1H), 8.55 (d, 1H).
b-20	1.52 (s, 3H), 1.58 (s, 3H), 5.88 (s, 1H), 7.23–7.42 (m, 4H), 7.62 (d, 1H), 8.38 (d, 1H), 8.83 (d, 1H).
b-21	2.59 (s, 3H), 2.80 (t, 2H), 4.07 (t, 2H), 4.73 (s, 2H), 6.65 (d, 1H), 6.91 (t, 1H), 6.97 (d, 1H), 7.28–7.35 (m, 1H), 8.24 (d, 1H).
b-22	1.73 (d, 6H), 2.02 (s, 1H), 3.02 (t, 2H), 4.07 (t, 2H), 4.73 (s, 2H), 6.57 (d, 1H), 6.82–6.89 (m, 1H), 6.98 (d, 1H), 7.10–7.15 (m, 1H), 8.25 (d, 1H).
b-23	2.63 (s, 3H), 6.60 (d, 1H), 6.77 (d, 2H), 6.89 (t, 1H), 7.25–7.32 (m, 1H), 7.62 (d, 1H), 7.76 (d, 1H), 8.16 (d, 1H).

(Chế phẩm)

Ví dụ về thuốc diệt nấm theo sáng chế được thể hiện dưới đây, tuy nhiên, các chất bổ sung và tỷ lệ bổ sung không bị giới hạn ở các ví dụ này và có thể thay đổi chúng trong phạm vi rộng. Ngoài ra, các phần trong ví dụ về chế phẩm là phần theo khối lượng.

Chế phẩm ví dụ 1	Bột phân tán trong nước
Hợp chất theo sáng chế	40 phần
Đất sét	48 phần
Natri dioctylsulfo succinat	4 phần
Natri lignin sulfonat	8 phần

Các thành phần nêu trên được trộn đồng đều và được tán thành bột mịn để thu được bột phân tán trong nước có 40% thành phần hoạt tính.

Chế phẩm ví dụ 2	Nhũ tương
Hợp chất theo sáng chế	10 phần
SORVESSO 200	53 phần
Xyclohexanon	26 phần
Kali dodexylbenzen sulfonat	1 phần
Polyoxyetylen alkylalylete	10 phần

Các thành phần nêu trên được trộn và được hòa tan để thu được nhũ tương có 10% thành phần hoạt tính.

Chế phẩm ví dụ 3	Bột
Hợp chất theo sáng chế	10 phần
Đất sét	90 phần

Các thành phần nêu trên được trộn đồng đều và được tán thành bột mịn để thu được bột có 10% thành phần hoạt tính.

Chế phẩm ví dụ 4	Hạt
------------------	-----

Hợp chất theo sáng chế 5 phần

Đất sét	73 phần
Bentonit	20 phần
Natri dioctylsulfo succinat	1 phần
Kali phosphat	1 phần

Các thành phần nêu trên được tán thành bột mịn, được trộn, và nhào trộn kỹ có bổ sung nước, sau đó là nghiền thành hạt và làm khô để thu được hạt có 5% thành phần hoạt tính.

Chế phẩm ví dụ 5 Hỗn dịch

Hợp chất theo sáng chế	10 phần
Polyoxyetylen alkyalylete	4 phần
Natri polycarboxylat	2 phần
Glyxerin	10 phần
Gôm xanthan	0,2 phần
Nước	73,8 phần

Các thành phần nêu trên được trộn và được tán thành bột mịn cho đến khi đường kính hạt trở nên bằng hoặc nhỏ hơn 3 micron để thu được hỗn dịch có 10% thành phần hoạt tính.

Chế phẩm ví dụ 6 Hạt phân tán được trong nước

Hợp chất theo sáng chế	40 phần
Đất sét	36 phần
Kali clorua	10 phần
Natri alkylbenzen sulfonat	1 phần
Natri lignin sulfonat	8 phần

Sản phẩm ngưng tụ formaldehyt của natri alkylbenzen sulfonat 5 phần

Các thành phần nêu trên được trộn và được tán thành bột mịn, sau đó là bổ sung lượng nước thích hợp và nhào trộn với các thành phần này để thành dạng đất sét. Nguyên liệu đã tạo hình đất sét được tạo thành hạt và được làm khô để thu được hạt phân tán được trong nước có 40% thành phần hoạt tính.

(Ví dụ thử nghiệm sinh học 1) Thử nghiệm khống chế bệnh nấm vảy ở cây táo

Nhũ tương của hợp chất theo sáng chế có nồng độ thành phần hoạt tính là 100 ppm được phun vào các cây táo con trồng trong chậu đất sét (giống “Ralls Janet”, 3 đến 4 gốc lá). Sau khi được làm khô bằng không khí ở nhiệt độ trong phòng, bào tử đỉnh của vi khuẩn gây bệnh nấm vảy ở cây táo (*Venturia inaequalis*) được cấy nhiễm, và được giữ trong 2 tuần trong phòng ở nhiệt độ 20°C trong điều kiện độ ẩm cao, với ánh sáng và bóng tối được lặp lại 12 giờ một lần. Tác dụng khống chế được xác định bằng cách so sánh tình trạng xuất hiện thương tổn trên lá với tình trạng của cây không được xử lý.

Đối với các hợp chất được biểu diễn bằng hợp chất số 3, 6, 7, 8, 10, 11, 12, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 24, 25, 26, 28, 29, 30, 31, 33, 34, 35, 36, 37, 38, 40, 41, 43, 44, 45, 46, 48, 49, 52, 53, 54, 57, 59, 60, 61, 62, 63, 64, 65 và 66, thử nghiệm khống chế bệnh nấm vảy ở cây táo được tiến hành. Kết quả là, tất cả các hợp chất này đều cho thấy giá trị bảo vệ ít nhất là 75%.

Ngoài ra, tiến hành thử nghiệm giống như vậy đối với các hợp chất được biểu diễn bằng hợp chất số 67, 68, 70, 73, 74, 75, 76, 77, 78, 79, 80, 82, 83, 84, 85, 86, 87, 88, 89, 90, 91, 92, 93, 94, 95, 96, 97, 98, 100, 101, 102, 103, 104, 105, 106, 107, 108, 109, 110, 111, 113, 114, 115, 116, 117, 118, 119, 120, 121, 122, 123, 124, 125, 126, 127, 128, 131, 132, 133, 134, 135, 136, 137, 138, 139, 140, 141, 142, 143, 144, 145, 146, 147, 148, 149, 150, 151, 152, 156, 157, 158, 159, 160, 161, 162, 163, 164, 165, 166, 167, 168, 169, 170, 171, 172, 173, 174, 175, 176, 177, 178, 179, 180, 181, 182, 183, 184, 185, 186, 187, 188, 190, 192, 193, 194, 195, 196, 197, 198, 199, 200, 201, 202, 203, 204, 205, 206, 207, 208, 209, 210, 211, 215, 217, 218, 219, 220, 221, 222, 223, 224, 225, 227, 228, 229, 230, 231, 232, 233, 234, 235, 236, 237, 238, 239, 240, 242, 243, 244, 245, 246,

247, 248, 249, 250, 251, 252, 253, 254, 255, 256, 257, 258, 259, 260, 261, 262, 263, 264, 265, 266, 267, 268, 269, 270, 271, 272, 273, 274, 276, 277, 278, 279, 280, 281, 283, 284, 285, 288, 289, 290, 291, 292, 293, 294, 295, 296, 297, 298, 299, 300, 306, 308, 309, 310, 311, 314, 315, 316, 317, 318, 319, 320, 321, 322, 323, 324, 325, 327, 328, 329, 330, 331, 332, 333, 334, 335, 344, 347, 348, 349, 350, 353, 354, 355, 356, 357, 358, 359, 360, 361, 362, 363, 364, 365, 366, 367, 368, 369, 370, 371, 372, 373, 374, 375, 376, 377, 378, 379, 380, 381, 382, 383, 384, 385, 386, 387, 388, 389, 390, 391, 392, 393, 394, 395, 396, 397, 398, 399, 400, 402, 403, 404, 406, 407, 408, 409, 410, 411, 412, 413, 414, 416, 417, 418, 419, 423, 424, 425, 426, 427, 428, 429, 430, 431, 432, 433, 434, 435, 437, 439, 440, 441, 442, 443, 445, a-2, a-3, a-4, a-5, a-6, a-7, a-8, a-9, a-10, b-1, b-2, b-3, b-4, b-5, b-6, b-7, b-8, b-9, b-10, b-11, b-12, b-13, b-14, b-15, b-16, b-17, b-20, b-22, b-23, b-24, c-2, c-3, c-4, c-5, d-5, và d-6. Kết quả là, tất cả các hợp chất này đều cho thấy giá trị bảo vệ ít nhất là 75%.

(Ví dụ thử nghiệm sinh học 2) Thử nghiệm khống chế bệnh mốc xám ở cây dưa chuột

Nhũ tương của hợp chất theo sáng chế có nồng độ thành phần hoạt tính là 100 ppm được phun vào các cây dưa chuột con được trồng trong chậu đất sét (Giống “*Cucumis sativus L.*”, gốc lá mầm). Sau khi được làm khô bằng không khí ở nhiệt độ trong phòng, hỗn dịch bào tử đỉnh của vi khuẩn gây bệnh mốc xám ở cây dưa chuột (*Botrytis cinerea*) được cấy nhiễm từng giọt, và được giữ trong 4 ngày trong phòng tối ở nhiệt độ 20°C trong điều kiện độ ẩm cao. Tác dụng khống chế được xác định bằng cách so sánh tình trạng xuất hiện thương tổn trên lá với tình trạng của cây không được xử lý.

Đối với các hợp chất được biểu diễn bằng hợp chất số 10, 11, 12, 15, 18, 19, 22, 26, 29, 30, 31, 33, 34, 35, 36, 37, 38, 42, 43, 44, 48, 49, 54, 57, và 59, thử nghiệm khống chế bệnh mốc xám ở cây dưa chuột được tiến hành. Kết quả là, tất cả các hợp chất này đều cho thấy giá trị bảo vệ ít nhất là 75%.

Ngoài ra, tiến hành thử nghiệm giống như vậy đối với các hợp chất được biểu diễn bằng hợp chất số 67, 73, 75, 76, 77, 80, 81, 82, 83, 86, 88, 89, 90, 92,

93, 94, 95, 96, 97, 98, 99, 100, 101, 102, 104, 106, 107, 108, 109, 110, 111, 113, 114, 115, 116, 117, 118, 119, 122, 123, 124, 125, 126, 127, 128, 133, 134, 138, 139, 140, 141, 142, 143, 144, 145, 146, 147, 148, 149, 150, 151, 152, 153, 156, 157, 158, 159, 160, 162, 163, 164, 166, 167, 168, 169, 170, 171, 172, 173, 174, 175, 176, 177, 178, 179, 180, 181, 183, 184, 185, 186, 187, 188, 192, 197, 198, 199, 200, 201, 202, 203, 205, 208, 209, 210, 219, 220, 221, 222, 223, 225, 227, 228, 229, 230, 231, 232, 233, 234, 235, 236, 237, 238, 239, 240, 241, 242, 243, 244, 245, 246, 247, 248, 249, 250, 251, 252, 253, 254, 255, 256, 257, 258, 259, 260, 261, 262, 263, 264, 265, 266, 267, 268, 269, 270, 271, 272, 274, 275, 278, 281, 284, 285, 291, 292, 293, 295, 296, 297, 298, 299, 308, 309, 310, 311, 314, 315, 316, 317, 318, 319, 323, 324, 325, 326, 327, 328, 332, 333, 338, 340, 344, 348, 353, 355, 359, 360, 361, 363, 364, 365, 371, 375, 376, 377, 378, 379, 380, 381, 382, 386, 391, 392, 393, 395, 397, 398, 399, 402, 403, 405, 406, 412, 414, 416, 417, 418, 423, 424, 425, 426, 427, 428, 429, 431, 432, 433, 434, 435, 436, 437, 439, 440, 441, 442, 444, a-2, a-5, a-6, a-7, a-8, a-10, b-1, b-2, b-3, b-7, b-8, b-12, b-16, c-3, và c-4. Kết quả là, tất cả các hợp chất này đều cho thấy giá trị bảo vệ ít nhất là 75%.

(Ví dụ thử nghiệm sinh học 3) Thử nghiệm ứng dụng trạng thái ngập nước đối với bệnh thối rửa cổ ở cây lúa

Cây mạ được trồng trong chậu ở đó gốc mạ thương mại ở trạng thái ngập nước (Giống “koshihikari”, 1 gốc lá), và nhũ tương của hợp chất theo sáng chế có nồng độ thành phần hoạt tính là 400 ppm được xử lý nhỏ giọt vào bề mặt của nước. Sau 2 ngày, hỗn dịch bào tử đỉnh của vi khuẩn gây bệnh thối rửa cổ ở lúa (*Magnaporthe grisea*) được cấy nhiễm dạng phun, được giữ trong 2 ngày trong phòng tối ở nhiệt độ 25°C trong điều kiện độ ẩm cao, và sau đó được giữ trong 8 ngày trong phòng ở nhiệt độ 25°C, với ánh sáng và bóng tối được lặp lại 12 giờ một lần. Tác dụng không chế được quyết định bởi các mức sau sau khi so sánh tình trạng xuất hiện thương tổn trên lá với tình trạng của cây không được xử lý.

A (giá trị bảo vệ ít nhất là 60%)

B (giá trị bảo vệ ít nhất là 40% nhưng ít hơn 60%)

Kết quả của thử nghiệm này, tác dụng khống chế của các hợp chất sau được đánh giá là A.

Hợp chất số: 5, 20, 21, 23, 25, 28, 32, 33, 34, 36, 37, 38, 43, 44, 48, 58, 66, 70, 71, 73, 78, 84, 85, 88, 89, 90, 106, 107, 227, 228, 234, 236, 260, 262, 348, 353, 356, 358, 375, 376, 401, 402, a-6

Ngoài ra, tác dụng khống chế của các hợp chất sau được đánh giá là B.

Hợp chất số: 1, 3, 7, 12, 13, 22, 46, 54, 55, 75, 95, 98, 139, 151, 261, 359, 360, b-1

(Ví dụ thử nghiệm sinh học 4) Thử nghiệm ứng dụng ngâm về bệnh thối rữa cổ ở cây lúa

Cây mạ được trồng trong chậu ở đó gốc mạ thương mại ở trạng thái ngập nước (Giống “koshihikari”, 1 gốc lá), và nhũ tương của hợp chất theo sáng chế với thành phần hoạt tính có nồng độ là 400 ppm được xử lý nhỏ giọt vào bề mặt của nước. Sau 14 ngày, hỗn dịch bào tử dính của vi khuẩn gây bệnh thối rữa cổ ở lúa (*Magnaporthe grisea*) được cấy nhiễm dạng phun, được giữ trong 2 ngày trong phòng tối ở nhiệt độ 25°C trong điều kiện độ ẩm cao, và sau đó được giữ trong 8 ngày trong phòng ở nhiệt độ 25°C, với ánh sáng và bóng tối được lặp lại 12 giờ một lần. Tác dụng khống chế được quyết định bởi các mức sau sau khi so sánh tình trạng xuất hiện thương tổn trên lá với tình trạng của cây không được xử lý.

A (giá trị bảo vệ ít nhất là 60%)

B (giá trị bảo vệ ít nhất là 40% nhưng ít hơn 60%)

Kết quả của thử nghiệm này, tác dụng khống chế của các hợp chất sau được đánh giá là A.

Hợp chất số: 21, 36, 37, 38, 43, 44, 48, 84, 88, 89, 95, 106, 109, 125, 262, 266, 267, 292, 350, 375, a-6

Ngoài ra, tác dụng khống chế của các hợp chất sau được đánh giá là B.

Hợp chất số: 236

(Ví dụ thử nghiệm sinh học 5) Thử nghiệm xử lý hạt đối với bệnh tàn héo cây dưa chuột

Hạt cây dưa chuột (Giống “*Cucumis sativus L.*”) đã được làm nhiễm vi khuẩn gây bệnh tàn héo ở cây dưa chuột (*Fusarium oxysporum*) được xử lý bằng nhũ tương của hợp chất theo sáng chế để thu được hạt chứa 1 g/kg thành phần hoạt tính. Hạt được gieo và sau 3 tuần, tác dụng không chế được xác định bằng cách so sánh mức độ xuất hiện bệnh với mức độ xuất hiện bệnh của hạt không được xử lý.

Kết quả là, các hợp chất sau thể hiện giá trị bảo vệ tuyệt vời bằng ít nhất là 75%.

Hợp chất số: 18, 36, 37, 43, 44, 48, 77, 81, 83, 88, 92, 94, 100, 103, 109, 126, 225, 227, 228, 234, 235, 241, 242, 243, 244, 252, 258, 266, 268, 298, 395, 397, 425, 435, a-6, a-7, a-8, b-8, b-12, c-4

(Ví dụ thử nghiệm sinh học 6) Thử nghiệm xử lý hạt đối với bệnh tàn héo ở cây dưa chuột

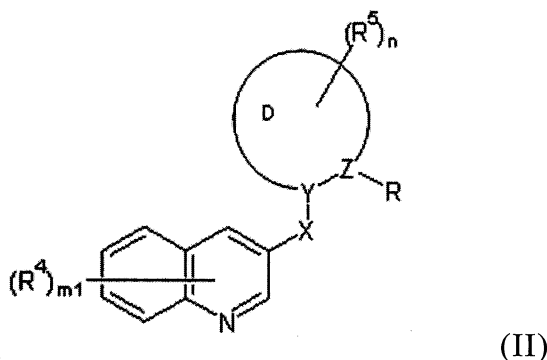
Hạt cây dưa chuột (Giống “*Cucumis sativus L.*”) được xử lý bằng nhũ tương của hợp chất theo sáng chế để thu được hạt chứa 1 g/kg thành phần hoạt tính. Hạt được gieo trong đất đã bị làm nhiễm vi khuẩn gây bệnh tàn héo ở cây dưa chuột (*Fusarium oxysporum*) và, sau 3 tuần, tác dụng không chế được xác định bằng cách so sánh mức độ xuất hiện bệnh với mức độ xuất hiện bệnh của hạt không được xử lý.

Kết quả là, các hợp chất sau thể hiện giá trị bảo vệ tuyệt vời bằng ít nhất là 75%.

Hợp chất số: 17, 18, 31, 33, 34, 35, 36, 37, 43, 86, 88, 96, 97, 100, 109, 227, 232, 239, 242, 243, 244, 262, 265, 268, 295, 296, 375, 428, a-7, b-1

YÊU CẦU BẢO HỘ

1. Hợp chất dị vòng chứa nitơ được biểu diễn bằng công thức (II):



hoặc muối của nó, hoặc hợp chất N-oxit của nó,

trong đó, trong công thức (II), R là nhóm được biểu diễn bằng $CR^1R^2R^3$;

mỗi R^1 , R^2 , và R^3 độc lập là nguyên tử hydro, nhóm C_{1-8} alkyl được thế hoặc không được thế, nhóm C_{2-8} alkenyl không được thế, nhóm C_{2-8} alkynyl không được thế, nhóm C_{3-8} xycloalkyl không được thế, nhóm C_{4-8} xycloalkenyl không được thế, nhóm C_{6-10} aryl không được thế, nhóm dị vòng không được thế, nhóm C_{1-8} axyl không được thế, nhóm (1-imino) C_{1-8} alkyl không được thế, nhóm carboxyl được thế hoặc không được thế, nhóm carbamoyl được thế hoặc không được thế, nhóm hydroxyl được thế hoặc không được thế, nhóm amino được thế hoặc không được thế, nhóm halogeno, nhóm xyano, hoặc nhóm nitro;

ngoại trừ trong đó: R^1 , R^2 , và R^3 tất cả đều là nguyên tử hydro; R^1 , R^2 , và R^3 tất cả đều là nhóm C_{1-8} alkyl không được thế; bất kỳ một trong số R^1 , R^2 , và R^3 là nguyên tử hydro và hai gốc còn lại đều là nhóm C_{1-8} alkyl không được thế; và, bất kỳ một trong số R^1 , R^2 , và R^3 là nhóm C_{1-8} alkyl không được thế và hai gốc còn lại đều là nguyên tử hydro;

R^1 và R^2 có thể được nối để tạo thành $O=$;

mỗi R^4 độc lập là nhóm C_{1-8} alkyl được thế hoặc không được thế, nhóm C_{2-8} alkenyl không được thế, nhóm C_{2-8} alkynyl không được thế, nhóm C_{3-8} xycloalkyl không được thế, nhóm hydroxyl được thế hoặc không được thế, nhóm halogeno, nhóm xyano, hoặc nhóm nitro;

m_1 biểu thị số lượng R^4 và là số nguyên nằm trong khoảng từ 0 đến 6;

mỗi R^5 độc lập là nhóm C_{1-8} alkyl được thế hoặc không được thế, nhóm C_{2-8} alkenyl không được thế, nhóm C_{2-8} alkynyl không được thế, nhóm C_{3-8} xycloalkyl không được thế, nhóm hydroxyl được thế hoặc không được thế, nhóm halogeno, nhóm xyano, hoặc nhóm nitro;

n biểu thị số lượng R^5 và là số nguyên nằm trong khoảng từ 0 đến 5;

D là vòng hydrocacbon có từ 5 đến 7 cạnh hoặc vòng dị vòng có từ 5 đến 7 cạnh;

X là nguyên tử oxy;

Y là nguyên tử cacbon; và

Z là nguyên tử cacbon, và

trong đó nhóm C_{1-8} alkyl được thế là nhóm C_{3-6} xycloalkyl C_{1-6} alkyl, nhóm C_{4-6} xycloalkenyl C_{1-6} alkyl, nhóm C_{1-6} haloalkyl, nhóm C_{6-10} aryl C_{1-6} alkyl, nhóm heteroaryl C_{1-6} alkyl có 5 đến 6 cạnh, nhóm hydroxyl C_{1-6} alkyl, nhóm C_{1-6} alkoxy C_{1-6} alkyl, nhóm C_{1-7} axyloxy C_{1-6} alkyl, nhóm tri C_{1-6} alkylsilyloxy C_{1-6} alkyl, nhóm C_{6-10} arylsulfonyloxy C_{1-6} alkyl được thế C_{1-6} alkyl, nhóm xyano C_{1-6} alkyl, nhóm C_{1-6} axyl C_{1-6} alkyl, nhóm 2-hydroxyimino C_{2-6} alkyl, nhóm formyl C_{1-6} alkyl, nhóm carboxy C_{1-6} alkyl, nhóm C_{1-6} alkoxycarbonyl C_{1-6} alkyl, hoặc nhóm azido C_{1-6} alkyl,

nhóm carboxyl được thế là nhóm C_{1-6} alkoxycarbonyl, nhóm C_{2-6} alkenyloxycarbonyl, nhóm C_{2-6} alkynyloxycarbonyl, nhóm C_{6-10} aryloxycarbonyl, hoặc nhóm C_{6-10} aryl C_{1-6} alkoxycarbonyl,

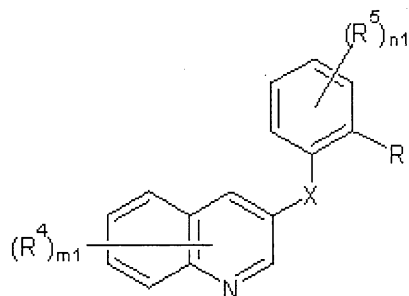
nhóm carbamoyl được thế là nhóm mono C_{1-6} alkylcarbamoyl, nhóm di C_{1-6} alkylcarbamoyl, hoặc nhóm mono C_{6-10} arylcarbamoyl,

nhóm hydroxyl được thế là nhóm C_{1-6} alkoxy, nhóm C_{3-8} xycloalkyl C_{1-6} alkoxy, nhóm C_{6-10} aryl C_{1-6} alkoxy, nhóm C_{1-6} haloalkoxy, nhóm C_{2-6} alkenyloxy, nhóm C_{2-6} alkynyloxy, nhóm C_{3-6} xycloalkyloxy, nhóm C_{6-10} aryloxy, nhóm C_{6-10} aryl C_{1-6} alkyloxy, nhóm C_{1-7} axyloxy, nhóm C_{1-6} alkoxycarbonyl C_{1-6} alkoxy, hoặc nhóm tri C_{1-6} alkylsilyloxy, và

nhóm amino được thế là nhóm mono C_{1-6} alkylamino, nhóm di C_{1-6} alkylamino, nhóm mono C_{1-6} alkylidenamino, nhóm mono C_{6-10} arylamino,

nhóm di C₆₋₁₀ arylamino, nhóm C₆₋₁₀ aryl C₁₋₆ alkylamino, nhóm C₁₋₆ axylamino, hoặc nhóm C₁₋₆ alkoxycarbonylamino.

2. Hợp chất dị vòng chứa nitơ, muối của nó, hoặc hợp chất N-oxit, theo điểm 1, trong đó hợp chất dị vòng chứa nitơ này được biểu diễn bằng công thức (III):



(III)

trong đó, mỗi trong số R, R⁴, R⁵, m₁ và X có cùng nghĩa như trong công thức (II); và

n₁ biểu thị số lượng R⁵ và là số nguyên nằm trong khoảng từ 0 đến 4.

3. Thuốc diệt nấm dùng trong nông nghiệp bao gồm, để làm hoạt chất, ít nhất một hợp chất được chọn từ nhóm bao gồm hợp chất dị vòng chứa nitơ, muối của nó, và hợp chất N-oxit của nó, theo điểm 1.

4. Hợp chất dị vòng chứa nitơ, muối của nó, hoặc hợp chất N-oxit, theo điểm 1, trong đó R¹ là nhóm hydroxyl không được thế hoặc được thế, R² là nguyên tử hydro hoặc nhóm C₁₋₈ alkyl không được thế hoặc được thế, và R³ là nguyên tử hydro, nhóm C₁₋₈ alkyl không được thế hoặc được thế, nhóm C₂₋₈ alkenyl không được thế, nhóm C₂₋₈ alkynyl không được thế, nhóm C₃₋₈ xycloalkyl không được thế, nhóm C₆₋₁₀ aryl không được thế, nhóm dị vòng không được thế, nhóm C₁₋₈ axyl không được thế, nhóm (1-imino)C₁₋₈ alkyl không được thế, nhóm C₁₋₆ alkoxycarbonyl, nhóm hydroxyl không được thế hoặc được thế, hoặc nhóm xyano.

5. Hợp chất dị vòng chứa nitơ, muối của nó, hoặc hợp chất N-oxit, theo điểm 1, trong đó R⁴ là nhóm C₁₋₆ alkyl, nhóm C₁₋₆ haloalkyl, nhóm C₂₋₆ alkenyl, nhóm C₃₋₈ xycloalkyl, nhóm hydroxyl, nhóm C₁₋₆ alkoxy, hoặc nhóm halogeno.

6. Hợp chất dị vòng chứa nitơ, muối của nó, hoặc hợp chất N-oxit theo điểm 1, trong đó R^5 là nhóm C_{1-6} alkyl, nhóm C_{1-6} haloalkyl, nhóm C_{6-10} aryl C_{1-6} alkyl, nhóm C_{3-8} xycloalkyl, nhóm C_{1-6} alkoxy, nhóm halogeno, nhóm xyano hoặc nhóm nitro.
7. Hợp chất dị vòng chứa nitơ, muối của nó, hoặc hợp chất N-oxit, theo điểm 6, trong đó hợp chất dị vòng chứa nitơ này là:
 2-[2-flo-6-(8-floquinolin-3-yloxy)-phenyl]-3,3-dimetyl-butan-2-ol,
 2-[2-flo-6-(8-floquinolin-3-yloxy)-phenyl]-propan-2-ol,
 2-[2-flo-6-(8-flo-2-metylquinolin-3-yloxy)-phenyl]-propan-2-ol, hoặc
 2-[2-flo-6-(7,8-diflo-2-metylquinolin-3-yloxy)-phenyl]-propan-2-ol.
8. Thuốc diệt nấm dùng trong nông nghiệp để xử lý hạt giống chứa hoạt chất là ít nhất một hợp chất được chọn từ nhóm bao gồm hợp chất dị vòng chứa nitơ, muối của nó, và hợp chất N-oxit của nó, theo điểm 1.
9. Phương pháp xử lý hạt giống bằng cách sử dụng thuốc diệt nấm dùng trong nông nghiệp chứa hoạt chất là ít nhất một hợp chất được chọn từ nhóm bao gồm hợp chất dị vòng chứa nitơ, muối của nó, và hợp chất N-oxit của nó, theo điểm 1.