



(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) 
1-0021672

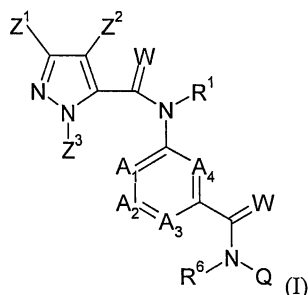
(51)⁷ **C07D 231/14, 231/16, 231/18, 401/12,**
C07C 255/61, A01N 43/56, A01P 5/00,
7/00, C07C 255/46, 237/38

(13) **B**

-
- (21) 1-2013-03194 (22) 12.03.2012
(86) PCT/EP2012/054299 12.03.2012 (87) WO2012/126766 27.09.2012
(30) 11158838.0 18.03.2011 EP
61/454,134 18.03.2011 US
11190693.9 25.11.2011 EP
(45) 25.09.2019 378 (43) 25.02.2014 311
(73) BAYER INTELLECTUAL PROPERTY GMBH (DE)
Alfred-Nobel-Strasse 10, 40789 Monheim, Germany
(72) MAUE, Michael (DE), ADEL, Isabelle (FR), HEIL, Markus (DE), JESCHKE,
Peter (DE), KAPFERER, Tobias (DE), MUHLTHAU, Friedrich, August (AT),
SUDAU, Alexander (DE), MALSAM, Olga (DE), LOSEL, Peter (GB), VOERSTE,
Arnd (DE), GORGENS, Ulrich (DE)
(74) Công ty Luật TNHH T&G (TGVN)
-

(54) **HỢP CHẤT N-(3-CARBAMOYLPHENYL)-1H-PYRAZOL-5-CARBOXAMIT,**
DƯỢC PHẨM CHỨA HỢP CHẤT NÀY, QUY TRÌNH ĐIỀU CHẾ CHẾ PHẨM
BẢO VỆ MÙA MÀNG VÀ PHƯƠNG PHÁP PHÒNG TRỪ CÁC LOÀI GÂY HẠI
TRÊN CÂY TRỒNG HOẶC HẠT

(57) Sáng chế đề cập đến hợp chất có công thức chung (I):



trong đó các gốc A₁, A₂, A₃, A₄, L, Q, R¹, T và W có nghĩa như được nêu trong bản mô tả và sử dụng các hợp chất này để phòng trừ các loài động vật gây hại. Sáng chế còn đề cập đến quy trình và các chất trung gian để điều chế hợp chất có công thức (I).

Lĩnh vực kỹ thuật được đề cập

Sáng chế đề cập đến hợp chất được thế halogen mới, quy trình điều chế chúng và việc sử dụng chúng để phòng trừ các loài động vật gây hại, cụ thể là động vật chân đốt và cụ thể là sâu bọ, lớp nhện và giun tròn.

Tình trạng kỹ thuật của sáng chế

Đã biết được rằng các hợp chất được thế halogen cụ thể có hoạt tính diệt cỏ (tham khảo J. Org. Chem. **1997**, 62(17), 5908-5919, J. Heterocycl. Chem. **1998**, 35(6), 1493-1499, WO 2004/035545, WO 2004/106324, US 2006/069132, WO 2008/029084).

Hơn nữa, đã biết rằng các hợp chất được thế halogen cụ thể có hoạt tính trừ sâu (EP1911751).

Hơn nữa, đã biết rằng các hợp chất được thế halogen cụ thể có hoạt tính ức chế xytokin (WO 00/07980).

Các chế phẩm bảo vệ mùa màng hiện nay đã đáp ứng được nhiều nhu cầu, ví dụ về hiệu quả, tính ổn định và phổ hoạt động và khả năng sử dụng chúng. Về độc tính, khả năng kết hợp với các hợp chất hoạt tính hoặc chất bổ trợ tạo chế phẩm khác có đóng một vai trò, cũng như về chi phí đòi hỏi để tổng hợp hợp chất hoạt tính. Hơn nữa, có thể xảy ra tính kháng. Vì tất cả những lý do này, việc tìm ra chất bảo vệ mùa màng mới có thể không bao giờ được xem như là kết thúc, và vẫn còn nhu cầu liên tục về các hợp chất mới có đặc tính mà, so với các hợp chất đã biết, được nâng cao ít nhất về một khía cạnh cụ thể.

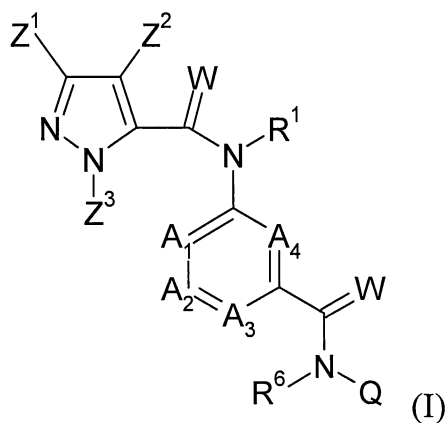
Bản chất kỹ thuật của sáng chế

Mục đích của sáng chế là đề xuất hợp chất có khả năng mở rộng phổ diệt các loài gây hại ở các khía cạnh khác nhau và/hoặc để nâng cao hoạt tính của chúng.

Bất ngờ, ngày nay đã phát hiện ra rằng các hợp chất được thế halogen cụ thể và N-oxit và muối của chúng đều có đặc tính sinh học và phù hợp cụ thể để phòng trừ các loài động vật gây hại, và qua đó có thể được sử dụng trong lĩnh vực nông hóa và trong lĩnh vực sức khỏe động vật.

Các hợp chất tương tự cũng đã được biết đến trong WO 2010/051926.

Các hợp chất được thế halogen theo sáng chế được xác định bằng công thức chung (I):



trong đó:

R^1 là hydro, C_1 - C_6 -alkyl, C_2 - C_6 -alkenyl, C_2 - C_6 -alkynyl, C_3 - C_7 -xycloalkyl, C_1 - C_6 -alkylcarbonyl, C_1 - C_6 -alkoxycarbonyl, xiano- C_1 - C_2 -alkyl, aryl-(C_1 - C_3)-alkyl, heteroaryl-(C_1 - C_3)-alkyl được thế tùy ý,

nhóm hóa học

A_1 là CR^2 hoặc nitơ,

A_2 là CR^3 hoặc nitơ,

A_3 là CR^4 hoặc nitơ và

A_4 là CR^5 hoặc nitơ,

nhưng không nhiều hơn ba nhóm từ A_1 đến A_4 đồng thời cùng là nitơ;

R^2 , R^3 , R^4 và R^5 độc lập với nhau là hydro, halogen, CN, NO_2 , $\text{C}_1\text{-C}_6\text{-alkyl}$, $\text{C}_1\text{-C}_6\text{-haloalkyl}$, $\text{C}_3\text{-C}_6\text{-xycloalkyl}$, $\text{C}_3\text{-C}_6\text{-haloxycloalkyl}$, $\text{C}_1\text{-C}_6\text{-alkoxy}$, $\text{C}_1\text{-C}_6\text{-haloalkoxy}$, $\text{C}_1\text{-C}_6\text{-alkylthio}$, $\text{C}_1\text{-C}_6\text{-haloalkylthio}$, $\text{C}_1\text{-C}_6\text{-alkylsulphinyl}$, $\text{C}_1\text{-C}_6\text{-haloalkylsulphinyl}$, $\text{C}_1\text{-C}_6\text{-alkylsulphonyl}$, $\text{C}_1\text{-C}_6\text{-haloalkylsulphonyl}$, $\text{C}_1\text{-C}_6\text{-alkylamino}$, $N,N\text{-di-C}_1\text{-C}_6\text{-alkylamino}$, $N\text{-C}_1\text{-C}_6\text{-alkylaminocarbonyl}$, $N\text{-C}_3\text{-C}_6\text{-xycloalkylaminocarbonyl}$ hoặc $(\text{C}_1\text{-C}_3\text{-alkoxy})\text{carbonyl}$ được thể tùy ý;

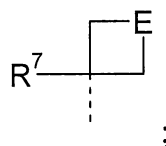
nếu không có nhóm nào trong các nhóm A_2 và A_3 là nitơ, thì R^3 và R^4 cùng với nguyên tử cacbon mà chúng gắn vào có thể tạo thành vòng có 5- hoặc 6 cạnh mà chứa 0, 1 hoặc 2 nguyên tử nitơ và/hoặc 0 hoặc 1 nguyên tử oxy và/hoặc 0 hoặc 1 nguyên tử lưu huỳnh, hoặc

nếu không có nhóm nào trong các nhóm A_1 và A_2 là nitơ, R^2 và R^3 cùng với nguyên tử cacbon mà chúng gắn vào có thể tạo thành vòng có 6 cạnh mà chứa 0, 1 hoặc 2 nguyên tử nitơ;

W là nguyên tử oxy hoặc lưu huỳnh;

R^6 là hydro, $\text{C}_1\text{-C}_6\text{-alkyl}$, aryl- $(\text{C}_1\text{-C}_3)\text{-alkyl}$, heteroaryl- $(\text{C}_1\text{-C}_3)\text{-alkyl}$, $\text{C}_2\text{-C}_6\text{-alkenyl}$, $\text{C}_2\text{-C}_6\text{-alkynyl}$, $\text{C}_3\text{-C}_6\text{-xycloalkyl}$, $(\text{C}_1\text{-C}_3\text{-alkyl})\text{-C}_3\text{-C}_6\text{-xycloalkyl}$ và $(\text{C}_3\text{-C}_6\text{-xycloalkyl})\text{-C}_1\text{-C}_3\text{-alkyl}$, $\text{C}_1\text{-C}_6\text{-alkylcarbonyl}$, $\text{C}_1\text{-C}_6\text{-alkoxycarbonyl}$ được thể tùy ý;

Q là:



E là một liên kết, $-\text{CH}_2-$, S, SO, SO_2 , $-\text{S-CH}_2-$, $-\text{SO-CH}_2-$, $-\text{SO}_2\text{-CH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{-S-CH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{-SO-CH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{-SO}_2\text{-CH}_2-$, $-\text{S-CH}_2\text{-CH}_2-$, $-\text{SO-CH}_2\text{-CH}_2-$, $-\text{SO}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2-$, $-\text{NR}^6\text{CH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{-NR}^6\text{CH}_2-$;

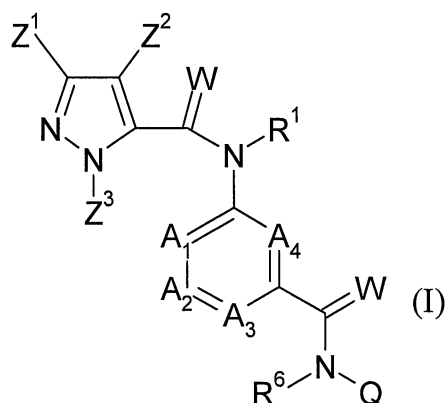
R^7 là xyano hoặc C(=S)NH_2 ;

Z^1 là C_1 - C_6 -haloalkyl hoặc C_3 - C_6 xycloalkyl được thể tùy ý, C_3 - C_6 -haloxycloalkyl, và

Z^2 là nguyên tử halogen, xyano, nitro hoặc C_1 - C_6 -haloalkyl, C_1 - C_6 -alkylthio, C_1 - C_6 -haloalkylthio, C_1 - C_6 -alkylsulphinyl, C_1 - C_6 -haloalkylsulphinyl, C_1 - C_6 -alkylsulphonyl, C_1 - C_6 -haloalkylsulphonyl được thể tùy ý, và

Z^3 là hydro hoặc C_1 - C_6 -alkyl, C_1 - C_4 -alkenyl, C_1 - C_4 -alkynyl, C_1 - C_6 -haloalkyl được thể tùy ý;

Ưu tiên đề xuất hợp chất có công thức (I):



trong đó:

R^1 là hydro, metyl, etyl, n-propyl, isopropyl, n-butyl, isobutyl, s-butyl, t-butyl, metoxymetyl, etoxymetyl, propoxymetyl, metylcarbonyl, etylcarbonyl, n-propylcarbonyl, isopropylcarbonyl, s-butylcarbonyl, t-butylcarbonyl, metoxycarbonyl, etoxycarbonyl, n-propoxycarbonyl, isopropoxycarbonyl, s-butoxycarbonyl, t-butoxycarbonyl, xyanometyl, 2-xyanoetyl, benzyl, 4-metoxybenzyl, pyrit-2-ylmetyl, pyrit-3-ylmetyl, pyrit-4-ylmetyl, 4-clopyrit-3-ylmetyl;

nhóm hóa học

A_1 là CR^2 hoặc nitơ,

A_2 là CR^3 hoặc nitơ,

A_3 là CR^4 hoặc nitơ và

A_4 là CR^5 hoặc nitơ,

nhưng không nhiều hơn ba nhóm từ A₁ đến A₄ đồng thời cùng là nito;

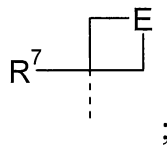
R² và R⁵ độc lập với nhau là hydro, metyl, flo hoặc clo và

R³ và R⁴ độc lập với nhau là hydro, flo, clo, brom, CN, NO₂, metyl, etyl, flometyl, diflometyl, triflometyl, 2,2,2-trifloetyl, metoxy, etoxy, n-propoxy, 1-metyletoxy, flometoxy, diflometoxy, clodiflometoxy, dicloflometoxy, triflometoxy, 2,2,2-trifloetoxo, 2-clo-2,2-difloetoxo, pentaflometoxy, metylsulphonyl, metylsulphinyl, triflometylsulphonyl, triflometylsulphinyl; trong đó

W là nguyên tử oxy,

R⁶ là hydro, metyl, etyl, n-propyl, isopropyl, n-butyl, isobutyl, s-butyl, t-butyl, metoxymetyl, etoxymetyl, propoxymetyl, metylcarbonyl, etylcarbonyl, n-propylcarbonyl, isopropylcarbonyl, s-butylcarbonyl, t-butylcarbonyl, metoxycarbonyl, etoxycarbonyl, n-propoxycarbonyl, isopropoxycarbonyl, s-butoxycarbonyl, t-butoxycarbonyl, xyanometyl, 2-xyanoetyl, benzyl, 4-metoxybenzyl, pyrit-2-ylmetyl, pyrit-3-ylmetyl, pyrit-4-ylmetyl, 4-clopyrit-3-ylmetyl;

Q là:



E là một liên kết hoặc -CH₂-;

R⁷ là xyano hoặc C(=S)NH₂;

Z¹ là diflometyl, triclometyl, clodiflometyl, dicloflometyl, triflometyl, bromodiclometyl, clometyl, bromometyl, 1-floetyl, 1-flo-1-metyleetyl, 2-floetyl, 2,2-difloetyl, 2,2,2-trifloetyl, 1,2,2,2-tetrafloetyl, 1-clo-1,2,2,2-tetrafloetyl, 2,2,2-tricloetyl, 2-clo-2,2-difloetyl, 1,1-difloetyl, pentaflometyl, pentaflometyl-t-butyl, heptaflometyl-n-propyl, heptaflometylisopropyl, nonaflometyl-n-butyl, xyclopropyl, 1-cloxyxyclopropyl, 1-floxyxyclopropyl, 1-bromoxyclopropyl, 1-xyanoxyxyclopropyl, 1-triflometylxyclopropyl, xyclobutyl hoặc 2,2-diflo-1-metylxyclopropyl, và

Z^2 là nguyên tử halogen, xyano, nitro, diflometyl, triclometyl, clodiflometyl, dicloflometyl, triflometyl, bromodiclometyl, clometyl, bromometyl, 1-floetyl, 1-flo-1-metyletyl, 2-floetyl, 2,2-difloetyl, 2,2,2-trifloetyl, 1,2,2,2-tetrafloetyl, 1-clo-1,2,2,2-tetrafloetyl, 2,2,2-tricloetyl, 2-clo-2,2-difloetyl, 1,1-difloetyl, pentafloetyl, pentaflo-t-butyl, heptaflo-n-propyl, heptaflóisopropyl, nonaflo-n-butyl, metylthio, metylsulphinyl, metylsulphonyl, etylthio, etylsulphinyl, etylsulphonyl, triflometylthio, triflometylsulphinyl, triflometylsulphonyl, và

Z^3 là hydro, metyl, etyl, n-propyl, isopropyl, n-butyl, isobutyl, s-butyl, t-butyl, etenyl, 1-propenyl, 2-propenyl, etynyl, 1-propynyl, 1-butynyl, diflometyl, triclometyl, clodiflometyl, dicloflometyl, triflometyl, clometyl, bromometyl, 1-floetyl, 1-flo-1-metyletyl, 2-floetyl, 2,2-difloetyl, 2,2,2-trifloetyl;

Các hợp chất được ưu tiên cụ thể khác là hợp chất có công thức chung (I) trong đó:

Z^1 là triflometyl, 1-cloxypropyl, 1-floxypropyl hoặc pentafloetyl,

Z^2 là triflometyl, nitro, metylthio, metylsulphinyl, metylsulphonyl, flo, clo, brom hoặc iot,

Z^3 là metyl, etyl, n-propyl hoặc hydro,

R^1 là hydro, metyl, etyl, n-propyl, isopropyl, n-butyl, isobutyl, s-butyl, t-butyl, metoxymetyl, etoxymetyl, propoxymetyl, metylcarbonyl, etylcarbonyl, n-propylcarbonyl, isopropylcarbonyl, s-butylcarbonyl, t-butylcarbonyl, metoxycarbonyl, etoxycarbonyl, n-propoxycarbonyl, isopropoxycarbonyl, s-butoxycarbonyl, t-butoxycarbonyl, xyanometyl, 2-xyanoetyl, benzyl, 4-metoxybenzyl, pyrit-2-ylmetyl, pyrit-3-ylmetyl, pyrit-4-ylmetyl, 4-clopyrit-3-ylmetyl,

A^1 , A^2 và A^4 là CH,

A_3 là CR^4 và

R^4 là flo, clo, brom hoặc iot,

R^6 là hydro, metyl, etyl, n-propyl, isopropyl, n-butyl, isobutyl, s-butyl, t-butyl,

W là nguyên tử oxy và

Q là 1-xyanoxycyclopropyl.

Ưu tiên cụ thể là các hợp chất khác trong đó:

Z^1 là triflometyl, 1-cloxy-cyclopropyl, 1-floxy-cyclopropyl hoặc pentafluetyl,

Z^2 là triflometyl, clo hoặc

Z^3 là metyl,

R^1 là hydro, metyl, etyl,

A^1 , A^2 và A^4 là CH,

A_3 là CR^4 và

R^4 là clo,

R^6 là hydro, metyl, etyl,

W là nguyên tử oxy và

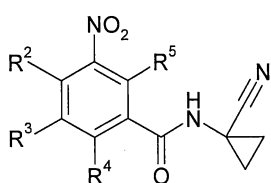
Q là 1-xyanoxycyclopropyl.

Sáng chế còn bao gồm các hợp chất mới có công thức chung (IVa), (IVb), (Va), (Vb) được ưu tiên làm nguyên liệu ban đầu để tổng hợp hợp chất có công thức chung (I).

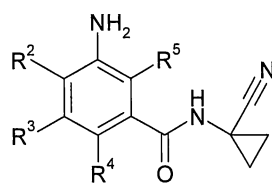
Mô tả chi tiết sáng chế

Hợp chất có công thức chung (IVa) và (IVb) là các phương án ưu tiên cho tiền chất có công thức chung (IV) ví dụ theo các sơ đồ phản ứng 1, 2 và 3. Việc điều chế hợp chất có công thức chung (I), không kể những hợp chất khác, ưu tiên được thực hiện bằng cách sử dụng các hợp chất này. Hợp chất có công thức chung (IVb) thường được biến đổi bằng cách khử thành hợp chất (IVa).

Các hợp chất (IVa) và (IVb) được xác định bằng công thức chung dưới đây:



(IVb)



(IVa)

trong đó:

R^2 , R^3 , R^4 và R^5 độc lập với nhau là hydro, halogen, xyano, nitro, C_1 - C_6 -alkyl, C_1 - C_6 -haloalkyl, C_3 - C_6 -xycloalkyl, C_3 - C_6 -haloxycloalkyl, C_1 - C_6 -alkoxy, C_1 - C_6 -haloalkoxy, C_1 - C_6 -alkylthio, C_1 - C_6 -haloalkylthio, C_1 - C_6 -alkylsulphinyl, C_1 - C_6 -haloalkylsulphinyl, C_1 - C_6 -alkylsulphonyl, C_1 - C_6 -haloalkylsulphonyl, C_1 - C_6 -alkylamino, *N,N*-di- C_1 - C_6 alkylamino, *N*- C_1 - C_6 -alkylaminocarbonyl, *N*- C_3 - C_6 -xycloalkylaminocarbonyl hoặc (C_1 - C_3 -alkoxy)carbonyl tùy ý được thế.

Ưu tiên đề cập đến hợp chất có công thức chung (IVa), (IVb) trong đó:

R^2 và R^5 là hydro hoặc halogen, và

R^3 và R^4 là hydro, halogen, xyano, nitro, C_1 - C_6 -alkyl, C_1 - C_6 -haloalkyl, C_3 - C_6 -xycloalkyl, C_3 - C_6 -haloxycloalkyl, C_1 - C_6 -alkylthio, C_1 - C_6 -haloalkylthio, C_1 - C_6 -alkylsulphinyl, C_1 - C_6 -haloalkylsulphinyl, C_1 - C_6 -alkylsulphonyl, C_1 - C_6 -haloalkylsulphonyl.

Ưu tiên cụ thể đề cập đến hợp chất có công thức chung (IVa), (IVb) trong đó

R^2 là hydro hoặc flo, và

R^3 là hydro, flo, clo, brom, iot, xyano, nitro, metyl, etyl, n-propyl, isopropyl, n-butyl, isobutyl, s-butyl, t-butyl, xyclopropyl, 1-cloxypropyl, 1-floxypropyl, metylthio, triflometylthio, metylsulphinyl, triflometylsulphinyl, metylsulphonyl, triflometylsulphonyl, và

R^4 là hydro, flo, clo, brom, iot, xyano, nitro, metyl, etyl, n-propyl, isopropyl, n-butyl, isobutyl, s-butyl, t-butyl, xyclopropyl, 1-cloxypropyl, 1-floxypropyl, metylthio, triflometylthio, metylsulphinyl, triflometylsulphinyl, metylsulphonyl, triflometylsulphonyl, và

R^5 là hydro.

Ưu tiên rất cụ thể đề cập đến hợp chất có công thức chung (IVa), (IVb) trong đó:

R^2 và R^5 là hydro, và

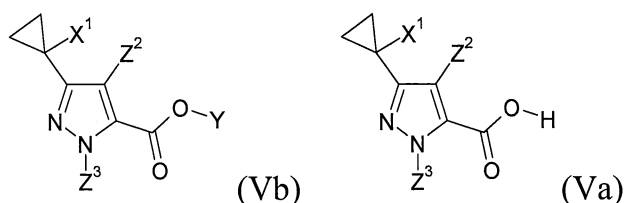
R^3 là hydro, flo, clo, brom, iot, xyano, metyl, etyl, metylthio, triflo-metylthio, metylsulphinyl, triflometylsulphinyl, metylsulphonyl, triflometyl-sulphonyl, và

R^4 là flo, clo, brom, iot, metyl, và

R^5 là hydro.

Hợp chất có công thức chung (Va) và (Vb) là các phương án ưu tiên của tiền chất có công thức chung (V) ví dụ theo các sơ đồ phản ứng 1, 2 và 8. Việc điều chế hợp chất có công thức chung (I), không kể những hợp chất khác, ưu tiên được thực hiện bằng cách sử dụng các hợp chất này.

Các hợp chất (Va) và (Vb) được xác định bằng công thức chung dưới đây, trong đó:



X^1 là nguyên tử halogen, xyano và C_1 - C_4 -haloalkyl, và

Z^2 là nguyên tử halogen, xyano, nitro hoặc C_1 - C_6 -haloalkyl, C_1 - C_6 -alkyl-thio, C_1 - C_6 -haloalkylthio, C_1 - C_6 -alkylsulphinyl, C_1 - C_6 -haloalkylsulphinyl, C_1 - C_6 -alkylsulphonyl, C_1 - C_6 -haloalkylsulphonyl được thể tùy ý, và

Z^3 là hydro hoặc C_1 - C_6 -alkyl, C_1 - C_4 -alkenyl, C_1 - C_4 -alkynyl, C_1 - C_6 -haloalkyl được thể tùy ý, và

Y là C_1 - C_6 alkyl tùy ý được thể.

Ưu tiên đề xuất hợp chất có công thức chung (Va) và (Vb) trong đó:

X^1 là flo, clo, brom, xyano và C_1 - C_2 -haloalkyl, và

Z^2 là nguyên tử halogen, xyano, nitro, diflometyl, triclometyl, clodiflometyl, dicloflometyl, triflometyl, bromodiclometyl, clometyl, bromometyl, 1-floetyl, 1-flo-1-metyletyl, 2-floetyl, 2,2-difloetyl, 2,2,2-trifloetyl, 1,2,2,2-tetrafloetyl, 1-clo-1,2,2,2-tetrafloetyl, 2,2,2-tricloetyl, 2-clo-2,2-difloetyl, 1,1-difloetyl, pentafloetyl, pentaflo-t-butyl, heptaflon-propyl, heptaflorisopropyl, nonaflon-butyl, metylthio, metylsulphinyl, metylsulphonyl, etylthio, etylsulphinyl, etylsulphonyl, triflometylthio, triflometylsulphinyl, triflometylsulphonyl, và

Z^3 là hydro, metyl, etyl, n-propyl, isopropyl, n-butyl, isobutyl, s-butyl, t-butyl, etenyl, 1-propenyl, 2-propenyl, etynyl, 1-propynyl, 1-butylnyl, diflometyl, triclometyl, clodiflometyl, dicloflometyl, triflometyl, clometyl, bromometyl, 1-floetyl, 1-flo-1-metyletyl, 2-floetyl, 2,2-difloetyl, 2,2,2-trifloetyl, và

Y là C_1 - C_6 -alkyl tùy ý được thế.

Ưu tiên cụ thể đề cập đến hợp chất có công thức chung (Va) và (Vb) trong đó:

X^1 là flo, clo, triflometyl hoặc pentafloetyl, và

Z^2 là triflometyl, nitro, metylthio, metylsulphinyl, metylsulphonyl, flo, clo, brom hoặc iot, và

Z^3 là metyl, etyl, n-propyl hoặc hydro, và

Y là metyl, etyl, n-propyl, isopropyl, n-butyl hoặc t-butyl.

Theo sáng chế, "alkyl" - ở dạng như vậy hoặc là một phần của nhóm hóa học – là hydrocacbon mạch thẳng hoặc mạch có nhánh ưu tiên có từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon ví dụ như, metyl, etyl, n-propyl, isopropyl, n-butyl, isobutyl, s-butyl, t-butyl, pentyl, 1-metylbutyl, 2-metylbutyl, 3-metylbutyl, 1,2-dimetylpropyl, 1,1-dimetylpropyl, 2,2-dimetylpropyl, 1-etylpropyl, hexyl, 1-metylpentyl, 2-metylpentyl, 3-metylpentyl, 4-metylpentyl, 1,2-dimetylpropyl, 1,3-dimetylbutyl, 1,4-dimetylbutyl, 2,3-dimetylbutyl, 1,1-dimetylbutyl, 2,2-dimetylbutyl, 3,3-dimetylbutyl, 1,1,2-trimetylpropyl, 1,2,2-trimetylpropyl, 1-etylbutyl và 2-etylbutyl. Ưu tiên đề xuất thêm đến nhóm alkyl có từ 1 đến 4 nguyên tử cacbon như, không kể những nhóm khác, metyl, etyl, n-propyl,

isopropyl, n-butyl, isobutyl, s-butyl hoặc t-butyl. Nhóm alkyl theo sáng chế có thể được thể bằng một hoặc nhiều gốc giống hoặc khác nhau.

Theo sáng chế, "alkenyl" - ở dạng như vậy hoặc là một phần của nhóm hóa học – là hydrocacbon mạch thẳng hoặc mạch có nhánh ưu tiên có từ 2 đến 6 nguyên tử cacbon và ít nhất một liên kết đôi ví dụ như, vinyl, 2-propenyl, 2-butenyl, 3-butenyl, 1-metyl-2-propenyl, 2-metyl-2-propenyl, 2-pentenyl, 3-pentenyl, 4-pentenyl, 1-metyl-2-butenyl, 2-metyl-2-butenyl, 3-metyl-2-butenyl, 1-metyl-3-butenyl, 2-metyl-3-butenyl, 3-metyl-3-butenyl, 1,1-dimetyl-2-propenyl, 1,2-dimetyl-2-propenyl, 1-etyl-2-propenyl, 2-hexenyl, 3-hexenyl, 4-hexenyl, 5-hexenyl, 1-metyl-2-pentenyl, 2-metyl-2-pentenyl, 3-metyl-2-pentenyl, 4-metyl-2-pentenyl, 3-metyl-3-pentenyl, 4-metyl-3-pentenyl, 1-metyl-4-pentenyl, 2-metyl-4-pentenyl, 3-metyl-4-pentenyl, 4-metyl-4-pentenyl, 1,1-dimetyl-2-butenyl, 1,1-dimetyl-3-butenyl, 1,2-dimetyl-2-butenyl, 1,2-dimetyl-3-butenyl, 1,3-dimetyl-2-butenyl, 2,2-dimetyl-3-butenyl, 2,3-dimetyl-2-butenyl, 2,3-dimetyl-3-butenyl, 1-etyl-2-butenyl, 1-etyl-3-butenyl, 2-etyl-2-butenyl, 2-etyl-3-butenyl, 1,1,2-trimetyl-2-propenyl, 1-etyl-1-metyl-2-propenyl và 1-etyl-2-metyl-2-propenyl. Ưu tiên đề xuất thêm đến nhóm alkenyl có từ 2 đến 4 nguyên tử cacbon như, không kể những nhóm khác, 2-propenyl, 2-butenyl hoặc 1-metyl-2-propenyl. Nhóm alkenyl theo sáng chế có thể được thể bằng một hoặc nhiều gốc giống hoặc khác nhau.

Theo sáng chế, "alkynyl" -, ở dạng như vậy hoặc là một phần của nhóm hóa học – là hydrocacbon mạch thẳng hoặc mạch có nhánh ưu tiên có từ 2 đến 6 nguyên tử cacbon và ít nhất một liên kết ba ví dụ như, 2-propynyl, 2-butylnyl, 3-butylnyl, 1-metyl-2-propynyl, 2-pentynyl, 3-pentynyl, 4-pentynyl, 1-metyl-3-butylnyl, 2-metyl-3-butylnyl, 1-metyl-2-butylnyl, 1,1-dimetyl-2-propynyl, 1-etyl-2-propynyl, 2-hexynyl, 3-hexynyl, 4-hexynyl, 5-hexynyl, 1-metyl-2-pentynyl, 1-metyl-3-pentynyl, 1-metyl-4-pentynyl, 2-metyl-3-pentynyl, 2-metyl-4-pentynyl, 3-metyl-4-pentynyl, 4-metyl-2-pentynyl, 1,1-dimetyl-3-butylnyl, 1,2-dimetyl-3-butylnyl, 2,2-dimetyl-3-butylnyl, 1-etyl-3-butylnyl, 2-etyl-3-butylnyl, 1-etyl-1-metyl-2-propynyl và 2,5-hexadiynyl. Ưu tiên đề xuất thêm đến nhóm alkynyl có từ 2 đến 4 nguyên tử cacbon như, không kể những nhóm khác, etynyl, 2-propynyl hoặc 2-butylnyl-2-propenyl. Nhóm alkynyl theo sáng chế có thể được thể bằng một hoặc nhiều gốc giống hoặc khác nhau.

Theo sáng chế, "xycloalkyl" - ở dạng như vậy hoặc là một phần của nhóm hóa học - là hydrocacbon có một, hai hoặc ba vòng ưu tiên có từ 3 đến 10 nguyên tử cacbon ví dụ như, xyclopropyl, xyclobutyl, xyclopentyl, xyclohexyl, xycloheptyl, xyclooctyl, bixyclo[2.2.1]heptyl, bixyclo[2.2.2]octyl hoặc adamantyl. Ưu tiên đề xuất thêm đến nhóm xycloalkyl có 3, 4, 5, 6 hoặc 7 nguyên tử cacbon như, không kể những nhóm khác, xyclopropyl hoặc xyclobutyl. Nhóm xycloalkyl theo sáng chế có thể được thể bằng một hoặc nhiều gốc giống hoặc khác nhau.

Theo sáng chế, "alkylxycloalkyl" là alkylxycloalkyl có một, hai hoặc ba vòng ưu tiên có từ 4 đến 10 hoặc từ 4 đến 7 nguyên tử cacbon ví dụ như, etylxyclopropyl, isopropylxyclobutyl, 3-metyl xyclopentyl và 4-metyl xyclohexyl. Ưu tiên đề xuất thêm đến nhóm alkylxycloalkyl có 4, 5 hoặc 7 nguyên tử cacbon như, không kể những nhóm khác, etylxyclopropyl hoặc 4-metyl xyclohexyl. Nhóm alkylxycloalkyl theo sáng chế có thể được thể bằng một hoặc nhiều gốc giống hoặc khác nhau.

Theo sáng chế, "xycloalkylalkyl" là xycloalkylalkyl có một, hai hoặc ba vòng ưu tiên có từ 4 đến 10 hoặc từ 4 đến 7 nguyên tử cacbon ví dụ như, xyclopropylmetyl, xyclobutylmetyl, xyclopentylmetyl, xyclohexylmetyl và xyclopentyletyl. Ưu tiên đề xuất thêm đến nhóm xycloalkylalkyl có 4, 5 hoặc 7 nguyên tử cacbon như, không kể những nhóm khác, xyclopropylmetyl hoặc xyclobutylmetyl. Nhóm xycloalkylalkyl theo sáng chế có thể được thể bằng một hoặc nhiều gốc giống hoặc khác nhau.

Theo sáng chế, "halogen" là flo, clo, brom hoặc iot, cụ thể là flo, clo hoặc brom.

Nhóm hóa học được thể halogen theo sáng chế ví dụ như, haloalkyl, halo-xycloalkyl, haloalkyloxy, haloalkylthio, haloalkylsulphinyl hoặc haloalkylsulphonyl được thể một hoặc nhiều lần bằng nguyên tử halogen đến số phần tử thể tối đa có thể được. Trong trường hợp thể nhiều lần bằng halogen, nguyên tử halogen có thể là giống hoặc khác nhau, và có thể tất cả đều được liên kết với một hoặc với nhiều nguyên tử cacbon. Ở đây, halogen cụ thể là flo, clo, brom hoặc iot, ưu tiên là flo, clo hoặc brom và ưu tiên cụ thể là flo.

Theo sáng chế, "haloxycloalkyl" là haloxycloalkyl có một, hai hoặc ba vòng ưu tiên có từ 3 đến 10 nguyên tử cacbon như, không kể những nhóm khác, 1-floxyclopropyl, 2-floxyclopropyl hoặc 1-floxyclobutyl. Ưu tiên đề xuất thêm đến haloxycloalkyl có 3, 5 hoặc 7 nguyên tử cacbon. Nhóm haloxycloalkyl theo sáng chế có thể được thế bằng một hoặc nhiều gốc giống hoặc khác nhau.

Theo sáng chế, "haloalkyl" "haloalkenyl" hoặc "haloalkynyl" là nhóm alkyl, alkenyl hoặc alkynyl được thế halogen ưu tiên có từ 1 đến 9 nguyên tử halogen giống hoặc khác nhau ví dụ như, monohaloalkyl như $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{Cl}$, $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{F}$, CHClCH_3 , CHFCH_3 , CH_2Cl , CH_2F ; perhaloalkyl như CCl_3 hoặc CF_3 hoặc CF_2CF_3 ; polyhaloalkyl như CHF_2 , CH_2F , CH_2CHFCl , CHCl_2 , $\text{CF}_2\text{CF}_2\text{H}$, CH_2CF_3 . Điều này áp dụng tương ứng với haloalkenyl và các gốc được thế halogen khác. Haloalkoxy là, ví dụ, OCF_3 , OCHF_2 , OCH_2F , OCF_2CF_3 , OCH_2CF_3 và $\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{Cl}$.

Ví dụ khác về nhóm haloalkyl là triclometyl, clodiflometyl, dicloflometyl, clo-metyl, bromometyl, 1-floetyl, 2-floetyl, 2,2-difloetyl, 2,2,2-trifloetyl, 2,2,2-tricloetyl, 2-clo-2,2-difloetyl, pentaflloetyl và pentafllo-t-butyl. Ưu tiên đề xuất đến nhóm haloalkyl có từ 1 đến 4 nguyên tử cacbon và từ 1 đến 9, ưu tiên từ 1 đến 5, nguyên tử halogen giống hoặc khác nhau được chọn từ nhóm bao gồm flo, clo và brom. Ưu tiên cụ thể đề cập đến nhóm haloalkyl có 1 hoặc 2 nguyên tử cacbon và từ 1 đến 5 nguyên tử nguyên tử halogen giống hoặc khác nhau được chọn từ nhóm bao gồm flo và clo như, không kể những nhóm khác, diflometyl, triflometyl hoặc 2,2-difloetyl.

Theo sáng chế, "hydroxyalkyl" là rượu mạch thẳng hoặc mạch có nhánh ưu tiên có từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon ví dụ như, metanol, etanol, n-propanol, isopropanol, n-butanol, isobutanol, s-butanol và t-butanol. Ưu tiên đề xuất thêm đến nhóm hydroxyalkyl có từ 1 đến 4 nguyên tử cacbon. Nhóm hydroxyalkyl theo sáng chế có thể được thế bằng một hoặc nhiều gốc giống hoặc khác nhau.

Theo sáng chế, "alkoxy" là o-alkyl mạch thẳng hoặc mạch có nhánh ưu tiên có từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon ví dụ như, metoxy, etoxy, n-propoxy, isopropoxy, n-butoxy, isobutoxy, s-butoxy và t-butoxy. Ưu tiên đề xuất thêm đến nhóm alkoxy có từ 1 đến 4

nguyên tử cacbon. Nhóm alkoxy theo sáng chế có thể được thế bằng một hoặc nhiều gốc giống hoặc khác nhau.

Theo sáng chế, "haloalkoxy" là o-alkyl mạch thẳng hoặc mạch có nhánh được thế halogen ưu tiên có từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon như, không kể những nhóm khác, diflometoxy, triflometoxy, 2,2-difloetoxy, 1,1,2,2-tetrafloetoxy, 2,2,2-trifloetoxy và 2-clo-1,1,2-trifloetoxy. Ưu tiên đề xuất thêm đến nhóm haloalkoxy có từ 1 đến 4 nguyên tử cacbon. Nhóm haloalkoxy theo sáng chế có thể được thế bằng một hoặc nhiều gốc giống hoặc khác nhau.

Theo sáng chế, "alkylthio" là s-alkyl mạch thẳng hoặc mạch có nhánh ưu tiên có từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon ví dụ như, metylthio, etylthio, n-propylthio, isopropylthio, n-butylthio, isobutylthio, s-butylthio và t-butylthio. Ưu tiên đề xuất thêm đến nhóm alkylthio có từ 1 đến 4 nguyên tử cacbon. Nhóm alkylthio theo sáng chế có thể được thế bằng một hoặc nhiều gốc giống hoặc khác nhau.

Ví dụ về nhóm haloalkylthioalkyl, nghĩa là nhóm alkylthio được thế halogen là, không kể những nhóm khác diflometylthio, triflometylthio, triclometylthio, clodiflometylthio, 1-floetylthio, 2-floetylthio, 2,2-difloetylthio, 1,1,2,2-tetrafloetylthio, 2,2,2-trifloetylthio hoặc 2-clo-1,1,2-trifloetylthio.

Theo sáng chế, "alkylsulphinyl" là alkylsulphinyl mạch thẳng hoặc mạch có nhánh ưu tiên có từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon ví dụ như, metylsulphinyl, etylsulphinyl, n-propylsulphinyl, isopropylsulphinyl, n-butylsulphinyl, isobutylsulphinyl, s-butylsulphinyl và t-butylsulphinyl. Ưu tiên đề xuất thêm đến nhóm alkylsulphinyl có từ 1 đến 4 nguyên tử cacbon. Nhóm alkylsulphinyl theo sáng chế có thể được thế bằng một hoặc nhiều gốc giống hoặc khác nhau.

Ví dụ về nhóm haloalkylsulphinyl, nghĩa là nhóm alkylsulphinyl được thế halogen là, không kể những nhóm khác, diflometylsulphinyl, triflometylsulphinyl, triclometylsulphinyl, clodiflometylsulphinyl, 1-floetylsulphinyl, 2-floetylsulphinyl, 2,2-difloetylsulphinyl, 1,1,2,2-tetrafloetylsulphinyl, 2,2,2-trifloetylsulphinyl và 2-clo-1,1,2-trifloetylsulphinyl.

Theo sáng chế, "alkylsulphonyl" là alkylsulphonyl mạch thẳng hoặc mạch có nhánh ưu tiên có từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon ví dụ như, metylsulphonyl, etylsulphonyl, n-propylsulphonyl, isopropylsulphonyl, n-butylsulphonyl, isobutylsulphonyl, s-butylsulphonyl và t-butylsulphonyl. Ưu tiên đề xuất thêm đến nhóm alkylsulphonyl có từ 1 đến 4 nguyên tử cacbon. Nhóm alkylsulphonyl theo sáng chế có thể được thể bằng một hoặc nhiều gốc giống hoặc khác nhau.

Ví dụ về nhóm haloalkylsulphonyl, nghĩa là nhóm alkylsulphonyl được thể halogen là, không kể những nhóm khác, diflometylsulphonyl, triflometylsulphonyl, triclometylsulphonyl, clodiflometylsulphonyl, 1-floetylsulphonyl, 2-floetylsulphonyl, 2,2-difloetylsulphonyl, 1,1,2,2-tetrafloetylsulphonyl, 2,2,2-trifloetylsulphonyl và 2-clo-1,1,2-trifloetylsulphonyl.

Theo sáng chế, "alkylcarbonyl" là s alkyl-C(=O) mạch thẳng hoặc mạch có nhánh ưu tiên có từ 2 đến 7 nguyên tử cacbon như metylcarbonyl, etylcarbonyl, n-propylcarbonyl, isopropylcarbonyl, s-butylcarbonyl và t-butylcarbonyl. Ưu tiên đề xuất thêm đến nhóm alkylcarbonyl có từ 1 đến 4 nguyên tử cacbon. Nhóm alkylcarbonyl theo sáng chế có thể được thể bằng một hoặc nhiều gốc giống hoặc khác nhau.

Theo sáng chế, "xycloalkylcarbonyl" là xycloalkylcarbonyl mạch thẳng hoặc mạch có nhánh ưu tiên có từ 3 đến 10 nguyên tử cacbon trong gốc xycloalkyl ví dụ như, xyclopropylcarbonyl, xyclobutylcarbonyl, xyclopentylcarbonyl, xyclohexylcarbonyl, xycloheptylcarbonyl, xyclooctylcarbonyl, bixyclo[2.2.1]heptyl, bixyclo[2.2.2]octylcarbonyl và adamantylcarbonyl. Ưu tiên đề xuất thêm đến xycloalkylcarbonyl có 3, 5 hoặc 7 nguyên tử cacbon trong gốc xycloalkyl. Nhóm xycloalkylcarbonyl theo sáng chế có thể được thể bằng một hoặc nhiều gốc giống hoặc khác nhau.

Theo sáng chế, "alkoxycarbonyl" - ở dạng riêng biệt hoặc là phần tử thể của nhóm hóa học - là alkoxycarbonyl mạch thẳng hoặc mạch có nhánh, ưu tiên có từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon hoặc có từ 1 đến 4 nguyên tử cacbon trong gốc alkoxy ví dụ như, metoxycarbonyl, etoxycarbonyl, n-propoxycarbonyl, isopropoxycarbonyl, s-

butoxycarbonyl và t-butoxycarbonyl. Nhóm alkoxycarbonyl theo sáng chế có thể được thể bằng một hoặc nhiều gốc giống hoặc khác nhau.

Theo sáng chế, "alkylaminocarbonyl" là alkylaminocarbonyl mạch thẳng hoặc mạch có nhánh ưu tiên có từ 1 đến nguyên tử cacbon hoặc từ 1 đến 4 nguyên tử cacbon trong gốc alkyl, ví dụ như, metylaminocarbonyl, etylaminocarbonyl, n-propylaminocarbonyl, isopropylaminocarbonyl, s-butylaminocarbonyl và t-butylaminocarbonyl. Nhóm alkylaminocarbonyl theo sáng chế có thể được thể bằng một hoặc nhiều gốc giống hoặc khác nhau.

Theo sáng chế, "*N,N*-dialkylaminocarbonyl" là *N,N*-dialkylaminocarbonyl mạch thẳng hoặc mạch có nhánh ưu tiên có từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon hoặc từ 1 đến 4 nguyên tử cacbon trong gốc alkyl, ví dụ như, *N,N*-dimethylaminocarbonyl, *N,N*-diethylaminocarbonyl, *N,N*-di(n-propylamino)carbonyl, *N,N*-di(isopropylamino)carbonyl và *N,N*-di(s-butylamino)carbonyl. Nhóm *N,N*-dialkylaminocarbonyl theo sáng chế có thể được thể bằng một hoặc nhiều gốc giống hoặc khác nhau.

Theo sáng chế, "aryl" là hệ thơm có một, hai hoặc ba vòng ưu tiên có từ 6 đến 14, cụ thể từ 6 đến 10 nguyên tử cacbon trong vòng ví dụ như, phenyl, naphthyl, anthryl, phenantrenyl, ưu tiên là phenyl. Hơn nữa, aryl cũng là hệ đa vòng như tetrahydronaphthyl, indenyl, indanyl, fluorenyl, biphenylyl, trong đó vị trí liên kết ở trên hệ thơm này. Nhóm aryl theo sáng chế có thể được thể bằng một hoặc nhiều gốc giống hoặc khác nhau.

Ví dụ về aryl được thể là nhóm arylalkyl mà tương tự có thể được thể bằng một hoặc nhiều gốc giống hoặc khác nhau trong gốc alkyl và/hoặc aryl. Ví dụ về các nhóm arylalkyl này là, không kể những nhóm khác, benzyl và 1-phenyletyl.

Theo sáng chế, "dị vòng", "vòng khác loại" hoặc "hệ vòng khác loại" là hệ vòng cacbon có ít nhất một vòng trong đó ít nhất một nguyên tử cacbon được thay thế bằng một nguyên tử khác loại, tốt hơn bằng một nguyên tử khác loại từ nhóm gồm có N, O, S, P, B, Si, Se, và là no, không no hoặc dị thơm và có thể không được thể hoặc được thể bằng phần tử thế Z, trong đó điểm liên kết được định vị ở một nguyên tử trong

vòng. Trừ khi được quy định khác, dị vòng ưu tiên chứa từ 3 đến 9 nguyên tử trong vòng, cụ thể từ 3 đến 6 nguyên tử trong vòng, và một hoặc nhiều, ưu tiên từ 1 đến 4, cụ thể 1, 2 hoặc 3, nguyên tử khác loại trong dị vòng, ưu tiên được chọn từ nhóm bao gồm N, O, và S, tuy nhiên nên không có hai nguyên tử oxy nào ở cạnh nhau. Dị vòng thường chứa không nhiều hơn 4 nitơ và/hoặc không nhiều hơn 2 nguyên tử oxy và/hoặc không nhiều hơn 2 nguyên tử lưu huỳnh. Nếu gốc dị vòng hoặc dị vòng này được thể tùy ý, nó có thể được ngưng tụ với các vòng cacbon hoặc dị vòng khác. Trong trường hợp dị vòng được thể tùy ý, sáng chế cũng đề cập đến hệ đa vòng ví dụ như, 8-azabicyclo[3.2.1]octanyl hoặc 1-azabicyclo[2.2.1]heptyl. Dị vòng được thể tùy ý, sáng chế cũng đề cập đến hệ vòng spiro ví dụ như, 1-oxa-5-azaspiro[2.3]hexyl.

Nhóm dị vòng theo sáng chế là, ví dụ, piperidiny, piperaziny, morpholiny, thiomorpholiny, dihydropyrany, tetrahydropyrany, dioxany, pyrroliny, pyrrolidiny, imidazoliny, imidazolidiny, thiazolidiny, oxazolidiny, dioxolany, dioxoly, pyrazolidiny, tetrahydrofurany, dihydrofurany, oxetany, oxirany, azetidiny, aziridiny, oxazetidiny, oxaziridiny, oxazepany, oxazinany, azepany, oxopyrrolidiny, dioxopyrrolidiny, oxomorpholiny, oxopiperaziny và oxepany.

Heteroarylen, nghĩa là hệ dị thơm, có nghĩa cụ thể. Theo sáng chế, thuật ngữ heteroaryl là hợp chất dị thơm, nghĩa là hợp chất dị vòng thơm không no hoàn toàn ở trong định nghĩa về dị vòng ở trên. Tham khảo vòng có từ 5- đến 7- cạnh có từ 1 đến 3, tốt hơn có 1 hoặc 2, nguyên tử giống hoặc khác nhau được chọn từ nhóm ở trên. Nhóm heteroaryl theo sáng chế là, ví dụ, furyl, thienyl, pyrazolyl, imidazolyl, 1,2,3- và 1,2,4-triazolyl, isoxazolyl, thiazolyl, isothiazolyl, 1,2,3-, 1,3,4-, 1,2,4- và 1,2,5-oxadiazolyl, azepiny, pyroryl, pyrityl, pyritaziny, pyrimidiny, pyraziny, 1,3,5-, 1,2,4- và 1,2,3-triaziny, 1,2,4-, 1,3,2-, 1,3,6 và 1,2,6oxaziny, oxepiny, thiopiny, 1,2,4-triazolonyl và 1,2,4-diazepiny. Nhóm heteroaryl theo sáng chế có thể cũng được thể bằng một hoặc nhiều gốc giống hoặc khác nhau.

Nhóm được thể như gốc alkyl, alkenyl, alkynyl, xycloalkyl, aryl, phenyl, benzyl, heteroxyclyl và heteroaryl được thể là ví dụ, gốc được thể thu được từ cấu trúc bazo không được thể, trong đó các phần tử thể là, ví dụ, một hoặc nhiều, ưu tiên 1, 2 hoặc 3,

gốc từ nhóm bao gồm halogen, alkoxy, alkylthio, hydroxyl, amino, nitro, carboxyl hoặc nhóm tương đương với nhóm carboxyl, xyano, isoxyano, azido, alkoxy-carbonyl, alkyl-carbonyl, formyl, carbamoyl, mono- và *N,N*-dialkylaminocarbonyl, amino được thế như axylamino, mono- và *N,N*-dialkylamino, trialkylsilyl và xycloalkyl được thế tùy ý, aryl được thế tùy ý, heteroxyclyl được thế tùy ý, mỗi chúng trong nhóm vòng sau cùng cũng có thể được liên kết thông qua nguyên tử khác loại hoặc nhóm chức có hóa trị hai như ở trong gốc alkyl đã đề cập, và alkylsulphinyl, bao gồm cả hai chất đồng phân đối ảnh của nhóm alkylsulphonyl, alkylphosphinyl, alkylphosphonyl và, trong trường hợp gốc vòng (= "khung vòng"), cả alkyl, haloalkyl, alkylthioalkyl, alkoxyalkyl, mono- và *N,N*-dialkylaminoalkyl tùy ý được thế và hydroxyalkyl.

Thuật ngữ "nhóm được thế", như alkyl được thế v.v..., bao gồm, khi các phần tử thế, ngoài gốc hydrocacbon no đã đề cập, gốc béo và thơm không no tương ứng như alkenyl được thế tùy ý, alkynyl, alkenyloxy, alkynyloxy, alkenylthio, alkynylthio, alkenyloxycarbonyl, alkynyloxycarbonyl, alkenylcarbonyl, alkynylcarbonyl, mono- và *N,N*-dialkenylaminocarbonyl, mono- và dialkynylaminocarbonyl, mono- và *N,N*-dialkenylamino, mono- và *N,N*-dialkynylamino, trialkenylsilyl, trialkynylsilyl, xycloalkenyl được thế tùy ý, xycloalkynyl được thế tùy ý, phenyl, phenoxy v.v.... Trong trường hợp gốc vòng không được thế bằng các thành phần béo trong vòng, cũng bao gồm hệ vòng có các phần tử thế này liên kết với vòng bằng một liên kết đôi, ví dụ hệ vòng có nhóm alkyliden như metyliden hoặc etyliden, hoặc nhóm oxo, nhóm imino hoặc nhóm imino được thế.

Khi hai hoặc nhiều gốc tạo thành một hoặc nhiều vòng, chúng có thể là vòng cacbon, dị vòng, no, no một phần, không no, ví dụ cả thơm và được thế thêm.

Phần tử thế được đề cập qua ví dụ ("mức thế thứ nhất") có thể, nếu chúng chứa gốc chứa hydrocacbon, tùy ý được thế thêm ở đó ("mức thế thứ hai"), ví dụ bằng một trong các phần tử thế như đã xác định cho mức thế thứ nhất. Cũng có thể có thêm các mức thế khác tương ứng. Thuật ngữ "gốc được thế" ưu tiên bao gồm chỉ một hoặc hai mức thế.

Phần tử thế ưu tiên cho các mức thế là, ví dụ,

amino, hydroxy, halogen, nitro, xyano, isoxyano, mercapto, isothioxyanato, carboxyl, carboxamit, SF₅, aminosulphonyl, alkyl, xycloalkyl, alkenyl, xycloalkenyl, alkynyl, *N*-monoalkylamino, *N,N*-dialkylamino, *N*-alkanoylamino, alkoxy, alkenyloxy, alkynyloxy, xycloalkoxy, xycloalkenyloxy, alkoxycarbonyl, alkenyloxycarbonyl, alkynyloxycarbonyl, aryloxycarbonyl, alkanoyl, alkenylcarbonyl, alkynylcarbonyl, arylcarbonyl, alkylthio, xycloalkylthio, alkenylthio, xycloalkenylthio, alkynylthio, alkylsulphenyl và alkylsulphinyl, trong đó bao gồm cả hai chất đồng phân đối ảnh của nhóm alkylsulphinyl, alkylsulphonyl, *N*-monoalkylaminosulphonyl, *N,N*-dialkylaminosulphonyl, alkylphosphinyl, alkylphosphonyl, trong đó trong trường hợp alkylphosphinyl và alkylphosphonyl bao gồm cả hai chất đồng phân đối ảnh, *N*-alkylaminocarbonyl, *N,N*-dialkylaminocarbonyl, *N*-alkanoylaminocarbonyl, *N*-alkanoyl-*N*-alkylaminocarbonyl, aryl, aryloxy, benzyl, benzyloxy, benzylthio, arylthio, arylamino, benzylamino, dị vòng và trialkylsilyl.

Phần tử thế bao gồm nhiều mức thế ưu tiên là alkoxyalkyl, alkylthioalkyl, alkylthioalkoxy, alkoxyalkoxy, phenetyl, benzyloxy, haloalkyl, haloxycloalkyl, haloalkoxy, haloalkylthio, haloalkylsulphinyl, haloalkylsulphonyl, haloalkanoyl, haloalkylcarbonyl, haloalkoxycarbonyl, haloalkoxyalkoxy, haloalkoxyalkylthio, haloalkoxyalkanoyl, haloalkoxyalkyl.

Trong trường hợp gốc có nguyên tử cacbon, ưu tiên là gốc có từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon, ưu tiên có từ 1 đến 4 nguyên tử cacbon, cụ thể có 1 hoặc 2 nguyên tử cacbon. Ưu tiên phần tử thế từ nhóm bao gồm halogen, ví dụ flo và clo, (C₁-C₄)-alkyl, ưu tiên metyl hoặc etyl, (C₁-C₄)-haloalkyl, ưu tiên triflometyl, (C₁-C₄)-alkoxy, ưu tiên metoxy hoặc etoxy, (C₁-C₄)-haloalkoxy, nitro và xyano. Ưu tiên cụ thể là phần tử thế metyl, metoxy, flo và clo.

Amino được thế như amino được thế một hoặc hai lần nghĩa là gốc từ nhóm bao gồm gốc amino được thế mà được thế *N*, ví dụ, bằng một hoặc hai gốc giống hoặc khác nhau từ nhóm bao gồm nhóm alkyl, hydroxy, amino, alkoxy, axyl và aryl; ưu tiên *N*-mono- và *N,N*-dialkylamino, (ví dụ, metylamino, etylamino, *N,N*-dimetylamino,

N,N-diethylamino, *N,N*-di-*n*-propylamino, *N,N*-diisopropylamino hoặc *N,N*-dibutylamino), *N*-mono- hoặc *N,N*-dialkoxyalkylamino (ví dụ, *N*-metoxymethylamino, *N*-metoxyethylamino, *N,N*-di(metoxymethyl)amino hoặc *N,N*-di(metoxyethyl)amino), *N*-mono- và *N,N*-diarylamino, như anilin được thế tùy ý, axylamino, *N,N*-diaxylamino, *N*-alkyl-*N*-arylamino, *N*-alkyl-*N*-axylamino và *N*-dị vòng no; ưu tiên ở đây là gốc alkyl có từ 1 đến 4 nguyên tử cacbon; ở đây, aryl ưu tiên là phenyl hoặc phenyl được thế; với axyl, định nghĩa đưa ra thêm dưới đây, ưu tiên (C₁-C₄)-alkanoyl. Cùng đưa ra cho hydroxylamino được thế hoặc hydrazino.

Theo sáng chế, thuật ngữ "nhóm amino vòng" bao gồm hệ vòng dị thơm hoặc hệ vòng béo có một hoặc nhiều nitơ. Dị vòng no hoặc không no, bao gồm một hoặc nhiều hệ vòng tùy ý được ngưng tụ và tùy ý còn bao gồm các nguyên tử khác loại khác ví dụ như, một hoặc hai nitơ, oxy và/hoặc nguyên tử lưu huỳnh. Hơn nữa, thuật ngữ này cũng bao gồm nhóm có hệ vòng spiro hoặc hệ vòng có cầu. Số nguyên tử mà tạo thành nhóm amino vòng không bị giới hạn, trong trường hợp hệ một vòng, ví dụ, các nhóm có thể bao gồm từ 3 đến 8 nguyên tử trong vòng, và trong trường hợp hệ hai vòng có từ 7 đến 11 nguyên tử.

Ví dụ về nhóm amino vòng có nhóm vòng đơn no và không no có nitơ làm nguyên tử khác loại mà có thể được đề cập đến là 1-azetidiny, pyrrolidino, 2-pyrrolidin-1-yl, 1-pyrrolyl, piperidino, 1,4-dihydropyrazin-1-yl, 1,2,5,6-tetrahydropyrazin-1-yl, 1,4-dihydropyridin-1-yl, 1,2,5,6-tetrahydropyridin-1-yl, homopiperidiny; ví dụ về nhóm amino vòng có nhóm vòng đơn no và không no có hai hoặc nhiều nitơ làm nguyên tử khác loại có thể được đề cập đến là 1-imidazolidiny, 1-imidazolyl, 1-pyrazolyl, 1-triazolyl, 1-tetrazolyl, 1-piperaziny, 1-homopiperaziny, 1,2-dihydropiperazin-1-yl, 1,2-dihydropyrimidin-1-yl, perhydropyrimidin-1-yl, 1,4-diazaxycloheptan-1-yl; ví dụ về nhóm amino vòng có nhóm vòng đơn no và không no có một hoặc hai nguyên tử oxy và từ một đến ba nitơ làm nguyên tử khác loại, ví dụ như, oxazolidin-3-yl, 2,3-dihydroisoxazol-2-yl, isoxazol-2-yl, 1,2,3-oxadiazin-2-yl, morpholino, ví dụ về nhóm amino vòng có nhóm vòng đơn no và không no có từ một đến ba nitơ và từ một đến hai nguyên tử lưu huỳnh làm nguyên tử khác loại có thể được đề cập đến là thiazolidin-3-yl, isothiazolin-2-yl, thiomorpholino, hoặc

dioxothiomorpholino; ví dụ về nhóm amino vòng có nhóm vòng được ngưng tụ no và không no có thể được đề cập đến là indol-1-yl, 1,2-dihydrobenzimidazol-1-yl, perhydropyrol[1,2-a]pyrazin-2-yl; ví dụ về nhóm amino vòng có nhóm vòng spiro có thể được đề cập đến là 2-azaspiro[4,5]decan-2-yl; ví dụ về nhóm amino vòng có nhóm dị vòng có cầu có thể được đề cập đến là 2-azabicyclo[2.2.1]heptan-7-yl.

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

Phenyl tùy ý được thể ưu tiên là phenyl mà không được thể hoặc được thể một hoặc nhiều lần, ưu tiên được thể đến ba lần, bằng các gốc giống hoặc khác nhau từ nhóm bao gồm halogen, (C₁-C₄)-alkyl, (C₁-C₄)-alkoxy, (C₁-C₄)-alkoxy-(C₁-C₄)-alkoxy, (C₁-C₄)-alkoxy-(C₁-C₄)-alkyl, (C₁-C₄)-haloalkyl, (C₁-C₄)-haloalkoxy, (C₁-C₄)-alkylthio, (C₁-C₄)-haloalkylthio, xyano, isoxyano và nitro, ví dụ o-, m- và p-tolyl, dimethylphenyls, 2-, 3- và 4-clophenyl, 2-, 3- và 4-flophenyl, 2-, 3- và 4-triflometyl- và -triclometylphenyl, 2,4-, 3,5-, 2,5- và 2,3-diclophenyl, o-, m- và p-metoxyphephenyl.

Xycloalkyl tùy ý được thể ưu tiên là xycloalkyl, mà không được thể hoặc được thể một hoặc nhiều lần, ưu tiên được thể đến ba lần, bằng gốc giống hoặc khác nhau từ nhóm bao gồm halogen, xyano, (C₁-C₄)-alkyl, (C₁-C₄)-alkoxy, (C₁-C₄)-alkoxy-(C₁-C₄)-alkoxy, (C₁-C₄)-alkoxy-(C₁-C₄)-alkyl, (C₁-C₄)-haloalkyl và (C₁-C₄)-haloalkoxy, cụ thể bằng một hoặc hai gốc (C₁-C₄)-alkyl.

Dị vòng tùy ý được thể ưu tiên là dị vòng mà không được thể hoặc được thể một hoặc nhiều lần, ưu tiên được thể đến ba lần, bằng gốc giống hoặc khác nhau từ nhóm bao gồm halogen, xyano, (C₁-C₄)-alkyl, (C₁-C₄)-alkoxy, (C₁-C₄)-alkoxy-(C₁-C₄)-alkoxy, (C₁-C₄)-alkoxy-(C₁-C₄)-alkyl, (C₁-C₄)-haloalkyl, (C₁-C₄)-haloalkoxy, nitro và oxo, cụ thể được thể một hoặc nhiều lần bằng các gốc từ nhóm bao gồm halogen, (C₁-C₄)-alkyl, (C₁-C₄)-alkoxy, (C₁-C₄)-haloalkyl và oxo, ưu tiên nhất được thể bằng một hoặc hai gốc (C₁-C₄)-alkyl.

Ví dụ về nhóm heteroaryl được thể alkyl là furylmetyl, thienylmetyl, pyrazolylmetyl, imidazolylmetyl, 1,2,3- và 1,2,4-triazolylmetyl, isoxazolylmetyl,

thiazolylmetyl, isothiazolylmetyl, 1,2,3-, 1,3,4-, 1,2,4- và 1,2,5-oxadiazolylmetyl, azepinylmetyl, pyrolylmetyl, pyritylmetyl, pyritazinylmetyl, pyrimidinylmetyl, pyrazinylmetyl, 1,3,5-, 1,2,4- và 1,2,3-triazinylmetyl, 1,2,4-, 1,3,2-, 1,3,6 và 1,2,6oxazinylmetyl, oxepinylmetyl, thiepinylmetyl và 1,2,4-diazepinylmetyl.

Muối phù hợp theo sáng chế là các hợp chất theo sáng chế, ví dụ muối với bazơ hoặc muối cộng axit, là tất cả các muối không độc thông thường, ưu tiên muối phù hợp trong nông nghiệp và/hoặc phù hợp với sinh lý. Ví dụ muối với bazơ hoặc muối cộng axit. Ưu tiên muối với bazơ vô cơ ví dụ như, muối kim loại kiềm (ví dụ, muối natri, kali hoặc xezit), muối kim loại kiềm thổ (ví dụ, muối canxi hoặc magie), muối amoni hoặc muối với bazơ hữu cơ, cụ thể với amin hữu cơ, ví dụ như, muối trietylamoni, dicyclohexylamoni, *N,N'*-dibenzyletylendiamoni, pyridini, picolini hoặc etanolamoni, muối với axit vô cơ (ví dụ, clohydric, bromhydric, dihydrosulphat, trihydrosulphat hoặc phosphat), muối với axit carboxylic hữu cơ hoặc sulphoaxit vô cơ (ví dụ, format, axetat, trifloaxetat, maleat, tartrat, metansulphonat, benzensulphonat hoặc 4-toluensulphonat). Đã biết rằng t-amin như một số hợp chất theo sáng chế có khả năng tạo thành *N*-oxit, cũng là muối theo sáng chế.

Hợp chất theo sáng chế có thể, phụ thuộc vào đặc điểm của các phần tử thế, ở dạng chất đồng phân có hoạt tính hình học và/hoặc quang học hoặc hỗn hợp của chất đồng phân tương ứng trong các chế phẩm khác nhau. Các chất đồng phân lập thể này là, ví dụ, chất đồng phân đối ảnh, chất đồng phân phi đối ảnh, đồng phân atropo hoặc đồng phân hình học. Theo đó, sáng chế đề cập đến chất đồng phân lập thể thuần túy và bất kỳ hỗn hợp nào của các chất đồng phân này.

Khi phù hợp, hợp chất theo sáng chế có thể có mặt ở các dạng đa hình khác nhau hoặc ở dạng hỗn hợp của các dạng đa hình khác nhau. Cả hai dạng đa hình thuần túy và hỗn hợp đa hình đều được đề xuất theo sáng chế và có thể được sử dụng theo sáng chế.

Hợp chất có công thức chung (I) có thể được trộn lẫn hoặc được sử dụng cùng với các hợp chất có hoạt tính trừ sâu, diệt giun, diệt ve hoặc kháng khuẩn. Trong các hỗn hợp hoặc dạng sử dụng kết hợp này, hiệu quả hiệp đồng có thể xảy ra, nghĩa là

quan sát thấy hiệu quả của hỗn hợp hoặc dạng sử dụng kết hợp này là cao hơn tổng hiệu quả của các hợp chất có hoạt tính riêng lẻ trong các ứng dụng này. Ví dụ về hợp chất trộn lẫn hoặc kết hợp vào này là:

(1) Chất ức chế axetylcholinesteraza (axetylcholinesterase -AChE), ví dụ

carbamat, ví dụ alanycarb (II-1-1), aldicarb (II-1-2), bendiocarb (II-1-3), benfuracarb (II-1-4), butocarboxim (II-1-5), butoxycarboxim (II-1-6), carbaryl (II-1-7), carbofuran (II-1-8), carbosulfan (II-1-9), ethiofencarb (II-1-10), fenobucarb (II-1-11), formetanate (II-1-12), furathiocarb (II-1-13), isoprocarb (II-1-14), methiocarb (II-1-15), methomyl (II-1-16), metolcarb (II-1-17), oxamyl (II-1-18), pirimicarb (II-1-19), propoxur (II-1-20), thiodicarb (II-1-21), thiofanox (II-1-22), triazamat (II-1-23), trimethacarb (II-1-24), XMC (II-1-25) và xylylcarb (II-1-26); hoặc

organophosphat, ví dụ axephat (II-1-27), azamethiphos (II-1-28), azinphos-ethyl (II-1-29), azinphos-metyl (II-1-30), cadusafos (II-1-31), cloetoxifos (II-1-32), clofenvinphos (II-1-33), clomephos (II-1-34), clopyrifos (II-1-35), clopyrifos-metyl (II-1-36), coumaphos (II-1-37), xyanophos (II-1-38), demeton-S-metyl (II-1-39), diazinon (II-1-40), diclofos/DDVP (II-1-41), dicrotophos (II-1-42), dimetoat (II-1-43), dimetylvinphos (II-1-44), disulfoton (II-1-45), EPN (II-1-46), ethion (II-1-47), ethoprophos (II-1-48), famphur (II-1-49), fenamiphos (II-1-50), fenitrothion (II-1-51), fenthion (II-1-52), fosthiazate (II-1-53), heptenophos (II-1-54), imixyafos (II-1-55), isofenphos (II-1-56), isopropyl O-(metoxyaminothiophosphoryl) salixylat (II-1-57), isoxathion (II-1-58), malathion (II-1-59), mecarbam (II-1-60), methamidophos (II-1-61), methidathion (II-1-62), mevinphos (II-1-63), monocrotophos (II-1-64), naled (II-1-65), ometoat (II-1-66), oxydemeton-metyl (II-1-67), parathion (II-1-68), parathion-metyl (II-1-69), phenthoat (II-1-70), phorat (II-1-71), phosalon (II-1-72), phosmet (II-1-73), phosphamidon (II-1-74), phoxim (II-1-75), pirimiphos-metyl (II-1-76), profenofos (II-1-77), propetamphos (II-1-78), prothiofos (II-1-79), pyraclofos (II-1-80), pyritaphenthion (II-1-81), quinalphos (II-1-82), sulfotep (II-1-83), tebupirimfos (II-1-84), temephos (II-1-85), terbufos (II-1-86), tetraclovinphos (II-1-87), thiometon (II-1-88), triazophos (II-1-89), triclofon (II-1-90) và vamidothion (II-1-91).

(2) Chất đối kháng kênh cổng vận chuyển clorua-GABA ví dụ như, xyclodien clo hữu cơ, ví dụ clodan (II-2-1) và endosulfan (II-2-2); hoặc phenylpyrazol (fiprol), ví dụ ethiprol (II-2-3) và fipronil (II-2-4).

(3) Chất điều biến kênh natri/chất chặn kênh natri phụ thuộc điện áp ví dụ như, pyrethroit, ví dụ acrinathrin (II-3-1), allethrin (II-3-2), d-cis-trans allethrin (II-3-3), d-trans allethrin (II-3-4), bifenthrin (II-3-5), bioallethrin (II-3-6), chất đồng phân bioallethrin S-xycllopentenyl (II-3-7), bioresmethrin (II-3-8), xycloprothrin (II-3-9), xyfluthrin (II-3-10), beta-xyfluthrin (II-3-11), xyhalothrin (II-3-12), lambda-xyhalothrin (II-3-13), gama-xyhalothrin (II-3-14), xypermethrin (II-3-15), alpha-xypermethrin (II-3-16), beta-xypermethrin (II-3-17), theta-xypermethrin (II-3-18), zeta-xypermethrin (II-3-19), xyphenothrin [chất đồng phân (1R)-trans] (II-3-20), deltamethrin (II-3-21), chất đồng phân empenthrin [(EZ)-(1R)] (II-3-22), esfenvalerat (II-3-23), etofenprox (II-3-24), fenpropathrin (II-3-25), fenvalerat (II-3-26), fluxythrinate (II-3-27), flumethrin (II-3-28), tau-fluvalinate (II-3-29), halfenprox (II-3-30), imiprothrin (II-3-31), kadethrin (II-3-32), permethrin (II-3-33), phenothrin [chất đồng phân (1R)-trans] (II-3-34), prallethrin (II-3-35), pyrethrin (pyrethrum) (II-3-36), resmethrin (II-3-37), silafluofen (II-3-38), tefluthrin (II-3-39), tetramethrin (II-3-40), tetramethrin [chất đồng phân (1R)] (II-3-41), tralomethrin (II-3-42) và transfluthrin (II-3-43); hoặc DDT (II-3-44); hoặc metoxyclo (II-3-45).

(4) Chất chủ vận thụ thể nicotinic axetylcholin (Nicotinic axetylcholine receptor-nAChR) ví dụ như, neonicotinoit, ví dụ axetamiprit (II-4-1), clothianidin (II-4-2), dinotefuran (II-4-3), imidacloprid (II-4-4), nitenpyram (II-4-5), thiacloprid (II-4-6) và thiamethoxam (II-4-7); hoặc nicotin (II-4-8).

(5) Chất hoạt hóa dị lập thể thụ thể nicotinic axetylcholin (Nicotinic axetylcholine receptor-nAChR) ví dụ như, spinosyn, ví dụ spinetoram (II-5-1) và spinosad (II-5-2).

(6) Chất hoạt hóa kênh clorua ví dụ như,
 avermectin/milbemyxin, ví dụ abamectin (II-61), emamectin benzoat (II-62),
 lepimectin (II-63) và milbemectin (II-64).

(7) Chất giả hormon vị thành niên ví dụ như,
 chất tương tự hormon vị thành niên, ví dụ hydropren (II-7-1), kinopren (II-7-2) và
 metopren (II-7-3); hoặc
 fenoxycarb (II-7-4); hoặc pyriproxyfen (II-7-5).

(8) Hợp chất có hoạt tính với cơ chế hoạt động chưa biết hoặc không cụ thể ví dụ
 như
 alkyl halua, ví dụ metyl bromua (II-8-1) và alkyl halua khác; hoặc
 clopicrin (II-8-2); hoặc sulphuryl florua (II-8-3); hoặc borax (II-8-4); hoặc tartar
 emetic (II-8-5).

(9) Chất gây ngán chọn lọc, ví dụ pymetrozin (II-9-1); hoặc flonicamit (II-9-2).

(10) Chất ức chế sự phát triển của ve, ví dụ clofentezin (II-10-1), hexythiazox (II-
 10-2) và diflovidazin (II-10-3); hoặc
 etoxazol (II-10-4).

(11) Vi khuẩn phá hủy màng ruột sâu bọ, ví dụ *Bacillus thuringiensis* phân loài
 israelensis (II-11-1), *Bacillus sphaericus* (II-11-2), *Bacillus thuringiensis* phân loài
 aizawai (II-11-3), *Bacillus thuringiensis* phân loài kurstaki (II-11-4), *Bacillus*
thuringiensis phân loài tenebrionis (II-11-5) và protein thực vật BT: Cry1Ab, Cry1Ac,
 Cry1Fa, Cry2Ab, mCry3A, Cry3Ab, Cry3Bb, Cry34/35Ab1 (II-11-6).

(12) Chất ức chế sự oxy-phosphoryl hóa, chất phá hủy ATP ví dụ như,
 diafenthiuron (II-12-1); hoặc
 hợp chất organotin, ví dụ azoxyclostin (II-12-2), xyhexatin (II-12-3) và fenbutatin
 oxit (II-12-4); hoặc
 propargit (II-12-5); hoặc tetradifon (II-12-6).

(13) Chất khử liên kết oxy-phosphoryl hóa hoạt động bằng cách phá vỡ gradien của proton giờ ví dụ như, clofenapyr (II-13-1), DNOC (II-13-2) và sulfluramit (II-13-3).

(14) Chất đối kháng thụ thể nicotinerigic axetylcholin ví dụ như, bensultap (II-14-1), cartap hydroclorua (II-14-2), thioxycclam (II-14-3) và thiosultap-natri (II-14-4).

(15) Chất ức chế sinh tổng hợp chitin, loại 0, ví dụ như, bistrifluron (II-15-1), clofluazuron (II-15-2), diflubenzuron (II-15-3), fluxycloxuron (II-15-4), flufenoxuron (II-15-5), hexaflumuron (II-15-6), lufenuron (II-15-7), novaluron (II-15-8), noviflumuron (II-15-9), teflubenzuron (II-15-10) và triflumuron (II-15-11).

(16) Chất ức chế sinh tổng hợp chitin, loại 1, như, ví dụ, buprofezin (II-161).

(17) Chất làm gián đoạn sự thay lông ở côn trùng hai cánh ví dụ như, xyromazin (II-17-1).

(18) Chất chủ vận thụ thể ecdyson ví dụ như, chromafenozit (II-18-1), halofenozit (II-18-2), metoxyfenozit (II-18-3) và tebufenozit (II-18-4).

(19) Chất chủ vận octopaminergic ví dụ như, amitraz (II-19-1).

(20) Chất ức chế sự vận chuyển phức hợp -III electron ví dụ như, hydrametylnon (II-20-1); hoặc axequinocyl (II-20-2); hoặc fluacrypyrim (II-20-3).

(21) Chất ức chế sự vận chuyển phức hợp -I electron, ví dụ METI acaricit, ví dụ fenazaquin (II-21-1), fenpyroximat (II-21-2), pyrimidifen (II-21-3), pyritaben (II-21-4), tebufenpyrad (II-21-5) và tolfenpyrad (II-21-6); hoặc rotenon (Derris) (II-21-7).

(22) Chất chặn kênh natri phụ thuộc điện thế, ví dụ indoxacarb (II-22-1); hoặc metaflumizon (II-22-2).

(23) Chất ức chế axetyl-CoA carboxylaza ví dụ như, tetronic và dẫn xuất của axit tetramic, ví dụ spirodiclofen (II-23-1), spiromesifen (II-23-2) và spirotetramat (II-23-3).

(24) Chất ức chế vận chuyển phức hợp -IV electron ví dụ như,

phosphin, ví dụ alumin phosphua(II-24-1), canxi phosphua (II-24-2), phosphin (II-24-3) và kẽm phosphua (II-24-4); hoặc xyanua (II-24-5).

(25) Chất ức chế vận chuyển phức hợp-II electron ví dụ như, xyenopyrafen (II-25-1).

(28) Chất cảm ứng thụ thể ryanodin ví dụ như, diamit, ví dụ cloantraniliprol (II-28-1) và flubendiamit (II-28-2).

Các hợp chất có hoạt tính khác với cơ chế hoạt động chưa được biết đến ví dụ như, amidoflumet (II-29-1), azadirachtin (II-29-2), benclothiaz (II-29-3), benzoximat (II-29-4), bifenazat (II-29-5), bromopropylat (II-29-6), chinomethionat (II-29-7), cryolite (II-29-8), xyantraniliprol (Cyazypyr) (II-29-9), xyflumetofen (II-29-10), dicofol (II-29-11), diflovidazin (II-29-12), fluensulfon (II-29-13), flufenerim (II-29-14), flufiprol (II-29-15), fluopyram (II-29-16), fufenozit (II-29-17), imidaclothiz (II-29-18), iprodion (II-29-19), pyritaly (II-29-20), pyrifluquinazon (II-29-21) và iometan (II-29-22); các chế phẩm khác chứa *Bacillus firmus* (I-1582, BioNeem, Votivo) (II-29-23) và cả các hợp chất có hoạt tính đã biết sau đây:

3-bromo-N-{2-bromo-4-clo-6[(1-xyclopropyletyl)carbamoyletyl]phenyl}-1-(3-clopyridin-2-yl)-1H-pyrazol-5-carboxamit (II-29-24) (đã biết đến từ WO2005/077934), 4-{[(6bromopyrit-3-yl)metyl](2-floetyl)amino}furan-2(5H)-on (II-29-25) (đã biết đến từ WO2007/115644), 4-{[(6flopyrit-3-yl)metyl](2,2-difloetyl)amino}furan-2(5H)-on (II-29-26) (đã biết đến từ WO2007/115644), 4-{[(2-clo-1,3-thiazol-5-yl)metyl](2-floetyl)amino}furan-2(5H)-on (II-29-27) (đã biết đến từ WO2007/115644), 4-{[(6clopyrit-3-yl)metyl](2-floetyl)amino}furan-2(5H)-on (II-29-28) (đã biết đến từ WO2007/115644), 4-{[(6clopyrit-3-yl)metyl](2,2-difloetyl)amino}furan-2(5H)-on (II-29-29) (đã biết đến từ WO2007/115644), 4-{[(6clo-5-flopyrit-3-yl)metyl](metyl)amino}furan-2(5H)-on (II-29-30) (đã biết đến từ WO2007/115643), 4-{[(5,6diclopyrit-3-yl)metyl](2-floetyl)amino}furan-2(5H)-on (II-29-31) (đã biết đến từ WO2007/115646), 4-{[(6clo-5-flopyrit-3-yl)metyl](xyclopropyl)amino}furan-2(5H)-on (II-29-32) (đã biết đến từ WO2007/115643), 4-{[(6clopyrit-3-

yl)methyl](xyclopropyl)amino}furan-2(5H)-on (II-29-33) (đã biết đến từ EP-A-0 539 588), 4-{[(6clopyrit-3-yl)methyl](metyl)amino}furan-2(5H)-on (II-29-34) (đã biết đến từ EP-A-0 539 588), {[1-(6clopyridin-3-yl)ethyl](metyl)oxido- λ^4 -sulphanyliden}xyanamit (II-29-35) (đã biết đến từ WO2007/149134) và các chất đồng phân phi đối ảnh của chúng {[1(R)-1-(6clopyridin-3-yl)ethyl](metyl)oxido- λ^4 -sulphanyliden}xyanamit (A) (II-29-36) và {[1(S)-1-(6clopyridin-3-yl)ethyl](metyl)oxido- λ^4 -sulphanyliden}xyanamit (B) (II-29-37) (cũng đã biết đến từ WO2007/149134) và sulfoxaflor (II-29-38) (cũng đã biết đến từ WO2007/149134) và chất đồng phân phi đối ảnh của chúng [(R)-metyl(oxido){1(R)-1-[6(triflometyl)pyridin-3-yl]ethyl}- λ^4 -sulphanyliden]xyanamit (A1) (II-29-39) và [(S)-metyl(oxido){1(S)-1-[6(triflometyl)pyridin-3-yl]ethyl}- λ^4 -sulphanyliden]xyanamit (A2) (II-29-40), được chỉ rõ là nhóm chất đồng phân phi đối ảnh A (đã biết đến từ WO 2010/074747, WO 2010/074751), [(R)-metyl(oxido){1(S)-1-[6(triflometyl)pyridin-3-yl]ethyl}- λ^4 -sulphanyliden]xyanamit (B1) (II-29-41) và [(S)-metyl(oxido){1(R)-1-[6(triflometyl)pyridin-3-yl]ethyl}- λ^4 -sulphanyliden]xyanamit (B2) (II-29-42), được chỉ rõ là nhóm chất đồng phân phi đối ảnh B (cũng đã biết đến từ WO 2010/074747, WO 2010/074751) và 11-(4-clo-2,6dimetylphenyl)-12-hydroxy-1,4-dioxa-9-azadispiro[4.2.4.2]tetradec-11-en-10-on (II-29-43) (đã biết đến từ WO2006/089633), 3-(4'-flo-2,4-dimetylbi phenyl-3-yl)-4-hydroxy-8-oxa-1-azaspiro[4.5]dec-3-en-2-on (II-29-44) (đã biết đến từ WO2008/067911), 1-{2-flo-4-metyl-5-[(2,2,2-trifloetyl)sulphinyl]phenyl}-3-(triflometyl)-1H-1,2,4-triazol-5-amin (II-29-45) (đã biết đến từ WO2006/043635), [(3S,4aR,12R,12aS,12bS)-3-[(xyclopropylcarbonyl)oxy]-6,12-dihydroxy-4,12b-dimetyl-11-oxo-9-(pyridin-3-yl)-1,3,4,4a,5,6,6a,12,12a,12b-decahydro-2H,11H-benzo[f]pyrano[4,3-b]chromen-4-yl]metyl xyclopropanecarboxylat (II-29-46) (đã biết đến từ WO2008/066153), 2-xyano-3-(diflometoxy)-N,N-dimetylbenzensulphonamit (II-29-47) (đã biết đến từ WO2006/056433), 2-xyano-3-(diflometoxy)-N-metylbenzensulphonamit (II-29-48) (đã biết đến từ WO2006/100288), 2-xyano-3-(diflometoxy)-N-etylbenzensulphonamit (II-29-49) (đã biết đến từ WO2005/035486), 4-(diflometoxy)-N-etyl-N-metyl-1,2-benzothiazol-3-amin 1,1-dioxit (II-29-50) (đã biết đến từ WO2007/057407), N-[1-(2,3-dimetylphenyl)-2-(3,5-dimetylphenyl)ethyl]-4,5-dihydro-1,3-thiazol-2-amin (II-29-51) (đã biết đến từ WO2008/104503), {1'-[(2E)-3-(4-clophenyl)prop-2-en-1-yl]-5-

flospiro[indol-3,4'-piperidin]-1(2H)-yl}(2-clopyridin-4-yl)metanon (II-29-52) (đã biết đến từ WO2003/106457), 3-(2,5-dimetylphenyl)-4-hydroxy-8-metoxi-1,8-diazaspiro[4.5]dec-3-en-2-on (II-29-53) (đã biết đến từ WO2009/049851), 3-(2,5-dimetylphenyl)-8-metoxi-2-oxo-1,8-diazaspiro[4.5]dec-3-en-4-yl etyl carbonat (II-29-54) (đã biết đến từ WO2009/049851), 4-(but-2-yn-1-yloxy)-6(3,5-dimetylpiiperidin-1-yl)-5-flopyrimidin (II-29-55) (đã biết đến từ WO2004/099160), (2,2,3,3,4,4,5,5-octaflopentyl)(3,3,3-triflopropyl)malononitril (II-29-56) (đã biết đến từ WO2005/063094), (2,2,3,3,4,4,5,5-octaflopentyl)(3,3,4,4,4-pentaflorbutyl)malononitril (II-29-57) (đã biết đến từ WO2005/063094), 8-[2-(xyclopropylmetoxi)-4-(triflometyl)phenoxy]-3-[6(triflometyl)pyritazin-3-yl]-3-azabixyclo[3.2.1]octan (II-29-58) (đã biết đến từ WO2007/040280), 2-etyl-7-metoxi-3-metyl-6[(2,2,3,3-tetraflo-2,3-dihydro-1,4-benzodioxin-6yl)oxy]quinolin-4-yl metylcarbonat (II-29-59) (đã biết đến từ JP2008/110953), 2-etyl-7-metoxi-3-metyl-6[(2,2,3,3-tetraflo-2,3-dihydro-1,4-benzodioxin-6yl)oxy]quinolin-4-yl axetat (II-29-60) (đã biết đến từ JP2008/110953), PF1364 (Số đăng ký CAS 120477660-2) (II-29-61) (đã biết đến từ JP2010/018586), 5-[5-(3,5-diclophenyl)-5-(triflometyl)-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl]-2-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)benzonitril (II-29-62) (đã biết đến từ WO2007/075459), 5-[5-(2-clopyridin-4-yl)-5-(triflometyl)-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl]-2-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)benzonitril (II-29-63) (đã biết đến từ WO2007/075459), 4-[5-(3,5-diclophenyl)-5-(triflometyl)-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl]-2-metyl-N-{2-oxo-2-[(2,2,2-trifloetyl)amino]etyl}benzamid (II-29-64) (đã biết đến từ WO2005/085216), 4-{[(6clopyridin-3-yl)metyl](xyclopropyl)amino}-1,3-oxazol-2(5H)-on (II-29-65), 4-{[(6clopyridin-3-yl)metyl](2,2-difloetyl)amino}-1,3-oxazol-2(5H)-on (II-29-66), 4-{[(6clopyridin-3-yl)metyl](etyl)amino}-1,3-oxazol-2(5H)-on (II-29-67), 4-{[(6clopyridin-3-yl)metyl](metyl)amino}-1,3-oxazol-2(5H)-on (II-29-68) (tất cả đều đã biết đến từ WO2010/005692), NNI-0711 (II-29-69) (đã biết đến từ WO2002/096882), 1-axetyl-N-[4-(1,1,1,3,3,3-hexaflo-2-metoxipropan-2-yl)-3-isobutylphenyl]-N-isobutyryl-3,5-dimetyl-1H-pyrazol-4-carboxamid (II-29-70) (đã biết đến từ WO2002/096882), metyl 2-[2-({[3-bromo-1-(3-clopyridin-2-yl)-1H-pyrazol-5-yl]carbonyl}amino)-5-clo-3-metylbenzoyl]-2-metylhydrazinecarboxylat (II-29-71) (đã biết đến từ WO2005/085216), metyl 2-[2-({[3-bromo-1-(3-clopyridin-2-yl)-1H-pyrazol-5-yl]carbonyl}amino)-5-

xyano-3-metylbenzoyl]-2-etylhydrazinecarboxylat (II-29-72) (đã biết đến từ WO2005/085216), metyl 2-[2-({[3-bromo-1-(3-clopyridin-2-yl)-1H-pyrazol-5-yl]carbonyl}amino)-5-xyano-3-metylbenzoyl]-2-metylhydrazinecarboxylat (II-29-73) (đã biết đến từ WO2005/085216), metyl 2-[3,5-dibromo-2-({[3-bromo-1-(3-clopyridin-2-yl)-1H-pyrazol-5-yl]carbonyl}amino)benzoyl]-1,2-dietylhydrazinecarboxylat (II-29-74) (đã biết đến từ WO2005/085216), metyl 2-[3,5-dibromo-2-({[3-bromo-1-(3-clopyridin-2-yl)-1H-pyrazol-5-yl]carbonyl}amino)benzoyl]-2-etylhydrazinecarboxylat (II-29-75) (đã biết đến từ WO2005/085216), (5RS,7RS;5RS,7SR)-1-(6clo-3-pyritylmetyl)-1,2,3,5,6,7-hexahydro-7-metyl-8-nitro-5-propoxyimidazo[1,2-a]pyridin (II-29-76) (đã biết đến từ WO2007/101369), 2-{6[2-(5-flopyridin-3-yl)-1,3-thiazol-5-yl]pyridin-2-yl}pyrimidin (II-29-77) (đã biết đến từ WO2010/006713), 2-{6[2-(pyridin-3-yl)-1,3-thiazol-5-yl]pyridin-2-yl}pyrimidin (II-29-78) (đã biết đến từ WO2010/006713), 1-(3-clopyridin-2-yl)-N-[4-xyano-2-metyl-6(metylcarbamoil)phenyl]-3-{[5-(triflometyl)-1H-tetrazol-1-yl]metyl}-1H-pyrazol-5-carboxamit (II-29-79) (đã biết đến từ WO2010/069502), 1-(3-clopyridin-2-yl)-N-[4-xyano-2-metyl-6(metylcarbamoil)phenyl]-3-{[5-(triflometyl)-2H-tetrazol-2-yl]metyl}-1H-pyrazol-5-carboxamit (II-29-80) (đã biết đến từ WO2010/069502), N-[2-(tert-butylcarbamoil)-4-xyano-6metylphenyl]-1-(3-clopyridin-2-yl)-3-{[5-(triflometyl)-1H-tetrazol-1-yl]metyl}-1H-pyrazol-5-carboxamit (II-29-81) (đã biết đến từ WO2010/069502), N-[2-(tert-butylcarbamoil)-4-xyano-6metylphenyl]-1-(3-clopyridin-2-yl)-3-{[5-(triflometyl)-2H-tetrazol-2-yl]metyl}-1H-pyrazol-5-carboxamit (II-29-82) (đã biết đến từ WO2010/069502) và (1E)-N-[(6clopyridin-3-yl)metyl]-N'-xyano-N-(2,2-difloetyl)etanimidamit (II-29-83) (đã biết đến từ WO2008/009360).

Hợp chất có hoạt tính chống vi trùng:

(1) Chất ức chế sự tổng hợp sinh học ergosterol, ví dụ aldimorph, azaconazol, bitertanol, bromuconazol, xyproconazol, diclobutrazol, difenoconazol, diniconazol, diniconazol-M, dodemorph, dodemorph axetat, epoxiconazol, etaconazol, fenarimol, fenbuconazol, fenhexamid, fenpropidin, fenpropimorph, fluquinconazol, flurprimidol, flusilazol, flutriafol, furconazol, furconazol-cis, hexaconazol, imazalil, imazalil sulphat, imibenconazol, ipconazol, mv.v...onazol, myclobutanil, naftifin, nuarimol,

oxpoconazol, paclobutrazol, pefurazoat, penconazol, piperalin, procloaz, propiconazol, prothioconazol, pyributicarb, pyrifenox, quinconazol, simeconazol, spiroxamin, tebuconazol, terbinafin, tetraconazol, triadimefon, triadimenol, tridemorph, triflumizol, triforin, triticonazol, uniconazol, uniconazol-p, viniconazol, voriconazol, 1-(4-clophenyl)-2-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)xycloheptanol, metyl 1-(2,2-dimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-1-yl)-1H-imidazol-5-carboxylat, N'-{5-(diflometyl)-2-metyl-4-[3-(trimetylsilyl)propoxy]phenyl}-N-etyl-N-metylimidoformamit, N-etyl-N-metyl-N'-{2-metyl-5-(triflometyl)-4-[3-(trimetylsilyl)propoxy]phenyl}imidoformamit và O-[1-(4-metoxypheoxy)-3,3-dimetylbutan-2-yl] 1H-imidazol-1-carbothioat.

(2) Chất ức chế hô hấp (chất ức chế chuỗi hô hấp), ví dụ bixafen, boscalid, carboxin, diflumentorim, fenfuram, fluopyram, flutolanil, fluxapyroxad, furametpyr, furmexyclox, hỗn hợp isopyrazam của raxemat syn-epimeric 1RS,4SR,9RS và của raxemat kháng epimeric 1RS,4SR,9SR, isopyrazam (raxemat kháng epimeric), isopyrazam (chất đồng phân đối ảnh kháng epimeric 1R,4S,9S), isopyrazam (chất đồng phân đối ảnh kháng epimeric 1S,4R,9R), isopyrazam (raxemat syn-epimeric 1RS,4SR,9RS), isopyrazam (chất đồng phân đối ảnh syn-epimeric 1R,4S,9R), isopyrazam (chất đồng phân đối ảnh syn-epimeric 1S,4R,9S), mepronil, oxycarboxin, penflufen, penthiopyrad, sedaxan, thifluzamit, 1-metyl-N-[2-(1,1,2,2-tetrafloetoxy)phenyl]-3-(triflometyl)-1H-pyrazol-4-carboxamit, 3-(diflometyl)-1-metyl-N-[2-(1,1,2,2-tetrafloetoxy)phenyl]-1H-pyrazol-4-carboxamit, 3-(diflometyl)-N-[4-flo-2-(1,1,2,3,3,3-hexaflopropoxy)phenyl]-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit và N-[1-(2,4-diclophenyl)-1-metoxypentan-2-yl]-3-(diflometyl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit,

(3) Chất ức chế hô hấp (chất ức chế chuỗi hô hấp) tác động lên phức hợp III của chuỗi hô hấp, ví dụ ametoctradin, amisulbrom, azoxytrobin, xyazofamid, dimoxytrobin, enestroburin, famoxadon, fenamidon, fluoxastrobin, kresoxim-metyl, metominostrobin, orysastrobin, picoxystrobin, pyraclostrobin, pyrametostrobin, pyraoxystrobin, pyribencarb, trifloxytrobin, (2E)-2-(2-{[6(3-clo-2-metylphenoxy)-5-flopyrimidin-4-yl]oxy}phenyl)-2-(metoxyimino)-N-metyletanamit, (2E)-2-(metoxyimino)-N-metyl-2-(2-{[(1E)-1-[3-

(triflometyl)phenyl]etyliden}amino)oxy]metyl}phenyl)etanamit, (2E)-2-(metoxyimino)-N-metyl-2-{2-[(E)-({1-[3-(triflometyl)phenyl]etoxy}imino)metyl]phenyl}etanamit, (2E)-2-{2-[(E)-1-(3-{[(E)-1-flo-2-phenyletenyl]oxy}phenyl)etyliden]amino}oxy)metyl]phenyl}-2-(metoxyimino)-N-metyletanamit, (2E)-2-{2-[(E)-4-(2,6diclophenyl)but-3-en-2-yliden]amino}oxy)metyl]phenyl}-2-(metoxyimino)-N-metyletanamit, 2-clo-N-(1,1,3-trimetyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl)pyridin-3-carboxamit, 5-metoxi-2-metyl-4-(2-{[(E)-1-[3-(triflometyl)phenyl]etyliden}amino)oxy]metyl}phenyl)-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-on, metyl (2E)-2-{2-[(xyclopropyl[(4-metoxiphenyl)imino]metyl]sulphanyl)metyl]phenyl}-3-metoxiprop-2-enoat, N-(3-etyl-3,5,5-trimetylxclohexyl)-3-(formylamino)-2-hydroxybenzamit, 2-{2-[(2,5-dimetylphenoxy)metyl]phenyl}-2-metoxi-N-metylaxetamit và (2R)-2-{2-[(2,5-dimetylphenoxy)metyl]phenyl}-2-metoxi-N-metylaxetamit.

(4) Chất ức chế nguyên phân và sự phân chia tế bào, ví dụ benomyl, carbendazim, clofenazol, diethofencarb, ethaboxam, fluopicolit, fuberidazol, penxycuron, thiabendazol, thiophanate-metyl, thiophanat, zoxamit, 5-clo-7-(4-metyl)piperidin-1-yl)-6(2,4,6triflophenyl)[1,2,4]triazolo[1,5-a]pyrimidin và 3-clo-5-(6clopriđin-3-yl)-6metyl-4-(2,4,6triflophenyl)pyritazin.

(5) Hợp chất có hoạt tính ở nhiều vị trí, ví dụ hỗn hợp Bordeaux, captafol, captan, clothalonil, chế phẩm đồng như đồng hydroxit, đồng naphthenat, đồng oxit, đồng oxycloit, đồng sulphat, diclofluanid, dithianon, dodin, bazơ giải phóng dodin, ferbam, flofolpet, folpet, guazatin, guazatin axetat, iminocadin, iminocadin albesilat, iminocadin triaxetat, mancopper, mancozeb, maneb, metiram, kẽm metiram, oxinđồng, propamidin, propineb, lưu huỳnh và chế phẩm lưu huỳnh, ví dụ canxi polysulphua, thiram, tolylfluanit, zineb và ziram.

(6) Chất cảm ứng tính kháng, ví dụ acibenzolar-S-metyl, isotianil, probenazol và tiadinil.

(7) Chất ức chế sinh tổng hợp axit amin và protein, ví dụ vàoprim, blasticidin-S, xyprodinil, kasugamycin, kasugamycin hydroclorua hydrat, mepanipyrim và pyrimetanil,

(8) Chất ức chế sản sinh ATP, ví dụ fentin axetat, fentin clorua, fentin hydroxit và silthiofam.

(9) Chất ức chế tổng hợp thành tế bào, ví dụ benthiavalicarb, dimethomorph, flumorph, iprovalicarb, mandipropamid, polyoxin, polyoxorim, validamycin A và valifenalat.

(10) Chất ức chế tổng hợp lipid và màng, ví dụ biphenyl, cloneb, dicloran, edifenphos, etridiazol, iodocarb, iprobenfos, isoprothiolan, propamocarb, propamocarb hydroclorua, prothiocarb, pyrazophos, quintozen, tecnazen và tolclofos-metyl.

(11) Chất ức chế sinh tổng hợp melanin, ví dụ carpropamid, diclocymet, fenoxanil, phthalide, pyroquilon và tricyclazol.

(12) Chất ức chế sinh tổng hợp axit nucleic, ví dụ benalaxyl, benalaxyl-M (kiralaxyl), bupirimat, clozylacon, dimethirimol, ethirimol, furalaxyl, hymexazol, metalaxyl, metalaxyl-M (mefenoxam), ofurace, oxadixyl, axit oxolinic,

(13) Chất ức chế truyền tín hiệu, ví dụ clozolinat, fenpiclonil, fludioxonil, iprodion, procymidon, quinoxifen và vinclozolin.

(14) Chất khử liên kết, ví dụ binapacryl, dinocap, ferimzon, fluazinam và meptyldinocap.

(15) Các hợp chất khác, ví dụ benthiazol, bethoxazin, capsimycin, carvon, chinomethionat, chlazafenon, cufraneb, xyflufenamid, xymoxanil, xyprosulfamid, dazomet, debacarb, diclophen, diclomezine, difenzoquat, difenzoquat metylsulphat, diphenylamin, ecomat, fenpyrazamin, flumetover, flomua, flusulfamid, flutianil, fosetyl-nhôm, fosetyl-canxi, fosetyl-natri, hexaclobenzen, irumamycin, methasulfocarb, metyl isothioxyanat, metrafenon, mildiomyxin, natamycin, niken dimetyldithiocarbamat, nitrothal-isopropyl, octhilinon, oxamocarb, oxyfenthiin,

pentaclophenol và muối của chúng, phenothrin, axit phosphoric và muối của chúng, propamocarb-fosetylát, propanosine-natri, proquinazid, pyrolnitrit, tebufloquin, tecloftalam, tolifenid, triazoxit, trichlamit, zarilamit, 1-(4-{4-[(5R)-5-(2,6diflophenyl)-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl]-1,3-thiazol-2-yl}piperidin-1-yl)-2-[5-metyl-3-(triflometyl)-1H-pyrazol-1-yl]etanon, 1-(4-{4-[(5S)-5-(2,6diflophenyl)-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl]-1,3-thiazol-2-yl}piperidin-1-yl)-2-[5-metyl-3-(triflometyl)-1H-pyrazol-1-yl]etanon, 1-(4-{4-[5-(2,6diflophenyl)-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl]-1,3-thiazol-2-yl}piperidin-1-yl)-2-[5-metyl-3-(triflometyl)-1H-pyrazol-1-yl]etanon, 1-(4-metoxiphenoxy)-3,3-dimetylbutan-2-yl 1H-imidazol-1-carboxylat, 2,3,5,6-tetraclo-4-(metylsulphonyl)pyridin, 2,3-dibutyl-6clothieno[2,3-d]pyrimidin-4(3H)-on, 2-[5-metyl-3-(triflometyl)-1H-pyrazol-1-yl]-1-(4-{4-[(5R)-5-phenyl-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl]-1,3-thiazol-2-yl}piperidin-1-yl)etanon, 2-[5-metyl-3-(triflometyl)-1H-pyrazol-1-yl]-1-(4-{4-[(5S)-5-phenyl-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl]-1,3-thiazol-2-yl}piperidin-1-yl)etanon, 2-[5-metyl-3-(triflometyl)-1H-pyrazol-1-yl]-1-{4-[4-(5-phenyl-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl)-1,3-thiazol-2-yl]piperidin-1-yl}etanon, 2-butoxy-6iodo-3-propyl-4H-chromen-4-on, 2-clo-5-[2-clo-1-(2,6diflo-4-metoxiphenyl)-4-metyl-1H-imidazol-5-yl]pyridin, 2-phenylphenol và muối của chúng, 3,4,5-triclopyridin-2,6dicarbonitril, 3-[5-(4-clophenyl)-2,3-dimetyl-1,2-oxazolidin-3-yl]pyridin, 3-clo-5-(4-clophenyl)-4-(2,6diflophenyl)-6metylpyritazin, 4-(4-clophenyl)-5-(2,6diflophenyl)-3,6dimetylpyritazin, 5-amino-1,3,4-thiadiazol-2-thiol, 5-clo-N'-phenyl-N'-(prop-2-yn-1-yl)thiophen-2-sulphonohydrazit, 5-metyl-6octyl[1,2,4]triazolo[1,5-a]pyrimidin-7-amin, etyl (2Z)-3-amino-2-xyano-3-phenylprop-2-enoat, N-(4-clobenzyl)-3-[3-metoxi-4-(prop-2-yn-1-yloxy)phenyl]propanamit, N-[(4-clophenyl)(xyano)metyl]-3-[3-metoxi-4-(prop-2-yn-1-yloxy)phenyl]propanamit, N-[(5-bromo-3-clopyridin-2-yl)metyl]-2,4-diclopyridin-3-carboxamit, N-[1-(5-bromo-3-clopyridin-2-yl)etyl]-2,4-diclopyridin-3-carboxamit, N-[1-(5-bromo-3-clopyridin-2-yl)etyl]-2-flo-4-iodopyridin-3-carboxamit, N-{(E)-[(xyclopropylmetoxy)imino][6(diflometoxy)-2,3-diflophenyl]metyl}-2-phenylaxetamit, N-{(Z)-[(xyclopropylmetoxy)imino][6(diflometoxy)-2,3-diflophenyl]metyl}-2-phenylaxetamit, N-metyl-2-(1-{[5-metyl-3-(triflometyl)-1H-pyrazol-1-yl]axetyl}piperidin-4-yl)-N-(1,2,3,4-tetrahydronaphthalen-1-yl)-1,3-thiazol-

4-carboxamit, N-metyl-2-(1-{[5-metyl-3-(triflometyl)-1H-pyrazol-1-yl]axetyl}piperidin-4-yl)-N-[(1R)-1,2,3,4-tetrahydronaphthalen-1-yl]-1,3-thiazol-4-carboxamit, N-metyl-2-(1-{[5-metyl-3-(triflometyl)-1H-pyrazol-1-yl]axetyl}piperidin-4-yl)-N-[(1S)-1,2,3,4-tetrahydronaphthalen-1-yl]-1,3-thiazol-4-carboxamit, pentyl {6[(1-metyl-1H-tetrazol-5-yl)(phenyl)metylidene]amino}oxy)metyl]pyridin-2-yl}carbamat, axit phenazin-1-carboxylic, quinolin-8-ol và quinolin-8-ol sulphat (2:1),

Tất cả các thành phần kết hợp vào đã đề cập đến trong các mục từ (1) đến (15) có thể, nếu chúng có khả năng trên cơ sở nhóm chức của chúng, tùy ý tạo thành muối với bazơ hoặc axit phù hợp.

(16) Các hợp chất khác, ví dụ 1-metyl-3-(triflometyl)-N-[2'-(triflometyl)biphenyl-2-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamit, N-(4'-clobiphenyl-2-yl)-3-(diflometyl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, N-(2',4'-diclobiphenyl-2-yl)-3-(diflometyl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, 3-(diflometyl)-1-metyl-N-[4'-(triflometyl)biphenyl-2-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamit, N-(2',5'-diflobiphenyl-2-yl)-1-metyl-3-(triflometyl)-1H-pyrazol-4-carboxamit, 3-(diflometyl)-1-metyl-N-[4'-(prop-1-yn-1-yl)biphenyl-2-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamit, 5-flo-1,3-dimetyl-N-[4'-(prop-1-yn-1-yl)biphenyl-2-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamit, 2-clo-N-[4'-(prop-1-yn-1-yl)biphenyl-2-yl]pyridin-3-carboxamit, 3-(diflometyl)-N-[4'-(3,3-dimetylbut-1-yn-1-yl)biphenyl-2-yl]-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, N-[4'-(3,3-dimetylbut-1-yn-1-yl)biphenyl-2-yl]-5-flo-1,3-dimetyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, 3-(diflometyl)-N-(4'-etynylbiphenyl-2-yl)-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, N-(4'-etynylbiphenyl-2-yl)-5-flo-1,3-dimetyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, 2-clo-N-(4'-etynylbiphenyl-2-yl)pyridin-3-carboxamit, 2-clo-N-[4'-(3,3-dimetylbut-1-yn-1-yl)biphenyl-2-yl]pyridin-3-carboxamit, 4-(diflometyl)-2-metyl-N-[4'-(triflometyl)biphenyl-2-yl]-1,3-thiazol-5-carboxamit, 5-flo-N-[4'-(3-hydroxy-3-metylbut-1-yn-1-yl)biphenyl-2-yl]-1,3-dimetyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, 2-clo-N-[4'-(3-hydroxy-3-metylbut-1-yn-1-yl)biphenyl-2-yl]pyridin-3-carboxamit, 3-(diflometyl)-N-[4'-(3-metoxi-3-metylbut-1-yn-1-yl)biphenyl-2-yl]-1-metyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, 5-flo-N-[4'-(3-metoxi-3-metylbut-1-yn-1-yl)biphenyl-2-yl]-1,3-dimetyl-1H-pyrazol-4-carboxamit, 2-clo-N-[4'-(3-metoxi-3-metylbut-1-yn-1-yl)biphenyl-2-yl]pyridin-3-carboxamit, (5-bromo-2-metoxi-4-

methylpyridin-3-yl)(2,3,4-trimethoxy-6methylphenyl)metanon và N-[2-(4-{[3-(4-clophenyl)prop-2-yn-1-yl]oxy}-3-methoxyphenyl)ethyl]-N2-(methylsulphonyl)valinamit.

Các hợp chất có hoạt tính được xác định ở đây bằng tên chung của chúng đã được biết đến và được mô tả, ví dụ, trong sổ tay thuốc trừ sâu (“The Pesticide Manual” 14th Ed., British Crop Protection Council 2006) hoặc có thể được tìm thấy ở liên mạng (ví dụ, <http://www.alanwood.net/pesticides>).

Tất cả các thành phần kết hợp vào đã đề cập đến trong các mục từ (1) đến (16) có thể, nếu chúng có khả năng trên cơ sở nhóm chức của chúng, tùy ý tạo thành muối với bazơ hoặc axit phù hợp.

Cuối cùng, đã phát hiện ra rằng các hợp chất mới có công thức (I), trong khi được thực vật dung nạp tốt, có độ độc hằng nhiệt máu nóng thuận lợi và khả năng tương hợp với môi trường tốt, lại phù hợp cụ thể để phòng trừ các loài động vật gây hại, cụ thể là động vật chân đốt, sâu bọ, lớp nhện, giun sán, giun tròn và động vật thân mềm, mà hay gặp trong nông nghiệp, trồng rừng, trong bảo vệ các sản phẩm và vật liệu lưu giữ và trong lĩnh vực vệ sinh, hoặc trong lĩnh vực sức khỏe động vật. Hợp chất theo sáng chế cũng có thể được sử dụng trong lĩnh vực sức khỏe động vật, ví dụ để phòng trừ các loài ngoại ký sinh ngoài và/hoặc nội ký sinh.

Hợp chất theo sáng chế có thể được sử dụng làm chất phòng trừ các loài động vật gây hại, tốt hơn là được sử dụng làm chất bảo vệ mùa màng. Chúng có hiệu quả chống lại các loài nhạy cảm và có tính kháng thông thường và chống lại tất cả hoặc một số giai đoạn phát triển.

Hợp chất theo sáng chế có thể được chuyển thành các chế phẩm thông thường đã biết. Thông thường, các chế phẩm này chứa hợp chất hoạt tính với lượng nằm trong khoảng từ 0,01 đến 98% trọng lượng, tốt hơn từ 0,5 đến 90% trọng lượng.

Hợp chất theo sáng chế có thể có mặt trong các chế phẩm có bán trên thị trường và trong các dạng sử dụng, được tạo ra từ các chế phẩm này, như là hỗn hợp với các hợp chất hoạt tính hoặc chất hiệp đồng khác. Chất hiệp đồng là các hợp chất làm tăng tác dụng của các hợp chất hoạt tính, mà không cần hoạt tính của chính chất hiệp đồng.

Hàm lượng hợp chất hoạt tính trong các dạng sử dụng được điều chế từ các chế phẩm có bán trên thị trường có thể thay đổi trong phạm vi rộng. Nồng độ của hợp chất hoạt tính trong các dạng sử dụng có thể nằm trong khoảng từ 0,00000001 đến 95% khối lượng của hợp chất hoạt tính, tốt hơn nằm trong khoảng từ 0,00001 đến 1% khối lượng.

Các hợp chất này được sử dụng theo cách thông thường phù hợp cho các dạng sử dụng.

Sáng chế có thể được sử dụng để xử lý toàn bộ cây và phần của cây. Cây được hiểu ở đây có nghĩa là toàn bộ cây và quần thể cây, như cây đại mong muốn và không mong muốn hoặc cây trồng (bao gồm cây có trong tự nhiên). Cây trồng có thể là cây có thể thu được bằng phương pháp gây giống thông thường và phương pháp tối ưu hóa hoặc bằng phương pháp công nghệ sinh học và kỹ thuật di truyền hoặc bằng các cách kết hợp các phương pháp này, bao gồm cây chuyển gen và bao gồm cây trồng có thể được bảo vệ hoặc không thể được bảo vệ bởi quyền của người gây giống cây. Các phần của cây được hiểu theo nghĩa là tất cả các phần ở trên mặt đất và các phần ở dưới mặt đất và các bộ phận của cây như cành non, lá, hoa và rễ, ví dụ lá, lá kim, thân cây, cuống hoa, hoa, thân quả, quả và hạt giống, và rễ, thân củ và thân rễ. Các phần của cây còn bao gồm cả vật liệu thu hoạch, và vật liệu gây giống sinh sản và dinh dưỡng, ví dụ cành giâm, thân củ, thân rễ, cành ghép và hạt.

Việc xử lý cây và các phần của cây bằng hợp chất hoạt tính theo sáng chế có hiệu quả trực tiếp hoặc bằng cách để hợp chất tác dụng lên xung quanh, môi trường sống hoặc nơi bảo quản của chúng bằng các phương pháp xử lý thông thường, ví dụ bằng cách ngâm, phun mù, làm bay hơi, phun sương, tung rắc, phủ lên, phun và trong trường hợp nguyên liệu nhân giống, cụ thể là các hạt, còn áp dụng một hoặc nhiều lớp phủ.

Như đã đề cập ở trên, có thể xử lý toàn bộ cây và các phần của chúng theo sáng chế. Theo phương án ưu tiên, các loại cây đại và cây trồng hoặc cây thu được bằng các phương pháp gây giống sinh học thông thường, như lai hoặc dung hợp nguyên sinh chất, và các phần của nó, được xử lý. Theo phương án ưu tiên khác, cây chuyển gen và

cây trồng thu được bằng các phương pháp kỹ thuật di truyền, nếu phù hợp kết hợp với các phương pháp thông thường (sinh vật biến đổi gen) và các phần của nó được xử lý. Thuật ngữ “phần”, “phần của cây” và “phần cây” đã được giải thích ở trên.

Tốt hơn, cây trồng mà mỗi chúng đều có bán trên thị trường hoặc để sử dụng đều được xử lý theo sáng chế. Cây trồng được hiểu nghĩa là cây có các đặc tính mới (“tính trạng”) mà thu được bằng cách gây giống thông thường, bằng kỹ thuật đột biến hoặc kỹ thuật tái tổ hợp ADN. Các cây này có thể là cây trồng, cây kiểu sinh học và cây kiểu gen.

Trong lĩnh vực sức khỏe động vật, nghĩa là, trong lĩnh vực thuốc thú y, hợp chất hoạt tính theo sáng chế có hoạt tính chống lại ký sinh trùng trên động vật, cụ thể là nội ký sinh và ngoại ký sinh. Thuật ngữ “nội ký sinh” bao gồm cụ thể là giun sán, như sán dây, giun tròn hoặc sán lá, và động vật nguyên sinh, ví dụ, koozidia. Ngoại ký sinh là điển hình và tốt hơn là là động vật chân đốt, cụ thể là côn trùng như ruồi (đốt và liếm), ấu trùng ruồi ký sinh, chấy, rận tóc, rận chim, bọ chét và các loại tương tự, hoặc ve bét, ví dụ như bọ ve, ví dụ như bọ ve cứng hoặc bọ ve mềm, hoặc bọ ve, chẳng hạn như ve vẩy, ve mùa gặt, ve chim và bọ tương tự.

Cũng biết được rằng hợp chất theo sáng chế cũng có tác dụng diệt côn trùng mạnh chống lại các loài côn trùng phá hủy vật liệu công nghiệp. Vật liệu công nghiệp trong ngữ cảnh này được hiểu theo nghĩa là vật liệu vô sinh, như, ưu tiên là chất dẻo, chất kết dính, hồ, giấy và bìa các tông, da, gỗ, sản phẩm gia công từ gỗ và chế phẩm phủ ngoài.

Hơn nữa, tổ hợp theo sáng chế có thể được sử dụng làm chế phẩm chống bần, được sử dụng riêng biệt hoặc kết hợp với các hợp chất hoạt tính khác.

Các hợp chất hoạt tính này cũng phù hợp để phòng trừ các loài động vật gây hại trong nhà, trong lĩnh vực vệ sinh và trong bảo vệ sản phẩm lưu giữ, cụ thể là các loài gây hại, lớp nhện và ve bét, mà tìm thấy trong không gian kín, ví dụ nhà ở, hội trường nhà máy, văn phòng, khoang xe và không gian tương tự. Chúng có thể được sử dụng riêng biệt hoặc kết hợp với các hợp chất hoạt tính và các chất hỗ trợ khác trong các sản

phẩm thuốc diệt côn trùng gia đình. Chúng có hiệu quả chống lại các loài nhạy cảm và có tính kháng và chống lại tất cả các giai đoạn phát triển.

Cây được hiểu nghĩa là tất cả các loài cây, cây trồng và quần thể cây như cây đại mong muốn và không mong muốn hoặc cây trồng. Cây trồng được xử lý theo sáng chế là cây có trong tự nhiên hoặc là cây thu được bằng cách nhân giống thông thường và bằng các phương pháp tối ưu hóa hoặc bằng phương pháp công nghệ sinh học và tái tổ hợp hoặc bằng cách kết hợp các phương pháp đã đề cập ở trên. Tất nhiên thuật ngữ cây trồng cũng bao gồm cả cây chuyển gen.

Cây trồng được hiểu nghĩa là cây có các đặc tính mới (tính trạng) và thu được bằng cách gây giống thông thường, bằng kỹ thuật đột biến hoặc kỹ thuật tái tổ hợp ADN hoặc sự kết hợp các kỹ thuật này. Chúng có thể là cây trồng, giống cây, kiểu gen hoặc kiểu sinh học.

Phần của cây được hiểu theo nghĩa là tất cả các phần và cơ quan của cây ở trên mặt đất và dưới mặt đất, như cành cây, lá, hoa và rễ cây, ví dụ có thể được kể đến là lá, lá kim, thân và cuống hoa, thân cây, quả, quả và hạt, rễ, thân củ và thân rễ. Thuật ngữ phần của cây còn bao gồm cả vật liệu thu hoạch, và vật liệu gây giống sinh sản và dinh dưỡng, ví dụ cành giâm, thân củ, thân rễ, cành ghép và hạt.

Trong phương án tốt hơn, các loại cây có trong tự nhiên và cây trồng hoặc những cây thu được bằng các phương pháp gây giống thông thường và phương pháp tối ưu hóa (ví dụ, lai hoặc dung hợp tế bào chất) và cả các phần của nó đều được xử lý.

Trong phương án khác theo sáng chế, cây chuyển gen thu được bằng phương pháp kỹ thuật di truyền, nếu phù hợp kết hợp với các phương pháp thông thường, và các phần của nó đều được xử lý.

Phương pháp xử lý theo sáng chế ưu tiên được sử dụng cho các sinh vật bị biến đổi di truyền, ví dụ cây hoặc phần của cây.

Cây biến đổi di truyền, còn được gọi là cây chuyển gen, là cây trong đó một gen khác được hợp nhất ổn định vào bộ gen.

Thuật ngữ “gen khác” về bản chất là gen mà được đưa vào từ bên ngoài của cây và khi được đưa vào trong nhân, lục lạp hoặc ty thể sẽ cho ra cây trồng biến đổi gen mới hoặc cho ra vụ mùa năng suất hơn hoặc cho ra những đặc tính khác nhờ sự biểu hiện của protein hoặc polypeptit mong muốn hoặc nhờ việc làm giảm sự điều hòa hoặc làm câm (các) gen khác mà đã có mặt ở trong cây (ví dụ như kỹ thuật ngược mã, kỹ thuật đồng ức chế hoặc kỹ thuật can thiệp (RNA interference – RNAi). Gen khác mà được định vị trong hệ gen còn được gọi là gen chuyển. Gen chuyển được xác định bởi vị trí cụ thể của nó trong hệ gen của cây được gọi là hiện tượng biến nạp hoặc chuyển gen.

Phụ thuộc vào loại cây hoặc cây trồng, vị trí và điều kiện sinh trưởng của chúng (đất trồng, khí hậu, giai đoạn sinh dưỡng, chế độ nuôi dưỡng), việc xử lý theo sáng chế cũng có thể cho ra hiệu quả hoạt tính quá cao (“hiệp đồng”). Vì vậy, ví dụ việc giảm tỉ lệ áp dụng và/hoặc mở rộng phổ hoạt động và/hoặc tăng hoạt tính của hợp chất hoạt tính và chế phẩm mà có thể được sử dụng theo sáng chế, cây phát triển tốt hơn, tăng sức chịu đựng với nhiệt độ cao hay thấp, tăng sức chịu đựng với điều kiện hạn hán hay ngập lụt hay đất ngập mặn, hoa nở nhiều hơn, dễ dàng thu hoạch, quả nhanh chín, sản lượng thu hoạch cao hơn, quả to hơn, cây cao hơn, lá xanh hơn, hoa nở sớm hơn, chất lượng cao hơn và/hoặc sản phẩm thu hoạch được có giá trị dinh dưỡng cao hơn, hàm lượng đường trong quả cao hơn, sản phẩm lưu trữ có sự ổn định hơn và/hoặc các sản phẩm đã được thu hoạch tốt hơn, đều vượt quá hiệu quả mà chúng ta thực sự mong muốn.

Ở những tỉ lệ áp dụng cụ thể, các các tổ hợp của hợp chất hoạt tính theo sáng chế có thể cũng có những tác động mạnh vào cây trồng. Do đó, chúng cũng phù hợp để huy động hệ thống bảo vệ cho cây chống lại sự tấn công của nấm và/hoặc vi sinh vật và/hoặc virus hại cây không mong muốn. Điều này có thể, nếu thích hợp, là một trong nhiều nguyên nhân làm tăng hoạt tính của các tổ hợp theo sáng chế, ví dụ chống lại nấm. Chất tăng cường cho cây (gây ra sự chống chịu) được hiểu với nghĩa, trong ngữ cảnh này, là chất hoặc tổ hợp của các chất mà có khả năng kích thích hệ thống bảo vệ của cây theo cách mà, khi sau đó cây bị nhiễm nấm và/hoặc vi sinh vật và/hoặc virus gây bệnh ở cây không mong muốn, các cây đã xử lý thể hiện một mức độ chống chịu

đáng kể với nấm và/hoặc vi sinh vật và/hoặc virus gây bệnh ở cây không mong muốn. Trong trường hợp này, nấm và/hoặc vi sinh vật và/hoặc virus gây bệnh ở cây không mong muốn được hiểu theo nghĩa là các loại nấm, vi khuẩn và virus gây bệnh ở cây. Do đó, các chất theo sáng chế có thể được sử dụng để bảo vệ cây chống lại sự tấn công của mầm bệnh đã đề cập ở trên trong khoảng thời gian cụ thể sau khi xử lý. Khoảng thời gian bảo vệ có hiệu quả thường kéo dài từ 1 đến 10 ngày, tốt hơn từ 1 đến 7 ngày, sau khi xử lý cây bằng hợp chất hoạt tính.

Cây mà được ưu tiên xử lý theo sáng chế hơn có sức đề kháng chống lại một hay nhiều yếu tố áp lực vi sinh vật, ví dụ cây đã nói đến có sự bảo vệ chống lại các loài vi khuẩn và các loài gây bệnh ở động vật tốt hơn, như giun tròn, côn trùng, bét, nấm gây bệnh ở cây, vi khuẩn, virus và/hoặc các dạng virus.

Ngoài cây và cây trồng đề cập ở trên, cũng có thể xử lý theo sáng chế các cây kháng lại với một hoặc nhiều yếu tố áp lực vô sinh.

Các điều kiện áp lực vô sinh có thể bao gồm, ví dụ, hạn hán, phơi nhiễm với nhiệt độ lạnh, phơi nhiễm với nhiệt, áp lực thẩm thấu, ngập nước, độ mặn của đất tăng, phơi nhiễm với khoáng tăng lên, phơi nhiễm với ozon, phơi nhiễm với ánh sáng mạnh, nguồn dinh dưỡng nitro có sẵn bị hạn chế, nguồn chất dinh dưỡng phospho có sẵn bị hạn chế hoặc tránh bóng tối.

Cây và cây trồng mà cũng có thể được xử lý theo sáng chế là các cây đặc trưng bởi năng suất được nâng cao. Năng suất của các cây đã nói được nâng cao có thể là kết quả của, ví dụ, chức năng sinh lý, sự sinh trưởng và phát triển được nâng cao, như hiệu quả sử dụng nước, hiệu quả giữ nước, việc sử dụng nitơ được cải thiện, sự đồng hóa cacbon được nâng cao, sự quang hợp được nâng cao, hiệu quả mọc mầm được nâng cao và sự chín được thúc đẩy. Ngoài ra năng suất cũng có thể bị tác động bởi cấu trúc cây được nâng cao (dưới các điều kiện áp lực và không áp lực), bao gồm ra hoa sớm, phòng trừ sự ra hoa để tạo ra hạt lai, sức sống của cây giống con, kích thước cây, số lượng và khoảng cách gióng, sự phát triển rễ, kích cỡ hạt, kích cỡ quả, kích cỡ hạt trong quả, số lượng quả hoặc bông, số lượng hạt trên một quả hoặc bông, khối lượng hạt, sự đầy hạt được nâng cao, sự phân tán hạt giảm, sự nứt vỏ giảm và chống chịu lại

sự cong gập của thân cây. Các đặc điểm khác về năng suất bao gồm thành phần của hạt, như hàm lượng carbohydrat, hàm lượng protein, hàm lượng và thành phần dầu, giá trị dinh dưỡng, sự giảm các hợp chất phi dinh dưỡng, khả năng xử lý được nâng cao và sự ổn định khi lưu giữ tốt hơn.

Những cây có thể được xử lý theo sáng chế là những cây lai biểu hiện các đặc tính ưu thế giống lai hoặc các đặc tính trội của cây lai, dẫn đến năng suất, sức sống, sức khỏe và sức đề kháng với các thiệt hại do sinh học hoặc không phải do sinh học cao hơn. Các cây này điển hình được tạo ra bằng cách lai giữa dòng bố mẹ bất dục đực lai cùng dòng (mẹ) với dòng bố mẹ bất dục cái lai cùng dòng (bố) khác. Hạt lai thường được thu hoạch từ các cây bất dục đực và bán cho những người trồng cây. Các cây bất dục cái (như ngô) đôi khi được tạo ra nhờ loại bỏ râu ngô tạo ra thụ phấn, nghĩa là chuyển dời cơ học các cơ quan sinh dục đực (hoặc hoa đực) nhưng, thường hơn, sự bất dục đực do sự quyết định của gen trong hệ gen của cây. Trong trường hợp đó, và đặc biệt khi hạt giống là sản phẩm mong muốn được thu hoạch từ các cây lai, nó thường có ích để đảm bảo sự sinh sản mạnh trong các cây lai, mà có chứa các yếu tố quyết định di truyền là nguyên nhân gây ra sự bất dục đực, được hồi phục hoàn toàn. Điều này có thể được thực hiện bằng cách đảm bảo rằng các bố mẹ tốt có những gen bảo toàn sự sinh sản phù hợp mà có khả năng bảo toàn sự sinh sản mạnh trong cây lai chứa các yếu tố quyết định di truyền chịu trách nhiệm cho sự bất dục đực. Các yếu tố quyết định di truyền cho sự bất dục đực có thể nằm trong tế bào chất. Ví dụ về sự bất dục đực trong tế bào chất (cytoplasmic male sterility-CMS) là ví dụ đã mô tả trong các loài Brassica. Tuy nhiên, các yếu tố quyết định di truyền đối với sự bất dục đực có thể cũng nằm trong bộ di truyền của nhân. Các cây bất dục đực cũng có thể có được nhờ các phương pháp công nghệ sinh học trên cây như kỹ thuật di truyền. Một cách đặc biệt hữu ích để thu được các cây bất dục đực được mô tả trong WO 89/10396, trong đó, ví dụ một enzym ribonucleaza như barnaza được biểu hiện một cách có chọn lọc trong các tế bào tapetum trong nhị hoa. Sự hữu dục sau đó có thể được phục hồi bằng cách biểu hiện trong các tế bào thâm của chất ức chế enzym trong tiêu thể của tế bào như barstar.

Cây hoặc các giống cây (nhận được bằng các phương pháp công nghệ sinh học trên cây như kỹ thuật di truyền) có thể được xử lý theo sáng chế là các cây chịu thuốc

diệt cỏ, có nghĩa là cây tạo ra sức chịu đựng với một hoặc nhiều thuốc diệt cỏ cụ thể. Có thể thu được các cây này bằng sự biến đổi gen hoặc sự chọn lọc các cây chứa sự truyền đột biến như sức chịu đựng thuốc diệt cỏ.

Cây chịu thuốc diệt cỏ là ví dụ cây chịu glyphosat, có nghĩa là những cây tạo ra sức chịu đựng với glyphosat trong thuốc diệt cỏ hoặc muối của chúng. Ví dụ, cây chịu glyphosat có thể nhận được bằng cách biến đổi cây chứa gen mã hóa enzym 5-enolpyruvylshikimat-3-phosphat synthaza (EPSPS). Ví dụ về các gen EPSPS như vậy là gen AroA (đột biến CT7) của vi khuẩn *Salmonella typhimurium*, gen CP4 của vi khuẩn *Agrobacterium sp.*, gen mã hóa EPSPS của dã yên thảo, EPSPS của cà chua, hoặc EPSPS của Eleusin. Nó cũng có thể là EPSPS đột biến. Cũng có thể thu được cây chịu glyphosat bằng sự biểu hiện gen mã hóa enzym glyphosat axetyl transferaza. Cũng có thể thu được cây chịu glyphosat bằng cách biểu hiện gen mã hóa enzym glyphosat axetyl transferaza. Cũng có thể thu được cây chịu glyphosat bằng cách chọn lọc các cây chứa đột biến xảy ra tự nhiên của các gen đã đề cập ở trên.

Ví dụ về cây kháng lại thuốc diệt cỏ khác là cây có khả năng chịu được thuốc diệt cỏ nhờ ức chế enzym tổng hợp glutamin, như bialaphos, phosphinothrixin hoặc glufosinat. Có thể thu được các cây này bằng sự biểu hiện enzym giải độc thuốc diệt cỏ hoặc enzym tổng hợp glutamin đột biến mà kháng lại sự ức chế. Enzym giải độc có hiệu quả là enzym mã hóa phosphinothrixin axetyltransferaza (như protein bar hoặc pat của loài *Streptomyces*). Cây mà biểu hiện phosphinothricin axetyltransferaza ngoại sinh đã được mô tả.

Cây chịu thuốc diệt cỏ khác còn là cây được tạo ra sức chịu đựng với thuốc diệt cỏ ức chế enzym hydroxyphenylpyruvat dioxygenaza (HPPD). Hydroxyphenylpyruvat dioxygenaza là enzym xúc tác phản ứng chuyển para-hydroxyphenylpyruvat (HPP) thành homogentisat. Cây chịu chất ức chế HPPD có thể được biến đổi gen ghi mã enzym HPPD có sức kháng có trong tự nhiên, hoặc gen mã hóa enzym HPPD đã đột biến. Cũng có thể thu được sức chống chịu với các chất ức chế HPPD bằng cách biến đổi cây bằng gen mã hóa các enzym cụ thể cho phép sự tạo thành homogentisat thay cho sự ức chế của enzym HPPD tự nhiên bởi chất ức chế HPPD. Sức chống chịu của

cây đối với chất ức chế HPPD cũng có thể được nâng cao bằng cách biến đổi cây bằng gen ghi mã enzym tiền phenat dehydroaza ngoài gen ghi mã enzym chịu HPPD.

Hơn nữa, cây có tính kháng thuốc diệt cỏ là cây được tạo ra sức chịu đựng với chất ức chế enzym tổng hợp axetolactat (acetolactate synthase-ALS). Ví dụ về chất ức chế ALS đã được biết bao gồm, ví dụ sulfonylurea, imidazolinon, triazolopyrimidin, pyrimidinyoxy(thio)benzoat, và/hoặc các thuốc diệt cỏ sulfonylaminocarbonyltri-azolinon. Các đột biến khác nhau trong enzym ALS (còn được biết như axetohydroxyaxit synthaza, AHAS) được biết là tạo ra sức chống chịu với các thuốc diệt cỏ và các nhóm thuốc diệt cỏ khác nhau. Việc sản xuất ra cây chịu sulfonylurea và cây chịu imidazolinone đã được mô tả trong WO 1996/033270. Cây chịu sulfonylurea và imidazolinone khác cũng được mô tả, ví dụ, trong WO 2007/024782.

Các cây khác chịu imidazolinon và/hoặc sulphonylurea có thể thu được bằng cách gây đột biến cảm ứng, bằng cách chọn lọc trong các canh trường tế bào khi có mặt thuốc diệt cỏ hoặc bằng cách gây giống đột biến.

Cây hoặc các giống cây (nhận được bằng các phương pháp công nghệ sinh học như kỹ thuật di truyền) có thể cũng được xử lý theo sáng chế là cây chuyển gen kháng sâu bọ, có nghĩa là cây tạo ra sự kháng đối với sự tấn công bởi các loại sâu bọ cụ thể. Có thể thu được các cây này bằng biến nạp gen, hoặc bằng cách chọn lọc những cây chứa sự truyền đột biến như kháng sâu bọ.

Như được sử dụng ở đây, “cây chuyển gen kháng sâu bọ” gồm bất cứ cây nào chứa ít nhất một gen chuyển bao gồm trình tự mã mà ghi mã:

1) protein tinh thể kháng sâu bọ từ *Bacillus thuringiensis* hoặc phần kháng sâu bọ của nó, như các protein tinh thể kháng sâu bọ được liệt kê ở trang web: http://www.lifesci.suss.ac.uk/Home/Neil_Crickmore/Bt/), hoặc các phần trừ sâu của nó, như các protein của các lớp protein Cry gồm Cry1Ab, Cry1Ac, Cry1F, Cry2Ab, Cry3Aa, hoặc Cry3Bb hoặc các phần trừ sâu của chúng; hoặc:

2) protein tinh thể từ *Bacillus thuringiensis* hoặc một phần của nó mà có tính kháng sâu bọ trong sự có mặt của protein tinh thể thứ hai khác từ *Bacillus*

thuringiensis hoặc một phần của nó, như độc tố đôi được cấu thành từ các protein tinh thể Cry34 và Cry35; hoặc

3) protein trừ sâu lai gồm các phần của hai protein tinh thể trừ sâu khác nhau từ *Bacillus thuringiensis*, ví dụ lai các protein từ 1) các protein ở trên hoặc sự lai các protein của 2) ở trên, ví dụ protein CryA.105 được tạo ra từ hiện tượng ngô MON89034 (WO 2007/027777); hoặc

4) protein trong số từ 1) đến 3) ở trên trong đó một số, cụ thể từ 1 đến 10 axit amin được thay thế bằng các axit amin khác để thu được hoạt tính trừ sâu cao hơn đối với các loài sâu bọ hướng đến, và/hoặc mở rộng phổ tác động đến các loài sâu bọ hướng đến và/hoặc do những thay đổi được đưa vào ADN ghi mã trong quá trình tách dòng hoặc biến nạp, như protein Cry3Bb1 trong hiện tượng ngô MON863 hoặc MON88017, hoặc protein Cry3A trong hiện tượng ngô MIR604; hoặc

5) protein kháng sâu bọ được tiết ra từ *Bacillus thuringiensis* hoặc *Bacillus cereus*, hoặc một phần kháng sâu bọ của nó, như các protein kháng sâu bọ từ thực vật ở đường link: http://www.lifesci.sussex.ac.uk/Home/Neil_Crickmore/Bt/vip.html, ví dụ protein từ lớp VIP3Aa protein; hoặc

6) protein được tiết ra từ *Bacillus thuringiensis* hoặc *Bacillus cereus* mà kháng sâu bọ khi có mặt protein thứ hai được tiết ra từ *Bacillus thuringiensis* hoặc *B. cereus*, như độc tố nhị phân được tạo thành từ các protein VIP1A và VIP2A;

7) protein kháng sâu bọ lai bao gồm các phần từ các protein khác nhau được tiết ra từ *Bacillus thuringiensis* hoặc *Bacillus cereus*, như dạng lai của các protein trong 1) ở trên hoặc dạng lai của các protein trong 2) ở trên; hoặc

8) protein theo mục bất kỳ trong số mục 1) đến 3) ở trên trong đó, cụ thể từ 1 đến 10 axit amin được thay thế bằng các axit amin khác để có được hoạt tính trừ sâu cao hơn đối với các loài sâu bọ hướng đến, và/hoặc mở rộng phổ tác dụng với các loài sâu bọ hướng đến, và/hoặc nhờ sự thay đổi được đưa vào trong ADN

ghi mã trong quá trình tách dòng hoặc biến nạp (trong khi vẫn mã hoá một protein trừ sâu), như protein VIP3Aa trong hiện tượng bông COT102.

Tất nhiên, trong tài liệu này, cây chuyển gen kháng sâu bọ cũng bao gồm bất cứ cây nào có chứa tổ hợp các gen ghi mã protein thuộc bất kỳ protein nào trong các lớp protein từ 1 đến 8 ở trên. Trong một phương án, cây kháng sâu bọ có chứa nhiều hơn một gen chuyển mã mã hoá một trong các protein trong các lớp từ 1 đến 8 ở trên, để mở rộng hơn phổ tác động đến các loài sâu bọ hướng đến, hoặc để trì hoãn sự phát triển kháng sâu của cây bằng cách dùng các protein kháng sâu khác nhau với cùng loại sâu bọ hướng đến nhưng có cách hoạt động khác nhau, như liên kết với các vị trí liên kết thụ thể khác nhau trong sâu bọ.

Cây hoặc giống cây (thu được bằng các phương pháp công nghệ sinh học trên cây như kỹ thuật di truyền) có thể cũng được xử lý theo sáng chế có sức chịu với các yếu tố gây áp lực phi sinh. Những cây đó có thể nhận được bằng biến nạp gen, hoặc bằng cách chọn lọc các cây chứa sự truyền đột biến như sức kháng với áp lực này. Cây cụ thể có sức chịu với áp lực có ích bao gồm:

- a. cây chứa gen chuyển có khả năng làm giảm sự biểu hiện và/hoặc hoạt động của gen poly(ADP-riboza)polymeraza (PARP) trong các tế bào của cây hoặc trong các cây;
- b. những cây chứa gen chuyển nâng cao sức chống chịu với áp lực có khả năng làm giảm sự biểu hiện và/hoặc sự hoạt động của gen ghi mã PARG của cây hoặc các tế bào cây;
- c. cây chứa gen chuyển nâng cao sức chống chịu với áp lực mà mã hóa nzym chức năng thực vật của quá trình sinh tổng hợp tái sử dụng nicotinamid adenin dinucleotit, bao gồm nicotinamidaza, nicotinat photphoribosyltransferaza, nicotinic axit mononucleotit adenyl transferaza, nicotinamid adenin dinucleotit synthetaza hoặc nicotinamid photphoribosyltransferaza.

Cây hoặc giống cây (thu được bằng phương pháp công nghệ sinh học trên cây như kỹ thuật di truyền) có thể cũng được xử lý theo sáng chế cho thấy chất lượng, số lượng được biến đổi và/hoặc sự ổn định khi dự trữ của sản phẩm thu hoạch và/hoặc

tính chất của các thành phần đặc trưng của sản phẩm thu hoạch được biến đổi như, ví dụ:

1) cây trồng chuyển gen tổng hợp tinh bột biến tính, mà trong đặc tính lý hoá của nó, cụ thể hàm lượng amyloza hoặc tỷ lệ amyloza/amylopectin, độ phân nhánh, chiều dài trung bình của chuỗi, sự phân bố của chuỗi bên, tính nhớt, độ bền keo, kích cỡ và/hoặc hình thái của hạt tinh bột, được thay đổi so với hạt tinh bột được tổng hợp trong các cây hoặc các tế bào cây hoang dại, vì vậy phù hợp hơn cho các ứng dụng đặc biệt.

2) cây chuyển gen tổng hợp các polyme carbohydrat không phải tinh bột hoặc tổng hợp các polyme carbohydrat không phải tinh bột có những đặc tính bị biến đổi so với cây hoang dại không có biến đổi gen. Ví dụ là cây sản xuất polyfructoza, cụ thể là dạng inulin và levan, cây sản xuất anpha-1,4-glucan, cây sản xuất anpha-1,4-glucan có nhánh anpha-1,6, và cây sản xuất alternan.

3) cây chuyển gen sản xuất hyaluronan.

Cây hoặc giống cây (mà có thể nhận được bằng các phương pháp công nghệ sinh học trên cây như kỹ thuật di truyền) có thể cũng được xử lý theo sáng chế là các cây, như cây bông, có tính chất sợi được biến đổi. Có thể thu được các cây này bằng cách biến nạp di truyền, hoặc bằng cách chọn lọc những cây chứa sự truyền đột biến như tính chất sợi được biến đổi và bao gồm:

a) cây, như cây bông, chứa dạng được biến đổi của các gen tổng hợp xenluloza,

b) cây, như cây bông, chứa dạng được biến đổi của axit nucleic đồng đẳng rsw2 hoặc rsw3;

c) cây, như cây bông, với sự biểu hiện enzym tổng hợp sucroza photphat được tăng lên;

d) cây, như cây bông, với sự biểu hiện enzym tổng hợp sucroza được tăng lên;

e) cây, như cây bông, trong đó thời gian đi qua cửa cầu chất nguyên sinh tại nền của tế bào sợi được thay đổi, ví dụ thông qua sự điều hòa ức chế của β -1,3-glucanaza chọn lọc sợi;

f) cây, như cây bông, mà có các sợi với độ phản ứng đã biến đổi, ví dụ thông qua sự biểu hiện của gen N-acetylglucosamintransferaza bao gồm các gen nodC và chitin synthaza.

Cây hoặc giống cây (mà có thể nhận được bằng các phương pháp công nghệ sinh học trên cây như kỹ thuật di truyền) có thể cũng được xử lý theo sáng chế là cây, như cây cải dầu hoặc các cây thuộc họ cải bắp, với các đặc tính đặc trưng cho dầu được biến đổi. Có thể thu được các cây này bằng sự biến nạp gen hoặc bằng cách chọn lọc các cây chứa sự truyền đột biến như các đặc tính đặc trưng cho dầu được biến đổi và bao gồm:

- a) cây, như cây cải dầu, mà sản xuất dầu có hàm lượng axit oleic cao;
- b) cây, như cây cải dầu, mà sản xuất dầu có hàm lượng axit linolenic thấp;
- c) cây, như cây cải dầu, sản xuất dầu có hàm lượng các axit béo bão hòa ở mức thấp.

Cây chuyển gen hữu ích cụ thể có thể được xử lý theo sáng chế là cây chứa một hoặc nhiều gen ghi mã một hoặc nhiều độc tố, và là cây trồng được bán dưới các tên thương mại sau: YIELD GARD® (ví dụ, ngô, bông, đậu tương), KnockOut® (ví dụ, ngô), BiteGard® (ví dụ, ngô), BT-Xtra® (ví dụ, ngô), StarLink® (ví dụ, ngô), Bollgard® (bông), Nucotn® (bông), Nucotn 33B® (bông), NatureGard® (ví dụ, ngô), Protecta® và NewLeaf® (khoai tây). Ví dụ về cây chịu thuốc diệt cỏ có thể được đề cập đến là các giống ngô, giống bông và giống đậu tương được bán dưới tên thương mại sau: Roundup Ready® (chịu được glyphosat, ví dụ ngô, ngô, đậu tương), Liberty Link® (chịu được phosphinothricin, ví dụ dầu hạt cải), IMI® (chịu được imidazolinone) và SCS® (chịu được sulphonylurea, ví dụ ngô). Cây kháng thuốc diệt cỏ (cây được gây giống theo cách truyền thống để chịu được thuốc diệt cỏ) mà có thể được đề cập bao gồm các loài cây được bán dưới tên thương mại Clearfield (ví dụ, cây ngô).

Cây chuyển gen hữu ích cụ thể có thể được xử lý theo sáng chế là cây chứa các hiện tượng biến đổi hoặc tổ hợp của các hiện tượng biến đổi, chúng được thống kê trong cơ sở dữ liệu của các cơ quan điều tiết quốc gia hoặc khu vực (xem ví dụ http://gmoinfo.jrc.it/gmp_browse.aspx và <http://www.agbios.com/dbase.php>).

Việc xử lý theo sáng chế các cây trồng và bộ phận cây trồng bằng các tổ hợp hợp chất hoạt tính được thực hiện trực tiếp hoặc bằng cho phép các hợp chất tác dụng lên xung quanh, môi trường sống hoặc nơi bảo quản bằng các phương pháp xử lý thông thường, ví dụ bằng ngâm, phun mù, làm bay hơi, phun sương, tung rắc, phủ lên, phun và trong trường hợp nguyên liệu nhân giống, cụ thể trong trường hợp hạt, còn áp dụng một hoặc nhiều lớp phủ.

Các hỗn hợp theo sáng chế phù hợp cụ thể để xử lý hạt giống. Ở đây, ưu tiên đề cập cụ thể đến các tổ hợp theo sáng chế như đã đề cập ở trên. Do đó, hầu hết các nguy hại cho cây trồng do động vật gây hại gây ra xảy ra sớm khi mà hạt bị phá hoại trong khi lưu giữ và sau khi hạt được đưa vào trong đất, và trong khi và ngay sau khi cây nảy mầm. Giai đoạn này là đặc biệt quan trọng do rễ và cành non của cây đang phát triển đặc biệt nhạy cảm, và thậm chí một sự hư hại nhỏ cũng có thể dẫn đến chết cả cây. Do đó việc bảo vệ hạt và cây đang nảy mầm bằng cách sử dụng chế phẩm phù hợp được quan tâm nhiều một cách đặc biệt.

Sự phòng trừ các loài gây hại bằng cách xử lý hạt của cây đã được biết đến trong một thời gian dài và là đối tượng của những cải tiến liên tục. Tuy nhiên, việc xử lý hạt lại gây ra một loạt các vấn đề mà thường không thể giải quyết được một cách thỏa đáng. Do đó, mong muốn phát triển các phương pháp bảo vệ hạt và cây đang nảy mầm mà không cần phải sử dụng thêm các sản phẩm bảo vệ cây trồng sau khi gieo hạt hoặc sau khi cây đã mọc. Hơn nữa mong muốn tối ưu hóa lượng hợp chất hoạt tính sử dụng theo cách đề xuất sự bảo vệ tối ưu cho hạt và cây đang nảy mầm khỏi sự tấn công của các loài gây hại, mà không phá hủy chính cây bằng hợp chất hoạt tính sử dụng. Cụ thể, phương pháp xử lý hạt cũng quan tâm đến các đặc tính trừ sâu bên trong của cây chuyển gen để đạt được sự bảo vệ hạt và cây đang nảy mầm được tối ưu bằng lượng tối thiểu chất bảo vệ cây trồng được sử dụng.

Do đó sáng chế cũng đề cập cụ thể đến phương pháp bảo vệ hạt và các cây nảy mầm khỏi sự tấn công của các loài gây hại, bằng cách xử lý hạt bằng chế phẩm theo sáng chế. Sáng chế cũng đề cập đến việc sử dụng chế phẩm theo sáng chế để xử lý hạt để bảo vệ hạt và cây nảy mầm khỏi các loài gây hại. Sáng chế đề cập thêm đến hạt được xử lý bằng chế phẩm theo sáng chế để bảo vệ khỏi các loài gây hại.

Một trong các ưu điểm của sáng chế đó là đặc tính toàn bộ cụ thể của các chế phẩm theo sáng chế nghĩa là việc xử lý hạt bằng chế phẩm này không chỉ bảo vệ bản thân các hạt, mà còn bảo vệ cả cây mọc lên sau khi nảy mầm, khỏi các loài gây hại. Theo cách này, có thể bỏ qua bước xử lý trung gian cho cây ở thời điểm gieo hạt hoặc sau đó một thời gian ngắn.

Ưu điểm khác là hoạt tính trừ sâu của chế phẩm theo sáng chế được tăng lên một cách hiệp đồng so với hợp chất hoạt tính trừ sâu đơn lẻ, mà vượt quá hoạt tính mong đợi của cả hai hợp chất này khi sử dụng riêng lẻ. Ưu điểm khác là hoạt tính diệt nấm của chế phẩm theo sáng chế được tăng lên một cách hiệp đồng so với hợp chất hoạt tính diệt nấm đơn lẻ, mà vượt quá hoạt tính mong đợi của cả hai hợp chất này khi sử dụng riêng lẻ. Điều này khiến cho có thể tối ưu hóa lượng hợp chất hoạt tính sử dụng.

Hơn nữa, cũng được xem là ưu điểm rằng hợp chất theo sáng chế cũng có thể được sử dụng cụ thể cho hạt chuyển gen, cây mọc từ hạt này có thể biểu hiện protein mà chống lại các loài gây hại. Bằng cách xử lý các hạt bằng chế phẩm theo sáng chế, các loài gây hại cụ thể có thể được phòng trừ chỉ bằng sự biểu hiện của, ví dụ protein trừ sâu, và có thể ngăn ngừa được các nguy hại cho hạt bằng chế phẩm theo sáng chế.

Các chế phẩm theo sáng chế thích hợp cho việc bảo vệ hạt của giống cây bất kỳ được sử dụng trong nông nghiệp, trong nhà kính, trong rừng hoặc trong nghề làm vườn. Cụ thể là bảo vệ hạt giống của cây ngô, cây đậu phụng, cây dầu canola, cây cải dầu, cây anh túc, đậu tương, cây bông, củ cải (ví dụ, củ cải đường và củ cải đường cho chăn nuôi), lúa, kê, lúa mỳ, lúa mì, lúa mạch, yến mạch, lúa mạch đen, hướng dương, thuốc lá, khoai tây hoặc rau (ví dụ, cà chua, rau thuộc họ cải bắp). Chế phẩm theo sáng chế cũng phù hợp để xử lý hạt của cây ăn quả và rau như vừa đề cập ở trên. Việc xử lý hạt ngô, đậu tương, bông, lúa mì, lúa và canola hạt cải là quan trọng một cách cụ thể.

Như đã đề cập ở trên, việc xử lý hạt chuyển gen bằng chế phẩm theo sáng chế cũng đặc biệt quan trọng. Đó là hạt của các cây thường chứa ít nhất một gen khác loại có tác dụng phòng trừ sự biểu hiện của một polypeptit có các đặc tính trừ sâu cụ thể. Trong ngữ cảnh này, các gen khác loại trong hạt chuyển gen có thể được lấy từ vi sinh vật như *Bacillus*, *Rhizobium*, *Pseudomonas*, *Serratia*, *Trichoderma*, *Clavibacter*, *Glomus* hoặc *Gliocladium*. Sáng chế phù hợp một cách cụ thể để xử lý hạt chuyển gen mà chứa ít nhất một gen khác loại từ *Bacillus sp.* và sản phẩm gen của nó mà thể hiện hoạt tính chống lại bộ rầy ngô Châu Âu và/hoặc sâu đục rễ ngô. Gen này ưu tiên hơn là gen khác loại thu được từ *Bacillus thuringiensis*.

Trong ngữ cảnh sáng chế, chế phẩm theo sáng chế được sử dụng cho hạt ở dạng hoặc riêng biệt hoặc ở dạng thích hợp. Tốt hơn, hạt được xử lý ở trạng thái ổn định đủ để tránh sự phá hủy trong lúc xử lý. Nói chung, hạt có thể được xử lý ở bất cứ thời gian nào giữa lúc thu hoạch và lúc gieo hạt. Hạt thường sử dụng được phân tách khỏi cây và được tách khỏi hạt phôi lớn, các vỏ, thân cây, các vỏ, các lông cây hoặc cuì của các quả.

Khi xử lý hạt giống, thường phải đảm bảo rằng lượng chế phẩm theo sáng chế được dùng cho hạt giống và/hoặc lượng các phụ gia khác được chọn sao cho sự nảy mầm của hạt không bị ảnh hưởng bất lợi, hoặc cây thu được không bị hư hại. Điều này phải được đảm bảo cụ thể trong trường hợp các hợp chất hoạt tính có thể thể hiện các tác dụng độc tính thực vật ở các tỷ lệ áp dụng cụ thể.

Hơn nữa, hợp chất theo sáng chế có thể được sử dụng để phòng trừ nhiều loài gây hại khác nhau, bao gồm, ví dụ, côn trùng chích hút có hại, côn trùng cắn và các loài gây hại khác là loài ký sinh trên cây, loài gây hại nguyên liệu bảo quản, loài gây hại mà phá hủy vật liệu công nghiệp, và loài gây hại vệ sinh bao gồm ký sinh trùng, trong lĩnh vực sức khỏe động vật và để phòng trừ chúng, ví dụ, trừ tiết và tiêu diệt chúng. Do đó sáng chế cũng bao gồm phương pháp phòng trừ các loài gây hại.

Trong lĩnh vực sức khỏe động vật, tức là, trong lĩnh vực thuốc thú y, các hợp chất hoạt tính theo sáng chế có hoạt tính chống lại ký sinh trùng trên động vật, cụ thể nội ký sinh và ngoại ký sinh. Thuật ngữ "nội ký sinh" bao gồm giun sán, cụ thể sán dây,

giun hóa hoặc sán lá, và động vật nguyên sinh, ví dụ koozzidia. Ngoại ký sinh là điển hình và tốt hơn là là động vật chân đốt, côn trùng đặc biệt như ruồi (đốt và liếm), ấu trùng ruồi ký sinh, chấy, rận tóc, chấy chim, bọ chét và các loại tương tự, hoặc ve bét, ví dụ như bọ ve, ví dụ như bọ ve cứng hoặc bọ ve mềm, hoặc bọ ve, chẳng hạn như ve vẩy, ve mùa gặt, ve chim và tương tự.

Các con ký sinh này bao gồm:

Từ bộ Anoplurida, ví dụ vi khuẩn *Haematopinus* spp., *Linognathus* spp., *Pediculus* spp., *Phtirus* spp. và *Solenopotes* spp.; các ví dụ cụ thể là: *Linognathus setosus*, *Linognathus vituli*, *Linognathus ovillus*, *Linognathus oviformis*, *Linognathus pedalis*, *Linognathus stenopsis*, *Haematopinus asini macrocephalus*, *Haematopinus eurytarnus*, *Haematopinus suis*, *Pediculus humanus capitis*, *Pediculus humanus corporis*, *Phylloera vastatrix*, *Phthirus pubis*, *Solenopotes capillatus*;

Từ bộ Mallophagida và các phân bộ Amblycerina và Ischnocerina, ví dụ *Trimenopon* spp., *Menopon* spp., *Trinoton* spp., *Bovicola* spp., *Werneckiella* spp., *Lepikentron* spp., *Damalina* spp., *Trichodectes* spp., *Felicola* spp.; ví dụ cụ thể là: *Bovicola bovis*, *Bovicola ovis*, *Bovicola limbata*, *Damalina bovis*, *Trichodectes canis*, *Felicola subrostratus*, *Bovicola caprae*, *Lepikentron ovis*, *Werneckiella equi*;

Từ bộ côn trùng hai cánh và các phân bộ Nematocerina và Brachycerina, ví dụ *Aedes* spp., *Anopheles* spp., *Culex* spp., *Simulium* spp., *Eusimulium* spp., *Phlebotomus* spp., *Lutzomyia* spp., *Culicoides* spp., *Chrysops* spp., *Hybomitra* spp., *Atylotus* spp., *Tabanus* spp., *Haematopota* spp., *Philipomyia* spp., *Braula* spp., *Musca* spp., *Hydrotaea* spp., *Stomoxys* spp., *Haematobia* spp., *Morellia* spp., *Fannia* spp., *Glossina* spp., *Calliphora* spp., *Lucilia* spp., *Chrysomya* spp., *Wohlfahrtia* spp., *Sarcophaga* spp., *Oestrus* spp., *Hypoderma* spp., *Gasterophilus* spp., *Hippobosca* spp., *Lipoptena* spp., *Melophagus* spp. *Aedes aegypti*, *Aedes albopictus*, *Aedes taeniorhynchus*, *Anopheles gambiae*, *Anopheles maculipennis*, *Calliphora erythrocephala*, *Chrysomya pluvialis*, *Culex quinquefasciatus*, *Culex pipiens*, *Culex tarsalis*, *Fannia canicularis*, *Sarcophaga carnaria*, *Stomoxys calcitrans*, *Tipula paludosa*, *Lucilia cuprina*, *Lucilia sericata*, *Simulium reptans*, *Phlebotomus papatasi*,

Phlebotomus longipalpis, *Odagmia ornata*, *Wilhelmia equina*, *Boophthora erythrocephala*, *Tabanus bromius*, *Tabanus spodopterus*, *Tabanus atratus*, *Tabanus sudeticus*, *Hybomitra ciurea*, *Chrysops caecutiens*, *Chrysops relictus*, *Haematopota pluvialis*, *Haematopota italica*, *Musca autumnalis*, *Musca domestica*, *Haematobia irritans irritans*, *Haematobia irritans exigua*, *Haematobia stimulans*, *Hydrotaea irritans*, *Hydrotaea albipuncta*, *Chrysomya clopyga*, *Chrysomya bezziana*, *Oestrus ovis*, *Hypoderma bovis*, *Hypoderma lineatum*, *Przhevalskiana silenus*, *Dermatobia hominis*, *Melophagus ovinus*, *Lipoptena capreoli*, *Lipoptena cervi*, *Hippobosca variegata*, *Hippobosca equina*, *Gasterophilus intestinalis*, *Gasterophilus haemorroitalis*, *Gasterophilus inermis*, *Gasterophilus nasalis*, *Gasterophilus nigricornis*, *Gasterophilus pecorum*, *Braula coeca*;

Từ bộ Siphonapterida, ví dụ, *Pulex* spp., *Ctenocephalogenua* spp., *Tunga* spp., *Xenopsylla* spp., *Ceratophyllus* spp.; ví dụ cụ thể là: *Ctenocephalogenua canis*, *Ctenocephalogenua felis*, *Pulex irritans*, *Tunga penetrans*, *Xenopsylla cheopis*;

Từ bộ Heteropterida, ví dụ, *Cimex* spp., *Triatoma* spp., *Rhodnius* spp., *Panstrongylus* spp.

Từ bộ Blattarida, ví dụ, *Blatta orientalis*, *Periplaneta americana*, *Blattella germanica*, *Supella* spp. (ví dụ, *Supella longipalpa*).

Từ phân lớp Acari (Acarina) và các bộ Meta- và Mesostigmata, ví dụ, *Argas* spp., *Ornithodoros* spp., *Otobius* spp., *Ixodes* spp., *Amblyomma* spp., *Rhipicephalus* (*Boophilus*) spp., *Dermacentor* spp., *Haemophysalis* spp., *Hyalomma* spp., *Dermanyssus* spp., *Rhipicephalus* spp. (từ giống ban đầu multi-host tick s), *Ornithonyssus* spp., *Pneumonyssus* spp., *Raillietia* spp., *Pneumonyssus* spp., *Sternostoma* spp., *Varroa* spp., *Acarapis* spp.; ví dụ cụ thể là: *Argas persicus*, *Argas reflexus*, *Ornithodoros moubata*, *Otobius megnini*, *Rhipicephalus* (*Boophilus*) *microplus*, *Rhipicephalus* (*Boophilus*) *decoloratus*, *Rhipicephalus* (*Boophilus*) *annulatus*, *Rhipicephalus* (*Boophilus*) *calceratus*, *Hyalomma anatolicum*, *Hyalomma aegypticum*, *Hyalomma marginatum*, *Hyalomma transiens*, *Rhipicephalus evertsi*, *Ixodes ricinus*, *Ixodes hexagonus*, *Ixodes canisuga*, *Ixodes pilosus*, *Ixodes rubicundus*,

Ixodes scapularis, *Ixodes holocyclus*, *Haemaphysalis concinna*, *Haemaphysalis punctata*, *Haemaphysalis cinnabarina*, *Haemaphysalis otophila*, *Haemaphysalis leachi*, *Haemaphysalis longicorni*, *Dermacentor marginatus*, *Dermacentor reticulatus*, *Dermacentor pictus*, *Dermacentor albipictus*, *Dermacentor versoni*, *Dermacentor variabilis*, *Hyalomma mauritanicum*, *Rhipicephalus sanguineus*, *Rhipicephalus bursa*, *Rhipicephalus appendiculatus*, *Rhipicephalus capensis*, *Rhipicephalus turanicus*, *Rhipicephalus zambeziensis*, *Amblyomma americanum*, *Amblyomma variegatum*, *Amblyomma maculatum*, *Amblyomma hebraeum*, *Amblyomma cajennense*, *Dermanyssus gallinae*, *Ornithonyssus bursa*, *Ornithonyssus sylviarum*, *Varroa jacobsoni*;

Từ bộ Actinedida (Prostigmata) và Acaridida (Astigmata), ví dụ, *Acarapis* spp., *Cheyletiella* spp., *Ornithocheyletia* spp., *Myobia* spp., *Psorergates* spp., *Demodex* spp., *Trombicula* spp., *Listrophorus* spp., *Acarus* spp., *Tyrophagus* spp., *Caloglyphus* spp., *Hypodectes* spp., *Pterolichus* spp., *Psoroptes* spp., *Chorioptes* spp., *Otodectes* spp., *Sarcoptes* spp., *Notoedres* spp., *Knemidocoptes* spp., *xylodites* spp., *Laminosioptes* spp.; ví dụ cụ thể là: *Cheyletiella yasguri*, *Cheyletiella blakei*, *Demodex canis*, *Demodex bovis*, *Demodex ovis*, *Demodex caprae*, *Demodex equi*, *Demodex caballi*, *Demodex suis*, *Neotrombicula autumnalis*, *Neotrombicula desaleri*, *Neoschöngastia xerothermobia*, *Trombicula akamushi*, *Otodectes xynotis*, *Notoedres cati*, *Sarcoptes canis*, *Sarcoptes bovis*, *Sarcoptes ovis*, *Sarcoptes rupicaprae* (=S. caprae), *Sarcoptes equi*, *Sarcoptes suis*, *Psoroptes ovis*, *Psoroptes cuniculi*, *Psoroptes equi*, *Chorioptes bovis*, *Psorergates ovis*, *Pneumonyssoides mange*, *Pneumonyssoides caninum*, *Acarapis woodi*.

Hợp chất hoạt tính theo sáng chế cũng có thể thích hợp để phòng trừ động vật chân đốt, giun sán và động vật nguyên sinh mà phá hoại động vật. Các loài động vật bao gồm vật nuôi trong nông nghiệp, ví dụ như gia súc, cừu, dê, ngựa, lợn, lừa, lạc đà, trâu, thỏ, gà, gà tây, vịt, ngan, ngỗng, cá nuôi, ong. Các loài động vật này cũng bao gồm vật nuôi trong nhà - cũng được gọi là vật nuôi - chẳng hạn như, ví dụ, chó, mèo, chim lồng và cá nuôi, và cũng được gọi là động vật thử nghiệm, chẳng hạn như, ví dụ, chuột đồng, chuột lang, chuột nhà và chuột hoang.

Việc phòng trừ động vật chân đốt, giun sán và/hoặc động vật nguyên sinh làm giảm các trường hợp chết và làm tăng năng suất (cho thịt, sữa, len, da sống, trứng, mật v.v...) và sức khỏe của con vật chủ, và cả việc sử dụng hợp chất hoạt tính theo sáng chế có thể kinh tế hơn và dễ dàng quản lý vật nuôi hơn.

Ví dụ, mong muốn ngăn ngừa hoặc ngăn chặn sự hút máu của vật chủ của động vật ký sinh (nếu phù hợp). Việc phòng trừ động vật ký sinh cũng có thể góp phần ngăn ngừa sự lan truyền các chất lây nhiễm.

Thuật ngữ "phòng trừ", như được sử dụng ở đây về lĩnh vực sức khỏe động vật, có nghĩa là các hợp chất hoạt tính hoạt động bằng cách giảm tỷ lệ xảy ra ký sinh trùng đang nói đến ở động vật bị nhiễm ký sinh trùng này đến mức vô hại. Cụ thể hơn, "phòng trừ" như được sử dụng trong bản mô tả này, có nghĩa là hợp chất hoạt tính giết ký sinh trùng đang nói đến, ức chế sự phát triển hoặc ức chế sự tăng sinh của nó.

Thông thường, hợp chất hoạt tính theo sáng chế có thể được sử dụng trực tiếp khi chúng được dùng để xử lý động vật. Tốt hơn chúng được dùng ở dạng dược phẩm mà có thể bao gồm tá dược và/hoặc chất hỗ trợ dược dụng đã biết trong lĩnh vực này.

Trong lĩnh vực sức khỏe động vật và quản lý động vật, các hợp chất hoạt tính được sử dụng (được dùng) theo cách đã biết, bằng cách đưa vào trong ruột ở dạng, ví dụ, viên nén, viên nang, chất lỏng, liều thuốc lớn, hạt nhỏ, bột nhão, viên thuốc to, quá trình thông và thuốc đạn, bằng đưa vào qua đường ngoài ruột, như, ví dụ, bằng tiêm (trong cơ, dưới da, qua tĩnh mạch, trong xoang bụng và tương tự), cấy bằng đưa vào qua mũi, bằng sử dụng qua da ở dạng, ví dụ, nhúng hoặc ngâm, phun, rót lên và chấm điểm lên, rửa và nghiền thành bột, và cả với sự hỗ trợ của các hạt đúc chứa hợp chất hoạt tính, như vòng đệm, dầu tai, dầu đuôi, đai chi, các dải vòng, thiết bị đánh dấu và tương tự. Các hợp chất hoạt tính này có thể được bào chế ở dạng dầu gội hoặc dạng phù hợp để dùng trong bình phun hoặc phun không áp lực, ví dụ phun bơm và phun tán.

Khi được sử dụng cho vật nuôi, gia cầm và loài tương tự, hợp chất hoạt tính theo sáng chế có thể được sử dụng ở dạng chế phẩm (ví dụ, bột, bột ướt ["wetttable powders-WP"], nhũ tương, chất cô đặc nhũ hóa ["emulsifiable concentrates-EC"],, chế

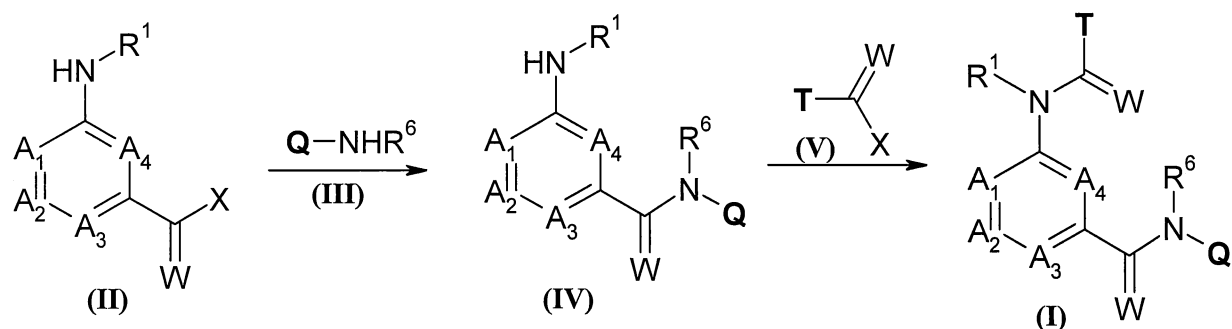
phẩm chảy tự do, dung dịch đồng nhất và chất cô đặc huyền phù [“ [“suspension concentrates-SC”) mà chứa hợp chất hoạt tính với lượng từ 1 đến 80% khối lượng, trực tiếp hoặc sau pha loãng (ví dụ, 100 đến 1000 lần), hoặc chúng có thể được sử dụng ở dạng bẻ hoá chất.

Khi được sử dụng trong lĩnh vực sức khỏe động vật, hợp chất hoạt tính theo sáng chế có thể được sử dụng kết hợp với chất hiệp đồng phù hợp hoặc hợp chất hoạt tính khác như, ví dụ, thuốc diệt ve bét, thuốc trừ sâu, thuốc trừ giun sán, chất chống lại động vật nguyên sinh.

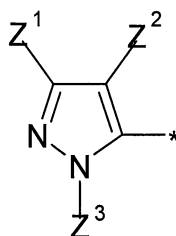
Hợp chất theo sáng chế có thể được người có trình độ trong lĩnh vực này điều chế bằng các phương pháp thông thường đã biết.

Sơ đồ phản ứng 1 thể hiện quy trình điều chế chung A để điều chế hợp chất (I) theo sáng chế.

Sơ đồ phản ứng 1



Các gốc A_1 - A_4 , Q, W, R^1 và R^6 có nghĩa như đã mô tả ở trên. T là nhóm:



trong đó các gốc Z^1 , Z^2 và Z^3 có nghĩa như đã nêu ở trên và dấu hoa thị là điểm liên kết với nhóm C=W . X là bất kỳ nhóm rời chuyển nào.

Hợp chất theo sáng chế thuộc loại (I) có thể được điều chế bằng cách cho amin có công thức chung (IV) phản ứng với các dẫn xuất của axit carboxylic đã hoạt hóa có

công thức chung (V). Phản ứng có thể được thực hiện trong sự có mặt hoặc không có mặt của dung môi. Trong bước này, cũng có thể sử dụng bazơ phù hợp.

Thông thường, thuận lợi để thực hiện bước phản ứng thứ nhất trong quy trình điều chế A theo sáng chế, khi phù hợp, trong sự có mặt của chất làm loãng phù hợp và, khi phù hợp, trong sự có mặt của chất hỗ trợ phản ứng bazơ phù hợp.

Chất làm loãng được sử dụng với lượng có lợi để hỗn hợp phản ứng còn lại dễ dàng có thể khuấy được trong toàn bộ phản ứng.

Phù hợp để sử dụng làm dung môi là bất kỳ dung môi nào không làm ảnh hưởng đến phản ứng ví dụ như, nước. Phù hợp là hydrocacbon thơm như benzen hoặc toluen; hydrocacbon halogen hóa như diclometan, cloroform hoặc carbon tetrachlorua, ete mạch hở hoặc vòng như dietyl ete, dioxan, tetrahydrofuran hoặc 1,2-dimethoxyetan; este như etyl axetat và butyl axetat; keton ví dụ như, axeton, metyl isobutyl keton và cyclohexanon; amit như dimethylformamid và dimethylacetamid; nitril như axetonitril; và các dung môi khác như 1,3-dimethyl-2-imidazolidinon; dung môi có thể được sử dụng ở dạng như vậy luôn hoặc trong hỗn hợp của hai hoặc nhiều dung môi.

Bazơ sử dụng có thể là bazơ hữu cơ như triethylamin, ethyldiisopropylamin, tri-n-butylamin, pyridin và 4-dimethylaminopyridin; Hơn nữa, có thể sử dụng, ví dụ, các bazơ sau: hydroxit kim loại kiềm ví dụ như, natri hydroxit và kali hydroxit; carbonat như natri bicarbonat và kali carbonat; phosphat như dikali hydrophosphat và trinatri phosphat; hydrua kim loại kiềm như natri hydrua; alkoxit kim loại kiềm như natri metoxit và natri etoxit. Các bazơ này có thể được sử dụng ở tỷ lệ từ 0,01 đến 5,0 đương lượng mol dựa vào (IV) và (V). Hơn nữa, cũng có thể sử dụng bạc(I) xyanua làm bazơ và chất hoạt hóa [Journal of Organic Chemistry. **1992**, 57, 4394-4400; Journal of Medicinal Chemistry **1992**, 35, 3905-3918; Journal of Organic Chemistry **2003**, 68, 1843-1851]

Nhiệt độ phản ứng phù hợp nằm trong khoảng từ -20°C đến điểm sôi của dung môi đưa ra và thời gian phản ứng nằm trong khoảng từ vài phút đến 96 giờ, phụ thuộc vào chất phản ứng, dung môi và nhiệt độ phản ứng lựa chọn.

Carbonyl halogenua vòng khi được thể hiện bằng công thức chung (V) có thể được điều chế theo cách tương tự bằng cách cho axit carboxylic dị vòng phản ứng với chất halogen hóa như thionyl clorua, thionyl bromua, phosphoryl clorua, oxalyl clorua, phospho triclорua, v.v.... [Houben-Weyl, 1952, Vol. VIII, p.463 ff.].

Tuy nhiên, việc điều chế carboxamit được thể hiện bằng công thức (I) cũng có thể được thực hiện bằng cách sử dụng các chất kết hợp như dicyclohexylcarbodiimide và chất bổ sung như 1-hydroxybenzotriazol [Chem. Ber. **1970**, 788]. Cũng có thể sử dụng các chất kết hợp như 1-ethyl-3-(3-dimethylaminopropyl)carbodiimide, 1,1'-carbonyl-1H-imidazol và hợp chất tương tự.

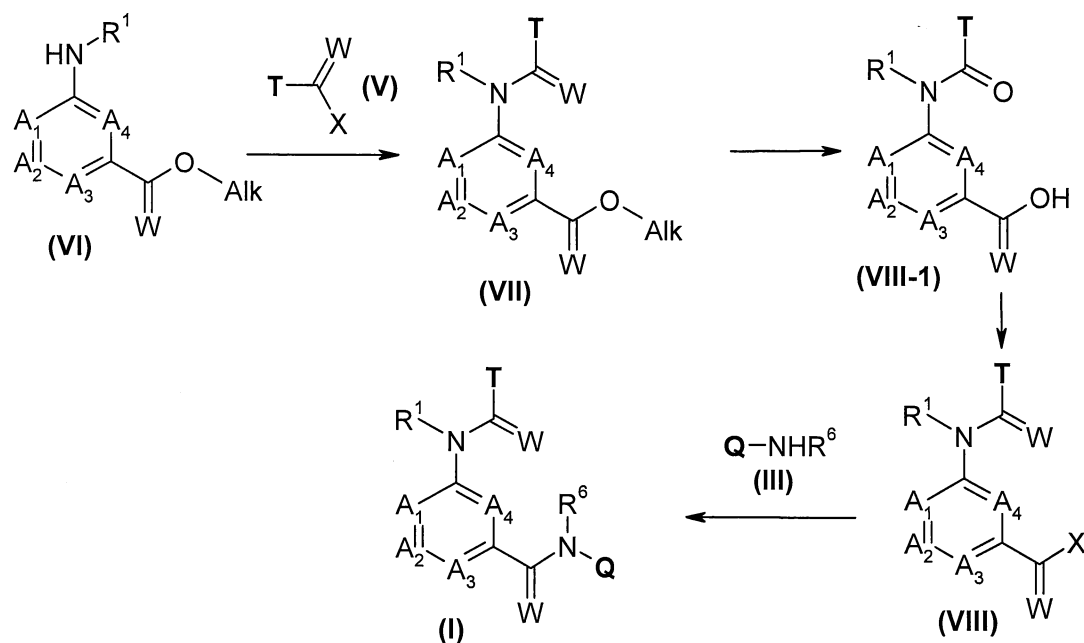
Chất kết hợp sử dụng để thực hiện quy trình điều chế này là tất cả các chất phù hợp để tạo thành liên kết este hoặc amit (tham khảo ví dụ, Bodansky et al., Peptide Synthesis, 2nd ed., Wiley & Sons, New York, 1976; Gross, Meienhofer, The Peptide: Analysis, Synthesis, Biology, Academic Press, New York, 1979).

Hơn nữa, cũng có thể sử dụng các anhydrua kết hợp để điều chế (I) [J. Am. Chem. Soc **1967**, 5012]. Trong quy trình này, có thể sử dụng các este cloroform khác nhau, ví dụ isobutyl cloroformat, isopropyl cloroformat. Cho mục đích này cũng có thể sử dụng diethylaxetyl clorua, trimethylaxetyl clorua và chất tương tự.

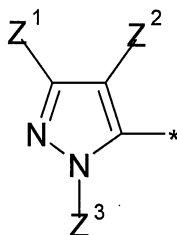
Các hợp chất có công thức cấu tạo chung (IV) có thể được điều chế bằng cách cho amin có công thức cấu tạo chung (III) phản ứng với dẫn xuất của axit carboxylic đã hoạt hóa có công thức cấu tạo chung (II). Ở đây, sử dụng cùng một điều kiện như trong điều chế (I) đã mô tả ở trên về việc lựa chọn dung môi, điều kiện phản ứng, thời gian phản ứng và chất phản ứng.

Sơ đồ phản ứng 2 thể hiện quy trình điều chế chung B để tổng hợp hợp chất (I) theo sáng chế.

Sơ đồ phản ứng 2



Các gốc A₁-A₄, Q, R¹, R⁶ và W có nghĩa như đã mô tả ở trên. X là bất kỳ nhóm rời chuyển nào và alk là gốc alkyl ví dụ như, metyl hoặc etyl. T là nhóm



trong đó các gốc Z¹, Z² và Z³ có nghĩa như đã nêu ở trên và dấu hoa thị là điểm liên kết với nhóm C=W.

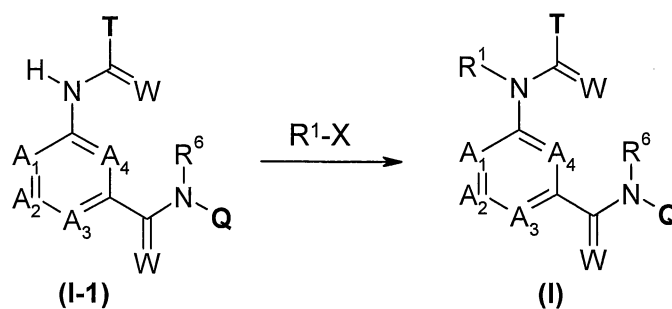
Hợp chất theo sáng chế thuộc loại (I) có thể được điều chế bằng cách cho amin có công thức cấu tạo chung (III) phản ứng với dẫn xuất của axit carboxylic đã hoạt hóa có công thức cấu tạo chung (VIII). Ở đây, sử dụng cùng một điều kiện như trong sự chuyển hóa (IV) và (V) thành (I) đã mô tả trong quy trình điều chế A về sự lựa chọn dung môi, điều kiện phản ứng, thời gian phản ứng và chất phản ứng.

Dẫn xuất của axit carboxylic đã hoạt hóa có công thức cấu tạo chung (VIII) có thể được điều chế bằng sự tổng hợp hai bước từ carboxylic este tương ứng có công thức cấu tạo chung (VII). Trong bước thứ nhất, chức axit carboxylic, được bảo vệ ở dạng este (O-Alk), của hợp chất (VII), phụ thuộc vào alkyl este sử dụng, được khử bảo vệ bằng chất phản ứng phù hợp [Greene's protective groups in organic synthesis, 4. Edition, P. G. M. Wuts, T. W. Greene, John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New

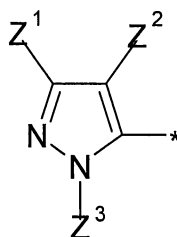
Jersey], và nhóm hydroxyl tự do của chức axit của (VIII-1) tạo thành được chuyển thành nhóm dôi chuyển X. Ở đây, có thể sử dụng cùng một quy trình như đã mô tả để điều chế (V). Hợp chất có công thức cấu tạo chung (VII) có thể được điều chế bằng cách cho amin có công thức cấu tạo chung (VI) phản ứng với dẫn xuất của axit carboxylic đã hoạt hóa có công thức cấu tạo chung (V). Ở đây, sử dụng cùng một điều kiện như điều kiện tổng hợp (I) đã mô tả trong quy trình điều chế A về sự lựa chọn dung môi, điều kiện phản ứng, thời gian phản ứng và chất phản ứng.

Sơ đồ phản ứng 3 thể hiện quy trình điều chế chung C để tổng hợp hợp chất (I) theo sáng chế.

Sơ đồ phản ứng 3



Các gốc A_1 - A_4 , Q, R^6 và W có nghĩa như đã mô tả ở trên. X là bất kỳ nhóm dôi chuyển nào ví dụ như, clo, brom hoặc iot. T là nhóm



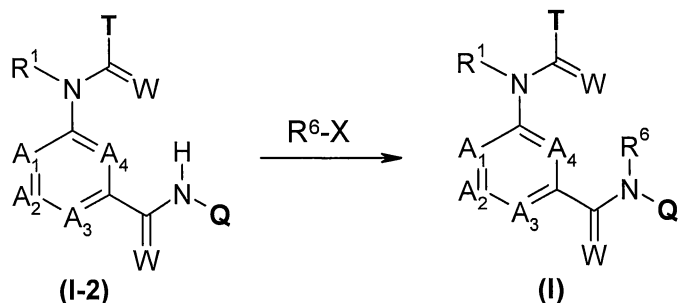
trong đó các gốc Z^1 , Z^2 và Z^3 có nghĩa như đã nêu ở trên và dấu hoa thị là điểm liên kết với nhóm $C=W$. R^1 là các gốc đã mô tả ở trên ngoại trừ hydro.

Hợp chất có công thức cấu tạo chung (I) trong đó $R^1 \neq H$ có thể có thể được điều chế từ hợp chất có công thức cấu tạo chung (I-1). Ở đây, có thể sử dụng các quy trình đã biết đến trong tài liệu [R^1 = alkyl & (het)arylalkyl tùy ý được thể: WO2008/061688; Journal of Heterocyclic Chemistry **1995**, 32(3), 835-839; WO2011/029808; WO2010/020432; US2010/0152192; WO2010/101949; WO2010/043377, Medicinal Chemistry Letters **2011**, 2(8), 632-637; Journal of

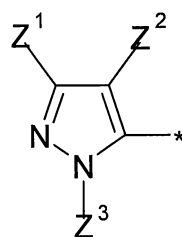
Heterocyclic Chemistry **1977**, 14(7), 1263-1265; WO2011/020193; WO2008/121602; WO2006/074924; WO2006/065794 | R1 = alkylcarbonyl & (het)aryl(alkyl)carbonyl tùy ý được thế: WO2010/015545; Journal of the Chemical Society, Perkin Transactions 1 **2002**, (2), 257-274; US 7951828 | R1 = alkoxycarbonyl & (het)aryl(alkyl)oxycarbonyl tùy ý được thế: WO2011/112731; WO2009/027393; Journal of Organic Chemistry **2011**, 76(8), 2502-2520 | R1 = alkynyl tùy ý được thế: Synthesis **2007**, (18), 2920-2923; Tetrahedron **2006**, 62(16), 38563871; Journal of the American Chemical Society **2006**, 128(14), 45864587; Chemical Communications (Cambridge, United Kingdom) **2010**, 46(8), 1269-1271; WO2009/027393 | R1 = alkenyl tùy ý được thế: Organic Chemistry: An Indian Journal **2010**, 6(1), 52-55; European Journal of Organic Chemistry **2009**, (1), 72-84; WO2006/067444; WO2005/049585].

Sơ đồ phản ứng 4 thể hiện quy trình điều chế chung D để tổng hợp hợp chất (I) theo sáng chế.

Sơ đồ phản ứng 4



Các gốc A₁-A₄, Q, R¹ và W có nghĩa như đã mô tả ở trên. X là bất kỳ nhóm rời chuyển nào, ví dụ như, clo, brom hoặc iot. T là nhóm

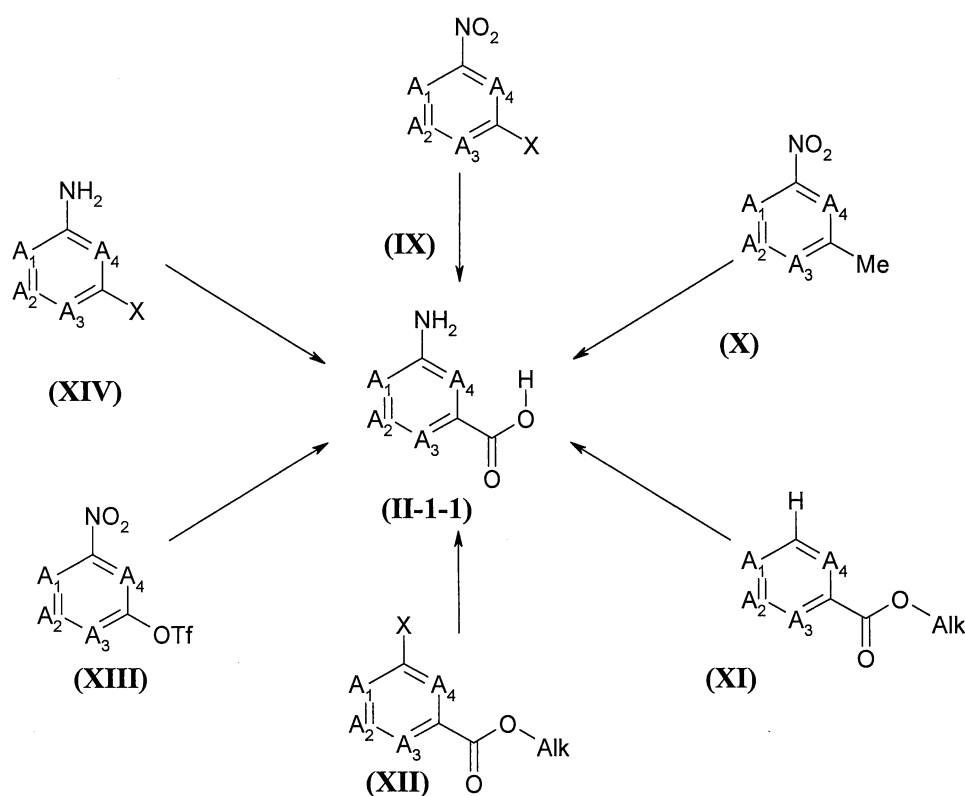


trong đó các gốc Z¹, Z² và Z³ có nghĩa như đã nêu ở trên và dấu hoa thị là điểm liên kết với nhóm C=W. R⁶ là các gốc đã mô tả ở trên.

Hợp chất có công thức cấu tạo chung (I) có thể được điều chế từ hợp chất có công thức cấu tạo chung (I-1). Ở đây, có thể sử dụng các quy trình đã đề cập trong quy trình điều chế C.

Hợp chất có công thức chung (II-1), (II-1-1) và (II-2) có thể được sử dụng làm tiền chất cho các chất có công thức chung (II). Các chất có công thức chung (II-1-1) thường được biết đến là hợp chất hóa học hữu cơ có thể thu được bằng quy trình tổng hợp đã thiết lập. Con đường tổng hợp phù hợp cho axit aminocarboxylic vòng có công thức chung (II-1-1) được thể hiện trong sơ đồ phản ứng 5.

Sơ đồ phản ứng 5



Hợp chất nitro- hoặc amino (di)thion đã halogen hóa, ví dụ, như được thể hiện bằng công thức (IX) và (XIV) có thể làm nguyên liệu ban đầu để điều chế axit aminocarboxylic có công thức cấu tạo chung (II-1-1). Ở đây, nhóm rời chuyển X được thay thế bằng nhóm xiano, và nhóm sau cùng được thủy phân axit hoặc bazơ. Sự trao đổi halogen/xiano có thể được thực hiện, ví dụ, bằng sự thế ái nhân ở vòng thơm bằng cách sử dụng loại xyanua ví dụ như, natri xyanua [US 4766219], hoặc

ngoài ra bằng phản ứng qua trung gian đồng [Journal of Antibiotics **1994**, 47(12), 145665].

Trong trường hợp hợp chất nitro (**IX**, **X**, và **XIII**), sau đó chức nitro có thể bị khử thành chức amino. Quy trình phù hợp để khử là sự hydro hóa và phản ứng qua trung gian kim loại ví dụ như, thiếc(II) clorua, bột sắt, bột kẽm và các hợp chất tương tự chúng.

Sự hydro hóa có thể được thực hiện trong dung môi phù hợp trong sự có mặt của chất xúc tác dưới áp suất khí hydro (áp suất chuẩn hoặc áp suất cao). Phù hợp để sử dụng làm chất xúc tác là chất xúc tác paladi ví dụ như, paladi trên than, chất xúc tác niken như Raney niken, chất xúc tác coban, chất xúc tác ruteni, chất xúc tác rodi, chất xúc tác platin và các hợp chất tương tự chúng. Dung môi phù hợp là nước, rượu như metanol và etanol, hydrocacbon thơm như benzen và toluen, ete mạch hở hoặc vòng như diethyl ete, dioxan và tetrahydrofuran, và cả este như etyl axetat. Có thể tiến hành khử trong phạm vi áp suất nằm trong khoảng từ 1 đến 100 ba (1.10^2 - 1.10^4 kPa), trong đó nhiệt độ có thể thay đổi trong khoảng từ -20°C đến điểm sôi của dung môi sử dụng. Phụ thuộc vào điều kiện phản ứng, thời gian phản ứng nằm trong khoảng từ vài phút đến 96 giờ.

Sự khử qua trung gian kim loại, ví dụ bằng thiếc(II) clorua, có thể được thực hiện theo quy trình đã mô tả trong Organic Syntheses Coll. Vol. (III), 453.

Hơn nữa, axit aminocarboxylic (đị) thơm có công thức cấu tạo chung (**II-1-1**) cũng có thể được điều chế từ các tiền chất metyl tương ứng thuộc loại (**X**) bằng sự oxy hóa. Chất oxy hóa phù hợp cho sự oxy này là, ví dụ, kali permanganat, natri dicromat, crom trioxit và các hợp chất tương tự chúng [Tetrahedron Letters **1995**, 36(25), 4369-72; Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters **2007**, 17(4), 1043-1046]. Cũng có thể sử dụng quy trình enzym cho các sự oxy hóa này [PCT Int. Appl., 9502061]. Sự khử chức nitro sau đó có thể được thực hiện tương tự như quy trình đã mô tả ở trên.

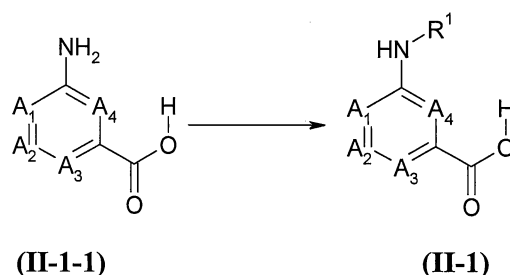
Phương pháp khác để điều chế axit aminocarboxylic (đị)thơm có công thức cấu tạo chung (**II-1-1**) là sự nitro hóa tiền chất của axit carboxylic được thể hiện bằng công

thức (XI) hoặc (XII) và sau đó khử chức nitro. Sự nitro hóa có thể được thực hiện bằng cách sử dụng các quy trình đã biết đến trong tài liệu [Justus Liebigs Annalen der Chemie **1958**, 611, 194-205; hoặc *Organikum*, Wiley-VCH, 22. Edition, 358ff]. Sự khử chức nitro sau đó đòi hỏi phải được thực hiện tương tự với quy trình đã mô tả ở trên.

Hơn nữa, axit aminocarboxylic (dị) thơm có công thức cấu tạo chung (II-1-1) có thể được điều chế từ các (hetero)aryl triflat tương ứng thuộc loại (XIII) bằng cách sử dụng quy trình có xúc tác paladi [Synthesis **2006**, (4), 594-596].

Hợp chất có công thức chung (II-1) có thể được điều chế từ hợp chất có công thức chung (II-1-1) bằng quy trình tổng hợp đã thiết lập. Con đường tổng hợp phù hợp cho axit aminocarboxylic vòng có công thức chung (II-1) được thể hiện trong sơ đồ phản ứng 6.

Sơ đồ phản ứng 6



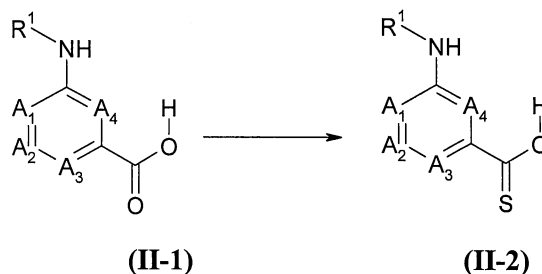
Các gốc A₁-A₄ có nghĩa như đã mô tả ở trên. Gốc R¹ là gốc đã mô tả ở trên ngoại trừ hydro.

Sự chuyển hóa, đã biết đến trong tài liệu, (II-1-1) thành (II-1) có thể diễn ra, không kể những quy trình khác, thông qua sự tạo nhóm amin khử [Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters **2005**, 15(21), 4752-4756; WO2010-142402; US2010-0324056] hoặc sự alkyl hóa trực tiếp [Tetrahedron Letters **1977**, (9), 771-774; Journal of the American Chemical Society **1997**, 119(9), 2315-2316; Journal of Combinatorial Chemistry **2006**, 8(6), 834-840].

Hợp chất có công thức chung (II-2) có thể được điều chế từ hợp chất có công thức chung (II-1) bằng quy trình tổng hợp đã thiết lập. Con đường tổng hợp phù hợp

cho axit aminocarboxylic có công thức chung (II-2) được thể hiện trong sơ đồ phản ứng 7.

Sơ đồ phản ứng 7

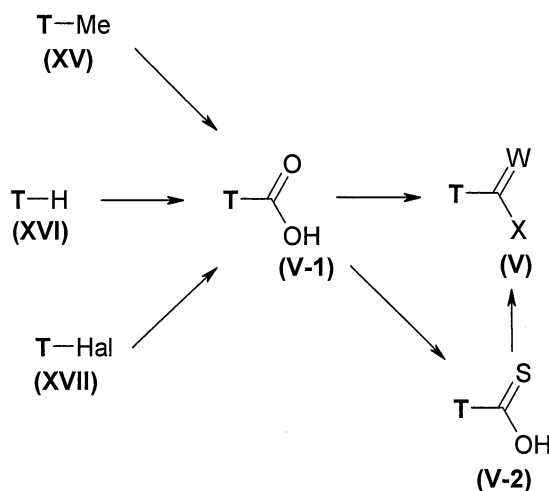


Các gốc A_1 - A_4 và R^1 có nghĩa như đã mô tả ở trên.

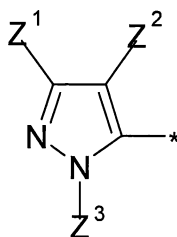
Sự chuyển hóa hợp chất có công thức chung (II-1) thành hợp chất có công thức chung (II-2) có thể được thực hiện tương tự với các phản ứng đã biết đến trong tài liệu [US2009-0023798; WO2009-044200; WO2010-085352].

Quy trình tổng hợp axit carboxylic dị vòng có công thức chung (V) phù hợp được thể hiện trong sơ đồ phản ứng 8.

Sơ đồ phản ứng 8



Gốc W có nghĩa như đã mô tả ở trên. Hal là halogen phù hợp, ví dụ brom hoặc iot. X là nhóm dimer chuyển phù hợp ví dụ như, clo. T là nhóm



trong đó các gốc Z^1 , Z^2 và Z^3 có nghĩa như đã nêu ở trên và dấu hoa thị là điểm liên kết với nhóm Me, giờ, Hal, COOH, C(=S)OH hoặc C(=W)X.

Axit carboxylic dị vòng có công thức cấu tạo chung (V-1) có thể được điều chế, không kể những chất khác khác, từ dẫn xuất methyl có công thức chung (XV) bằng sự oxy hóa chức methyl. Để thực hiện việc này, có thể sử dụng các quy trình vừa đề cập ở trên để oxy hóa nhóm methyl của hợp chất có công thức cấu tạo chung (X).

Axit carboxylic dị vòng có công thức cấu tạo chung (V-1) có thể được điều chế từ các tiền chất có công thức cấu tạo chung (XVI) bằng sự khử proton hóa sử dụng bazơ phù hợp và làm sạch carbanion tương ứng bằng cacbon dioxid [Journal of Medicinal Chemistry **2008**, 51(4), 937-947; Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters **2007**, 17(22), 6274-6279]. Bazơ phù hợp là, ví dụ, lithi diisopropylamit, n-butyllithi, s-butyllithi và các hợp chất tương tự chúng.

Cũng phù hợp cho quy trình đã mô tả ở trên để điều chế axit carboxylic dị vòng có công thức cấu tạo chung (V-1) là các dị vòng đã halogen hóa (XVII) phù hợp. Tuy nhiên, ở đây carbanion không được sinh ra do sự khử proton hóa mà do phản ứng thế nguyên tử H bằng kim loại [Angewandte Chemie, International Edition **2008**, 47(2), 311-315]. Ưu tiên cho phản ứng thế nguyên tử H bằng kim loại là n-butyllithi, t-butyllithi và isopropylmagie clorua.

Axit carboxylic dị vòng có công thức cấu tạo chung (V-1) cũng có thể được chuyển hóa từ các tiền chất đã halogen hóa có công thức cấu tạo chung (XVII) bằng phản ứng xúc tác paladi đã biết đến trong tài liệu thành carboxylic este dị vòng tương ứng [Russian Journal of Applied Chemistry **2007**, 80(4), 571-575].

Axit carboxylic dị vòng có công thức cấu tạo chung (V-1) có thể được điều chế thêm từ hợp chất đã halogen hóa có công thức cấu tạo chung (XVII) bằng phản ứng

thể xyanua và sau đó là thủy phân chức nitril bằng axit hoặc bazơ mạnh [WO 2005079801].

Axit thiocarboxylic dị vòng có công thức cấu tạo chung (V-2) có thể được điều chế từ (V-1) tương tự với phương pháp, đã biết đến trong tài liệu, được mô tả để điều chế hợp chất có công thức chung (II-2).

Dẫn xuất của axit carboxylic dị vòng đã hoạt hóa ví dụ như, carbonyl halogenua như được thể hiện bằng cấu trúc (V) có thể được điều chế bằng cách cho axit (thio)carboxylic vòng được thể hiện bằng công thức (V-1) và (V-2) phản ứng với chất halogen hóa như thionyl clorua, thionyl bromua, phosphoryl clorua, oxalyl clorua, phospho triclорua v.v.... [Organikum, Wiley-VCH, 22. Edition, 496ff].

Dẫn xuất của axit carboxylic đã hoạt hóa có công thức cấu tạo chung (II) có thể được điều chế bằng quy trình thường đã biết trong tài liệu từ axit carboxylic có công thức (II-1) [Organikum, Wiley-VCH, 22. Edition, 496ff; Chem. Ber. **1970**, 788; J. Am. Chem. Soc **1967**, 5012]. Các hợp chất có công thức (II-1) có bán trên thị trường hoặc có thể được điều chế bằng các quy trình đã biết trong tài liệu [Synthesis **2006**, (4), 594-596; Tetrahedron Letters **1995**, 36(25), 4369-72; Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters **2007**, 17(4), 1043-1046; PCT Int. Appl., 9502061, Journal of Organic Chemistry **1954**, 19, 357-64; WO 2001083459].

Hợp chất có công thức cấu tạo chung (III) có bán trên thị trường và/hoặc có thể được điều chế bằng các quy trình sau, mà đã biết đến trong tài liệu hoặc quy trình tương tự [Journal of Organic Chemistry **1990**, 55(14), 427681; WO 2005028429; WO 2005021485; hoặc Tetrahedron Letters **2010**, 12(9), 1944-1947; Tetrahedron **1999**, 55(24), 7625-7644].

Hợp chất có công thức cấu tạo chung (V) thường có bán trên thị trường và/hoặc có thể được điều chế bằng các quy trình đã biết trong tài liệu [Journal of Medicinal Chemistry **2008**, 51(4), 937-947; Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters **2007**, 17(22), 6274-6279; Russian Journal of Applied Chemistry **2007**, 80(4), 571-575; WO

2005079801; Journal of Organic Chemistry **2008**, 73(9), 3523-3529; Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters **2005**, 15(22), 4898-4906; US2006069270]

Hợp chất có công thức cấu tạo chung (**VI**) có thể được điều chế bằng quy trình đã biết đến trong tài liệu từ hợp chất có công thức cấu tạo chung (**II**) [Journal of the American Chemical Society **2001**, 123(34), 8177-8188; Inorganica Chimica Acta **2006**, 359(6), 1912-1922].

Các hợp chất có công thức cấu tạo chung từ (**IX**) đến (**XVII**) có bán trên thị trường và/hoặc đã được biết đến trong tài liệu chuyên môn thích hợp.

Chất oxy hóa để oxy hóa nhóm rượu đã được biết đến (tham khảo, ví dụ, Oxidizing agents in Organic Synthesis by Oxidation with Metal Compounds, Mijs, de Jonge, Plenum Verlag, New York, 1986; Manganese Compounds as Oxidizing Agents in Organic Chemistry, Arndt, Open Court Publishing Company, La Salle, IL, 1981; The Oxidation of Organic Compounds by Permanganat Ion và Hexavalent Crom, Lee, Open Court Publishing Company, La Salle, IL, 1980). Quá trình oxy hóa có thể được thực hiện, ví dụ, trong sự có mặt của permanganat (ví dụ, kali permanganat), oxit kim loại (ví dụ, mangan dioxit, crom oxit mà có thể được sử dụng, ví dụ, trong dipyrđincrom(VI) oxit là chất phản ứng Collin (tham khảo J. C. Collins et al., Tetrahedron Lett. 30, 3363-3366, 1968)). Cũng trong sự có mặt của pyridini cloromat (ví dụ, chất phản ứng Corey) (cũng tham khảo R. O. Hutchins et al., Tetrahedron Lett. 48, 4167-4170, 1977; D. Landini et al. Synthesis 134-136, 1979) hoặc ruteni tetroxit (tham khảo S.-I. Murahashi, N. Komiya Ruthenium-catalyzed Oxidation of Alkenes, Rượu, Amin, Amits, β -Lactams, Phenols và Hydrocacbon, in: Modern Oxidation Methods, Baekvall, Jan-Erling (Eds.), Wiley-VCH-Verlag GmbH & Co. KGaA, 2004). Cũng phù hợp là phản ứng oxy hóa khử siêu âm và sử dụng kali permanganat (tham khảo J. Yamawaki et al., Chem. Lett. 3, 379-380, 1983).

Tất cả các chất hỗ trợ phản ứng axit hoặc bazơ phù hợp đều có thể được sử dụng theo các quy trình đã mô tả trong tài liệu để tách khỏi/lấy nhóm bảo vệ SG ra. Khi nhóm bảo vệ loại carbamat được sử dụng cho nhóm amino, ưu tiên sử dụng chất hỗ trợ phản ứng axit. Khi nhóm bảo vệ t-butylcarbamate (nhóm BOC) được sử dụng, ví dụ, sử

dụng hỗn hợp của axit khoáng như axit clohydric, axit bromhydric, axit nitric, axit sulphuric, axit phosphoric hoặc axit hữu cơ như axit benzoic, axit formic, axit axetic, axit triflo axetic, axit metansulphonic, axit benzensulphonic hoặc axit toluensulphonic và chất làm loãng phù hợp như nước và/hoặc dung môi hữu cơ như tetrahydrofuran, dioxan, diclometan, cloroform, etyl axetat, etanol hoặc metanol. Ưu tiên đề xuất hỗn hợp của axit clohydric hoặc axit axetic với nước và/hoặc dung môi hữu cơ, như etyl axetat.

Đã biết rằng các phản ứng cụ thể và quy trình điều chế có thể được thực hiện một cách hiệu quả trong sự có mặt của chất làm loãng hoặc dung môi và chất hỗ trợ phản ứng bazơ hoặc axit. Cũng có thể sử dụng hỗn hợp của chất làm loãng hoặc dung môi. Chất làm loãng hoặc dung môi được sử dụng với lượng có lợi để hỗn hợp phản ứng còn lại dễ dàng có thể khuấy được trong toàn bộ phản ứng.

Chất làm loãng hoặc dung môi phù hợp để thực hiện các quy trình theo sáng chế là, theo nguyên tắc, tất cả dung môi hữu cơ đều trợ dưới điều kiện phản ứng cụ thể. Ví dụ bao gồm: halohydrocacbon (ví dụ, clohydrocacbon như tetracloetylen, tetracloetan, diclopropan, metylen clorua, diclobutan, cloroform, carbon tetracloetua, tricloetan, tricloetylen, pentacloetan, diflobenzen, 1,2-dicloetan, clobenzen, bromobenzen, diclobenzen, clotoluen, triclobenzen), rượu (ví dụ, metanol, etanol, isopropanol, butanol), ete (ví dụ, etyl propyl ete, metyl tert-butyl ete, n-butyl ete, anisol, phenetol, xyclohexyl metyl ete, dimetyl ete, dietyl ete, dipropyl ete, diisopropyl ete, di-n-butyl ete, diisobutyl ete, diisoamyl ete, etylen glycol dimetyl ete, tetrahydrofuran, dioxan, diclodietyl ete và polyete của etylen oxit và/hoặc propylen oxit), amin (ví dụ, trimetyl-, trietyl-, tripropyl-, tributylamin, N-metylmorpholin, pyridin và tetrametylendiamin), nitrohydrocacbon (ví dụ, nitrometan, nitroetan, nitropropan, nitrobenzen, clonitrobenzen, o-nitrotoluen); nitril (ví dụ, axetonitril, propionitril, butyronitril, isobutyronitril, benzonitril, m-clobenzonitril), tetrahydrothiophen dioxit, dimetyl sulphoxit, tetrametylen sulphoxit, dipropyl sulphoxit, benzyl metyl sulphoxit, diisobutyl sulphoxit, dibutyl sulphoxit, diisoamyl sulphoxit, sulphon (ví dụ, dimetyl, dietyl, dipropyl, dibutyl, diphenyl, dihexyl, metyl etyl, etyl propyl, etyl isobutyl và pentametylen sulphon), hydrocacbon béo, vòng béo hoặc thơm (ví dụ, pentan, hexan,

heptan, octan, nonan và hydrocacbon kỹ thuật), và cả các chất được gọi là " spirit trắng" với các thành phần có điểm sôi nằm trong khoảng từ, ví dụ, từ 40°C đến 250°C, xylen, phân đoạn dầu mỏ với điểm sôi nằm trong khoảng từ 70°C đến 190°C, xyclohexan, metylxyclohexan, petroleum ete, ligroin, octan, benzen, toluen, clobenzen, bromobenzen, nitrobenzen, xylen, este (ví dụ, metyl, etyl, butyl và isobutyl axetat, dimetyl, dibutyl và etylen carbonat); amit (ví dụ, hexametylphosphoric triamit, formamit, N-metylformamit, *N,N*-dimetylformamit, *N,N*-dipropylformamit, *N,N*-dibutylformamit, N-metylpyrolidin, N-metylcaprolactam, 1,3-dimetyl-3,4,5,6-tetrahydro-2(1H)-pyrimidin, octylpyrolidon, octylcaprolactam, 1,3-dimetyl-2-imidazolinedion, N-formylpiperidin, *N,N'*-diformylpiperazin) và keton (ví dụ, axeton, axetophenon, metyl etyl keton, metyl butyl keton).

Chất hỗ trợ phản ứng bazơ được sử dụng để thực hiện quy trình theo sáng chế có thể là tất cả các chất kết dính axit phù hợp. Ví dụ bao gồm: hợp chất kim loại kiềm thổ hoặc kim loại kiềm (ví dụ, hydroxit, hydrua, oxit và carbonat của lithi, natri, kali, magie, canxi và bari), bazơ amidin hoặc bazơ guanidin (ví dụ, 7-metyl-1,5,7-triazabixyclo[4.4.0]dec-5-en (MTBD); diazabixyclo[4.3.0]nonen (DBN), diazabixyclo[2.2.2]octan (DABCO), 1,8-diazabixyclo[5.4.0]undecen (DBU), xyclohexyltetrabutylguanidin (CyTBG), xyclohexyltetrametylguanidin (CyTMG), *N,N,N,N*-tetrametyl-1,8-naphthalendiamin, pentametylpiperidin) và amin, cụ thể tertiary amin (ví dụ, trietylamin, trimetylamin, tribenzylamin, triisopropylamin, tributylamin, trixyclohexylamin, triamylamin, trihexylamin, *N,N*-dimetylanilin, *N,N*-dimetyltoluidin, *N,N*-dimetyl-p-aminopyridin, N-metylpyrolidin, N-metylpiperidin, N-metylimidazol, N-metylpyrazol, N-metylmorpholin, N-metylhexametylendiamin, pyridin, 4-pyrolidinopyridin, 4-dimetylaminopyridin, quinolin, α -picolin, β -picolin, isoquinolin, pyrimidin, acridin, *N,N,N',N'*-tetrametylendiamin, *N,N,N',N'*-tetraetylendiamin, quinoxalin, N-propyldiisopropylamin, N-etyldiisopropylamin, *N,N'*-dimetylxyclohexylamin, 2,6-lutidin, 2,4-lutidin hoặc trietyldiamin).

Chất hỗ trợ phản ứng axit sử dụng để thực hiện quy trình theo sáng chế bao gồm tất cả axit khoáng (ví dụ, axit hydrohalic như axit flohydric, axit clohydric, axit bromhydric hoặc axit hydroiodic, và cả axit sulphuric, axit phosphoric, axit chứa

phospho, axit nitric), axit Lewis (ví dụ, nhôm(III) clorua, boron triflorua hoặc ete của nó, titan(IV) clorua, thiếc(IV) clorua) và axit hữu cơ (ví dụ, axit formic, axit axetic, axit propionic, axit malonic, axit lactic, axit oxalic, axit fumaric, axit adipic, axit stearic, axit tartaric, axit oleic, axit metansulphonic, axit benzoic, axit benzensulphonic hoặc axit para-toluensulphonic).

Nếu nhóm bảo vệ được đưa vào sơ đồ phản ứng, tất cả các nhóm bảo vệ thường được biết đến đều được sử dụng. Cụ thể là các chất được mô tả bởi Greene T. W., Wuts P. G. W. in *Protective Groups in Organic Synthesis*; John Wiley & Sons, Inc. 1999, "Protection for the hydroxyl group including 1,2- and 1,3-diols".

Cũng phù hợp là các nhóm bảo vệ

thuộc loại methyl ete được thể (ví dụ, metoxymethyl ete (MOM), methylthiomethyl ete (MTM), (phenyldimethylsilyl)metoxymethyl ete (SNOM-OR), benzyloxymethyl ete (BOM-OR) para-metoxybenzyloxymethyl ete (PMBM-OR), para-nitrobenzyloxymethyl ete, ortho-nitrobenzyloxymethyl ete (NBOM-OR), (4-metoxyphenoxy)methyl ete (p-AOM-OR), guaiacolmethyl ete (GUM-OR), t-butoxymethyl ete, 4-pentyloxymethyl ete (POM-OR), silyloxymethyl ete, 2-metoxymethyl ete (MEM-OR), 2,2,2-tricloetoxymethyl ete, bis(2-cloetoxy)methyl ete, 2-(trimethylsilyl)etoxymethyl ete (SEM-OR), metoxymethyl ete (MM-OR));

thuộc loại etyl ete được thể (ví dụ, 1-etoxyetyl ete (EE-OR), 1-(2-cloetoxy)etyl ete (CEE-OR), 1-[2-(trimethylsilyl)etoxy]etyl ete (SEE-OR), 1-metyl-1-metoxymetyl ete (MIP-OR), 1-metyl-1-benzyloxyetyl ete (MBE-OR), 1-metyl-1-benzyloxy-2-floetyl ete (MIP-OR), 1-metyl-1-phenoxyetyl ete, 2,2,2-tricloetyl ete, 1,1-dianisyl-2,2,2-tricloetyl ete (DATE-OR), 1,1,1,3,3,3-hexaflo-2-phenylisopropyl ete (HIP-OR), 2-trimethylsilyl etyl ete, 2-(benzylthio)etyl ete, 2-(phenylselenyl)etyl ete), ete (ví dụ, tetrahydropyranyl ete (THP-OR), 3-bromotetrahydropyranyl ete (3-BrTHP-OR), tetrahydrothiopyranyl ete, 1-metoxycyclohexyl ete, 2- và 4-picolyl ete, 3-metyl-2-picolyl-N-oxido ete, 2-quinolinylmetyl ete (Qm-OR), 1-pyrenylmetyl ete, diphenylmetyl ete (DPM-OR), para, para'-dinitrobenzhydryl ete (DNB-OR), 5-dibenzosuberyl ete, triphenylmetyl ete (Tr-OR), alpha-naphthyldiphenylmetyl ete, para-metoxyphenyldiphenylmetyl ete (MMTrOR), di(para-metoxyphenyl)phenylmetyl ete

(DMTr-OR), tri(para-metoxyphenyl)phenylmetyl ete (TMTr-OR), 4-(4'-bromophenaxyloxy)phenyldiphenylmetyl ete, 4,4',4''-tris(4,5-diclophthalimidophenyl)metyl ete (CPTTr-OR), 4,4',4''-tris(benzoyloxyphenyl)metyl ete (TBTr-OR), 4,4'-dimetoxo-3''-[N-(imidazolylmetyl)]trityl ete (IDTr-OR), 4,4'-dimetoxo-3''-[N-(imidazolyl-etyl)carbamoyl]trityl ete (IETTr-OR), 1,1-bis(4-metoxo-phenyl)-1'-pyrenylmetyl ete (Bmpm-OR), 9-anthryl ete, 9-(9-phenyl)xanthenyl ete (Pixyl-OR), 9-(9-phenyl-10-oxo)anthryl (tritylone ete), 4-metoxytetrahydropyranyl ete (MTHP-OR), 4-metoxytetrahydrothiopyranyl ete, 4-metoxytetrahydrothiopyranyl S,S-dioxit, 1-[(2-clo-4-metyl)phenyl]-4-metoxypiperidin-4-yl ete (CTMP-OR), 1-(2-flophenyl)-4-metoxypiperidin-4-yl ete (Fpmp-OR), 1,4-dioxan-2-yl ete, tetrahydrofuranyl ete, tetrahydrothiofuranyl ete, 2,3,3a,4,5,6,7,7a-octahydro-7,8,8-trimetyl-4,7-metanbenzofuran-2-yl ete (MBF-OR), t-butyl ete, allyl ete, propargyl ete, para-clophenyl ete, para-metoxo-phenyl ete, para-nitrophenyl ete, para-2,4-dinitrophenyl ete (DNP-OR), 2,3,5,6tetraflo-4-(triflometyl)phenyl ete, benzyl ete (Bn-OR));

thuộc loại benzyl ete được thể (ví dụ, para-metoxibenzylyl ete (MPM-OR), 3,4-dimetoxibenzylyl ete (DMPM-OR), ortho-nitrobenzylyl ete, para-nitrobenzylyl ete, para-halobenzylyl ete, 2,6diclobenzylyl ete, para-aminoaxylbenzylyl ete (PAB-OR), para-azidobenzylyl ete (Azb-OR), 4-azido-3-clobenzylyl ete, 2-triflometylbenzylyl ete, para-(metylsulphinylyl)benzylyl ete (Msib-OR));

thuộc loại silyl ete (ví dụ, trimetylsilyl ete (TMS-OR), trietylsilyl ete (TES-OR), triisopropylsilyl ete (TIPS-OR), dimetylisopropylsilyl ete (IPDMS-OR), dietylisopropylsilyl ete (DEIPS-OR), dimetylhexylsilyl ete (TDS-OR), t-butyl dimetylsilyl ete (TBDMS-OR), t-butyl diphenylsilyl ete (TBDPS-OR), tribenzylsilyl ete, tri-para-xylylsilyl ete, triphenylsilyl ete (TPS-OR), diphenylmetylsilyl ete (DPMS-OR), di-t-butylmetylsilyl ete (DTBMS-OR), tris(trimetylsilyl)silyl ete (sisyl ete), di-t-butylmetylsilyl ete (DTBMS-OR), tris(trimetylsilyl)silyl ete (sisyl ete), (2-hydroxytyryl)dimetylsilyl ete (HSDMS-OR), (2-hydroxytyryl)diisopropylsilyl ete (HSDIS-OR), t-butylmetoxyphenylsilyl ete (TBMPS-OR), t-butoxydiphenylsilyl ete (DPTBOS-OR));

thuộc loại este (ví dụ, format este, benzoylformat este, axetat este (Ac-OR), cloaxetat este, dicloaxetat este, tricloaxetat este, trifloaxetat este, (TFA-OR), metoxyaxetat este, triphenylmetoxyaxetat este, phenoxyaxetat este, para-clophenoxyaxetat este, phenylaxetat este, diphenylaxetat este (DPA-OR), nicotinat este, 3-phenylpropionate este, 4-pentoat este, 4-oxopentoat este (levulinate) (Lev-OR) 4,4-(etylendithio)pentanoat este (LevS-OR), 5-[3-bis(4-metoxypheyl)hydroxymetoxypheoxy]levulinat este, pivaloat este (Pv-OR), 1-adamantanoat este, crotonat este, 4-metoxycrotonat este, benzoat este (Bz-OR), para-phenylbenzoat este, 2,4,6-trimetylbenzoat este (mesitoat), 4-(metylthiometoxi)butyrat este (MTMB-OR), 2-(metylthiometoxymetyl)benzoat este (MTMT-OR),

thuộc loại este (ví dụ, metyl carbonat, metoxymetyl carbonat, 9-fluorenylmetyl carbonat (Fmoc-OR), etyl carbonat, 2,2,2-tricloetyl carbonat (Troc-OR), 1,1-dimetyl-2,2,2-tricloetyl carbonat (TCBOC-OR), 2-(trimetylsilyl)etyl carbonat (TMS-OR), 2-(phenylsulphonyl)etyl carbonat (Ps-OR), 2-(triphenylphosphonio)etyl carbonat (Peoc-OR), t-butyl carbonat (Boc-OR), isobutyl carbonat, vinyl carbonat, allyl carbonat (Alloc-OR), para-nitrophenyl carbonat, benzyl carbonat (Z-OR), para-metoxibenzyl carbonat, 3,4-dimetoxibenzyl carbonat, ortho-nitrobenzyl carbonat, para-nitrobenzyl carbonat, 2-dansyletyl carbonat (Dnseoc-OR), 2-(4-nitrophenyl)etyl carbonat (Npeoc-OR), 2-(2,4-dinitrophenyl)etyl carbonat (Dnpeoc)), và

thuộc loại sulphat (ví dụ, allylsulphonat (Als-OR), metansulphonat (Ms-OR), benzylsulphonat, tosylat (Ts-OR), 2-[(4-nitrophenyl)etyl]sulphonat (Npes-OR)).

Chất xúc tác phù hợp để thực hiện sự hydro hóa xúc tác theo sáng chế là tất cả các chất xúc tác sự hydro hóa thông thường ví dụ như, chất xúc tác platin (ví dụ, tấm platin, bột platin, muối platin, platin keo, platin oxit, dây platin), chất xúc tác paladi (ví dụ, bột paladi, muối paladi, paladi oxit, paladi/carcon, paladi keo, paladi/bari sulphat, paladi/bari carbonat, paladi hydroxit, chất xúc tác niken (ví dụ, niken khử, niken oxit, Raney niken), chất xúc tác ruteni, chất xúc tác coban (ví dụ, coban khử, Raney coban), chất xúc tác đồng (ví dụ, đồng khử, đồng Raney, đồng Ullmann). Ưu tiên đề xuất việc sử dụng chất xúc tác kim loại quý (ví dụ, chất xúc tác platin và paladi hoặc ruteni), mà có thể được sử dụng cho mục đích phù hợp (ví dụ, cacbon hoặc silicon), chất xúc tác

rodi (ví dụ, tris(triphenylphosphin)rodi(I) clorua trong sự có mặt của triphenylphosphin). Hơn nữa, có thể sử dụng "chất xúc tác sự hydro hóa không đối xứng" (ví dụ, chất xúc tác chứa các phối tử diphosphin không đối xứng như (2S,3S)-(-)-2,3-bis(diphenylphosphino)butan [(S,S)-chiraphos] hoặc (R)-(+)-2,2'- hoặc (S)-(-)-2,2'-bis(diphenylphosphino)-1,1'-binaphtalen [R(+)-BINAP hoặc S(-)-BINAP]), qua đó tỷ lệ chất đồng phân trong hỗn hợp chất đồng phân tăng lên hoặc sự tạo thành chất đồng phân khác gần như bị ngăn cản hoàn toàn.

Muối của hợp chất theo sáng chế được điều chế bằng các phương pháp chuẩn. Muối cộng axit điển hình là, ví dụ, muối được tạo thành từ phản ứng với axit vô cơ, ví dụ như, axit sulphuric, axit clohydric, axit bromhydric, axit phosphoric, hoặc axit carboxylic vô cơ như axit axetic, axit triflo axetic, axit xitric, axit succinic, axit butyric, axit lactic, axit formic, axit fumaric, axit maleic, axit malonic, axit camphoric, axit oxalic, axit phtalic, axit propionic, axit glycolic, axit glutaric, axit stearic, axit salixylic, axit sorbic, axit tartaric, axit xinamic, axit valeric, axit picric, axit benzoic hoặc axit sulphonic hữu cơ như axit metansulphonic và 4-axit toluensulphonic.

Cũng điển hình là muối của hợp chất theo sáng chế được tạo thành từ bazơ hữu cơ, ví dụ như, pyridin hoặc trietylamin, hoặc muối được tạo thành từ bazơ vô cơ, ví dụ như, hydrua, hydroxit hoặc carbonat của natri, lithi, canxi, magie hoặc bari, với điều kiện hợp chất có công thức chung (I) có phần cấu trúc phù hợp để tạo muối này.

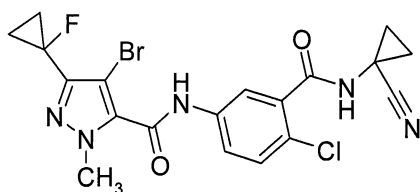
Phương pháp tổng hợp để điều chế N-oxit và t-amin dị vòng đã được biết đến. Sau đó có thể thu được chúng bằng cách sử dụng axit peroxit (ví dụ, axit peraxetic và axit meta-cloperbenzoic (MCPBA), hydro peroxit), alkyl hydroperoxit (ví dụ, t-butyl hydroperoxit), natri perborat và dioxiran (ví dụ, dimetyldioxiran). Các phương pháp này đã được mô tả, ví dụ, bởi T. L. Gilchrist, in *Comprehensive Organic Synthesis*, Vol. 7, pp. 748-750, 1992, S. V. Ley, (Ed.), Pergamon Press; M. Tisler, B. Stanovnik, in *Comprehensive Heterocyclic Chemistry*, Vol. 3, pp. 18-20, 1984, A. J. Boulton, A. McKillop, (Eds.), Pergamon Press; M. R. Grimmett, B. R. T. Keene in *Advances in Heterocyclic Chemistry*, Vol. 43, pp. 149-163, 1988, A. R. Katritzky, (Ed.), Academic Press; M. Tisler, B. Stanovnik, in *Advances in Heterocyclic Chemistry*, Vol. 9, pp.

285-291, 1968, A. R. Katritzky, A. J. Boulton (Eds.), Academic Press; G. W. giờ. Cheeseman, E. S. G. Werstiuk in *Advances in Heterocyclic Chemistry*, Vol. 22, pp. 390-392, 1978, A. R. Katritzky, A. J. Boulton, (Eds.), Academic Press.

Ví dụ thực hiện sáng chế

Quy trình điều chế A

Ví dụ (1) 4-Bromo-N-{4-clo-3-[(1-xyanoxycyclopropyl)carbamoyl]phenyl}-3-(1-floxyccyclopropyl)-1-metyl-1H-pyrazol-5-carboxamit



120mg (0,45mmol) axit 4-bromo-3-(1-floxyccyclopropyl)-1-metyl-1H-pyrazol-5-carboxylic được tạo huyền phù trong 20ml diclometan tinh khiết để phân tích, và 0,02ml *N,N*-dimetylformamit tinh khiết để phân tích được bổ sung vào. 0,119ml (1,36mmol) oxalyl clorua được bổ sung nhỏ giọt vào hỗn hợp này. Sau đó hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 30 phút và sau đó khuấy dưới nhiệt độ hồi lưu trong 30 phút. Sau khi làm lạnh, hỗn hợp phản ứng được cô đặc dưới áp suất giảm trong thiết bị làm bay hơi kiểu quay. Sản phẩm thô thu được theo cách này được để phản ứng luôn mà không cần tinh chế thêm.

Ban đầu 108mg (0,45mmol) 5-amino-2-clo-*N*-(1-xyanoxycyclopropyl)benzamit và 92mg (0,68mmol) bạc(I) xyanua được nạp vào trong 10ml diclometan tinh khiết để phân tích Dung dịch chứa 129mg (0,45mmol) 4-bromo-3-(1-floxyccyclopropyl)-1-metyl-1H-pyrazol-5-carbonyl clorua trong 10ml diclometan tinh khiết để phân tích được bổ sung nhỏ giọt vào huyền phù này. Hỗn hợp phản ứng được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 16 giờ và sau đó được lọc qua silicagel, và bánh lọc được rửa bằng etyl axetat. Dung môi được loại bỏ dưới áp suất giảm trong thiết bị làm bay hơi kiểu quay.

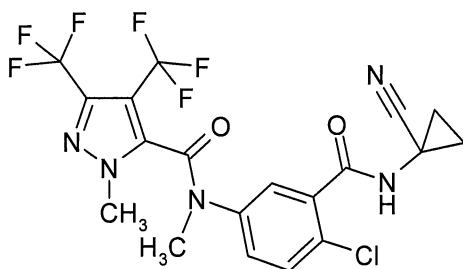
Quy trình này cho ra 170mg (78%) 4-bromo-*N*-{4-clo-3-[(1-xyanoxycyclopropyl)carbamoyl]phenyl}-3-(1-floxyccyclopropyl)-1-metyl-1H-pyrazol-5-carboxamit là chất rắn không màu.

$^1\text{H-NMR}$ (400MHz, d_6DMSO): δ = 10,96 (s, 1H), 9,49 (s, 1H), 7,85 (d, 1H), 7,74 (dd, 1H), 7,55 (d, 1H), 3,93 (s, 3H), 1,57-1,61 (m, 2H), 1,40-1,45 (m, 2H), 1,23-1,28 (m, 2H), 1,08-1,11 (m, 2H) ppm.

HPLC-MS^a): logP = 2,50, phổ khối (m/z) = 482 $[\text{M}+\text{H}]^+$.

Quy trình điều chế B

Ví dụ (2) *N*-{4-Clo-3-[(1-xyanxyclopropyl)carbamoyl]phenyl}-*N*,1-dimetyl-3,4-bis(triflometyl)-1H-pyrazol-5-carboxamit



150,0mg (0,29mmol) axit 2-clo-5-(metyl{[1-metyl-3,4-bis(triflometyl)-1H-pyrazol-5-yl]carbonyl}amino) benzoic được tạo huyền phù trong 5,0ml diclometan tinh khiết để phân tích 0,02ml *N,N*-dimetylformamit tinh khiết để phân tích và 0,075ml (0,86mmol) oxalyl clorua sau đó được bổ sung lần lượt vào huyền phù này. Hỗn hợp phản ứng được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 0,5 giờ và sau đó được gia nhiệt dưới nhiệt độ hồi lưu trong 40 phút. Dung môi được loại bỏ dưới áp suất giảm trong thiết bị làm bay hơi kiểu quay. 2-clo-5-(metyl{[1-metyl-3,4-bis(triflometyl)-1H-pyrazol-5-yl]carbonyl}amino)benzoyl clorua tạo thành được sử dụng cho bước tổng hợp sau đó mà không cần tinh chế thêm.

Đầu tiên 68,3mg (0,58mmol) 1-aminoxyclopropancarbonitril hydroclorua được nạp vào 5,0ml diclometan tinh khiết để phân tích, và sau đó 0,148ml (0,86mmol) *N*-etylidiisopropylamin và 156mg 2-clo-5-(metyl{[1-metyl-3,4-bis(triflometyl)-1H-pyrazol-5-yl]carbonyl}amino)benzoyl clorua (0,29mmol) đã hòa tan trong 5,0ml diclometan tinh khiết để phân tích được bổ sung vào. Phản ứng được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 16 giờ. Dung dịch phản ứng được pha loãng bằng 30ml etyl axetat. Pha hữu cơ được rửa hai lần bằng 1N axit clohydric, một lần bằng 1N dung dịch nước natri hydroxit và một lần bằng dung dịch natri clorua bão hòa. Pha hữu cơ được làm

khô bằng magie sulphat và được lọc và dung môi được loại bỏ trong thiết bị làm bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm.

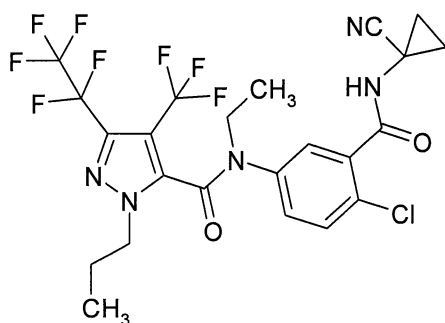
Sản phẩm thô được tinh chế bằng HPLC điều chế. Quy trình này cho ra 64mg (45%) *N*-{4-clo-3-[(1-xyanoxycyclopropyl)carbamoyl]phenyl}-*N*,1-dimetyl-3,4-bis(triflometyl)-1*H*-pyrazol-5-carboxamit là chất rắn không màu.

$^1\text{H-NMR}$ (400MHz, d_3 -axetonitril, hỗn hợp của các amit được tạo cấu hình *cis*- và *trans*): $\delta = 7,42\text{--}7,66$ (m, 2H), 7,40 (d, 1H), 7,29 (d, 2H), 7,18 (dd, 1H), 3,83 & 3,99 (2 s, cùng với 3H), 3,46 & 3,23 (2 s, cùng với 3H), 1,54-1,60 (m, 2H), 1,25-1,37 (m, 2H) ppm.

HPLC-MS^a): logP = 2,81, phổ khối (m/z) = 494 $[\text{M}+\text{H}]^+$.

Quy trình điều chế C

Ví dụ (50) *N*-{4-Clo-3-[(1-xyanoxycyclopropyl)carbamoyl]phenyl}-*N*-etyl-3-(pentaflöetyl)-1-propyl-4-(triflometyl)-1*H*-pyrazol-5-carboxamit



70mg (0,13mmol) *N*-{4-clo-3-[(1-xyanoxycyclopropyl)carbamoyl]phenyl}-3-(pentaflöetyl)-1-propyl-4-(triflometyl)-1*H*-pyrazol-5-carboxamit và 35mg (0,14mmol) kali carbonat được tạo huyền phù trong 1,4ml *N,N*-dimetylformamit tinh khiết để phân tích Trong khoảng thời gian 16 giờ, tổng cộng 29mg (0,19mmol) iodoetan được bổ sung từ từ vào hỗn hợp này. Sau khi bổ sung vào, dung dịch phản ứng được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 20 giờ. Hỗn hợp phản ứng được pha loãng bằng nước, và pha nước được chiết ba lần bằng etyl axetat. Các pha hữu cơ kết hợp được rửa hai lần

bằng dung dịch natri clorua bão hòa, được làm khô bằng natri sulphat và được lọc. Dung môi được loại bỏ trong thiết bị làm bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm.

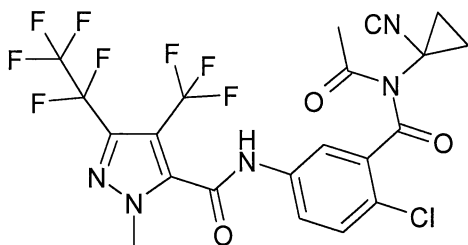
Sản phẩm thô được tinh chế bằng sắc ký cột trên silicagel. Quy trình này cho ra 30mg (41%) *N*-{4-clo-3-[(1-xyanoxyclopropyl)carbamoyl]phenyl}-*N*-etyl-3-(pentafluetyl)-1-propyl-4-(triflometyl)-1*H*-pyrazol-5-carboxamit là chất rắn không màu.

¹H-NMR (400MHz, d₆DMSO, hỗn hợp của các amit được tạo cấu hình *cis*- và *trans*): δ = 9,56 & 9,42 (2s, cùng với 1H), 7,69 & 7,56 (2d, cùng với 1H), 7,63 & 7,42 (2d, cùng với 1H), 7,48 & 7,28 (2dd, cùng với 1H), 3,52-4,32 (m, 4H), 0,79-1,87 (m, 12H) ppm.

HPLC-MS ^{a)}: logP = 4,06, phổ khối (m/z) = 586 [M+H]⁺.

Quy trình điều chế D

Ví dụ (40) N-{3-[*Axetyl*(1-xyanoxyclopropyl)carbamoyl]-4-clophenyl}-1-metyl-3-(pentafluetyl)-4-(triflometyl)-1*H*-pyrazol-5-carboxamit



300mg (0,57mmol) *N*-{4-clo-3-[(1-xyanoxyclopropyl)carbamoyl]phenyl}-1-metyl-3-(pentafluetyl)-4-(triflometyl)-1*H*-pyrazol-5-carboxamit được hòa tan trong 6,0ml diclometan tinh khiết để phân tích và được làm lạnh trong bể nước đá. 0,17ml (0,99mmol) *N*-etyldiisopropylamin và 49mg (0,62mmol) axetyl clorua được bổ sung lần lượt vào dung dịch này. Sau đó, hỗn hợp phản ứng được làm ấm đến nhiệt độ trong phòng và được khuấy trong 16 giờ. Dung dịch phản ứng được pha loãng bằng diclometan và sau đó được rửa bằng nước. Pha hữu cơ được làm khô bằng natri

sulphat và được lọc, và dung môi được loại bỏ trong thiết bị làm bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm.

Sản phẩm thô được tinh chế bằng HPLC điều chế. Quy trình này cho ra 130mg (40%) *N*-{3-[axetyl(1-xyanoxyclopropyl)carbamoyl]-4-clophenyl}-1-metyl-3-(pentafluoetyl)-4-(triflometyl)-1*H*-pyrazol-5-carboxamit là chất rắn không màu.

$^1\text{H-NMR}$ (400MHz, d_6DMSO): $\delta = 11,49$ (s, 1H), 7,90 (d, 1H), 7,70 (dd, 1H), 7,57 (d, 1H), 4,03 (s, 3H), 2,49 (s, 3H), 1,85-1,91 (m, 2H), 1,57-1,67 (m, 2H) ppm.

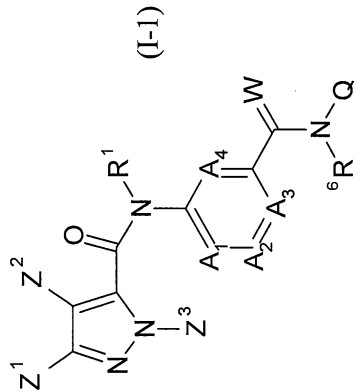
HPLC-MS^{a)}: logP = 3,81, phổ khối (m/z) = 572 $[\text{M}+\text{H}]^+$.

a) Chú ý về việc xác định các trị số logP và phát hiện khối lượng. Việc xác định các trị số logP cụ thể được thực hiện theo EEC Directive 79/831 Annex V.A8 bằng HPLC (sắc ký lỏng hiệu suất cao) trên cột pha đảo (C18). Hệ Agilent 1100 LC; 50*4.6 Zorbax Eclipse Plus C18 1,8 micron; pha động A: axetonitril (0,1% axit formic); pha động B: nước (0,09% axit formic); pha tuyến tính từ 10% axetonitril đến 95% axetonitril trong 4,25 phút, sau đó 95% axetonitril trong thêm 1,25 phút nữa; nhiệt độ lò 55°C; lưu lượng: 2,0 ml/phút. Phát hiện khối lượng thông qua hệ thống Agilent MSD.

b) Chú ý về việc xác định các trị logP và phát hiện khối lượng. Các trị số log P cụ thể được xác định theo EEC Directive 79/831 Annex V.A8 by HPLC (Sắc ký lỏng hiệu suất cao) bằng cách sử dụng cột pha đảo (C18). HP1100; 50*4,6 Zorbax Eclipse Plus C18 1,8 micron; pha động A: axetonitril (0,1% axit formic); pha động B: nước (0,08% axit formic); pha tuyến tính từ 5% axetonitril đến 95% axetonitril trong 1,70 phút, sau đó là 95% axetonitril trong 1,00 phút nữa; nhiệt độ lò 55°C; lưu lượng: 2,0 ml/phút. Phát hiện khối lượng thông qua phát phát hiện khối lượng Micromass ZQ2000 của Waters.

Các hợp chất được liệt kê trong Bảng 1 & 2 được điều chế bằng cách sử dụng các quy trình điều chế từ A đến D đã mô tả ở trên.

Bảng 1



Ví dụ số	Z ¹	Z ²	Z ³	R ¹	A ¹	A ²	A ³	A ⁴	W	R ⁶	Q	logP	Khối [m/z] 1
1	1-floxyclopropyl	Br	Me	H	CH	CH	CCl	CH	O	H	1-xyanoxyclopropyl	2,50 ^{a)}	482 ^{a)}
2	CF ₃	CF ₃	Me	Me	CH	CH	CCl	CH	O	H	1-xyanoxyclopropyl	2,81 ^{a)}	494 ^{a)}
3	1-cloxycl opropyl	Cl	Me	Me	CH	CH	CCl	CH	O	H	1-xyanoxyclopropyl	2,46 ^{a)}	466 ^{a)}
4	pentaflo etyl	CF ₃	Me	Me	CH	CH	CCl	CH	O	Et	1-xyanoxyclopropyl	3,77 ^{a)}	572 ^{a)}

Vị đặt số	Z ¹	Z ²	Z ³	R ¹	A ¹	A ²	A ³	A ⁴	W	R ⁶	Q	logP	Khối [m/z] 1
5	pentafl etyl	CF ₃	Me	Me	CH	CH	CCl	CH	O	M	1- xyanoxyclo propyl	3,59 ^a	558 ^a
6	pentafl etyl	CF ₃	Me	Et	CH	CH	CCl	CH	O	H	1- xyanoxyclo propyl	3,36 ^a	558 ^a
7	pentafl etyl	CF ₃	Me	H	CH	CH	CCl	CH	O	H	1- xyanoxyclo butyl	3,55 ^a	544 ^a
8	pentafl etyl	CF ₃	Me	Me	CH	CH	CCl	CH	O	H	1- xyanoxyclo propyl	3,21 ^a	544 ^a
9	CF ₃	CF ₃	Me	H	CH	CH	CCl	CH	O	H	1- xyanoxyclo propyl	2,85 ^a	480 ^a
10	pentafl etyl	CF ₃	Me	H	CH	CH	CCl	CH	O	H	1- xyanoxyclo propyl	3,27 ^a	530 ^a
11	CF ₃	CF ₃	Me	H	CH	CBr	CBr	CH	O	H	1- xyanoxyclo propyl	3,30	604

Ví dụ số	Z ¹	Z ²	Z ³	R ¹	A ¹	A ²	A ³	A ⁴	W	R ⁶	Q	logP	Khối [m/z] 1
12	CF ₃	CF ₃	Me	H	CH	CCl	CBr	CH	O	H	1- xyanoxyclo propyl	3,27	560
13	pentaflor etyl	CF ₃	Me	H	CH	CBr	CCl	CH	O	H	1- xyanoxyclo propyl	3,67	610
14	pentaflor etyl	CF ₃	Me	H	CH	CH	CBr	CH	O	H	1- xyanoxyclo propyl	3,31	576
15	pentaflor etyl	CF ₃	Me	H	CH	CH	CCl	CH	O	prop ionyl	1- xyanoxyclo propyl	4,17	584 ²
16	pentaflor etyl	CF ₃	Me	H	CH	CCl	CBr	CH	O	H	1- xyanoxyclo propyl	3,73	610
17	1- floxyclo propyl	Cl	Me	H	CH	CH	CCl	CH	O	H	1- xyanoxyclo propyl	2,50	436
18	pentaflor etyl	CF ₃	Me	axet yl	CH	CH	CCl	CH	O	axet yl	1- xyanoxyclo propyl	4,04	

Vị đặt số	Z ¹	Z ²	Z ³	R ¹	A ¹	A ²	A ³	A ⁴	W	R ⁶	Q	logP	Khối [m/z] 1
19	pentaflor etyl	CF ₃	Me	metoxycarbonyl	CH	CH	CCl	CH	O	H	1-cyanoxypropyl	3,69	588
20	pentaflor etyl	CF ₃	Me	etoxycarbonyl	CH	CH	CCl	CH	O	H	1-cyanoxypropyl	3,95	602
21	pentaflor etyl	CF ₃	Me	metoxycarbonyl	CH	CH	CCl	CH	O	metoxycarbonyl	1-cyanoxypropyl	4,32	646
22	pentaflor etyl	CF ₃	Me	etoxycarbonyl	CH	CH	CCl	CH	O	etoxycarbonyl	1-cyanoxypropyl	4,80	674
23	pentaflor etyl	CF ₃	Me	2,2-dimethylpropanoyl	CH	CH	CCl	CH	O	H	1-cyanoxypropyl	4,40	614
24	pentaflor etyl	CF ₃	Me	H	CH	CMe	CCl	CH	O	H	1-cyanoxypropyl	3,51	544

Vị đặt số	Z ¹	Z ²	Z ³	R ¹	A ¹	A ²	A ³	A ⁴	W	R ⁶	Q	logP	Khối [m/z] 1
25	pentaflor etyl	CF ₃	Me	H	CH	CH	Cl	CH	O	H	1- xyanoxyclo propyl	3,43	620 ²
26	pentaflor etyl	CF ₃	Me	prop -2- yn- 1-yl	CH	CH	CCl	CH	O	H	1- xyanoxyclo propyl	3,41	568
27	pentaflor etyl	CF ₃	Me	H	CH	CH	CF	CH	O	H	1- xyanoxyclo propyl	3,21	514
28	pentaflor etyl	CF ₃	Me	4- clob enzy l	CH	CH	CCl	CH	O	H	1- xyanoxyclo propyl	4,30	654
29	pentaflor etyl	CF ₃	Me	isob utyryl	CH	CH	CCl	CH	O	H	1- xyanoxyclo propyl	4,38	600
30	pentaflor etyl	CF ₃	Me	but- 2- yn- 1-yl	CH	CH	CCl	CH	O	H	1- xyanoxyclo propyl	3,60	582

Vị đặt số	Z ¹	Z ²	Z ³	R ¹	A ¹	A ²	A ³	A ⁴	W	R ⁶	Q	logP	Khối [m/z] 1
31	pentaflor etyl	CF ₃	Me	benz yl	CH	CH	CCl	CH	O	H	1- xyanoxyclo propyl	3,97	620
32	pentaflor etyl	CF ₃	Me	pyri đin- 2-ylme tyl	CH	CH	CCl	CH	O	H	1- xyanoxyclo propyl	3,53	621
33	pentaflor etyl	CF ₃	Me	prop ionyl	CH	CH	CCl	CH	O	H	1- xyanoxyclo propyl	3,91	586
34	pentaflor etyl	CF ₃	Et	H	CH	CH	CCl	CH	O	H	1- xyanoxyclo propyl	3,53	544
35	pentaflor etyl	CF ₃	Pr	H	CH	CH	CCl	CH	O	H	1- xyanoxyclo propyl	3,87	558
36	pentaflor etyl	CF ₃	Pr	H	CH	CH	CF	CH	O	H	1- xyanoxyclo propyl	3,74	542

Vị đặt số	Z ¹	Z ²	Z ³	R ¹	A ¹	A ²	A ³	A ⁴	W	R ⁶	Q	logP	Khối [m/z] 1
37	pentaflor etyl	CF ₃	Et	H	CH	CH	CF	CH	O	H	1- xyanoxyclo propyl	3,44	528
38	pentaflor etyl	CF ₃	Et	Me	CH	CH	CCl	CH	O	H	1- xyanoxyclo propyl	3,57	558
39	pentaflor etyl	CF ₃	Me	Et	CH	CBr	CCl	CH	O	H	1- xyanoxyclo propyl	3,92	638
40	pentaflor etyl	CF ₃	Me	H	CH	CH	CCl	CH	O	axet yl	1- xyanoxyclo propyl	3,81	572
41	pentaflor etyl	CF ₃	Et	Me	CH	CH	CCl	CH	O	Me	1- xyanoxyclo propyl	3,85	572
42	pentaflor etyl	metyl sulph anyl	Me	H	CH	CH	CCl	CH	O	H	1- xyanoxyclo propyl	3,43	508

Vị đặt số	Z ¹	Z ²	Z ³	R ¹	A ¹	A ²	A ³	A ⁴	W	R ⁶	Q	logP	Khối [m/z] 1
43	pentaflor etyl	CF ₃	Et	Et	CH	CH	CCl	CH	O	H	1- xyanoxyclo propyl	3,68	572
44	pentaflor etyl	CF ₃	Me	xyan omet yl	CH	CH	CCl	CH	O	H	1- xyanoxyclo propyl	3,25	569
45	pentaflor etyl	metyl sulph inyl	Me	H	CH	CH	CCl	CH	O	H	1- xyanoxyclo propyl	2,91	524
46	pentaflor etyl	CF ₃	Pr	Me	CH	CH	CCl	CH	O	Me	1- xyanoxyclo propyl	4,26	586
47	pentaflor etyl	CF ₃	Pr	Me	CH	CH	CF	CH	O	Me	1- xyanoxyclo propyl	4,05	570
48	pentaflor etyl	CF ₃	Et	Me	CH	CH	CF	CH	O	Me	1- xyanoxyclo propyl	3,76	556

V1 điểm số	Z ¹	Z ²	Z ³	R ¹	A ¹	A ²	A ³	A ⁴	W	R ⁶	Q	logP	Khối [m/z] 1
49	pentaflor etyl	metyl sulph onyl	Me	H	CH	CH	CCl	CH	O	H	1- xyanoxyclo propyl	2,47	540
50	pentaflor etyl	CF ₃	Pr	Et	CH	CH	CCl	CH	O	H	1- xyanoxyclo propyl	4,06	586
51	pentaflor etyl	CF ₃	Pr	Et	CH	CH	CCl	CH	O	Et	1- xyanoxyclo propyl	4,68	614
52	pentaflor etyl	CF ₃	Et	Et	CH	CH	CCl	CH	O	Et	1- xyanoxyclo propyl	4,26	600
53	pentaflor etyl	CF ₃	Me	axet yl	CH	CH	CCl	CH	O	H	1- xyanoxyclo propyl	3,63	572
54	pentaflor etyl	CF ₃	Me	pyri đin- 3- ylme	CH	CH	CCl	CH	O	H	1- xyanoxyclo propyl	2,85	621

V1 điều số	Z ¹	Z ²	Z ³	R ¹	A ¹	A ²	A ³	A ⁴	W	R ⁶	Q	logP	Khối [m/z] 1
55	pentaflor etyl	CF ₃	Me	2-metyl propyl p-2-en- 1-yl	CH	CH	CCl	CH	O	H	1-xyanoxyclo propyl	3,78	584
56	pentaflor etyl	CF ₃	Me	pyridin- 4-ylmethyl	CH	CH	CCl	CH	O	H	1-xyanoxyclo propyl	2,52	621
57	pentaflor etyl	CF ₃	propyl- 2-yn- 1-yl	H	CH	CH	CCl	CH	O	H	1-xyanoxyclo propyl	3,58	554
58	pentaflor etyl	CF ₃	propyl- 2-en- 1-yl	H	CH	CH	CCl	CH	O	H	1-xyanoxyclo propyl	3,65	556
59	pentaflor etyl	CF ₃	Me	H	CH	CF	CBr	CH	O	H	1-xyanoxyclo propyl	3,58	592
60	pentaflor etyl	CF ₃	Me	propylionyl	CH	CH	CCl	CH	O	propylionyl	1-xyanoxyclo propyl	4,68	

V1 điều số	Z ¹	Z ²	Z ³	R ¹	A ¹	A ²	A ³	A ⁴	W	R ⁶	Q	logP	Khối [m/z] 1
61	pentafl etyl	CF ₃	Me	H	CH	CH	CCl	CH	O	Et	1- xyanoxyclo propyl	3,86	558
62	pentafl etyl	CF ₃	Me	H	CH	CH	CCl	CH	O	Me	1- xyanoxyclo propyl	3,66	544
63	pentafl etyl	CF ₃	Me	isopr opox ycar bony l	CH	CH	CCl	CH	O	H	1- xyanoxyclo propyl	4,19	616
64	pentafl etyl	CF ₃	2,2,2 - triflo etyl	H	CH	CH	CCl	CH	O	H	1- xyanoxyclo propyl	3,60	598
65	CF ₃	CF ₃	Me	H	CH	CH	CCl	CH	S	H	1- xyanoxyclo propyl		

Vị đặt số	Z ¹	Z ²	Z ³	R ¹	A ¹	A ²	A ³	A ⁴	W	R ⁶	Q	logP	Khối [m/z] 1
66	pentafl etyl	CF ₃	Me	Me	CH	CH	CCl	CH	S	H	1- xyanoxyclo propyl		
67	pentafl etyl	CF ₃	Me	H	CH	CH	CCl	CH	S	H	1- xyanoxyclo butyl		
68	pentafl etyl	CF ₃	Me	Et	CH	CH	CCl	CH	S	H	1- xyanoxyclo propyl		
69	pentafl etyl	CF ₃	Me	Me	CH	CH	CCl	CH	S	Me	1- xyanoxyclo propyl		
70	pentafl etyl	CF ₃	Me	Me	CH	CH	CCl	CH	S	Et	1- xyanoxyclo propyl		
71	1- cloxyl opropyl	Cl	Me	Me	CH	CH	CCl	CH	S	H	1- xyanoxyclo propyl		

Ví dụ số	Z ¹	Z ²	Z ³	R ¹	A ¹	A ²	A ³	A ⁴	W	R ⁶	Q	logP	Khối [m/z] 1
72	CF ₃	CF ₃	Me	Me	CH	CH	CCl	CH	S	H	1- xyanoxyclo propyl		
73	pentafo etyl	CF ₃	Me	H	CH	CH	CCl	CH	S	H	1- xyanoxyclo propyl		
74	1- floxyclo propyl	Br	Me	H	CH	CH	CCl	CH	S	H	1- xyanoxyclo propyl		
75	CF ₃	CF ₃	Me	H	CH	CBr	CBr	CH	S	H	1- xyanoxyclo propyl		
76	CF ₃	CF ₃	Me	H	CH	CCl	CBr	CH	S	H	1- xyanoxyclo propyl		
77	pentafo etyl	CF ₃	Me	H	CH	CBr	CCl	CH	S	H	1- xyanoxyclo propyl		

V1 định số	Z ¹	Z ²	Z ³	R ¹	A ¹	A ²	A ³	A ⁴	W	R ⁶	Q	logP	Khối [m/z] 1
78	pentaflor etyl	CF ₃	Me	H	CH	CH	CBr	CH	S	H	1- xyanoxyclo propyl		
79	pentaflor etyl	CF ₃	Me	H	CH	CH	CCl	CH	S	prop ionyl	1- xyanoxyclo propyl		
80	pentaflor etyl	CF ₃	Me	H	CH	CCl	CBr	CH	S	H	1- xyanoxyclo propyl		
81	1- floxyclo propyl	Cl	Me	H	CH	CH	CCl	CH	S	H	1- xyanoxyclo propyl		
82	pentaflor etyl	CF ₃	Me	axet yl	CH	CH	CCl	CH	S	axet yl	1- xyanoxyclo propyl		
83	pentaflor etyl	CF ₃	Me	meto xyca rbon yl	CH	CH	CCl	CH	S	H	1- xyanoxyclo propyl		
84	pentaflor etyl	CF ₃	Me	etox ycar bony l	CH	CH	CCl	CH	S	H	1- xyanoxyclo propyl		

Vị đặt số	Z ¹	Z ²	Z ³	R ¹	A ¹	A ²	A ³	A ⁴	W	R ⁶	Q	logP	Khối [m/z] 1
85	pentaflor etyl	CF ₃	Me	metoxycarbonyl	CH	CH	CCl	CH	S	metoxycarbonyl	1-cyanoxypropyl		
86	pentaflor etyl	CF ₃	Me	etoxycarbonyl	CH	CH	CCl	CH	S	etoxycarbonyl	1-cyanoxypropyl		
87	pentaflor etyl	CF ₃	Me	2,2-dimethylpropan	CH	CH	CCl	CH	S	H	1-cyanoxypropyl		
88	pentaflor etyl	CF ₃	Me	H	CH	CMe	CCl	CH	S	H	1-cyanoxypropyl		
89	pentaflor etyl	CF ₃	Me	H	CH	CH	Cl	CH	S	H	1-cyanoxypropyl		
90	pentaflor etyl	CF ₃	Me	prop-2-yn-1-yl	CH	CH	CCl	CH	S	H	1-cyanoxypropyl		

Vị đặt số	Z ¹	Z ²	Z ³	R ¹	A ¹	A ²	A ³	A ⁴	W	R ⁶	Q	logP	Khối [m/z] 1
91	pentafl etyl	CF ₃	Me	H	CH	CH	CF	CH	S	H	1- xyanoxyclo propyl		
92	pentafl etyl	CF ₃	Me	4- clob enzy l	CH	CH	CCl	CH	S	H	1- xyanoxyclo propyl		
93	pentafl etyl	CF ₃	Me	isob utyr yl	CH	CH	CCl	CH	S	H	1- xyanoxyclo propyl		
94	pentafl etyl	CF ₃	Me	but- 2- yn- 1-yl	CH	CH	CCl	CH	S	H	1- xyanoxyclo propyl		
95	pentafl etyl	CF ₃	Me	benz yl	CH	CH	CCl	CH	S	H	1- xyanoxyclo propyl		
96	pentafl etyl	CF ₃	Me	pyri đin- 2- ylme	CH	CH	CCl	CH	S	H	1- xyanoxyclo propyl		

Vị dự số	Z ¹	Z ²	Z ³	R ¹	A ¹	A ²	A ³	A ⁴	W	R ⁶	Q	logP	Khối [m/z] 1
97	pentafl etyl	CF ₃	Me	prop ionyl	CH	CH	CCl	CH	S	H	1- xyanoxyclo propyl		
98	pentafl etyl	CF ₃	Et	H	CH	CH	CCl	CH	S	H	1- xyanoxyclo propyl		
99	pentafl etyl	CF ₃	Pr	H	CH	CH	CCl	CH	S	H	1- xyanoxyclo propyl		
100	pentafl etyl	CF ₃	Pr	H	CH	CH	CF	CH	S	H	1- xyanoxyclo propyl		
101	pentafl etyl	CF ₃	Et	H	CH	CH	CF	CH	S	H	1- xyanoxyclo propyl		
102	pentafl etyl	CF ₃	Et	Me	CH	CH	CCl	CH	S	H	1- xyanoxyclo propyl		

Vị đặt số	Z ¹	Z ²	Z ³	R ¹	A ¹	A ²	A ³	A ⁴	W	R ⁶	Q	logP	Khối [m/z] 1
103	pentaflor etyl	CF ₃	Me	Et	CH	CBr	CCl	CH	S	H	1- xyanoxyclo propyl		
104	pentaflor etyl	CF ₃	Me	H	CH	CH	CCl	CH	S	axet yl	1- xyanoxyclo propyl		
105	pentaflor etyl	CF ₃	Et	Me	CH	CH	CCl	CH	S	Me	1- xyanoxyclo propyl		
106	pentaflor etyl	metyl sulph anyl	Me	H	CH	CH	CCl	CH	S	H	1- xyanoxyclo propyl		
107	pentaflor etyl	CF ₃	Et	Et	CH	CH	CCl	CH	S	H	1- xyanoxyclo propyl		
108	pentaflor etyl	CF ₃	Me	xyan omet yl	CH	CH	CCl	CH	S	H	1- xyanoxyclo propyl		
109	pentaflor etyl	metyl sulph inyl	Me	H	CH	CH	CCl	CH	S	H	1- xyanoxyclo propyl		

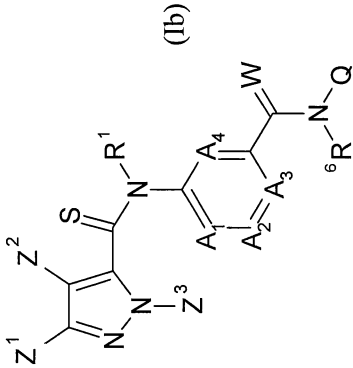
Vị dụ số	Z ¹	Z ²	Z ³	R ¹	A ¹	A ²	A ³	A ⁴	W	R ⁶	Q	logP	Khối [m/z] 1
110	pentaflor etyl	CF ₃	Pr	Me	CH	CH	CCl	CH	S	Me	1- xyanoxyclo propyl		
111	pentaflor etyl	CF ₃	Pr	Me	CH	CH	CF	CH	S	Me	1- xyanoxyclo propyl		
112	pentaflor etyl	CF ₃	Et	Me	CH	CH	CF	CH	S	H	1- xyanoxyclo propyl		
113	pentaflor etyl	metyl sulph onyl	Me	H	CH	CH	CCl	CH	S	H	1- xyanoxyclo propyl		
114	pentaflor etyl	CF ₃	Pr	Et	CH	CH	CCl	CH	S	H	1- xyanoxyclo propyl		
115	pentaflor etyl	CF ₃	Pr	Et	CH	CH	CCl	CH	S	Et	1- xyanoxyclo propyl		

Ví dụ số	Z ¹	Z ²	Z ³	R ¹	A ¹	A ²	A ³	A ⁴	W	R ⁶	Q	logP	Khối [m/z] 1
116	pentafluor ethyl	CF ₃	Et	Et	CH	CH	CCl	CH	S	Et	1- xyanoxyclo propyl		
117	pentafluor ethyl	CF ₃	Me	acet yl	CH	CH	CCl	CH	S	H	1- xyanoxyclo propyl		
118	pentafluor ethyl	CF ₃	Me	pyri din- 3-ylme	CH	CH	CCl	CH	S	H	1- xyanoxyclo propyl		
119	pentafluor ethyl	CF ₃	Me	2- mety lpro p-2-	CH	CH	CCl	CH	S	H	1- xyanoxyclo propyl		
120	pentafluor ethyl	CF ₃	Me	pyri din- 4-ylme	CH	CH	CCl	CH	S	H	1- xyanoxyclo propyl		
121	pentafluor ethyl	CF ₃	prop -2- yn- 1-yl	H	CH	CH	CCl	CH	S	H	1- xyanoxyclo propyl		

V1 điểm số	Z ¹	Z ²	Z ³	R ¹	A ¹	A ²	A ³	A ⁴	W	R ⁶	Q	logP	Khối [m/z] 1
122	pentaflor etyl	CF ₃	prop -2-en- 1-yl	H	CH	CH	CCl	CH	S	H	1- xyanoxyclo propyl		
123	pentaflor etyl	CF ₃	Me	H	CH	CF	CBr	CH	S	H	1- xyanoxyclo propyl		
124	pentaflor etyl	CF ₃	Me	prop ionyl	CH	CH	CCl	CH	S	prop ionyl	1- xyanoxyclo propyl		
125	pentaflor etyl	CF ₃	Me	H	CH	CH	CCl	CH	S	Et	1- xyanoxyclo propyl		
126	pentaflor etyl	CF ₃	Me	H	CH	CH	CCl	CH	S	Me	1- xyanoxyclo propyl		
127	pentaflor etyl	CF ₃	Me	isopr opox ycar bony l	CH	CH	CCl	CH	S	H	1- xyanoxyclo propyl		

Vị đặt số	Z ¹	Z ²	Z ³	R ¹	A ¹	A ²	A ³	A ⁴	W	R ⁶	Q	logP	Khối [m/z] 1
128	pentafl etyl	CF ₃	2,2,2 - triflo etyl	H	CH	CH	CCl	CH	S	H	1- xyanoxyclo propyl		

Bảng 2



Thứ nghị ệ m số	Z ¹	Z ²	Z ³	R ¹	A ¹	A ²	A ³	A ⁴	W	R ⁶	Q	logP	Phổ khối [m/z] 1
129	1- floxycycloprop yl	Br	Me	H	C H	CH	CCl	C H	O	H	1- xyanoxycyclopr opyl		
130	CF ₃	CF ₃	Me	Me	C H	CH	CCl	C H	O	H	1- xyanoxycyclopr opyl		
131	1- cloxycycloprop yl	Cl	Me	Me	C H	CH	CCl	C H	O	H	1- xyanoxycyclopr opyl		

Thứ nghị ệ m số	Z ¹	Z ²	Z ³	R ¹	A ¹	A ²	A ³	A ⁴	W	R ⁶	Q	logP	Phổ khối [m/z] 1
132	pentafluoryl	CF ₃	Me	Me	C H	CH	CCl	C H	O	Et	1- xyanoxyclopr opyl		
133	pentafluoryl	CF ₃	Me	Me	C H	CH	CCl	C H	O	Me	1- xyanoxyclopr opyl		
134	pentafluoryl	CF ₃	Me	Et	C H	CH	CCl	C H	O	H	1- xyanoxyclopr opyl		
135	pentafluoryl	CF ₃	Me	H	C H	CH	CCl	C H	O	H	1- xyanoxyclob utyl		
136	pentafluoryl	CF ₃	Me	Me	C H	CH	CCl	C H	O	H	1- xyanoxyclopr opyl		
137	CF ₃	CF ₃	Me	H	C H	CH	CCl	C H	O	H	1- xyanoxyclopr opyl		
138	pentafluoryl	CF ₃	Me	H	C H	CH	CCl	C H	O	H	1- xyanoxyclopr opyl		

Thử nghiệm số	Z ¹	Z ²	Z ³	R ¹	A ¹	A ²	A ³	A ⁴	W	R ⁶	Q	logP	Phổ khối [m/z] ₁
139	CF ₃	CF ₃	Me	H	C H	CBr	CBr	C H	O	H	1-xyanoxycyclopropyl		
140	CF ₃	CF ₃	Me	H	C H	CCl	CBr	C H	O	H	1-xyanoxycyclopropyl		
141	pentafluethyl	CF ₃	Me	H	C H	CBr	CCl	C H	O	H	1-xyanoxycyclopropyl		
142	pentafluethyl	CF ₃	Me	H	C H	CH	CBr	C H	O	H	1-xyanoxycyclopropyl		
143	pentafluethyl	CF ₃	Me	H	C H	CH	CCl	C H	O	propionyl	1-xyanoxycyclopropyl		
144	pentafluethyl	CF ₃	Me	H	C H	CCl	CBr	C H	O	H	1-xyanoxycyclopropyl		
145	1-floxycyclopropyl	Cl	Me	H	C H	CH	CCl	C H	O	H	1-xyanoxycyclopropyl		

Thứ nghị ệ m số	Z ¹	Z ²	Z ³	R ¹	A ¹	A ²	A ³	A ⁴	W	R ⁶	Q	logP	Phổ khối [m/z] 1
146	pentafluorylethyl	CF ₃	Me	acetyl	C H	CH	CCl	C H	O	axetyl	1- xyanoxycyclopropyl		
147	pentafluorylethyl	CF ₃	Me	methoxycarbonyl	C H	CH	CCl	C H	O	H	1- xyanoxycyclopropyl		
148	pentafluorylethyl	CF ₃	Me	ethoxycarbonyl	C H	CH	CCl	C H	O	H	1- xyanoxycyclopropyl		
149	pentafluorylethyl	CF ₃	Me	methoxycarbonyl	C H	CH	CCl	C H	O	methoxycarbonyl	1- xyanoxycyclopropyl		
150	pentafluorylethyl	CF ₃	Me	ethoxycarbonyl	C H	CH	CCl	C H	O	ethoxycarbonyl	1- xyanoxycyclopropyl		
151	pentafluorylethyl	CF ₃	Me	2,2-dimethylpropanoyl	C H	CH	CCl	C H	O	H	1- xyanoxycyclopropyl		
152	pentafluorylethyl	CF ₃	Me	H	C H	CM _e	CCl	C H	O	H	1- xyanoxycyclopropyl		

Thử nghi ệm số	Z ¹	Z ²	Z ³	R ¹	A ¹	A ²	A ³	A ⁴	W	R ⁶	Q	logP	Phổ khối [m/z] 1
153	pentafluoroyl	CF ₃	Me	H	C H	CH	Cl	C H	O	H	1- xyanoxyclopr opyl		
154	pentafluoroyl	CF ₃	Me	prop-2-yn-1-yl	C H	CH	CCl	C H	O	H	1- xyanoxyclopr opyl		
155	pentafluoroyl	CF ₃	Me	H	C H	CH	CF	C H	O	H	1- xyanoxyclopr opyl		
156	pentafluoroyl	CF ₃	Me	4-clobenzyl	C H	CH	CCl	C H	O	H	1- xyanoxyclopr opyl		
157	pentafluoroyl	CF ₃	Me	isobutyryl	C H	CH	CCl	C H	O	H	1- xyanoxyclopr opyl		
158	pentafluoroyl	CF ₃	Me	but-2-yn-1-yl	C H	CH	CCl	C H	O	H	1- xyanoxyclopr opyl		
159	pentafluoroyl	CF ₃	Me	benzyl	C H	CH	CCl	C H	O	H	1- xyanoxyclopr opyl		

Thử nghi ệm số	Z ¹	Z ²	Z ³	R ¹	A ¹	A ²	A ³	A ⁴	W	R ⁶	Q	logP	Phổ khối [m/z] 1
160	pentafluoroyl	CF ₃	Me	pyridin-2- ylmethyl	C H	CH	CCl	C H	O	H	1- xyanoxyclopr opyl		
161	pentafluoroyl	CF ₃	Me	propionyl	C H	CH	CCl	C H	O	H	1- xyanoxyclopr opyl		
162	pentafluoroyl	CF ₃	Et	H	C H	CH	CCl	C H	O	H	1- xyanoxyclopr opyl		
163	pentafluoroyl	CF ₃	Pr	H	C H	CH	CCl	C H	O	H	1- xyanoxyclopr opyl		
164	pentafluoroyl	CF ₃	Pr	H	C H	CH	CF	C H	O	H	1- xyanoxyclopr opyl		
165	pentafluoroyl	CF ₃	Et	H	C H	CH	CF	C H	O	H	1- xyanoxyclopr opyl		
166	pentafluoroyl	CF ₃	Et	Me	C H	CH	CCl	C H	O	H	1- xyanoxyclopr opyl		

Thứ nghị ệ m số	Z ¹	Z ²	Z ³	R ¹	A ¹	A ²	A ³	A ⁴	W	R ⁶	Q	logP	Phổ khối [m/z] 1
167	pentafluor	CF ₃	Me	Et	C H	CBr	CCl	C H	O	H	1- xyanoxyclopr opyl		
168	pentafluor	CF ₃	Me	H	C H	CH	CCl	C H	O	axetyl	1- xyanoxyclopr opyl		
169	pentafluor	CF ₃	Et	Me	C H	CH	CCl	C H	O	Me	1- xyanoxyclopr opyl		
170	pentafluor	metyl sulphanyl	Me	H	C H	CH	CCl	C H	O	H	1- xyanoxyclopr opyl		
171	pentafluor	CF ₃	Et	Et	C H	CH	CCl	C H	O	H	1- xyanoxyclopr opyl		
172	pentafluor	CF ₃	Me	xyanometyl	C H	CH	CCl	C H	O	H	1- xyanoxyclopr opyl		
173	pentafluor	metyl sulphanyl	Me	H	C H	CH	CCl	C H	O	H	1- xyanoxyclopr opyl		

Thứ nghị ệ m số	Z ¹	Z ²	Z ³	R ¹	A ¹	A ²	A ³	A ⁴	W	R ⁶	Q	logP	Phổ khối [m/z] 1
174	pentafluoryl	CF ₃	Pr	Me	C H	CH	CCl	C H	O	Me	1- xyanoxyclopr opyl		
175	pentafluoryl	CF ₃	Pr	Me	C H	CH	CF	C H	O	Me	1- xyanoxyclopr opyl		
176	pentafluoryl	CF ₃	Et	Me	C H	CH	CF	C H	O	H	1- xyanoxyclopr opyl		
177	pentafluoryl	methylsulph onyl	Me	H	C H	CH	CCl	C H	O	H	1- xyanoxyclopr opyl		
178	pentafluoryl	CF ₃	Pr	Et	C H	CH	CCl	C H	O	H	1- xyanoxyclopr opyl		
179	pentafluoryl	CF ₃	Pr	Et	C H	CH	CCl	C H	O	Et	1- xyanoxyclopr opyl		

Thử nghi ệm số	Z ¹	Z ²	Z ³	R ¹	A ¹	A ²	A ³	A ⁴	W	R ⁶	Q	logP	Phổ khối [m/z] 1
180	pentafluorylethyl	CF ₃	Et	Et	C H	CH	CCl	C H	O	Et	1- xyanoxycyclopropyl		
181	pentafluorylethyl	CF ₃	Me	acetyl	C H	CH	CCl	C H	O	H	1- xyanoxycyclopropyl		
182	pentafluorylethyl	CF ₃	Me	pyridin-3-ylmethyl	C H	CH	CCl	C H	O	H	1- xyanoxycyclopropyl		
183	pentafluorylethyl	CF ₃	Me	2-methylprop-2-en-1-yl	C H	CH	CCl	C H	O	H	1- xyanoxycyclopropyl		
184	pentafluorylethyl	CF ₃	Me	pyridin-4-ylmethyl	C H	CH	CCl	C H	O	H	1- xyanoxycyclopropyl		
185	pentafluorylethyl	CF ₃	prop-2-yn-1-yl	H	C H	CH	CCl	C H	O	H	1- xyanoxycyclopropyl		
186	pentafluorylethyl	CF ₃	prop-2-en-1-yl	H	C H	CH	CCl	C H	O	H	1- xyanoxycyclopropyl		

Thứ nghị ệ m số	Z ¹	Z ²	Z ³	R ¹	A ¹	A ²	A ³	A ⁴	W	R ⁶	Q	logP	Phổ khối [m/z] 1
187	pentafluor	CF ₃	Me	H	C H	CF	CBr	C H	O	H	1- xyanoxyclopr opyl		
188	pentafluor	CF ₃	Me	propionyl	C H	CH	CCl	C H	O	propionyl	1- xyanoxyclopr opyl		
189	pentafluor	CF ₃	Me	H	C H	CH	CCl	C H	O	Et	1- xyanoxyclopr opyl		
190	pentafluor	CF ₃	Me	H	C H	CH	CCl	C H	O	Me	1- xyanoxyclopr opyl		
191	pentafluor	CF ₃	Me	isopropoxycarb onyl	C H	CH	CCl	C H	O	H	1- xyanoxyclopr opyl		
192	pentafluor	CF ₃	2,2,2- trifluor	H	C H	CH	CCl	C H	O	H	1- xyanoxyclopr opyl		
193	CF ₃	CF ₃	Me	H	C H	CH	CCl	C H	S	H	1- xyanoxyclopr opyl		

Thử nghi ệm số	Z ¹	Z ²	Z ³	R ¹	A ¹	A ²	A ³	A ⁴	W	R ⁶	Q	logP	Phổ khối [m/z] 1
194	pentafluoryl	CF ₃	Me	Me	C H	CH	CCl	C H	S	H	1- xyanoxyclopr opyl		
195	pentafluoryl	CF ₃	Me	H	C H	CH	CCl	C H	S	H	1- xyanoxyclob utyl		
196	pentafluoryl	CF ₃	Me	Et	C H	CH	CCl	C H	S	H	1- xyanoxyclopr opyl		
197	pentafluoryl	CF ₃	Me	Me	C H	CH	CCl	C H	S	Me	1- xyanoxyclopr opyl		
198	pentafluoryl	CF ₃	Me	Me	C H	CH	CCl	C H	S	Et	1- xyanoxyclopr opyl		
199	1- cloxycloprop yl	Cl	Me	Me	C H	CH	CCl	C H	S	H	1- xyanoxyclopr opyl		
200	CF ₃	CF ₃	Me	Me	C H	CH	CCl	C H	S	H	1- xyanoxyclopr opyl		

Thứ nghị ệ m số	Z ¹	Z ²	Z ³	R ¹	A ¹	A ²	A ³	A ⁴	W	R ⁶	Q	logP	Phổ khối [m/z] 1
201	pentafluorethyl	CF ₃	Me	H	C H	CH	CCl	C H	S	H	1- xyanoxyclopr opyl		
202	1- floxycloprop yl	Br	Me	H	C H	CH	CCl	C H	S	H	1- xyanoxyclopr opyl		
203	CF ₃	CF ₃	Me	H	C H	CBr	CBr	C H	S	H	1- xyanoxyclopr opyl		
204	CF ₃	CF ₃	Me	H	C H	CCl	CBr	C H	S	H	1- xyanoxyclopr opyl		
205	pentafluorethyl	CF ₃	Me	H	C H	CBr	CCl	C H	S	H	1- xyanoxyclopr opyl		
206	pentafluorethyl	CF ₃	Me	H	C H	CH	CBr	C H	S	H	1- xyanoxyclopr opyl		
207	pentafluorethyl	CF ₃	Me	H	C H	CH	CCl	C H	S	propionyl	1- xyanoxyclopr opyl		

Thử nghị ệ m số	Z ¹	Z ²	Z ³	R ¹	A ¹	A ²	A ³	A ⁴	W	R ⁶	Q	logP	Phổ khối [m/z] 1
208	pentafluor yl	CF ₃	Me	H	C H	CCl	CBr	C H	S	H	1- xyanoxyclopr opyl		
209	1- floxycloprop yl	Cl	Me	H	C H	CH	CCl	C H	S	H	1- xyanoxyclopr opyl		
210	pentafluor yl	CF ₃	Me	axetyl	C H	CH	CCl	C H	S	axetyl	1- xyanoxyclopr opyl		
211	pentafluor yl	CF ₃	Me	metoxycarbony l	C H	CH	CCl	C H	S	H	1- xyanoxyclopr opyl		
212	pentafluor yl	CF ₃	Me	etoxycarbonyl	C H	CH	CCl	C H	S	H	1- xyanoxyclopr opyl		
213	pentafluor yl	CF ₃	Me	metoxycarbony l	C H	CH	CCl	C H	S	metoxycar bonyl	1- xyanoxyclopr opyl		

Thứ nghị ệ m số	Z ¹	Z ²	Z ³	R ¹	A ¹	A ²	A ³	A ⁴	W	R ⁶	Q	logP	Phổ khối [m/z] 1
214	pentafluorylethyl	CF ₃	Me	ethoxycarbonyl	CH	CH	CCl	CH	S	ethoxycarbonyl	1- xyanoxycyclopropyl		
215	pentafluorylethyl	CF ₃	Me	2,2-dimethylpropanoyl	CH	CH	CCl	CH	S	H	1- xyanoxycyclopropyl		
216	pentafluorylethyl	CF ₃	Me	H	CH	CH	CCl	CH	S	H	1- xyanoxycyclopropyl		
217	pentafluorylethyl	CF ₃	Me	H	CH	CH	Cl	CH	S	H	1- xyanoxycyclopropyl		
218	pentafluorylethyl	CF ₃	Me	prop-2-yn-1-yl	CH	CH	CCl	CH	S	H	1- xyanoxycyclopropyl		
219	pentafluorylethyl	CF ₃	Me	H	CH	CH	CF	CH	S	H	1- xyanoxycyclopropyl		

Thử nghi ệ m số	Z ¹	Z ²	Z ³	R ¹	A ¹	A ²	A ³	A ⁴	W	R ⁶	Q	logP	Phổ khối [m/z] 1
220	pentafluorethyl	CF ₃	Me	4-chlorobenzyl	C H	CH	CCl	C H	S	H	1- xyanoxyclopr opyl		
221	pentafluorethyl	CF ₃	Me	isobutyryl	C H	CH	CCl	C H	S	H	1- xyanoxyclopr opyl		
222	pentafluorethyl	CF ₃	Me	but-2-yn-1-yl	C H	CH	CCl	C H	S	H	1- xyanoxyclopr opyl		
223	pentafluorethyl	CF ₃	Me	benzyl	C H	CH	CCl	C H	S	H	1- xyanoxyclopr opyl		
224	pentafluorethyl	CF ₃	Me	pyridin-2- ylmethyl	C H	CH	CCl	C H	S	H	1- xyanoxyclopr opyl		
225	pentafluorethyl	CF ₃	Me	propionyl	C H	CH	CCl	C H	S	H	1- xyanoxyclopr opyl		
226	pentafluorethyl	CF ₃	Et	H	C H	CH	CCl	C H	S	H	1- xyanoxyclopr opyl		

Thử nghiệm số	Z ¹	Z ²	Z ³	R ¹	A ¹	A ²	A ³	A ⁴	W	R ⁶	Q	logP	Phổ khối [m/z] ₁
227	pentafluoryl	CF ₃	Pr	H	C H	CH	CCl	C H	S	H	1- xyanoxyclopr opyl		
228	pentafluoryl	CF ₃	Pr	H	C H	CH	CF	C H	S	H	1- xyanoxyclopr opyl		
229	pentafluoryl	CF ₃	Et	H	C H	CH	CF	C H	S	H	1- xyanoxyclopr opyl		
230	pentafluoryl	CF ₃	Et	Me	C H	CH	CCl	C H	S	H	1- xyanoxyclopr opyl		
231	pentafluoryl	CF ₃	Me	Et	C H	CBr	CCl	C H	S	H	1- xyanoxyclopr opyl		
232	pentafluoryl	CF ₃	Me	H	C H	CH	CCl	C H	S	axetyl	1- xyanoxyclopr opyl		
233	pentafluoryl	CF ₃	Et	Me	C H	CH	CCl	C H	S	Me	1- xyanoxyclopr opyl		

Thứ nghị ệ m số	Z ¹	Z ²	Z ³	R ¹	A ¹	A ²	A ³	A ⁴	W	R ⁶	Q	logP	Phổ khối [m/z] 1
234	pentafluorethyl	methylsulph hanyl	Me	H	C H	CH	CCl	C H	S	H	1- xyanoxyclopr opyl		
235	pentafluorethyl	CF ₃	Et	Et	C H	CH	CCl	C H	S	H	1- xyanoxyclopr opyl		
236	pentafluorethyl	CF ₃	Me	xyanomethyl	C H	CH	CCl	C H	S	H	1- xyanoxyclopr opyl		
237	pentafluorethyl	methylsulph hanyl	Me	H	C H	CH	CCl	C H	S	H	1- xyanoxyclopr opyl		
238	pentafluorethyl	CF ₃	Pr	Me	C H	CH	CCl	C H	S	Me	1- xyanoxyclopr opyl		
239	pentafluorethyl	CF ₃	Pr	Me	C H	CH	CF	C H	S	Me	1- xyanoxyclopr opyl		
240	pentafluorethyl	CF ₃	Et	Me	C H	CH	CF	C H	S	H	1- xyanoxyclopr opyl		

Thứ nghị ệ m số	Z ¹	Z ²	Z ³	R ¹	A ¹	A ²	A ³	A ⁴	W	R ⁶	Q	logP	Phổ khối [m/z] 1
241	pentafluorethyl	methoxyethyl	Me	H	C H	CH	CCl	C H	S	H	1- methoxyethyl		
242	pentafluorethyl	CF ₃	Pr	Et	C H	CH	CCl	C H	S	H	1- methoxyethyl		
243	pentafluorethyl	CF ₃	Pr	Et	C H	CH	CCl	C H	S	Et	1- methoxyethyl		
244	pentafluorethyl	CF ₃	Et	Et	C H	CH	CCl	C H	S	Et	1- methoxyethyl		
245	pentafluorethyl	CF ₃	Me	acet	C H	CH	CCl	C H	S	H	1- methoxyethyl		
246	pentafluorethyl	CF ₃	Me	pyridin-3-ylmethyl	C H	CH	CCl	C H	S	H	1- methoxyethyl		
247	pentafluorethyl	CF ₃	Me	2-methylprop-2-en-1-yl	C H	CH	CCl	C H	S	H	1- methoxyethyl		

Thứ nghị ệ m số	Z ¹	Z ²	Z ³	R ¹	A ¹	A ²	A ³	A ⁴	W	R ⁶	Q	logP	Phổ khối [m/z] 1
248	pentafluorethyl	CF ₃	Me	pyridin-4-ylmethyl	C H	CH	CCl	C H	S	H	1- xyanoxycyclopropyl		
249	pentafluorethyl	CF ₃	prop-2-yn-1-yl	H	C H	CH	CCl	C H	S	H	1- xyanoxycyclopropyl		
250	pentafluorethyl	CF ₃	prop-2-en-1-yl	H	C H	CH	CCl	C H	S	H	1- xyanoxycyclopropyl		
251	pentafluorethyl	CF ₃	Me	H	C H	CF	CBr	C H	S	H	1- xyanoxycyclopropyl		
252	pentafluorethyl	CF ₃	Me	propionyl	C H	CH	CCl	C H	S	propionyl	1- xyanoxycyclopropyl		
253	pentafluorethyl	CF ₃	Me	H	C H	CH	CCl	C H	S	Et	1- xyanoxycyclopropyl		

Thứ nghị ệ m số	Z ¹	Z ²	Z ³	R ¹	A ¹	A ²	A ³	A ⁴	W	R ⁶	Q	logP	Phổ khối [m/z] 1
254	pentafluorylethyl	CF ₃	Me	H	C H	CH	CCl	C H	S	Me	1- xyanoxycyclopr opyl		
255	pentafluorylethyl	CF ₃	Me	isopropoxycarb onyl	C H	CH	CCl	C H	S	H	1- xyanoxycyclopr opyl		
256	pentafluorylethyl	CF ₃	2,2,2- trifluoroethyl	H	C H	CH	CCl	C H	S	H	1- xyanoxycyclopr opyl		

Khối được chỉ ra là dạng đồng vị của ion $[M+H]^+$ có cường độ cao nhất; khi ion $[M-H]^-$ được phát hiện, khối chỉ ra được đánh dấu bằng ².

² Khối được chỉ ra là đỉnh của dạng đồng vị của ion $[M-H]^-$ có cường độ cao nhất.

a) Chú ý đề cập đến việc xác định các trị số logP và sự phát hiện khối lượng: việc xác định các trị số logP được tiến hành theo EEC Directive 79/831 Annex V.A8 bằng HPLC (sắc ký lỏng hiệu suất cao) trên cột pha đảo (C18). Hệ Agilent 1100 LC; 50*4,6 Zorbax Eclipse Plus C18 1,8 micron; pha động A: axetonitril (0,1% axit formic); pha động B: nước (0,09% axit formic); pha tuyến tính từ 10% axetonitril đến 95% axetonitril trong 4,25 phút, sau đó là 95% axetonitril trong 1,25 phút nữa; nhiệt độ lò 55°C; lưu lượng: 2,0 ml/phút. Phát hiện khối lượng thông qua hệ Agilent MSD.

b) Chú ý về việc xác định các trị số logP và sự phát hiện khối lượng: trị số log P được xác định theo EEC Directive 79/831 Annex V.A8 bằng HPLC (sắc ký lỏng hiệu suất cao) bằng cách sử dụng cột pha đảo (C18). HP1100; 50*4.6 Zorbax Eclipse Plus C18 1,8 micron; pha động A: axetonitril (0,1% axit formic); pha động B: nước (0,08% axit formic); pha tuyến tính từ 5% axetonitril đến 95% axetonitril trong 1,70 phút, sau đó là 95% axetonitril trong 1,00 phút nữa; nhiệt độ lò 55°C; lưu lượng: 2,0 ml/phút. Phát hiện khối lượng thông qua bộ phát hiện khối lượng Micromass ZQ2000 của Waters.

Dữ liệu NMR của các ví dụ lựa chọn

Dữ liệu ¹H-NMR của các ví dụ lựa chọn được đưa ra ở dạng danh sách đỉnh ¹H-NMR. Với mỗi đỉnh tín hiệu, trị số δ theo ppm và cường độ tín hiệu trong dấu ngoặc đơn được chỉ ra.

Ví dụ số 3, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 600,13MHz 11,2357 (5,81); 9,4015 (2,32); 7,9529 (0,33); 7,9112 (0,33); 7,6345 (0,34); 7,4603 (2,39); 7,3952 (0,42); 7,3764 (0,35); 7,3658 (0,38); 7,3009 (0,7); 7,2887 (0,72); 4,4308 (0,59); 4,4236 (0,6); 4,0461 (1,28); 4,0342 (3,7); 4,0223 (3,71); 4,0105 (1,26); 3,853 (0,6); 3,8474 (0,42); 3,8307 (0,44); 3,7989 (0,86); 3,788 (1,25); 3,7603 (10,68); 3,7331 (1,16); 3,726 (1,01); 3,7196 (0,75); 3,7116 (0,53); 3,7053 (0,33); 3,459 (0,59); 3,4058 (13,82); 3,3755 (1,92); 3,3496 (164,63); 3,3259 (1,89); 3,2237 (0,45); 2,8908 (2,26); 2,7309 (1,92); 2,6212 (0,39); 2,6184 (0,58); 2,6154 (0,72); 2,6125 (0,61); 2,5427 (1,49); 2,5244 (3,1); 2,5214 (3,56); 2,5182 (3,84); 2,5093 (28,51); 2,5064 (58,78); 2,5034 (80,56); 2,5004 (60,43); 2,4975 (29,82); 2,3903 (0,38); 2,3873 (0,5); 2,3843

(0,39); 2,2647 (0,57); 2,2538 (0,97); 2,2442 (0,58); 2,2423 (0,63); 2,0871 (0,62); 2,0233 (0,41); 2,0152 (0,44); 2,0134 (0,46); 1,9905 (16); 1,9096 (1,12); 1,851 (0,52); 1,8378 (0,99); 1,7685 (0,38); 1,7588 (0,55); 1,7475 (0,49); 1,7373 (0,4); 1,7288 (0,34); 1,7133 (0,34); 1,7077 (0,35); 1,6908 (0,37); 1,6852 (0,36); 1,6645 (0,89); 1,6546 (1,09); 1,6502 (1,34); 1,6452 (1,8); 1,6419 (1,74); 1,637 (1,45); 1,6253 (1,25); 1,6174 (0,98); 1,6101 (0,88); 1,5994 (5,38); 1,5901 (11,8); 1,5856 (12,84); 1,5767 (5,21); 1,55 (0,56); 1,4866 (0,63); 1,473 (0,68); 1,467 (0,7); 1,4621 (0,62); 1,4595 (0,61); 1,4523 (0,5); 1,4479 (0,41); 1,4361 (0,35); 1,3967 (1,99); 1,3471 (5,81); 1,2984 (1,34); 1,2782 (1,83); 1,2518 (6,83); 1,2423 (12,83); 1,2384 (14,34); 1,2293 (8,19); 1,2043 (2,47); 1,1864 (5,57); 1,1746 (9,7); 1,1627 (5,14); 1,1493 (0,89); 1,1396 (0,87); 1,1361 (0,62); 1,1312 (0,65); 1,1158 (0,53); 1,111 (0,55); 1,108 (0,57); 1,1022 (0,42); 1,0935 (0,51); 1,0875 (0,48); 1,0847 (0,45); 1,0749 (0,38); 1,0668 (0,41); 1,0552 (0,36); 0,8965 (0,36); 0,8891 (1,06); 0,8851 (0,68); 0,8808 (0,62); 0,8743 (0,76); 0,8695 (0,73); 0,8627 (0,7); 0,8536 (0,94); 0,8421 (0,6); 0,8361 (0,4); 0,8234 (0,34); -0,0001 (1,54)

Ví dụ số 4, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 399,95MHz

19,9995 (0,35); 11,1852 (0,43); 7,6987 (0,97); 7,6759 (1,26); 7,5988 (1,74); 7,5752 (1,65); 7,4867 (2,1); 7,3938 (0,43); 7,3652 (0,84); 7,2019 (0,66); 5,7464 (4,97); 4,0662 (6,84); 4,0391 (1,88); 4,0214 (2,04); 3,9933 (16); 3,595 (0,77); 3,5647 (0,67); 3,4575 (11,78); 3,3059 (1902,13); 3,2823 (28,24); 3,251 (7,34); 3,1867 (1,32); 3,0111 (0,86); 2,9377 (0,79); 2,9232 (0,87); 2,8698 (1,22); 2,7378 (0,55); 2,6938 (0,68); 2,6741 (2,27); 2,6694 (2,78); 2,6647 (2,28); 2,5392 (5,5); 2,5089 (156,27); 2,5047 (278,63); 2,5003 (354,49); 2,496 (248,83); 2,3948 (0,32); 2,3317 (1,82); 2,327 (2,38); 2,0693 (1,78); 2,0088 (0,37); 1,9867 (5,95); 1,9077 (1,11); 1,7114 (5,17); 1,6397 (0,5); 1,5825 (0,5); 1,4849 (1,82); 1,3986 (7,92); 1,3522 (3,78); 1,2986 (3,52); 1,259 (3,75); 1,2366 (4,08); 1,2171 (1,92); 1,1981 (2,64); 1,1928 (3,24); 1,1751 (4,15); 1,1572 (2,51); 1,1005 (2,54); 0,8906 (0,33); 0,8673 (0,4); 0,8547 (0,48); -0,0002 (5,05)

Ví dụ số 5, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 601,6MHz

7,7016 (0,47); 7,6872 (0,61); 7,646 (0,57); 7,6419 (0,64); 7,6063 (0,37); 7,6024 (0,36); 7,5921 (0,54); 7,5882 (0,56); 7,579 (0,6); 7,3776 (1,3); 7,3475 (0,34); 5,7617 (16); 4,0701 (2,56); 4,0607 (0,79); 4,0345 (0,58); 4,0227 (0,63); 4,0108 (0,48); 3,9904 (2,73); 3,4829 (0,66); 3,4608 (9,78); 3,4259 (0,46); 3,3469 (320,39); 3,3232 (1,5); 3,2777 (0,75); 3,2493 (2,86); 3,2349 (0,66); 3,1106 (0,9); 3,076 (0,68); 2,8649 (2,78); 2,6213 (0,57); 2,6183 (0,8); 2,6153 (0,97); 2,6122 (0,82); 2,6093 (0,59); 2,543 (0,42); 2,5246 (1,24); 2,5215 (1,51); 2,5184 (1,42); 2,5096 (29,65); 2,5066 (65,23); 2,5035 (89,35); 2,5005 (63,63); 2,4975 (28,79); 2,3908 (0,39); 2,3877 (0,55); 2,3847 (0,39); 2,0771 (1); 1,9902 (1,99); 1,6767 (1,95); 1,6734 (2,2); 1,424 (0,34); 1,2981 (0,62); 1,2582 (0,83); 1,2356 (0,77); 1,1865 (0,59); 1,1747 (1,16); 1,1629 (0,58); -0,0002 (5,52)

Ví dụ số 6, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 399,95MHz

9,5105 (1,11); 9,37 (2,71); 7,6861 (0,89); 7,6648 (1,1); 7,6188 (1,04); 7,6126 (1,08); 7,5402 (2,64); 7,5188 (3,08); 7,5037 (0,69); 7,4974 (0,6); 7,4823 (0,53); 7,4761 (0,48); 7,4235 (2,42); 7,4171 (2,51); 7,2689 (1,57); 7,2623 (1,43); 7,2476 (1,35); 7,2409 (1,22); 4,1197 (0,76); 4,1021 (1,01); 4,0852 (1,27); 4,0686 (4,88); 4,0575 (1,57); 4,0496 (0,54); 4,0397 (3,72); 4,0219 (3,71); 4,0041 (1,27); 3,8782 (10,99); 3,835 (0,33); 3,817 (0,89); 3,7993 (1,08); 3,7824 (0,96); 3,7647 (0,74); 3,6837 (0,33); 3,6654 (0,43); 3,6475 (0,38); 3,5854 (0,39); 3,5673 (0,46); 3,5489 (0,34); 3,3007

(145,63); 3,2772 (2,79); 2,6695 (0,34); 2,5395 (0,82); 2,5225 (1,85); 2,5092 (19,84); 2,5049 (35,06); 2,5004 (44,17); 2,4961 (30,18); 2,4917 (14,34); 1,987 (16); 1,6127 (0,63); 1,6036 (1,61); 1,5987 (1,68); 1,5905 (3,88); 1,5832 (3,24); 1,57 (1,36); 1,3041 (0,63); 1,2906 (1,18); 1,2841 (1,18); 1,2696 (0,62); 1,2594 (0,5); 1,2375 (1,04); 1,2307 (1,64); 1,2171 (3,03); 1,2106 (3,03); 1,1931 (4,97); 1,1753 (9,03); 1,1575 (7,71); 1,1395 (7,05); 1,1216 (3,13); 0,962 (1,16); 0,9444 (2,37); 0,9267 (1,1); -0,0002 (4,85)

Ví dụ số 7, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 399,95MHz

11,4754 (1,96); 9,5774 (3,66); 7,8103 (3,62); 7,804 (4,04); 7,7228 (1,61); 7,7165 (1,38); 7,701 (2,26); 7,6946 (2,08); 7,606 (3,39); 7,5841 (2,38); 4,0559 (1,18); 4,0345 (16); 4,0204 (3,51); 4,0025 (1,13); 3,3203 (18,4); 2,7184 (0,84); 2,7027 (1,21); 2,6977 (1,45); 2,6851 (1,56); 2,6827 (1,57); 2,6699 (2,11); 2,6503 (1,2); 2,5102 (14,26); 2,5059 (28,52); 2,5014 (37,33); 2,4969 (26,79); 2,4927 (12,96); 2,4835 (1,57); 2,4608 (2,15); 2,4525 (1,25); 2,4404 (1,55); 2,4316 (1,69); 2,4084 (0,97); 2,1036 (0,56); 2,0953 (0,6); 2,085 (1,52); 2,0732 (1,03); 2,0651 (2,45); 2,058 (1,57); 2,0451 (1,65); 2,0352 (0,77); 2,0288 (0,39); 2,0252 (0,41); 2,0196 (0,4); 1,9889 (13,81); 1,1925 (3,78); 1,1747 (7,53); 1,1569 (3,66); -0,0002 (0,53)

Ví dụ số 8, dung môi: [CD₃CN], quang phổ kế: 399,95MHz

7,6396 (0,36); 7,5867 (0,51); 7,5653 (0,89); 7,544 (0,65); 7,5381 (0,86); 7,5157 (0,67); 7,5093 (0,52); 7,4941 (0,53); 7,4875 (0,63); 7,4768 (0,79); 7,3968 (2,11); 7,3753 (2,53); 7,3065 (1,94); 7,2998 (2,09); 7,1716 (1,4); 7,1649 (1,32); 7,1502 (1,17); 7,1434 (1,07); 3,9903 (3,54); 3,8495 (10,24); 3,4568 (16); 3,2228 (4,6); 2,1412 (168,83); 2,1318 (2,24); 2,1187 (0,37); 2,1125 (0,33); 2,1063 (0,38); 1,9749 (1,26); 1,9632 (92,07); 1,9513 (18,04); 1,9451 (33,99); 1,9389 (49,06); 1,9328 (33,45); 1,9266 (16,89); 1,7909 (0,5); 1,5939 (0,45); 1,5781 (1,51); 1,5737 (1,53); 1,5637 (2,7); 1,5577 (3,02); 1,5476 (0,89); 1,5443 (0,86); 1,3605 (0,47); 1,3468 (0,97); 1,3398 (1,12); 1,3254 (0,39); 1,2938 (1,35); 1,2881 (1,36); 1,2837 (1,68); 1,2798 (2,1); 1,2733 (1,74); 1,2636 (1,03); -0,0002 (5,39)

Ví dụ số 9, dung môi: [CD₃CN], quang phổ kế: 601,6MHz

9,3097 (0,56); 7,77 (3,79); 7,7657 (4,14); 7,6801 (2,48); 7,6757 (2,25); 7,6656 (2,92); 7,6612 (2,72); 7,6146 (1,14); 7,4969 (4,24); 7,4825 (3,68); 3,981 (16); 2,1615 (181,62); 2,0874 (0,35); 2,0771 (1,5); 2,0604 (0,46); 2,0563 (0,85); 2,0522 (1,16); 2,048 (0,87); 2,044 (0,44); 1,9735 (2,01); 1,9659 (259,46); 1,9576 (3,22); 1,9536 (3,65); 1,9499 (74,77); 1,9457 (141,93); 1,9416 (218,7); 1,9375 (150,41); 1,9334 (73,06); 1,9287 (2,12); 1,9246 (0,98); 1,8507 (1,44); 1,8351 (0,43); 1,831 (0,84); 1,8269 (1,17); 1,8227 (0,83); 1,8186 (0,43); 1,5805 (1,94); 1,5707 (4,1); 1,5665 (4,32); 1,5572 (2,31); 1,351 (2,23); 1,3416 (4); 1,3375 (4,07); 1,3276 (1,81); 0,9112 (1,45); 0,0053 (0,53); -0,0002 (20,71); -0,0057 (0,61)

Ví dụ số 10, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 600,13MHz

11,4592 (3,78); 9,4859 (4,45); 7,7721 (3,8); 7,7678 (4,24); 7,7112 (2,06); 7,7068 (1,78); 7,6966 (2,55); 7,6922 (2,36); 7,5881 (4,49); 7,5736 (3,69); 4,0356 (0,65); 4,0285 (16); 3,3215 (12,57); 2,5227 (0,37); 2,5196 (0,46); 2,5165 (0,45); 2,5077 (11,12); 2,5047 (24,25); 2,5017 (33,57); 2,4986 (24,06); 2,4956 (10,94); 1,989 (1,5); 1,6018 (1,64); 1,5924 (3,8); 1,5879 (4,14); 1,5789 (1,69); 1,2696 (1,81); 1,2604 (3,74); 1,256 (4,13); 1,2464 (1,5); 1,1871 (0,41); 1,1753 (0,83); 1,1634 (0,41); 0,0053 (0,46); -0,0001 (14,7); -0,0057 (0,44)

Ví dụ số 11, dung môi: [CD₃CN], quang phổ kế: 601,6MHz

9,4276 (0,94); 8,1604 (0,81); 8,1562 (0,84); 8,0909 (3,21); 8,0868 (3,24); 7,8499 (0,65); 7,8457 (0,65); 7,6042 (1,17); 7,5896 (3,34); 7,5855 (3,31); 3,99 (0,48); 3,9775 (16); 2,2102 (11,21); 2,0881 (0,39); 2,0779 (0,4); 2,0656 (0,66); 2,0611 (0,41); 2,057 (0,54); 2,0529 (0,65); 2,0486 (0,62); 2,048 (0,62); 2,0447 (0,36); 1,9732 (0,39); 1,9666 (16,06); 1,9584 (0,96); 1,9542 (1,36); 1,9506 (29,13); 1,9464 (53,99); 1,9423 (82,18); 1,9382 (57,22); 1,9341 (28,42); 1,9294 (1,09); 1,9253 (0,59); 1,8317 (0,39); 1,8276 (0,51); 1,8234 (0,37); 1,5826 (1,54); 1,5728 (3,25); 1,5686 (3,38); 1,5593 (1,89); 1,3599 (1,74); 1,3506 (3,08); 1,3464 (3,24); 1,3366 (1,49); 0,911 (0,48); -0,0002 (0,46)

Ví dụ số 12, dung môi: [CD₃CN], quang phổ kế: 601,6MHz

9,4577 (0,94); 7,9506 (3,67); 7,9465 (3,74); 7,6252 (1,29); 7,6178 (0,41); 7,5485 (3,85); 7,5444 (3,76); 5,4498 (1,24); 4,1225 (0,39); 3,9907 (0,48); 3,9784 (16); 2,2016 (26,81); 2,0656 (0,9); 2,0571 (0,36); 2,053 (0,47); 2,0479 (0,79); 1,9732 (1,48); 1,9668 (2,89); 1,9586 (0,78); 1,9572 (0,41); 1,9544 (1,17); 1,9507 (24,16); 1,9466 (45,51); 1,9424 (67,8); 1,9383 (46,53); 1,9342 (23,27); 1,9296 (0,68); 1,8277 (0,39); 1,5858 (1,78); 1,576 (3,73); 1,5718 (3,9); 1,5625 (2,15); 1,3635 (2,04); 1,3541 (3,59); 1,3499 (3,77); 1,3401 (1,77); 1,269 (0,34); 1,2159 (0,42); 1,2041 (0,83); 1,1922 (0,4); 0,911 (0,44)

Ví dụ số 13, dung môi: [CD₃CN], quang phổ kế: 399,95MHz

9,425 (1,09); 8,1057 (3,59); 8,0995 (3,63); 8,089 (0,38); 8,0828 (0,33); 7,9667 (0,34); 7,6477 (3,95); 7,6415 (4,02); 7,626 (1,54); 7,6058 (0,49); 7,5997 (0,42); 7,5882 (0,4); 7,582 (0,48); 7,4416 (0,5); 4,1118 (0,33); 4,0862 (1,68); 4,0683 (4,78); 4,0505 (4,77); 4,0327 (1,64); 3,9761 (16); 3,8931 (3,57); 2,1489 (347,53); 2,1318 (7,91); 2,1127 (2,21); 2,1065 (2,07); 2,1003 (1,56); 2,0941 (1,09); 2,0486 (0,56); 2,0434 (0,54); 1,9712 (32,63); 1,9634 (416,05); 1,9514 (67,15); 1,9453 (119,86); 1,9391 (167,42); 1,9329 (114,6); 1,9267 (58,47); 1,7911 (2,41); 1,7799 (0,49); 1,7737 (0,78); 1,7675 (1,01); 1,7614 (0,72); 1,7553 (0,42); 1,6282 (0,54); 1,6129 (1,02); 1,6069 (1,1); 1,604 (0,72); 1,5923 (0,84); 1,5869 (1,9); 1,5726 (4,35); 1,5656 (4,47); 1,5518 (2,49); 1,5116 (0,39); 1,3551 (2,45); 1,3413 (4,31); 1,3343 (4,21); 1,3295 (1,9); 1,3202 (2,1); 1,3078 (0,68); 1,2852 (0,55); 1,2708 (1,26); 1,2216 (6,04); 1,2038 (11,75); 1,1859 (5,85); 0,9117 (0,79); 0,008 (0,82); -0,0002 (18,6); -0,0085 (0,72)

Ví dụ số 14, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 601,6MHz

11,475 (2,8); 9,482 (4,01); 7,7377 (4,18); 7,7332 (5,35); 7,7173 (3,05); 7,6669 (0,49); 7,6647 (0,45); 7,6299 (2,01); 7,6257 (1,86); 7,6155 (1,61); 7,6111 (1,54); 4,046 (0,85); 4,0342 (3,8); 4,0263 (16); 4,0225 (3,74); 4,0105 (0,89); 3,3858 (0,71); 3,3809 (1,58); 3,3784 (1,63); 3,3578 (1678,47); 3,3341 (3,39); 3,0116 (0,41); 2,8065 (0,44); 2,6184 (0,64); 2,6153 (0,91); 2,6123 (0,64); 2,543 (0,47); 2,5247 (1,22); 2,5216 (1,5); 2,5185 (1,46); 2,5097 (46,46); 2,5066 (102,74); 2,5036 (142,42); 2,5006 (100,14); 2,4975 (44,69); 2,3908 (0,62); 2,3877 (0,87); 2,3847 (0,62); 2,0764 (1,87); 1,99 (10,94); 1,6062 (1,8); 1,5968 (4,05); 1,5923 (4,48); 1,5834 (1,81); 1,3972 (8,53); 1,272 (1,92); 1,2628 (3,88); 1,2584 (4,36); 1,2489 (1,8); 1,1863 (2,99); 1,1745 (5,92); 1,1626 (2,92); 0,0053 (0,68); -0,0002 (22,51); -0,0058 (0,62)

Ví dụ số 15, dung môi: [CD₃CN], quang phổ kế: 601,6MHz

7,6736 (3,25); 7,6594 (3,63); 7,6529 (0,62); 7,6383 (0,67); 7,5026 (1,73); 7,476 (1,42); 7,4719 (1,04); 7,4618 (1,32); 7,4578 (1,01); 7,4501 (0,41); 7,4349 (0,37); 5,3097 (0,35); 5,2976 (0,39); 4,0762 (0,87); 4,0644 (2,65); 4,0525 (2,74); 4,0407 (0,93); 3,9757 (0,91); 3,9408 (5,26); 3,9313 (16); 2,8568 (0,62); 2,8452 (1,86); 2,8333

(1,86); 2,8212 (0,7); 2,5123 (0,35); 2,4998 (1,1); 2,4874 (1,07); 2,4749 (0,42); 2,2936 (1,21); 2,2824 (1,31); 2,2699 (0,62); 2,2265 (0,62); 2,2149 (0,61); 2,1802 (0,36); 2,1739 (0,55); 2,1673 (0,84); 2,1535 (644,37); 2,1294 (0,59); 2,1215 (0,48); 2,0601 (0,87); 2,0561 (1,51); 2,0519 (2,22); 2,0478 (1,52); 2,0437 (0,77); 1,9727 (12,69); 1,9656 (21,18); 1,9575 (11,83); 1,9534 (14,58); 1,9496 (147,5); 1,9454 (266,85); 1,9413 (402,32); 1,9372 (276,01); 1,9331 (137,69); 1,9244 (1,96); 1,8503 (0,47); 1,8347 (1,84); 1,8307 (2,73); 1,8266 (3,2); 1,8225 (2,22); 1,8184 (1,32); 1,7246 (0,62); 1,7188 (0,99); 1,7132 (0,82); 1,6902 (1,73); 1,6658 (1); 1,6361 (0,55); 1,6214 (0,44); 1,6159 (0,49); 1,5864 (0,66); 1,5822 (0,66); 1,5728 (0,47); 1,5666 (0,46); 1,5571 (0,39); 1,5334 (1,65); 1,5063 (1,02); 1,5029 (0,92); 1,4777 (0,65); 1,4659 (0,65); 1,3852 (0,49); 1,3515 (0,42); 1,3403 (1,5); 1,3284 (0,54); 1,2851 (2,14); 1,2701 (1,88); 1,2384 (0,36); 1,2227 (0,53); 1,2158 (4,13); 1,2039 (7,13); 1,1963 (1,02); 1,1921 (4,09); 1,1765 (0,52); 1,1568 (0,64); 1,1488 (1,95); 1,1363 (4,5); 1,1315 (0,55); 1,1238 (2,55); 1,1152 (0,75); 1,1112 (1,54); 1,1021 (0,47); 1,0987 (0,78); 1,0915 (6,22); 1,0797 (12,97); 1,0677 (6,14); 1,0509 (0,37); 1,0462 (0,5); 1,0418 (0,48); 1,0022 (0,57); 0,9849 (0,79); 0,9637 (0,69); 0,949 (4,67); 0,9431 (1,35); 0,9371 (10,26); 0,9313 (2,24); 0,9244 (5,69); 0,9194 (1,11); 0,9121 (1,74); 0,8817 (0,48); 0,0964 (0,45); 0,0053 (3,79); -0,0002 (131,79); -0,0058 (3,52); -0,1 (0,49)

Ví dụ số 16, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 601,6MHz

11,6171 (2,98); 9,5642 (4,11); 8,0041 (4,64); 8,0001 (4,81); 7,5795 (3,62); 7,5754 (3,58); 4,377 (0,35); 4,3686 (0,7); 4,3601 (0,34); 4,0417 (16); 4,0342 (2,77); 4,0223 (2,5); 4,0105 (0,81); 3,9261 (1,01); 3,4494 (0,63); 3,4409 (0,64); 3,4378 (0,67); 3,4293 (0,66); 3,3467 (410,03); 3,3231 (3,18); 2,6178 (0,42); 2,6148 (0,6); 2,6118 (0,44); 2,5425 (0,44); 2,524 (1,29); 2,521 (1,64); 2,5178 (1,9); 2,509 (30,94); 2,5061 (65,8); 2,5031 (89,43); 2,5 (63,28); 2,497 (28,23); 2,3902 (0,4); 2,3872 (0,55); 2,3842 (0,39); 2,0769 (0,6); 1,99 (10,77); 1,9093 (0,47); 1,6161 (1,9); 1,6067 (4,15); 1,6022 (4,51); 1,5933 (1,81); 1,3972 (13,57); 1,3139 (0,32); 1,2846 (2,01); 1,2754 (3,98); 1,271 (4,39); 1,2614 (1,64); 1,1863 (2,93); 1,1745 (6,06); 1,1627 (2,93); 1,0665 (1,46); 1,0549 (2,75); 1,0433 (1,33); 0,0052 (0,71); -0,0002 (20,09); -0,0057 (0,51)

Ví dụ số 17, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 399,95MHz

10,9164 (2,69); 9,4701 (3,13); 7,8379 (2,16); 7,8316 (2,46); 7,7664 (1,22); 7,76 (1,05); 7,7445 (1,48); 7,7381 (1,32); 7,5569 (3,32); 7,5351 (2,79); 5,7527 (16); 4,0382 (0,59); 4,0204 (0,58); 3,9311 (10,48); 3,9291 (10,23); 3,4476 (0,32); 3,4238 (0,79); 3,3995 (1,41); 3,3529 (444,16); 3,2649 (0,45); 2,6723 (0,35); 2,5255 (1,04); 2,5123 (20,85); 2,5078 (42,03); 2,5032 (55,95); 2,4986 (40,59); 2,4941 (19,88); 2,3299 (0,35); 2,0728 (0,88); 1,9887 (2,51); 1,6084 (1,2); 1,5942 (2,85); 1,5874 (2,99); 1,5741 (1,42); 1,4745 (0,54); 1,4586 (1,66); 1,4548 (1,64); 1,4399 (0,7); 1,4294 (0,58); 1,4133 (1,6); 1,4094 (1,68); 1,3975 (0,83); 1,3948 (0,79); 1,2663 (1,44); 1,2525 (2,82); 1,246 (3,04); 1,2314 (1,24); 1,1927 (0,77); 1,1749 (1,45); 1,1571 (0,71); 1,129 (0,6); 1,1124 (1,86); 1,1085 (2,26); 1,0923 (2,2); 1,0884 (1,8); 1,0706 (0,5)

Ví dụ số 18, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 601,6MHz

7,8045 (2,23); 7,7904 (2,42); 7,6562 (0,38); 4,0456 (0,8); 4,0338 (2,39); 4,0304 (0,69); 4,0219 (3,08); 4,015 (16); 3,3608 (569,24); 3,3375 (3,07); 2,6187 (0,62); 2,6157 (0,85); 2,6127 (0,62); 2,5434 (0,54); 2,525 (1,66); 2,5219 (2,15); 2,5188 (2,4); 2,51 (45,96); 2,507 (97,64); 2,504 (134,23); 2,5009 (97,3); 2,4979 (44,27); 2,4056 (15,53); 2,3974 (1,27); 2,3945 (0,66); 2,3911 (0,88); 2,3882 (1,2); 2,3851 (0,77); 2,3823 (0,42);

2,2183 (1,21); 2,0872 (0,45); 2,0779 (2,65); 2,0487 (3,59); 2,0305 (0,77); 2,0256 (0,48); 1,9905 (10,01); 1,9538 (0,39); 1,9098 (4,41); 1,8867 (0,87); 1,8814 (0,87); 1,3969 (14,61); 1,2345 (0,46); 1,1862 (2,73); 1,1744 (5,37); 1,1653 (0,38); 1,1625 (2,65); -0,0002 (9,42)

Ví dụ số 19, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 399,95MHz

9,6008 (2,87); 7,7336 (2,68); 7,7122 (3,27); 7,6828 (2,15); 7,6766 (2,25); 7,518 (1,37); 7,5117 (1,26); 7,4968 (1,12); 7,4904 (1,05); 4,066 (10,48); 4,0381 (0,83); 4,0203 (1,07); 4,0026 (0,33); 3,6767 (16); 3,487 (0,45); 3,4643 (0,44); 3,4467 (0,79); 3,4391 (0,81); 3,4231 (1,05); 3,4136 (1,13); 3,3468 (882,82); 3,3224 (20,56); 3,2828 (0,63); 2,6764 (0,54); 2,6718 (0,74); 2,6674 (0,52); 2,542 (0,61); 2,5249 (2,21); 2,5118 (42,56); 2,5073 (85,34); 2,5028 (113,7); 2,4982 (82,44); 2,4937 (40); 2,3341 (0,49); 2,3295 (0,72); 2,3249 (0,52); 2,0729 (3,68); 1,9886 (3,32); 1,6558 (0,33); 1,6144 (1,37); 1,6001 (2,7); 1,5932 (2,9); 1,5801 (1,41); 1,2938 (1,3); 1,2802 (2,57); 1,2735 (2,8); 1,2588 (1,33); 1,2356 (0,78); 1,1925 (0,98); 1,1748 (2); 1,1569 (1); 0,008 (1,05); -0,0002 (28,19); -0,0085 (1,08)

Ví dụ số 20, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 601,6MHz

9,6087 (4,57); 7,7293 (4,27); 7,7152 (4,9); 7,6801 (2,65); 7,676 (2,67); 7,4972 (1,63); 7,493 (1,51); 7,4831 (1,43); 7,4788 (1,38); 4,3682 (0,58); 4,1597 (0,43); 4,1483 (1); 4,1369 (1,24); 4,1257 (1,28); 4,1143 (1); 4,1025 (0,47); 4,0779 (16); 4,0458 (0,46); 4,0339 (1,37); 4,0221 (1,98); 4,0103 (0,59); 3,449 (0,49); 3,4406 (0,49); 3,4374 (0,48); 3,429 (0,51); 3,3716 (1,66); 3,3457 (1847,32); 3,3222 (24,12); 2,6205 (0,63); 2,6176 (1,47); 2,6145 (2,05); 2,6115 (1,48); 2,6085 (0,63); 2,5422 (0,95); 2,5239 (2,46); 2,5208 (3,15); 2,5177 (3,1); 2,5088 (106,25); 2,5058 (238,45); 2,5028 (334,46); 2,4997 (242,59); 2,4967 (110,57); 2,393 (0,68); 2,39 (1,49); 2,3869 (2,09); 2,3839 (1,49); 2,3808 (0,69); 2,0766 (4,02); 1,9898 (5,37); 1,6109 (1,83); 1,6016 (3,88); 1,5971 (4,4); 1,5882 (2,19); 1,5763 (0,45); 1,2977 (0,37); 1,2859 (1,83); 1,2767 (3,71); 1,2723 (4,13); 1,2627 (1,75); 1,2579 (0,87); 1,2535 (1,01); 1,2499 (0,7); 1,2416 (1,16); 1,2342 (1,17); 1,23 (0,84); 1,1861 (1,54); 1,1742 (3,2); 1,1624 (1,62); 1,1496 (0,36); 1,0663 (1,12); 1,0546 (2); 1,043 (1,01); 0,9965 (6,51); 0,9847 (13,73); 0,973 (6,33); 0,0965 (0,41); 0,0053 (3,4); -0,0002 (125,56); -0,0058 (3,65); -0,1001 (0,45)

Ví dụ số 21, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 399,95MHz

7,7082 (2,45); 7,6866 (3,64); 7,6836 (2,1); 7,6766 (1,8); 7,663 (0,46); 7,5662 (0,33); 7,5492 (1,41); 7,5429 (1,29); 7,5279 (1,11); 7,5216 (1,06); 4,0591 (10,46); 4,038 (1,4); 4,0203 (2,19); 4,0025 (0,48); 3,7168 (0,33); 3,679 (15,83); 3,6733 (4,07); 3,6676 (16); 3,4322 (0,35); 3,3435 (321,55); 3,3363 (458,6); 3,2717 (0,52); 3,1751 (0,88); 3,162 (0,79); 2,6807 (0,32); 2,676 (0,65); 2,6714 (0,93); 2,6667 (0,65); 2,5415 (0,74); 2,5246 (2,58); 2,5114 (50,63); 2,5069 (102,7); 2,5023 (137,44); 2,4977 (99,21); 2,4931 (48,14); 2,3337 (0,63); 2,3291 (0,88); 2,3244 (0,63); 2,0731 (1,7); 1,9885 (5,54); 1,9008 (1,74); 1,8954 (2,04); 1,6574 (0,47); 1,6142 (1,05); 1,5995 (1,75); 1,5933 (1,89); 1,2728 (0,35); 1,2585 (0,57); 1,2522 (0,48); 1,2358 (0,96); 1,1925 (1,64); 1,1747 (3,39); 1,1569 (1,68); -0,0002 (6,5)

Ví dụ số 22, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 601,6MHz

7,7596 (0,35); 7,711 (3,38); 7,6968 (4,08); 7,6797 (1,48); 7,5444 (1,6); 7,5402 (1,49); 7,5303 (1,29); 7,526 (1,24); 4,3683 (0,44); 4,2593 (0,33); 4,2476 (0,33); 4,1566 (0,43); 4,1449 (0,94); 4,1332 (1,15); 4,1243 (1,15); 4,1129 (1,05); 4,1045 (0,75); 4,0946 (1,48); 4,0828 (3,99); 4,0686 (16); 4,0595 (1,27); 4,034 (0,45); 4,0221 (0,58);

4,0158 (0,43); 4,0103 (0,4); 3,449 (0,38); 3,4406 (0,38); 3,4374 (0,4); 3,429 (0,41); 3,3742 (1,02); 3,3457 (1563,22); 3,322 (28,53); 2,6206 (0,69); 2,6176 (1,46); 2,6146 (2,04); 2,6115 (1,44); 2,6085 (0,64); 2,5423 (1,22); 2,5239 (3,79); 2,5208 (5,05); 2,5176 (5,93); 2,5089 (109,54); 2,5059 (236,08); 2,5028 (323,23); 2,4997 (233,05); 2,4967 (103,3); 2,4766 (0,35); 2,3931 (0,66); 2,39 (1,43); 2,387 (2); 2,3839 (1,38); 2,3809 (0,63); 2,0767 (3,48); 1,9899 (1,42); 1,9031 (2,58); 1,6908 (0,35); 1,6696 (0,36); 1,6437 (0,33); 1,6184 (0,43); 1,5761 (1,67); 1,2579 (0,49); 1,2485 (0,35); 1,2344 (1,07); 1,2265 (0,65); 1,2146 (1,08); 1,2029 (0,52); 1,1861 (0,52); 1,1743 (1,03); 1,1705 (0,37); 1,1625 (0,52); 1,1492 (0,42); 1,0663 (0,87); 1,0547 (1,54); 1,043 (0,81); 1,0013 (6,44); 0,9895 (13,63); 0,9848 (1,07); 0,9817 (2,21); 0,9778 (6,34); 0,97 (0,97); 0,9557 (6,62); 0,9439 (14,2); 0,9321 (6,4); 0,0052 (3,03); -0,0002 (83,54); -0,0058 (2,47)

Ví dụ số 23, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 399,95MHz

9,5605 (1,88); 7,757 (1,46); 7,7355 (1,78); 7,6605 (0,8); 7,545 (0,66); 7,5386 (0,61); 7,5238 (0,55); 7,5174 (0,52); 4,058 (1,05); 4,0402 (3,29); 4,0271 (6,99); 4,0225 (4,44); 4,0046 (1,09); 3,3924 (24,23); 3,386 (32,63); 3,3799 (54,59); 3,377 (71,91); 2,5111 (7,26); 2,5069 (9,99); 2,5034 (6,54); 1,9898 (14,31); 1,6154 (0,75); 1,6011 (1,63); 1,5941 (1,77); 1,5811 (0,79); 1,3053 (0,83); 1,2917 (1,6); 1,2849 (1,74); 1,2704 (0,67); 1,2049 (0,71); 1,1943 (4); 1,1765 (8,08); 1,1587 (3,94); 1,1133 (2,92); 1,012 (16); -0,0002 (1,63)

Ví dụ số 24, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 399,95MHz

19,0481 (0,34); 12,999 (0,34); 11,6718 (0,32); 11,3817 (2,98); 11,2103 (0,33); 10,7432 (0,44); 10,1704 (0,38); 9,4484 (4,12); 9,4182 (0,34); 7,674 (2,45); 7,6678 (2,75); 7,5767 (3,19); 7,5699 (2,9); 7,471 (0,33); 4,1638 (0,77); 4,0557 (0,89); 4,0379 (3,26); 4,0189 (16); 4,0023 (1,06); 3,9243 (2,59); 3,4462 (0,32); 3,409 (0,48); 3,3939 (0,61); 3,3326 (387,86); 3,3263 (665,26); 3,3027 (8,07); 2,675 (1,43); 2,6707 (2,09); 2,6661 (1,44); 2,5406 (0,85); 2,5238 (3,39); 2,5058 (218,8); 2,5017 (290,84); 2,4581 (0,39); 2,4169 (0,78); 2,3781 (14,51); 2,3549 (0,74); 2,3328 (1,45); 2,3283 (2,04); 2,3241 (1,4); 2,3115 (0,8); 2,2563 (0,65); 2,0733 (1,71); 1,9884 (10,86); 1,6699 (0,36); 1,6549 (0,65); 1,6463 (0,63); 1,6341 (0,43); 1,6004 (1,6); 1,5859 (3,6); 1,5791 (3,91); 1,5661 (1,86); 1,3966 (0,4); 1,3312 (0,52); 1,318 (0,62); 1,3117 (0,71); 1,2978 (0,44); 1,2651 (1,73); 1,2518 (3,47); 1,2451 (3,89); 1,2311 (1,8); 1,217 (0,45); 1,1924 (3,07); 1,1745 (5,77); 1,1568 (2,92); 0,0081 (1,01); -0,0002 (34,96); -0,0085 (1,17); -3,0246 (0,33)

Ví dụ số 25, dung môi: [CD₃CN], quang phổ kế: 601,6MHz

7,9022 (3,82); 7,8879 (4,08); 7,6652 (3,91); 7,6609 (4,01); 7,52 (1,53); 7,4355 (2,47); 7,4312 (2,34); 7,4212 (2,34); 7,4169 (2,23); 4,0758 (0,58); 4,064 (1,8); 4,0521 (1,78); 4,0403 (0,62); 3,9724 (16); 3,893 (0,72); 2,1596 (251,61); 2,0611 (0,72); 2,057 (1,25); 2,0529 (1,77); 2,0487 (1,27); 2,0447 (0,68); 1,9732 (8,88); 1,9666 (29,58); 1,9584 (12,1); 1,9543 (16,7); 1,9505 (119,09); 1,9464 (214,31); 1,9423 (320,41); 1,9382 (222,08); 1,9341 (110,06); 1,9254 (2,33); 1,917 (0,76); 1,9128 (0,53); 1,9086 (0,36); 1,8357 (0,67); 1,8317 (1,23); 1,8275 (1,73); 1,8234 (1,22); 1,8193 (0,63); 1,5855 (1,79); 1,5758 (4,1); 1,5715 (4,17); 1,5623 (2,12); 1,382 (2,17); 1,3727 (4,02); 1,3684 (4,12); 1,3586 (1,71); 1,2691 (1,08); 1,2158 (2,25); 1,204 (4,73); 1,1922 (2,22); 0,0053 (1,55); -0,0002 (41,75); -0,0058 (1,45)

Ví dụ số 26, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 399,95MHz

14,5618 (0,37); 14,1854 (0,35); 9,5578 (1,5); 9,4271 (4,93); 9,2998 (0,36); 9,182 (0,38); 7,7634 (0,46); 7,7069 (1,14); 7,6847 (2,16); 7,5756 (3,33); 7,5541 (4,12); 7,5266 (0,76); 7,4862 (3,47); 7,3446 (0,38); 7,3053 (0,47); 7,275 (2,4); 7,2683 (2,29); 7,2533 (2,08); 7,2469 (1,92); 6,2641 (0,37); 4,9734 (1,6); 4,9321 (1,8); 4,5811 (1,98); 4,537 (3,53); 4,1428 (0,59); 4,0566 (5,17); 4,0378 (2,79); 4,0204 (2,99); 4,0026 (0,88); 3,9185 (0,48); 3,8903 (16); 3,8573 (0,39); 3,427 (1,33); 3,3939 (4,28); 3,3402 (400,48); 3,3359 (525,28); 3,3323 (787,02); 3,3084 (5,46); 3,272 (0,61); 3,2561 (0,46); 3,247 (0,37); 3,1263 (0,42); 2,7317 (0,36); 2,6709 (1,52); 2,5869 (0,39); 2,5415 (0,81); 2,5019 (262,13); 2,3291 (1,73); 2,0734 (1,24); 1,9884 (10,84); 1,5957 (5,63); 1,5917 (5,18); 1,576 (1,96); 1,5443 (0,37); 1,3969 (0,85); 1,278 (1,69); 1,2718 (1,78); 1,2585 (0,99); 1,2348 (1,26); 1,2215 (2,19); 1,207 (4,49); 1,2015 (4,56); 1,1924 (3,48); 1,1863 (1,89); 1,1747 (5,89); 1,1566 (2,78); 1,1479 (0,43); 0,8742 (0,46); 0,8572 (0,47); -0,0002 (33,26); -3,0698 (0,43)

Ví dụ số 27, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 399,95MHz

11,4041 (3,19); 9,3381 (2,87); 7,9571 (1,61); 7,9504 (1,81); 7,9418 (1,7); 7,9349 (1,72); 7,8013 (0,9); 7,7942 (0,92); 7,7904 (1,04); 7,7832 (0,95); 7,7788 (1,01); 7,7717 (1,07); 7,7681 (1,06); 7,7609 (0,81); 7,4187 (1,73); 7,3949 (2,44); 7,3715 (1,58); 4,0894 (4,37); 4,0563 (1,29); 4,0384 (4,43); 4,0308 (15,34); 4,0206 (4,05); 4,0029 (1,29); 3,5817 (0,36); 3,5615 (0,4); 3,5454 (0,49); 3,3749 (56,68); 3,1998 (0,54); 3,1712 (0,38); 3,0611 (0,42); 2,6762 (0,39); 2,6716 (0,49); 2,6674 (0,4); 2,5249 (0,94); 2,5068 (58,75); 2,5027 (78,81); 2,4986 (54,63); 2,3339 (0,38); 2,3294 (0,51); 2,325 (0,35); 1,9888 (16); 1,9093 (0,63); 1,5971 (1,56); 1,5828 (3,77); 1,5759 (3,95); 1,5626 (1,86); 1,2977 (2,14); 1,2839 (3,86); 1,2772 (4,13); 1,2626 (1,77); 1,2355 (1,38); 1,1928 (4,29); 1,175 (8,54); 1,1572 (4,24); -0,0002 (11,21); -0,0085 (0,33)

Ví dụ số 28, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 399,95MHz

9,475 (0,97); 9,3642 (5,1); 9,3069 (0,43); 8,7987 (0,37); 7,6689 (0,73); 7,5838 (0,66); 7,5622 (0,78); 7,4575 (2,92); 7,4414 (4,62); 7,4312 (1,02); 7,4246 (5,68); 7,42 (6,85); 7,4037 (7,53); 7,3379 (0,95); 7,3163 (1,1); 7,2661 (6,47); 7,2452 (5,07); 7,0778 (1,07); 7,0631 (0,5); 7,0582 (0,85); 6,9726 (1,86); 6,966 (1,92); 6,9512 (1,68); 6,945 (1,6); 5,4201 (2,11); 5,3833 (2,31); 4,9665 (0,6); 4,9267 (2,61); 4,8893 (2,28); 4,0551 (0,77); 4,045 (2,59); 4,0382 (2,1); 4,02 (1,77); 4,0026 (0,63); 3,8971 (16); 3,4603 (0,41); 3,4347 (0,7); 3,4009 (1,13); 3,3491 (582,58); 3,3413 (1358,67); 3,2752 (0,66); 2,6758 (1,21); 2,6711 (1,86); 2,5416 (1,04); 2,5247 (3,14); 2,5068 (206,51); 2,5026 (285,02); 2,4985 (203,82); 2,3336 (1,4); 2,3291 (1,76); 2,073 (2,52); 1,9885 (7,71); 1,6108 (1,9); 1,5968 (4,8); 1,59 (5,1); 1,5767 (2,1); 1,2799 (0,58); 1,2589 (1,23); 1,2344 (1,37); 1,2154 (2,1); 1,2016 (4,33); 1,1931 (5,24); 1,1801 (1,87); 1,1748 (4,28); 1,1569 (2,03); 0,8595 (0,42); 0,6779 (0,36); -0,0002 (6,05)

Ví dụ số 29, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 399,95MHz

11,5012 (3,45); 7,8648 (3,09); 7,8592 (3,49); 7,7164 (1,51); 7,7101 (1,37); 7,6943 (2,21); 7,6884 (2,2); 7,6159 (3,95); 7,594 (2,49); 4,0557 (0,65); 4,0379 (1,84); 4,0213 (16); 4,0026 (0,71); 3,4274 (0,34); 3,3515 (266,05); 3,349 (285,95); 3,3448 (214,54); 3,3422 (330,15); 3,3382 (346,98); 3,3349 (418,93); 3,293 (1,7); 3,2756 (1,97); 3,2593 (1,38); 3,2431 (0,63); 2,6712 (1,08); 2,6665 (0,8); 2,5414 (0,49); 2,5021 (170,74); 2,3288 (1,03); 2,3248 (0,78); 2,0733 (0,83); 1,9886 (6,8); 1,9206 (1,12); 1,8997 (3,5); 1,8826 (1,26); 1,5485 (1,15); 1,5306 (3,67); 1,5136 (0,94); 1,2328 (0,5); 1,1925 (1,89); 1,1747 (3,72); 1,1569 (1,93); 1,121 (14,9); 1,1043 (14,88); -0,0002 (10,09)

Ví dụ số 30, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 399,95MHz

17,8767 (0,49); 16,7278 (0,5); 15,2907 (0,46); 14,6922 (0,48); 11,3194 (0,47); 9,9917 (0,45); 9,5478 (1,93); 9,4196 (4,84); 7,9522 (1,92); 7,697 (1,24); 7,6759 (1,54); 7,6545 (1,48); 7,6289 (0,45); 7,5637 (3,75); 7,5423 (4,82); 7,5163 (0,81); 7,4807 (3,23); 7,4748 (3,56); 7,2683 (2,26); 7,2621 (1,93); 7,2473 (1,94); 7,24 (1,91); 6,5709 (0,48); 6,1831 (0,45); 4,9061 (1,2); 4,8649 (1,59); 4,5294 (1,43); 4,5247 (1,64); 4,4875 (1,39); 4,4825 (1,3); 4,4256 (1,93); 4,1384 (0,72); 4,0647 (6,28); 4,0384 (0,58); 4,0199 (0,67); 3,9606 (0,54); 3,9181 (0,47); 3,8854 (16); 3,759 (0,48); 3,4178 (0,55); 3,3771 (1,43); 3,3282 (1057,25); 3,251 (0,64); 2,8906 (12,28); 2,7309 (10,63); 2,6754 (1,93); 2,6707 (2,33); 2,5407 (1,33); 2,5057 (285,9); 2,5017 (383,65); 2,4982 (282,92); 2,3283 (2,31); 2,0733 (2,62); 1,9883 (1,97); 1,8712 (0,61); 1,7761 (11,28); 1,7311 (4,12); 1,6113 (1,99); 1,5966 (6,09); 1,5904 (5,32); 1,5777 (2,22); 1,2931 (0,88); 1,279 (1,92); 1,273 (2,06); 1,2578 (0,96); 1,2365 (1,31); 1,2229 (1,94); 1,2088 (4,32); 1,2025 (4,5); 1,1879 (1,67); 1,1747 (0,96); 1,1567 (0,93); 0,0078 (1,82); -0,0002 (58,33); -0,0086 (1,83); -2,3925 (0,46); -2,4975 (0,45); -3,438 (0,46)

Ví dụ số 31, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 399,95MHz

9,6271 (0,33); 9,4864 (1,04); 9,3652 (4,55); 7,6886 (0,76); 7,6822 (0,75); 7,5821 (0,72); 7,5605 (1,05); 7,4744 (2,86); 7,4687 (2,84); 7,4508 (0,45); 7,4243 (4,62); 7,4029 (5,04); 7,3666 (0,94); 7,362 (1,49); 7,3577 (0,73); 7,345 (4,29); 7,341 (2,48); 7,3269 (4,69); 7,3153 (1,34); 7,311 (2,53); 7,3074 (1,78); 7,3007 (0,69); 7,2937 (2,58); 7,2842 (0,59); 7,2752 (0,73); 7,2699 (0,96); 7,2509 (1,5); 7,2417 (3,98); 7,2377 (4,77); 7,2211 (3,59); 7,0343 (0,74); 7,0277 (0,66); 7,0153 (0,67); 6,96 (1,73); 6,9536 (1,69); 6,9387 (1,64); 6,9318 (1,6); 5,4626 (2,05); 5,4257 (2,49); 4,9216 (1,23); 4,9128 (2,37); 4,8762 (2,17); 4,0758 (0,37); 4,0556 (0,88); 4,0379 (2,56); 4,0201 (2,74); 4,0023 (0,88); 3,9667 (3,2); 3,9535 (0,34); 3,8996 (16); 3,3929 (0,35); 3,3332 (300,56); 3,3257 (628,51); 3,3027 (7,43); 2,6752 (1,18); 2,6706 (1,5); 2,6659 (1,01); 2,5407 (0,85); 2,524 (2,63); 2,5193 (3,68); 2,5058 (169,66); 2,5016 (233,25); 2,4977 (156,25); 2,3329 (1,14); 2,3282 (1,65); 2,3237 (1,1); 2,0733 (1,21); 1,9884 (11,36); 1,6066 (1,94); 1,5924 (4,57); 1,5856 (4,63); 1,5728 (2,04); 1,2823 (0,53); 1,2698 (0,96); 1,2621 (1,07); 1,2482 (0,71); 1,235 (1,64); 1,2116 (1,99); 1,198 (3,98); 1,1921 (7,04); 1,1746 (6,85); 1,1567 (3,11); 0,1462 (0,36); 0,0081 (2); -0,0002 (76,87); -0,0085 (2,13); -0,1493 (0,33)

Ví dụ số 32, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 399,95MHz

19,4883 (0,33); 14,4743 (0,34); 9,9628 (0,33); 9,4772 (1,71); 9,366 (4,51); 8,5874 (0,8); 8,5782 (0,78); 8,5563 (2,19); 8,547 (2,12); 7,8384 (1,13); 7,8194 (2,22); 7,8147 (2,2); 7,8004 (1,32); 7,7955 (1,32); 7,7145 (0,49); 7,6895 (0,9); 7,6743 (0,51); 7,6709 (0,55); 7,5658 (1,2); 7,5441 (1,65); 7,5333 (1,55); 7,5212 (3,6); 7,5155 (3,87); 7,4745 (3,75); 7,4531 (4,46); 7,4106 (3,5); 7,3909 (2,71); 7,3429 (1,51); 7,3315 (1,79); 7,3238 (1,72); 7,3124 (1,73); 7,2885 (0,58); 7,2779 (0,44); 7,2717 (2,25); 7,265 (2,21); 7,2499 (1,86); 7,2432 (1,77); 7,1046 (0,9); 7,0848 (0,86); 5,296 (1,4); 5,256 (3,53); 5,2123 (3,53); 5,1725 (1,5); 4,9686 (2,74); 4,1368 (5,32); 4,0557 (0,94); 4,0379 (2,86); 4,0202 (2,95); 3,9976 (16); 3,3915 (0,41); 3,3305 (304,35); 3,3279 (296,34); 3,3249 (391,32); 3,2506 (0,34); 2,6708 (1,53); 2,5409 (0,84); 2,5016 (246,17); 2,4386 (0,36); 2,4326 (0,43); 2,3282 (1,61); 2,0734 (1,6); 1,9885 (11,41); 1,9079 (0,43); 1,6004 (2,1); 1,5867 (5,4); 1,5798 (5,52); 1,5671 (2,28); 1,2692 (0,65); 1,2565 (1,56); 1,2491 (1,54); 1,235 (1,41); 1,2013 (1,93); 1,192 (5,11); 1,1816 (4,31); 1,1746 (6,69); 1,1672 (1,83); 1,1569

(3,02); 0,0075 (2,36); -0,0002 (43,57); -1,8063 (0,33)

Ví dụ số 33, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 399,95MHz

9,5775 (4,49); 9,5053 (0,45); 7,7786 (3,6); 7,7682 (0,92); 7,7572 (4,87); 7,7138 (0,34); 7,692 (0,35); 7,5946 (0,68); 7,573 (0,96); 4,0552 (0,63); 4,0374 (1,94); 4,0273 (2,07); 4,0163 (16); 4,002 (0,93); 3,4947 (0,62); 3,4821 (0,65); 3,3765 (615,2); 3,372 (488,62); 3,3684 (526,05); 3,3645 (546,77); 3,3625 (654,08); 3,359 (560,12); 3,2239 (0,35); 2,6782 (1,18); 2,6736 (1,67); 2,669 (1,25); 2,5438 (0,92); 2,527 (3); 2,5222 (4,56); 2,5136 (82,6); 2,5091 (180,41); 2,5045 (246,26); 2,5 (178,36); 2,4955 (86,07); 2,3358 (1,2); 2,3312 (1,65); 2,3267 (1,27); 2,2807 (1,71); 2,2634 (1,73); 2,2212 (0,46); 2,2023 (0,41); 2,0759 (1,71); 1,9902 (8,07); 1,6323 (1,61); 1,6181 (3,95); 1,6112 (4,4); 1,5979 (2,13); 1,3975 (0,64); 1,3544 (0,4); 1,2986 (2,04); 1,2849 (4,05); 1,2782 (4,47); 1,2636 (1,91); 1,2528 (0,8); 1,2356 (1,05); 1,1924 (2,24); 1,1746 (4,33); 1,1568 (2,15); 1,0046 (0,45); 0,9858 (0,8); 0,967 (0,39); 0,9035 (4,02); 0,8858 (8,59); 0,8681 (3,9); 0,008 (0,47); -0,0002 (15,07); -0,0086 (0,55)

Ví dụ số 34, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 601,6MHz

11,5357 (2,35); 9,5094 (2,93); 7,7744 (2,41); 7,7701 (2,69); 7,7094 (1,22); 7,7051 (1,07); 7,6949 (1,54); 7,6906 (1,44); 7,5923 (2,62); 7,5777 (2,13); 4,3468 (0,77); 4,3348 (2,43); 4,3228 (2,45); 4,3107 (0,79); 4,0465 (1,21); 4,0346 (3,71); 4,0228 (3,71); 4,011 (1,24); 3,3485 (39,29); 3,063 (1,4); 2,8638 (1,42); 2,5098 (6,24); 2,5069 (13,35); 2,5039 (18,23); 2,5009 (13,5); 2,498 (6,41); 1,991 (16); 1,6057 (1,04); 1,5963 (2,46); 1,5918 (2,7); 1,5829 (1,07); 1,4232 (3,53); 1,4112 (7,51); 1,3991 (3,52); 1,3831 (0,35); 1,371 (0,73); 1,359 (0,33); 1,2704 (1,14); 1,2612 (2,43); 1,2568 (2,67); 1,2472 (1); 1,1869 (4,33); 1,175 (8,76); 1,1632 (4,27); -0,0002 (1,62)

Ví dụ số 35, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 399,95MHz

11,5005 (4,87); 9,4951 (6,27); 7,7618 (4,81); 7,7554 (5,95); 7,7144 (2,63); 7,7078 (2); 7,6925 (3,37); 7,686 (2,85); 7,5904 (5,35); 7,5686 (3,92); 4,2725 (3,11); 4,2554 (6,27); 4,2381 (3,15); 4,0382 (0,36); 4,0188 (0,33); 3,4841 (0,32); 3,4614 (0,46); 3,4443 (0,55); 3,4137 (0,86); 3,3433 (1492,06); 3,2822 (3,03); 3,25 (1,84); 3,2136 (1,16); 3,1836 (0,68); 3,1568 (0,48); 3,0604 (1,58); 2,8553 (1,58); 2,6765 (0,88); 2,6715 (1,15); 2,6668 (0,89); 2,5808 (0,37); 2,5419 (0,94); 2,5068 (140,47); 2,5027 (192,83); 2,4986 (142,05); 2,4395 (1,46); 2,4062 (0,88); 2,4024 (0,84); 2,3507 (0,48); 2,3295 (1,39); 2,3251 (1,13); 2,3016 (0,38); 2,0748 (2,08); 1,9892 (1,51); 1,8724 (0,6); 1,8543 (2,3); 1,8363 (4,51); 1,8184 (4,61); 1,8002 (2,47); 1,7815 (0,63); 1,6082 (2,21); 1,5942 (5,23); 1,5868 (5,61); 1,5738 (2,55); 1,5334 (0,32); 1,3974 (9,15); 1,2748 (2,5); 1,2617 (5,29); 1,2545 (5,68); 1,24 (2,34); 1,1923 (0,45); 1,1741 (0,77); 1,1568 (0,42); 0,8614 (7,69); 0,8431 (16); 0,8244 (7,18); -0,0002 (12,56); -0,0087 (0,62)

Ví dụ số 36, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 601,6MHz

11,4548 (1,5); 9,3583 (1,27); 7,9479 (0,56); 7,9434 (0,64); 7,9378 (0,61); 7,9332 (0,58); 7,7878 (0,37); 7,7856 (0,39); 7,7807 (0,35); 7,7778 (0,36); 7,7728 (0,41); 7,771 (0,4); 7,4149 (0,55); 7,3992 (0,89); 7,3837 (0,52); 4,2745 (0,87); 4,2629 (1,71); 4,2513 (0,87); 4,0461 (1,23); 4,0343 (3,73); 4,0224 (3,73); 4,0106 (1,24); 3,3508 (5,32); 3,0615 (0,46); 2,857 (0,46); 2,5216 (0,38); 2,5067 (18,22); 2,5038 (24,1); 2,5008 (17,69); 1,9909 (16); 1,8508 (0,62); 1,8388 (1,21); 1,8269 (1,23); 1,8149 (0,65); 1,5953 (0,63); 1,5859 (1,53); 1,5813 (1,8); 1,5724 (0,68); 1,2932 (0,72); 1,2841 (1,56); 1,2796 (1,68); 1,2702 (0,7); 1,1866 (4,25); 1,1747 (8,49); 1,1629 (4,18); 0,9297 (0,46); 0,8596 (1,94); 0,8473 (4,1); 0,835 (1,9); 0,8263 (0,36); -0,0002 (1,87)

Ví dụ số 37, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 399,95MHz

11,4582 (4,4); 9,3437 (3,47); 7,9546 (1,99); 7,9477 (2,21); 7,9391 (2,06); 7,9323 (2,22); 7,7969 (1,11); 7,7896 (1,15); 7,7858 (1,31); 7,7786 (1,09); 7,7744 (1,19); 7,7674 (1,35); 7,7633 (1,35); 7,7565 (1,05); 7,4195 (2,16); 7,3953 (2,98); 7,3726 (1,97); 4,4209 (0,48); 4,402 (0,49); 4,3576 (1,39); 4,3397 (4,42); 4,3215 (4,47); 4,3031 (1,4); 4,2264 (0,44); 4,209 (0,72); 4,1911 (0,99); 4,1728 (0,68); 4,0554 (1,12); 4,0376 (3,61); 4,0198 (3,61); 4,002 (1,17); 3,4598 (0,4); 3,3366 (26,64); 3,2408 (0,63); 3,2327 (0,6); 3,18 (0,49); 3,0617 (7,35); 2,9068 (0,33); 2,862 (7,44); 2,6758 (0,84); 2,6713 (1,17); 2,6666 (0,87); 2,5416 (0,6); 2,5245 (2,07); 2,5199 (2,85); 2,5063 (123,98); 2,5022 (170,52); 2,4985 (114,01); 2,3384 (0,38); 2,3333 (0,8); 2,3286 (1,21); 2,3245 (0,85); 2,3194 (0,49); 2,0755 (0,47); 1,9893 (16); 1,9091 (0,6); 1,5982 (1,91); 1,5841 (4,44); 1,5769 (4,72); 1,5638 (2,26); 1,4339 (6,76); 1,4158 (15,95); 1,3976 (7,06); 1,3891 (2,15); 1,3757 (2,45); 1,371 (4,02); 1,3576 (1,14); 1,3528 (1,86); 1,2979 (2,59); 1,2842 (4,49); 1,2773 (4,85); 1,2627 (2,22); 1,2354 (0,95); 1,1923 (4,5); 1,1745 (8,88); 1,1567 (4,35); 0,8883 (0,35); 0,008 (0,92); -0,0002 (35,96); -0,0085 (1,05)

Ví dụ số 38, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 601,6MHz

9,5496 (0,57); 9,4141 (0,99); 7,9531 (2,11); 7,6736 (0,9); 7,6699 (0,6); 7,6588 (0,63); 7,5771 (0,34); 7,5534 (0,98); 7,5391 (1,1); 7,433 (0,87); 7,4286 (0,92); 7,2912 (0,53); 7,2868 (0,49); 7,2769 (0,48); 7,2725 (0,45); 4,3763 (0,46); 4,3643 (0,47); 4,2607 (0,37); 4,1747 (0,32); 4,1628 (0,38); 3,4447 (5,41); 3,3584 (170,61); 3,335 (1,41); 3,2387 (2,83); 2,8911 (16); 2,7312 (13,04); 2,7307 (12,77); 2,5251 (0,36); 2,522 (0,46); 2,5189 (0,48); 2,5099 (12,87); 2,507 (27,63); 2,504 (37,72); 2,501 (27,87); 2,4981 (13,11); 1,6046 (0,84); 1,6005 (0,7); 1,5953 (0,94); 1,5911 (1,16); 1,5824 (0,42); 1,4525 (0,74); 1,4405 (1,57); 1,4285 (0,74); 1,308 (1,26); 1,296 (2,69); 1,2908 (0,39); 1,284 (1,46); 1,2771 (0,59); 1,1964 (0,45); 1,1876 (0,87); 1,1835 (0,88); 1,1744 (0,48); -0,0002 (5,92)

Ví dụ số 39, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 399,95MHz

16,4832 (0,33); 15,8688 (0,33); 13,2954 (0,33); 9,6257 (0,34); 9,6097 (2,28); 9,4715 (4,25); 9,4357 (0,37); 9,3286 (0,34); 8,0115 (1,98); 8,0058 (2,14); 7,6392 (4,36); 7,6335 (3,82); 7,6013 (0,4); 7,5949 (0,44); 7,5777 (0,47); 7,5615 (0,48); 7,5253 (0,37); 7,4896 (3,22); 7,4834 (3,02); 7,4395 (0,43); 7,4325 (0,57); 7,4255 (0,52); 7,4196 (0,37); 5,7522 (0,33); 4,1774 (0,4); 4,1601 (0,99); 4,1421 (1,31); 4,1253 (1,47); 4,1073 (1,28); 4,0847 (8,62); 4,0554 (1,29); 4,0376 (3,86); 4,0199 (3,78); 4,0022 (1,25); 3,9064 (0,38); 3,8793 (1,92); 3,8664 (14,52); 3,8554 (1,87); 3,8367 (0,71); 3,8182 (1,21); 3,8004 (1,64); 3,7833 (1,43); 3,7657 (1,14); 3,7471 (0,43); 3,7013 (0,51); 3,6822 (0,73); 3,6642 (0,9); 3,6454 (1); 3,6338 (0,83); 3,6158 (0,91); 3,5968 (0,64); 3,5781 (0,38); 3,4622 (0,34); 3,4401 (0,39); 3,4079 (0,75); 3,3466 (768,76); 3,3431 (1758,18); 3,3199 (5,3); 3,2876 (0,84); 3,2746 (0,59); 3,2684 (0,52); 3,2291 (0,35); 3,2188 (0,44); 2,6767 (1,39); 2,6717 (1,92); 2,6678 (1,4); 2,5418 (0,89); 2,5252 (3,39); 2,5111 (113,97); 2,5071 (219,12); 2,5029 (302,49); 2,4987 (211,86); 2,4946 (105,8); 2,4557 (0,43); 2,3342 (1,35); 2,3295 (1,8); 2,3249 (1,43); 2,075 (2,09); 1,9893 (16); 1,6178 (2,02); 1,6037 (6,07); 1,5977 (5,35); 1,5842 (2,19); 1,5755 (0,39); 1,3835 (0,33); 1,3449 (0,36); 1,3127 (1,03); 1,298 (2,27); 1,2915 (2,11); 1,2761 (0,89); 1,2588 (0,57); 1,2327 (3,01); 1,2191 (4,19); 1,2121 (4,3); 1,1979 (1,6); 1,1924 (4,68); 1,1746 (8,79); 1,1567 (8,3); 1,1383 (9,27); 1,1204 (4,08); 1,0992 (0,35); 0,9885 (0,33); 0,9703 (2,29); 0,9523 (4,58); 0,9345 (2,19); -0,0002 (11,63); -0,0088 (0,43); -3,0168 (0,32)

Ví dụ số 40, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 399,95MHz 11,491 (2,41); 7,8981 (2,63); 7,8918 (2,76); 7,7092 (1,29); 7,7028 (1,18); 7,6873 (1,79); 7,6809 (1,74); 7,5849 (3,2); 7,563 (2,31); 4,056 (0,73); 4,0381 (2,56); 4,0288 (11,26); 4,0205 (2,67); 4,0026 (0,76); 3,3518 (0,45); 3,3286 (152,33); 2,5244 (1,09); 2,5195 (1,69); 2,5109 (19,1); 2,5065 (38,19); 2,502 (49,79); 2,4974 (35,73); 2,493 (17,31); 2,3955 (16); 2,3286 (0,34); 2,074 (0,42); 1,9888 (9,22); 1,8766 (1,77); 1,6065 (0,84); 1,1926 (2,46); 1,1748 (4,87); 1,157 (2,4); -0,0002 (5,14)
Ví dụ số 41, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 601,6MHz 9,4121 (0,42); 7,9528 (1,18); 7,7388 (0,36); 7,7028 (0,82); 7,6882 (1,07); 7,674 (0,37); 7,6583 (0,38); 7,6479 (0,99); 7,6438 (1,12); 7,6126 (1,11); 7,5995 (1,46); 7,5769 (0,36); 7,5533 (0,48); 7,5395 (0,48); 7,433 (0,5); 7,4291 (0,53); 7,3221 (0,64); 7,2903 (0,44); 7,2761 (0,33); 7,2716 (0,34); 4,3716 (1,39); 4,3595 (1,67); 4,272 (0,39); 4,2601 (0,39); 4,2481 (0,36); 4,1277 (0,42); 4,1191 (0,42); 4,0334 (0,56); 4,0216 (0,56); 3,5061 (0,42); 3,4808 (1,12); 3,4549 (16); 3,444 (2,94); 3,4284 (0,6); 3,3956 (1,34); 3,3758 (5,24); 3,3517 (4904,54); 3,3282 (80,11); 3,2755 (1,57); 3,2474 (4,78); 3,2383 (1,31); 3,1704 (1,74); 3,1617 (1,71); 3,1108 (1,82); 3,0743 (1,14); 2,8906 (8,65); 2,8645 (4,58); 2,7306 (7,07); 2,618 (10,41); 2,615 (14,06); 2,6121 (10,4); 2,5428 (5,84); 2,5243 (20,27); 2,5213 (25,42); 2,5182 (25,36); 2,5091 (738,32); 2,5062 (1554,79); 2,5033 (2093,86); 2,5003 (1556,28); 2,4974 (750,49); 2,3904 (9,64); 2,3874 (13,16); 2,3845 (9,61); 2,283 (0,4); 2,0787 (15,29); 1,9906 (2,25); 1,6777 (3,23); 1,6044 (0,51); 1,591 (0,77); 1,582 (0,49); 1,5066 (0,63); 1,4948 (0,86); 1,4825 (0,67); 1,4514 (2,04); 1,4394 (4,05); 1,4273 (2,94); 1,415 (1,05); 1,3496 (2,36); 1,3072 (1,28); 1,2954 (1,78); 1,2833 (1,18); 1,2666 (0,69); 1,2576 (1,03); 1,2338 (6,68); 1,1951 (0,48); 1,1859 (1,2); 1,174 (1,49); 1,1622 (0,72); 1,0541 (0,42); 0,8646 (0,43); 0,8535 (1,03); 0,8416 (0,52); 0,0965 (1,89); 0,0052 (14,67); -0,0002 (473,67); -0,0057 (19,93); -0,1 (1,92)
Ví dụ số 42, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 601,6MHz 11,0933 (3,12); 10,6126 (0,51); 9,5132 (3,58); 9,5027 (0,8); 7,8641 (2,73); 7,86 (2,86); 7,8428 (1,09); 7,839 (0,51); 7,8313 (0,4); 7,7552 (1,31); 7,751 (1,2); 7,7406 (1,56); 7,7365 (1,44); 7,5785 (3,5); 7,564 (2,35); 7,5578 (0,51); 7,5418 (0,41); 4,1945 (2,61); 4,0334 (0,76); 4,0215 (0,81); 4,0064 (12,33); 3,3813 (1,49); 3,3561 (1038,24); 3,3325 (10,5); 2,6153 (1,84); 2,543 (0,72); 2,5245 (2,78); 2,5214 (3,59); 2,5181 (4,4); 2,5063 (218,81); 2,5036 (275,25); 2,3877 (1,67); 2,2932 (0,59); 2,2827 (16); 2,0785 (0,51); 1,9907 (3,1); 1,6109 (1,37); 1,6016 (3,69); 1,5971 (3,87); 1,5881 (1,44); 1,2646 (1,41); 1,2554 (3,39); 1,2511 (3,52); 1,2413 (1,86); 1,2344 (0,88); 1,1859 (0,82); 1,1741 (1,59); 1,1622 (0,81); 0,0049 (1,62); -0,0002 (30,57)
Ví dụ số 43, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 601,6MHz 9,5611 (2,61); 9,4204 (5,99); 7,6917 (2,08); 7,6775 (2,5); 7,644 (2,35); 7,6398 (2,43); 7,5687 (5,27); 7,5544 (5,96); 7,5008 (1,35); 7,4967 (1,29); 7,4867 (1,16); 7,4825 (1,15); 7,4199 (4,23); 7,4158 (4,42); 7,2921 (2,65); 7,288 (2,5); 7,2779 (2,46); 7,2736 (2,33); 4,3914 (0,77); 4,3788 (2,21); 4,367 (2,26); 4,3549 (0,78); 4,268 (0,45); 4,2567 (1,31); 4,2449 (1,84); 4,2335 (2,3); 4,2217 (1,95); 4,21 (0,64); 4,1658 (0,64); 4,1541 (1,99); 4,1423 (2,5); 4,1343 (1,96); 4,1311 (2,19); 4,1224 (2,3); 4,1193 (1,88); 4,1114 (2,32); 4,0996 (1,8); 4,0878 (0,56); 4,0334 (0,37); 4,0216 (0,36); 3,7795 (0,53); 3,7678 (1,63); 3,7559 (2,07); 3,7448 (1,99); 3,7328 (1,56); 3,7214 (0,53); 3,6918 (0,56); 3,68 (0,78); 3,6676 (0,94); 3,6558 (0,78); 3,5796 (0,83); 3,5678 (1); 3,5556

(0,85); 3,5436 (0,6); 3,4046 (0,45); 3,3945 (1,21); 3,3858 (1,16); 3,3796 (1,18); 3,3518 (1984,37); 3,3279 (16,06); 3,3028 (0,46); 3,1702 (0,33); 3,1616 (0,43); 2,6179 (4,37); 2,6151 (5,71); 2,6123 (4,23); 2,5427 (2,81); 2,5332 (0,94); 2,5242 (9,59); 2,5211 (13,27); 2,5179 (16,58); 2,5062 (657,61); 2,5033 (846,44); 2,5005 (615,2); 2,4784 (2,21); 2,3903 (3,99); 2,3875 (5,24); 2,3847 (3,83); 2,0787 (4,37); 1,9906 (1,25); 1,6177 (1,12); 1,6056 (4,24); 1,5967 (6,28); 1,5925 (6,54); 1,5838 (2,53); 1,4508 (3,21); 1,4388 (6,55); 1,4268 (3,06); 1,306 (7,37); 1,2941 (16); 1,282 (9,65); 1,2721 (1,16); 1,2576 (0,69); 1,2338 (3,09); 1,2054 (2,8); 1,1965 (5,73); 1,1922 (5,97); 1,183 (2,39); 1,1741 (0,91); 1,1621 (0,47); 1,1436 (6,79); 1,1317 (13,97); 1,1198 (6,51); 0,9438 (2,6); 0,932 (5,36); 0,9202 (2,47); 0,8535 (0,4); 0,0967 (0,49); 0,005 (5,69); -0,0002 (104,53); -0,0999 (0,47)

Ví dụ số 44, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 601,6MHz

9,4685 (3,13); 7,6186 (2,15); 7,6043 (2,37); 7,5156 (2,09); 7,5118 (2,18); 7,3065 (1,24); 7,3024 (1,24); 7,2923 (1,16); 7,2882 (1,12); 5,2573 (1,78); 5,2279 (2,2); 4,9892 (2,11); 4,9598 (1,74); 4,0648 (0,9); 4,0453 (1,36); 4,0335 (3,87); 4,0217 (3,86); 4,0098 (1,32); 3,9354 (10,54); 3,4336 (0,7); 3,3766 (1,21); 3,352 (365,17); 3,3252 (0,47); 2,6151 (0,96); 2,5429 (0,42); 2,5034 (150,98); 2,3876 (0,93); 1,9907 (16); 1,6188 (1,49); 1,6097 (3,52); 1,6054 (3,55); 1,5965 (1,28); 1,2734 (0,4); 1,2338 (0,67); 1,217 (1,28); 1,2079 (2,97); 1,2038 (3,11); 1,1942 (1,13); 1,186 (4,37); 1,1742 (8,34); 1,1623 (4,17); -0,0002 (1,27)

Ví dụ số 45, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 399,95MHz

11,5629 (3,17); 9,5197 (3,89); 7,8939 (0,68); 7,8145 (2,97); 7,8081 (3,34); 7,6813 (1,42); 7,675 (1,32); 7,6594 (2,05); 7,653 (2,01); 7,5849 (4,03); 7,563 (2,7); 7,5353 (0,32); 5,7625 (0,52); 4,1942 (1); 4,1104 (12,73); 4,0549 (0,57); 4,0371 (1,62); 4,0193 (1,67); 4,0016 (0,65); 3,3488 (381,8); 3,3413 (634,34); 3,0337 (16); 2,681 (0,92); 2,6766 (1,94); 2,672 (2,7); 2,6675 (1,97); 2,5421 (1,6); 2,5254 (4,95); 2,5207 (7,26); 2,512 (132,84); 2,5075 (285,73); 2,503 (383,95); 2,4984 (271,1); 2,4939 (125,41); 2,3389 (0,83); 2,3343 (1,83); 2,3297 (2,55); 2,3251 (1,84); 2,0772 (0,62); 1,99 (7,2); 1,612 (1,36); 1,5977 (3,37); 1,5909 (3,47); 1,5778 (1,53); 1,2731 (1,73); 1,2596 (3,49); 1,2529 (3,76); 1,2378 (2,87); 1,1921 (1,91); 1,1742 (3,78); 1,1565 (1,84); 0,8539 (0,37); 0,008 (1,19); -0,0002 (35,07); -0,0077 (1,04)

Ví dụ số 45, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 399,95MHz

11,5617 (2,61); 9,5199 (2,8); 7,8135 (2,59); 7,8072 (2,92); 7,6806 (1); 7,6741 (0,94); 7,6586 (1,53); 7,6522 (1,56); 7,5846 (2,73); 7,5627 (1,8); 4,1102 (12,24); 4,0369 (0,87); 4,0191 (0,88); 4,0016 (0,61); 3,3499 (1797,52); 3,2245 (0,46); 3,033 (16); 2,6813 (0,63); 2,6767 (1,35); 2,6721 (1,89); 2,6675 (1,39); 2,6629 (0,67); 2,5424 (1,08); 2,5255 (3,44); 2,5208 (5,1); 2,5121 (94,77); 2,5076 (206,74); 2,503 (279,76); 2,4984 (197,63); 2,4939 (91,37); 2,3389 (0,58); 2,3343 (1,29); 2,3297 (1,81); 2,3252 (1,31); 2,0765 (2,83); 1,9898 (4,26); 1,6115 (1,29); 1,5972 (2,98); 1,5904 (3,18); 1,5772 (1,42); 1,273 (1,66); 1,2592 (3,23); 1,2526 (3,51); 1,2379 (1,98); 1,192 (1,13); 1,1742 (2,25); 1,1564 (1,08); -0,0002 (8,57)

Ví dụ số 46, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 399,95MHz

9,5373 (0,47); 9,3983 (0,81); 7,7053 (0,41); 7,6838 (0,63); 7,6757 (0,42); 7,6635 (0,45); 7,6546 (0,75); 7,6313 (0,77); 7,6092 (1,26); 7,5886 (1,33); 7,5792 (0,79); 7,5486 (0,9); 7,527 (0,97); 7,4347 (0,79); 7,4282 (0,89); 7,3883 (0,47); 7,3078 (1,04); 7,2891 (0,66); 7,2824 (0,56); 7,2677 (0,47); 7,2612 (0,45); 4,2924 (1,02); 4,2751 (0,9);

4,182 (0,47); 4,1649 (0,51); 4,1476 (0,56); 4,1292 (0,35); 4,0547 (1,37); 4,0369 (3,7); 4,0191 (3,74); 4,0013 (1,31); 3,4557 (10,09); 3,4453 (5,02); 3,3427 (771,28); 3,319 (13,1); 3,2679 (1,37); 3,2419 (3,06); 3,2325 (2,72); 3,1112 (1,16); 3,072 (0,85); 2,8904 (0,43); 2,8646 (2,78); 2,7312 (0,35); 2,6764 (1,44); 2,6718 (2); 2,6673 (1,53); 2,5422 (1,53); 2,5253 (3,59); 2,5205 (5,22); 2,5117 (95,58); 2,5073 (207,41); 2,5028 (281,65); 2,4982 (204,86); 2,4938 (99,47); 2,334 (1,35); 2,3295 (1,9); 2,325 (1,43); 2,0769 (2,16); 1,9899 (16); 1,9015 (0,53); 1,8832 (1); 1,8655 (1,18); 1,847 (0,97); 1,8267 (0,75); 1,8103 (0,56); 1,7924 (0,52); 1,7738 (0,52); 1,6767 (2,49); 1,6439 (0,6); 1,6192 (0,38); 1,5969 (1,32); 1,5899 (1,04); 1,5768 (0,52); 1,4012 (0,6); 1,2967 (0,71); 1,2823 (0,75); 1,2755 (0,81); 1,258 (0,71); 1,2347 (1,66); 1,2004 (0,58); 1,192 (4,72); 1,1743 (9,08); 1,1564 (4,38); 0,8945 (1,45); 0,876 (3,76); 0,8567 (3,53); 0,8335 (2,44); 0,8148 (2,63); 0,7962 (1,13); 0,146 (0,39); 0,008 (2,78); -0,0002 (90,84); -0,0085 (3,33); -0,1499 (0,34)

Ví dụ số 47, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 601,6MHz

7,6521 (0,53); 7,4488 (0,87); 7,4092 (0,79); 7,3946 (0,85); 7,3798 (0,87); 4,3079 (0,35); 4,2962 (0,64); 4,2842 (0,81); 4,2717 (0,82); 4,2604 (0,93); 4,2489 (1,03); 4,2369 (0,57); 4,1612 (0,58); 4,1506 (0,59); 4,1386 (0,49); 4,127 (0,54); 4,1149 (0,59); 4,1037 (0,33); 4,0456 (0,57); 4,0338 (1,71); 4,022 (1,73); 4,0101 (0,58); 3,4532 (16); 3,4036 (1,29); 3,3797 (0,39); 3,3536 (287,87); 3,33 (4,06); 3,2402 (1,45); 3,1042 (0,53); 3,095 (0,47); 3,0631 (0,57); 2,9405 (0,67); 2,6832 (2,06); 2,6186 (0,56); 2,6157 (0,74); 2,6128 (0,54); 2,5249 (1,23); 2,5218 (1,83); 2,5069 (84,85); 2,504 (111,28); 2,501 (80,94); 2,391 (0,55); 2,3881 (0,73); 2,3852 (0,53); 1,9909 (7,37); 1,8792 (0,58); 1,8669 (0,68); 1,8549 (0,61); 1,8371 (0,59); 1,7449 (0,46); 1,7341 (0,59); 1,7232 (0,61); 1,7109 (0,61); 1,6979 (0,68); 1,686 (0,86); 1,6637 (1,33); 1,4754 (0,37); 1,3882 (0,95); 1,2578 (0,37); 1,2343 (1,25); 1,1862 (2,13); 1,1744 (4,02); 1,1625 (2,03); 0,8889 (1,11); 0,8766 (2,26); 0,8638 (2,34); 0,8493 (3,1); 0,6607 (0,53); 0,6484 (1,06); 0,6361 (0,51); 0,0051 (1,29); -0,0002 (25,89); -0,0056 (0,98)

Ví dụ số 48, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 601,6MHz

7,6625 (0,59); 7,6566 (0,58); 7,6531 (0,62); 7,441 (0,93); 7,4125 (0,97); 7,3978 (1,05); 4,3751 (0,97); 4,3634 (1,3); 4,3523 (1,07); 4,3412 (1,13); 4,3294 (0,96); 4,3177 (0,36); 4,2724 (0,53); 4,0335 (0,92); 4,0217 (0,91); 3,4526 (16); 3,3768 (0,53); 3,3522 (580,58); 3,3286 (7,62); 3,2446 (1,32); 3,1036 (0,51); 3,0656 (0,51); 2,9399 (0,7); 2,6805 (2,05); 2,6182 (1,09); 2,6153 (1,49); 2,6123 (1,1); 2,543 (0,62); 2,5245 (2,25); 2,5215 (3,05); 2,5183 (3,8); 2,5094 (79,16); 2,5065 (164,86); 2,5035 (221,76); 2,5005 (162,52); 2,4977 (78,12); 2,3906 (1,05); 2,3877 (1,43); 2,3847 (1,05); 2,0789 (0,5); 1,9907 (3,97); 1,9066 (0,38); 1,6608 (1,13); 1,4749 (0,38); 1,4506 (0,98); 1,4387 (1,81); 1,4266 (1,1); 1,3791 (0,88); 1,3467 (2,94); 1,2977 (0,44); 1,2577 (0,56); 1,2337 (1,42); 1,186 (1,28); 1,1742 (2,31); 1,1623 (1,19); 0,0052 (2,55); -0,0002 (61,56); -0,0057 (2,57)

Ví dụ số 49, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 399,95MHz

11,3656 (3,86); 9,5142 (4,4); 7,7755 (3,59); 7,7692 (3,97); 7,6847 (1,75); 7,6783 (1,49); 7,6628 (2,52); 7,6564 (2,33); 7,5817 (4,49); 7,5599 (3,05); 4,0562 (1,15); 4,0384 (3,4); 4,0206 (3,6); 4,0034 (16); 3,3453 (94,9); 3,3448 (94,73); 3,3197 (17,97); 2,5245 (0,51); 2,511 (7,72); 2,5068 (14,99); 2,5023 (19,26); 2,4978 (13,84); 2,4937 (6,76); 2,0729 (0,59); 1,9887 (13,71); 1,6091 (1,56); 1,5949 (3,86); 1,588 (4,03); 1,5747 (1,73); 1,277 (1,86); 1,2635 (3,82); 1,2568 (4,07); 1,2422 (1,5); 1,1928 (3,82);

1,1749 (7,49); 1,1572 (3,7)

Ví dụ số 50, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 601,6MHz

9,5618 (2,56); 9,4177 (6,18); 7,9529 (0,98); 7,6923 (2,28); 7,6781 (2,69); 7,635 (2,45); 7,6308 (2,6); 7,5617 (5,97); 7,5475 (6,73); 7,5004 (1,4); 7,4963 (1,31); 7,4863 (1,23); 7,482 (1,22); 7,4233 (4,05); 7,4191 (4,25); 7,2874 (2,63); 7,283 (2,53); 7,2731 (2,42); 7,2688 (2,31); 4,3107 (0,81); 4,3036 (0,87); 4,2993 (1,52); 4,2921 (1,53); 4,2806 (0,81); 4,1677 (0,49); 4,1596 (1,05); 4,1559 (1,81); 4,1474 (2,05); 4,144 (2,45); 4,1362 (2,11); 4,1329 (2,74); 4,1249 (2,63); 4,1211 (2,27); 4,1128 (1,37); 4,0421 (1,16); 4,0323 (1,53); 4,0297 (1,5); 4,0196 (1,98); 4,0097 (1,08); 4,0068 (1,07); 3,9968 (0,83); 3,7605 (0,48); 3,7486 (1,68); 3,7369 (2,16); 3,7256 (2,07); 3,7139 (1,61); 3,7018 (0,54); 3,6876 (0,53); 3,6756 (0,76); 3,6634 (0,93); 3,6514 (0,75); 3,5736 (0,78); 3,5616 (0,93); 3,5493 (0,81); 3,5373 (0,58); 3,4009 (0,71); 3,3887 (0,8); 3,3806 (1,37); 3,3578 (1317,4); 3,334 (5,83); 2,8908 (7,36); 2,7308 (5,98); 2,6185 (1,57); 2,6155 (2,16); 2,6126 (1,59); 2,5433 (0,92); 2,5248 (3,01); 2,5217 (4,1); 2,5186 (4,76); 2,5095 (118,16); 2,5067 (245,74); 2,5038 (330,23); 2,5009 (240,75); 2,4981 (114,58); 2,3909 (1,49); 2,3879 (2,06); 2,385 (1,48); 2,0787 (0,93); 1,8893 (1); 1,8773 (2,04); 1,8652 (2,07); 1,8532 (1,07); 1,8217 (0,59); 1,8094 (1,15); 1,7977 (1,5); 1,7863 (1,74); 1,7743 (1,53); 1,7621 (0,74); 1,6799 (0,65); 1,6676 (1,17); 1,6574 (1,68); 1,645 (1,65); 1,6348 (1,13); 1,6225 (0,67); 1,6179 (1,23); 1,6084 (4,94); 1,6039 (3,6); 1,5991 (6,24); 1,5947 (7,45); 1,5859 (2,64); 1,2954 (1,19); 1,2863 (2,43); 1,2819 (2,67); 1,2724 (1); 1,2578 (0,42); 1,2335 (1,57); 1,2037 (2,86); 1,1947 (5,93); 1,1903 (6,34); 1,181 (2,45); 1,1407 (7,11); 1,1288 (14,87); 1,1168 (6,89); 0,9415 (2,6); 0,9297 (5,46); 0,9179 (2,57); 0,8865 (3,17); 0,8743 (6,67); 0,862 (3,13); 0,8535 (0,38); 0,8172 (7,63); 0,8049 (16); 0,7926 (7,21); 0,0051 (1,34); -0,0002 (32,06); -0,0057 (1,19)

Ví dụ số 51, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 601,6MHz

11,2435 (1); 9,3497 (0,74); 7,9531 (0,39); 7,7736 (0,6); 7,7601 (0,7); 7,7304 (2,91); 7,7161 (3,31); 7,6522 (3,79); 7,6386 (3,74); 7,6244 (3,53); 7,5889 (2,65); 7,5753 (2,41); 7,5207 (1,21); 7,4121 (11,62); 7,4027 (3,64); 7,3862 (2,56); 7,3118 (2,15); 7,2988 (1,8); 7,2009 (0,39); 6,8169 (0,48); 4,3007 (3,14); 4,2901 (3,3); 4,2794 (2,58); 4,2566 (2,26); 4,2028 (1,63); 4,1284 (3,82); 4,1178 (3,61); 4,107 (3,02); 4,0674 (1,32); 4,055 (1,55); 4,0456 (2,7); 4,0338 (4,82); 4,022 (4,4); 4,0102 (1,78); 3,9587 (1,64); 3,947 (2,06); 3,9353 (1,89); 3,9165 (1,96); 3,9041 (2,3); 3,8933 (1,94); 3,8468 (1,72); 3,7093 (1,04); 3,6044 (0,96); 3,3585 (2804,89); 3,3349 (16,31); 3,2711 (0,92); 3,2466 (0,88); 3,1423 (0,68); 3,0944 (0,54); 3,061 (1,47); 3,0465 (1,27); 2,9693 (1,33); 2,8912 (2,99); 2,8563 (1,82); 2,8399 (3,68); 2,8293 (3,66); 2,7312 (2,47); 2,6188 (3,62); 2,616 (4,79); 2,6132 (3,59); 2,5436 (1,95); 2,525 (9,26); 2,522 (12,69); 2,5186 (16,24); 2,507 (555,84); 2,5043 (726,37); 2,5015 (536,53); 2,3912 (3,62); 2,3884 (4,75); 2,3856 (3,53); 2,2958 (0,37); 2,2837 (0,81); 2,2716 (0,33); 2,0789 (2,13); 1,991 (15,17); 1,8862 (1,72); 1,8744 (3,51); 1,8624 (4,2); 1,8509 (3,63); 1,8425 (3,66); 1,8307 (3,67); 1,8188 (3,58); 1,8066 (2,89); 1,794 (2,27); 1,7812 (2,03); 1,7642 (2,22); 1,7173 (14,52); 1,6892 (3,36); 1,6419 (1,13); 1,5709 (1,75); 1,5668 (1,84); 1,5023 (3,27); 1,4837 (3,07); 1,374 (3,95); 1,3622 (2,97); 1,3502 (2,21); 1,3334 (3,83); 1,3217 (5,49); 1,3103 (4,13); 1,2978 (3,26); 1,2679 (4,55); 1,2579 (5,13); 1,2343 (9,67); 1,1974 (3,99); 1,1862 (10,63); 1,1743 (14,27); 1,1624 (12,11); 1,1558 (13,88); 1,1412 (16); 1,1295 (8,23); 1,1049 (6,61); 1,0708 (6); 1,0599 (8,58); 0,9401 (3,69); 0,9284 (5,1); 0,9172 (2,68); 0,8835 (5,11); 0,8713 (10,54); 0,865 (6,44); 0,8588 (10,32);

0,8536 (8,8); 0,845 (12,86); 0,8317 (12,07); 0,78 (1,98); 0,7676 (0,91); 0,0966 (0,62); 0,005 (6,46); -0,0002 (127,14); -0,0055 (5,46); -0,1 (0,6)

Ví dụ số 52, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 399,95MHz

9,4063 (0,33); 7,7318 (0,72); 7,7103 (0,89); 7,6897 (0,37); 7,6725 (0,36); 7,6593 (1,1); 7,6531 (1,26); 7,6406 (1,06); 7,6247 (0,89); 7,5947 (0,61); 7,5698 (0,76); 7,5483 (0,56); 7,5048 (0,39); 7,4401 (0,74); 7,4106 (1,09); 7,3918 (1,37); 7,2958 (0,47); 7,2895 (0,56); 7,2747 (0,49); 7,2686 (0,49); 4,4001 (0,35); 4,3823 (1,01); 4,3643 (1,22); 4,2654 (0,77); 4,2473 (0,94); 4,2311 (0,91); 4,2129 (0,73); 4,1602 (0,44); 4,147 (0,55); 4,1419 (0,6); 4,1332 (0,55); 4,1246 (0,64); 4,1084 (0,36); 4,055 (1,34); 4,0461 (0,4); 4,0372 (3,72); 4,0282 (0,46); 4,0194 (3,81); 4,0016 (1,44); 3,9349 (0,82); 3,9199 (0,86); 3,6846 (0,33); 3,6661 (0,36); 3,6171 (0,37); 3,5995 (0,37); 3,5078 (0,35); 3,3637 (1,04); 3,3424 (804,32); 3,3186 (9,85); 3,2893 (0,5); 3,2722 (0,6); 3,2519 (0,38); 3,2175 (0,32); 3,0961 (0,41); 3,0623 (0,35); 2,9842 (0,35); 2,8907 (1,32); 2,83 (0,8); 2,8117 (0,8); 2,7313 (0,96); 2,6766 (1,05); 2,6721 (1,47); 2,6675 (1,09); 2,5424 (0,67); 2,5255 (2,36); 2,5208 (3,63); 2,512 (75,12); 2,5075 (162,37); 2,503 (218,4); 2,4984 (156,12); 2,494 (73,27); 2,3388 (0,55); 2,3342 (1,08); 2,3297 (1,5); 2,3252 (1,13); 1,99 (16); 1,7116 (3,31); 1,6105 (0,4); 1,5971 (0,55); 1,5894 (0,58); 1,576 (0,43); 1,4981 (0,96); 1,458 (1,92); 1,44 (3,22); 1,4221 (1,86); 1,4094 (0,97); 1,3406 (3,68); 1,3235 (3,33); 1,3135 (3,04); 1,2956 (3,01); 1,2777 (2,74); 1,2582 (2,19); 1,2343 (5,2); 1,2036 (1,29); 1,1922 (5,62); 1,1863 (2,32); 1,1744 (10,68); 1,1676 (3,46); 1,1566 (7,96); 1,1448 (5,05); 1,1332 (3,63); 1,1153 (1,98); 1,0491 (1,91); 0,9496 (1,15); 0,9317 (1,85); 0,914 (0,87); 0,8933 (0,63); 0,8748 (1,42); 0,8624 (1,03); 0,8539 (1,15); 0,8363 (0,42); 0,1459 (0,45); 0,008 (3,24); -0,0002 (113,96); -0,0085 (3,81); -0,1496 (0,43)

Ví dụ số 53, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 399,95MHz

11,4811 (0,46); 9,5802 (3,86); 9,504 (0,61); 7,8067 (0,33); 7,7817 (3,36); 7,7747 (1,02); 7,7681 (1,19); 7,7604 (4,49); 7,7135 (0,41); 7,6917 (0,47); 7,6851 (0,47); 7,5943 (0,9); 7,5726 (1,01); 7,3651 (0,37); 4,106 (0,36); 4,0549 (0,76); 4,037 (2,46); 4,0205 (16); 4,0015 (0,98); 3,4808 (0,47); 3,4264 (0,76); 3,4141 (1,01); 3,366 (481,46); 3,3609 (380,93); 3,3594 (381,76); 3,3541 (595,63); 3,3505 (698,07); 3,0316 (0,61); 2,6772 (1,33); 2,6727 (1,85); 2,6681 (1,36); 2,5429 (0,97); 2,5261 (3,27); 2,5213 (4,97); 2,5126 (89,86); 2,5081 (194,5); 2,5036 (263,53); 2,4991 (189,65); 2,4946 (89,56); 2,4051 (1,69); 2,335 (1,23); 2,3303 (1,72); 2,3258 (1,27); 2,0763 (1,33); 2,0394 (9,05); 1,9899 (10,76); 1,9092 (0,76); 1,6335 (1,56); 1,6194 (3,67); 1,6124 (4,01); 1,5991 (1,94); 1,5757 (0,35); 1,3543 (0,43); 1,2973 (1,85); 1,2837 (3,68); 1,277 (4,01); 1,2623 (1,85); 1,2521 (0,95); 1,2369 (1,14); 1,1922 (2,96); 1,1744 (5,8); 1,1566 (2,83); 0,008 (0,76); -0,0002 (21,52); -0,0085 (0,61)

Ví dụ số 54, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 399,95MHz

9,4882 (0,79); 9,3813 (4,43); 8,5176 (2,05); 8,5137 (2,27); 8,5056 (2,27); 8,5017 (2,28); 8,4323 (3,23); 8,4273 (3,41); 8,2561 (0,5); 8,2509 (0,53); 7,952 (0,59); 7,7143 (0,68); 7,7082 (0,72); 7,6847 (1,07); 7,6801 (1,7); 7,6753 (1,15); 7,6651 (1,28); 7,6603 (1,95); 7,6556 (1,27); 7,5766 (0,52); 7,555 (0,77); 7,5036 (2,71); 7,4973 (2,86); 7,4812 (0,43); 7,4689 (0,59); 7,4626 (0,76); 7,4508 (4,33); 7,4415 (0,51); 7,4293 (4,72); 7,4088 (1,88); 7,3969 (1,79); 7,3893 (1,66); 7,3773 (1,57); 6,9932 (1,56); 6,9868 (1,58); 6,9719 (1,46); 6,9654 (1,45); 5,4683 (2,14); 5,4307 (2,45); 5,0433 (0,53); 4,9943 (0,63); 4,9816 (2,41); 4,9544 (0,36); 4,9441 (2,09); 4,0808 (2,62); 4,0555

(0,62); 4,0377 (1,82); 4,02 (1,85); 4,0022 (0,63); 3,9068 (16); 3,3269 (326,92); 3,322 (337,09); 2,8902 (5,17); 2,7304 (4,11); 2,6791 (0,48); 2,675 (1,04); 2,6704 (1,48); 2,6658 (1,11); 2,6613 (0,56); 2,5408 (0,86); 2,5237 (2,77); 2,5102 (73,18); 2,5058 (152,67); 2,5013 (207,94); 2,4967 (155,09); 2,4923 (79,01); 2,337 (0,46); 2,3326 (1,01); 2,3281 (1,42); 2,3235 (1,05); 2,3191 (0,53); 2,0737 (0,39); 1,9884 (7,83); 1,6127 (2,1); 1,5986 (4,95); 1,5917 (5,39); 1,5785 (2,38); 1,2787 (0,41); 1,2653 (0,83); 1,2583 (1,18); 1,2433 (0,76); 1,2353 (1,12); 1,2176 (1,97); 1,204 (4,14); 1,1973 (4,51); 1,1924 (3,36); 1,183 (1,78); 1,1745 (4,42); 1,1567 (2,17); 0,008 (1,38); -0,0002 (45,87); -0,0084 (2,11)

Ví dụ số 55, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 399,95MHz

9,4969 (1,3); 9,3847 (4,47); 7,9522 (0,67); 7,6698 (0,96); 7,664 (1,17); 7,6364 (0,52); 7,615 (1,61); 7,6008 (1,05); 7,5951 (0,94); 7,5792 (0,35); 7,5731 (0,36); 7,507 (3,9); 7,4855 (4,65); 7,4513 (3,32); 7,4447 (3,77); 7,2367 (2,05); 7,2301 (2,11); 7,2153 (1,83); 7,2086 (1,89); 4,9577 (1,05); 4,9518 (1,43); 4,9482 (1,23); 4,8765 (3,22); 4,7971 (5,72); 4,7583 (2,3); 4,7061 (0,96); 4,3904 (2,06); 4,3516 (1,9); 4,3323 (0,37); 4,2925 (0,75); 4,2475 (0,75); 4,2081 (0,32); 4,0563 (5,38); 4,0379 (2,52); 4,0201 (2,62); 4,0023 (0,85); 3,9551 (0,69); 3,8648 (16); 3,6011 (0,36); 3,5766 (15,78); 3,3572 (0,33); 3,3255 (554,45); 2,8905 (5,77); 2,731 (4,53); 2,6751 (0,77); 2,6707 (1,1); 2,666 (0,83); 2,5407 (0,36); 2,524 (1,72); 2,5105 (54,47); 2,5061 (115,62); 2,5015 (158,95); 2,497 (121,97); 2,4927 (65,07); 2,3327 (0,86); 2,3283 (1,14); 2,3238 (0,89); 2,1326 (0,37); 2,1203 (5,45); 1,9886 (10,49); 1,7799 (6,3); 1,7121 (13,9); 1,6499 (0,4); 1,6077 (2,28); 1,5936 (5,52); 1,5872 (5,41); 1,5736 (3,14); 1,5679 (4,32); 1,2928 (0,62); 1,2791 (1,24); 1,2727 (1,44); 1,2583 (0,93); 1,2352 (1,63); 1,2184 (1,97); 1,205 (4,02); 1,1984 (4,28); 1,1924 (4); 1,1846 (1,85); 1,1745 (5,9); 1,1568 (3,09); 1,1023 (0,52); 1,0152 (11,7); 0,9974 (0,34); -0,0002 (0,61)

Ví dụ số 56, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 601,6MHz

9,4759 (0,64); 9,3699 (3,96); 8,5556 (5,83); 8,5529 (3,5); 8,5482 (3,58); 8,5456 (6,22); 8,4651 (0,81); 8,4626 (0,53); 8,4577 (0,53); 8,4551 (0,83); 7,9522 (0,41); 7,7446 (0,57); 7,5812 (1,4); 7,5194 (2,55); 7,5151 (2,6); 7,4619 (4,25); 7,4476 (4,7); 7,2711 (4,79); 7,2612 (4,76); 7,1362 (0,73); 7,1264 (0,73); 7,1037 (1,56); 7,0993 (1,54); 7,0894 (1,48); 7,0849 (1,45); 5,4328 (2,05); 5,4068 (2,29); 5,0763 (0,44); 5,0253 (2,42); 4,9994 (2,01); 4,0725 (2,43); 4,0467 (1,03); 4,0348 (2,93); 4,023 (2,97); 4,0112 (0,99); 3,9285 (16); 3,3673 (0,36); 3,3234 (775,68); 3,2995 (6,23); 2,8904 (3,65); 2,7311 (2,88); 2,6191 (0,72); 2,6161 (1,53); 2,6131 (2,16); 2,61 (1,53); 2,607 (0,72); 2,5406 (0,65); 2,5377 (0,44); 2,5223 (5,37); 2,5193 (6,39); 2,5162 (5,82); 2,5074 (108,34); 2,5044 (234,17); 2,5013 (320,07); 2,4983 (230,08); 2,4953 (105,4); 2,3916 (0,64); 2,3885 (1,45); 2,3855 (2,03); 2,3824 (1,42); 2,3794 (0,63); 2,0737 (0,79); 1,9885 (12,97); 1,604 (2,16); 1,5948 (4,81); 1,5903 (5,36); 1,5814 (2,18); 1,2674 (0,33); 1,2583 (0,74); 1,2538 (0,79); 1,2441 (0,52); 1,2351 (0,55); 1,2076 (1,71); 1,1984 (3,86); 1,1941 (4,14); 1,1863 (4,31); 1,1745 (7,06); 1,1626 (3,5); 0,0965 (0,4); 0,0052 (3,02); -0,0002 (99,19); -0,0058 (2,91); -0,1001 (0,39)

Ví dụ số 57, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 399,95MHz

11,5339 (4,33); 9,4933 (1,31); 9,4791 (5,1); 7,7783 (0,46); 7,7659 (1,88); 7,7568 (1,13); 7,7496 (4,1); 7,7332 (1,88); 7,697 (8,58); 7,6917 (3,71); 7,6793 (3,75); 7,6736 (2,13); 7,6497 (0,47); 7,6332 (0,74); 7,6173 (0,48); 7,5851 (3,7); 7,567 (1,83); 7,5617 (2,51); 7,5506 (0,43); 7,5346 (0,34); 7,5192 (0,33); 5,9815 (0,48); 5,9665 (0,79); 5,95

(0,57); 5,9152 (0,52); 5,8999 (0,51); 5,8617 (1,01); 5,8285 (6,59); 5,8124 (6,52); 5,3477 (1,24); 5,3423 (1,27); 4,0562 (1,36); 4,0382 (3,76); 4,0202 (3,91); 4,0025 (1,35); 3,9786 (1,07); 3,6883 (0,81); 3,5728 (0,36); 3,5567 (0,37); 3,5234 (0,37); 3,5028 (0,42); 3,4858 (0,46); 3,4778 (0,41); 3,4639 (0,45); 3,4477 (0,59); 3,4164 (0,76); 3,3245 (1168,23); 3,2622 (0,43); 3,2123 (0,32); 3,1803 (0,58); 3,1683 (0,47); 3,0473 (1,21); 2,9933 (4,69); 2,9063 (0,59); 2,8597 (1,25); 2,8422 (4,92); 2,6749 (3,65); 2,6707 (4,76); 2,6666 (3,51); 2,5505 (1,32); 2,5403 (2,36); 2,5237 (16,88); 2,506 (550,85); 2,5017 (693,41); 2,4974 (500,71); 2,438 (0,61); 2,4143 (0,41); 2,393 (0,38); 2,3369 (10); 2,3286 (4,78); 2,3239 (3,48); 2,2986 (0,44); 2,2881 (0,35); 2,2187 (0,35); 2,1917 (0,47); 2,074 (0,97); 2,0503 (0,97); 1,9889 (16); 1,6079 (2,47); 1,5934 (6,31); 1,5869 (6,86); 1,5737 (3,53); 1,5483 (0,66); 1,5334 (0,56); 1,3133 (0,48); 1,2989 (0,51); 1,2759 (2,83); 1,2618 (6,03); 1,2551 (6,78); 1,2402 (4,56); 1,1923 (4,5); 1,1745 (8,44); 1,1571 (4,12); 0,8537 (0,55); 0,0077 (1,92); 0,0004 (50,97); -0,0002 (51,39); -0,0076 (2,47)

Ví dụ số 58, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 399,95MHz

11,4625 (0,76); 9,4924 (0,91); 7,7342 (0,69); 7,7279 (0,87); 7,6972 (0,38); 7,6754 (0,52); 7,669 (0,44); 7,5846 (0,89); 7,5628 (0,61); 5,2886 (0,42); 5,2653 (0,38); 5,2629 (0,4); 5,2177 (0,4); 5,2149 (0,4); 5,1751 (0,34); 5,1722 (0,34); 5,0002 (0,7); 4,9854 (0,68); 4,0553 (1,25); 4,0375 (3,8); 4,0197 (3,84); 4,0019 (1,29); 3,3327 (56,56); 2,5244 (0,53); 2,5107 (9,02); 2,5065 (18,16); 2,502 (23,94); 2,4976 (17,52); 2,4933 (8,69); 1,9892 (16); 1,6078 (0,32); 1,5935 (0,8); 1,5866 (0,87); 1,5734 (0,37); 1,2731 (0,38); 1,2595 (0,79); 1,2527 (0,87); 1,2381 (0,4); 1,1924 (4,32); 1,1746 (8,51); 1,1568 (4,22)

Ví dụ số 59, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 399,95MHz

11,651 (3,43); 9,5701 (3,87); 7,8258 (0,42); 7,8066 (0,45); 7,7856 (1,77); 7,7798 (1,75); 7,7597 (1,67); 7,7539 (1,75); 7,4937 (2,27); 7,4912 (2,53); 7,4879 (2,46); 4,055 (1,17); 4,0364 (16); 4,0195 (2,96); 4,0017 (0,96); 3,3272 (189,39); 3,3038 (1,7); 2,6753 (2,02); 2,6707 (2,77); 2,6662 (2,03); 2,6617 (1); 2,5409 (1,96); 2,538 (2); 2,5241 (10,07); 2,5194 (14,6); 2,5106 (143,21); 2,5062 (290,59); 2,5017 (381,24); 2,4971 (273,16); 2,4927 (130,54); 2,3372 (0,88); 2,3329 (1,89); 2,3284 (2,64); 2,3238 (1,92); 1,9891 (12,1); 1,6247 (1,42); 1,6106 (3,42); 1,6037 (3,59); 1,5904 (1,59); 1,3354 (0,45); 1,2977 (0,37); 1,2887 (1,71); 1,2751 (3,39); 1,2684 (3,63); 1,254 (1,5); 1,2493 (0,86); 1,2349 (1,15); 1,1921 (3,43); 1,1743 (6,77); 1,1565 (3,32); 0,146 (0,95); 0,008 (8,15); -0,0002 (242,95); -0,0085 (7,93); -0,1497 (0,99)

Ví dụ số 60, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 399,95MHz

7,794 (4,24); 7,7727 (4,24); 7,6351 (0,76); 4,0377 (0,78); 4,0274 (0,64); 4,0196 (1,38); 4,0064 (16); 3,3192 (128,67); 3,2968 (0,7); 2,8209 (1,39); 2,8055 (1,44); 2,6747 (0,95); 2,6701 (1,33); 2,6657 (0,98); 2,5404 (0,79); 2,5235 (3,49); 2,51 (67,6); 2,5057 (137,84); 2,5011 (183,23); 2,4966 (131,99); 2,4922 (63,54); 2,4323 (0,41); 2,414 (0,36); 2,3324 (1,13); 2,3278 (1,54); 2,3234 (1,25); 2,3189 (0,84); 2,2912 (1,59); 2,2752 (1,59); 1,9886 (2,92); 1,8835 (2,17); 1,6149 (0,87); 1,4668 (0,4); 1,449 (0,35); 1,3351 (0,44); 1,2492 (0,66); 1,2339 (0,36); 1,1922 (0,88); 1,1744 (1,71); 1,1566 (0,85); 1,1112 (0,34); 1,0892 (0,48); 1,084 (0,4); 1,0655 (0,87); 1,0372 (4,91); 1,0194 (10,33); 1,0015 (4,75); 0,9043 (4,3); 0,8866 (9,1); 0,8688 (4,15); 0,008 (1,09); -0,0002 (32,33); -0,0085 (1,18)

Ví dụ số 61, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 399,95MHz

11,5111 (0,37); 11,475 (1,82); 7,8171 (0,36); 7,761 (1,76); 7,7563 (1,78); 7,6607 (0,63); 7,6561 (0,62); 7,6393 (1,64); 7,6344 (1,68); 7,6196 (2,16); 7,5979 (0,65); 4,0388 (7,82); 4,0199 (1,67); 3,3272 (155,76); 3,3046 (0,44); 3,2089 (0,61); 3,0604 (0,48); 2,8649 (0,47); 2,6801 (0,39); 2,6754 (0,85); 2,6708 (1,18); 2,6662 (0,84); 2,6616 (0,37); 2,541 (0,64); 2,5242 (3,65); 2,5194 (6,12); 2,5108 (63,64); 2,5063 (126,44); 2,5017 (165,51); 2,4971 (117,67); 2,4926 (54,8); 2,3375 (0,45); 2,333 (0,89); 2,3285 (1,2); 2,3239 (0,84); 2,3193 (0,4); 1,9892 (1,79); 1,717 (1,85); 1,4686 (0,61); 1,3975 (16); 1,3356 (0,56); 1,3185 (0,45); 1,3025 (0,73); 1,2491 (0,7); 1,2357 (0,51); 1,2144 (1,84); 1,1967 (3,53); 1,179 (1,74); 1,1744 (1,8); 1,1565 (0,59); 0,008 (0,73); -0,0002 (19,27); -0,0085 (0,58)
Ví dụ số 62, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 399,95MHz 11,4809 (1,28); 7,7806 (1,15); 7,7762 (1,17); 7,6487 (0,33); 7,6426 (0,35); 7,6268 (1,18); 7,6215 (1,31); 7,6147 (1,72); 7,593 (0,33); 4,0556 (0,42); 4,0348 (5,9); 4,0202 (1,98); 4,0022 (0,4); 3,3283 (21,01); 3,1067 (0,99); 2,8649 (5,51); 2,5245 (0,58); 2,511 (9,79); 2,5067 (19,73); 2,5022 (26,27); 2,4977 (19,46); 2,4934 (9,59); 1,9895 (4,55); 1,6728 (1,36); 1,4933 (1,02); 1,3975 (16); 1,1926 (1,27); 1,1748 (2,51); 1,157 (1,23); -0,0002 (2,53)
Ví dụ số 63, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 399,95MHz 9,6002 (1,23); 7,7269 (1,04); 7,7055 (1,24); 7,6766 (0,93); 7,6704 (0,97); 7,4809 (0,56); 7,4747 (0,53); 7,4597 (0,48); 7,4533 (0,47); 4,8951 (0,42); 4,8795 (0,59); 4,864 (0,43); 4,0855 (4,08); 4,0568 (1,41); 4,039 (4,12); 4,0212 (4,16); 4,0034 (1,43); 3,3262 (2,69); 2,5117 (1,75); 2,5073 (3,52); 2,5028 (4,67); 2,4983 (3,47); 2,4939 (1,71); 1,9898 (16); 1,617 (0,42); 1,6028 (1,05); 1,596 (1,11); 1,5828 (0,47); 1,2947 (0,5); 1,281 (1,05); 1,2745 (1,1); 1,2599 (0,4); 1,1934 (5,01); 1,1756 (9,46); 1,1578 (4,87); 1,0379 (1,17); 1,0225 (1,27); 0,994 (1,27); 0,9787 (1,15); -0,0002 (1,31)
Ví dụ số 64, dung môi: [DMSO], quang phổ kế: 399,95MHz 11,531 (5,19); 9,4981 (6,09); 8,3176 (0,59); 7,7614 (4,9); 7,7551 (5,67); 7,69 (2,44); 7,6836 (2,05); 7,6681 (3,54); 7,6617 (3,29); 7,588 (6,35); 7,5661 (4,3); 5,5721 (1,17); 5,5509 (3,42); 5,5291 (3,53); 5,5072 (1,24); 4,0553 (0,61); 4,0375 (1,86); 4,0197 (1,88); 4,0019 (0,63); 3,3757 (6,9); 2,6756 (1,2); 2,671 (1,66); 2,6665 (1,24); 2,5379 (1,15); 2,5242 (6,33); 2,5193 (9,89); 2,5108 (89,72); 2,5065 (179,68); 2,5019 (237,24); 2,4974 (175,66); 2,4931 (88,49); 2,3331 (1,22); 2,3287 (1,67); 2,3242 (1,26); 1,989 (7,98); 1,609 (2,14); 1,5947 (5,27); 1,5878 (5,67); 1,5746 (2,44); 1,3977 (16); 1,3122 (0,32); 1,2725 (2,58); 1,2588 (5,23); 1,2521 (5,65); 1,2375 (2,18); 1,1926 (2,19); 1,1748 (4,28); 1,157 (2,11); 0,8854 (0,38); 0,0079 (1,5); -0,0002 (40,02); -0,0083 (1,91)

Cường độ của những tín hiệu rõ nét liên quan đến chiều cao theo cm của các tín hiệu này trong ví dụ về phổ NMR được in ra và thể hiện tỷ lệ thực của các cường độ tín hiệu. Trong trường hợp tín hiệu rộng, một số tín hiệu hoặc điểm giữ của tín hiệu và cường độ tương đối của chúng có thể được thể hiện trong sự so sánh với tín hiệu mạnh nhất trong phổ này.

Danh sách của các đỉnh ^1H NMR tương tự như dữ liệu ^1H NMR thông thường được in ra và do đó thường bao gồm tất cả các đỉnh được liệt kê trong sự thể hiện NMR thông thường.

Hơn nữa, như dữ liệu ^1H NMR thông thường được in ra, chúng có thể thể hiện các tín hiệu dung môi, tín hiệu chất đồng phân lập thể của hợp chất đích, mà cũng tạo thành một phần của mục đích của sáng chế này, và/hoặc các đỉnh của tạp chất.

Trong báo cáo về các tín hiệu hợp chất trong khoảng delta của dung môi và/hoặc nước, danh sách của chúng tôi về các đỉnh ^1H NMR thể hiện các đỉnh dung môi thông thường, ví dụ các đỉnh của DMSO trong DMSO- d_6 và đỉnh của nước, mà thường có cường độ trung bình cao.

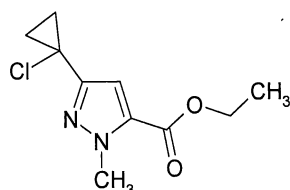
Các đỉnh của chất đồng phân lập thể của hợp chất đích và/hoặc các đỉnh của tạp chất thường có cường độ trung bình thấp hơn các đỉnh của hợp chất gốc (ví dụ, với độ tinh khiết $>90\%$).

Các chất đồng phân lập thể và/hoặc tạp chất này có thể là điển hình của quy trình điều chế cụ thể. Do đó các đỉnh của chúng có thể giúp nhận biết ra sự mô phỏng quy trình điều chế của chúng tôi với sự xem xét "các dấu tay sản phẩm phụ".

Người có trình độ trong lĩnh vực này mà tính toán các đỉnh của hợp chất đích bằng phương pháp đã biết (MestreC, mô phỏng ACD, nhưng cả bằng cách đánh giá các trị số mong muốn theo kinh nghiệm) có thể, khi cần, tách các đỉnh của hợp chất đích ra, tùy ý sử dụng các bộ lọc cường độ bổ sung. Sự phân tách này sẽ tương tự với việc lựa chọn đỉnh phù hợp trong sự thể hiện ^1H NMR thông thường.

Điều chế nguyên liệu ban đầu

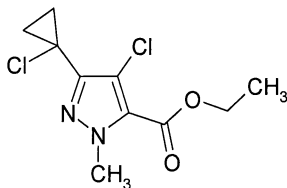
Etyl 3-(1-cloxypropyl)-1-metyl-1H-pyrazol-5-carboxylat



10,16g (254,2mmol) natri hydrua được tạo huyền phù trong 125ml tetrahydrofuran tinh khiết để phân tích và được làm lạnh đến -15°C . Dung dịch chứa 15,0g (127,1mmol) 1-(1-cloxypropyl)etanon trong 25ml tetrahydrofuran tinh khiết để phân tích được bổ sung nhỏ giọt vào huyền phù này. Huyền phù được khuấy ở -15°C trong 2 giờ, và 37,12g (254,2mmol) diethyl oxalat sau đó được bổ sung vào. Sau 3 giờ ở nhiệt độ trong phòng, phản ứng được làm lạnh bằng nước đá. Pha nước được chiết lặp đi lặp lại bằng ethyl axetat. Các pha hữu cơ kết hợp được rửa bằng dung dịch natri clorua bão hòa, được làm khô bằng natri sulphat và được lọc. Dung môi được loại bỏ trong thiết bị làm bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm.

Chất cặn được hòa tan trong 150ml ethanol tinh khiết để phân tích và được đun sôi dưới nhiệt độ hồi lưu. 36,09g (254,2mmol) methylhydrazin sulphat được bổ sung vào hỗn hợp này ở nhiệt độ hồi lưu, và hỗn hợp được đun sôi ở nhiệt độ hồi lưu trong 4 giờ nữa. Sau khi làm lạnh, phản ứng được cô đặc dưới áp suất giảm trong thiết bị làm bay hơi kiểu quay, và chất cặn thu được theo cách này được hấp thụ trong hỗn hợp nước và ethyl axetat. Pha nước được chiết lặp đi lặp lại bằng ethyl axetat. Các pha hữu cơ kết hợp được rửa bằng dung dịch natri clorua bão hòa, được làm khô bằng natri sulphat và được lọc. Dung môi được loại bỏ trong thiết bị làm bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Sản phẩm thô được tinh chế bằng sắc ký cột. Quy trình này cho ra 4,34g (15%) ethyl 3-(1-cloxypropyl)-1-methyl-1H-pyrazol-5-carboxylat.

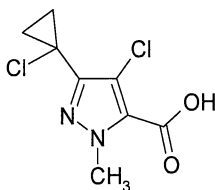
$^1\text{H-NMR}$ (300MHz, $\text{d}_1\text{-chloroform}$) δ = 6,89 (s, 1H), 4,36 (q, 2H), 4,11 (s, 3H), 1,35 (t, 3H) ppm;

Etyl 4-clo-3-(1-cloxypropyl)-1-metyl-1H-pyrazol-5-carboxylat

500mg (2,19mmol) etyl 3-(1-cloxypropyl)-1-metyl-1*H*-pyrazol-5-carboxylat được hòa tan trong 10ml N,N-dimetylformamit tinh khiết để phân tích, và 438mg (3,28mmol) N-closuxinimit được bổ sung vào. Hỗn hợp phản ứng được gia nhiệt ở 80°C trong 15. Dung dịch phản ứng đã làm lạnh được pha loãng bằng nước và được chiết hai lần bằng etyl axetat. Các pha hữu cơ kết hợp được rửa bằng dung dịch natri clorua bão hòa, được làm khô bằng natri sulphat và được lọc. Dung môi được loại bỏ dưới áp suất giảm trong thiết bị làm bay hơi kiểu quay. Sản phẩm thô được lọc qua silicagel và được rửa giải bằng etyl axetat. Quy trình này cho ra 517mg (80%) etyl 4-clo-3-(1-cloxypropyl)-1-metyl-1*H*-pyrazol-5-carboxylat có độ tinh khiết 89%.

¹H-NMR (400MHz, d₆DMSO): δ = 4,35 (q, 2H), 4,04 (s, 3H), 1,42-1,46 (m, 2H), 1,31-1,38 (m, 5H) ppm.

HPLC-MS ^{a)}: logP = 3.52, phổ khối (m/z) = 263 [M+H]⁺.

Axit 4-clo-3-(1-cloxypropyl)-1-metyl-1H-pyrazol-5-carboxylic

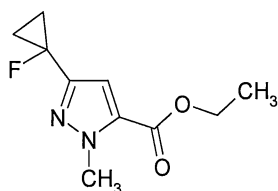
517mg (1,76mmol) etyl 4-clo-3-(1-cloxypropyl)-1-metyl-1*H*-pyrazol-5-carboxylat (độ tinh khiết 89%) được hòa tan trong 10ml etanol tinh khiết để phân tích 3,5ml (3,5mmol) 1N dung dịch nước natri hydroxit sau đó được bổ sung vào dung dịch này, và hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ phòng trong 16 giờ. Hỗn hợp phản ứng được axit hóa bằng cách bổ sung 1N axit clohydric vào. Pha nước được chiết hai lần bằng etyl axetat. Các pha hữu cơ kết hợp được rửa bằng dung dịch natri clorua bão hòa, được làm khô bằng natri sulphat và được lọc. Dung môi được loại bỏ dưới áp suất

giảm trong thiết bị làm bay hơi kiểu quay. Quy trình này cho ra 422mg (99%) axit 4-clo-3-(1-cloxypropyl)-1-metyl-1*H*-pyrazol-5-carboxylic.

$^1\text{H-NMR}$ (400MHz, d_6DMSO): $\delta = 4,02$ (s, 3H), 1,31-1,42 (m, 4H) ppm.

HPLC-MS ^{a)}: logP = 1,90, phổ khối (m/z) = 235 $[\text{M}+\text{H}]^+$.

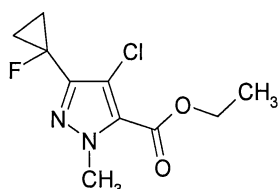
Etyl 3-(1-floxypropyl)-1-metyl-1H-pyrazol-5-carboxylat



Etyl 3-(1-floxypropyl)-1-metyl-1*H*-pyrazol-5-carboxylat được điều chế từ 1-(1-floxypropyl)etanon tương tự với quy trình đã mô tả trong sự tổng hợp etyl 3-(1-cloxypropyl)-1-metyl-1*H*-pyrazol-5-carboxylat.

$^1\text{H-NMR}$ (300MHz, $\text{d}_1\text{-chloroform}$) $\delta = 6,90$ (s, 1H), 4,34 (q, 2H), 4,13 (s, 3H), 1,37 (t, 3H) ppm;

Etyl 4-clo-3-(1-floxypropyl)-1-metyl-1H-pyrazol-5-carboxylat

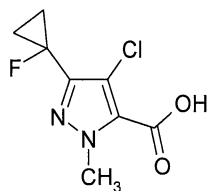


Việc điều chế được thực hiện tương tự với việc điều chế etyl 4-clo-3-(1-cloxypropyl)-1-metyl-1*H*-pyrazol-5-carboxylat bằng cách sử dụng etyl 3-(1-floxypropyl)-1-metyl-1*H*-pyrazol-5-carboxylat và 3 eq of *N*-closucxinimit.

$^1\text{H-NMR}$ (400MHz, d_6DMSO): $\delta = 4,36$ (q, 2H), 4,06 (s, 3H), 1,38-1,44 (m, 2H), 1,33 (t, 3H), 1,04-1,09 (m, 2H) ppm.

HPLC-MS ^{a)}: logP = 3,07, phổ khối (m/z) = 247 $[\text{M}+\text{H}]^+$.

Axit 4-clo-3-(1-floxypropyl)-1-metyl-1H-pyrazol-5-carboxylic

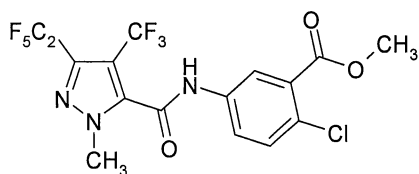


Việc điều chế được thực hiện tương tự với việc điều chế axit 4-clo-3-(1-cloxypropyl)-1-metyl-1*H*-pyrazol-5-carboxylic bằng cách sử dụng etyl 3-(1-floxypropyl)-1-metyl-1*H*-pyrazol-5-carboxylat và 5,0 đương lượng natri hydroxit trong metanol.

$^1\text{H-NMR}$ (400MHz, $d_6\text{DMSO}$): δ = 4,05 (s, 3H), 1,37-1,43 (m, 2H), 1,05-1,09 (m, 2H) ppm.

HPLC-MS ^{a)}: logP = 3,07, phổ khối (m/z) = 219 $[\text{M}+\text{H}]^+$.

Metyl 2-clo-5-([1-metyl-3-(pentafluoretyl)-4-(trifluoretyl)-1H-pyrazol-5-yl]carbonyl)amino)benzoat



4,0g (12,8mmol) axit 1-metyl-3-(pentafluoretyl)-4-(trifluoretyl)-1*H*-pyrazol-5-carboxylic được tạo huyền phù trong 50ml diclometan. 0,02ml *N,N*-dimetylformamit và 3,54ml (38,4mmol) oxalyl clorua sau đó được bổ sung lần lượt vào. Sau đó hỗn hợp phản ứng được khuấy lần đầu tiên ở nhiệt độ phòng trong 30 phút và sau đó được khuấy dưới nhiệt độ hồi lưu trong 30 phút. Dung môi được loại bỏ dưới áp suất giảm trong thiết bị làm bay hơi kiểu quay. 1-Metyl-3-(pentafluoretyl)-4-(trifluoretyl)-1*H*-pyrazol-5-carbonyl clorua tạo thành được sử dụng cho bước tổng hợp sau đó mà không cần tinh chế thêm.

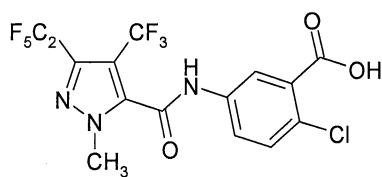
Dung dịch chứa 4,24g (12,8mmol) 1-metyl-3-(pentafluoretyl)-4-(trifluoretyl)-1*H*-pyrazol-5-carbonyl clorua trong 25ml diclometan tinh khiết để phân tích được bổ sung vào huyền phù chứa 2,38g (12,8mmol) metyl 5-amino-2-clobenzoat và 2,57g (19,2mmol) bạc(I) xyanua trong 50ml diclometan tinh khiết để phân tích, và hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ phòng trong 16 giờ. Sau đó huyền phù này được lọc qua

silicagel và sản phẩm được rửa giải bằng cách sử dụng hỗn hợp chứa xyclohexane và etyl axetat (1:1). Pha hữu cơ được rửa liên tục ba lần bằng 6N axit clohydric và hai lần bằng dung dịch natri clorua bão hòa. Sau đó pha hữu cơ được làm khô bằng natri sulphat, được lọc và cô đặc trong thiết bị làm bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Quy trình này cho ra 5,75g (93%) metyl 2-clo-5-([1-metyl-3-(pentafluoretyl)-4-(trifluorometyl)-1H-pyrazol-5-yl]carbonyl)-amino)benzoat.

$^1\text{H-NMR}$ (400MHz, d_3 -axetonitril): δ = 9,33 (s, 1H), 8,14 (d, 1H), 7,72 (dd, 1H), 7,54 (d, 1H), 3,98 (s, 3H), 3,90 (s, 3H) ppm.

HPLC-MS^{a)}: logP = 4,05, phổ khối (m/z) = 480 $[\text{M}+\text{H}]^+$.

Axit 2-clo-5-([1-metyl-3-(pentafluoretyl)-4-(trifluorometyl)-1H-pyrazol-5-yl]-carbonyl)amino)benzencarboxylic

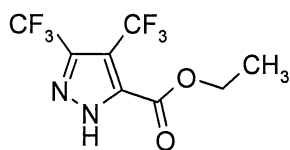


5,75g (11,9mmol) metyl 2-clo-5-([1-metyl-3-(pentafluoretyl)-4-(trifluorometyl)-1H-pyrazol-5-yl]carbonyl)amino)benzoat được hòa tan trong 30ml metanol tinh khiết để phân tích, và 15,0ml (30,0mmol) 2 N dung dịch nước natri hydroxit sau đó được bổ sung vào. Hỗn hợp phản ứng được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 16 giờ. Dung dịch phản ứng được axit hóa cẩn thận bằng 6N axit clohydric, và sau đó pha nước được chiết ba lần bằng etyl axetat. Các pha hữu cơ kết hợp được rửa một lần bằng dung dịch natri clorua bão hòa, được làm khô bằng natri sulphat và được lọc. Dung môi được loại bỏ dưới áp suất giảm trong thiết bị làm bay hơi kiểu quay. Quy trình này cho ra 5,57g axit 2-clo-5-([1-metyl-3-(pentafluoretyl)-4-(trifluorometyl)-1H-pyrazol-5-yl]carbonyl)amino)-benzencarboxylic là chất rắn không màu.

$^1\text{H-NMR}$ (400MHz, d_3 -axetonitril): δ = 9,17 (s, 1H), 8,11 (d, 1H), 7,73 (dd, 1H), 7,52 (d, 1H), 3,98 (s, 3H) ppm.

HPLC-MS^{a)}: logP = 3,18, phổ khối (m/z) = 466 $[\text{M}+\text{H}]^+$.

Etyl 3,4-bis(trifluorometyl)-1H-pyrazol-5-carboxylat

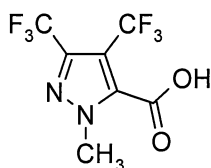


Dưới môi trường khí bảo vệ, ban đầu 7,57g (63,0mmol) diazoethyl axetat được nạp vào trong 200ml dietyl ete, và nhiệt độ của hỗn hợp được điều chỉnh đến -70°C . Sau đó 20,4g (126mmol) hexaflubutyn được đưa vào dung dịch đã làm lạnh. Hỗn hợp phản ứng được làm ấm từ từ đến nhiệt độ trong phòng và được khuấy trong 16 giờ. Sau đó dung môi được loại bỏ trong thiết bị làm bay hơi kiểu quay. Quy trình này cho ra 17,0g etyl 3,4-bis(triflometyl)-1H-pyrazol-5-carboxylat (98%) là dầu màu vàng.

$^1\text{H-NMR}$ (400MHz, d_3 -axetonitril): $\delta = 4,42$ (q, 2H), 1,38 (t, 3H) ppm.

GC-MS: thời gian lưu 3,48 phút; khối (m/z) = 276 $[\text{M}]^+$.

Axit 1-metyl-3,4-bis(triflometyl)-1H-pyrazol-5-carboxylic

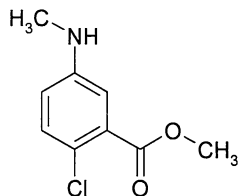


3,0g (10,9mmol) etyl 3,4-bis(triflometyl)-1H-pyrazol-5-carboxylat và 4,5g (32,6mmol) kali carbonat được tạo huyền phù trong 70ml axeton, và 1,35ml iodometan (21,7mmol) được bổ sung vào. Hỗn hợp phản ứng được khuấy ở nhiệt độ trong phòng qua đêm. 54ml (108mmol) 2N dung dịch nước natri hydroxit được bổ sung vào huyền phù. Sau đó dung dịch này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng qua đêm. Hỗn hợp phản ứng được pha loãng bằng nước, và hầu hết axeton đều bị loại ra trong thiết bị làm bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Chất cặn được điều chỉnh đến pH = 2-3 bằng cách sử dụng 1M axit clohydric. Dung dịch phản ứng nước được chiết hai lần bằng etyl axetat. Các pha hữu cơ kết hợp được làm khô bằng magie sulphat, được lọc và cô đặc dưới áp suất giảm trong thiết bị làm bay hơi kiểu quay. Quy trình này cho ra 2,7g axit 1-metyl-3,4-bis(triflometyl)-1H-pyrazol-5-carboxylic (84%; độ tinh khiết 88%) là chất rắn màu nâu.

$^1\text{H-NMR}$ (400MHz, d_3 -axetonitril): $\delta = 4,12$ (s, 3H) ppm.

HPLC-MS ^{a)}: logP = 1,47, phổ khối (m/z) = 263 [M+H]⁺.

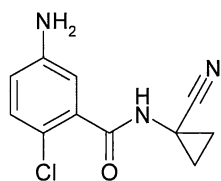
Metyl 2-clo-5-(metylamino)benzoat



55,0g (296mmol) metyl 2-clo-5-aminobenzoat và 49,1g (356mmol) kali carbonat được tạo huyền phù trong 500ml axetonitril tinh khiết để phân tích 22,1ml (356mmol) metyl iodua được bổ sung nhỏ giọt vào hỗn hợp phản ứng. Sau đó huyền phù được đun sôi dưới nhiệt độ hồi lưu trong 3 giờ. Sau khi làm lạnh, hỗn hợp phản ứng được lọc. Dịch lọc được pha loãng bằng nước. Pha nước được chiết hai lần bằng etyl axetat. Các pha hữu cơ kết hợp được làm khô bằng natri sulphat và được lọc. Dung môi được loại bỏ dưới áp suất giảm trong thiết bị làm bay hơi kiểu quay. Sản phẩm thô được tinh chế bằng sắc ký cột. Quy trình này cho ra 30,0g (51%) metyl 2-clo-5-(metylamino)benzoat.

¹H-NMR (300MHz, d₁-cloroform) δ = 7,21 (d, 1H), 7,00 (d, 1H), 6,63 (d, 1H), 3,90 (s, 3H), 2,86 (s, 3H) ppm.

5-Amino-2-clo-N-(1-xyanoxyclopropyl)benzamid



Ban đầu 3,20g (15,9mmol) axit 2-clo-5-nitro benzoic được nạp vào trong 50ml diclometan tinh khiết để phân tích, và 0,06ml N,N-dimetylformamid tinh khiết để phân tích được bổ sung vào. 2,08ml (23,8mmol) oxalyl clorua sau đó được bổ sung vào hỗn hợp phản ứng. Sau 3 giờ ở RT, hỗn hợp phản ứng được cô đặc dưới áp suất giảm trong thiết bị làm bay hơi kiểu quay. Sản phẩm thô (2-clo-5-nitrobenzoyl clorua) được để phản ứng luôn mà không cần tinh chế thêm.

2,36g (19,mmol) 1-aminoxyclopropancarbonitril hydroclorua được tạo huyền phù trong 70ml cloroform tinh khiết để phân tích Bằng cách làm lạnh bằng đá, 6,93ml

(39,7mmol) N-etyldiisopropylamin được bổ sung vào huyền phù. Sau đó dung dịch chứa 3,50g (15,9mmol) 2-clo-5-nitrobenzoyl clorua trong 5ml cloroform được bổ sung nhỏ giọt vào hỗn hợp đã được làm lạnh này. Hỗn hợp phản ứng được gia nhiệt ở 50°C (nhiệt độ bể dầu) trong 4 giờ. Sau đó hỗn hợp phản ứng được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 12 giờ nữa.

Hỗn hợp phản ứng được cô đặc dưới áp suất giảm trong thiết bị làm bay hơi kiểu quay, và chất cặn được hấp thụ trong etyl axetat. Pha hữu cơ được rửa hai lần bằng 0,5N axit clohydric, được làm khô bằng natri sulphat và được lọc. Dung môi được loại bỏ dưới áp suất giảm trong thiết bị làm bay hơi kiểu quay. Quy trình này cho ra 3,70g (84%) 2-clo-*N*-(1-xyanoxycyclopropyl)-5-nitrobenzamid.

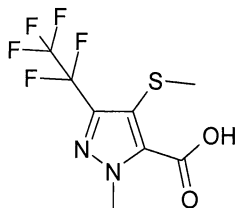
¹H-NMR (400MHz, d₆DMSO): δ = 9,59 (s, 1H), 8,36 (d, 1H), 8,31 (dd, 1H), 7,85 (d, 1H), 1,55-1,61 (m, 2H), 1,32-1,37 (m, 2H) ppm.

HPLC-MS ^{a)}: logP = 1,52, phổ khối (m/z) = 266 [M+H]⁺.

3,15g bột sắt được tạo huyền phù trong 18ml 5% axit axetic đặc, và dung dịch chứa 3,0g 2-clo-*N*-(1-xyanoxycyclopropyl)-5-nitrobenzamid trong hỗn hợp chứa 25ml etyl axetat và 22,6ml axit axetic lạnh được bổ sung vào. Trong khi bổ sung vào, nhiệt độ bên trong được giữ ở dưới 45°C. Hỗn hợp phản ứng được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 14 giờ và sau đó được lọc qua xelit. Dịch lọc được pha loãng bằng nước, và pha nước được chiết ba lần bằng etyl axetat. Các pha hữu cơ kết hợp được rửa hai lần bằng dung dịch natri clorua bão hòa, được làm khô bằng magie sulphat, được lọc và cô đặc trong thiết bị làm bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Sản phẩm thô được nghiền với hỗn hợp chứa ba phần xyclohexan và một phần etyl axetat, và chất rắn được lọc ra. Quy trình này cho ra 2,0g (71%) 5-amino-2-clo-*N*-(1-xyanoxycyclopropyl)benzamid.

¹H-NMR (400MHz, d₆DMSO): δ = 9,20 (s, 1H), 7,07 (d, 1H), 6,62 (dd, 1H), 6,57 (d, 1H), 1,51-1,57 (m, 2H), 1,17-1,24 (m, 2H) ppm.

HPLC-MS ^{a)}: logP = 0,82, phổ khối (m/z) = 236 [M+H]⁺.

Axit 1-metyl-4-(metylsulphanyl)-3-(pentafluoretyl)-1*H*-pyrazol-5-carboxylic

8,0g axit (27.7mmol) 1-metyl-4-nitro-3-(pentafluoretyl)-1*H*-pyrazol-5-carboxylic [được điều chế tương tự với J. Med. Chem. **1987**, 30, 91-96] được hòa tan trong 100ml diclometan. 50μl N,N-dimetylformamit và 10,5g (83,0mmol) oxalyl clorua được bổ sung lần lượt vào dung dịch này. Sau 0,5 giờ ở nhiệt độ trong phòng, phản ứng được gia nhiệt dưới nhiệt độ hồi lưu trong 0,5 giờ. Hỗn hợp phản ứng được làm mát đến nhiệt độ trong phòng. Dung môi và lượng oxalyl clorua dư được loại bỏ trong thiết bị làm bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm. Chất cặn được hòa tan trong cloroform tinh khiết để phân tích và được bổ sung nhỏ giọt từ từ vào huyền phù chứa 5,56g (41,5mmol) bạc(I) xyanua, 100ml cloroform tinh khiết để phân tích và 56ml metanol tinh khiết để phân tích. Hỗn hợp được gia nhiệt dưới nhiệt độ hồi lưu trong 8 giờ và sau đó được làm mát đến nhiệt độ trong phòng. Hỗn hợp phản ứng được lọc qua cột silicagel ngắn, và cột này được rửa bằng diclometan. Dung môi được loại bỏ trong thiết bị làm bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm.

Quy trình này cho ra 8,5g metyl 1-metyl-4-nitro-3-(pentafluoretyl)-1*H*-pyrazol-5-carboxylat. Sản phẩm thô được sử dụng cho phản ứng tiếp theo mà không cần tinh chế thêm.

$^1\text{H-NMR}$ (600MHz, d_6DMSO): δ = 4,16 (s, 3H), 3,93 (s, 3H) ppm.

HPLC-MS ^{a)}: logP = 3,18, phổ khối (m/z) = 304 $[\text{M}+\text{H}]^+$.

8,5g (28,0mmol) metyl 1-metyl-4-nitro-3-(pentafluoretyl)-1*H*-pyrazol-5-carboxylat và 850mg paladi trên than (10% paladi) được tạo huyền phù trong 100ml metanol. Nồi hấp được trơ hóa bằng nitơ và sau đó hỗn hợp phản ứng được khuấy dưới môi trường khí hydro ở 5 bar. Sau 22 giờ ở RT, hỗn hợp được lọc qua xelit và dung môi được loại bỏ dưới áp suất giảm trong thiết bị làm bay hơi kiểu quay. Sản phẩm thô được hấp thụ

trong diclometan và được lọc qua natri sulphat. Sau đó diclometan được loại bỏ dưới áp suất giảm trong thiết bị làm bay hơi kiểu quay.

Quy trình này cho ra 6,7g (86%) metyl 4-amino-1-metyl-3-(pentafluetyl)-1H-pyrazol-5-carboxylat.

$^1\text{H-NMR}$ (600MHz, d_6DMSO): $\delta = 5,32$ (s, 2H), 4,07 (s, 3H), 3,86 (s, 3H) ppm.

HPLC-MS ^{a)}: $\log P = 2,52$, phổ khối (m/z) = 274 $[\text{M}+\text{H}]^+$.

2,0g (7,32mmol) metyl 4-amino-1-metyl-3-(pentafluetyl)-1H-pyrazol-5-carboxylat và 1,38g (14,6mmol) dimetyl disulphua được hòa tan trong 14ml axetonitril tinh khiết để phân tích. Dung dịch chứa 1,26g (11.0mmol) *tert*-butyl nitrit trong 5ml axetonitril tinh khiết để phân tích được bổ sung nhỏ giọt từ từ vào hỗn hợp này. Sau khi bổ sung vào, hỗn hợp phản ứng được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 1 giờ nửa. Sau đó hỗn hợp phản ứng được rót vào 1N axit clohydric. Pha nước được chiết ba lần bằng etyl axetat. Các pha hữu cơ kết hợp được rửa hai lần bằng dung dịch natri clorua bão hòa, được làm khô bằng magie sulphat và được lọc. Dung môi được loại bỏ trong thiết bị làm bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm.

Quy trình này cho ra 2,0g (72%) metyl 1-metyl-4-(metylsulphanyl)-3-(pentafluetyl)-1H-pyrazol-5-carboxylat là hỗn hợp chứa hợp chất mong muốn và sản phẩm phụ metyl 1-metyl-3-(pentafluetyl)-1H-pyrazol-5-carboxylat ở tỷ lệ 8:2.

$^1\text{H-NMR}$ (400MHz, d_6DMSO): $\delta = 4,12$ (s, 3H), 3,94 (s, 3H), 2,34 (s, 3H) ppm.

HPLC-MS ^{a)}: $\log P = 3,51$, phổ khối (m/z) = 305 $[\text{M}+\text{H}]^+$.

3,0g metyl 1-metyl-4-(metylsulphanyl)-3-(pentafluetyl)-1H-pyrazol-5-carboxylat được hòa tan trong 16ml metanol tinh khiết để phân tích 16,5ml 2N dung dịch nước natri hydroxit sau đó được bổ sung vào dung dịch này, và hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 16 giờ. Hỗn hợp phản ứng được pha loãng bằng etyl axetat và sau đó được rửa bằng 100ml 1N axit clohydric. Pha nước axit được chiết hai lần bằng etyl axetat. Các pha hữu cơ kết hợp được rửa bằng dung dịch natri clorua bão hòa,

được làm khô bằng natri sulphat và được lọc. Dung môi được loại bỏ trong thiết bị làm bay hơi kiểu quay dưới áp suất giảm.

Quy trình này cho ra 2,5g (90%) axit 1-metyl-4-(metylsulphanyl)-3-(pentafluoretyl)-1H-pyrazol-5-carboxylic là hỗn hợp chứa sản phẩm mong muốn và sản phẩm phụ axit 1-metyl-3-(pentafluoretyl)-1H-pyrazol-5-carboxylic ở tỷ lệ 8:2.

$^1\text{H-NMR}$ (400MHz, $d_6\text{DMSO}$): δ = 4,12 (s, 3H), 3,94 (s, 3H), 2,34 (s, 3H) ppm.

HPLC-MS ^{a)}: logP = 3,51, phổ khối (m/z) = 305 $[\text{M}+\text{H}]^+$.

Ví dụ thử nghiệm sinh học

A. Hoạt tính của hợp chất

Thử nghiệm *Phaedon* (xử lý phun PHAECO)

Dung môi: 8,0 phần khối lượng axeton

1,5 phần khối lượng dimethylformamit

Chất nhũ hóa: 0,5 phần khối lượng ankylaryl polyglycol ete

Để tạo ra chế phẩm chứa hợp chất hoạt tính thích hợp, một phần khối lượng hợp chất hoạt tính được trộn với các lượng dung môi và chất nhũ hóa được chỉ định, và chất cô đặc được pha loãng bằng nước chứa chất nhũ hóa đến nồng độ mong muốn. Các đĩa lá cải bắp Trung quốc (*Brassica pekinensis*) được phun chế phẩm chứa hợp chất hoạt tính ở nồng độ mong muốn và, sau khi sấy khô, đưa các ấu trùng bọ cánh cứng ở cây mù tạt (*Phaedon cochleariae*) vào.

Sau thời gian 7 ngày, xác định hiệu quả theo %. 100% có nghĩa là toàn bộ ấu trùng bọ cánh cứng đã bị tiêu diệt; 0% có nghĩa là không có ấu trùng bọ cánh cứng bị tiêu diệt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau theo ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả $\geq 100\%$ ở tỷ lệ áp dụng 500g/hecta: 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10

Thử nghiệm *Spodoptera frugiperda* (xử lý phun SPODFR)

Dung môi: 78,0 phần khối lượng axeton

1,5 phần khối lượng dimethylformamit

Chất nhũ hóa: 0,5 phần khối lượng ankylaryl polyglycol ete

Để tạo ra chế phẩm chứa hợp chất hoạt tính thích hợp, một phần khối lượng hợp chất hoạt tính được trộn với lượng dung môi và chất nhũ hóa được chỉ định, và chất đậm đặc này được pha loãng bằng nước chứa chất nhũ hóa đến nồng độ mong muốn. Các đĩa lá ngô (*Zea mays*) được phun chế phẩm chứa hợp chất hoạt tính ở nồng độ mong muốn và, sau khi sấy khô, đưa vào các con sâu bướm ký sinh hại cây (*Spodoptera frugiperda*) vào.

Sau thời gian 7 ngày, xác định hiệu quả theo %. 100% nghĩa là tất cả sâu bướm bị tiêu diệt, 0% nghĩa là không có con nào bị tiêu diệt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau theo ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả $\geq 83\%$ ở tỷ lệ áp dụng 500 g/hecta: 7

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau theo ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả $\geq 100\%$ ở tỷ lệ áp dụng 500g/hecta: 2, 4, 5, 6, 8, 9, 10

Thử nghiệm rệp (xử lý phun MYZUPE)

Dung môi: 78 phần khối lượng axeton

1,5 phần khối lượng dimethylformamit

Chất nhũ hóa: 0,5 phần khối lượng ankylaryl polyglycol ete

Để tạo ra chế phẩm chứa hợp chất hoạt tính thích hợp, một phần khối lượng hợp chất hoạt tính được trộn với các lượng dung môi và chất nhũ hóa được chỉ định, và chất đậm đặc này được pha loãng bằng nước chứa chất nhũ hóa đến nồng độ mong muốn. Đĩa lá cải bắp Trung Quốc (*Brassica pekinensis*) bị phá hoại bởi tất cả các giai đoạn của rệp ăn cây đào xanh (*Myzus persicae*) được phun chế phẩm chứa hợp chất hoạt tính ở nồng độ mong muốn.

Sau thời gian 6 ngày, xác định hiệu quả theo %. Ở đây, 100% có nghĩa là toàn bộ rệp đã bị tiêu diệt; 0% có nghĩa là không có rệp bị tiêu diệt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau theo ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả $\geq 90\%$ ở tỷ lệ áp dụng 500g/hecta: 5, 9

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau theo ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả $\geq 100\%$ ở tỷ lệ áp dụng 500g/hecta: 2, 4, 6, 8, 10

Thử nghiệm nhện đỏ, kháng OP (xử lý phun TETRUR)

Dung môi: 78,0 phần khối lượng axeton

1,5 phần khối lượng dimethylformamit

Chất nhũ hóa: 0,5 phần khối lượng ankylaryl polyglycol ete

Để tạo ra chế phẩm chứa hợp chất hoạt tính thích hợp, một phần khối lượng hợp chất hoạt tính được trộn với các lượng dung môi và chất nhũ hóa được chỉ định, và chất cô đặc này được pha loãng bằng nước chứa chất nhũ hóa đếm nồng độ mong muốn. Đĩa lá đậu (*Phaseolus vulgaris*) bị nhiễm ở tất cả các giai đoạn của ve nhện đỏ nhà kính (*Tetranychus urticae*) được phun chế phẩm chứa hợp chất hoạt tính ở nồng độ mong muốn.

Sau thời gian 6 ngày, xác định hiệu quả theo %. 100% có nghĩa là toàn bộ nhện ve đã bị tiêu diệt; 0% có nghĩa là không có nhện ve bị tiêu diệt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau theo ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả $\geq 90\%$ ở tỷ lệ áp dụng 500 g/hecta: 10

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau theo ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả $\geq 100\%$ ở tỷ lệ áp dụng 500 g/hecta: 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9.

Thử nghiệm *Ctenocephalogenus felis*; qua đường miệng (CTECFE)

Dung môi: 1 phần khối lượng dimethyl sulphoxit

Để tạo ra chế phẩm chứa hợp chất hoạt tính thích hợp, 10mg hợp chất hoạt tính được trộn với 0,5ml dimethyl sulphoxit. Phần chất cô đặc được pha loãng đến nồng độ mong muốn bằng máu gia súc đã xitrat hoá.

Khoảng 20 con bọ chết trưởng thành được bỏ đói (*Ctenocephalogenua felis*) được đặt vào buồng có đỉnh và đáy được bịt kín bằng gạc. Một xylanh kim loại được phủ giấy parafilm được đặt lên trên ngăn. Xylanh chứa máu/chế phẩm chứa hợp chất hoạt tính có thể được bọ chết hút thông qua màng parafilm. Sau thời gian 14 ngày, xác định tỷ lệ bị tiêu diệt theo %. 100% nghĩa là tất cả bọ chết đều bị tiêu diệt, 0% nghĩa là không có con nào bị tiêu diệt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất của ví dụ điều chế cho thấy, ở tỷ lệ áp dụng 100ppm, cho hiệu quả $\geq 80\%$: 7

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất của ví dụ điều chế cho thấy, ở tỷ lệ áp dụng là 100ppm, cho hiệu quả $\geq 100\%$: 2, 6, 8, 9, 10

Thử nghiệm ruồi *Lucilia cuprina* (LUCICU)

Dung môi: dimetyl sulphoxit

Để tạo ra chế phẩm chứa hợp chất hoạt tính thích hợp, 10mg hợp chất hoạt tính được trộn với 0,5ml dimetyl sulphoxit và chất cô đặc được pha loãng bằng nước đến nồng độ mong muốn. Các bình chứa thịt ngựa đã xử lý bằng chế phẩm chứa hợp chất hoạt tính ở nồng độ mong muốn được đưa khoảng 20 ấu trùng *Lucilia cuprina* vào.

Sau thời gian 14 ngày, xác định tỷ lệ giết chết theo %. 100% nghĩa là tất cả các ấu trùng đều bị giết; 0% nghĩa là không ấu trùng nào bị giết.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau của các ví dụ điều chế thể hiện hoạt tính $\geq 100\%$ ở tỷ lệ áp dụng 100ppm: 6, 7, 8, 9, 10

Thử nghiệm ruồi nhà *Musca domestica* (MUSCDO)

Dung môi: dimetyl sulphoxit

Để tạo ra chế phẩm chứa hợp chất hoạt tính thích hợp, 10mg hợp chất hoạt tính được trộn với 0,5ml dimetyl sulphoxit và chất cô đặc được pha loãng bằng nước đến nồng độ mong muốn. Các bình chứa chứa bột biển được xử lý bằng chế phẩm chứa hợp chất hoạt tính ở nồng độ mong muốn được đưa *Musca domestica* trưởng thành vào.

Sau thời gian 2 ngày, xác định tỷ lệ giết chết theo %. 100% nghĩa là tất cả ruồi đều bị tiêu diệt, 0% nghĩa là không có con nào bị tiêu diệt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau của các ví dụ điều chế thể hiện hoạt tính $\geq 100\%$ ở tỷ lệ áp dụng 100ppm: 6, 7, 8, 10

Thử nghiệm ve *Boophilus microplus* (tiêm BOOPMI)

Dung môi: dimethyl sulphoxit

Để tạo ra chế phẩm chứa hợp chất hoạt tính thích hợp, 10mg hợp chất hoạt tính được trộn với 0,5ml dung môi và chất cô đặc được pha loãng bằng dung môi đến nồng độ mong muốn. Dung dịch hợp chất hoạt tính được tiêm vào bụng (*Boophilus microplus*) và các con vật được chuyển vào các đĩa và bảo quản trong phòng được phòng trừ khí hậu. Hoạt tính được đánh giá bằng cách kiểm tra trứng có khả năng sinh sản.

Sau thời gian 7 ngày, xác định hiệu quả theo %. 100% nghĩa là không có con ve nào đẻ được trứng tốt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau theo ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả $\geq 100\%$ ở tỷ lệ áp dụng 20 μ g/con vật: 2, 6, 7, 8, 9, 10

Thử nghiệm ve *Boophilus microplus* (tiêm BOOPMI)

Con vật thử nghiệm: *Boophilus microplus* cái trưởng thành thuộc chủng Parkhurst kháng SP đã được ăn no.

Dung môi: dimethyl sulphoxit

10mg hợp chất hoạt tính được hòa tan trong 0,5ml dimethyl sulphoxit. Để tạo ra chế phẩm phù hợp, trong mỗi trường hợp dung dịch hợp chất hoạt tính được pha loãng bằng nước đến nồng độ mong muốn.

Chế phẩm chứa hợp chất hoạt tính này được hút vào các ống. từ 8 đến 10 con ve được chuyển vào ống khác có lỗ. Ống này được nhúng vào chế phẩm chứa hợp chất hoạt tính, và tất cả các con ve đều bị làm ướt hoàn toàn. Sau khi chất lỏng đã rơi xuống hết, các con ve được chuyển vào đĩa lọc trong

đĩa nhựa và được giữ trong phòng điều hòa khí hậu. Hoạt tính được đánh giá bằng cách kiểm tra trứng có khả năng sinh sản sau 7 ngày. Trứng có khả năng sinh sản không nhìn thấy được từ bên ngoài được giữ trong các ống thủy tinh trong tủ phòng trừ khí hậu cho đến khi ấu trùng nở. 100% nghĩa là không có con ve nào để được trứng tốt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau của các ví dụ điều chế thể hiện hoạt tính $\geq 100\%$ ở tỷ lệ áp dụng 100ppm: 6, 8, 9, 10

Thử nghiệm *Amblyomma hebraeum* (AMBYHE)

Dung môi: dimetyl sulphoxit

Để tạo ra chế phẩm chứa hợp chất hoạt tính thích hợp, 10mg hợp chất hoạt tính được trộn với 0,5ml dimetyl sulphoxit và chất cô đặc được pha loãng bằng nước đến nồng độ mong muốn.

Các nhộng ve (*Amblyomma hebraeum*) được đặt vào trong cốc nhẹ được đục lỗ và được nhúng trong nồng độ mong muốn trong một phút. Các con ve được chuyển lên giấy lọc đưa vào đĩa Petri và được giữ trong buồng được phòng trừ khí hậu.

Sau thời gian 42 ngày, xác định tỷ lệ bị tiêu diệt theo %. 100% có nghĩa là toàn bộ ve đã bị tiêu diệt; 0% có nghĩa là không có con ve nào bị tiêu diệt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất của các ví dụ điều chế cho thấy, ở một tỷ lệ áp dụng là 100ppm, cho hiệu quả $\geq 100\%$: 10

Thử nghiệm so sánh sinh học

Thử nghiệm *Spodoptera frugiperda* (xử lý phun SPODFR)

Dung môi: 78,0 phần khối lượng axeton

1,5 phần khối lượng dimetylformamit

Chất nhũ hóa: 0,5 phần khối lượng ankylaryl polyglycol ete

Để tạo ra chế phẩm chứa hợp chất hoạt tính thích hợp, một phần khối lượng hợp chất hoạt tính được trộn với các lượng dung môi và chất nhũ hóa đã biết và chất cô đặc được pha loãng bằng nước chứa chất nhũ hóa đến nồng độ mong muốn (g/hecta).

Các đĩa lá ngô (*Zea mays*) được phun chế phẩm chứa hợp chất hoạt tính ở nồng độ mong muốn và, sau khi sấy khô, được đưa các con sâu bướm ký sinh hại cây (*Spodoptera frugiperda*) vào.

Sau khoảng thời gian mong đợi, hiệu quả tính theo % được xác định. 100% nghĩa là tất cả sâu bướm bị tiêu diệt, 0% nghĩa là không có con nào bị tiêu diệt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau đây của các ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả tốt hơn trong lĩnh vực này: xem bảng

Thử nghiệm rệp (xử lý phun MYZUPE)

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

Chất nhũ hóa: 0,5 phần khối lượng ankylaryl polyglycol ete

Để tạo ra chế phẩm chứa hợp chất hoạt tính thích hợp, một phần khối lượng hợp chất hoạt tính được trộn với các lượng dung môi và chất nhũ hóa đã biết và chất cô đặc được pha loãng bằng nước chứa chất nhũ hóa đến nồng độ mong muốn (g/hecta).

Đĩa lá cải bắp Trung Quốc (*Brassica pekinensis*) bị phá hoại bởi tất cả các giai đoạn của rệp ăn cây đào xanh (*Myzus persicae*) được phun chế phẩm chứa hợp chất hoạt tính ở nồng độ mong muốn.

Sau khoảng thời gian mong đợi, hiệu quả tính theo % được xác định. Ở đây, 100% có nghĩa là toàn bộ rệp đã bị tiêu diệt; 0% có nghĩa là không có rệp bị tiêu diệt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau đây của các ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả tốt hơn trong lĩnh vực này: xem bảng

Thử nghiệm *Phaedon* (xử lý phun PHAECO)

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

Chất nhũ hóa: 0,5 phần khối lượng ankylaryl polyglycol ete

Để tạo ra một phần của hợp chất hoạt tính thích hợp, một phần khối lượng hợp chất hoạt tính được trộn với các lượng dung môi và chất nhũ hóa đã biết và chất cô đặc được pha loãng bằng nước chứa chất nhũ hóa đến nồng độ mong muốn (g/hecta).

Các đĩa rau cải bắp Trung quốc (*Brassica pekinensis*) được phun chế phẩm chứa hợp chất hoạt tính ở nồng độ mong muốn và, sau khi sấy khô, được đưa các ấu trùng bọ cánh cứng ở cây mù tạt (*Phaedon cochleariae*) vào.

Sau khoảng thời gian mong đợi, hiệu quả tính theo % được xác định. 100% có nghĩa là toàn bộ ấu trùng bọ cánh cứng đã bị tiêu diệt; 0% có nghĩa là không có ấu trùng bọ cánh cứng bị tiêu diệt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau đây của các ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả tốt hơn trong lĩnh vực này: xem bảng

Thử nghiệm nhện đỏ, kháng OP (xử lý phun TETRUR)

Dung môi: 78,0 phần khối lượng axeton

1,5 phần khối lượng dimethylformamit

Chất nhũ hóa: 0,5 phần khối lượng ankylaryl polyglycol ete

Để tạo ra chế phẩm chứa hợp chất hoạt tính thích hợp, một phần khối lượng hợp chất hoạt tính được trộn với các lượng dung môi và chất nhũ hóa đã biết và chất cô đặc được pha loãng bằng nước chứa chất nhũ hóa đến nồng độ mong muốn (g/hecta).

Đĩa cải bắp Trung Quốc (*Phaseolus vulgaris*) bị nhiễm ở tất cả các giai đoạn của ve nhện đỏ nhà kính (*Tetranychus urticae*) được phun chế phẩm chứa hợp chất hoạt tính ở nồng độ mong muốn.

Sau khoảng thời gian mong đợi, hiệu quả tính theo % được xác định. 100% có nghĩa là toàn bộ nhện ve đã bị tiêu diệt; 0% có nghĩa là không có nhện ve bị tiêu diệt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau đây của các ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả tốt hơn trong lĩnh vực này: xem bảng

Thử nghiệm phun *Phaedon cochleariae* (PHAECO)

Dung môi: 7 phần khối lượng dimethylformamit

Chất nhũ hóa: 2 phần khối lượng ankylaryl polyglycol ete

Để tạo ra một phần của hợp chất hoạt tính thích hợp, một phần khối lượng hợp chất hoạt tính được trộn với các lượng dung môi và chất nhũ hóa đã biết và chất cô đặc được pha loãng bằng nước chứa chất nhũ hóa đến nồng độ mong muốn (ppm). Nếu có

yêu cầu bổ sung muối amoni và/hoặc chất thấm vào, trong mỗi trường hợp bổ sung một nồng độ 1000ppm vào dung dịch chế phẩm.

Lá cải bắp (*Brassica oleracea*) được phun chế phẩm chứa hợp chất hoạt tính ở nồng độ mong muốn và được đưa trùng bộ cánh cứng ở cây mù tạt (*Phaedon cochleariae*) vào.

Sau khoảng thời gian mong đợi, tỷ lệ tiêu diệt theo % được xác định. 100% có nghĩa là toàn bộ ấu trùng bộ cánh cứng đã bị tiêu diệt; 0% có nghĩa là không có ấu trùng bộ cánh cứng bị tiêu diệt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau đây của các ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả tốt hơn trong lĩnh vực này: xem bảng

Thử nghiệm phun *Plutella xylostella* (PLUTMA)

Dung môi: 7 phần khối lượng dimethylformamit

Chất nhũ hóa: 2 phần khối lượng ankylaryl polyglycol ête

Để tạo ra chế phẩm chứa hợp chất hoạt tính thích hợp, một phần khối lượng hợp chất hoạt tính được trộn với các lượng dung môi và chất nhũ hóa đã biết và chất cô đặc được pha loãng bằng nước chứa chất nhũ hóa đến nồng độ mong muốn (ppm). Nếu có yêu cầu bổ sung muối amoni và/hoặc chất thấm vào, trong mỗi trường hợp bổ sung một nồng độ 1000ppm vào dung dịch điều chế.

Lá cải bắp (*Brassica oleracea*) được phun chế phẩm chứa hợp chất hoạt tính với nồng độ mong muốn và bị nhiễm ấu trùng sâu tơ (*Plutella xylostella*).

Sau khoảng thời gian mong đợi, tỷ lệ tiêu diệt theo % được xác định. 100% nghĩa là tất cả các con sâu bướm đều bị giết; 0% nghĩa là không con sâu bướm nào bị giết.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau đây của các ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả tốt hơn trong lĩnh vực này: xem bảng

Thử nghiệm phun *Spodoptera frugiperda* (SPODFR)

Dung môi: 7 phần khối lượng dimethylformamit

Chất nhũ hóa: 2 phần khối lượng ankylaryl polyglycol ête

Để tạo ra một phần của hợp chất hoạt tính thích hợp, một phần khối lượng hợp chất hoạt tính được trộn với các lượng dung môi và chất nhũ hóa đã biết và chất cô đặc được pha loãng bằng nước chứa chất nhũ hóa đến nồng độ mong muốn (ppm). Nếu có

yêu cầu bổ sung muối amoni và/hoặc chất thấm vào, trong mỗi trường hợp bổ sung một nồng độ 1000ppm vào dung dịch điều chế.

Lá bông (*Gossypium hirsutum*) được phun chế phẩm chứa hợp chất hoạt tính với nồng độ mong muốn và, sau khi sấy khô, được đưa vào với các sâu bướm ký sinh hại cây (*Spodoptera frugiperda*).

Sau khoảng thời gian mong đợi, tỷ lệ tiêu diệt theo % được xác định. 100% nghĩa là tất cả các con sâu bướm đều bị giết; 0% nghĩa là không con sâu bướm nào bị giết.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau đây của các ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả tốt hơn trong lĩnh vực này: xem bảng

Thử nghiệm phun *Heliothis armigera* (HELIAR)

Dung môi: 7 phần khối lượng dimethylformamit

Chất nhũ hóa: 2 phần khối lượng ankylaryl polyglycol ête

Để tạo ra chế phẩm chứa hợp chất hoạt tính thích hợp, một phần khối lượng hợp chất hoạt tính được trộn với các lượng dung môi và chất nhũ hóa đã biết và chất cô đặc được pha loãng bằng nước chứa chất nhũ hóa đến nồng độ mong muốn (ppm). Nếu có yêu cầu bổ sung muối amoni và/hoặc chất thấm vào, trong mỗi trường hợp bổ sung một nồng độ 1000ppm vào dung dịch điều chế.

Các cây bông (*Gossypium hirsutum*) được phun chế phẩm chứa hợp chất hoạt tính với nồng độ mong muốn và, sau khi sấy khô, được đưa các sâu bướm của sâu hại bông (*Heliothis armigera*) vào.

Sau khoảng thời gian mong đợi, tỷ lệ tiêu diệt theo % được xác định. 100% nghĩa là tất cả các con sâu bướm đều bị giết; 0% nghĩa là không con sâu bướm nào bị giết.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau đây của các ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả tốt hơn trong lĩnh vực này: xem bảng

Thử nghiệm phun *Tetranychus urticae*, kháng OP (TETRUR)

Dung môi: 7 phần khối lượng dimethylformamit

Chất nhũ hóa: 2 phần khối lượng ankylaryl polyglycol ête

Để tạo ra một phần của hợp chất hoạt tính thích hợp, một phần khối lượng hợp chất hoạt tính được trộn với các lượng dung môi và chất nhũ hóa đã biết và chất cô đặc được pha loãng bằng nước chứa chất nhũ hóa đến nồng độ mong muốn (ppm). Nếu có

yêu cầu bổ sung muối amoni và/hoặc chất thấm vào, trong mỗi trường hợp bổ sung một nồng độ 1000ppm vào dung dịch điều chế.

Cây đậu (*Phaseolus vulgaris*) bị phá hoại nặng trong tất cả giai đoạn của nhện ve đỏ trong nhà kính (*Tetranychus urticae*) được xử lý bằng cách phun chế phẩm hợp chất hoạt tính ở nồng độ mong muốn.

Sau khoảng thời gian mong đợi, hiệu quả tính theo % được xác định. 100% có nghĩa là toàn bộ nhện ve đã bị tiêu diệt; 0% có nghĩa là không có nhện ve bị tiêu diệt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau đây của các ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả tốt hơn trong lĩnh vực này: xem bảng

Thử nghiệm phun *Nilaparvata lugens* (NILALU)

Dung môi: 52,5 phần khối lượng axeton

7 phần khối lượng dimethylformamit

Chất nhũ hóa: 0,5 phần khối lượng ankylaryl polyglycol ete

Để tạo ra một phần của hợp chất hoạt tính thích hợp, một phần khối lượng hợp chất hoạt tính được trộn với các lượng dung môi và chất nhũ hóa được chỉ định, và chất cô đặc được pha loãng bằng nước chứa chất nhũ hóa đến nồng độ mong muốn. Nếu có yêu cầu bổ sung muối amoni và/hoặc chất thấm vào, trong mỗi trường hợp bổ sung một nồng độ 1000ppm vào dung dịch điều chế.

Cây lúa (*Oryza sativa*) được phun chế phẩm chứa hợp chất hoạt tính với nồng độ mong muốn và sau đó bị nhiễm ấu trùng rầy nâu hại lúa (*Nilaparvata lugens*).

Sau khoảng thời gian mong đợi, hiệu quả tính theo % được xác định. Ở đây, 100% có nghĩa là toàn bộ rầy nâu đã bị tiêu diệt; 0% có nghĩa là không có con nào bị tiêu diệt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau đây của các ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả tốt hơn trong lĩnh vực này: xem bảng

Thử nghiệm phun *Frankliniella occidentalis* (FRANOC)

Dung môi: 52,5 phần khối lượng axeton

7 phần khối lượng dimethylformamit

Chất nhũ hóa: 0,5 phần khối lượng ankylaryl polyglycol ete

Để tạo ra một phần của hợp chất hoạt tính thích hợp, một phần khối lượng hợp chất hoạt tính được trộn với các lượng dung môi và chất nhũ hóa được chỉ định, và chất cô đặc được pha loãng bằng nước chứa chất nhũ hóa đến nồng độ mong muốn. Nếu có yêu cầu bổ sung muối amoni và/hoặc chất thấm vào, trong mỗi trường hợp bổ sung một nồng độ 1000ppm vào dung dịch điều chế.

Các đĩa lá cây đậu (*Phaseolus vulgaris*) được phun chế phẩm chứa hợp chất hoạt tính ở nồng độ mong muốn và sau đó bị nhiễm quần thể bọ trĩ hỗn hợp (*Frankliniella occidentalis*).

Sau khoảng thời gian mong đợi, hiệu quả tính theo % được xác định. 100% nghĩa là tất cả các con bọ trĩ đều bị giết; 0% nghĩa là không con bọ trĩ nào bị giết.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau đây của các ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả tốt hơn trong lĩnh vực này: xem bảng

Thử nghiệm phun *Liriomyza trifolii* (LIRITR)

Dung môi: 52,5 phần khối lượng axeton
7 phần khối lượng dimethylformamit

Chất nhũ hóa: 0,5 phần khối lượng ankylaryl polyglycol ete

Để tạo ra chế phẩm chứa hợp chất hoạt tính thích hợp, một phần khối lượng hợp chất hoạt tính được trộn với các lượng dung môi và chất nhũ hóa được chỉ định, và chất cô đặc được pha loãng bằng nước chứa chất nhũ hóa đến nồng độ mong muốn. Nếu có yêu cầu bổ sung muối amoni và/hoặc chất thấm vào, trong mỗi trường hợp bổ sung một nồng độ 1000ppm vào dung dịch điều chế.

Các đĩa lá đỗ (*Phaseolus vulgaris*) được gây nhiễm bởi ấu trùng của ruồi đục lá (*Liriomyza trifolii*) được phun chế phẩm chứa hợp chất hoạt tính với nồng độ mong muốn.

Sau khoảng thời gian mong đợi, hiệu quả tính theo % được xác định. 100% nghĩa là tất cả các con ruồi đục lá đều bị tiêu diệt, 0% nghĩa là không có con nào bị tiêu diệt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau đây của các ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả tốt hơn trong lĩnh vực này: xem bảng

Thử nghiệm *Ctenocephalogenua felis*; qua đường miệng (CTECFE)

Dung môi: 1 phần khối lượng dimetyl sulphoxit

Để tạo ra chế phẩm chứa hợp chất hoạt tính thích hợp, 10mg hợp chất hoạt tính được trộn với 0,5ml dimetyl sulphoxit. Phần chất cô đặc được pha loãng đến nồng độ mong muốn bằng máu gia súc đã xitrat hoá.

Khoảng 20 con bọ chét trưởng thành được bỏ đói (*Ctenocephalogenua felis*) được đặt vào buồng có đỉnh và đáy được bịt kín bằng gạc. Một xylanh kim loại được phủ giấy parafilm được đặt lên trên ngăn. Xylanh chứa máu/chế phẩm chứa hợp chất hoạt tính có thể được bọ chét hút qua màng parafilm.

Sau khoảng thời gian mong đợi, tỷ lệ tiêu diệt theo % được xác định. 100% nghĩa là tất cả bọ chét bị tiêu diệt, 0% nghĩa là không có con nào bị tiêu diệt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau đây của các ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả tốt hơn trong lĩnh vực này: xem bảng

Thử nghiệm ruồi nhà *Musca domestica* (MUSCDO)

Dung môi: dimetyl sulphoxit

Để tạo ra chế phẩm chứa hợp chất hoạt tính thích hợp, 10mg hợp chất hoạt tính được trộn với 0,5ml dimetyl sulphoxit và chất cô đặc được pha loãng bằng dung môi đến nồng độ mong muốn.

Các thùng chứa chứa bột biển được xử lý với chế phẩm chứa hợp chất hoạt tính ở nồng độ mong muốn được đưa vào với *Musca domestica* trưởng thành.

Sau khoảng thời gian mong đợi, tỷ lệ tiêu diệt theo % được xác định. 100% nghĩa là tất cả bọ chét đều bị tiêu diệt, 0% nghĩa là không có con nào bị tiêu diệt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau đây của các ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả tốt hơn trong lĩnh vực này: xem bảng

Thử nghiệm *Boophilus microplus* (DIP)

Con vật thử nghiệm: *Boophilus microplus* cái trưởng thành thuộc chủng Parkhurst kháng SP đã được ăn no.

Dung môi: dimetyl sulphoxit

10mg hợp chất hoạt tính được hòa tan trong 0,5ml dimetyl sulphoxit. Để tạo ra chế phẩm phù hợp, trong mỗi trường hợp dung dịch hợp chất hoạt tính được pha loãng bằng nước đến nồng độ mong muốn (theo ppm).

Chế phẩm chứa hợp chất hoạt tính này được hút vào các ống. từ 8 đến 10 con ve được chuyển vào ống khác có lỗ. Ống này được nhúng vào chế phẩm chứa hợp chất hoạt tính, và tất cả các con ve đều bị làm ướt hoàn toàn. Sau khi chất lỏng thoát hết, ve được chuyển sang đĩa lọc trong các đĩa nhựa và được giữ trong phòng được phòng trừ khí hậu.

Hoạt tính được đánh giá sau thời gia mong muốn bằng cách kiểm tra trứng có khả năng sinh sản. Trứng mà có khả năng sinh sản không nhìn thấy được từ bên ngoài được giữ trong các ống thủy tinh trong tủ có khí hậu thích hợp cho đến khi ấu trùng nở. 100% nghĩa là không có con ve nào để được trứng tốt.

Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau đây của các ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả tốt hơn trong lĩnh vực này: xem bảng

Thử nghiệm ve *Boophilus microplus* (tiêm BOOPMI)

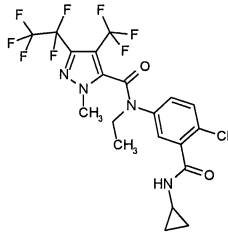
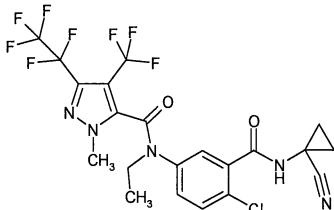
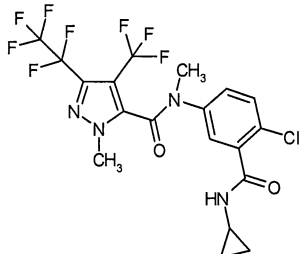
Dung môi: dimetyl sulphoxit

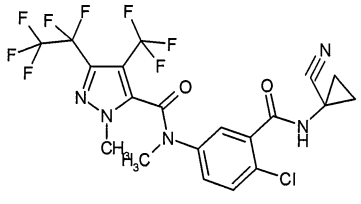
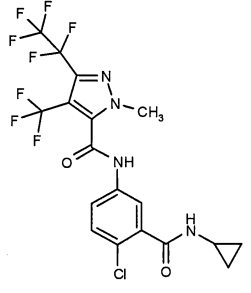
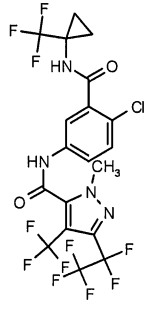
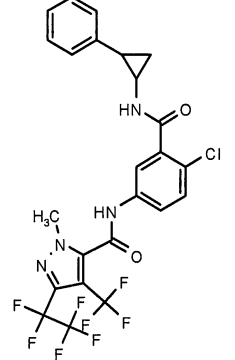
Để tạo ra chế phẩm chứa hợp chất hoạt tính thích hợp, 10mg hợp chất hoạt tính được trộn với 0,5ml dung môi và chất cô đặc được pha loãng bằng dung môi đến nồng độ mong muốn ($\mu\text{g}/\text{con}$).

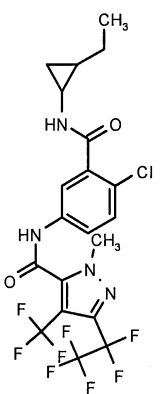
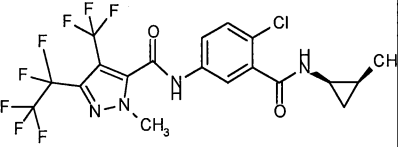
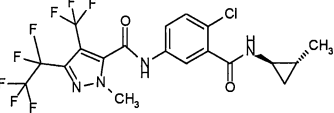
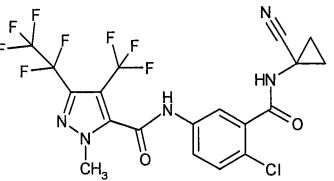
Dung dịch hợp chất hoạt tính được tiêm vào bụng (*Boophilus microplus*) và các con vật được chuyển vào các đĩa và bảo quản trong phòng được phòng trừ khí hậu.

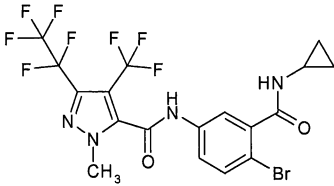
Sau thời gian 7 ngày, xác định hiệu quả theo %. Hoạt tính được đánh giá bằng cách kiểm tra trứng có khả năng sinh sản. 100% nghĩa là không có con ve nào để được trứng tốt.

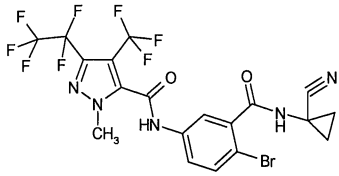
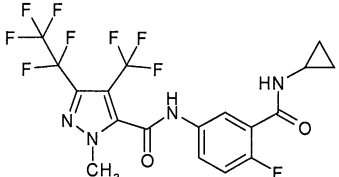
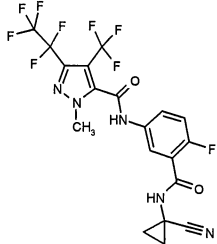
Trong thử nghiệm này, ví dụ, các hợp chất sau đây của các ví dụ điều chế thể hiện hiệu quả tốt hơn trong lĩnh vực này: xem bảng

Chất	Cấu trúc	Loài động vật	Nồng độ	%Hoạt tính	ngày
Ví dụ số Ik-136 đã biết đến từ WO 2010/051926 A2		MYZUPE	20 g/ha	0	6ngày
		TETRUR	20 g/ha	0	6ngày
		PHAECO	0,8 ppm	0	7ngày
		NILALU	20 g/ha	0	7ngày
		CTECFE	0,8 ppm	30	2ngày
		BOOPMI	0,032	0	7ngày
			µg/con vật 20 ppm	0	7ngày
Ví dụ số 6 Theo sáng chế		MYZUPE	20 g/ha	70	6ngày
		TETRUR	20 g/ha	100	6ngày
		PHAECO	0,8 ppm	100	7ngày
		NILALU	20 g/ha	90	7ngày
		CTECFE	0,8 ppm	80	2ngày
		BOOPMI	0,032	70	7ngày
			µg/con vật 20 ppm	100	7ngày
Ví dụ số Ik-132 đã biết đến từ WO 2010/051926 A2		MYZUPE	100 g/ha	0	6ngày
		PHAECO	0,8 ppm	5	7ngày
		PLUTMA	20 ppm	5	7ngày
		SPODFR	20 ppm	50	7ngày
		TETRUR	4 ppm	30	7ngày
		CTECFE	0,8 ppm	30	2ngày
		BOOPMI	0,032	0	7ngày
			µg/con vật 20 ppm	30	7ngày

Chất	Cấu trúc	Loài động vật	Nồng độ	%Hoạt tính	ngày
Ví dụ số 8 Theo sáng chế		MYZUPE	100 g/ha	100	6ngày
		PHAECO	0,8 ppm	100	7ngày
		PLUTMA	20 ppm	100	7ngày
		SPODFR	20 ppm	100	7ngày
		TETRUR	4 ppm	95	7ngày
		CTECFE	0,8 ppm	90	2ngày
		BOOPMI	0,032	100	7ngày
			µg/con vật 20 ppm	100	7ngày
Ví dụ số Ik-1 đã biết đến từ WO 2010/051926 A2		SPODFR	20 ppm	20	7ngày
		HELIAR	20 ppm	45	7ngày
		TETRUR	4 ppm	40	7ngày
		FRANOC	20 g/ha	0	7ngày
		NILALU	500 g/ha	0	7ngày
		CTECFE	0,8 ppm	0	2ngày
Ví dụ số Ik-296 đã biết đến từ WO 2010/051926 A2		MYZUPE	100 g/ha	0	6ngày
		FRANOC	500 g/ha	60	7ngày
		LIRITR	500 g/ha	0	7ngày
		NILALU	500 g/ha	0	7ngày
Ví dụ số Ik-47 đã biết đến từ WO 2010/051926 A2		MYZUPE	500 g/ha	0	6ngày
		PHAECO	20 g/ha	0	7ngày
		PLUTMA	20 ppm	0	7ngày
		SPODFR	20 ppm	0	7ngày
		HELIAR	20 ppm	0	7ngày
		TETRUR	20 ppm	0	7ngày
		FRANOC	20 ppm	30	7ngày
			500 g/ha	0	7ngày

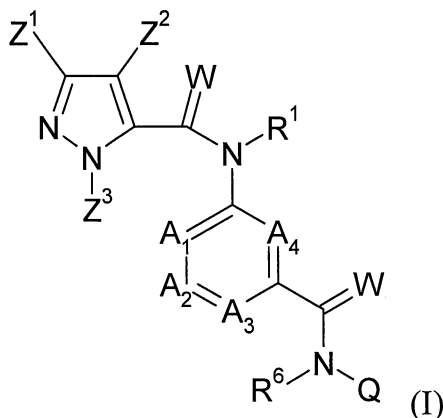
Chất	Cấu trúc	Loài động vật	Nồng độ	%Hoạt tính	ngày
		NILALU	500 g/ha	0	7ngày
		CTECFE	20 ppm	50	2ngày
		MUSCDO	100 ppm	0	2ngày
		BOOPMI	0,8 µg/con vật	50	7ngày
Ví dụ số Ik-286 đã biết đến từ WO 2010/051926 A2		MYZUPE	20 g/ha	0	6ngày
		PHAECO	100 g/ha	0	7ngày
		CTECFE	4 ppm	0	2ngày
		BOOPMI	100 ppm	40	7ngày
			0,16 µg/con vật	20	7ngày
Ví dụ số Ik-279 đã biết đến từ WO 2010/051926 A2		MYZUPE	20 g/ha	0	6ngày
		PHAECO	20 g/ha	0	7ngày
		SPODFR	100 g/ha	50	7ngày
		TETRUR	4 ppm	0	7ngày
Ví dụ số Ik-280 đã biết đến từ WO 2010/051926 A2		PLUTMA	20 ppm	65	7ngày
		PHAECO	4 ppm	0	7ngày
		SPODFR	20 ppm	40	7ngày
		HELIAR	100 ppm	0	7ngày
		NILALU	100 g/ha	0	7ngày
Ví dụ số 10 Theo sáng chế		MYZUPE	500 g/ha	100	6ngày
			100 g/ha	100	6ngày
			20 g/ha	80	6ngày
		PHAECO	100 g/ha	100	7ngày
			20 g/ha	100	7ngày

Chất	Cấu trúc	Loài động vật	Nồng độ	%Hoạt tính	ngày
		SPODFR	4 ppm	100	7ngày
			100 g/ha	100	7ngày
		PLUTMA	20 ppm	100	7ngày
			20 ppm	100	7ngày
		HELIAR	100 ppm	100	7ngày
			20 ppm	100	7ngày
		TETRUR	20 ppm	100	7ngày
			20 ppm	100	7ngày
		FRANOC	4 ppm	100	7ngày
			500 g/ha	100	7ngày
		LIRITR	20 g/ha	90	7ngày
		NILALU	500 g/ha	100	7ngày
			500 g/ha	100	7ngày
		CTECFE	100 g/ha	100	7ngày
			20 ppm	100	2ngày
		MUSCDO	4 ppm	98	2ngày
			0,8 ppm	90	2ngày
		BOOPMI	100 ppm	100	2ngày
			0,8 µg/con vật	100	7ngày
			0,16 µg/con vật	100	7ngày
			100 ppm		
Ví dụ số Ik-175 đã biết đến từ WO 2010/051926 A2		MYZUPE	100 g/ha	0	6ngày
		PHAECO	4 ppm	10	7ngày
		NILALU	500 g/ha	0	7ngày

Chất	Cấu trúc	Loài động vật	Nồng độ	%Hoạt tính	ngày
Ví dụ số 14 Theo sáng chế		MYZUPE PHAECO NILALU	100 g/ha 4 ppm 500 g/ha	100 100 80	6ngày 7ngày 4ngày
Ví dụ số Ik-155 đã biết đến từ WO 2010/051926 A2		MYZUPE TETRUR	100 g/ha 100 g/ha	0 0	6ngày 6ngày
Ví dụ số 14 Theo sáng chế		MYZUPE TETRUR	100 g/ha 100 g/ha	100 100	6ngày 6ngày

YÊU CẦU BẢO HỘ

1. Hợp chất có công thức chung (I):



trong đó:

R^1 là hydro, C_1 - C_6 -alkyl, C_2 - C_6 -alkenyl, C_2 - C_6 -alkynyl, C_3 - C_7 -xycloalkyl, C_1 - C_6 -alkylcarbonyl, C_1 - C_6 -alkoxycarbonyl, xyano- C_1 - C_2 -alkyl, aryl- $(C_1$ - $C_3)$ -alkyl, heteroaryl- $(C_1$ - $C_3)$ -alkyl được thể tùy ý,

nhóm hóa học

A_1 là CR^2 hoặc nitơ,

A_2 là CR^3 hoặc nitơ,

A_3 là CR^4 hoặc nitơ và

A_4 là CR^5 hoặc nitơ,

nhưng không nhiều hơn ba nhóm từ A_1 đến A_4 đồng thời cùng là nitơ;

R^2 , R^3 , R^4 và R^5 độc lập với nhau là hydro, halogen, CN, NO_2 , C_1 - C_6 -alkyl, C_1 - C_6 -haloalkyl, C_3 - C_6 -xycloalkyl, C_3 - C_6 -haloxycloalkyl, C_1 - C_6 -alkoxy, C_1 - C_6 -haloalkoxy, C_1 - C_6 -alkylthio, C_1 - C_6 -haloalkylthio, C_1 - C_6 -alkylsulphinyl, C_1 - C_6 -haloalkylsulphinyl, C_1 - C_6 -alkylsulphonyl, C_1 - C_6 -haloalkylsulphonyl, C_1 - C_6 -alkylamino, N,N -di- C_1 - C_6 -alkylamino, N - C_1 - C_6 -alkylaminocarbonyl, N - C_3 - C_6 -xycloalkylaminocarbonyl hoặc $(C_1$ - C_3 -alkoxy)carbonyl được thể tùy ý;

nếu không có nhóm nào trong các nhóm A_2 và A_3 là nitơ, R^3 và R^4 cùng với nguyên tử cacbon mà chúng gắn vào có thể tạo thành vòng có 5- hoặc 6 cạnh mà

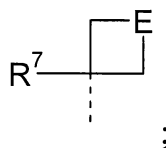
chứa 0, 1 hoặc 2 nguyên tử nitơ và/hoặc 0 hoặc 1 nguyên tử oxy và/hoặc 0 hoặc 1 nguyên tử lưu huỳnh, hoặc

nếu không có nhóm nào trong các nhóm A_1 và A_2 là nitơ, R^2 và R^3 cùng với nguyên tử cacbon mà chúng gắn vào có thể tạo thành vòng có 6 cạnh mà chứa 0, 1 hoặc 2 nguyên tử nitơ;

W là nguyên tử oxy hoặc lưu huỳnh;

R^6 là hydro, C_1 - C_6 -alkyl, aryl- (C_1-C_3) -alkyl, heteroaryl- (C_1-C_3) -alkyl, C_2 - C_6 -alkenyl, C_2 - C_6 -alkynyl, C_3 - C_6 -xycloalkyl, $(C_1-C_3$ -alkyl)- C_3 - C_6 -xycloalkyl và $(C_3$ - C_6 -xycloalkyl)- C_1 - C_3 -alkyl, C_1 - C_6 -alkylcarbonyl, C_1 - C_6 -alkoxycarbonyl được thể tùy ý;

Q là:



E là một liên kết, $-CH_2-$, S, SO, SO_2 , $-S-CH_2-$, $-SO-CH_2-$, $-SO_2-CH_2-$, $-CH_2-S-CH_2-$, $-CH_2-SO-CH_2-$, $-CH_2-SO_2-CH_2-$, $-S-CH_2-CH_2-$, $-SO-CH_2-CH_2-$, $-SO_2-CH_2-CH_2-$, $-NR^6CH_2-$, $-CH_2-NR^6CH_2-$;

R^7 là xyano hoặc $C(=S)NH_2$;

Z^1 là C_1 - C_6 -haloalkyl hoặc C_3 - C_6 -xycloalkyl, C_3 - C_6 -haloxycloalkyl được thể tùy ý, và

Z^2 là nguyên tử halogen, xyano, nitro hoặc C_1 - C_6 haloalkyl, C_1 - C_6 -alkylthio, C_1 - C_6 -haloalkylthio, C_1 - C_6 -alkylsulphinyl, C_1 - C_6 -haloalkylsulphinyl, C_1 - C_6 -alkylsulphonyl, C_1 - C_6 -haloalkylsulphonyl được thể tùy ý, và

Z^3 là hydro hoặc C_1 - C_6 -alkyl, C_1 - C_4 -alkenyl, C_1 - C_4 -alkynyl, C_1 - C_6 -haloalkyl tùy ý được thể.

2. Hợp chất có công thức chung (I) theo điểm 1, trong đó:

R^1 là hydro, metyl, etyl, n-propyl, isopropyl, n-butyl, isobutyl, s-butyl, t-butyl, metoxymetyl, etoxymetyl, propoxymetyl, metylcarbonyl, etylcarbonyl, n-propylcarbonyl, isopropylcarbonyl, s-butylcarbonyl, t-butylcarbonyl, metoxycarbonyl, etoxycarbonyl, n-propoxycarbonyl, isopropoxycarbonyl, s-butoxycarbonyl, t-butoxycarbonyl, xyanometyl, 2-xyanoetyl, benzyl, 4-metoxybenzyl, pyrit-2-ylmetyl, pyrit-3-ylmetyl, pyrit-4-ylmetyl, 4-clopyrit-3-ylmetyl;

nhóm hóa học

A_1 là CR^2 hoặc nitơ,

A_2 là CR^3 hoặc nitơ,

A_3 là CR^4 hoặc nitơ và

A_4 là CR^5 hoặc nitơ,

nhưng không nhiều hơn ba nhóm từ A_1 đến A_4 đồng thời cùng là nitơ;

R^2 và R^5 độc lập với nhau là hydro, metyl, flo hoặc clo và

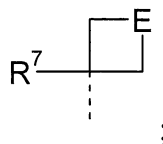
R^3 và R^4 độc lập với nhau là hydro, flo, clo, brom, CN, NO_2 , metyl, etyl, flometyl, diflometyl, triflometyl, 2,2,2-trifloetyl, metoxy, etoxy, n-propoxy, 1-metyletoxy, flometoxy, diflometoxy, clodiflometoxy, dicloflometoxy, triflometoxy, 2,2,2-trifloetoxo, 2-clo-2,2-difloetoxo, pentaflometoxy, metylsulphonyl, metylsulphinyl, triflometylsulphonyl, triflometylsulphinyl; trong đó:

W là nguyên tử oxy,

R^6 là hydro, metyl, etyl, n-propyl, isopropyl, n-butyl, isobutyl, s-butyl, t-butyl, metoxymetyl, etoxymetyl, propoxymetyl, metylcarbonyl, etylcarbonyl, n-propylcarbonyl, isopropylcarbonyl, s-butylcarbonyl, t-butylcarbonyl, metoxycarbonyl, etoxycarbonyl, n-propoxycarbonyl, isopropoxycarbonyl, s-butoxycarbonyl, t-butoxycarbonyl, xyanometyl, 2-

xyanoetyl, benzyl, 4-metoxybenzyl, pyrit-2-ylmetyl, pyrit-3-ylmetyl, pyrit-4-ylmetyl, 4-clopyrit-3-ylmetyl;

Q là:



E là một liên kết hoặc $-\text{CH}_2-$;

R^7 là xyano hoặc $\text{C}(=\text{S})\text{NH}_2$;

Z^1 là diflometyl, triclometyl, clodiflometyl, dicloflometyl, triflo-metyl, bromodiclometyl, clometyl, bromometyl, 1-floetyl, 1-flo-1-metyletyl, 2-floetyl, 2,2-difloetyl, 2,2,2-trifloetyl, 1,2,2,2-tetrafloetyl, 1-clo-1,2,2,2-tetrafloetyl, 2,2,2-tricloetyl, 2-clo-2,2-difloetyl, 1,1-difloetyl, pentafloetyl, pentaflo-t-butyl, heptaflo-n-propyl, heptafloisopropyl, nonaflo-n-butyl, xyclopropyl, 1-cloxypropyl, 1-floxypropyl, 1-bromoxyclopropyl, 1-xyanoxyclopropyl, 1-triflometylxcyclopropyl, xyclobutyl hoặc 2,2-diflo-1-metylxcyclopropyl, và

Z^2 là nguyên tử halogen, xyano, nitro, diflometyl, triclometyl, clodiflometyl, dicloflometyl, triflometyl, bromodiclometyl, clometyl, bromometyl, 1-floetyl, 1-flo-1-metyletyl, 2-floetyl, 2,2-difloetyl, 2,2,2-trifloetyl, 1,2,2,2-tetrafloetyl, 1-clo-1,2,2,2-tetrafloetyl, 2,2,2-tricloetyl, 2-clo-2,2-difloetyl, 1,1-difloetyl, pentafloetyl, pentaflo-t-butyl, heptaflo-n-propyl, heptafloisopropyl, nonaflo-n-butyl, metylthio, metylsulphinyl, metylsulphonyl, etylthio, etylsulphinyl, etylsulphonyl, triflometylthio, triflometylsulphinyl, triflometylsulphonyl, và

Z^3 là hydro, metyl, etyl, n-propyl, isopropyl, n-butyl, isobutyl, s-butyl, t-butyl, etenyl, 1-propenyl, 2-propenyl, etynyl, 1-propynyl, 1-butylnyl, diflometyl, triclometyl, clodiflometyl, dicloflometyl, triflometyl, clometyl, bromometyl, 1-floetyl, 1-flo-1-metyletyl, 2-floetyl, 2,2-difloetyl, 2,2,2-trifloetyl.

3. Hợp chất có công thức chung (I) theo điểm 1 hoặc 2, trong đó:

Z^1 là triflometyl, 1-cloxypropyl, 1-floxypropyl hoặc pentafluorometyl,

Z^2 là triflometyl, nitro, metylthio, metylsulphinyl, metylsulphonyl, flo, clo, brom hoặc iot,

Z^3 là metyl, etyl, n-propyl hoặc hydro,

R^1 là hydro, metyl, etyl, n-propyl, isopropyl, n-butyl, isobutyl, s-butyl, t-butyl, metoxymetyl, etoxymetyl, propoxymetyl, metylcarbonyl, etylcarbonyl, n-propylcarbonyl, isopropylcarbonyl, s-butylcarbonyl, t-butylcarbonyl, metoxycarbonyl, etoxycarbonyl, n-propoxycarbonyl, isopropoxycarbonyl, s-butoxycarbonyl, t-butoxycarbonyl, xyanometyl, 2-xyanoetyl, benzyl, 4-metoxybenzyl, pyrit-2-ylmetyl, pyrit-3-ylmetyl, pyrit-4-ylmetyl, 4-clopyrit-3-ylmetyl,

A^1 , A^2 và A^4 là CH,

A_3 là CR^4 và

R^4 là flo, clo, brom hoặc iot,

R^6 là hydro, metyl, etyl, n-propyl, isopropyl, n-butyl, isobutyl, s-butyl, t-butyl,

W là nguyên tử oxy và

Q là 1-xyanoxycyclopropyl.

4. Hợp chất có công thức chung (I) theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 3, trong đó:

Z^1 là triflometyl, 1-cloxypropyl, 1-floxypropyl hoặc pentafluorometyl,

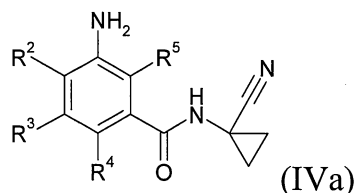
Z^2 là triflometyl, clo hoặc

Z^3 là metyl,

R^1 là hydro, metyl, etyl,

A^1 , A^2 và A^4 là CH,
 A_3 là CR^4 và
 R^4 là clo,
 R^6 là hydro, metyl, etyl,
 W là nguyên tử oxy và
 Q là 1-xyanoxycyclopropyl.

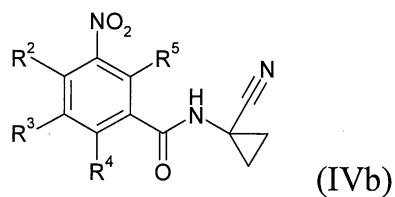
5. Dược phẩm chứa ít nhất một hợp chất theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 4.
6. Quy trình điều chế chế phẩm bảo vệ mùa màng chứa hợp chất có công thức chung (I) theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 4 và chất độn và/hoặc chất hoạt động bề mặt thông thường.
7. Phương pháp phòng trừ các loài gây hại trên cây trồng hoặc hạt, khác biệt ở chỗ, hợp chất có công thức chung (I) theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 4 được cho tác động đến các loài gây hại và/hoặc môi trường sống của chúng.
8. Hợp chất có công thức chung (IVa):



trong đó:

R^2 , R^3 , R^4 và R^5 độc lập với nhau là hydro, halogen, xyano, nitro, tùy ý được thế C_1 - C_6 -alkyl, C_1 - C_6 -haloalkyl, C_3 - C_6 -xycloalkyl, C_3 - C_6 -haloxycloalkyl, C_1 - C_6 -alkoxy, C_1 - C_6 -haloalkoxy, C_1 - C_6 -alkylthio, C_1 - C_6 -haloalkylthio, C_1 - C_6 -alkylsulphinyl, C_1 - C_6 -haloalkylsulphinyl, C_1 - C_6 -alkylsulphonyl, C_1 - C_6 -haloalkylsulphonyl, C_1 - C_6 -alkylamino, N,N -di- C_1 - C_6 -alkylamino, N - C_1 - C_6 -alkylaminocarbonyl, N - C_3 - C_6 -xycloalkylaminocarbonyl hoặc (C_1 - C_3 -alkoxy)carbonyl.

9. Hợp chất có công thức chung (IVb):



trong đó:

R^2 , R^3 , R^4 và R^5 độc lập với nhau là hydro, halogen, xyano, nitro, tùy ý được thế C_1 - C_6 -alkyl, C_1 - C_6 -haloalkyl, C_3 - C_6 -xycloalkyl, C_3 - C_6 -haloxycloalkyl, C_1 - C_6 -alkoxy, C_1 - C_6 -haloalkoxy, C_1 - C_6 -alkylthio, C_1 - C_6 -haloalkylthio, C_1 - C_6 -alkylsulphinyl, C_1 - C_6 -haloalkylsulphinyl, C_1 - C_6 -alkylsulphonyl, C_1 - C_6 -haloalkylsulphonyl, C_1 - C_6 -alkylamino, N,N -di- C_1 - C_6 -alkylamino, N - C_1 - C_6 -alkylaminocarbonyl, N - C_3 - C_6 -xycloalkylaminocarbonyl hoặc (C_1 - C_3 -alkoxy)carbonyl.