



(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

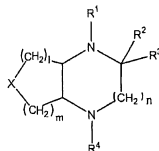
(11) 
1-0022230

(51)⁷ **C07D 403/04**, 409/04, 241/38, 243/10, (13) **B**
401/04, 403/10, 405/04, 405/10, 409/10,
413/10, 417/04, 417/10, 471/04, 491/04,
495/04

(21)	1-2013-00752	(22)	12.09.2011		
(86)	PCT/JP2011/071174	12.09.2011	(87)	WO2012/036253A1	22.03.2012
(30)	2010-204747	13.09.2010	JP		
(45)	25.11.2019	380	(43)	25.07.2013	304
(73)	OTSUKA PHARMACEUTICAL CO., LTD. (JP) 2-9, Kanda-Tsukasa-machi, Chiyoda-ku, Tokyo 101-8535, Japan				
(72)	ITO, Nobuaki (JP), SASAKI, Hirofumi (JP), TAI, Kuninori (JP), SHINOHARA, Tomoichi (JP)				
(74)	Công ty TNHH một thành viên Sở hữu trí tuệ VCCI (VCCI-IP CO.,LTD)				

(54) **HỢP CHẤT DỊ VÒNG ĐỂ ĐIỀU TRỊ HOẶC PHÒNG NGỪA CÁC RỐI LOẠN GÂY RA BỞI SỰ GIẢM DẪN TRUYỀN THẦN KINH ĐỐI VỚI SEROTONIN, NOREPINEPHRIN HOẶC DOPAMIN, QUY TRÌNH SẢN XUẤT VÀ DƯỢC PHẨM CHỨA HỢP CHẤT NÀY**

(57) **Sáng chế đề cập đến hợp chất dị vòng có công thức chung (1) hoặc muối của hợp chất này:**



(1)

trong đó m, l, và n lần lượt là số nguyên là 1 hoặc 2; X là -O- hoặc -CH₂-;
R¹ là hydro, nhóm alkyl thấp, nhóm hydroxy-alkyl thấp, nhóm bảo vệ, hoặc nhóm tri-alkylsilyloxy thấp-alkyl thấp;
R² và R³ là các gốc giống nhau hoặc khác nhau, mỗi gốc độc lập là hydro hoặc nhóm alkyl thấp; hoặc R² và R³ được liên kết để tạo ra nhóm xyclo-C3-C8 alkyl;
và
R⁴ là nhóm thơm hoặc nhóm dị vòng, trong đó:
nhóm thơm hoặc nhóm dị vòng có thể có một hoặc nhiều phân tử thế tùy ý. Sáng chế còn đề cập đến quy trình sản xuất và dược phẩm chứa hợp chất dị vòng này.

Lĩnh vực kỹ thuật được đề cập

Sáng chế đề cập đến hợp chất dị vòng, quy trình sản xuất và dược phẩm chứa hợp chất này.

Tình trạng kỹ thuật của sáng chế

Ba loại monoamin đã biết đó là serotonin, norepinephrin, và dopamin hoạt động dưới dạng các chất dẫn truyền xung thần kinh in vivo. Do đó, các thuốc có tác dụng ức chế sự tái hấp thu của các monoamin này đã được sử dụng rộng rãi làm các thuốc điều trị các bệnh có liên quan đến hệ thần kinh trung ương hoặc ngoại biên.

Hầu hết các thuốc được sử dụng trước đây trong điều trị trầm cảm ức chế một cách chọn lọc sự tái hấp thu norepinephrin hoặc serotonin. Ví dụ về các thuốc này bao gồm imipramin (thuốc chống trầm cảm thế hệ thứ nhất), maprotiline (thuốc chống trầm cảm thế hệ thứ hai), các thuốc ức chế tái hấp thu serotonin chọn lọc (SSRIs, các thuốc chống trầm cảm thế hệ thứ ba) mà điển hình là floxetin, và các thuốc ức chế tái hấp thu serotonin và/hoặc norepinephrin (SNRIs, các thuốc chống trầm cảm thế hệ thứ tư) mà điển hình là venlafaxin (S. Miura, Japanese Journal of Clinical Psychopharmacology, 2000, 3: 311-318).

Tuy nhiên, tất cả các thuốc này đòi hỏi một thời gian dài tới 3 tuần lễ hoặc lâu hơn để thực hiện các tác dụng điều trị của chúng, và ngoài ra, các thuốc này không thực hiện được các tác dụng đầy đủ trên xấp xỉ 30% số bệnh nhân bị trầm cảm (Phil Skolnick, European Journal of Pharmacology, 1999, 375: 31-40).

WO 2010/141540 là tài liệu được công bố sau mà mô tả các bis-pyridylpyridon là chất đối kháng với thụ thể hormon tập trung melanin 1 (MCHR1), các dược phẩm chứa chúng, các quy trình điều chế và sử dụng chúng trong liệu pháp điều trị bệnh béo phì và tiểu đường.

WO 2008/023239 đề cập đến các dẫn xuất pyrimidon I có hoạt tính làm các chất ức chế GSK-3, các dược phẩm chứa các dẫn xuất này và sử dụng các dẫn xuất này để điều trị một số chứng rối loạn.

WO 2008/019372 mô tả các hợp chất 2-aminobenzoxazol có công thức cụ thể, mà hữu ích làm các chất ức chế 5-HT₃ trong việc điều trị CINV, IBS-D và các bệnh và tình trạng khác.

WO 2004/056784 đề cập đến các carboxamit được thể có công thức nhất định, mà có các đặc tính dược lý hữu ích, cụ thể là tác dụng chống huyết khối và tác dụng ức chế nhân tố Xa.

WO 2000/67735 (A2) đề cập đến các hợp chất quinazoline có công thức (I), mà hữu ích trong việc sản xuất thuốc để điều trị rối loạn chức năng sinh dục ở nam và nữ.

EP 726 899 (A1) mô tả các dẫn xuất carboxamit pyrazin, các phương pháp điều chế và sử dụng các dẫn xuất này trong thuốc.

SU 390091 đề cập đến các hợp chất N-aryl decahydroquinoxalin.

Giardinà et al. (J. Med, Chem., tập 52, số 15, 2009, trang 4951-4954) mô tả việc điều chế chất đối kháng alpha 1-adrenoceptor liên quan đến doxazosin và kiểm tra hoạt tính chống ung thư tuyến tiền liệt của các hợp chất này.

Sagratini et al. (Bioorganic & Medicinal Chemistry, Pergamon, tập 15, số 6, trang 2334-2345) kiểm tra hoạt tính đối kháng alpha 1-adrenoceptor của các dẫn xuất và chất đồng phân furan của (+)-xyclazosin.

Giardinà et al. (Il Farmaco, tập 58, 2003, trang 477-487) mô tả việc tìm kiếm các chất tương tự xyclazosin như chất đối kháng alpha 1b-adrenoceptor.

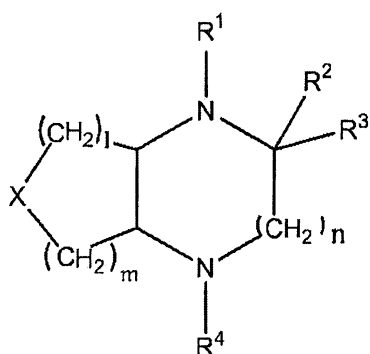
Bản chất kỹ thuật của sáng chế

Mục đích của sáng chế là đề xuất hợp chất dùng làm thuốc có phổ điều trị rộng và có thể có các tác dụng điều trị đầy đủ trong một thời gian ngắn so với các thuốc chống trầm cảm đã biết trong lĩnh vực.

Để đạt được mục đích nêu trên, các tác giả sáng chế đã tiến hành thực hiện các nghiên cứu sâu rộng và kết quả là đã phát hiện ra rằng, hợp chất dị vòng có công thức chung (1) thể hiện dưới đây có thể được sử dụng trong sản xuất thuốc mong muốn. Sáng chế được tạo ra dựa trên phát hiện này.

Sáng chế đề xuất các đối tượng nêu trong các mục từ 1 đến 11 sau đây. Cụ thể hơn, sáng chế đề xuất:

1. Hợp chất dị vòng có công thức (1) hoặc muối của hợp chất này:



(1)

trong đó $m = 2$, $l = 1$, và $n = 1$; X là $-\text{CH}_2-$;

R^1 là hydro, nhóm C1-C6 alkyl, nhóm hydroxy-C1-C6 alkyl, nhóm bảo vệ được chọn từ các nhóm C1-C6 alkanoyl được thế hoặc không được thế, phthaloyl, C1-C6 alkoxyacarbonyl, aralkyloxyacarbonyl được thế hoặc không được thế, 9-florenylmethoxyacarbonyl, nitrophenylsulfenyl, aralkyl và C1-C6 alkylsilyl, hoặc nhóm tri-C1-C6 alkylsilyloxy-C1-C6 alkyl;

R^2 và R^3 là các gốc giống nhau hoặc khác nhau, mỗi gốc độc lập là hydro hoặc nhóm C1-C6 alkyl; hoặc R^2 và R^3 được liên kết để tạo ra nhóm xyclo-C3-C8 alkyl; và

R^4 là nhóm bất kỳ trong số:

(1) nhóm phenyl,

(2) nhóm indolyl,

- (3) nhóm benzothienyl,
- (4) nhóm naphthyl,
- (5) nhóm benzofuryl,
- (6) nhóm quinolyl,
- (7) nhóm isoquinolyl,
- (8) nhóm pyridyl,
- (9) nhóm thienyl,
- (10) nhóm dihydrobenzoxazinyll,
- (11) nhóm dihydrobenzodioxinyll,
- (12) nhóm dihydroquinolyl,
- (13) nhóm cromanyl,
- (14) nhóm quinoxalinyll,
- (15) nhóm dihydroindenyl,
- (16) nhóm dihydrobenzofuryl,
- (17) nhóm benzodioxolyl,
- (18) nhóm indazolyl,
- (19) nhóm benzothiazolyl,
- (20) nhóm indolinyll,
- (21) nhóm thienopyridyl,
- (22) nhóm tetrahydrobenzazepinyll,
- (23) nhóm tetrahydrobenzodiazepinyll,
- (24) nhóm dihydrobenzodioxepinyll,
- (25) nhóm florenyl,
- (26) nhóm pyridazinyll,

- (27) nhóm tetrahydroquinolyl,
- (28) nhóm carbazolyl,
- (29) nhóm phenantryl,
- (30) nhóm dihydroaxenaphtylenyl,
- (31) nhóm pyrolopyridyl,
- (32) nhóm antryl,
- (33) nhóm benzodioxinyl,
- (34) nhóm pyrrolidinyl,
- (35) nhóm pyrazolyl,
- (36) nhóm oxadiazolyl,
- (37) nhóm pyrimidinyl,
- (38) nhóm tetrahydronaphtyl,
- (39) nhóm dihydroquinazolinyl,
- (40) nhóm benzoxazolyl,
- (41) nhóm thiazolyl,
- (42) nhóm quinazolinyl,
- (43) nhóm phtalazinyl,
- (44) nhóm pyrazinyl, và
- (45) nhóm cromenyl, trong đó:

các nhóm thơm hoặc dị vòng này có thể có một hoặc nhiều phần tử thế được chọn từ:

- (1-1) nguyên tử halogen,
- (1-2) nhóm C1-C6 alkyl,
- (1-3) nhóm C1-C6 alkanoyl,

- (1-4) nhóm halogen-C1-C6 alkyl được thế,
- (1-5) nhóm halogen-C1-C6 alkoxy được thế,
- (1-6) nhóm xyano,
- (1-7) nhóm C1-C6 alkoxy,
- (1-8) nhóm C1-C6 alkylthio,
- (1-9) nhóm imidazolyl,
- (1-10) nhóm tri-C1-C6 alkylsilyl,
- (1-11) nhóm oxadiazolyl mà nhóm này có thể có (các) nhóm C1-C6 alkyl,
- (1-12) nhóm pyrrolidinyl mà có thể có (các) nhóm oxo,
- (1-13) nhóm phenyl mà có thể có (các) nhóm C1-C6 alkoxy,
- (1-14) nhóm C1-C6 alkylamino-C1-C6 alkyl,
- (1-15) nhóm oxo,
- (1-16) nhóm pyrazolyl mà có thể có (các) nhóm C1-C6 alkyl,
- (1-17) nhóm thienyl,
- (1-18) nhóm furyl,
- (1-19) nhóm thiazolyl mà có thể có (các) nhóm C1-C6 alkyl,
- (1-20) nhóm C1-C6 alkylamino,
- (1-21) nhóm pyrimidyl mà có thể có (các) nhóm C1-C6 alkyl,
- (1-22) nhóm phenyl-C2-C6 alkenyl,
- (1-23) nhóm phenoxy mà có thể có (các) nguyên tử halogen,
- (1-24) nhóm phenoxy-C1-C6 alkyl,
- (1-25) nhóm pyrrolidinyl-C1-C6 alkoxy,
- (1-26) nhóm C1-C6 alkylsulfamoyl,
- (1-27) nhóm pyridazinylloxy mà có thể có (các) nhóm C1-C6 alkyl,

- (1-28) nhóm phenyl-C1-C6 alkyl,
- (1-29) nhóm C1-C6 alkylamino-C1-C6 alkoxy,
- (1-30) nhóm imidazolyl-C1-C6 alkyl,
- (1-31) nhóm phenyl-C1-C6 alkoxy,
- (1-32) nhóm hydroxy,
- (1-33) nhóm C1-C6 alkoxycarbonyl,
- (1-34) nhóm hydroxy-C1-C6 alkyl,
- (1-35) nhóm oxazolyl,
- (1-36) nhóm piperidyl,
- (1-37) nhóm pyrrolyl,
- (1-38) nhóm morpholiny-C1-C6 alkyl,
- (1-39) nhóm piperaziny-C1-C6 alkyl mà có thể có (các) nhóm C1-C6 alkyl,
- (1-40) nhóm piperidyl-C1-C6 alkyl,
- (1-41) nhóm pyrrolidiny-C1-C6 alkyl,
- (1-42) nhóm morpholiny, và
- (1-43) nhóm piperaziny mà có thể có (các) nhóm C1-C6 alkyl.

2. Hợp chất có công thức (1) hoặc muối được dụng của nó theo mục 1, trong đó:

R^4 là nhóm bất kỳ trong số:

- (1) nhóm phenyl,
- (2) nhóm indolyl,
- (3) nhóm benzothienyl,
- (4) nhóm naphthyl,
- (5) nhóm benzofuryl,
- (6) nhóm quinolyl,

- (7) nhóm isoquinolyl,
- (8) nhóm pyridyl,
- (9) nhóm thienyl,
- (10) nhóm dihydrobenzoxaziny,
- (11) nhóm dihydrobenzodioxiny,
- (12) nhóm dihydroquinolyl,
- (13) nhóm chromanyl,
- (14) nhóm quinoxaliny,
- (15) nhóm dihydroindenyl,
- (16) nhóm dihydrobenzofuryl,
- (17) nhóm benzodioxolyl,
- (18) nhóm indazolyl,
- (19) nhóm benzothiazolyl,
- (20) nhóm indoliny,
- (21) nhóm thienopyridyl,
- (22) nhóm tetrahydrobenzazepiny,
- (23) nhóm tetrahydrobenzodiazepiny,
- (24) nhóm dihydrobenzodioxepiny,
- (25) nhóm florenyl,
- (26) nhóm pyridaziny,
- (27) nhóm tetrahydroquinolyl,
- (28) nhóm carbazolyl,
- (29) nhóm phenanthryl,
- (30) nhóm dihydroacenaphtylenyl,

- (31) nhóm pyrolopyridyl,
- (32) nhóm ananthryl,
- (33) nhóm benzodioxinyl,
- (34) nhóm pyrrolidinyl,
- (35) nhóm pyrazolyl,
- (36) nhóm oxadiazolyl,
- (37) nhóm pyrimidinyl,
- (38) nhóm tetrahydronaphtyl,
- (39) nhóm dihydroquinazolinyl,
- (40) nhóm benzoxazolyl,
- (41) nhóm thiazolyl,
- (42) nhóm quinazolinyl,
- (43) nhóm phtalazinyl,
- (44) nhóm pyrazinyl, và
- (45) nhóm chromenyl, trong đó:

các nhóm thơm hoặc dị vòng này có thể có từ 1 đến 4 phần tử thế được chọn từ:

- (1-1) nguyên tử halogen,
- (1-2) nhóm C1-C6 alkyl,
- (1-3) nhóm C1-C6 alkanoyl,
- (1-4) nhóm halogen-được thế C1-C6 alkyl,
- (1-5) nhóm halogen-được thế C1-C6 alkoxy,
- (1-6) nhóm xyano,
- (1-7) nhóm C1-C6 alkoxy,
- (1-8) nhóm C1-C6 alkylthio,

- (1-9) nhóm imidazolyl,
- (1-10) nhóm tri-C1-C6alkylsilyl,
- (1-11) nhóm oxadiazolyl mà có thể có 1 nhóm C1-C6 alkyl,
- (1-12) nhóm pyrrolidinyl mà có thể có 1 nhóm oxo,
- (1-13) nhóm phenyl mà có thể có 1 nhóm C1-C6 alkoxy,
- (1-14) nhóm C1-C6 alkylamino-C1-C6 alkyl,
- (1-15) nhóm oxo,
- (1-16) nhóm pyrazolyl mà có thể có 1 nhóm C1-C6 alkyl,
- (1-17) nhóm thienyl,
- (1-18) nhóm furyl,
- (1-19) nhóm thiazolyl mà có thể có 1 nhóm C1-C6 alkyl,
- (1-20) nhóm C1-C6 alkylamino,
- (1-21) nhóm pyrimidyl mà có thể có 1 nhóm C1-C6 alkyl,
- (1-22) nhóm phenyl-C2-C6 alkenyl,
- (1-23) nhóm phenoxy mà có thể có 1 nguyên tử halogen,
- (1-24) nhóm phenoxy-C1-C6 alkyl,
- (1-25) nhóm pyrrolidinyl-C1-C6 alkoxy,
- (1-26) nhóm C1-C6 alkylsulfamoyl,
- (1-27) nhóm pyridazinyloxy mà có thể có 1 nhóm C1-C6 alkyl,
- (1-28) nhóm phenyl-C1-C6 alkyl,
- (1-29) nhóm C1-C6 alkylamino-C1-C6 alkoxy,
- (1-30) nhóm imidazolyl-C1-C6 alkyl,
- (1-31) nhóm phenyl-C1-C6 alkoxy,
- (1-32) nhóm hydroxy,

- (1-33) nhóm C1-C6 alkoxyacetyl,
- (1-34) nhóm hydroxy-C1-C6 alkyl,
- (1-35) nhóm oxazolyl,
- (1-36) nhóm piperidyl,
- (1-37) nhóm pyrrolyl,
- (1-38) nhóm morpholiny-C1-C6 alkyl,
- (1-39) nhóm piperazinyl-C1-C6 alkyl mà có thể có 1 nhóm C1-C6 alkyl,
- (1-40) nhóm piperidyl-C1-C6 alkyl,
- (1-41) nhóm pyrrolidinyl-C1-C6 alkyl,
- (1-42) nhóm morpholiny, và
- (1-43) nhóm piperazinyl mà có thể có 1 nhóm C1-C6 alkyl.

3. Hợp chất có công thức (1) hoặc muối được dụng của nó theo mục 2, trong đó:
 R^1 là hydro, nhóm C1-C6 alkyl, nhóm hydroxy-C1-C6 alkyl, nhóm benzyl, hoặc
 nhóm tri-C1-C6 alkylsilyloxy-C1-C6 alkyl; và

R^4 là nhóm bất kỳ trong số:

- (1) nhóm phenyl,
- (2) nhóm indolyl,
- (4) nhóm naphthyl,
- (5) nhóm benzofuryl, và
- (31) nhóm pyrrolopyridyl, trong đó:

các nhóm thơm hoặc dị vòng này có thể có từ 1 đến 4 phần tử thể được chọn từ:

- (1-1) nguyên tử halogen,
- (1-2) nhóm C1-C6 alkyl,
- (1-3) nhóm C1-C6 alkanoyl,

- (1-4) nhóm halogen-C1-C6 alkyl được thế,
- (1-5) nhóm halogen-C1-C6 alkoxy được thế,
- (1-6) nhóm xyano,
- (1-7) nhóm C1-C6 alkoxy,
- (1-8) nhóm C1-C6 alkylthio,
- (1-9) nhóm imidazolyl,
- (1-10) nhóm tri-C1-C6 alkylsilyl,
- (1-11) nhóm oxadiazolyl mà có thể có 1 nhóm C1-C6 alkyl,
- (1-12) nhóm pyrrolidinyl mà có thể có 1 nhóm oxo,
- (1-13) nhóm phenyl mà có thể có 1 nhóm C1-C6 alkoxy,
- (1-14) nhóm C1-C6 alkylamino-C1-C6 alkyl,
- (1-15) nhóm oxo,
- (1-16) nhóm pyrazolyl mà có thể có 1 nhóm C1-C6 alkyl,
- (1-17) nhóm thienyl,
- (1-18) nhóm furyl,
- (1-19) nhóm thiazolyl mà có thể có 1 nhóm C1-C6 alkyl,
- (1-20) nhóm C1-C6 alkylamino,
- (1-21) nhóm pyrimidyl mà có thể có 1 nhóm C1-C6 alkyl,
- (1-22) nhóm phenyl-C1-C6 alkenyl,
- (1-23) nhóm phenoxy mà có thể có 1 nguyên tử halogen,
- (1-24) nhóm phenoxy-C1-C6 alkyl,
- (1-25) nhóm pyrrolidinyl-C1-C6 alkoxy,
- (1-26) nhóm C1-C6 alkylsulfamoyl,
- (1-27) nhóm pyridazinyloxy mà có thể có 1 nhóm C1-C6 alkyl,

- (1-28) nhóm phenyl-C1-C6 alkyl,
- (1-29) nhóm C1-C6 alkylamino-C1-C6 alkoxy,
- (1-30) nhóm imidazolyl-C1-C6 alkyl,
- (1-31) nhóm phenyl-C1-C6 alkoxy,
- (1-32) nhóm hydroxy,
- (1-34) nhóm hydroxy-C1-C6 alkyl,
- (1-35) nhóm oxazolyl,
- (1-36) nhóm piperidyl,
- (1-37) nhóm pyrolyl,
- (1-38) nhóm morpholiny-C1-C6 alkyl,
- (1-39) nhóm piperaziny-C1-C6 alkyl mà có thể có (các) nhóm C1-C6 alkyl,
- (1-40) nhóm piperidyl-C1-C6 alkyl,
- (1-41) nhóm pyrrolidiny-C1-C6 alkyl,
- (1-42) nhóm morpholiny, và
- (1-43) nhóm piperaziny mà có thể có 1 nhóm C1-C6 alkyl.

4. Hợp chất có công thức (1) hoặc muối được dụng của nó theo mục 3, trong đó:

R^1 là hydro;

R^2 và R^3 là giống hoặc khác nhau, mỗi gốc độc lập là nhóm C1-C6 alkyl; hoặc

R^2 và R^3 được liên kết để tạo ra nhóm xyclo-C3-C8 alkyl; và

R^4 là nhóm bất kỳ trong số:

- (1) nhóm phenyl,
- (2) nhóm indolyl,
- (4) nhóm naphthyl,
- (5) nhóm benzofuryl, và

(31) nhóm pyrolopyridyl, trong đó:

các nhóm thơm hoặc dị vòng này có thể có từ 1 đến 2 phần tử thể được chọn từ:

(1-1) nguyên tử halogen,

(1-2) nhóm C1-C6 alkyl,

(1-5) nhóm halogen-C1-C6 alkoxy được thế,

(1-6) nhóm xyano, và

(1-7) nhóm C1-C6 alkoxy.

5. Hợp chất dị vòng có công thức chung (1) hoặc muối của nó theo mục 4, trong đó hợp chất này được chọn từ:

(4aS,8aR)-1-(4-clophenyl)-3,3-dimetyldecahydroquinoxalin,

2-clo-4-((4aS,8aS)-3,3-dimetyloctahydroquinoxalin-1(2H)-yl)benzonitril,

(4aS,8aR)-1-(3-clo-4-flophenyl)-3,3-dimetyldecahydroquinoxalin,

(4aS,8aR)-1-(7-flobenzofuran-4-yl)-3,3-dimetyldecahydroquinoxalin,

5-((4aR,8aS)-3,3-dimetyloctahydroquinoxalin-1(2H)-yl)-1-metyl-1H-indol-2-cacbonitril,

(4a'R,8a'S)-4'-(7-metoxibenzofuran-4-yl)octahydro-1'H-spiro[xyclobutan-1,2'-quinoxalin],

(4aS,8aR)-1-(6,7-diflobenzofuran-4-yl)-3,3-dimetyldecahydroquinoxalin,

5-((4aS,8aS)-3,3-dimetyloctahydroquinoxalin-1(2H)-yl)-1H-indol-2-cacbonitril,

6-((4aS,8aS)-3,3-dimetyloctahydroquinoxalin-1(2H)-yl)-2-naphtonitril,

(4aS,8aS)-3,3-dimetyl-1-(1H-pyrol[2,3-b]pyridin-4-yl)decahydroquinoxalin,

(4aS,8aS)-1-(4-(diflometoxy)-3-flophenyl)-3,3-dimetyldecahydroquinoxalin,

(4aS,8aS)-1-(4-(diflometoxy)phenyl)-3,3-dimetyldecahydroquinoxalin, và

(4aR,8aR)-1-(4-(diflometoxy)-3-flophenyl)-3,3-dimetyldecahydroquinoxalin.

6. Dược phẩm chứa hợp chất có công thức (1) hoặc muối dược dụng của hợp

chất này theo mục 1 làm hoạt chất và chất mang được dụng.

7. Hợp chất có công thức (1) hoặc muối được dụng của hợp chất này theo mục 1, để sử dụng trong việc điều trị các rối loạn được chọn từ nhóm gồm bệnh trầm cảm, tình trạng trầm cảm gây ra bởi sự rối loạn điều chỉnh, trạng thái lo âu gây ra bởi sự rối loạn điều chỉnh, trạng thái lo âu gây ra bởi các bệnh khác, rối loạn lo âu lan tỏa, ám ảnh sợ hãi, rối loạn ám ảnh cưỡng chế, rối loạn hoảng sợ, rối loạn stress sau sang chấn, rối loạn stress cấp tính, rối loạn bệnh tương, rối loạn quên phân ly, rối loạn nhân cách tránh né, rối loạn ám ảnh cơ thể, rối loạn ăn uống, béo phì, phụ thuộc hóa chất, đau, đau cơ xơ hóa, bệnh Alzheimer, thiếu trí nhớ, bệnh Parkinson, hội chứng chân bứt rứt không nghỉ, rối loạn nội tiết, co thắt mạch máu, mất điều hòa tiểu não, rối loạn dạ dày - ruột, hội chứng âm tính của tâm thần phân liệt, hội chứng tiền kinh nguyệt, đái dầm do stress, rối loạn Tourette, rối loạn tăng động giảm chú ý (ADHD), tự kỷ, hội chứng Asperger, rối loạn kiểm soát xung lực, chứng giật râu tóc, xung động ăn cắp, rối loạn nghiện cờ bạc, đau đầu từng chuỗi, nhức nửa đầu, đau nửa đầu kịch phát kinh niên, hội chứng mệt mỏi kinh niên, xuất tinh sớm, bất lực nam giới, cơn ngủ kịch phát, cơn ngủ lịm tiên phát, chứng mất ngủ trương lực, hội chứng ngưng thở khi ngủ và đau đầu.

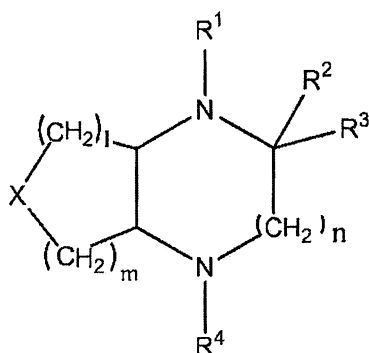
8. Hợp chất để sử dụng theo mục 7, trong đó bệnh trầm cảm được chọn từ nhóm gồm rối loạn trầm cảm nặng; rối loạn lưỡng cực loại I; rối loạn lưỡng cực loại II; trạng thái hỗn tạp; rối loạn khí sắc; chu kỳ thay đổi trạng thái nhanh; trầm cảm không điển hình; rối loạn cảm xúc theo mùa; trầm cảm sau sinh nở; chứng u sầu nhẹ; rối loạn trầm cảm ngắn hồi quy; trầm cảm kháng thuốc; trầm cảm kinh niên; trầm cảm kép; rối loạn tính khí do rượu; rối loạn hỗn hợp lo âu-trầm cảm; trầm cảm gây ra bởi các bệnh thực thể khác như hội chứng Cushing, giảm năng tuyến giáp, tăng năng tuyến cận giáp, bệnh Addison, hội chứng vô kinh tiết sữa, bệnh Parkinson, bệnh Alzheimer, sa sút trí tuệ do mạch máu não, nhồi máu não, xuất huyết não, xuất huyết dưới màng nhện, đái tháo đường, nhiễm trùng do virus, bệnh đa xơ cứng, hội chứng mệt mỏi kinh niên, bệnh mạch vành, đau, ung thư, v.v.; trầm cảm tiền lão suy; trầm cảm lão suy; trầm cảm ở trẻ em và vị thành

niên; trầm cảm gây ra bởi các thuốc như interferon, v.v..

9. Hợp chất để sử dụng theo mục 7, trong đó trạng thái lo âu gây ra bởi các bệnh khác nhau được chọn từ nhóm gồm trạng thái lo âu gây ra bởi chấn thương đầu, nhiễm trùng não, tổn thương tai trong, suy tim, loạn nhịp tim, tăng năng tuyến thượng thận, tăng năng tuyến giáp, hen và bệnh phổi tắc nghẽn mãn tính.

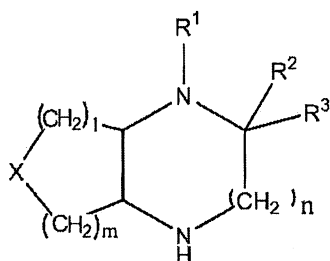
10. Hợp chất để sử dụng theo mục 7, trong đó chứng đau được chọn từ nhóm gồm đau kinh niên, đau do căn nguyên tâm lý, đau do căn nguyên thần kinh, đau chi ảo, đau dây thần kinh sau ecpet, hội chứng chấn thương vùng cổ, đau do tổn thương tủy sống, đau dây thần kinh sinh ba, bệnh thần kinh do đái đường.

11. Quy trình sản xuất hợp chất có công thức chung (1):

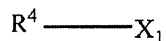


(1)

hoặc các muối được dùng của hợp chất này, trong đó m , l , n , X , R^1 , R^2 , và R^3 được xác định trong mục 1 nêu trên, quy trình bao gồm bước tiến hành phản ứng giữa hợp chất có công thức chung:



trong đó m , l , n , X , R^1 , R^2 , và R^3 được xác định trong điểm 1 nêu trên và hợp chất có công thức chung:



trong đó R^4 và X^1 được xác định trong mục 1 nêu trên.

Mô tả chi tiết sáng chế

Mỗi nhóm được thể hiện trong công thức chung điển hình là như được xác định dưới đây.

Thuật ngữ "thấp" có nghĩa là nhóm có từ 1 đến 6 (tốt hơn là từ 1 đến 4, tốt hơn nữa là từ 1 đến 3) nguyên tử cacbon, trừ khi được xác định theo cách khác.

Nhóm vòng dị vòng bao gồm vòng dị vòng đơn vòng hoặc đa vòng, no hoặc không no bao gồm ít nhất một nguyên tử khác loại được chọn từ (các) nguyên tử oxy, (các) nguyên tử lưu huỳnh và (các) nguyên tử nitơ. Tốt hơn nữa bao gồm các vòng dị vòng sau:

Vòng dị vòng đơn vòng không no, có từ 3 đến 8 cạnh, tốt hơn có 5 hoặc 6 cạnh chứa từ 1 đến 4 nguyên tử nitơ, ví dụ, các nhóm pyrolyl, pyrolinyl, imidazolyl, pyrazolyl, các nhóm pyridyl và N-oxit của nó, pyrimidinyl, pyrazinyl, pyridazinyl, triazolyl (ví dụ, các nhóm 4H-1, 2, 4-triazolyl, 1H-1, 2, 3-triazolyl, 2H-1, 2, 3-triazolyl v.v.), nhóm tetrazolyl (ví dụ, các nhóm 1H-tetrazolyl, 2H-tetrazolyl, v.v.), dihydrotriazinyl (ví dụ, các nhóm 4, 5-dihydro-1, 2, 4-triazinyl, 2, 5-dihydro-1, 2, 4-triazinyl), v.v. có thể được đề cập đến. Tốt hơn là, các nhóm imidazolyl, pyridazinyl, pyridyl, pyrazinyl, pyrimidinyl, pyrazolyl, v.v. có thể được đề cập đến.

Vòng dị vòng đơn vòng không no có từ 3 đến 8 cạnh, tốt hơn có 5 hoặc 6 cạnh chứa từ 1 đến 4 nguyên tử nitơ, ví dụ, các nhóm azetidiny, pyrrolidinyl, imidazolidinyl, piperidinyl, pyrazolidinyl, piperazinyl, v.v. có thể được đề cập đến. Tốt hơn là nhóm pyrrolidinyl.

Nhóm dị vòng ngưng tụ có từ 7 đến 12 cạnh, no một phần hoặc không no chứa từ 1 đến 5 nguyên tử nitơ, ví dụ, các nhóm indolyl, dihydroindolyl, (ví dụ, nhóm 2, 3-dihydro-1H-dihydroindolyl, v.v.), isoindolyl, indolizinyl,

benzimidazolyl, quinolyl, isoquinolyl, dihydroisoquinolyl (ví dụ, nhóm 3, 4-dihydro-1H-isoquinolyl, v.v.), tetrahydroquinolyl, tetrahydroisoquinolyl (ví dụ, các nhóm 1, 2, 3, 4-tetrahydro-1H-isoquinolyl, 5, 6, 7, 8-tetrahydroisoquinolyl, v.v.), carbostyryl, dihydrocarbostyryl (ví dụ, nhóm 3, 4-dihydrocarbostyryl, v.v.), indazolyl, benzotriazolyl, tetrazolopyridyl, tetrazolopyridazinyl (ví dụ, nhóm tetrazolo[1, 5-b]pyridazinyl, v.v.), dihydrotriazolopyridazinyl, imidazopyridyl (ví dụ, nhóm imidazo[1, 2-a]pyridyl, v.v.), naphthyridyl, xinolinyl, quinoxalinyl, pyrazolopyridyl (ví dụ, nhóm pyrazolo[2, 3-a]pyridyl, v.v.), pyrolopyridyl, carbazolyl, Indolinyl, tetrahydrobenzodiazepiny, tetrahydrobenzoazepiny, quinazoliny, phtalazinyl, v.v. có thể được đề cập đến. Tốt hơn là, các nhóm quinolyl, isoquinolyl, quinoxaliny, indolyl, indazolyl, pyrolopyridyl, tetrahydroquinolyl, carbazolyl, indoliny, quinazolyl, phtalazinyl, tetrahydrobenzodiazepiny, hoặc tetrahydrobenzoazepiny, v.v. có thể được đề cập đến.

Dị vòng một vòng có từ 3 đến 8 cạnh, tốt hơn có 5 hoặc 6 cạnh, không no chứa từ 1 đến 2 nguyên tử oxy, ví dụ, nhóm furyl, v.v. có thể được đề cập đến.

Nhóm dị vòng ngưng tụ có từ 7 đến 12 cạnh, no một phần hoặc không no chứa từ 1 đến 3 nguyên tử oxy, ví dụ, các nhóm benzofuryl, dihydrobenzofuryl (ví dụ, nhóm 2, 3-dihydrobenzo [b] furyl, v.v.), cromanyl, benzodioxanyl (ví dụ, nhóm 1,4-benzodioxanyl, v.v.), dihydrobenzoxadiny (ví dụ, 2, 3-dihydrobenzo-1,4-oxadiny), benzodioxolyl (ví dụ, nhóm benzo[1,3] dioxolyl, v.v.), benzodioxynyl, dihydrobenzodioxynyl, dihydrobenzodioxepiny, v.v. có thể được đề cập đến. Tốt hơn là, các nhóm benzofuryl, benzodioxynyl, benzodioxolyl, dihydrobenzofuryl, dihydrobenzodioxepiny, dihydrobenzodioxsepinylyl, cromenyl, hoặc cromanyl có thể được đề cập đến.

Vòng dị vòng đơn vòng không no có từ 3 đến 8 cạnh, tốt hơn có 5 hoặc 6 cạnh chứa từ 1 đến 2 nguyên tử oxy và từ 1 đến 3 nguyên tử nitơ, ví dụ, các nhóm oxazolyl, isoxazolyl, oxadiazolyl (ví dụ, các nhóm 1, 2, 4-oxadiazolyl, 1,

3, 4-oxadiazoyl, 1, 2, 5-oxadiazoyl, v.v.), v.v. có thể được đề cập đến. Tốt hơn là, các nhóm oxazolyl, oxadiazolyl có thể được đề cập đến.

Vòng dị vòng đơn vòng no có từ 3 đến 8 cạnh, tốt hơn có 5 hoặc 6 cạnh chứa từ 1 đến 2 nguyên tử oxy và từ 1 đến 3 nguyên tử nitơ, ví dụ, nhóm morpholinyl, v.v. có thể được đề cập đến.

Dị vòng ngưng tụ no một phần hoặc không no có từ 7 đến 12 cạnh chứa từ 1 đến 2 nguyên tử oxy và từ 1 đến 3 nguyên tử nitơ, ví dụ, các nhóm benzoxazolyl, benzoxazdiazolyl, benzisoxazolyl, furopyridyl (ví dụ, các nhóm furo[2, 3-b] pyridyl, furo[3, 2-c]pyridyl, v.v.), dihydrobenzoxadiny, v.v. có thể được đề cập đến. Tốt hơn là, các nhóm benzoxazolyl, dihydrobenzoxadiny có thể được đề cập đến.

Vòng dị vòng đơn vòng không no có từ 3 đến 8 cạnh, tốt hơn có 5 hoặc 6 cạnh chứa từ 1 đến 2 nguyên tử lưu huỳnh và từ 1 đến 3 nguyên tử nitơ, ví dụ, các nhóm thiazolyl, 1, 2-thiazolyl, thiazolynyl, thiadiazolyl (ví dụ, các nhóm 1,2,4-thiadiazolyl, 1,3,4-thiadiazolyl, 1,2,5-thiadiazolyl, 1, 2, 3-thiadiazolyl, v.v.), v.v. có thể được đề cập đến. Tốt hơn là, nhóm thiazolyl có thể được đề cập đến:

Vòng dị vòng đơn vòng no có từ 3 đến 8 cạnh, tốt hơn là 5 hoặc 6 cạnh chứa từ 1 đến 2 nguyên tử lưu huỳnh và từ 1 đến 3 nguyên tử nitơ, ví dụ, nhóm thiazolydiny, v.v. có thể được đề cập đến.

Vòng dị vòng đơn vòng không no có từ 3 đến 8 cạnh, tốt hơn là 5 hoặc 6 cạnh chứa 1 nguyên tử lưu huỳnh, ví dụ, nhóm thienyl, v.v. có thể được đề cập đến.

Dị vòng ngưng tụ không no có từ 7 đến 12 cạnh chứa từ 1 đến 3 nguyên tử lưu huỳnh, ví dụ, nhóm benzothienyl (ví dụ, nhóm benzo [b] thienyl, v.v.), v.v. có thể được đề cập đến.

nhóm dị vòng ngưng tụ no một phần hoặc không no, có từ 7 đến 12 cạnh chứa từ 1 đến 2 nguyên tử lưu huỳnh và từ 1 đến 3 nguyên tử nitơ, ví dụ, các nhóm benzothiazolyl, benzothadiazolyl, thienopyridyl (ví dụ, các nhóm

thieno[2, 3-b] pyridyl, thieno[2, 3-c] pyridyl, thieno[3, 2-c]pyridyl, v.v.), imidazothiazolyl (ví dụ, nhóm imidazo[2, 1-b] thiazolyl, v.v.), dihydroimidazothiazolyl (ví dụ, nhóm 2, 3-dihydroimidazo[2, 1-b] thiazolyl, v.v.), thienopyradinyl (ví dụ, nhóm thieno[2, 3-b] pyradinyl, v.v.), v.v. có thể được đề cập đến. Tốt hơn là, các nhóm thienopyridyl hoặc benzothiazolyl có thể được đề cập đến.

Vòng dị vòng nêu trên có thể được thể bởi một hoặc nhiều nhóm thế tùy ý.

Đối với vòng thơm, vòng này bao gồm, ví dụ, các nhóm C₆₋₁₄ aryl có thể được đề cập đến. Ví dụ ưu tiên về các nhóm aryl đó là các nhóm phenyl, naphthyl, antryl, phenantryl, axenaphtylenyl, biphenyl, indenyl. Trong số các nhóm này, các nhóm phenyl, naphthyl, antryl, phenantryl là được ưu tiên. Các nhóm aryl có thể được làm no một phần. Các nhóm aryl không no một phần là, ví dụ, các nhóm dihydroindenyl, florenyl, dihydroaxenaphtylenyl, tetrahydronaphthyl. Ở đây, các vòng dị vòng nêu trên có thể được thể bởi một hoặc nhiều nhóm thế tùy ý.

Đối với nhóm hydrocacbon no, nhóm này bao gồm, ví dụ, các nhóm alkyl thấp, xyclo C₃-C₈ alkyl, v.v..

Đối với nhóm hydrocacbon không no, nhóm này bao gồm, ví dụ, các nhóm alkenyl thấp, alkynyl thấp, phenyl, v.v..

Nhóm đặc trưng là thuật ngữ chung được sử dụng để đề cập đến các nhóm trực tiếp liên kết với cấu trúc gốc khác với liên kết cacbon-cacbon (các nguyên tử hoặc các nhóm nguyên tử không phải hydro), và $-C\equiv N$ và $>C=X$ ($X=O, S, Se, Te, NH, NR$). Đối với nhóm đặc trưng, nhóm này bao gồm, ví dụ, các nhóm cacboxy, cacbamoyl, xyano, hydroxy, amino, v.v..

Các nhóm thế tùy ý là các vòng dị vòng, các nhóm vòng thơm, các nhóm hydrocacbon no, các nhóm hydrocacbon không no, các nhóm đặc trưng nêu trên, v.v.. Tốt hơn là, các nhóm thế từ (1-1) đến (1-43) mô tả trong điểm 2 nêu trên có thể được đề cập đến.

Các ví dụ về nhóm alkyl thấp có thể bao gồm các nhóm alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh có từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon (tốt hơn là từ 1 đến 4 nguyên tử cacbon), trừ khi được xác định theo cách khác. Cụ thể hơn nữa, nhóm này bao gồm các nhóm metyl, etyl, n-propyl, isopropyl, n-butyl, isobutyl, tert-butyl, sec-butyl, n-pentyl, 1-ethylpropyl, isopentyl, neopentyl, n-hexyl, 1,2,2-trimethylpropyl, 3,3-dimethylbutyl, 2-ethylbutyl, isohexyl, và 3-methylpentyl, v.v..

Các ví dụ về nhóm alkoxy thấp có thể bao gồm các nhóm alkoxy mạch thẳng hoặc mạch nhánh có từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon (tốt hơn là từ 1 đến 4 nguyên tử cacbon), trừ khi được xác định theo cách khác. Cụ thể hơn nữa, nhóm này bao gồm các nhóm metoxy, etoxy, n-propoxy, isopropoxy, n-butoxy, isobutoxy, tert-butoxy, sec-butoxy, n-pentyloxy, 1-ethylpropoxy, isopentyloxy, neopentyloxy, n-hexyloxy, 1,2,2-trimethylpropoxy, 3,3-dimethylbutoxy, 2-ethylbutoxy, isohexyloxy, và 3-methylpentyloxy, v.v..

Các ví dụ về nguyên tử halogen bao gồm các nguyên tử flo, clo, brom, và iot, trừ khi được xác định theo cách khác.

Các ví dụ về nhóm alkyl thấp được thế halogen có thể bao gồm các nhóm alkyl thấp minh họa ở trên được thế bởi từ 1 đến 7 (tốt hơn nữa là từ 1 đến 3) nguyên tử halogen, trừ khi được xác định theo cách khác. Cụ thể hơn nữa, nhóm này bao gồm các nhóm flometyl, diflometyl, triflometyl, clometyl, diclometyl, triclometyl, bromometyl, dibromometyl, dicloflometyl, 2,2-difloetyl, 2,2,2-trifloetyl, pentaflloetyl, 2-floetyl, 2-cloetyl, 3,3,3-triflopropyl, heptafllopropyl, 2,2,3,3,3-pentafllopropyl, heptaflloisopropyl, 3-clopropyl, 2-clopropyl, 3-bromopropyl, 4,4,4-triflobutyl, 4,4,4,3,3-pentafllobutyl, 4-clobutyl, 4-bromobutyl, 2-clobutyl, 5,5,5-triflopentyl, 5-clopentyl, 6,6,6-triflohexyl, 6-clohexyl, và perflohexyl, v.v..

Các ví dụ về nhóm alkoxy thấp được thế halogen có thể bao gồm các nhóm alkoxy thấp minh họa ở trên được thế bởi từ 1 đến 7 (tốt hơn là từ 1 đến 3) nguyên tử halogen, trừ khi được xác định theo cách khác. Cụ thể hơn nữa, nhóm này bao gồm các nhóm flometoxy, diflometoxy, triflometoxy, clometoxy,

diclometoxy, triclometoxy, bromometoxy, dibromometoxy, dicloflometoxy, 2,2-difloetoxo, 2,2,2-trifloetoxo, pentaflorotoxo, 2-florotoxo, 2-clorotoxo, 3,3,3-trifloropropoxy, heptafloropropoxy, heptaflorisopropoxy, 3-cloropropoxy, 2-cloropropoxy, 3-bromopropoxy, 4,4,4-triflorobutoxy, 4,4,4,3,3-pentaflorobutoxy, 4-clorobutoxy, 4-bromobutoxy, 2-clorobutoxy, 5,5,5-trifloropentyloxy, 5-cloropentyloxy, 6,6,6-triflorohexyloxy, 6-clorohexyloxy, và perflorohexyloxy, v.v..

Các ví dụ về nhóm xyclo-C3-C8 alkyl bao gồm các nhóm xyclopropyl, xyclobutyl, xyclopentyl, xyclohexyl, xycloheptyl, và xyclooctyl, v.v., trừ khi được xác định theo cách khác.

Các ví dụ về nhóm alkanoyl thấp có thể bao gồm các nhóm alkanoyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh có từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon (tốt hơn là từ 1 đến 4 nguyên tử cacbon), trừ khi được xác định theo cách khác. Cụ thể hơn nữa, nhóm này bao gồm các nhóm formyl, axetyl, propionyl, butyryl, isobutyryl, pentanoyl, tert-butylcacbonyl, và hexanoyl, v.v..

Các ví dụ về nhóm alkylthio thấp có thể bao gồm các nhóm thio được thể bởi các nhóm alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh có từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon (tốt hơn là từ 1 đến 4 nguyên tử cacbon), trừ khi được xác định theo cách khác. Cụ thể hơn nữa, nhóm này bao gồm các nhóm metylthio, etylthio, n-propylthio, isopropylthio, n-butylthio, isobutylthio, tert-butylthio, sec-butylthio, n-pentylthio, 1-etylpropylthio, isopentylthio, neopentylthio, n-hexylthio, 1,2,2-trimetylpropylthio, 3,3-dimetylbutylthio, 2-etylbutylthio, isohexylthio, và 3-metylpenlythio, v.v..

Các ví dụ về nhóm alkenyl thấp có thể bao gồm các nhóm alkenyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh có từ 1 đến 3 liên kết đôi và từ 2 đến 6 nguyên tử cacbon (tốt hơn là từ 2 đến 4 nguyên tử cacbon), trừ khi được xác định theo cách khác, và nhóm alkenyl thấp bao gồm cả hai dạng trans và cis. Cụ thể hơn nữa, nhóm này bao gồm các nhóm vinyl, 1-propenyl, 2-propenyl, 1-metyl-1-propenyl, 2-metyl-1-propenyl, 2-metyl-2-propenyl, 2-butenyl, 1-butenyl, 3-butenyl, 2-pentenyl, 1-pentenyl, 3-pentenyl, 4-pentenyl, 1,3-butadienyl, 1,3-

pentadienyl, 2-penten-4-yl, 2-hexenyl, 1-hexenyl, 5-hexenyl, 3-hexenyl, 4-hexenyl, 3,3-dimetyl-1-propenyl, 2-etyl-1-propenyl, 1,3,5-hexatrienyl, 1,3-hexadienyl, và 1,4-hexadienyl, v.v..

Các ví dụ về nhóm hydroxy-alkyl thấp có thể bao gồm các nhóm alkyl thấp minh họa ở trên (tốt hơn là các nhóm alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh có từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon (tốt hơn nữa là từ 1 đến 4 nguyên tử cacbon)) mà các nhóm này có từ 1 đến 5, tốt hơn là từ 1 đến 3 nhóm hydroxy, trừ khi được xác định theo cách khác. Cụ thể hơn nữa, nhóm này bao gồm các nhóm hydroxymetyl, 2-hydroxyetyl, 2-hydroxypropyl, 1-hydroxyetyl, 3-hydroxypropyl, 2,3-dihydroxypropyl, 4-hydroxybutyl, 3,4-dihydroxybutyl, 1,1-dimetyl-2-hydroxyetyl, 5-hydroxypentyl, 6-hydroxyhexyl, 3,3-dimetyl-3-hydroxypropyl, 2-metyl-3-hydroxypropyl, 2,3,4-trihydroxybutyl, và perhydroxyhexyl, v.v..

Các ví dụ về nhóm alkylamino thấp có thể bao gồm các nhóm amino có từ 1 đến 2 trong số các nhóm alkyl thấp (tốt hơn là các nhóm alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh có từ 1 đến 6 (tốt hơn nữa là từ 1 đến 4, thậm chí tốt hơn nữa là từ 1 đến 3) nguyên tử cacbon) minh họa ở trên, trừ khi được xác định theo cách khác. Cụ thể hơn nữa, nhóm này bao gồm các nhóm metylamino, dimethylamino, diethylamino, và diisopropylamino, v.v..

Các ví dụ về nhóm alkylsulfamoyl thấp có thể bao gồm các nhóm sulfamoyl có từ 1 đến 2 trong số các nhóm alkyl thấp (tốt hơn là các nhóm alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh có từ 1 đến 6 (tốt hơn nữa là từ 1 đến 4, thậm chí tốt hơn nữa là từ 1 đến 3) nguyên tử cacbon) minh họa ở trên, trừ khi được xác định theo cách khác. Cụ thể hơn nữa, nhóm này bao gồm các nhóm metylsulfamoyl, etylsulfamoyl, dimethylsulfamoyl, diethylsulfamoyl, và etylmethylsulfamoyl, v.v..

Nhóm tri-alkylsilyl thấp có thể được minh họa bằng các nhóm silyl được thể bởi 3 nhóm alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh có từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon, như các nhóm triisopropylsilyl, tert-butyldimethylsilyl, trimethylsilyl, n-

butylethylmethylsilyl, tert-butylpropylsilyl, n-pentyl-diethylsilyl, và n-hexyl-n-propylmethylsilyl, v.v..

Các ví dụ về nhóm tri(alkyl thấp)silyloxy-alkyl thấp có thể bao gồm các nhóm tri(alkyl thấp)silyloxy-alkyl thấp mà gốc alkyl thấp của nó là nhóm bất kỳ trong số các nhóm alkyl thấp minh họa ở trên (tốt hơn là các nhóm alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh có từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon (tốt hơn nữa là từ 1 đến 4 nguyên tử cacbon)), trừ khi được xác định theo cách khác. Cụ thể hơn nữa, nhóm này bao gồm các nhóm trimethylsilyloxymethyl, 1- (hoặc 2-)trimethylsilyloxyethyl, 1- (hoặc 2- hoặc 3-)trimethylsilyloxypropyl, triethylsilyloxymethyl, 1- (hoặc 2-)triethylsilyloxyethyl, 1- (hoặc 2- hoặc 3-)triethylsilyloxypropyl, triisopropylsilyloxymethyl, 1- (hoặc 2-)triisopropylsilyloxyethyl, và 1- (hoặc 2- hoặc 3-)triisopropylsilyloxypropyl, v.v..

Các ví dụ về nhóm phenoxy-alkyl thấp có thể bao gồm các nhóm alkyl thấp (tốt hơn là các nhóm alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh có từ 1 đến 6 (tốt hơn nữa là từ 1 đến 4, thậm chí tốt hơn nữa là từ 1 đến 3) nguyên tử cacbon) minh họa ở trên có từ 1 đến 3, tốt hơn là 1 nhóm phenoxy, trừ khi được xác định theo cách khác. Cụ thể hơn nữa, nhóm này bao gồm các nhóm phenoxymethyl, 1-phenoxyethyl, 2-phenoxyethyl, 3-phenoxypropyl, 2-phenoxypropyl, 4-phenoxybutyl, 5-phenoxypropyl, 4-phenoxypropyl, 6-phenoxyhexyl, 2-methyl-3-phenoxypropyl, và 1,1-dimethyl-2-phenoxyethyl, v.v..

Các ví dụ về nhóm phenyl-alkoxy thấp có thể bao gồm các nhóm alkoxy thấp (tốt hơn là các nhóm alkoxy mạch thẳng hoặc mạch nhánh có từ 1 đến 6 (tốt hơn nữa là từ 1 đến 4, thậm chí tốt hơn nữa là từ 1 đến 3) nguyên tử cacbon) minh họa ở trên có từ 1 đến 3, tốt hơn là 1 nhóm phenyl, trừ khi được xác định theo cách khác. Cụ thể hơn nữa, nhóm này bao gồm các nhóm benzyloxy, 2-phenyletoxy, 1-phenyletoxy, 3-phenylpropoxy, 4-phenylbutoxy, 5-phenylpentoxy, 6-phenylhexyloxy, 1,1-dimethyl-2-phenyletoxy, và 2-methyl-3-phenylpropoxy, v.v..

Các ví dụ về nhóm phenyl-alkenyl thấp có thể bao gồm các nhóm

alkenyl thấp (tốt hơn là các nhóm alkenyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh có từ 2 đến 6 (tốt hơn nữa có từ 2 đến 4) nguyên tử cacbon) minh họa ở trên mà các nhóm này có từ 1 đến 3, tốt hơn là 1 nhóm phenyl, trừ khi được xác định theo cách khác. Cụ thể hơn nữa, nhóm này bao gồm các nhóm styryl, 3-phenyl-2-propenyl (thông thường được gọi là xinamyl), 4-phenyl-2-butenyl, 4-phenyl-3-butenyl, 5-phenyl-4-pentenyl, 5-phenyl-3-pentenyl, 6-phenyl-5-hexenyl, 6-phenyl-4-hexenyl, 6-phenyl-3-hexenyl, 4-phenyl-1,3-butadienyl, và 6-phenyl-1,3,5-hexatrienyl, v.v..

Các ví dụ về nhóm alkylamino thấp-alkyl thấp có thể bao gồm các nhóm alkyl thấp có từ 1 đến 2 trong số các nhóm alkylamino thấp minh họa ở trên, trừ khi được xác định theo cách khác. Cụ thể hơn nữa, nhóm này bao gồm các nhóm metylaminometyl, etylaminometyl, dimethylaminometyl, 1- (hoặc 2-)dimethylaminoetyl, 1- (hoặc 2- hoặc 3-)dimethylaminopropyl, diisopropylaminometyl, 1- (hoặc 2-)diethylaminoetyl, và bis(dimethylamino)metyl, v.v..

Các ví dụ về nhóm alkylamino thấp-alkoxy thấp có thể bao gồm các nhóm alkoxy thấp có từ 1 đến 2 trong số các nhóm alkylamino thấp minh họa ở trên, trừ khi được xác định theo cách khác. Cụ thể hơn nữa, nhóm này bao gồm các nhóm metylaminometoxy, etylaminometoxy, dimethylaminometoxy, 1- (hoặc 2-)dimethylaminoetoxy, 1- (hoặc 2- hoặc 3-)dimethylaminopropoxy, diisopropylaminometoxy, 1- (hoặc 2-)diethylaminoetoxy, và bis(dimethylamino)metoxy, v.v..

Các ví dụ về nhóm dihydrobenzodioxinyl bao gồm các nhóm 2,3-dihydrobenzo[b][1,4]dioxinyl, 3,4-dihydrobenzo[c][1,2]dioxinyl, và 2,4-dihydrobenzo[d][1,3] dioxinyl, v.v..

Các ví dụ về nhóm imidazolyl-alkyl thấp có thể bao gồm các nhóm alkyl thấp (tốt hơn là các nhóm alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh có từ 1 đến 6 (tốt hơn nữa là từ 1 đến 4) nguyên tử cacbon) minh họa ở trên mà các nhóm này có từ 1 đến 3, tốt hơn là 1 nhóm imidazolyl. Cụ thể hơn nữa, nhóm này bao gồm

các nhóm 1- (hoặc 2- hoặc 4- hoặc 5-)imidazolylmetyl, 1- (hoặc 2-){1- (hoặc 2- hoặc 4- hoặc 5-)imidazolyl}etyl, và 1- (hoặc 2- hoặc 3-){1- (hoặc 2- hoặc 4- hoặc 5-)imidazolyl}propyl, v.v..

Nhóm dihydroindenyl bao gồm các nhóm (1-, 2-, 4-, hoặc 5-)-1,2-dihydroindenyl, v.v..

Nhóm dihydroquinolyl bao gồm các nhóm 1,2-dihydroquinolyl, 3,4-dihydroquinolyl, 1,4-dihydroquinolyl, 4a,8a-dihydroquinolyl, 5,6-dihydroquinolyl, 7,8-dihydroquinolyl, và 5,8-dihydroquinolyl, v.v..

Nhóm florenyl bao gồm các nhóm 1H-florenyl, 2H-florenyl, 3H-florenyl, 4aH-florenyl, 5H-florenyl, 6H-florenyl, 7H-florenyl, 8H-florenyl, 8aH-florenyl, và 9H-florenyl, v.v..

Nhóm dihydrobenzofuryl bao gồm các nhóm 2,3-dihydro-(2-, 3-, 4-, 5-, 6-, hoặc 7-)benzofuryl, v.v..

Nhóm dihydrobenzoxazinyl bao gồm các nhóm (2-, 3-, 4-, 5-, 6-, 7-, hoặc 8-)3,4-dihydro-2H-benzo[b][1,4]oxazinyl và (1-, 2-, 4-, 5-, 6-, 7-, hoặc 8-)2,4-dihydro-1H-benzo[d][1,3]oxazinyl, v.v..

Nhóm tetrahydrobenzodiazepinyl bao gồm các nhóm (1-, 2-, 3-, 4-, 5-, 6-, 7-, 8-, hoặc 9-)2,3,4,5-tetrahydro-1H-benzo[b][1,4]diazepinyl và (1-, 2-, 3-, 4-, 5-, 6-, 7-, 8-, hoặc 9-)2,3,4,5-tetrahydro-1H-benzo[e][1,4]diazepinyl, v.v..

Các ví dụ về nhóm tetrahydrobenzodiazepinyl có thể bao gồm các nhóm (1-, 2-, 3-, 4-, 5-, 6-, 7-, 8-, hoặc 9-)2,3,4,5-tetrahydro-1H-benzo[b][1,4]diazepinyl và (1-, 2-, 3-, 4-, 5-, 6-, 7-, 8-, hoặc 9-)2,3,4,5-tetrahydro-1H-benzo[e][1,4]diazepinyl, v.v..

Nhóm dihydrobenzodioxepinyl bao gồm các nhóm 3,4-dihydro-2H-1,5-benzodioxepinyl, 4,5-dihydro-3H-1,2-benzodioxepinyl, và 3,5-dihydro-2H-1,4-benzodioxepinyl, v.v..

Các ví dụ về nhóm pyrrolidinyl mà nhóm này có thể có (các) nhóm oxo

bao gồm nhóm pyrrolidinyl mà nhóm này có thể có từ 1 đến 2 (tốt hơn là 1) nhóm oxo, trừ khi được xác định theo cách khác. Cụ thể hơn nữa, nhóm này bao gồm các nhóm (1-, 2-, hoặc 3-)pyrrolidinyl, (2- hoặc 3-)oxo-1-pyrrolidinyl, (3-, 4-, hoặc 5-)oxo-2-pyrrolidinyl, và (2-, 4-, hoặc 5-)oxo-3-pyrrolidinyl, v.v..

Các ví dụ về nhóm oxadiazolyl mà nhóm này có thể có (các) nhóm alkyl thấp có thể bao gồm nhóm oxadiazolyl mà nhóm này có thể có từ 1 đến 2 (tốt hơn là 1) trong số các nhóm alkyl thấp minh họa ở trên, trừ khi được xác định theo cách khác. Cụ thể hơn nữa, nhóm này bao gồm các nhóm 5-metyl-1,3,4-oxadiazolyl, 5-etyl-1,3,4-oxadiazolyl, 5-propyl-1,3,4-oxadiazolyl, 5-butyl-1,3,4-oxadiazolyl, 5-pentyl-1,3,4-oxadiazolyl, và 5-hexyl-1,3,4-oxadiazolyl, v.v..

Các ví dụ về nhóm pyrazolyl mà nhóm này có thể có (các) nhóm alkyl thấp có thể bao gồm nhóm pyrazolyl mà nhóm này có thể có từ 1 đến 2 (tốt hơn là 1) trong số các nhóm alkyl thấp minh họa ở trên, trừ khi được xác định theo cách khác. Cụ thể hơn nữa, nhóm này bao gồm các nhóm 1-metyl-1H-pyrazolyl, 1-etyl-1H-pyrazolyl, 1-propyl-1H-pyrazolyl, 1-isopropyl-1H-pyrazolyl, 1-butyl-1H-pyrazolyl, 1-tert-butyl-1H-pyrazolyl, và 1,3-dimetyl-1H-pyrazolyl, v.v..

Các ví dụ về nhóm thiazolyl mà nhóm này có thể có (các) nhóm alkyl thấp có thể bao gồm nhóm thiazolyl mà nhóm này có thể có từ 1 đến 2 (tốt hơn là 1) trong số các nhóm alkyl thấp minh họa ở trên, trừ khi được xác định theo cách khác. Cụ thể hơn nữa, nhóm này bao gồm các nhóm 2-metylthiazolyl, 2-etylthiazolyl, 2-propylthiazolyl, 2-isopropylthiazolyl, 2-butylthiazolyl, 2-tert-butylthiazolyl, và 2,5-dimetylthiazolyl, v.v..

Các ví dụ về nhóm pyrimidyl mà nhóm này có thể có (các) nhóm alkyl thấp có thể bao gồm nhóm pyrimidyl mà nhóm này có thể có từ 1 đến 2 (tốt hơn là 1) trong số các nhóm alkyl thấp minh họa ở trên, trừ khi được xác định theo cách khác. Cụ thể hơn nữa, nhóm này bao gồm các nhóm 2-metylpyrimidyl, 2-etylpyrimidyl, 2-propylpyrimidyl, 2-isopropylpyrimidyl, 2-butylpyrimidyl, 2-tert-butylpyrimidyl, và 2,4-dimetylpyrimidyl, v.v..

Các ví dụ về nhóm pyridazinyl mà nhóm này có thể có (các) nhóm alkyl

thấp có thể bao gồm nhóm pyridazinyl mà nhóm này có thể có từ 1 đến 2 (tốt hơn là 1) trong số các nhóm alkyl thấp minh họa ở trên, trừ khi được xác định theo cách khác. Cụ thể hơn nữa, nhóm này bao gồm các nhóm 3-methylpyridazinyl, 3-ethylpyridazinyl, 3-propylpyridazinyl, 3-isopropylpyridazinyl, 3-butylpyridazinyl, 3-tert-butylpyridazinyl, và 3,4-dimethylpyridazinyl, v.v..

Các ví dụ về nhóm pyridazinyl-oxy mà nhóm này có thể có (các) nhóm alkyl thấp có thể bao gồm nhóm oxy được thế bởi pyridazinyl mà nhóm này có thể có từ 1 đến 2 (tốt hơn là 1) trong số các nhóm alkyl thấp minh họa ở trên, trừ khi được xác định theo cách khác. Cụ thể hơn nữa, nhóm này bao gồm các nhóm 6-methylpyridazinyl-3-yloxy và 4-methylpyridazinyl-3-yloxy, v.v..

Các ví dụ về nhóm pyrrolidinyl-alkoxy thấp có thể bao gồm các nhóm alkoxy thấp (tốt hơn là các nhóm alkoxy mạch thẳng hoặc mạch nhánh có từ 1 đến 6 (tốt hơn nữa là từ 1 đến 4, thậm chí tốt hơn nữa là từ 1 đến 3) nguyên tử cacbon) minh họa ở trên mà các nhóm này có từ 1 đến 3, tốt hơn là 1 nhóm pyrrolidinyl, trừ khi được xác định theo cách khác. Các ví dụ cụ thể về các nhóm này bao gồm các nhóm (1-, 2-, hoặc 3-) pyrrolidinylmetoxy, 2-[(1-, 2-, hoặc 3-)pyrrolidinyl]etoxo, 1-[(1-, 2-, hoặc 3-)pyrrolidinyl]etoxo, 3-[(1-, 2-, hoặc 3-)pyrrolidinyl]propoxo, 4-[(1-, 2-, hoặc 3-)pyrrolidinyl]butoxy, 5-[(1-, 2-, hoặc 3-)pyrrolidinyl]pentyloxy, 6-[(1-, 2-, hoặc 3-)pyrrolidinyl]hexyloxy, 1,1-dimethyl-2-[(1-, 2-, hoặc 3-) pyrrolidinyl]etoxo, và 2-methyl-3-[(1-, 2-, hoặc 3-)pyrrolidinyl]propoxo, v.v..

Các ví dụ về nhóm bảo vệ bao gồm các nhóm bảo vệ được sử dụng thông thường, như các nhóm alkanoyl thấp được thế hoặc không được thế [ví dụ, formyl, axetyl, propionyl, và trifloaxetyl], phtaloyl, alkoxycarbonyl thấp [ví dụ, butoxycarbonyl bậc ba và amyloxycarbonyl bậc ba], aralkyloxycarbonyl được thế hoặc không được thế [ví dụ, benzyloxycarbonyl và p-nitrobenzyloxycarbonyl], 9-florenylmetoxycarbonyl, arensulfonyl được thế hoặc không được thế [ví dụ, benzensulfonyl và tosyl], nitrophenylsulfenyl,

alkyl [ví dụ, trityl và benzyl], và alkylsilyl thấp [ví dụ, triisopropylsilyl].

Các ví dụ về nhóm phenyl-alkyl thấp có thể bao gồm các nhóm alkyl thấp (tốt hơn là các nhóm alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh có từ 1 đến 6 (tốt hơn nữa là từ 1 đến 4 nguyên tử cacbon) minh họa ở trên mà các nhóm này có từ 1 đến 3, tốt hơn là 1 nhóm phenyl, trừ khi được xác định theo cách khác. Cụ thể hơn nữa, nhóm này bao gồm các nhóm benzyl, phenetyl, 3-phenylpropyl, benzhydryl, trityl, 4-phenylbutyl, 5-phenylpentyl, và 6-phenylhexyl, v.v..

Các ví dụ về nhóm morpholinyl-alkyl thấp có thể bao gồm các nhóm alkyl thấp (tốt hơn là các nhóm alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh có từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon) minh họa ở trên mà các nhóm này có từ 1 đến 2 (tốt hơn là 1) nhóm morpholinyl, trừ khi được xác định theo cách khác. Cụ thể hơn nữa, nhóm này bao gồm các nhóm 2-morpholinyl metyl, 3-morpholinyl metyl, 4-morpholinyl metyl, 2-(2-morpholinyl)etyl, 2-(3-morpholinyl)etyl, 2-(4-morpholinyl)etyl, 1-(2-morpholinyl)etyl, 1-(3-morpholinyl)etyl, 1-(4-morpholinyl)etyl, 3-(2-morpholinyl)propyl, 3-(3-morpholinyl)propyl, 3-(4-morpholinyl)propyl, 4-(2-morpholinyl)butyl, 4-(3-morpholinyl)butyl, 4-(4-morpholinyl)butyl, 5-(2-morpholinyl)pentyl, 5-(3-morpholinyl)pentyl, 5-(4-morpholinyl)pentyl, 6-(2-morpholinyl)hexyl, 6-(3-morpholinyl)hexyl, 6-(4-morpholinyl)hexyl, 3-metyl-3-(2-morpholinyl)propyl, 3-metyl-3-(3-morpholinyl)propyl, 1, 1-dimetyl-2-(2-morpholinyl)etyl, 1,1-dimetyl-2-(3-morpholinyl)etyl, và 1,1-dimetyl-2-(4-morpholinyl)etyl, v.v..

Các ví dụ về nhóm pyrrolidinyl-alkyl thấp có thể bao gồm các nhóm alkyl thấp minh họa ở trên có từ 1 đến 3 (tốt hơn là 1) nhóm pyrrolidinyl, trừ khi được xác định theo cách khác. Cụ thể hơn nữa, nhóm này bao gồm các nhóm (1-, 2-, hoặc 3-) pyrrolidinylmetyl, 2-[(1-, 2- hoặc 3-) pyrrolidinyl]etyl, 1-[(1-, 2- hoặc 3-) pyrrolidinyl]etyl, 3-[(1-, 2- hoặc 3-) pyrrolidinyl]propyl, 4-[(1-, 2- hoặc 3-) pyrrolidinyl]butyl, 5-[(1-, 2- hoặc 3-) pyrrolidinyl]pentyl, 6-[(1-, 2- hoặc 3-) pyrrolidinyl]hexyl, 1, 1-dimetyl-2-[(1-, 2- hoặc 3-) pyrrolidinyl]etyl, và 2-metyl-3-[(1-, 2- hoặc 3-) pyrrolidinyl]propyl, v.v..

Các ví dụ về nhóm piperidyl-alkyl thấp có thể bao gồm các nhóm alkyl thấp (tốt hơn là các nhóm alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh có từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon) minh họa ở trên mà các nhóm này có từ 1 đến 2 (tốt hơn là 1) nhóm piperidyl, trừ khi được xác định theo cách khác. Cụ thể hơn nữa, nhóm này bao gồm các nhóm (1-, 2-, 3- hoặc 4-) piperidylmetyl, 2-[(1-, 2-, 3- hoặc 4-)piperidyl]etyl, 1-[(1-, 2-, 3- hoặc 4-)piperidyl]etyl, 3-[(1-, 2-, 3- hoặc 4-)piperidyl]propyl, 4-[(1-, 2-, 3- hoặc 4-)piperidyl]butyl, 1,1-dimetyl-2-[(1-, 2-, 3- hoặc 4-)piperidyl]etyl, 5-[(1-, 2-, 3- hoặc 4-)piperidyl]pentyl, 6-[(1-, 2-, 3- hoặc 4-)piperidyl]hexyl, 1-[(1-, 2-, 3- hoặc 4-)piperidyl]isopropyl, và 2-metyl-3-[(1-, 2-, 3- hoặc 4-)piperidyl]propyl, v.v..

Các ví dụ về nhóm alkoxyacetyl thấp có thể bao gồm các nhóm alkoxy mạch thẳng hoặc mạch nhánh tốt hơn có từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon và có gốc alkoxyacetyl thấp như được minh họa ở trên. Cụ thể hơn nữa, nhóm này bao gồm các nhóm metoxyacetyl, etoxyacetyl, n-propoxyacetyl, isopropoxyacetyl, n-butoxyacetyl, isobutoxyacetyl, tert-butoxyacetyl, sec-butoxyacetyl, n-pentyloxyacetyl, neopentyloxyacetyl, n-hexyloxyacetyl, isohexyloxyacetyl, 3-metylpentyloxyacetyl, v.v..

Các ví dụ về nhóm piperazinyl mà nhóm này có thể có (các) nhóm alkyl thấp bao gồm các nhóm piperazinyl mà các nhóm này có thể có từ 1 đến 2 (tốt hơn là 1) nhóm alkyl thấp, trừ khi được xác định theo cách khác. Cụ thể hơn nữa, nhóm này bao gồm các nhóm 2-metylpiperazinyl, 4-metylpiperazinyl, 2-etylpiperazinyl, 2-propylpiperazinyl, 2-isopropylopiperazinyl, 2-butylopiperazinyl, 2-tert butylopiperazinyl, và 2, 4-dimetylpiperazinyl, v.v..

Các ví dụ về nhóm piperazinyl-alkyl thấp mà nhóm này có thể có (các) nhóm alkyl thấp bao gồm các nhóm piperazinyl minh họa ở trên mà các nhóm này có thể có từ 1 đến 2 (tốt hơn là 1) nhóm alkyl thấp, trừ khi được xác định theo cách khác. Cụ thể hơn nữa, nhóm này bao gồm các nhóm 1-(4-metylpiperazinyl)metyl, 1-(2-metyl piperazinyl)metyl, 2-(1-metyl

piperazinyl)ethyl, 3-(1-metyl piperazinyl)propyl, 4-(1-metyl piperazinyl)butyl, v.v..

Các ví dụ về nhóm phenyl mà nhóm này có thể có (các) nhóm alkoxy thấp bao gồm các nhóm phenyl minh họa ở trên mà các nhóm này có thể có từ 1 đến 2 (tốt hơn là 1) nhóm alkoxy thấp, trừ khi được xác định theo cách khác. Cụ thể hơn nữa, nhóm này bao gồm các nhóm 4-metoxypheyl, 4-etoxypheyl, 4-propoxypheyl, 4-isopropylphenyl, 4-butoxypheyl, 4-tert butoxypheyl, v.v. có thể được đề cập đến. Đối với nhóm phenoxy minh họa ở trên mà nhóm này có thể có (các) nguyên tử halogen bao gồm các nhóm phenoxy mà các nhóm này có thể có từ 1 đến 4 (tốt hơn là 1) nguyên tử halogen, trừ khi được xác định theo cách khác. Cụ thể hơn nữa, nhóm này bao gồm các nhóm 4-flophenoxy, 3, 4-diflophenoxy, 3, 4, 5-triflophenoxy, và 3-clo-4,5-diflophenoxy, v.v..

Nhóm tetrahydroquinolyl bao gồm, ví dụ, các nhóm 1, 2, 3, 4-tetrahydroquinolyl, 5, 6, 7, 8-tetrahydroquinolyl, 4a, 5, 8, 8a-tetrahydroquinolyl, 3, 4, 4a, 8a-tetrahydroquinolyl, 4a, 5, 8, 8a-tetrahydroquinolyl, và 4a, 5, 6, 7-tetrahydroquinolyl, v.v..

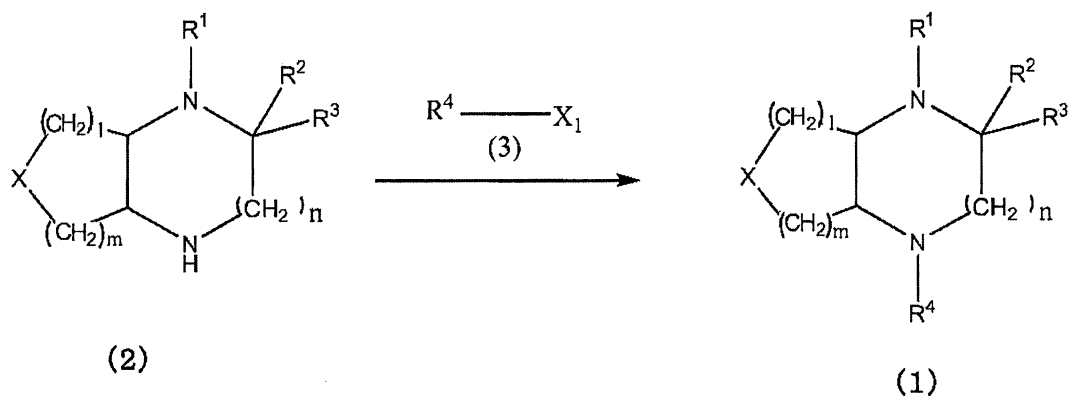
Nhóm dihydroaxenaphtylenyl bao gồm, ví dụ, các nhóm 1, 2-dihydroaxenaphtylenyl, 2a¹, 3-dihydroaxenaphtylenyl, 5, 6-dihydroaxenaphtylenyl, 3, 7-dihydroaxenaphtylenyl, 2a¹, 6-dihydroaxenaphtylenyl, 1, 2a¹-dihydroaxenaphtylenyl, và 6, 8a-dihydroaxenaphtylenyl, v.v.. Tốt hơn nữa, nhóm 1, 2-dihydroaxenaphtylenyl có thể được đề cập đến.

Nhóm tetrahydronaphtyl bao gồm, ví dụ, các nhóm 1, 2, 3, 4-tetrahydronaphtyl, 1, 2, 3, 5-tetrahydronaphtyl, và 5, 6, 7, 8-tetrahydronaphtyl, 2, 3, 7, 8-tetrahydronaphtyl, v.v. có thể được đề cập đến.

Nhóm dihydroquinazolinyll bao gồm, ví dụ, các nhóm 1, 2-dihydroquinazolinyll, 3, 4-dihydroquinazolinyll, 4a, 5-dihydroquinazolinyll, 5, 6-dihydroquinazolinyll, 6, 7-dihydroquinazolinyll, 7,8-dihydroquinazolinyll, 8,8a-dihydroquinazolinyll, và 4a, 8a-dihydroquinazolinyll, v.v. có thể được đề cập đến.

Hợp chất dị vòng có công thức chung (1) có thể được tạo ra bằng các phương pháp khác nhau. Để làm ví dụ, hợp chất dị vòng có công thức chung (1) được tạo ra bằng các phương pháp được biểu thị bằng các quá trình phản ứng được thể hiện dưới đây.

Quá trình phản ứng 1



trong đó R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , X , l , m , và n được xác định như ở trên; và X_1 là nhóm rời chuyển.

Trong công thức chung (3), nhóm rời chuyển biểu thị bằng X_1 có thể được minh họa bằng các nguyên tử halogen, các nhóm alkansulfonyloxy thấp, các nhóm arylsulfonyloxy, các nhóm aralkylsulfonyloxy, các nhóm trihalometansulfonyloxy, các nhóm sulfonio, và các nhóm toluensulfoxy. Ví dụ ưu tiên về các nhóm rời chuyển cho phản ứng này bao gồm các nguyên tử halogen.

Ví dụ về các nguyên tử halogen được biểu thị bằng X_1 có thể bao gồm các nguyên tử flo, clo, brom, và iot.

Các nhóm alkansulfonyloxy thấp biểu thị bằng X_1 có thể được minh họa cụ thể bằng các nhóm alkansulfonyloxy mạch thẳng hoặc mạch nhánh có từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon, như các nhóm metansulfonyloxy, etansulfonyloxy, n-propansulfonyloxy, isopropansulfonyloxy, n-butansulfonyloxy, tert-butansulfonyloxy, n-pentansulfonyloxy, và n-hexansulfonyloxy.

Ví dụ về các nhóm arylsulfonyloxy được biểu thị bằng X_1 có thể bao

gồm: các nhóm phenylsulfonyloxy mà nhóm này có thể có từ 1 đến 3 nhóm được chọn từ nhóm gồm các nhóm alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh có từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon, các nhóm alkoxy mạch thẳng hoặc mạch nhánh có từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon, các nhóm nitro, và các nguyên tử halogen làm các nhóm thế trên vòng phenyl; và các nhóm naphthylsulfonyloxy. Các nhóm phenylsulfonyloxy mà nhóm này có thể có các nhóm thế có thể được minh họa cụ thể bằng các nhóm phenylsulfonyloxy, 4-metylphenylsulfonyloxy, 2-metylphenylsulfonyloxy, 4-nitrophenylsulfonyloxy, 4-metoxypheylsulfonyloxy, 2-nitrophenylsulfonyloxy, và 3-clophenylsulfonyloxy. Các nhóm naphthylsulfonyloxy có thể được minh họa cụ thể bằng các nhóm α -naphthylsulfonyloxy và β -naphthylsulfonyloxy.

Ví dụ về các nhóm aralkylsulfonyloxy được biểu thị bằng X_1 có thể bao gồm: các nhóm alkansulfonyloxy mạch thẳng hoặc mạch nhánh có từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon, các nhóm này được thế bởi nhóm phenyl mà nhóm này có thể có từ 1 đến 3 nhóm được chọn từ nhóm gồm các nhóm alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh có từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon, các nhóm alkoxy mạch thẳng hoặc mạch nhánh có từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon, các nhóm nitro, và các nguyên tử halogen làm các nhóm thế trên vòng phenyl; và các nhóm alkansulfonyloxy mạch thẳng hoặc mạch nhánh có từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon, các nhóm này được thế bởi nhóm naphthyl. Các nhóm alkansulfonyloxy được thế bởi nhóm phenyl có thể được minh họa cụ thể bởi benzylsulfonyloxy, 2-phenyletylsulfonyloxy, 4-phenylbutylsulfonyloxy, 4-metylbenzylsulfonyloxy, 2-metylbenzylsulfonyloxy, 4-nitrobenzylsulfonyloxy, 4-metoxymetylbenzylsulfonyloxy, và 3-clobenzylsulfonyloxy. Các nhóm alkansulfonyloxy được thế bởi nhóm naphthyl có thể được minh họa cụ thể bằng các nhóm α -naphthylmetylsulfonyloxy và β -naphthylmetylsulfonyloxy.

Các nhóm perhaloalkansulfonyloxy được biểu thị bằng X_1 có thể được minh họa cụ thể bằng các nhóm triflometansulfonyloxy.

Ví dụ về các nhóm sulfonio được biểu thị bằng X_1 cụ thể có thể bao gồm

các nhóm dimetylsulfonio, dietylsulfonio, dipropylsulfonio, di-(2-xyanoetyl)sulfonio, di-(2-nitroetyl)sulfonio, di-(aminoetyl)sulfonio, di-(2-metylaminoetyl)sulfonio, di-(2-dimetylaminoetyl)sulfonio, di-(2-hydroxyetyl)sulfonio, di-(3-hydroxypropyl)sulfonio, di-(2-metoxetyl)sulfonio, di-(2-cacbamoyletyl)sulfonio, di-(2-cacbamoyletyl)sulfonio, di-(2-cacboxyetyl)sulfonio, và di-(2-metoxycacbonyletyl)sulfonio, và diphenylsulfonio.

Hợp chất có công thức chung (2) và hợp chất có công thức chung (3) có thể được phản ứng với sự có mặt của chất xúc tác paladi với sự có mặt hoặc không có mặt của hợp chất kiềm không cần dung môi hoặc trong dung môi trơ để bằng cách đó tạo ra hợp chất (1).

Các ví dụ về dung môi trơ có thể bao gồm, ví dụ: nước; các dung môi ete như dioxan, tetrahydrofuran, dietyl ete, 1,2-dimetoxietan, dietylen glycol dimetyl ete, và etylen glycol dimetyl ete; các dung môi hydrocacbon thơm như benzen, toluen, và xylen; các dung môi rượu bậc thấp như metanol, etanol, và isopropanol; các dung môi keton như axeton và metyl etyl keton; và các dung môi phân cực như N,N-dimetylformamit (DMF), dimetyl sulfoxit (DMSO), hexametylphosphoric triamit, và axetonitril. Các dung môi trơ này được sử dụng riêng biệt hoặc ở dạng hỗn hợp của hai hoặc nhiều trong số các dung môi này.

Hợp chất paladi được sử dụng trong phản ứng này không bị giới hạn cụ thể. Các ví dụ về hợp chất này bao gồm: các chất xúc tác paladi hóa trị bốn như natri hexaclopaladi (IV) axit tetrahydrat và kali hexaclopaladi (IV) axit; các chất xúc tác paladi hóa trị hai như paladi (II) clorua, paladi (II) bromua, paladi (II) axetat, paladi (II) axetylaxetonat, diclobis(benzonitril)paladi (II), diclobis(axetonitril)paladi (II), diclobis(triphenylphosphin)paladi (II), diclotetraamin paladi (II), diclo(xycloocta-1,5-dien)paladi (II), và phức hợp paladi (II) trifloaxetat 1,1'-bis(diphenylphosphino)feroxendiclopaladi (II)-diclometan; và các chất xúc tác paladi hóa trị 0 như tris(dibenzylidenaxeton)dipaladi (0), phức hợp tris(dibenzylidenaxeton)dipaladi

(0)-cloroform, và tetrakis(triphenylphosphin)paladi (0). Các hợp chất paladi này được sử dụng riêng biệt hoặc ở dạng hỗn hợp của hai hoặc nhiều trong số chúng.

Trong phản ứng này, lượng chất xúc tác paladi được sử dụng không bị giới hạn cụ thể và thông thường nằm trong khoảng từ 0,000001 đến 20mol về paladi so với 1mol hợp chất có công thức chung (2). Tốt hơn nữa, lượng hợp chất paladi được sử dụng nằm trong khoảng từ 0,0001 đến 5mol về paladi so với 1mol hợp chất có công thức chung (2).

Phản ứng này tiến hành thuận lợi với sự có mặt của một phối tử thích hợp. Ví dụ, 2,2'-bis(diphenylphosphino)-1,1'-binaphtyl (BINAP), tri-*o*-tolylphosphin, bis(diphenylphosphino)feroxen, triphenylphosphin, tri-*t*-butylphosphin, trixyclohexylphosphin, và 9,9-dimetyl-4,5-bis(diphenylphosphino)xanten (XANTPHOS) có thể được sử dụng làm phối tử cho chất xúc tác paladi. Các phối tử này được sử dụng riêng biệt hoặc ở dạng hỗn hợp của hai hoặc nhiều trong số chúng.

Ngoài ra, theo sáng chế, phosphin bậc ba có thể được điều chế ở dạng phức hợp trước và được bổ sung vào đó. Các ví dụ về phức hợp có thể bao gồm tri-*t*-butylphosphoni tetrafloroborat và tri-*t*-butylphosphoni tetraphenylborat.

Tỷ lệ giữa chất xúc tác paladi và phối tử được sử dụng không bị giới hạn cụ thể. Lượng phối tử được sử dụng xấp xỉ từ 0,1 đến 100mol, tốt hơn xấp xỉ từ 0,5 đến 15mol, so với 1mol chất xúc tác paladi.

Các kiềm vô cơ và hữu cơ đã biết trong lĩnh vực có thể được sử dụng rộng rãi làm hợp chất kiềm.

Ví dụ về các kiềm vô cơ có thể bao gồm: các kim loại kiềm hydroxit như natri hydroxit, kali hydroxit, xesi hydroxit, và lithi hydroxit; các kim loại kiềm cacbonat như natri cacbonat, kali cacbonat, xesi cacbonat, và lithi cacbonat; các kim loại kiềm bicarbonat như lithi bicarbonat, natri bicarbonat, và kali bicarbonat; các kim loại kiềm như natri và kali; các phosphat như natri phosphat và kali phosphat; các amit như natri amit; và các kim loại kiềm hydrua như natri hydrua và kali hydrua.

Ví dụ về các kiềm hữu cơ có thể bao gồm: các kim loại kiềm alkoxit thấp như natri metoxit, natri etoxit, natri t-butoxit, kali metoxit, kali etoxit, và kali t-butoxit; và các amin như trietylamin, tripropylamin, pyridin, quinolin, piperidin, imidazol, N-etyldiisopropylamin, dimetylaminopyridin, trimetylamin, dimetylanilin, N-metylmorpholin, 1,5-diazabixyclo[4,3,0]non-5-en (DBN), 1,8-diazabixyclo[5,4,0]undec-7-en (DBU), và 1,4-diazabixyclo[2,2,2]octan (DABCO).

Các hợp chất kiềm này được sử dụng riêng biệt hoặc ở dạng hỗn hợp của hai hoặc nhiều trong số chúng. Các ví dụ ưu tiên hơn nữa về hợp chất kiềm được sử dụng trong phản ứng này bao gồm các kim loại kiềm cacbonat như natri cacbonat, kali cacbonat, xesi cacbonat, và lithi cacbonat, và natri t-butoxit.

Lượng hợp chất kiềm được sử dụng thông thường nằm trong khoảng từ 0,5 đến 10mol, tốt hơn là từ 0,5 đến 6mol, so với 1mol hợp chất có công thức chung (2).

Tỷ lệ giữa hợp chất có công thức chung (2) và hợp chất có công thức chung (3) được sử dụng trong quá trình phản ứng 1 có thể ít nhất là 1mol, tốt hơn xấp xỉ từ 1 đến 5mol của hợp chất nói sau so với 1mol của hợp chất nói trước.

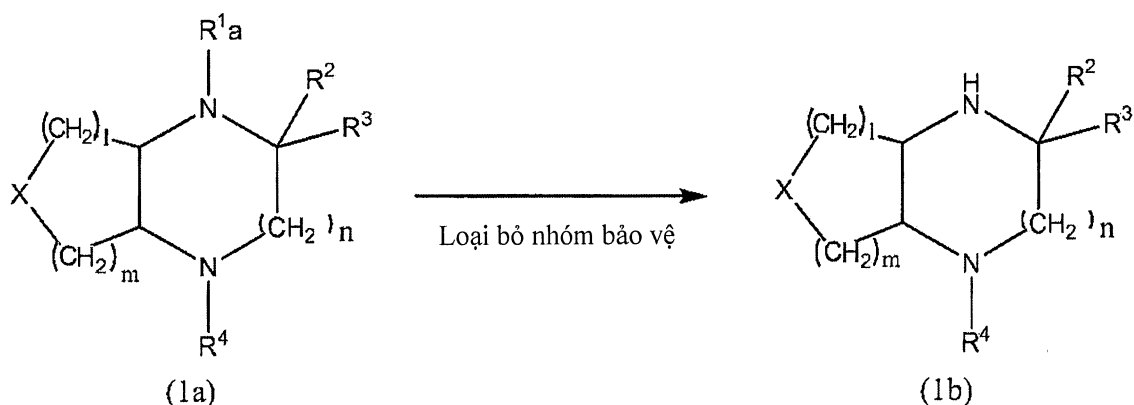
Phản ứng có thể được thực hiện trong môi trường khí trơ như nitơ hoặc argon trong điều kiện áp suất khí quyển hoặc có thể được thực hiện trong điều kiện áp suất tăng.

Phản ứng này thông thường được thực hiện trong các điều kiện nhiệt độ từ nhiệt độ trong phòng đến 200°C, tốt hơn là từ nhiệt độ trong phòng đến 150°C, và thông thường được hoàn thành trong thời gian xấp xỉ từ 1 đến 30 giờ. Phản ứng cũng đạt được bằng cách gia nhiệt ở nhiệt độ từ 100 đến 200°C trong thời gian từ 5 phút đến 1 giờ sử dụng thiết bị phản ứng vi sóng.

Sau khi hoàn thành phản ứng, sản phẩm của phản ứng có thể được xử lý bằng một phương pháp chuẩn để thu được hợp chất mong muốn.

Hợp chất có công thức chung (2) được sử dụng làm nguyên liệu khởi đầu trong quá trình phản ứng 1 được tạo ra từ các hợp chất đã biết trong lĩnh vực, ví dụ, bằng các phương pháp được biểu thị bằng Các quá trình phản ứng 3 và 4 được thể hiện dưới đây. Hợp chất có công thức chung (3) là một hợp chất có thể thu được một cách dễ dàng đã biết trong lĩnh vực hoặc hợp chất được tạo ra một cách dễ dàng bằng phương pháp đã biết trong lĩnh vực.

Quá trình phản ứng 2



trong đó R^2 , R^3 , R^4 , X , l , m , và n được xác định như ở trên; và R^{1a} là nhóm bảo vệ.

Các ví dụ về nhóm bảo vệ bao gồm các nhóm bảo vệ minh họa ở trên.

Hợp chất có công thức chung (1b) có thể được tạo ra bằng cách cho hợp chất có công thức chung (1a) tiến hành phản ứng loại bỏ nhóm bảo vệ.

Phương pháp được sử dụng thông thường như thủy phân hoặc hydro phân có thể được áp dụng cho phản ứng loại bỏ nhóm bảo vệ.

Phản ứng này thông thường được thực hiện trong dung môi được sử dụng thông thường mà không làm ảnh hưởng bất lợi cho phản ứng. Các ví dụ về dung môi bao gồm: nước; các dung môi rượu như metanol, etanol, isopropanol, n-butanol, trifloetanol, và etylen glycol; các dung môi keton như axeton và metyl etyl keton; các dung môi ete như tetrahydrofuran, dioxan, dietyl ete, dimetoxyetan, và diglyme; các dung môi este như metyl axetat và etyl axetat;

các dung môi phân cực không proton như axetonitril, N,N-dimetylformamit, dimetyl sulfoxit, và N-metylpyrrolidon; các dung môi hydrocacbon halogen hóa như metylen clorua và etylen clorua; và các dung môi hữu cơ khác.

(i) thủy phân:

Phương pháp thủy phân tốt hơn được thực hiện với sự có mặt của kiềm hoặc axit (bao gồm cả các axit Lewis).

Các kiềm vô cơ và hữu cơ đã biết trong lĩnh vực có thể được sử dụng rộng rãi làm kiềm. Ví dụ ưu tiên về các kiềm vô cơ bao gồm các kim loại kiềm (ví dụ, natri và kali), các kim loại kiềm thổ (ví dụ, magie và canxi), và các hydrua, các cacbonat, hoặc các bicacbonat của chúng. Ví dụ ưu tiên về các kiềm hữu cơ bao gồm các trialkylamin (ví dụ, trimetylamin và trietylamin), picolin, và 1,5-diazabicyclo[4,3,0]non-5-en.

Các axit hữu cơ và vô cơ đã biết trong lĩnh vực có thể được sử dụng rộng rãi làm axit. Ví dụ ưu tiên về các axit hữu cơ bao gồm: các axit béo như axit formic, axit axetic, và axit propionic; và các axit trihaloaxetic như axit tricloaxetic và axit trifloaxetic. Ví dụ ưu tiên về các axit vô cơ bao gồm axit clohydric, axit bromhydric, axit sulfuric, hydro clorua, và hydro bromua. Ví dụ về các axit Lewis bao gồm các phức bo triflorua-ete, bo tribromua, nhôm clorua, và sắt (III) clorua.

Khi axit trihaloaxetic hoặc axit Lewis được sử dụng làm axit, phản ứng tốt hơn được thực hiện với sự có mặt của chất tẩy cation (ví dụ, anisol và phenol).

Lượng kiềm hoặc axit được sử dụng không bị giới hạn cụ thể miễn là lượng này là lượng cần thiết cho phản ứng thủy phân.

Nhiệt độ phản ứng thông thường nằm trong khoảng từ 0 đến 120°C, tốt hơn là từ nhiệt độ trong phòng đến 100°C, tốt hơn nữa là từ nhiệt độ trong phòng đến 80°C. Thời gian phản ứng thông thường nằm trong khoảng từ 30 phút đến 24 giờ, tốt hơn là từ 30 phút đến 12 giờ, tốt hơn nữa là từ 1 đến 8 giờ.

(ii) Hydro phân:

Các phương pháp hydro phân đã biết trong lĩnh vực có thể được áp dụng rộng rãi cho phương pháp hydro phân. Ví dụ về các phương pháp hydro phân như vậy bao gồm phương pháp khử hóa học và khử xúc tác.

Các chất khử ưu tiên được sử dụng trong phương pháp khử hóa học là các hỗn hợp của các hydrua (ví dụ, hydro iodua, hydro sulfua, lithi nhôm hydrua, natri bohydrua, và natri xyanobohydrua), các kim loại (ví dụ, thiếc, kẽm, và sắt), hoặc các hợp chất kim loại (ví dụ, crom clorua và crom axetat) với các axit hữu cơ hoặc vô cơ (ví dụ, axit formic, axit axetic, axit propionic, axit trifloaxetic, axit p-toluensulfonic, axit clohydric, và axit bromhydric).

Các chất xúc tác ưu tiên được sử dụng trong phương pháp khử xúc tác là các chất xúc tác platin (ví dụ, các tấm platin, bột platin, muối platin, keo platin, platin oxit, và sợi platin), các chất xúc tác paladi (ví dụ, bột paladi, muối paladi, paladi oxit, paladi-cacbon, paladi/bari sulfat, và paladi/bari cacbonat), các chất xúc tác niken (ví dụ, niken khử, niken oxit, và Raney niken), các chất xúc tác coban (ví dụ, coban khử và Raney coban), các chất xúc tác sắt (ví dụ, sắt khử), v.v..

Khi các axit này được sử dụng trong phương pháp khử hóa học ở trạng thái lỏng, chúng cũng có thể được sử dụng làm các dung môi.

Lượng chất khử được sử dụng trong phương pháp khử hóa học hoặc lượng chất xúc tác được sử dụng trong phương pháp khử xúc tác không bị giới hạn cụ thể và có thể là lượng được sử dụng thông thường.

Phản ứng của sáng chế có thể được thực hiện trong môi trường khí trơ như nitơ hoặc argon trong điều kiện áp suất khí quyển hoặc có thể được thực hiện trong điều kiện áp suất tăng.

Nhiệt độ phản ứng thông thường nằm trong khoảng từ 0 đến 120°C, tốt hơn là từ nhiệt độ trong phòng đến 100°C, tốt hơn nữa là từ nhiệt độ trong phòng đến 80°C. Thời gian phản ứng thông thường nằm trong khoảng từ 30 phút

đến 24 giờ, tốt hơn là từ 30 phút đến 10 giờ, tốt hơn nữa là từ 30 phút đến 4 giờ.

Sau khi hoàn thành phản ứng, sản phẩm của phản ứng có thể được xử lý bằng một phương pháp chuẩn để thu được hợp chất có công thức chung (1b) mong muốn.

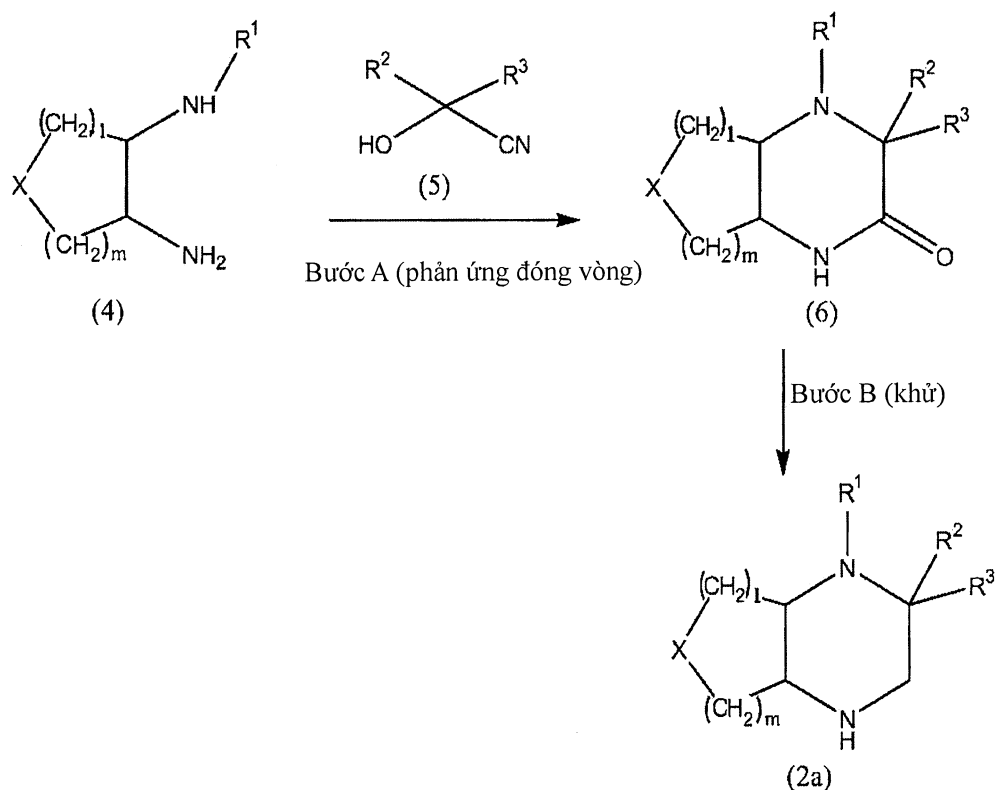
Phản ứng loại bảo vệ của nhóm bảo vệ không bị hạn chế bởi các điều kiện phản ứng mô tả ở trên. Ví dụ, phản ứng được mô tả trong T.W. Green, P.G.M. Wuts, "Protective Groups in Organic Synthesis", 4th ed., hoặc John Wiley & Sons; New York, 1991, P. 309 cũng có thể được áp dụng cho bước phản ứng này.

Hợp chất có công thức chung (2) là một hợp chất mới, hợp chất này hữu dụng làm hợp chất trung gian cho hợp chất có công thức chung (1), như được mô tả ở trên.

Hợp chất có công thức chung (2) được tạo ra theo, ví dụ, các quá trình phản ứng 3, 4, hoặc 5 được thể hiện dưới đây.

Sau đây, mỗi quá trình phản ứng sẽ được mô tả.

Quá trình phản ứng 3



trong đó R¹, R², R³, X, l, m, và n được xác định như ở trên.

Hợp chất có công thức chung (2a) được tạo ra bằng cách cho hợp chất có công thức chung (4) và hợp chất có công thức chung (5) tiến hành phản ứng đóng vòng để tạo ra hợp chất có công thức chung (6) (Bước A), hợp chất này sau đó được khử (Bước B).

Bước A

Phản ứng giữa hợp chất có công thức chung (4) và hợp chất có công thức chung (5) có thể được thực hiện với sự có mặt hoặc không có mặt của kiềm không cần dung môi hoặc trong dung môi trơ.

Các ví dụ về dung môi trơ có thể bao gồm, ví dụ: nước; các ete như dioxan, tetrahydrofuran, dietyl ete, dietylen glycol dimetyl ete, và etylen glycol dimetyl ete; các hydrocacbon thơm như benzen, toluen, và xylen; các rượu bậc thấp như metanol, etanol, và isopropanol; các keton như axeton và metyl etyl keton; và các dung môi phân cực như N,N-dimetylformamit (DMF), dimetyl sulfoxit (DMSO), hexametylphosphoric triamit, và axetonitril.

Các hợp chất kiềm đã biết trong lĩnh vực có thể được sử dụng rộng rãi. Ví dụ về các hợp chất kiềm này có thể bao gồm: các kim loại kiềm hydroxit như natri hydroxit, kali hydroxit, xesi hydroxit, và lithi hydroxit; các kim loại kiềm cacbonat như natri cacbonat, kali cacbonat, xesi cacbonat, và lithi cacbonat; các kim loại kiềm như natri và kali; các kiềm vô cơ khác như natri amit, natri hydrua, và kali hydrua; các kim loại kiềm alcolat như natri metoxit, natri etoxit, kali metoxit, và kali etoxit; và các kiềm hữu cơ khác như trietylamin, tripropylamin, pyridin, quinolin, piperidin, imidazol, N-etyldiisopropylamin, dimetylaminopyridin, trimetylamin, dimetylanilin, N-metylmorpholin, 1,5-diazaxyclo[4,3,0]non-5-en (DBN), 1,8-diazabixyclo[5,4,0]undec-7-en (DBU), và 1,4-diazabixyclo[2,2.2]octan (DABCO).

Các hợp chất kiềm này được sử dụng riêng biệt hoặc ở dạng hỗn hợp của hai hoặc nhiều trong số chúng.

Lượng hợp chất kiềm được sử dụng thông thường nằm trong khoảng từ 0,5 đến 10mol, tốt hơn là từ 0,5 đến 6mol, so với hợp chất có công thức chung (4).

Phản ứng có thể được thực hiện bằng cách bổ sung, nếu cần, kim loại kiềm iodua (ví dụ, kali iodua và natri iodua) làm chất thúc đẩy phản ứng.

Tỷ lệ giữa hợp chất có công thức chung (4) và hợp chất có công thức chung (5) được sử dụng trong quá trình phản ứng thông thường có thể ít nhất là 0,5mol, tốt hơn xấp xỉ từ 0,5 đến 5mol của hợp chất nói sau so với 1mol của hợp chất nói trước.

Phản ứng của sáng chế có thể được thực hiện trong môi trường khí trơ như nitơ hoặc argon trong điều kiện áp suất khí quyển hoặc có thể được thực hiện trong điều kiện áp suất tăng.

Phản ứng thông thường được thực hiện trong các điều kiện nhiệt độ nằm trong khoảng từ 0°C đến 200°C, tốt hơn là từ nhiệt độ trong phòng đến 150°C, và thông thường được hoàn thành trong thời gian xấp xỉ từ 1 đến 30 giờ.

Hợp chất có công thức chung (4) và hợp chất có công thức chung (5) được sử dụng làm các nguyên liệu khởi đầu trong Bước A là các hợp chất có thể thu được một cách dễ dàng đã biết trong lĩnh vực hoặc các hợp chất được tạo ra một cách dễ dàng bằng phương pháp đã biết trong lĩnh vực.

Bước B

Hợp chất có công thức chung (2a) có thể được tạo ra bằng cách cho hợp chất có công thức chung (6) tiến hành phản ứng khử không cần dung môi hoặc trong dung môi trơ.

Ví dụ về các phương pháp khử như vậy bao gồm phương pháp khử hóa học và khử xúc tác.

Các ví dụ về dung môi trơ có thể bao gồm: nước; các ete như dioxan, tetrahydrofuran, dietyl ete, dietylen glycol metyl ete, và etylen glycol dimetyl ete; các hydrocacbon thơm như benzen, toluen, và xylen; các rượu bậc thấp như metanol, etanol, và isopropanol; các keton như axeton và metyl etyl keton; và các dung môi phân cực như N,N-dimetylformamit (DMF), dimetyl sulfoxit (DMSO), hexametylphosphoric triamit, và axetonitril.

Các chất khử ưu tiên được sử dụng trong phương pháp khử hóa học là các hỗn hợp của các hydrua (ví dụ, hydro iodua, hydro sulfua, lithi nhôm hydrua, bo hydrua, natri bohydrua, và natri xyanobohydrua), các kim loại (ví dụ, thiếc, kẽm, và sắt), hoặc các hợp chất kim loại (ví dụ, crom clorua và crom axetat) với các axit hữu cơ hoặc vô cơ (ví dụ, axit formic, axit axetic, axit propionic, axit trifloaxetic, axit p-toluensulfonic, axit clohydric, và axit bromhydric).

Các chất xúc tác ưu tiên được sử dụng trong phương pháp khử xúc tác là các chất xúc tác platin (ví dụ, các tấm platin, bột platin, muối platin, keo platin, platin oxit, và sợi platin), các chất xúc tác paladi (ví dụ, bột paladi, muối paladi, paladi oxit, paladi-cacbon, paladi/bari sulfat, và paladi/bari cacbonat), các chất xúc tác niken (ví dụ, niken khử, niken oxit, và Raney niken), các chất xúc tác coban (ví dụ, coban khử và Raney coban), các chất xúc tác sắt (ví dụ, sắt khử),

V.V..

Khi các axit này được sử dụng trong phương pháp khử hóa học ở trạng thái lỏng, chúng cũng có thể được sử dụng làm các dung môi.

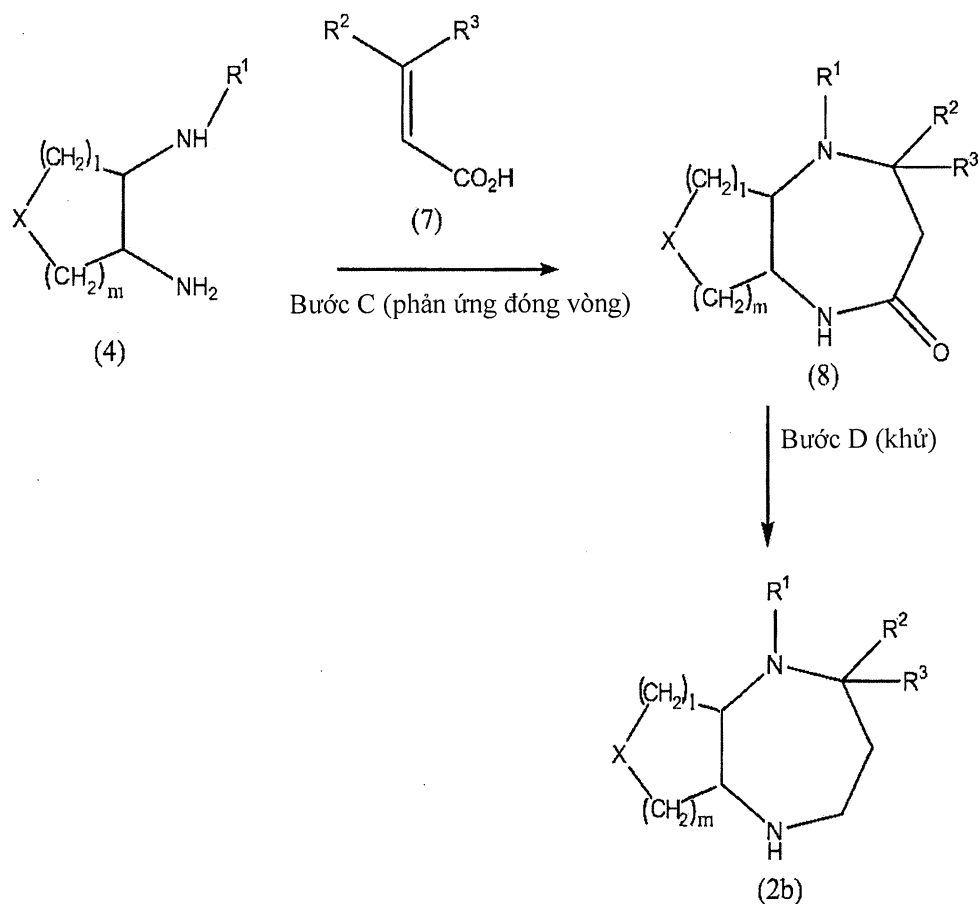
Lượng chất khử được sử dụng trong phương pháp khử hóa học hoặc chất xúc tác được sử dụng trong phương pháp khử xúc tác không bị giới hạn cụ thể và có thể là lượng được sử dụng thông thường.

Phản ứng của sáng chế có thể được thực hiện trong môi trường khí trơ như nitơ hoặc argon trong điều kiện áp suất khí quyển hoặc có thể được thực hiện trong điều kiện áp suất tăng.

Nhiệt độ phản ứng thông thường nằm trong khoảng từ 0 đến 120°C, tốt hơn là từ nhiệt độ trong phòng đến 100°C, tốt hơn nữa là từ nhiệt độ trong phòng đến 80°C. Thời gian phản ứng thông thường nằm trong khoảng từ 30 phút đến 24 giờ, tốt hơn là từ 30 phút đến 10 giờ, tốt hơn nữa là từ 30 phút đến 4 giờ.

Sau khi hoàn thành phản ứng, sản phẩm của phản ứng có thể được xử lý bằng một phương pháp chuẩn để thu được hợp chất có công thức chung (2a) mong muốn.

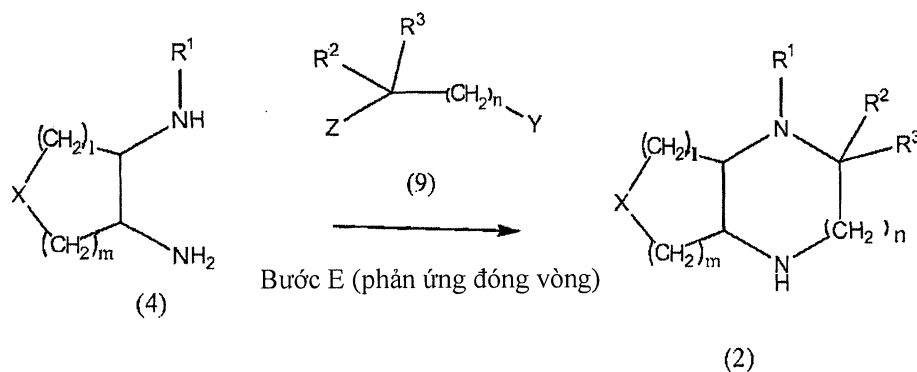
Quá trình phản ứng 4



trong đó R^1 , R^2 , R^3 , X, l, m, và n được xác định như ở trên.

Hợp chất có công thức chung (2b) được tạo ra bằng cách cho hợp chất có công thức chung (4) và hợp chất có công thức chung (7) tiến hành phản ứng đóng vòng để tạo ra hợp chất có công thức chung (8) (Bước C), hợp chất này sau đó được khử (Bước D). Các điều kiện phản ứng là tương tự như các điều kiện phản ứng trong quá trình phản ứng 3.

Quá trình phản ứng 5



trong đó R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , l , m , n , và X được xác định như ở trên; và Y và Z là các nhóm giống nhau hoặc khác nhau, mỗi nhóm độc lập là nhóm rời chuyển.

Ví dụ về các nhóm rời chuyển được biểu thị bằng Y và Z trong công thức chung (9) bao gồm các nhóm rời chuyển minh họa ở trên.

Bước E

Hợp chất có công thức chung (2) có thể được tạo ra bằng cách cho hợp chất có công thức chung (4) và hợp chất có công thức chung (9) tiến hành phản ứng đóng vòng. Phản ứng đóng vòng thông thường được thực hiện với sự có mặt hoặc không có mặt của hợp chất kiềm.

Phản ứng này thông thường được thực hiện trong dung môi được sử dụng thông thường mà không làm ảnh hưởng bất lợi cho phản ứng. Các ví dụ về dung môi bao gồm: nước; các dung môi rượu như metanol, etanol, isopropanol, n-butanol, trifloetanol, và etylen glycol; các dung môi keton như axeton và methyl etyl keton; các dung môi ete như tetrahydrofuran, dioxan, dietyl ete, dimetoxyetan, và diglyme; các dung môi este như methyl axetat và etyl axetat; các dung môi phân cực không proton như axetonitril, N,N-dimetylformamit, dimetyl sulfoxit, và N-metylpyrrolidon; các dung môi hydrocacbon halogen hóa như metylen clorua và etylen clorua; và các dung môi hữu cơ khác.

Chất xúc tác kim loại chuyển tiếp và phối tử có thể được sử dụng trong phản ứng này. Các ví dụ về kim loại chuyển tiếp bao gồm ruteni clorua, diclotris(triphenylphosphin)ruteni, dibromotris(triphenylphosphin)ruteni, dihydridotetrakis(triphenylphosphin)ruteni, $(\eta^4\text{-xyclooctadien})(\eta^6\text{-xyclooctatrien})\text{ruteni}$, các dime diclotricacbonylruteni, dodecacacbonyltriruteni, $(\eta^5\text{-pentametylxyclopentadienyl})\text{clo}(\eta^4\text{-xyclooctatrien})\text{ruteni}$, paladi axetat, paladi clorua, diclobis(triphenylphosphin)paladi, tetrakis(triphenylphosphin)paladi, bis(dibenzylidenaxeton)paladi, rodi clorua, clotris(triphenylphosphin)rodi, hydridocacbonyltris(triphenylphosphin)rodi, hydridotris(triphenylphosphin)rodi, di- μ -clotetracacbonylldirodi, clocacbonylbis(triphenylphosphin)iridi, các dime $(\eta^5\text{-$

pentamethylxyclopentadienyl)dicloiridi, niken tetrakis(triphenylphosphin), dicobanoctacacbonyl, và (η^5 -xyclopentadienyl)dicacbonylcoban.

Các ví dụ về phối tử bao gồm: các phối tử phosphin một chốt mà tiêu biểu là trimethylphosphin, triethylphosphin, tri-n-propylphosphin, tri-i-propylphosphin, tri-n-butylphosphin, tri-t-butylphosphin, trixyclohexylphosphin, triphenylphosphin, và tri(o-tolyl)phosphin; các phối tử phosphin hai chốt mà tiêu biểu là 1,2-bis(diphenylphosphino)etan, 1,3-bis(diphenylphosphino)propan, 1,4-bis(diphenylphosphino)butan, và 1,2-(diethylphosphino)etan; và các phối tử phosphit mà tiêu biểu là triethyl phosphit, tributyl phosphit, triphenyl phosphit, và tri(o-tolyl) phosphit.

Phản ứng này có thể được thực hiện với sự có mặt của kiềm. Các kiềm vô cơ và hữu cơ đã biết trong lĩnh vực có thể được sử dụng rộng rãi làm kiềm. Ví dụ về các kiềm vô cơ bao gồm các kim loại kiềm (ví dụ, natri và kali), các kim loại kiềm bicacbonat (ví dụ, lithi bicacbonat, natri bicacbonat, và kali bicacbonat), các kim loại kiềm hydroxit (ví dụ, lithi hydroxit, natri hydroxit, kali hydroxit, và xesi hydroxit), các kim loại kiềm cacbonat (ví dụ, lithi cacbonat, natri cacbonat, kali cacbonat, và xesi cacbonat), các kim loại kiềm alkoxit thấp (ví dụ, natri metoxit và natri etoxit), và các kim loại kiềm hydrua (ví dụ, natri hydrua và kali hydrua). Ví dụ về các kiềm hữu cơ bao gồm các trialkylamin (ví dụ, trimethylamin, triethylamin, và N-etyldiisopropylamin), pyridin, quinolin, piperidin, imidazol, picolin, dimethylaminopyridin, dimetylanilin, N-metylmorpholin, 1,5-diazabixyclo[4,3,0]non-5-en (DBN), 1,4-diazabixyclo[2,2,2]octan (DABCO), và 1,8-diazabixyclo[5,4,0]undec-7-en (DBU). Khi các kiềm này ở trạng thái lỏng, chúng cũng có thể được sử dụng làm các dung môi. Các kiềm này được sử dụng riêng biệt hoặc ở dạng hỗn hợp của hai hoặc nhiều trong số chúng. Lượng kiềm được sử dụng thông thường nằm trong khoảng từ 0,1 đến 10mol, tốt hơn là từ 0,1 đến 3mol, so với 1mol hợp chất có công thức chung (7).

Phản ứng cũng có thể được thực hiện với sự có mặt của hỗn hợp của chất

oxy hóa và chất khử.

Các ví dụ về chất oxy hóa bao gồm mangan dioxit, axit crôm, chì tetraaxetat, bạc oxit, đồng oxit, halogen axit, dimetyl sulfoxit (phản ứng oxy hóa Swern), các peroxit hữu cơ, và oxy. Phương pháp như oxy hóa điện cực có thể được sử dụng.

Các ví dụ về chất khử bao gồm các chất phản ứng bohydrua như natri bohydrua và các chất phản ứng nhôm hydrua như lithi nhôm hydrua.

Tỷ lệ giữa hợp chất có công thức chung (9) và hợp chất có công thức chung (4) được sử dụng trong quá trình phản ứng thông thường ít nhất là 1mol, tốt hơn xấp xỉ từ 1 đến 5mol của hợp chất trước so với 1mol của hợp chất sau.

Phản ứng theo sáng chế có thể được thực hiện trong môi trường khí trơ như nitơ hoặc argon trong điều kiện áp suất khí quyển hoặc có thể được thực hiện trong điều kiện áp suất tăng.

Nhiệt độ phản ứng không bị giới hạn cụ thể. Phản ứng thông thường được thực hiện trong điều kiện làm lạnh, ở nhiệt độ trong phòng, hoặc trong điều kiện gia nhiệt. Phản ứng tốt hơn được thực hiện trong các điều kiện nhiệt độ nằm trong khoảng từ nhiệt độ trong phòng đến 100°C, trong thời gian 30 phút đến 30 giờ, tốt hơn là từ 30 phút đến 5 giờ.

Sau khi hoàn thành phản ứng, sản phẩm của phản ứng có thể được xử lý bằng một phương pháp chuẩn để thu được hợp chất có công thức chung (2) mong muốn.

Các ví dụ về các muối ưu tiên của hợp chất có công thức chung (1) bao gồm các muối được dụng, ví dụ: các muối kim loại như các muối kim loại kiềm (ví dụ, muối natri và muối kali) và các muối kiềm thổ kim loại (ví dụ, muối canxi và muối magie); muối amoni; các muối của các kiềm vô cơ như các kim loại kiềm cacbonat (ví dụ, lithi cacbonat, kali cacbonat, natri cacbonat, và xesi cacbonat), các kim loại kiềm bicarbonat (ví dụ, lithi bicarbonat, natri bicarbonat, và kali bicarbonat), và các kim loại kiềm hydroxit (ví dụ, lithi

hydroxit, natri hydroxit, kali hydroxit, và xesi hydroxit); các muối của các kiềm hữu cơ như tri-alkylamin(thấp) (ví dụ, trimetylamin, trietylamin, và N-etyldiisopropylamin), pyridin, quinolin, piperidin, imidazol, picolin, dimetylaminopyridin, dimetylanilin, N-alkyl-morpholin(thấp) (ví dụ, N-metylmorpholin), 1,5-diazabixyclo[4,3,0]non-5-en (DBN), 1,8-diazabixyclo[5,4,0]undec-7-en (DBU), và 1,4-diazabixyclo [2,2.2] octan (DABCO); các muối của axit vô cơ như hydroclorua, hydrobromua, hydroiodua, sulfat, nitrat, và phosphat; và các muối của axit hữu cơ như format, axetat, propionat, oxalat, malonat, succinat, fumarat, maleat, lactat, malat, xitrat, tartrat, cacbonat, picrat, metansulfonat, etansulfonat, p-toluensulfonat, và glutamat.

Ngoài ra, các hợp chất ở dạng solvat (ví dụ, hydrat hoặc etanolat) bổ sung vào nguyên liệu thô hoặc hợp chất mong muốn thể hiện trong mỗi quá trình phản ứng cũng được bao gồm trong mỗi công thức chung. Các ví dụ về solvat tốt hơn bao gồm cả các hydrat.

Mỗi hợp chất mong muốn thu được theo mỗi trong số các quá trình phản ứng có thể được tách và được tinh chế ra khỏi hỗn hợp phản ứng, ví dụ, bằng cách tách, sau khi làm lạnh, hỗn hợp phản ứng thành sản phẩm phản ứng thô bằng các phương pháp tách như phương pháp lọc, cô đặc, và chiết và cho sản phẩm phản ứng thô tiến hành các phương pháp tinh chế thông thường như sắc ký cột và tái kết tinh.

Hợp chất có công thức chung (1) theo sáng chế cũng bao gồm các chất đồng phân như các chất đồng phân dị hình, các chất đồng phân lập thể, và các chất đồng phân quang học.

Các chất đồng phân khác nhau có thể được tách bằng phương pháp chuẩn sử dụng sự khác nhau về các đặc tính hóa lý trong số các chất đồng phân. Ví dụ, các hợp chất triệt quang có thể được chuyển hóa thành các chất đồng phân tinh khiết không gian bằng phương pháp phân giải quang học thông thường [ví dụ, phương pháp liên quan đến việc chuyển hóa thành các muối diastereomeric bằng một axit hoạt quang thông thường (axit tartaric, v.v.) và

phân giải quang học sau đó]. Các hỗn hợp diastereomeric có thể được điều chế, ví dụ, bằng phương pháp kết tinh phân đoạn hoặc sắc ký. Các hợp chất hoạt quang cũng có thể được tạo ra sử dụng các nguyên liệu khởi đầu hoạt quang thích hợp.

Sáng chế cũng bao gồm các hợp chất đánh dấu đồng vị mà các hợp chất này tương tự như hợp chất có công thức chung (1) chỉ khác ở chỗ một hoặc nhiều nguyên tử được thế bởi một hoặc nhiều nguyên tử có số khối lượng nguyên tử hoặc số khối lượng cụ thể. Các ví dụ về chất đồng vị mà có thể được sáp nhập vào hợp chất theo sáng chế bao gồm các chất đồng vị hydro, cacbon, nitơ, oxy, lưu huỳnh, flo, và clo như ^2H , ^3H , ^{13}C , ^{14}C , ^{15}N , ^{18}O , ^{17}O , ^{18}F , và ^{36}Cl . Các hợp chất đánh dấu đồng vị cụ thể này theo sáng chế chứa chất đồng vị bất kỳ và/hoặc các chất đồng vị khác của các nguyên tử khác, ví dụ, các hợp chất kết hợp chất đồng vị phóng xạ (ví dụ, ^3H và ^{14}C), là hữu dụng trong thử nghiệm về phân phối các thuốc và/hoặc các chất nền trong các mô tổ chức. Chất đồng vị (tức là ^3H) triti hóa và cacbon-14 (tức là ^{14}C) triti hóa là đặc biệt được ưu tiên nhờ bởi sự điều chế dễ dàng và khả năng phát hiện của chúng. Ngoài ra, việc thay thế bằng các chất đồng vị nặng hơn như hydro nặng (tức là ^2H) có thể được cho là mang lại các lợi thế trị liệu đặc biệt góp phần vào việc cải thiện khả năng ổn định chuyển hóa, ví dụ, chu kỳ bán hủy in-vivo tăng lên, hoặc giảm thiểu các liều lượng cần thiết. Các hợp chất đánh dấu đồng vị theo sáng chế có thể được điều chế thông thường bằng cách thay thế chất phản ứng không đánh dấu bằng chất phản ứng đánh dấu đồng vị có thể thu được một cách dễ dàng bằng phương pháp được bộc lộ trong các quá trình phản ứng và/hoặc các ví dụ dưới đây.

Dược phẩm bao gồm hợp chất theo sáng chế làm hoạt chất sẽ được mô tả.

Dược phẩm thu được bằng cách chuyển hợp chất theo sáng chế thành các dạng liều sử dụng thông thường của các dược phẩm và được điều chế sử dụng chất pha loãng và/hoặc tá dược được sử dụng thông thường, như các chất gia trọng, chất độn, các chất kết dính, các chất tạo ẩm, các chất phân hủy, các chất

hoạt diện, và các chất làm trơn.

Dược phẩm như vậy có thể được chọn từ các dạng khác nhau theo mục đích điều trị. Các ví dụ điển hình bao gồm các dạng viên nén, viên tròn, dạng bột, các dung dịch, các huyền phù, các nhũ tương, các dạng hạt, các viên nang, dạng đạn đặt, và các dạng tiêm (dung dịch, huyền phù, v.v.).

Các chất mang đã biết trong lĩnh vực để sử dụng trong việc tạo ra dạng viên nén có thể được sử dụng rộng rãi. Các ví dụ về chất mang bao gồm: các tá dược như lactoza, sucroza, natri clorua, glucoza, ure, tinh bột, canxi cacbonat, kaolin, và xenluloza kết tinh; các chất kết dính như nước, etanol, propanol, xi-rô đơn, các dung dịch glucoza, các dung dịch tinh bột, các dung dịch gelatin, cacboxymetylxenluloza, senlac, metylxenluloza, kali phosphat, và polyvinyl pyrrolidon; các chất phân hủy như tinh bột khô, natri alginat, bột agar, bột laminaran, natri bicacbonat, canxi cacbonat, các este axit béo của polyoxyetylen sorbitan, natri lauryl sulfat, monoglyxerit của axit stearic, tinh bột, và lactoza; các chất ức chế phân hủy như sucroza, stearin, bơ cacao, và dầu hydro hóa; các chất tăng cường hấp thụ như các kiềm amoni bậc bốn và natri lauryl sulfat; các chất tạo ẩm như glyxerin và tinh bột; các chất hấp thụ như tinh bột, lactoza, kaolin, bentonit, và keo axit silixic; và các chất làm trơn như bột talc tinh khiết, stearat, bột axit boric, và polyetylen glycol.

Ngoài ra, các viên nén có thể được bọc, nếu cần, bằng nguyên liệu bọc thông thường để điều chế, ví dụ, các viên nén bọc đường, các viên nén bọc gelatin, các viên nén bọc ruột, viên nén bọc màng, và các viên nén hai lớp hoặc đa lớp.

Các chất mang đã biết trong lĩnh vực để sử dụng trong việc tạo ra dạng viên tròn có thể được sử dụng rộng rãi. Ví dụ về các chất mang này bao gồm: các tá dược như glucoza, lactoza, tinh bột, bơ cacao, dầu thực vật hydro hóa, kaolin, và bột talc; các chất kết dính như bột gôm arabic, bột tragacanth, gelatin, và etanol; và các chất phân hủy như laminaran và thạch agar.

Các chất mang đã biết trong lĩnh vực để sử dụng trong việc tạo ra dạng

đạn đặt có thể được sử dụng rộng rãi. Ví dụ về các chất mang này bao gồm polyetylen glycol, bơ cacao, rượu bậc cao, các este của rượu bậc cao, gelatin, và glyxerit bán tổng hợp.

Khi hợp chất có công thức chung (1) được điều chế thành các dạng tiêm, các dung dịch, các nhũ tương, và các huyền phù tốt hơn là vô khuẩn và đẳng trương với máu. Các chất pha loãng đã biết trong lĩnh vực để sử dụng trong việc tạo ra các dạng dung dịch, nhũ tương, và huyền phù này có thể được sử dụng rộng rãi. Ví dụ về các chất pha loãng này bao gồm nước, etanol, propylen glycol, rượu isostearyl etoxyl hóa, rượu isostearyl polyoxyl hóa, và các este axit béo của polyoxyetylen sorbitan. Trong trường hợp này, dược phẩm có thể chứa muối thông thường, glucoza, hoặc glyxerin với lượng đủ để điều chế dung dịch đẳng trương và có thể chứa các chất hòa tan, các chất đệm, các chất làm dịu thông thường và chất tương tự, và nếu cần, các chất tạo màu, các chất bảo quản, các chất thơm, các chất tạo hương, các chất tạo ngọt, và chất tương tự, và/hoặc các thuốc khác.

Lượng hợp chất theo sáng chế chứa trong dược phẩm không bị giới hạn cụ thể và có thể được chọn thích hợp trong một phạm vi rộng. Hợp chất theo sáng chế thông thường được chứa với lượng tốt hơn xấp xỉ từ 1 đến 70% theo trọng lượng trong dược phẩm.

Phương pháp sử dụng dược phẩm theo sáng chế không bị giới hạn cụ thể. Dược phẩm được sử dụng bằng phương pháp tùy theo các dạng định liều khác nhau, tuổi, giới tính, và tình trạng bệnh của bệnh nhân, và các điều kiện khác. Ví dụ, viên nén, viên tròn, các dung dịch, huyền phù, nhũ tương, dạng hạt, và viên nang được sử dụng theo đường uống. Ngoài ra, các dạng tiêm có thể được sử dụng theo đường tĩnh mạch riêng biệt hoặc ở dạng hỗn hợp cùng với dịch thay thế thông thường như glucoza hoặc amino axit hoặc có thể được sử dụng riêng biệt theo đường trong cơ, trong da, dưới da, hoặc theo đường trong phúc mạc, nếu cần. Dạng đạn đặt được sử dụng theo đường trực tràng.

Liều lượng của dược phẩm có thể được chọn một cách thích hợp tùy theo

việc sử dụng, tuổi, giới tính, và tình trạng bệnh của bệnh nhân, và các điều kiện khác. Dược phẩm thông thường được sử dụng một lần hoặc vài lần mỗi ngày với liều lượng hàng ngày xấp xỉ từ 0,001 đến 100mg, tốt hơn xấp xỉ từ 0,001 đến 50mg, tính theo 1 kg thể trọng.

Liều lượng thay đổi tùy thuộc vào các điều kiện khác nhau. Do đó, trong một số trường hợp, liều lượng thấp hơn phạm vi liều lượng này là đủ. Trong các trường hợp khác lại đòi hỏi liều lượng cao hơn phạm vi này.

Hợp chất dị vòng theo sáng chế có các tác dụng ức chế tái hấp thu trên 1, 2, hoặc 3 monoamin (serotonin, norepinephrin, và dopamin).

Hợp chất dị vòng theo sáng chế có hoạt tính ức chế hấp thu rất mạnh trong các thử nghiệm in-vitro hoặc ex-vivo đối với bất kỳ 1, 2, hoặc tất cả 3 monoamin, so với các hợp chất hiện hữu có hoạt tính ức chế hấp thu monoamin. Ngoài ra, hợp chất dị vòng theo sáng chế thể hiện hoạt tính rất mạnh trong nghiên cứu vi thẩm tách não kháng lại sự gia tăng về bất kỳ 1, 2, hoặc tất cả 3 monoamin, so với các hợp chất hiện hữu có hoạt tính ức chế hấp thu monoamin.

Hợp chất dị vòng theo sáng chế có phổ trị liệu rộng, so với các thuốc chống trầm cảm đã biết trong lĩnh vực.

Hợp chất dị vòng theo sáng chế thể hiện các tác dụng điều trị đầy đủ thậm chí khi sử dụng thời gian ngắn.

Hợp chất dị vòng theo sáng chế có độ khả dụng sinh học tuyệt vời, hoạt tính ức chế yếu trên các enzym chuyển hóa ở gan, ít tác dụng phụ, và độ an toàn tuyệt vời.

Hợp chất dị vòng theo sáng chế vận chuyển dễ dàng vào não.

Hợp chất dị vòng theo sáng chế cũng thể hiện hoạt tính mạnh trong thử nghiệm chuột nhắt bởi cường bức được sử dụng trong sàng lọc trầm cảm. Ngoài ra, hợp chất dị vòng theo sáng chế cũng thể hiện hoạt tính mạnh trong thử nghiệm chuột nhắt bởi cường bức được sử dụng trong sàng lọc trầm cảm. Ngoài ra, hợp chất dị vòng theo sáng chế cũng thể hiện hoạt tính mạnh trong thử nghiệm

hạ thân nhiệt cảm ứng bởi reserpin được sử dụng trong sàng lọc trầm cảm.

Hợp chất dị vòng theo sáng chế thể hiện hoạt tính mạnh trong thử nghiệm hành vi chôn bi của chuột mẫu bị trạng thái lo âu hoặc căng thẳng và trong các mẫu kích thích căng thẳng được tập quen với sợ hãi.

Hợp chất dị vòng theo sáng chế có các tác dụng ức chế tái hấp thu trên 1, 2, hoặc 3 monoamin (serotonin, norepinephrin, và dopamin) và do đó hữu hiệu trong điều trị các rối loạn khác nhau liên quan với sự giảm dẫn truyền thần kinh đối với serotonin, norepinephrin, hoặc dopamin.

Các rối loạn như vậy bao gồm trầm cảm (ví dụ: rối loạn trầm cảm nặng; rối loạn lưỡng cực loại I; rối loạn lưỡng cực loại II; trạng thái hỗn tạp; rối loạn khí sắc; chu kỳ thay đổi trạng thái nhanh; trầm cảm không điển hình; rối loạn cảm xúc theo mùa; trầm cảm sau sinh nở; chứng u sầu nhẹ; rối loạn trầm cảm ngắn hồi quy; trầm cảm kháng thuốc/trầm cảm mãn tính; trầm cảm kép; rối loạn tính khí do rượu; rối loạn hỗn hợp lo âu-trầm cảm; trầm cảm gây ra bởi các bệnh thực thể khác như hội chứng Cushing, giảm năng tuyến giáp, tăng năng tuyến cận giáp, bệnh Addison, hội chứng vô kinh tiết sữa, bệnh Parkinson, bệnh Alzheimer, sa sút trí tuệ do mạch máu não, nhồi máu não, xuất huyết não, xuất huyết dưới màng nhện, đái tháo đường, nhiễm trùng do virus, bệnh đa xơ cứng, hội chứng mệt mỏi kinh niên, bệnh mạch vành, đau, và ung thư, v.v.; trầm cảm tiền lão suy; trầm cảm lão suy; trầm cảm ở trẻ em và vị thành niên; trầm cảm gây ra bởi các thuốc như interferon, v.v.); tình trạng trầm cảm gây ra bởi sự rối loạn điều chỉnh, trạng thái lo âu gây ra bởi sự rối loạn điều chỉnh, trạng thái lo âu gây ra bởi các bệnh khác nhau [ví dụ: các rối loạn thần kinh (chấn thương đầu, nhiễm trùng não, và tổn thương tai trong); các rối loạn tim mạch (suy tim và loạn nhịp tim); các rối loạn nội tiết (tăng năng tuyến thượng thận và tăng năng tuyến giáp); và các rối loạn hô hấp (hen và bệnh phổi tắc nghẽn mãn tính)], rối loạn lo âu lan tỏa, ám ảnh sợ hãi (ví dụ, chứng sợ khoảng rộng, ám sợ xã hội, ám ảnh sợ hãi đơn giản, ám ảnh sợ hãi xã hội, rối loạn trạng thái lo âu sợ xã hội, hội chứng đỏ mặt, ám ảnh sợ người, chứng sợ nơi cao, chứng sợ chữa răng,

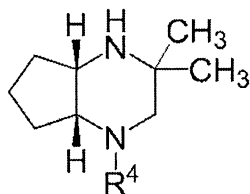
chứng sợ bị chích hoặc kim tiêm, ám ảnh sợ hãi đặc trưng, ám ảnh sợ hãi đơn giản, ám ảnh sợ hãi động vật, chứng sợ bị giam giữ, chứng sợ đêm tối và ám ảnh sợ lo âu), rối loạn ám ảnh cưỡng chế, rối loạn hoảng sợ, rối loạn stress sau sang chấn, hội chứng stress cấp, rối loạn bệnh tương, rối loạn quên phân ly, rối loạn nhân cách tránh né, rối loạn ám ảnh cơ thể, các rối loạn ăn uống (ví dụ, chán ăn tâm thần và háu ăn tâm thần), béo phì, phụ thuộc hóa chất (ví dụ, nghiện rượu, cocain, heroin, phenobarbital, nicotin, và benzodiazepin), đau (ví dụ, đau kinh niên, đau do căn nguyên tâm lý, đau do căn nguyên thần kinh, đau chi ảo, đau dây thần kinh sau ecpet, hội chứng chấn thương vùng cổ, đau do tổn thương tủy sống (SCI), đau dây thần kinh sinh ba, bệnh thần kinh do đái đường), đau cơ xơ hóa (FMS), bệnh Alzheimer, thiếu trí nhớ (ví dụ, sa sút trí tuệ, rối loạn trí nhớ, và suy giảm nhận thức do tuổi tác (ARCD)), bệnh Parkinson (ví dụ, các triệu chứng không thuộc vận động / tâm thần, sa sút trí tuệ trong bệnh Parkinson, hội chứng Parkinson do thuốc an thần, và rối loạn vận động muộn), các bệnh chân không nghỉ, các rối loạn nội tiết (ví dụ, tăng prolactin huyết), co thắt mạch máu (nhất là hệ mạch máu não), mất điều hòa tiểu não, các rối loạn dạ dày – ruột (bao gồm cả những thay đổi về bài tiết và vận động), các hội chứng âm tính của tâm thần phân liệt, hội chứng tiền kinh nguyệt, đái dầm do stress, rối loạn Tourette, rối loạn tăng động giảm chú ý (ADHD), tự kỷ, hội chứng Asperger, rối loạn kiểm soát xung lực, chứng giật râu tóc, xung động ăn cắp, rối loạn nghiện cờ bạc, đau đầu từng chuỗi, nhức nửa đầu, đau nửa đầu kịch phát kinh niên, hội chứng mệt mỏi kinh niên, xuất tinh sớm, bất lực nam giới, cơn ngủ kịch phát, cơn ngủ lịm tiên phát, chứng mất ngủ trương lực, hội chứng ngưng thở khi ngủ và đau đầu (kết hợp với bệnh lý mạch máu).

Ví dụ thực hiện sáng chế

Sau đây, sáng chế sẽ được mô tả cụ thể hơn nữa tham chiếu các ví dụ tham khảo, các ví dụ, và các thử nghiệm được lý. Các cấu trúc hóa học của các chất nền triệt quang và các dạng hoạt quang được chỉ rõ, ví dụ, như được thể hiện dưới đây.

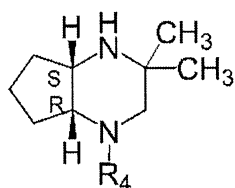
Chất nền triệt quang

Cấu hình tương đối



Dạng hoạt quang

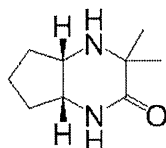
Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ tham khảo 1

Sự tạo ra cis-3,3-dimetyloctahydroxycyclopentapyrazin-2-on

Cấu hình tương đối



90% axeton xyanohydrin (9,79g, 104mmol) được bổ sung vào dung dịch nước (100mL) của cis-xyclopentan-1,2-diamin (9,88g, 98,6mmol) ở nhiệt độ trong phòng, và hỗn hợp được khuấy trong điều kiện hồi lưu trong thời gian 16 giờ. Dung môi được loại ra khỏi hỗn hợp phản ứng trong điều kiện áp suất giảm, tiếp theo bằng quá trình đồng sôi với ethanol. Phần cặn thu được được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột silicagel (metylen clorua/metanol=1/10) để thu được cis-3,3-dimetyloctahydroxycyclopentapyrazin-2-on (5,00g, 30%) ở dạng bột màu trắng.

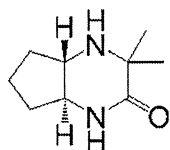
$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 1,20(1 H,brs), 1,34(3 H,s), 1,39(3 H,s), 1,40-2,20(6 H,m), 3,50-3,70(2 H,m), 5,89(1 H,brs).

Các hợp chất của các ví dụ tham khảo từ 2 đến 12 thể hiện dưới đây được tạo ra theo cách tương tự như trong ví dụ tham khảo 1 sử dụng các nguyên liệu khởi đầu thích hợp.

Ví dụ tham khảo 2

Trans-3,3-dimethyloctahydroxyclopentapyrazin-2-on

Cấu hình tương đối

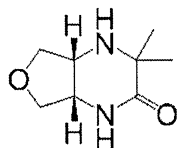


$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 1,26-1,55(9 H,m), 1,75-2,00(4 H,m), 2,85-3,02(1 H,m), 3,05-3,20(1 H,m), 6,02(1 H,brs).

Ví dụ tham khảo 3

Cis-3,3-dimethylhexahydrofuro[3,4-b]pyrazin-2-on

Cấu hình tương đối

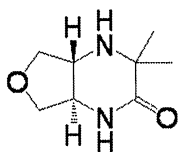


$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 1,37(3H,s), 1,40(3H,s), 1,50-1,85(1H,br), 3,73-4,10(6H,m), 6,02-6,22(1H,br).

Ví dụ tham khảo 4

Trans-3,3-dimethylhexahydrofuro[3,4-b]pyrazin-2-on

Cấu hình tương đối

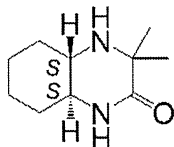


$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 1,38-1,43 (1H, br), 1,44 (3H, s), 1,47 (3H, s), 3,38-3,52 (1H, m), 3,52-3,65 (3H, m), 4,00-4,14 (2H, m), 6,28-6,45 (1H, br).

Ví dụ tham khảo 5

(4a*S*,8a*S*)-3,3-dimetyloctahydroquinoxalin-2-on

Cấu hình tuyệt đối

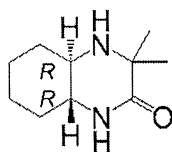


$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 1,14-1,37 (6H, m), 1,38 (3H, s), 1,42 (3H, s), 1,69 (1H, brs), 1,74-1,84 (2H, m), 2,57-2,65 (1H, m), 2,96-3,04 (1H, m), 5,61(1H,s)

Ví dụ tham khảo 6

(4a*R*,8a*R*)-3,3-dimetyloctahydroquinoxalin-2-on

Cấu hình tuyệt đối

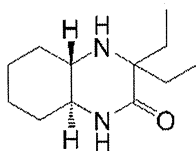


$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 1,14-1,37 (6H, m), 1,38 (3H, s), 1,42 (3H, s), 1,63 (1H, brs), 1,73-1,83 (2H, m), 2,57-2,66 (1H, m), 2,95-3,04 (1H, m), 5,55 (1H,s)

Ví dụ tham khảo 7

Trans-3,3-dietyloctahydroquinoxalin-2-on

Cấu hình tương đối

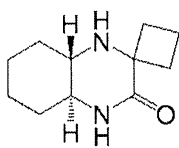


$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 0,92 (3H, t, $J = 7,5$ Hz), 0,93 (3H, t, $J = 7,3$ Hz), 1,13-1,49 (7H, m), 1,60-1,99 (6H, m), 2,55-2,60 (1H, m), 2,91-3,00 (1H, m), 5,69(1H, brs)

Ví dụ tham khảo 8

Trans-octahydro-1'H-spiro[xyclobutan-1,2'-quinoxalin]-3'-on

Cấu hình tương đối

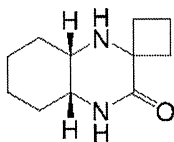


$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 1,14-1,46 (4H, m), 1,70-2,17 (9H, m), 2,43-2,52 (1H, m), 2,55-2,66 (1H, m), 2,78-2,88 (1H, m), 2,97-3,06 (1H, m), 5,65 (1H, brs)

Ví dụ tham khảo 9

Cis-octahydro-1'H-spiro[xyclobutan-1,2'-quinoxalin]-3'-on

Cấu hình tương đối

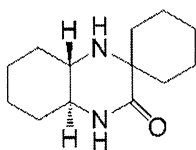


$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 1,1-1,3 (1H, m), 1,35-2,15 (12H, m), 2,5-2,6 (1H, m), 2,75-2,85 (1H, m), 3,15-3,3 (2H, m), 5,65(1H, br).

Ví dụ tham khảo 10

Trans-octahydro-1'H-spiro[xyclohexan-1,2'-quinoxalin]-3'-on

Cấu hình tương đối

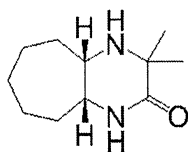


$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 1,18-1,88 (18H, m), 2,03-2,13 (1H, m), 2,47-2,58 (1H, m), 2,92-3,00 (1H, m), 5,59 (1H, s)

Ví dụ tham khảo 11

Cis-3,3-dimethyldecahydroxycloheptapyrazin-2-on

Cấu hình tương đối

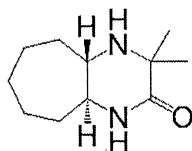


$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 1,12-2,00 (16 H, m), 2,03-2,20 (1H, m), 3,35-3,55 (2H, m), 5,88 (1H, brs).

Ví dụ tham khảo 12

Trans-3,3-dimethyldecahydrocycloheptapyrazin-2-on

Cấu hình tương đối

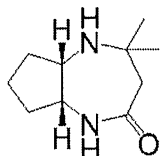


$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 1,35 (3H, s), 1,39 (3H, s), 1,42-1,90 (11H, m), 2,73-2,85 (1H, m), 3,13-3,26 (1H, m), 5,51 (1H, brs).

Ví dụ tham khảo 13

Sự tạo ra cis-4,4-dimethyloctahydrocyclopenta[b][1,4]diazepin-2-on

Cấu hình tương đối



Huyền phù toluen (200mL) của cis-xyclopentan-1,2-diamin (19,7g, 197mmol) và axit 3-metyl-2-butenic (19,7g, 197mmol) được khuấy trong điều kiện hồi lưu trong thời gian 24 giờ trong các điều kiện đồng sôi sử dụng thiết bị Dean-Stark. Hỗn hợp phản ứng được làm lạnh xuống nhiệt độ trong phòng và sau đó được cô trong điều kiện áp suất giảm, và tinh thể lỏng thu được tập hợp bằng cách lọc. Tinh thể thu được được rửa bằng ete và sau đó được làm khô để thu được cis-4,4-dimethyloctahydrocyclopenta[b][1,4]diazepin-2-on (8,60g, 24%) ở dạng bột màu nâu nhạt.

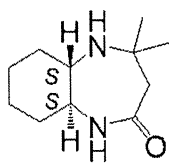
$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 1,10-1,56 (10 H, m), 1,65-1,80 (1 H, m), 2,02-2,30 (3 H, m), 2,60 (1 H, d, $J = 12,8$ Hz), 3,18-3,37 (1 H, m), 3,68-3,85 (1 H, m), 5,73 (1H, brs).

Các hợp chất của các ví dụ tham khảo 14 và 15 dưới đây được tạo ra theo cách tương tự như trong ví dụ tham khảo 13 sử dụng các nguyên liệu khởi đầu thích hợp.

Ví dụ tham khảo 14

(5a*S*,9a*S*)-4,4-dimethyldecahydro[*b*][1,4]diazepin-2-on

Cấu hình tuyệt đối

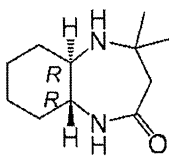


$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 1,00-1,45 (11H, m), 1,63-1,83 (3H, m), 1,83-2,00 (1H, m), 2,31-2,43 (1H, m), 2,65-2,81 (2H, m), 3,00-3,16 (1H, m), 5,54-5,90 (1H, br).

Ví dụ tham khảo 15

(5a*R*,9a*R*)-4,4-dimethyldecahydro[*b*][1,4]diazepin-2-on

Cấu hình tuyệt đối

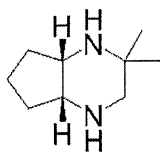


$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 1,02-1,36 (11H, m), 1,64-1,83 (3H, m), 1,83-1,97 (1H, m), 2,37 (1H, dd, $J = 2,4, 13,9$ Hz), 2,66-2,81 (2H, m), 3,01-3,15 (1H, m), 5,75-5,92 (1H, brs).

Ví dụ tham khảo 16

Sự tạo ra cis-2,2-dimetyloctahydro-1H-xyclopenta[*b*]pyrazin

Cấu hình tương đối



Lithi nhôm hydrua (541mg, 14,3mmol) được bổ sung vào dung dịch dioxan khan (40mL) của cis-3,3-dimetyloctahydroxyclopentapyrazin-2-on (2,00g, 11,9mmol) cùng với khuấy ở nhiệt độ trong phòng, và hỗn hợp được gia nhiệt từ từ và được khuấy trong thời gian 10 phút trong điều kiện hồi lưu. Hỗn hợp phản ứng được làm lạnh xuống nhiệt độ nước đá. Sau đó, natri sulfat decahydrat được bổ sung vào đó theo các phần nhỏ cho tới khi không có khí hydro nào được phát sinh. Sau đó, hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong thời gian 1 giờ. Chất không hòa tan được lọc qua xelit, và phần dịch lọc được cô đặc. Phần cặn thu được được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột silicagel kiềm (etyl axetat/hexan=1/10) để thu được cis-2,2-dimetyloctahydro-1H-xyclopenta[b]pyrazin (1,67g, 91%) ở dạng dầu màu vàng nhạt.

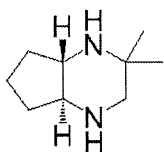
$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 1,04 (3 H, s), 1,16 (3 H, s), 1,28-2,02 (8 H, m), 2,37 (1 H, d, $J = 12,9$ Hz), 2,70 (1 H, d, $J = 12,9$ Hz), 3,00-3,15 (1 H, m), 3,15-3,32 (1 H, m).

Các hợp chất của các ví dụ tham khảo từ 17 đến 34 dưới đây được tạo ra theo cách tương tự như trong ví dụ tham khảo 16 sử dụng các nguyên liệu khởi đầu thích hợp.

Ví dụ tham khảo 17

Trans-2,2-dimetyloctahydro-1H-xyclopenta[b]pyrazin

Cấu hình tương đối

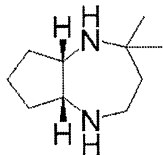


$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 1,08 (3H, s), 1,19-1,92 (11H, m), 2,15-2,30 (1H, m), 2,55-2,74 (2H, m), 2,77 (1H, d, $J = 12,2$ Hz).

Ví dụ tham khảo 18

Cis-2,2-dimethyldecahydrocyclopenta[b][1,4]diazepin

Cấu hình tương đối

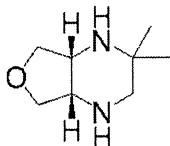


$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 1,11 (3H, s), 1,14 (3H, s), 1,15-1,45 (6H, m), 1,55-1,67 (1H, m), 1,67-1,77 (1H, m), 1,97-2,12 (2H, m), 2,68-2,80 (1H, m), 2,98-3,11 (2H, m), 3,16-3,28 (1H, m).

Ví dụ tham khảo 19

Cis-2,2-dimethyloctahydrofuro[3,4-b]pyrazin

Cấu hình tương đối

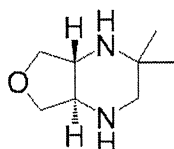


$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 1,08 (3H, s), 1,18 (3H, s), 1,40-1,80 (2H, br), 2,41 (1H, d, $J = 13,2$ Hz), 2,69 (1H, d, $J = 13,2$ Hz), 3,33-3,43 (1H, m), 3,43-3,55 (1H, m), 3,63-3,72 (1H, m), 3,75-3,96 (3H, m).

Ví dụ tham khảo 20

Trans-2,2-dimethyloctahydrofuro[3,4-b]pyrazin

Cấu hình tương đối

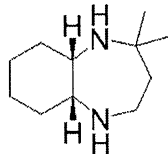


$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 1,13 (3H, s), 1,30 (3H, s), 1,44-1,65 (2H, m), 2,64-2,78 (2H, m), 2,83 (1H, d, $J = 12,2$ Hz), 3,11-3,22 (1H, m), 3,46 (1H, dd, $J = 7,3, 10,5$ Hz), 3,55 (1H, dd, $J = 7,4, 10,5$ Hz), 3,94 (1H, t, $J = 7,1$ Hz), 4,00 (1H, t, $J = 7,2$ Hz).

Ví dụ tham khảo 21

Cis-2,2-dimethyldecahydro-1H-benzo[b][1,4]diazepin

Cấu hình tương đối

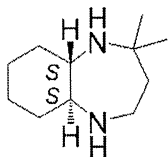


$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 1,08 (3H, s), 1,13 (3H, s), 1,18-1,84 (12H, m), 2,65-2,93 (3H, m), 3,14-3,22 (1H, m).

Ví dụ tham khảo 22

(5a*S*,9a*S*)-2,2-dimethyldecahydro-1H-benzo[b][1,4]diazepin

Cấu hình tuyệt đối

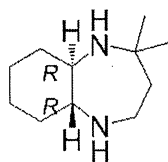


$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 1,00-1,35 (11H, m), 1,50-1,85 (7H, m), 2,20-2,31 (1H, m), 2,31-2,43 (1H, m), 2,79-2,90 (1H, m), 2,90-3,04 (1H, m).

Ví dụ tham khảo 23

(5a*R*,9a*R*)-2,2-dimethyldecahydro-1H-benzo[b][1,4]diazepin

Cấu hình tuyệt đối

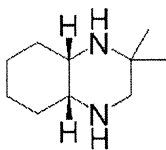


$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 1,00-1,35 (11H, m), 1,50-1,85 (7H, m), 2,20-2,31 (1H, m), 2,31-2,43 (1H, m), 2,79-2,90 (1H, m), 2,90-3,04 (1H, m).

Ví dụ tham khảo 24

Cis-2,2-dimethyldecahydroquinoxalin

Cấu hình tương đối

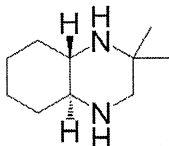


$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 1,06 (3H, s), 1,19 (3H, s), 1,20-1,40 (5H, m), 1,53-1,60 (3H, m), 1,70-1,77 (1H, m), 1,92-2,15 (1H, m), 2,36 (1H, d, $J = 12,7$ Hz), 2,66-2,72 (1H, m), 2,72 (1H, d, $J = 12,7$ Hz), 3,16-3,28 (1H, m).

Ví dụ tham khảo 25

Trans-2,2-dimethyldecahydroquinoxalin

Cấu hình tương đối

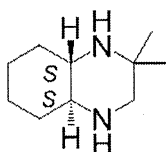


$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 1,05 (3H, s), 1,08-1,74 (10H, m), 1,23 (3H, s), 2,02-2,12 (1H, m), 2,40-2,50 (1H, m), 2,60 (1H, d, $J = 12,1$ Hz), 2,73 (1H, d, $J = 12,1$ Hz).

Ví dụ tham khảo 26

(4aS,8aS)-2,2-dimethyldecahydroquinoxalin

Cấu hình tuyệt đối

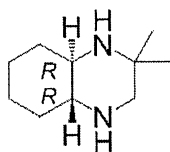


$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 1,01-1,43 (6H, m), 1,05 (3H, s), 1,23 (3H, s), 1,58-1,63 (1H, m), 1,68-1,74 (3H, m), 2,03-2,19 (1H, m), 2,40-2,49 (1H, m), 2,60 (1H, d, $J = 12,1$ Hz), 2,73 (1H, d, $J = 12,1$ Hz).

Ví dụ tham khảo 27

(4aR,8aR)-2,2-dimethyldecahydroquinoxalin

Cấu hình tuyệt đối

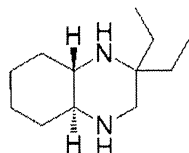


$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 1,05 (3H, s), 1,09-1,56 (6H, m), 1,23 (3H, s), 1,58-1,63 (1H, m), 1,66-1,75 (3H, m), 2,03-2,12 (1H, m), 2,41-2,50 (1H, m), 2,61 (1H, d, $J = 12,1$ Hz), 2,75 (1H, d, $J = 12,1$ Hz).

Ví dụ tham khảo 28

Trans-2,2-diethyldecahydroquinoxalin

Cấu hình tương đối

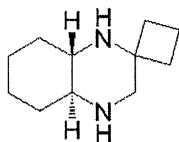


$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 0,79 (3H, t, $J = 7,5$ Hz), 0,81 (3H, t, $J = 7,5$ Hz), 0,86-1,02 (1H, m), 1,08-1,40 (8H, m), 1,47-1,60 (2H, m), 1,67-1,87 (3H, m), 2,06-2,15 (1H, m), 2,33-2,42 (1H, m), 2,57 (1H, d, $J = 12,1$ Hz), 2,81 (1H, d, $J = 12,1$ Hz).

Ví dụ tham khảo 29

Trans-octahydro-1'H-spiro[xyclobutan-1,2'-quinoxalin]

Cấu hình tương đối

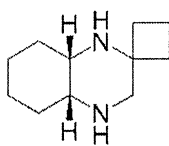


MS(M+1) 181

Ví dụ tham khảo 30

Cis-octahydro-1'H-spiro[xyclobutan-1,2'-quinoxalin]

Cấu hình tương đối

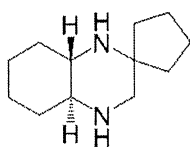


MS (M+1) 181

Ví dụ tham khảo 31

Trans-octahydro-1'H-spiro[xyclopentan-1,2'-quinoxalin]

Cấu hình tương đối

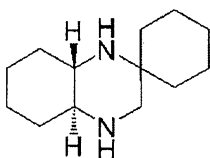


$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 1,10-1,97 (18H, m), 2,10-2,21 (1H, m), 2,29-2,38 (1H, m), 2,71 (1H, d, $J = 12,2$ Hz), 2,76 (1H, d, $J = 12,2$ Hz).

Ví dụ tham khảo 32

Trans-octahydro-1'H-spiro[xyclohexan-1,2'-quinoxalin]

Cấu hình tương đối

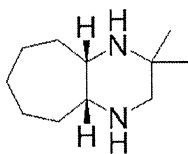


$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 1,12-1,76 (20H, m), 2,12-2,20 (1H, m), 2,44-2,53 (1H, m), 2,55 (1H, d, $J = 12,2$ Hz), 2,98 (1H, d, $J = 12,2$ Hz).

Ví dụ tham khảo 33

Cis-2,2-dimetyldecahydro-1H-xyclohepta[b]pyrazin

Cấu hình tương đối

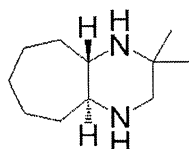


$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 1,00-2,02 (18H, m), 2,42 (1H, d, $J = 12,4$ Hz), 2,58 (1H, d, $J = 12,4$ Hz), 2,75-2,86 (1H, m), 3,13-3,25 (1H, m).

Ví dụ tham khảo 34

Trans-2,2-dimethyldecahydro-1H-xyclohepta[b]pyrazin

Cấu hình tương đối

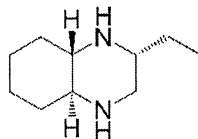


$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 1,05 (3H, s), 1,21 (3H, s), 1,23-1,80 (12H, m), 2,09-2,20 (1H, m), 2,46-2,60 (2H, m), 2,68 (1H, d, $J = 11,8$ Hz).

Ví dụ tham khảo 35

Sự tạo ra (2RS,4aSR,8aSR)-2-ethyldecahydroquinoxalin

Cấu hình tương đối



Diclo(pentametylxcyclopentadienyl)iridi (III) dime (70mg, 0,090mmol) và natri bicarbonat (73mg, 0,87mmol) được bổ sung vào dung dịch nước (20mL) của trans-xyclohexan-1,2-diamin (2,00g, 17,5mmol) và ($\pm$)-1,2-butandiol (1,69mL, 18,4mmol) cùng với khuấy ở nhiệt độ trong phòng. Bước loại khí và thay thế argon được lặp lại 3 lần, và hỗn hợp sau đó được khuấy trong thời gian 24 giờ trong điều kiện hồi lưu. Hỗn hợp phản ứng được cô đặc trong điều kiện áp suất giảm. Phần cặn thu được được tinh chế bằng phương

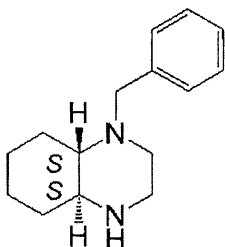
pháp sắc ký cột silicagel kiềm (metylen clorua/metanol) để thu được (2R*,4aS*,8aS*)-2-ethyldecahydroquinoxalin (2,03g, hiệu suất: 69%) ở dạng rắn màu vàng.

$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 0,92 (3H, t, $J = 7,5$ Hz), 1,10-1,60 (7H, m), 1,64-1,83 (5H, m), 2,16-2,31 (2H, m), 2,44 (1H, dd, $J = 11,5, 10,4$ Hz), 2,58-2,67 (1H, m), 3,02 (1H, dd, $J = 11,5, 2,7$ Hz).

Ví dụ tham khảo 36

Sự tạo ra (4aS,8aS)-1-benzyldecahydroquinoxalin

Cấu hình tuyệt đối



Benzaldehyt (3,05mL, 30,0mmol) được bổ sung vào dung dịch metanol (300mL) của (1S,2S)-xyclohexan-1,2-diamin (3,43g, 30,0mmol) cùng với khuấy ở nhiệt độ trong phòng, và hỗn hợp được khuấy qua đêm ở cùng nhiệt độ. Hỗn hợp phản ứng được làm lạnh xuống nhiệt độ 0°C . Natri bohydrua (2,27g, 60,0mmol) được bổ sung vào đó, và hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ 0°C trong thời gian 2 giờ. Nước (30mL) được bổ sung vào hỗn hợp phản ứng, và sản phẩm được chiết hai lần bằng metylen clorua (50mL). Các lớp hữu cơ được kết hợp và được làm khô trên magie sulfat, và dung môi sau đó được chưng cất trong điều kiện áp suất giảm. Phần cặn thu được được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột silicagel kiềm (etyl axetat/hexan) để thu được (1S,2S)-N-benzylxyclohexan-1,2-diamin (Mã số cas là 207450-11-1) (2,95g, hiệu suất: 48%) ở dạng dầu màu vàng nhạt.

Hợp chất (1S,2S)-N-benzylxyclohexan-1,2-diamin thu được (2,90g, 14,2mmol) được hòa tan trong metylen clorua (284nL). Natri hydrua 60%

(1,99g, 49,7mmol) được bổ sung vào dung dịch kết hợp với làm lạnh bằng nước đá và khuấy trong môi trường nitơ. Sau thời gian 5 phút, (2-bromoethyl)diphenylsulfoni triflometansulfonat (6,92g, 15,6mmol) được bổ sung vào hỗn hợp phản ứng kết hợp với làm lạnh bằng nước đá và khuấy, và hỗn hợp được khuấy qua đêm ở nhiệt độ trong phòng. Dung dịch nước bão hòa của amoni clorua được bổ sung từng giọt theo các phần nhỏ vào hỗn hợp phản ứng, và sản phẩm sau đó được chiết hai lần bằng metylen clorua (100mL). Các lớp hữu cơ được kết hợp và được làm khô trên magie sulfat, và dung môi sau đó được chưng cất trong điều kiện áp suất giảm. Phần cặn thu được được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột NH-silicagel (etyl axetat/hexan) để thu được (4aS,8aS)-1-benzyldecahydroquinoxalin (2,28g, 70%) ở dạng rắn màu nâu nhạt.

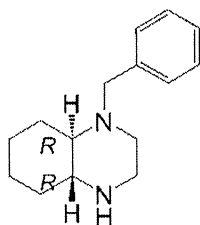
$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 1,05-1,4 (4H, m), 1,50 (1H, br), 1,6-1,9 (4H, m), 2,05-2,2 (1H, m), 2,2-2,3 (1H, m), 2,4-2,5 (1H, m), 2,65-2,75 (1H, m), 2,8-2,95 (2H, m), 3,14 (1H, d, $J = 13,4\text{Hz}$), 4,11 (1H, d, $J = 13,4\text{Hz}$), 7,15-7,4 (5H, m).

Các hợp chất của các ví dụ tham khảo từ 37 đến 39 dưới đây được tạo ra theo cách tương tự như trong ví dụ tham khảo 36 sử dụng các nguyên liệu khởi đầu thích hợp.

Ví dụ tham khảo 37

(4aS,8aS)-1-benzyldecahydroquinoxalin

Cấu hình tuyệt đối

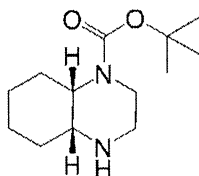


$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 1,05-1,4 (4H, m), 1,50 (1H, br), 1,6-1,9 (4H, m), 2,05-2,2 (1H, m), 2,2-2,3 (1H, m), 2,4-2,5 (1H, m), 2,65-2,75 (1H, m), 2,8-2,95 (2H, m), 3,13 (1H, d, $J = 13,4\text{Hz}$), 4,11 (1H, d, $J = 13,4\text{Hz}$), 7,15-7,4 (5H, m).

Ví dụ tham khảo 38

tert-butyl este của axit cis-decahydroquinoxalin-1-cacboxylic

Cấu hình tương đối

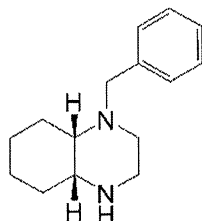


$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 1,05-1,15 (1H, m), 1,2-1,75 (19H, m), 1,75-1,85 (1H, m), 1,85-2,2 (1H, m), 3,70 (1H, br), 4,83(1H, br).

Ví dụ tham khảo 39

Cis-1-benzyldecahydroquinoxalin

Cấu hình tương đối

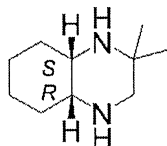


$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 1,0-2,0 (10H, m), 2,2-2,4 (1H, m), 2,45-2,7 (2H, m), 2,75-3,1 (2H, m), 3,63 (2H, br), 7,05-7,45 (5H, m).

Ví dụ tham khảo 40

Sự tạo ra (4aR,8aS)-2,2-dimethyldecahydroquinoxalin

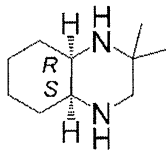
Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ tham khảo 41

(4aS,8aR)-2,2-dimethyldecahydroquinoxalin

Cấu hình tuyệt đối



Monohydrat axit (-)-dibenzoyl-L-tartaric (13,8g, 36,7mmol) trong etanol (140mL) được bổ sung vào dung dịch etanol (140mL) của cis-2,2-dimethyldecahydroquinoxalin (13,7g, 81,4mmol) cùng với khuấy ở nhiệt độ trong phòng. Hỗn hợp phản ứng được khuấy trong thời gian 30 phút trong điều kiện hồi lưu và được làm lạnh xuống nhiệt độ trong phòng, và tinh thể lắng tua màu trắng sau đó được tập hợp bằng cách lọc. Tinh thể thu được được rửa bằng etanol (20mL) và sau đó được làm khô để thu được chất rắn màu trắng <1> (13,1g). Phần dịch lọc và dịch rửa thu được trong khi thu chất rắn <1> được cô trong điều kiện áp suất giảm. Phần cặn thu được được hòa tan trong etanol (100mL). Dung dịch etanol (130mL) của (+)-axit dibenzoyl-D-tartaric (13,1g, 36,6mmol) được bổ sung cùng với khuấy ở nhiệt độ trong phòng vào dung dịch, và tinh thể lắng tua được tập hợp bằng cách lọc. Tinh thể thu được được rửa bằng etanol (20mL) và sau đó được làm khô để thu được chất rắn màu nâu nhạt <2> (16,6g).

Huyền phù metanol (130mL)/nước (10mL) của chất rắn <1> được khuấy trong thời gian 30 phút trong điều kiện hồi lưu. Sau đó, hỗn hợp phản ứng được làm lạnh xuống nhiệt độ trong phòng, và tinh thể lắng tua được tập hợp bằng cách lọc. Tinh thể lắng tua được rửa bằng metanol (10mL) và sau đó được làm khô để thu được (4aR,8aS)-2,2-dimethyldecahydroquinoxalin dibenzoyl-L-tartrat (11,4g, 21,6mmol) ở dạng rắn màu trắng (cấu hình tuyệt đối của cis-2,2-dimethyldecahydroquinoxalin được xác định bằng phương pháp phân tích tinh thể học tia X của chất rắn màu trắng). Chất rắn này được hòa tan trong dung dịch nước natri hydroxit 1N (44mL), và sản phẩm được chiết bằng ete (100mL) ba lần và bằng metylen clorua (100mL) ba lần. Các lớp chiết hữu cơ được kết hợp, được làm khô trên magie sulfat, và sau đó được cô trong điều kiện áp suất giảm

đề thu được (4aR,8aS)-2,2-dimethyldecahydroquinoxalin (3,44g, hiệu suất: 25%) ở dạng rắn màu trắng.

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 1,06 (3H, s), 1,20 (3H, s), 1,2-1,4 (4H, m), 1,45-1,95 (5H, m), 1,95-2,15 (1H, m), 2,36 (1H, d, $J = 12,7\text{Hz}$), 2,65-2,75 (2H, m), 3,15-3,25 (1H, m).

Huyền phù metanol (130mL)/nước (10mL) của chất rắn <2> được khuấy trong thời gian 1 giờ trong điều kiện hồi lưu. Sau đó, hỗn hợp phản ứng được làm lạnh xuống nhiệt độ trong phòng, và tinh thể lắng tủa được tập hợp bằng cách lọc. Tinh thể lắng tủa được rửa bằng metanol (10mL) và sau đó được làm khô để thu được (4aS,8aR)-2,2-dimethyldecahydroquinoxalin dibenzoyl-D-tartrat (16,0g, 30,4mmol) ở dạng rắn màu trắng. Chất rắn này được hòa tan trong dung dịch nước natri hydroxit 1N (65mL), và sản phẩm được chiết bằng metylen clorua (100mL) ba lần. Các lớp chiết hữu cơ được kết hợp, được làm khô trên magie sulfat, và sau đó được cô trong điều kiện áp suất giảm để thu được (4aS,8aR)-2,2-dimethyldecahydroquinoxalin (4,63g, hiệu suất: 34%) ở dạng rắn màu nâu nhạt.

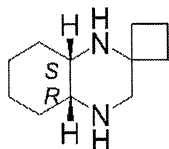
$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 1,06 (3H, s), 1,19 (3H, s), 1,2-1,45 (5H, m), 1,45-1,65 (3H, m), 1,65-1,8 (1H, m), 1,95-2,15 (1H, m), 2,36 (1H, d, $J = 12,7\text{Hz}$), 2,6-2,8 (2H, m), 3,15-3,25 (1H, m).

Các hợp chất của các ví dụ tham khảo từ 42 đến 45 dưới đây được tạo ra theo cách tương tự như trong Các ví dụ tham khảo 40 và 41 sử dụng các nguyên liệu khởi đầu thích hợp.

Ví dụ tham khảo 42

(4a'R,8a'S)-octahydro-1'H-spiro[xyclobutan-1,2'-quinoxalin]

Cấu hình tuyệt đối



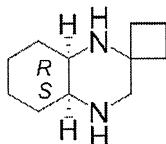
MS (M+1) 181

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δppm : 1,20-2,20 (16H, m), 2,69 (1H, d, $J = 12,4$ Hz), 2,72-2,82 (1H, m), 2,87-3,02 (2H, m).

Ví dụ tham khảo 43

(4a'S,8a'R)-octahydro-1'H-spiro[xyclobutan-1,2'-quinoxalin]

Cấu hình tuyệt đối



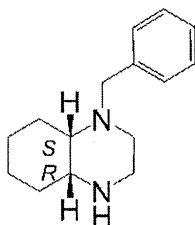
MS(M+1) 181

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δppm : 1,20-2,20 (16H, m), 2,68 (1H, d, $J = 12,5$ Hz), 2,72-2,82 (1H, m), 2,87-3,02 (2H, m).

Ví dụ tham khảo 44

(4aR,8aS)-1-benzyldecahydroquinoxalin

Cấu hình tuyệt đối

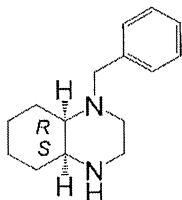


$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 1,0-1,25 (1H, m), 1,25-1,65 (5H, m), 1,65-2,05 (3H, m), 2,2-2,4 (1H, m), 2,45-2,7 (2H, m), 2,75-3,1 (3H, m), 3,63 (2H, br), 7,15-7,4 (5H, m).

Ví dụ tham khảo 45

(4aS,8aR)-1-benzyldecahydroquinoxalin

Cấu hình tuyệt đối

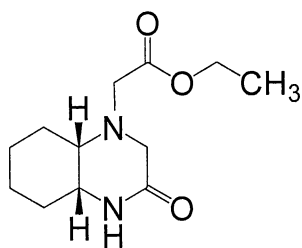


$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 1,05-1,25 (1H, m), 1,25-1,65 (5H, m), 1,65-2,05 (3H, m), 2,2-2,4 (1H, m), 2,5-2,7 (2H, m), 2,75-3,1 (3H, m), 3,63 (2H, br), 7,15-7,4 (5H, m).

Ví dụ tham khảo 46

Sự tạo ra etyl este của axit (trans-3-oxodecahydroquinoxalin-1-yl)acetic

Cấu hình tương đối



Trans-xyclohexan-1,2-diamin (3,00g, 26,3mmol) được pha loãng bằng ethanol (15mL). Bromoethyl axetat (6,12mL, 55,2mmol) được bổ sung từng giọt kết hợp với làm lạnh bằng nước đá vào dung dịch, và hỗn hợp sau đó được khuấy qua đêm ở nhiệt độ trong phòng.

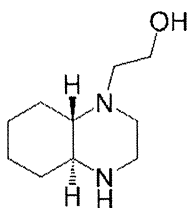
Nước được bổ sung vào dung dịch phản ứng, và hỗn hợp được khuấy. Sản phẩm được chiết bằng metylen clorua. Lớp hữu cơ được rửa bằng nước muối bão hòa và được làm khô trên magie sulfat, tiếp theo bằng lọc. Phần dịch lọc được cô đặc trong điều kiện áp suất giảm. Phần cặn thu được được tách và tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột silicagel (metylen clorua/metanol) để thu được etyl este của axit (trans-3-oxodecahydroquinoxalin-1-yl)acetic (2,35g, hiệu suất: 74,4%) ở dạng hạt rắn màu da cam.

$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 1,13-1,41 (4H, m), 1,28 (3H, t, $J = 7,1$ Hz), 1,72-1,97 (4H, m), 2,59-2,67 (1H, m), 3,06-3,13 (1H, m), 3,35 (1H, d, $J = 17,4$ Hz), 3,48 (1H, d, $J = 16,8$ Hz), 3,52 (1H, d, $J = 17,4$ Hz), 3,60 (1H, d, $J = 16,8$ Hz), 4,17 (2H, q, $J = 7,1$ Hz), 6,79 (1H, brs).

Ví dụ tham khảo 47

Sự tạo ra 2-(trans-decahydroquinoxalin-1-yl)ethanol

Cấu hình tương đối



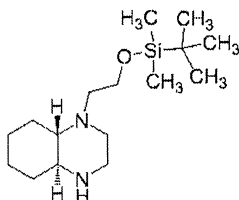
Lithi nhôm hydrua (1,00g, 26,4mmol) được tạo huyền phù trong dioxan khan (40mL). Dung dịch dioxan khan (10mL) của etyl este của axit (trans-3-oxodecahydroquinoxalin-1-yl)axetic (2,35g, 9,78mmol) được bổ sung từng giọt cùng với khuấy ở nhiệt độ trong phòng vào huyền phù, và hỗn hợp sau đó được khuấy trong điều kiện hồi lưu trong thời gian 10 phút. Hỗn hợp phản ứng được làm lạnh trên nước đá, và natri sulfat decahydrat được bổ sung vào đó theo các phần nhỏ cho tới khi không có khí được phát sinh. Hỗn hợp này được lọc qua xelit và được rửa bằng metylen clorua, và phần dịch lọc sau đó được cô trong điều kiện áp suất giảm để thu được 2-(trans-decahydroquinoxalin-1-yl)etanol (1,74g, hiệu suất: 97%) ở dạng dầu màu nâu.

$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 0,95-1,11 (1H, m), 1,15-1,44 (3H, m), 1,68-1,80 (5H, m), 1,85-1,94 (1H, m), 2,05-2,44 (4H, m), 2,87-2,97 (3H, m), 3,04-3,16 (1H, m), 3,46-3,54 (1H, m), 3,60-3,69 (1H, m).

Ví dụ tham khảo 48

Sự tạo ra trans-1-[2-(tert-butyldimetylsilyloxy)etyl]decahydroquinoxalin

Cấu hình tương đối



Triethylamin (4,61mL, 33,0mmol) và sau đó tert-butyldimetylsilyl clorua (4,27g, 28,3mmol) được bổ sung vào dung dịch metylen clorua (40mL) của 2-(trans-decahydroquinoxalin-1-yl)etanol (1,74g, 9,44mmol) kết hợp với làm lạnh bằng nước đá và khuấy, và hỗn hợp được khuấy qua đêm ở nhiệt độ trong

phòng. Nước (100mL) được bổ sung vào hỗn hợp phản ứng để kết thúc phản ứng. Sản phẩm được chiết bằng metylen clorua (100mL). Lớp hữu cơ được rửa bằng nước hai lần và bằng nước muối bão hòa một lần, sau đó được làm khô trên magie sulfat, và được cô trong điều kiện áp suất giảm. Phần cặn thu được được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột silicagel (metylen clorua/metanol) để thu được trans-1-[2-(tert-butyl dimethylsilyloxy)ethyl]decahydroquinoxalin (2,00g, hiệu suất: 71%) ở dạng dầu màu nâu nhạt.

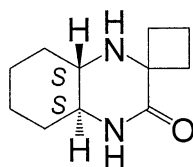
$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 0,06 (6H, s), 0,89 (9H, s), 0,98-1,36 (4H, m), 1,65-1,79 (4H, m), 1,85-1,95 (1H, m), 2,08-2,14 (1H, m), 2,24-2,39 (1H, m), 2,45-2,61 (2H, m), 2,79-3,03 (4H, m), 3,62-3,80 (2H, m).

Các hợp chất của các ví dụ tham khảo 50 và 51 dưới đây được tạo ra theo cách tương tự như trong ví dụ tham khảo 1 sử dụng các nguyên liệu khởi đầu thích hợp.

Ví dụ tham khảo 50

(4a'S,8a'S)-octahydro-1'H-spiro[xyclobutan-1,2'-quinoxalin]-3'-on

Cấu hình tuyệt đối

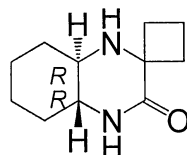


$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 0,99-1,38 (4H, m), 1,55-1,78 (5H, m), 1,78-1,94 (3H, m), 2,21-2,33 (2H, m), 2,48-2,59 (1H, m), 2,63 (1H, brs), 2,76-2,87 (1H, m), 7,36 (1H, s).

Ví dụ tham khảo 51

(4a'R,8a'R)-octahydro-1'H-spiro[xyclobutan-1,2'-quinoxalin]-3'-on

Cấu hình tuyệt đối



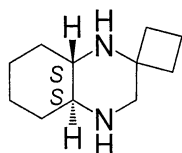
$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δppm : 0,97-1,36 (4H, m), 1,55-1,77 (5H, m), 1,77-1,92 (3H, m), 2,20-2,32 (2H, m), 2,47-2,57 (1H, m), 2,63 (1H, brs), 2,76-2,86 (1H, m), 7,36 (1H, s).

Các hợp chất của các ví dụ tham khảo 52 và 53 dưới đây được tạo ra theo cách tương tự như trong ví dụ tham khảo 16 sử dụng các nguyên liệu khởi đầu thích hợp.

Ví dụ tham khảo 52

(4a'S,8a'S)-octahydro-1'H-spiro[xyclobutan-1,2'-quinoxalin]

Cấu hình tuyệt đối

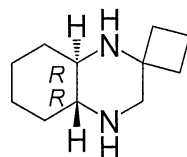


$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δppm : 1,05-1,90 (15H, m), 2,15-2,30 (3H, m), 2,69 (1H, dd, $J = 1,5, 12,2$ Hz), 3,01 (1H, d, $J = 12,2$ Hz).

Ví dụ tham khảo 53

(4a'R,8a'R)-octahydro-1'H-spiro[xyclobutan-1,2'-quinoxalin]

Cấu hình tuyệt đối

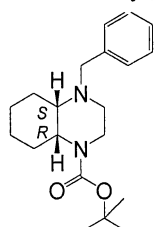


$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δppm : 1,05-1,91 (15H, m), 2,15-2,30 (3H, m), 2,69 (1H, d, $J = 12,2$ Hz), 3,01 (1H, d, $J = 12,2$ Hz).

Ví dụ tham khảo 54

Sự tạo ra (4aS,8aR)-tert-butyl 4-benzyldecahydroquinoxalin-1-carboxylat

Cấu hình tuyệt đối



Di-tert-butyl dicacbonat (1,70g, 7,79mmol) được bổ sung vào dung dịch MeOH (16mL) của (4aR,8aS)-1-benzyldecahydroquinoxalin (1,63g, 7,08mmol), và hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong thời gian 2 giờ. Dung môi được chưng cất, và phần cặn sau đó được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột silicagel kiềm (Hex-AcOEt) để thu được (4aS,8aR)-tert-butyl 4-benzyldecahydroquinoxalin-1-cacboxylat (2,38g, hiệu suất: định lượng) ở dạng dầu không màu.

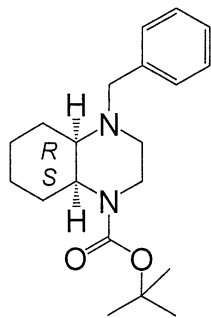
$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 1,26-1,66 (14H, m), 1,79-1,96 (2H, m), 2,14-2,33 (2H, m), 2,40-2,45 (1H, m), 2,66 (1H, brs), 2,86 (1H, d, $J = 13,2$ Hz), 3,03 (1H, brs), 3,50-4,10 (2H, br), 4,16 (1H, d, $J = 13,2$ Hz), 7,21-7,36 (5H, m).

Hợp chất của ví dụ tham khảo 55 dưới đây được tạo ra theo cách tương tự như trong ví dụ tham khảo 54 sử dụng các nguyên liệu khởi đầu thích hợp.

Ví dụ tham khảo 55

(4aR,8aS)-tert-butyl 4-benzyldecahydroquinoxalin-1-cacboxylat

Cấu hình tuyệt đối

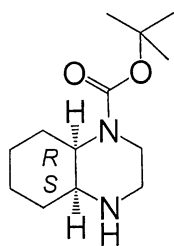


$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 1,26-1,66 (14H, m), 1,79-1,96 (2H, m), 2,14-2,33 (2H, m), 2,40-2,45 (1H, m), 2,65 (1H, brs), 2,86 (1H, d, $J = 13,2$ Hz), 3,03 (1H, brs), 3,51-4,10 (2H, br), 4,16 (1H, d, $J = 13,2$ Hz), 7,21-7,36 (5H, m).

Ví dụ tham khảo 56

Quy trình tạo ra (4aS,8aR)-tert-butyl decahydroquinoxalin-1-cacboxylat

Cấu hình tuyệt đối



Chất xúc tác Pearlman (0,24g) được bổ sung vào dung dịch EtOH (25mL) của (4aS,8aR)-tert-butyl 4-benzyldecahydroquinoxalin-1-cacboxylat (2,4g, 7,26mmol). Huyền phù này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong thời gian 1 giờ trong môi trường hydro. Chất xúc tác được lọc qua xelit, và phần cặn được rửa bằng EtOH. Sau đó, phần dịch lọc được cô đặc trong điều kiện áp suất giảm để thu được (4aS,8aR)-tert-butyl decahydroquinoxalin-1-cacboxylat (1,67g, hiệu suất: 96%) ở dạng dầu không màu.

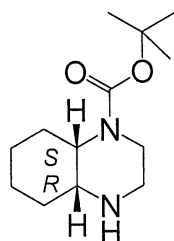
$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 1,16-1,53 (14H, m), 1,53-1,82 (3H, m), 1,83-2,00 (1H, m), 2,68-2,83 (1H, m), 2,85-3,10 (3H, m), 3,65-4,06 (2H, m).

Hợp chất của ví dụ tham khảo 57 dưới đây được tạo ra theo cách tương tự như trong ví dụ tham khảo 56 sử dụng các nguyên liệu khởi đầu thích hợp.

Ví dụ tham khảo 57

(4aR,8aS)-tert-butyl decahydroquinoxalin-1-cacboxylat

Cấu hình tuyệt đối

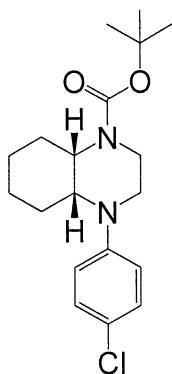


$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 1,18-1,55 (14H, m), 1,55-1,82 (3H, m), 1,85-2,00 (1H, m), 2,68-2,82 (1H, m), 2,85-3,10 (3H, m), 3,65-4,04 (2H, m).

Ví dụ tham khảo 58

Quy trình tạo ra cis tert-butyl 4-(4-clophenyl)decahydroquinoxalin-1-cacboxylat

Cấu hình tương đối



Huyền phù toluen (4mL) của cis tert-butyl decahydroquinoxalin-1-carboxylat (240mg, 0,999mmol), 1-bromo-4-clobenzen (211mg, 1,10mmol), Pd(OAc)₂ (11,2mg, 0,0499mmol), t-Bu₃P.HBF₄ (14,5mg, 0,0500mmol), và NaOt-Bu (135mg, 1,40mmol) được khuấy trong thời gian 5 giờ trong điều kiện hồi lưu trong môi trường nitơ. Dung dịch phản ứng được làm lạnh xuống nhiệt độ trong phòng. Sau đó, nước (0,5mL) và AcOEt (10mL) được bổ sung vào đó, và hỗn hợp được khuấy. MgSO₄ được bổ sung thêm vào đó, và hỗn hợp được khuấy. Chất không hòa tan được lọc qua xelit, và lớp xelit được rửa bằng AcOEt (5 ml×2). Sau đó, phần dịch lọc được cô đặc trong điều kiện áp suất giảm. Phần cặn thu được được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột silicagel kiềm (Hex-AcOEt) để thu được chất rắn màu trắng (87mg, hiệu suất: 25%).

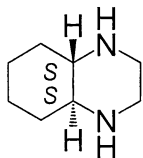
¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 1,10-1,40 (4H, m), 1,40-1,52 (10H, m), 1,63-1,71 (1H, m), 1,73-1,82 (1H, m), 2,15-2,28 (1H, m), 2,74 (1H, dt, J = 3,6, 11,8 Hz), 2,90-2,97 (1H, m), 3,05-3,11 (1H, m), 3,27 (1H, dt, J = 3,4, 12,6 Hz), 3,77-3,86 (1H, m), 4,01-4,10 (1H, m), 7,08-7,13 (2H, m), 7,25-7,30 (2H, m).

Các hợp chất của các ví dụ tham khảo từ 59 đến 63 dưới đây được tạo ra theo cách tương tự như trong ví dụ tham khảo 35 sử dụng các nguyên liệu khởi đầu thích hợp.

Ví dụ tham khảo 59

(4aS,8aS)-decahydroquinoxalin

Cấu hình tuyệt đối

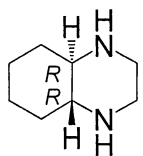


$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm : 1,12-1,58 (6H, m), 1,62-1,78 (4H, m), 2,20-2,29 (2H, m), 2,82-3,02 (4H, m).

Ví dụ tham khảo 60

(4aR,8aR)-decahydroquinoxalin

Cấu hình tuyệt đối

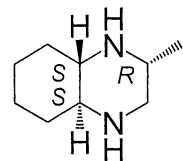


$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm : 1,14-1,27 (2H, m), 1,27-1,57 (4H, m), 1,62-1,79 (4H, m), 2,19-2,30 (2H, m), 2,83-3,03 (4H, m).

Ví dụ tham khảo 61

(2R,4aS,8aS)-2-methyldecahydroquinoxalin

Cấu hình tuyệt đối

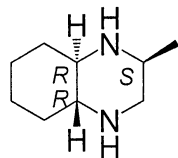


$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm : 1,02 (3H, d, $J = 6,3$ Hz), 1,11-1,51 (6H, m), 1,62-1,79 (4H, m), 2,14-2,22 (1H, m), 2,24-2,33 (1H, m), 2,44 (1H, dd, $J = 10,2, 11,7$ Hz), 2,81-2,91 (1H, m), 2,94 (1H, dd, $J = 2,9, 11,7$ Hz).

Ví dụ tham khảo 62

(2S,4aR,8aR)-2-metyldecahydroquinoxalin

Cấu hình tuyệt đối

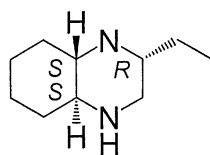


$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δppm : 1,02 (3H, d, $J = 6,3$ Hz), 1,10-1,49 (6H, m), 1,62-1,80 (4H, m), 2,14-2,22 (1H, m), 2,24-2,33 (1H, m), 2,44 (1H, dd, $J = 10,3, 11,7$ Hz), 2,80-2,91 (1H, m), 2,94 (1H, dd, $J = 2,9, 11,7$ Hz).

Ví dụ tham khảo 63

(2R,4aS,8aS)-2-etyldecahydroquinoxalin

Cấu hình tuyệt đối

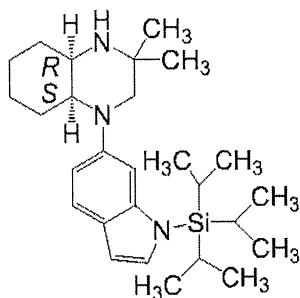


$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δppm : 0,92 (3H, t, $J = 7,5$ Hz), 1,1-1,55 (8H, m), 1,6-1,8 (4H, m), 2,14-2,32 (2H, m), 2,39-2,5 (1H, m), 2,57-2,68 (1H, m), 3,01 (1H, dd, $J = 2,6, 11,6$ Hz).

Ví dụ 1

Sự tạo ra (4aR,8aS)-3,3-dimetyl-1-(1-(triisopropylsilyl)-1H-indol-6-yl)decahydroquinoxalin

Cấu hình tuyệt đối



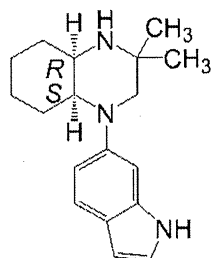
Huyền phù toluen (8mL) của (4a*S*,8a*R*)-2,2-dimetyldecahydroquinoxalin (337mg, 2,00mmol), 6-bromo-1-(triisopropylsilyl)-1*H*-indol (846mg, 2,40mmol), natri tert-butoxit (269mg, 2,80mmol), paladi (II) axetat (22,5mg, 0,0902mmol), và tri-tert-butylphosphin tetrafloroborat (29,1mg, 0,101mmol) được khuấy trong thời gian 5 giờ trong điều kiện hồi lưu trong môi trường nitơ. Hỗn hợp phản ứng được làm lạnh xuống nhiệt độ trong phòng. Sau đó, nước (0,5mL) và etyl axetat (10mL) được bổ sung vào đó, và hỗn hợp được khuấy, tiếp theo bằng việc bổ sung magie sulfat. Chất không hòa tan được lọc qua xelit, và phần dịch lọc sau đó được cô trong điều kiện áp suất giảm. Phần cặn thu được được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột NH-silicagel (n-hexan:etyl axetat) để thu được (4a*R*,8a*S*)-3,3-dimetyl-1-(1-(triisopropylsilyl)-1*H*-indol-6-yl)decahydroquinoxalin ở dạng vô định hình, không màu (0,75g, hiệu suất: 85%).

$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 1,1-1,2 (18H, m), 1,21 (3H, s), 1,29 (3H, s), 1,3-1,55 (5H, m), 1,55-1,8 (7H, m), 2,79 (1H, d, $J = 11,6\text{Hz}$), 2,91 (1H, d, $J = 11,6\text{Hz}$), 3,45-3,6 (2H, m), 6,49 (1H, dd, $J = 0,7, 3,2\text{Hz}$), 6,82 (1H, dd, $J = 2,0, 8,6\text{Hz}$), 6,93 (1H, s), 7,08 (1H, d, $J = 3,2\text{Hz}$), 7,45 (1H, d, $J = 8,6\text{Hz}$).

Ví dụ 2

Sự tạo ra (4a*R*,8a*S*)-1-(1*H*-indol-6-yl)-3,3-dimetyldecahydroquinoxalin

Cấu hình tuyệt đối



Tetra-*n*-butyl amoni florua (1M trong THF) (3,41mL, 3,41 mol) được bổ sung vào dung dịch tetrahydrofuran (15mL) của (4a*R*,8a*S*)-3,3-dimetyl-1-(1-(triisopropylsilyl)-1*H*-indol-6-yl)decahydroquinoxalin (0,750g, 1,71mmol) cùng với khuấy ở nhiệt độ trong phòng, và hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong thời gian 1 giờ. Dung môi được chưng cất ra khỏi hỗn hợp phản

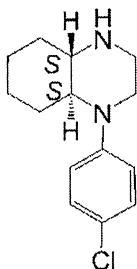
ứng trong điều kiện áp suất giảm. Phần cặn thu được được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột NH-silicagel (etyl axetat/hexan) để thu được chất rắn màu trắng. Chất rắn thu được được tái kết tinh từ diisopropyl ete/hexan để thu được (4aR,8aS)-1-(1H-indol-6-yl)-3,3-dimethyldecahydroquinoxalin (305mg, hiệu suất: 63%).

$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 1,0-1,55 (11H, m), 1,55-1,85 (4H, m), 2,79 (1H, d, $J = 11,6\text{Hz}$), 2,94 (1H, d, $J = 11,6\text{Hz}$), 3,45-3,55 (1H, m), 3,6-3,75 (1H, m), 6,35-6,5 (1H, m), 6,79 (1H, s), 6,86 (1H, dd, $J = 2,1, 8,7\text{Hz}$), 7,03 (1H, dd, $J = 2,7, 2,7\text{Hz}$), 7,47 (1H, d, $J = 8,6\text{Hz}$), 7,92 (1H, br).

Ví dụ 3

Sự tạo ra (4aS,8aS)-1-(4-clophenyl)decahydroquinoxalin

Cấu hình tuyệt đối



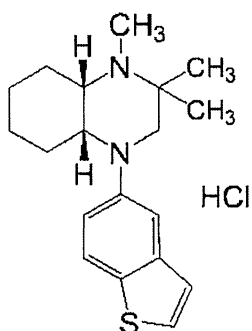
1-cloetyl cloroformat (229mL, 2,10mmol) được bổ sung vào dung dịch metylen clorua (6,5mL) của (4aS,8aS)-1-benzyl-4-(4-clophenyl)decahydroquinoxalin (0,650g, 1,91mmol) kết hợp với làm lạnh bằng nước đá và khuấy. Hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong thời gian 15 giờ, và hỗn hợp phản ứng sau đó được cô trong điều kiện áp suất giảm. Phần cặn thu được được hòa tan trong metanol (6,5mL), và dung dịch này được khuấy trong thời gian 1 giờ trong điều kiện hồi lưu. Dung môi được chưng cất ra khỏi hỗn hợp phản ứng. Axeton (5mL) được bổ sung vào phần cặn thu được, và hỗn hợp được khuấy. Tinh thể lắng tủa được tập hợp bằng cách lọc. Tinh thể thu được được rửa bằng axeton (1mL) và sau đó được làm khô để thu được (4aS,8aS)-1-(4-clophenyl)decahydroquinoxalin (253mg, hiệu suất: 53%) ở dạng bột màu trắng.

$^1\text{H-NMR}$ (DMSO- d_6) δ ppm: 0,85-1,05 (1H, m), 1,1-1,4 (2H, m), 1,4-1,65 (3H, m), 1,65-1,8 (1H, m), 1,9-2,05 (1H, m), 2,8-3,0 (2H, m), 3,05-3,2 (3H, m), 3,2-3,5 (1H, m), 7,1-7,2 (2H, m), 7,35-7,45 (2H, m), 9,2-9,65 (2H, m).

Ví dụ 4

Sự tạo ra cis-4-(benzo[b]thiophen-5-yl)-1,2,2-trimetyldecahydroquinoxalin hydroclorua

Cấu hình tương đối



Dung dịch nước formaldehyt 37% (0,81mL, 9,9mmol) được bổ sung vào dung dịch metanol (10mL) của cis-1-(benzo[b]thiophen-5-yl)-3,3-dimetyldecahydroquinoxalin (298mg, 0,992mmol) cùng với khuấy ở nhiệt độ trong phòng. Sau thời gian 30 phút, natri xyanobohydrua (311mg, 4,96mmol) và axit axetic (0,30mL) được bổ sung vào dung dịch phản ứng ở nhiệt độ trong phòng, và hỗn hợp được khuấy qua đêm. Dung môi được chưng cất ra khỏi hỗn hợp phản ứng trong điều kiện áp suất giảm. Sau đó, dung dịch nước bão hòa của natri bicacbonat (50mL) được bổ sung vào đó, tiếp theo bằng chiết bằng etyl axetat (50mL) hai lần. Lớp hữu cơ được rửa bằng nước hai lần và bằng nước muối bão hòa một lần, sau đó được làm khô trên magie sulfat, và được cô trong điều kiện áp suất giảm. Phần cặn thu được được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột silicagel (metylen clorua:metanol=10:1) để thu được dầu màu nâu. Axit clohydric 4N/etyl axetat (0,6mL) được bổ sung vào dung dịch etanol của dầu thu được cùng với khuấy ở nhiệt độ trong phòng, và tinh thể lắng tủa được tập hợp bằng cách lọc. Tinh thể thu được được rửa bằng etyl axetat và sau đó được làm khô trong điều kiện áp suất giảm để thu được cis-4-(benzo[b]thiophen-5-yl)-

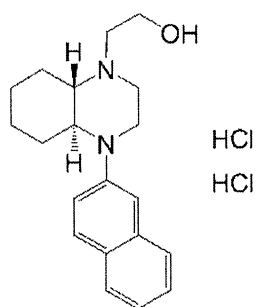
1,2,2-trimetyldecahydroquinoxalin hydroclorua (258mg, hiệu suất: 74%) ở dạng bột màu trắng.

$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 1,17-1,34 (1H, m), 1,37-1,74 (2H, m), 1,47 (3H, s), 1,87-2,04 (1H, m), 1,90 (3H, s), 2,20-2,30 (1H, m), 2,39-2,54 (1H, m), 2,64-2,88 (2H, m), 2,75 (3H, d, $J = 4,9$ Hz), 3,12 (1H, d, $J = 13,2$ Hz), 3,69-3,74 (1H, m), 3,85-3,93 (1H, m), 3,87 (1H, d, $J = 13,2$ Hz), 7,01 (1H, dd, $J = 8,8, 2,3$ Hz), 7,21-7,32 (2H, m), 7,44 (1H, d, $J = 5,4$ Hz), 7,75 (1H, d, $J = 8,8$ Hz), 11,20 (1H, brs).

Ví dụ 5

Sự tạo ra 2-(trans-4-(naphthalen-2-yl)decahydroquinoxalin-1-yl)etanol dihydroclorua

Cấu hình tương đối



Tetra-*n*-butyl amoni florua (1M trong THF) (2,1mL, 2,1mmol) được bổ sung vào dung dịch THF (10mL) của trans-1-(2-(tert-butyldimetylsilyloxy)etyl)-4-(naphthalen-2-yl)decahydroquinoxalin (820mg, 1,93mmol) cùng với khuấy ở nhiệt độ trong phòng, và hỗn hợp được khuấy qua đêm. Etyl axetat được bổ sung vào hỗn hợp phản ứng, và hỗn hợp tạo ra được rửa bằng nước hai lần và bằng nước muối bão hòa một lần, sau đó được làm khô trên magie sulfat, và được cô trong điều kiện áp suất giảm. Phần cặn thu được được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột silicagel (metylen clorua:metanol=10:1) để thu được chất rắn vô định hình, không màu (534mg). Phần phân ước 319mg của chất rắn thu được được hòa tan trong etanol. Axit clohydric 4N/etyl axetat (1,0mL) được bổ sung cùng với khuấy ở nhiệt độ trong phòng vào dung dịch, và tinh thể lắng

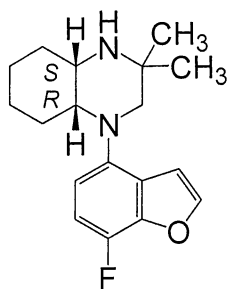
tủa được tập hợp bằng cách lọc. Tinh thể thu được được rửa bằng etyl axetat và sau đó được làm khô trong điều kiện áp suất giảm để thu được 2-(trans-4-(naphthalen-2-yl)decahydroquinoxalin-1-yl)ethanol dihydroclorua (365mg, hiệu suất: 49%) ở dạng bột màu trắng.

$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)\delta\text{ppm}$: 1,23-1,76 (4H, m), 1,86-2,08 (3H, m), 2,43-2,48 (1H, m), 3,18-3,25 (1H, m), 3,72-3,77 (2H, m), 3,93-3,98 (1H, m), 3,93-4,78 (1H, br), 4,08-4,20 (2H, m), 4,39-4,55 (1H, m), 4,57-4,78 (2H, m), 4,97-5,06 (1H, m), 7,61-7,68 (3H, m), 7,81-8,07 (3H, m), 8,17-8,69 (1H, br), 12,73 (1H, brs), 14,91 (1H, brs).

Ví dụ 77

Sự tạo ra (4aS,8aR)-1-(7-flobenzofuran-4-yl)-3,3-dimetyldecahydroquinoxalin

Cấu hình tuyệt đối



Huyền phù toluen (4mL) của (4aR,8aS)-2,2-dimetyldecahydroquinoxalin (168mg, 0,998mmol), 4-bromo-7-flobenzofuran (258mg, 1,20mmol), $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ (11,2mg, 0,0499mmol), $t\text{-Bu}_3\text{P.HBF}_4$ (14,5mg, 0,0500mmol), và NaOt-Bu (135mg, 1,40mmol) được khuấy trong thời gian 4 giờ trong điều kiện hồi lưu trong môi trường nitơ. Dung dịch phản ứng được làm lạnh xuống nhiệt độ trong phòng. Sau đó, nước (0,5mL) và AcOEt (10mL) được bổ sung vào đó, và hỗn hợp được khuấy. MgSO_4 được bổ sung thêm vào đó, và hỗn hợp được khuấy. Chất không hòa tan được lọc, và phần cặn được rửa bằng AcOEt (5 ml $\times$ 2). Sau đó, phần dịch lọc được cô đặc trong điều kiện áp suất giảm. Phần cặn thu được được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột silicagel kiềm (Hex- AcOEt) để thu được dầu không màu (167mg). Dầu này được kết tinh từ hexan (1mL) để thu được (4aS,8aR)-1-(7-flobenzofuran-4-yl)-3,3-dimetyldecahydroquinoxalin

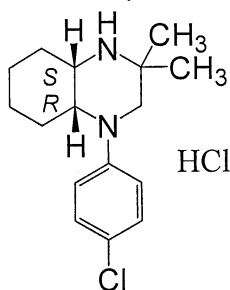
(107mg, hiệu suất: 35%) ở dạng bột màu trắng.

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 1,0-1,45 (11H, m), 1,6-1,8 (3H, m), 1,8-1,95 (1H, m), 2,70 (1H, d, $J = 11,3\text{Hz}$), 3,04 (1H, d, $J = 11,3\text{Hz}$), 3,50 (1H, ddd, $J = 3,8, 3,8, 12,1\text{Hz}$), 3,55-3,65 (1H, m), 6,47 (1H, dd, $J = 3,4, 8,6\text{Hz}$), 6,84 (1H, dd, $J = 2,5, 2,5\text{Hz}$), 6,89 (1H, dd, $J = 8,6, 10,4\text{Hz}$), 7,60 (1H, d, $J = 2,2\text{Hz}$).

Ví dụ 106

Sự tạo ra (4aS,8aR)-1-(4-clophenyl)-3,3-dimetyldecahydroquinoxalin hydroclorua

Cấu hình tuyệt đối



Huyền phù toluen (10mL) của (4aR,8aS)-2,2-dimetyldecahydroquinoxalin (252mg, 1,50mmol), 1-bromo-4-clobenzen (345mg, 1,80mmol), $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ (16,8mg, 0,0748mmol), $t\text{-Bu}_3\text{P.HBF}_4$ (21,8mg, 0,0751mmol), và NaOt-Bu (202mg, 2,10mmol) được khuấy trong thời gian 5 giờ trong điều kiện hồi lưu trong môi trường nitơ. Dung dịch phản ứng được làm lạnh xuống nhiệt độ trong phòng. Sau đó, nước (0,5mL) và AcOEt (10mL) được bổ sung vào đó, và hỗn hợp được khuấy. MgSO_4 được bổ sung thêm vào đó, và hỗn hợp được khuấy. Sau đó, chất không hòa tan được lọc qua xelit. Phần dịch lọc được cô đặc trong điều kiện áp suất giảm, và phần cặn thu được được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột silicagel kiềm (Hex-AcOEt). Dầu thu được được hòa tan trong HCl 1N- EtOH (3mL), và dung môi được chưng cất trong điều kiện áp suất giảm. Tinh thể lắng tủa được tái kết tinh từ etanol/axeton để thu được (4aS,8aR)-1-(4-clophenyl)-3,3-dimetyldecahydroquinoxalin hydroclorua (262mg, hiệu suất: 55%) ở dạng bột màu trắng.

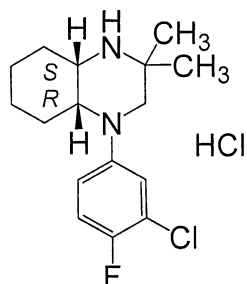
$^1\text{H-NMR}$ (DMSO-d_6) δ ppm: 1,2-1,45 (6H, m), 1,51 (3H, s), 1,6-2,1 (5H, m),

2,93 (1H, d, $J = 13,6\text{Hz}$), 3,40 (1H, d, $J = 13,8\text{Hz}$), 3,65-3,85 (1H, m), 3,9-4,1 (1H, m), 6,8-7,05 (2H, m), 7,1-7,35 (2H, m), 8,14 (1H, br), 9,77 (1H, br).

Ví dụ 112

Sự tạo ra (4aS,8aR)-1-(3-clo-4-flophenyl)-3,3-dimetyldecahydroquinoxalin hydroclorua

Cấu hình tuyệt đối



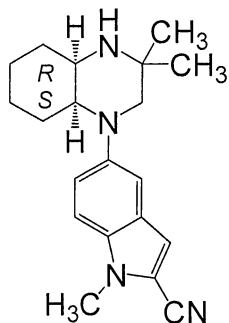
Huyền phù toluen (10mL) của (4aR,8aS)-2,2-dimetyldecahydroquinoxalin (168mg, 0,998mmol), 4-bromo-2-clo-1-flobenzen (251mg, 1,20mmol), $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ (11,2mg, 0,0500mmol), $t\text{-Bu}_3\text{P.HBF}_4$ (14,5mg, 0,0500mmol), và NaOt-Bu (135mg, 1,40mmol) được khuấy trong thời gian 5 giờ trong điều kiện hồi lưu trong môi trường nitơ. Dung dịch phản ứng được làm lạnh xuống nhiệt độ trong phòng. Sau đó, nước (0,5mL) và AcOEt (10mL) được bổ sung vào đó, và hỗn hợp được khuấy. MgSO_4 được bổ sung thêm vào đó, và hỗn hợp được khuấy. Sau đó, chất không hòa tan được lọc. Phần dịch lọc được cô đặc trong điều kiện áp suất giảm, và phần cặn thu được được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột silicagel kiềm (Hex-AcOEt). Dầu thu được được hòa tan trong HCl 1N- EtOH (3mL), và etanol được chưng cất trong điều kiện áp suất giảm. Tinh thể lắng tủa được tái kết tinh từ etanol/axeton để thu được (4aS,8aR)-1-(3-clo-4-flophenyl)-3,3-dimetyldecahydroquinoxalin hydroclorua (153mg, hiệu suất: 46%) ở dạng bột màu trắng.

$^1\text{H-NMR}$ (DMSO-d_6) δppm : 1,15-1,45 (6H, m), 1,51 (3H, s), 1,6-1,9 (4H, m), 1,9-2,05 (1H, m), 2,94 (1H, d, $J = 13,5\text{Hz}$), 3,3-3,45 (1H, m), 3,65-3,8 (1H, m), 3,95-4,1 (1H, m), 6,85-7,0 (1H, m), 7,12 (1H, dd, $J = 3,0, 6,2\text{Hz}$), 7,25 (1H, dd, $J = 9,1, 9,1\text{Hz}$), 8,13 (1H, br), 9,86 (1H, br).

Ví dụ 150

Sự tạo ra 5-((4aR,8aS)-3,3-dimethyldecahydroquinoxalin-1-yl)-1-metyl-1H-indol-2-cacbonitril

Cấu hình tuyệt đối



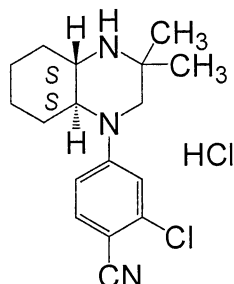
Huyền phù toluen (4mL) của (4aS,8aR)-2,2-dimethyldecahydroquinoxalin (168mg, 0,998mmol), 5-bromo-1-metyl-1H-indol-2-cacbonitril (259mg, 1,10mmol), Pd(OAc)₂ (11,2mg, 0,0499mmol), t-Bu₃P.HBF₄ (14,5mg, 0,0500mmol), và NaOt-Bu (135mg, 1,40mmol) được khuấy trong thời gian 4 giờ trong điều kiện hồi lưu trong môi trường nitơ. Dung dịch phản ứng được làm lạnh xuống nhiệt độ trong phòng. Sau đó, nước (0,5mL) và AcOEt (10mL) được bổ sung vào đó, và hỗn hợp được khuấy. MgSO₄ được bổ sung thêm vào đó, và hỗn hợp được khuấy. Chất không hòa tan được lọc qua xelit, và phần cặn được rửa bằng CH₂Cl₂:MeOH (3:1) (5 mL×2). Sau đó, phần dịch lọc được cô đặc trong điều kiện áp suất giảm. Phần cặn thu được được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột silicagel kiềm (Hex-AcOEt) để thu được dầu không màu. Dầu này được kết tinh từ hexan (1mL) để thu được 5-((4aR,8aS)-3,3-dimethyldecahydroquinoxalin-1-yl)-1-metyl-1H-indol-2-cacbonitril (148mg, hiệu suất: 46%) ở dạng bột màu vàng nhạt.

¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 0,7-2,3 (15H, m), 2,7-3,2 (2H, m), 3,5-3,8 (2H, m), 3,85 (3H, s), 6,95-7,05 (2H, m), 7,15-7,3 (2H, m).

Ví dụ 237

Sự tạo ra (4aS,8aS)-1-(3-clo-4-xyanophenyl)-3,3-dimetyldecahydroquinoxalin hydroclorua

Cấu hình tuyệt đối



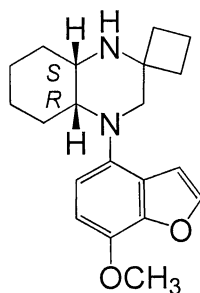
Huyền phù toluen (10mL) của (4aS,8aS)-2,2-dimetyldecahydroquinoxalin (400mg, 2,38mmol), 4-bromo-2-clobenzonitril (669mg, 3,09mmol), Pd(OAc)₂ (53mg, 0,24mmol), t-Bu₃P.HBF₄ (70mg, 0,24mmol), và t-BuONa (320mg, 3,33mmol) được khuấy trong thời gian 5 giờ trong điều kiện hồi lưu trong môi trường nitơ. Dung dịch phản ứng được làm lạnh. Sau đó, chất không hòa tan được lọc qua xelit, và phần dịch lọc được cô đặc. Phần cặn thu được được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột silicagel (CH₂Cl₂/MeOH) để thu được chất rắn vô định hình màu da cam. Chất rắn vô định hình này được hòa tan trong etyl axetat (5mL). Tinh thể lắng tủa bằng cách bổ sung HCl 4N/AcOEt (0,6mL) được tập hợp bằng cách lọc và được làm khô trong điều kiện áp suất giảm để thu được (4aS,8aS)-1-(3-clo-4-xyanophenyl)-3,3-dimetyldecahydroquinoxalin hydroclorua (304 mg, 48%) ở dạng bột màu da cam nhạt.

¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 1,05-1,20 (1H, m), 1,23-1,44 (2H, m), 1,54-2,10 (4H, m), 1,63 (3H, s), 1,68 (3H, s), 2,35-2,40 (1H, m), 2,89 (1H, d, J = 12,7 Hz), 3,19 (2H, br), 3,34 (1H, d, J = 12,7 Hz), 7,06 (1H, dd, J = 8,4, 2,0 Hz), 7,20 (1H, d, J = 2,0 Hz), 7,61 (1H, d, J = 8,4 Hz), 9,62 (1H, brs), 9,90 (1H, br)

Ví dụ 579

Sự tạo ra (4a'R,8a'S)-4'-(7-metoxibenzofuran-4-yl)octahydro-1'H-spiro[xyclobutan-1,2'-quinoxalin]

Cấu hình tuyệt đối



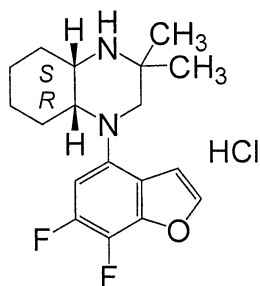
Huyền phù toluen (4mL) của (4a'R,8a'S)-octahydro-1'H-spiro[xyclobutan-1,2'-quinoxalin] (180mg, 0,998mmol), 4-bromo-7-metoxibenzofuran (250mg, 1,10mmol), Pd(OAc)₂ (11,2mg, 0,0499mmol), t-Bu₃P.HBF₄ (14,5mg, 0,0500mmol), và NaOt-Bu (135mg, 1,40mmol) được khuấy trong thời gian 4 giờ trong điều kiện hồi lưu trong môi trường nitơ. Dung dịch phản ứng được làm lạnh xuống nhiệt độ trong phòng. Sau đó, nước (0,5mL) và AcOEt (10mL) được bổ sung vào đó, và hỗn hợp được khuấy. MgSO₄ được bổ sung thêm vào đó, và hỗn hợp được khuấy. Chất không hòa tan được lọc, và phần cặn được rửa bằng AcOEt (5 mL×2). Sau đó, phần dịch lọc được cô đặc trong điều kiện áp suất giảm. Phần cặn thu được được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột silicagel kiềm (Hex-AcOEt) để thu được chất rắn vô định hình không màu. Chất rắn này được kết tinh từ hexan (1mL) để thu được (4a'R,8a'S)-4'-(7-metoxibenzofuran-4-yl)octahydro-1'H-spiro[xyclobutan-1,2'-quinoxalin] (107mg, hiệu suất: 35%) ở dạng bột màu trắng.

¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 0,95-1,1 (2H, m), 1,3-1,4 (1H, m), 1,4-2,1 (11H, m), 2,25-2,4 (1H, m), 3,01 (1H, d, J = 11,0Hz), 3,17 (1H, d, J = 11,1Hz), 3,40 (1H, br), 3,45-3,5 (1H, m), 3,97 (3H, s), 6,58 (1H, d, J = 8,4Hz), 6,70 (1H, d, J = 8,4Hz), 6,80 (1H, d, J = 2,1Hz), 7,58 (1H, d, J = 2,1Hz).

Ví dụ 580

Sự tạo ra (4aS,8aR)-1-(6,7-diflobenzofuran-4-yl)-3,3-dimetyldecahydroquinoxalin hydroclorua

Cấu hình tuyệt đối



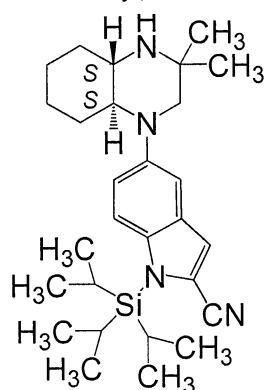
Huyền phù toluen (6mL) của (4aR,8aS)-2,2-dimetyldecahydroquinoxalin (252mg, 1,50mmol), 4-bromo-6,7-diflobenzofuran (384mg, 1,65mmol), Pd(OAc)₂ (16,8mg, 0,0748mmol), t-Bu₃P.HBF₄ (21,8mg, 0,0751mmol), và NaOt-Bu (202mg, 2,10mmol) được khuấy trong thời gian 3 giờ trong điều kiện hồi lưu trong môi trường nitơ. Dung dịch phản ứng được làm lạnh xuống nhiệt độ trong phòng. Sau đó, nước (0,5mL) và AcOEt (10mL) được bổ sung vào đó, và hỗn hợp được khuấy. MgSO₄ được bổ sung thêm vào đó, và hỗn hợp được khuấy. Sau đó, chất không hòa tan được lọc qua xelit. Phần dịch lọc được cô đặc trong điều kiện áp suất giảm, và phần cặn thu được được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột silicagel kiềm (Hex-AcOEt) để thu được dầu màu vàng nhạt (193mg). Dầu này được hòa tan trong ethanol (2mL). HCl 1N-EtOH (1,2mL) được bổ sung vào dung dịch, và hỗn hợp được khuấy. Tinh thể lắng tủa được tập hợp bằng cách lọc, được rửa bằng etyl axetat, và sau đó được làm khô trong điều kiện áp suất giảm để thu được (4aS,8aR)-1-(6,7-diflobenzofuran-4-yl)-3,3-dimetyldecahydroquinoxalin hydroclorua (167mg, hiệu suất: 31%) ở dạng bột màu trắng.

¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,01-1,17 (2H, m), 1,34-1,44 (1H, m), 1,48 (3H, s), 1,52 (3H, s), 1,59-2,07 (5H, m), 3,00 (1H, d, J = 13,0Hz), 3,28 (1H, d, J = 13,2Hz), 3,75-3,9 (1H, m), 4,0-4,15 (1H, m), 6,83 (1H, dd, J = 5,9, 13,5Hz), 7,36 (1H, dd, J = 2,6, 2,6Hz), 8,0-8,2 (2H, m), 9,7-9,9 (1H, m).

Ví dụ 581

Sự tạo ra (4aS,8aS)-1-(2-xyano-1-(triisopropylsilyl)-1H-indol-5-yl) 3,3-dimetyldecahydroquinoxalin

Cấu hình tuyệt đối



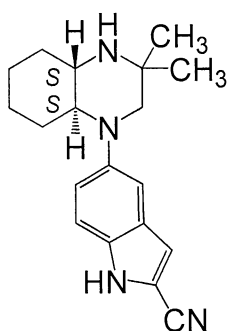
Huyền phù toluen (5mL) của (4aS,8aS)-2,2-dimethyldecahydroquinoxalin (200mg, 1,19mmol), 5-bromo-1-(triisopropylsilyl)-1H-indol-2-cacbonitril (493mg, 1,31mmol), Pd(OAc)₂ (13,3mg, 0,0594mmol), tBu₃P.HBF₄ (17,2mg, 0,0594mmol), và t-BuONa (137mg, 1,43mmol) được khuấy ở nhiệt độ 100°C trong thời gian 4 giờ trong môi trường nitơ. Chất không hòa tan được lọc qua xelit, và phần dịch lọc được cô đặc. Phần cặn thu được được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột silicagel kiềm (AcOEt/hexan) để thu được (4aS,8aS)-1-(2-xyano-1-(triisopropylsilyl)-1H-indol-5-yl) 3,3-dimethyldecahydroquinoxalin (430mg, 78%) ở dạng rắn vô định hình màu trắng.

¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 0,75-1,38 (26H, m), 1,41 (3H, s), 1,54-1,77 (4H, m), 2,01 (3H, quintet, J = 7,5 Hz), 2,25-2,32 (1H, m), 2,65 (1H, d, J = 11,2 Hz), 2,75-2,85 (2H, m), 7,11 (1H, dd, J = 2,0, 9,1 Hz), 7,32 (1H, d, J = 2,0 Hz), 7,33 (1H, d, J = 0,5 Hz), 7,50 (1H, d, J = 9,1 Hz).

Ví dụ 582

Sự tạo ra (4aS,8aS)-1-(2-xyano-1H-indol-5-yl) 3,3-dimethyldecahydroquinoxalin

Cấu hình tuyệt đối



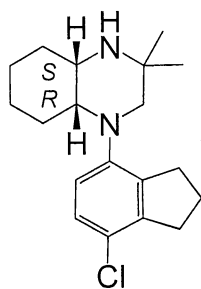
Tetrabutylamoni florua (dung dịch THF 1M, 0,73mL, 0,73mmol) được bổ sung vào dung dịch tetrahydrofuran khan (5mL) của (4aS,8aS)-1-(2-xyano-1-(triisopropylsilyl)-1H-indol-5-yl) 3,3-dimetyldecahydroquinoxalin (170mg, 0,366mmol) ở nhiệt độ trong phòng, và dung dịch phản ứng được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong thời gian 1 giờ. Dung dịch phản ứng được cô đặc trong điều kiện áp suất giảm, và phần cặn thu được được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột silicagel kiềm (AcOEt/hexan=1/10→1/1). Dung môi được loại bỏ trong điều kiện áp suất giảm. Phần cặn thu được được tái kết tinh từ etyl axetat/n-hexan để thu được (4aS,8aS)-1-(2-xyano-1H-indol-5-yl) 3,3-dimetyldecahydroquinoxalin (30mg, hiệu suất: 27%) ở dạng bột màu trắng.

$^1\text{H-NMR}$ (DMSO-d_6) δ ppm: 0,82-1,00 (4H, m), 1,08-1,34 (6H, m), 1,42-1,67 (5H, m), 2,19-2,27 (1H, m), 2,55 (1H, d, $J = 10,9$ Hz), 2,59-2,69 (2H, m), 7,11 (1H, dd, $J = 1,8, 8,8$ Hz), 7,26 (1H, d, $J = 0,8$ Hz), 7,32 (1H, d, $J = 1,8$ Hz), 7,36 (1H, d, $J = 8,8$ Hz) 12,25 (1H, brs).

Ví dụ 583

Sự tạo ra (4aS,8aR)-1-(7-clo-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl)-3,3-dimetyldecahydroquinoxalin

Cấu hình tuyệt đối



Dung dịch toluen (1mL) của bis(tri-tert-butylphosphin)paladi (25,6mg, 0,0501mmol) được bổ sung vào huyền phù toluen (4mL) của (4aR,8aS)-2,2-dimetyldecahydroquinoxalin (168mg, 0,998mmol), 4-bromo-7-clo-2,3-dihydro-1H-inden (255mg, 1,10mmol), và NaOt-Bu (135mg, 1,40mmol), và hỗn hợp được khuấy trong thời gian 4 giờ trong điều kiện hồi lưu trong môi trường nitơ. Dung dịch phản ứng được làm lạnh xuống nhiệt độ trong phòng. Sau đó, nước

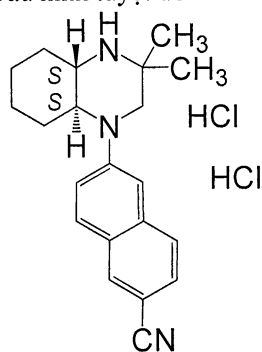
(0,5mL) và AcOEt (10mL) được bổ sung vào đó, và hỗn hợp được khuấy. MgSO_4 được bổ sung thêm vào đó, và hỗn hợp được khuấy. Chất không hòa tan được lọc qua xelit, và phần cặn được rửa bằng AcOEt (5 mL $\times$ 2). Sau đó, phần dịch lọc được cô đặc trong điều kiện áp suất giảm. Phần cặn thu được được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột silicagel kiềm (Hex-AcOEt) để thu được chất rắn màu trắng (167mg). Chất rắn này được tái kết tinh từ etanol/nước để thu được (4aS,8aR)-1-(7-clo-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl)-3,3-dimetyldecahydroquinoxalin (136mg, hiệu suất: 43%) ở dạng bột màu trắng.

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 0,97-1,12 (3H, m), 1,16 (3H, s), 1,27 (3H, s), 1,31-1,44 (2H, m), 1,45-1,76 (3H, m), 1,78-1,92 (1H, m), 1,94-2,06 (1H, m), 2,12-2,23 (1H, m), 2,51 (1H, d, $J = 11,2\text{Hz}$), 2,85-3,05 (5H, m), 3,1-3,2 (1H, m), 3,45-3,55 (1H, m), 6,58 (1H, d, $J = 8,4\text{Hz}$), 7,03 (1H, d, $J = 8,4\text{Hz}$).

Ví dụ 584

Sự tạo ra (4aS,8aS)-1-(6-xyanonaphtalen-2-yl)-3,3-dimetyldecahydroquinoxalin dihydroclorua

Cấu hình tuyệt đối



Huyền phù toluen (5mL) của (4aR,8aS)-2,2-dimetyldecahydroquinoxalin (200mg, 1,19mmol), 6-bromo-2-naphtonitril (303mg, 1,31mmol), $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ (13,3mg, 0,0594mmol), $t\text{Bu}_3\text{P.HBF}_4$ (17,2mg, 0,0594mmol), và $t\text{-BuONa}$ (137mg, 1,43mmol) được khuấy ở nhiệt độ 100°C trong thời gian 4 giờ. Chất không hòa tan được lọc qua xelit, và phần dịch lọc được cô đặc. Phần cặn thu được được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột silicagel kiềm (AcOEt/hexan). Dung môi được loại bỏ trong điều kiện áp suất giảm. Phần cặn thu được được

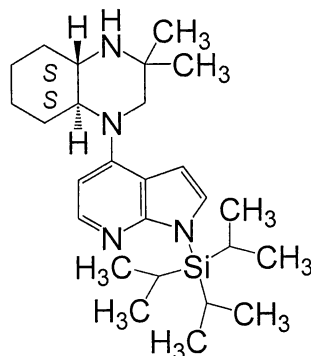
hòa tan trong etyl axetat. Axit clohydric 1N-etanol được bổ sung vào dung dịch này, và tinh thể lắng tua được tập hợp bằng cách lọc. Tinh thể thu được được làm khô trong điều kiện áp suất giảm để thu được (4aS,8aS)-1-(6-cyano-naphthalen-2-yl)-3,3-dimetyldecahydroquinoxalin dihydroclorua (303mg, hiệu suất: 65%) ở dạng bột màu trắng.

$^1\text{H-NMR}$ (DMSO-d_6) δ ppm: 1,10-1,50 (6H, m), 1,56-1,90 (7H, m), 2,00-2,14 (1H, m), 3,08-3,45 (4H, m), 4,68-5,32 (1H, br), 7,45 (1H, dd, $J = 2,0, 8,9$ Hz), 7,64 (1H, d, $J = 1,8$ Hz), 7,73 (1H, dd, $J = 1,6, 8,6$ Hz), 8,00 (1H, d, $J = 8,6$ Hz), 8,04 (1H, d, $J = 8,6$ Hz), 8,49 (1H, s), 9,10-9,28 (1H, br), 10,04-10,28 (1H, br).

Ví dụ 585

Sự tạo ra (4aS,8aS)-3,3-dimetyl-1-(1-(triisopropylsilyl)-1H-pyrrolo[2,3-b]pyridin-4-yl)decahydroquinoxalin

Cấu hình tuyệt đối



Huyền phù toluen (5mL) của (4aS,8aS)-2,2-dimetyldecahydroquinoxalin (200mg, 1,19mmol), 4-bromo-1-(triisopropylsilyl)-1H-pyrrolo[2,3-b]pyridin (462mg, 1,31mmol), $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ (13,3mg, 0,0594mmol), $\text{tBu}_3\text{P.HBF}_4$ (17,2mg, 0,0594mmol), và t-BuONa (137mg, 1,43mmol) được khuấy ở nhiệt độ 100°C trong thời gian 4 giờ trong môi trường nitơ. Chất không hòa tan được lọc qua xelit, và phần dịch lọc được cô đặc. Phần cặn thu được được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột silicagel kiềm (AcOEt/hexan) để thu được (4aS,8aS)-3,3-dimetyl-1-(1-(triisopropylsilyl)-1H-pyrrolo[2,3-b]pyridin-4-yl)decahydroquinoxalin (439mg, 84%) ở dạng rắn vô định hình màu trắng.

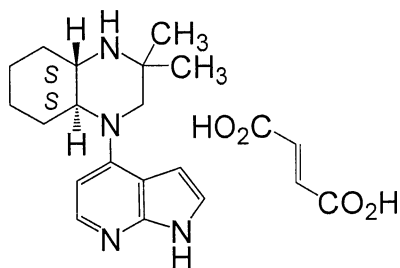
$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 0,95-1,20 (22H, m), 1,36-1,45 (3H, m), 1,52 (3H, s),

1,65-1,92 (7H, m), 2,11-2,20 (1H, m), 2,57-2,67 (2H, m), 2,83-2,95 (1H, m), 3,26- (1H, d, $J = 11,7$ Hz), 6,55 (1H, d, $J = 3,5$ Hz), 6,63 (1H, d, $J = 5,3$ Hz), 7,18 (1H, d, $J = 3,5$ Hz), 8,12 (1H, d, $J = 5,3$ Hz).

Ví dụ 586

Sự tạo ra (4aS,8aS)-3,3-dimetyl-1-(1H-pyrol[2,3-b]pyridin-4-yl)decahydroquinoxalin fumarat

Cấu hình tuyệt đối



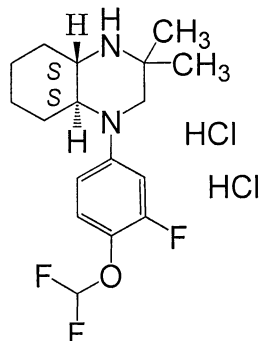
Tetrabutylamoni florua (dung dịch THF 1M, 1,95mL, 1,95mmol) được bổ sung vào dung dịch tetrahydrofuran khan (5mL) của (4aS,8aS)-3,3-dimetyl-1-(1-(triisopropylsilyl)-1H-pyrol[2,3-b]pyridin-4-yl)decahydroquinoxalin (430mg, 0,976nmol), và hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong thời gian 1 giờ. Dung dịch phản ứng được cô đặc trong điều kiện áp suất giảm, và phần cặn thu được được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột silicagel kiềm (AcOEt/hexan=1/10→1/1) để thu được sản phẩm (370mg, 1,30mmol) ở dạng dầu. Dầu này được hòa tan trong etanol (5mL). Dung dịch etanol (5mL) của axit fumaric (151mg) được bổ sung vào dung dịch này, và etanol được loại bỏ trong điều kiện áp suất giảm. Chất rắn thu được được tái kết tinh từ etanol/etyl axetat để thu được (4aS,8aS)-3,3-dimetyl-1-(1H-pyrol[2,3-b]pyridin-4-yl)decahydroquinoxalin fumarat (246mg, hiệu suất: 63%) ở dạng bột màu trắng.

$^1\text{H-NMR}$ (DMSO- d_6) δ ppm: 0,94-1,09 (1H, m), 1,20 (3H, s), 1,26-1,55 (7H, m), 1,68-1,78 (1H, m), 1,85-2,04 (2H, m), 2,81-2,93 (1H, m), 2,95-3,23 (3H, m), 6,36-6,42 (1H, m), 6,49 (2H, s), 6,71 (1H, d, $J = 5,2$ Hz), 7,32-7,38 (1H, m), 8,09 (1H, d, $J = 5,2$ Hz), 8,50-11,20 (1H, br), 11,59 (1H, s).

Ví dụ 587

Sự tạo ra (4aS,8aS)-1-(4-(diflometoxy)-3-flophenyl)-3,3-dimetyldecahydroquinoxalin dihydroclorua

Cấu hình tuyệt đối



Huyền phù toluen (5mL) của (4aS,8aS)-2,2-dimetyldecahydroquinoxalin (200mg, 1,19mmol), 4-bromo-1-diflometoxy-2-flobenzen (315mg, 1,31mmol), Pd(OAc)₂ (13,3mg, 0,0594mmol), tBu₃P.HBF₄ (17,2mg, 0,0594mmol), và t-BuONa (137mg, 1,43mmol) được khuấy ở nhiệt độ 100°C trong thời gian 4 giờ. Chất không hòa tan được lọc qua xelit, và phần dịch lọc được cô đặc. Phần cặn thu được được tinh chế bằng phương pháp sắc ký cột silicagel kiềm (AcOEt/hexan). Dung môi được loại bỏ trong điều kiện áp suất giảm. Phần cặn thu được được hòa tan trong etyl axetat. Axit clohydric 1N-etanol được bổ sung vào dung dịch này, và tinh thể lỏng tua được tập hợp bằng cách lọc. Tinh thể thu được được làm khô trong điều kiện áp suất giảm để thu được (4aS,8aS)-1-(4-diflometoxy-3-flophenyl)-3,3-dimetyldecahydroquinoxalin dihydroclorua (193mg, hiệu suất: 40%) ở dạng bột màu trắng.

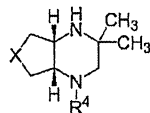
¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm :1,01-1,39 (6H, m), 1,49-1,67 (6H, m), 1,67-1,77 (1H, m), 1,96-2,05 (1H, m), 2,81-2,95 (2H, m), 3,02 (1H, d, J = 12,5 Hz), 3,10-3,23 (1H, m), 4,30-4,80 (1H, br), 6,96-7,01 (1H, m), 7,02 (0,25H, s), 7,17 (1H, dd, J = 2,5, 12,1 Hz), 7,20 (0,5H, s), 7,33 (1H, t, J = 8,9 Hz), 7,39 (0,25H, s), 9,04-9,21 (1H, m), 9,70-9,85 (1H, m).

Các hợp chất của các ví dụ từ 6 đến 76, từ 78 đến 105, từ 107 đến 111, từ 113 đến 149, từ 151 đến 236, từ 238 đến 578, từ 588 đến 1656 thể hiện trong các bảng dưới đây được tạo ra theo cách tương tự như trong các ví dụ sử dụng các nguyên liệu khởi đầu tương ứng thích hợp. Ví dụ, trong các bảng này, các hợp

chất tạo ra có các đặc tính vật lý như dạng kết tinh, điểm nóng chảy, muối, ^1H -NMR, và MS (phổ khối).

Bảng 1

Cấu hình tương đối

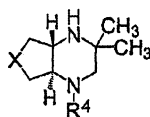


Ví dụ	X	R ⁴	^1H -NMR	Muối
6 *	-CH ₂ -		^1H -NMR (DMSO-d ₆) δ ppm : 1.39 (3H, s), 1.49 (3H, s), 1.56-2.20 (6H, m), 3.04 (1H, d, J = 13.3 Hz), 3.61 (1H, d, J = 13.3 Hz), 3.75-3.90 (1H, m), 4.40-4.55 (1H, m), 7.17-7.30 (2H, m), 7.33-7.48 (2H, m), 7.65-7.83 (3H, m), 8.35-8.60 (1H, br), 9.70-9.95 (1H, br).	Hydrochlorua
7 *	-CH ₂ -		^1H -NMR (DMSO-d ₆) δ ppm : 1.39 (3H, s), 1.48 (3H, s), 1.55-2.19 (6H, m), 3.01 (1H, d, J = 13.2 Hz), 3.45 (1H, d, J = 13.2 Hz), 3.70-3.87 (1H, m), 4.28-4.45 (1H, m), 7.17 (1H, dd, J = 2.2, 9.0 Hz), 7.29 (1H, d, J = 5.4 Hz), 7.37 (1H, d, J = 2.2 Hz), 7.67 (1H, d, J = 5.4 Hz), 7.81 (1H, J = 8.9 Hz), 8.42-8.65 (1H, br), 9.80-10.05 (1H, br).	Hydrochlorua
8 *	-O-		^1H -NMR (DMSO-d ₆) δ ppm : 1.42 (3H, s), 1.49 (3H, s), 3.07 (1H, d, J = 13.4 Hz), 3.53 (1H, d, J = 13.4 Hz), 3.72 (1H, t, J = 8.8 Hz), 3.90-4.17 (4H, m), 4.79-4.94 (1H, m), 7.19 (1H, dd, J = 2.4, 8.9 Hz), 7.30 (1H, dd, J = 0.5, 5.4 Hz), 7.41 (1H, d, J = 2.4 Hz), 7.69 (1H, d, J = 5.4 Hz), 7.83 (1H, d, J = 8.9 Hz), 8.60-8.85 (1H, br), 10.41-10.65 (1H, br).	Hydrochlorua
9 *	-CH ₂ -		^1H -NMR (DMSO-d ₆) δ ppm : 1.33 (3H, s), 1.44 (3H, s), 1.55-2.19 (6H, m), 2.92 (1H, d, J = 13.5 Hz), 3.48 (1H, d, J = 13.5 Hz), 3.66-3.82 (1H, m), 4.20-4.35 (1H, m), 6.98 (2H, d, J = 9.0 Hz), 7.23 (2H, d, J = 9.0 Hz), 8.40-8.66 (1H, br), 9.75-10.05 (1H, br).	Hydrochlorua
10 *	-CH ₂ -		^1H -NMR (DMSO-d ₆) δ ppm : 1.32 (3H, s), 1.43 (3H, s), 1.55-2.15 (6H, m), 2.93 (1H, d, J = 13.6 Hz), 3.58 (1H, d, J = 13.6 Hz), 3.65-3.82 (1H, m), 4.20-4.40 (1H, m), 6.97 (1H, dd, J = 2.9, 9.0 Hz), 7.19 (1H, d, J = 2.9 Hz), 7.40 (1H, d, J = 9.0 Hz), 8.40-8.52 (1H, br), 9.70-9.95 (1H, br).	Hydrochlorua
11 *	-O-		^1H -NMR (DMSO-d ₆) δ ppm : 1.34 (3H, s), 1.44 (3H, s), 2.99 (1H, d, J = 13.8 Hz), 3.60-3.73 (2H, m), 3.85-4.11 (4H, m), 4.71-4.90 (1H, m), 6.95-7.08 (1H, m), 7.20-7.30 (1H, m), 7.42 (1H, d, J = 9.0 Hz), 8.60-8.89 (1H, br), 10.20-10.61 (1H, br).	Hydrochlorua

* Các ví dụ tham khảo không phải của sáng chế

Bảng 2

Cấu hình tương đối

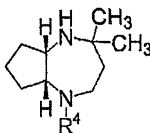


Ví dụ	X	R ⁴	NMR	Muối
12 *	-CH ₂ -		1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.30-1.50 (4H, m), 1.60 (3H, s), 1.65-2.05 (4H, m), 2.05-2.23 (1H, m), 2.82-2.96 (1H, m), 3.06-3.25 (1H, m), 3.25-3.45 (2H, m), 4.00-5.25 (1H, br), 7.29 (1H, dd, J = 2.1, 8.8 Hz), 7.35-7.60 (3H, m), 7.78-7.94 (3H, m), 9.33-9.67 (1H, br), 9.73-10.08 (1H, br).	Dihydrochlorua
13 *	-CH ₂ -		1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.30-1.53 (4H, m), 1.60 (3H, s), 1.65-2.07 (5H, m), 2.94 (1H, d, J = 12.4 Hz), 3.06-3.45 (3H, m), 4.40-5.68 (1H, br), 7.18 (1H, dd, J = 1.7, 8.7 Hz), 7.42 (1H, d, J = 5.4 Hz), 7.65 (1H, d, J = 1.7 Hz), 7.76 (1H, d, J = 5.4 Hz), 7.93 (1H, d, J = 8.7 Hz), 9.40-9.70 (1H, br), 9.80-10.12 (1H, br).	Dihydrochlorua
14 *	-O-		1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.44 (3H, s), 1.62 (3H, s), 2.80 (1H, d, J = 12.7 Hz), 3.34 (1H, d, J = 12.7 Hz), 3.46-3.61 (2H, m), 3.75-3.95 (2H, m), 4.00-4.10 (1H, m), 4.11-4.28 (1H, m), 4.75-5.61 (1H, br), 7.12 (1H, dd, J = 2.1, 8.7 Hz), 7.40 (1H, d, J = 5.4 Hz), 7.62 (1H, d, J = 2.1 Hz), 7.75 (1H, d, J = 5.4 Hz), 7.91 (1H, d, J = 8.7 Hz), 9.68-10.08 (1H, br), 10.08-10.30 (1H, br).	Dihydrochlorua
15 *	-CH ₂ -		1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.25-1.45 (4H, m), 1.52 (3H, s), 1.65-1.88 (3H, m), 1.88-2.10 (2H, m), 2.84 (1H, d, J = 12.8 Hz), 2.94-3.10 (1H, m), 3.18-3.39 (2H, m), 4.03-4.70 (1H, br), 7.09 (1H, dd, J = 2.6, 8.7 Hz), 7.33 (1H, d, J = 2.6 Hz), 7.52 (1H, d, J = 8.7 Hz), 9.26-9.59 (1H, br), 9.72-10.04 (1H, br).	Dihydrochlorua
16 *	-CH ₂ -		1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.24-1.45 (4H, m), 1.53 (3H, s), 1.63-2.04 (5H, m), 2.82 (1H, d, J = 12.6 Hz), 2.90-3.08 (1H, m), 3.13 (1H, d, J = 12.6 Hz), 3.26-3.36 (1H, m), 4.35-5.05 (1H, br), 7.05-7.18 (2H, m), 7.30-7.40 (2H, m), 9.30-9.55 (1H, br), 9.75-10.02 (1H, br).	Dihydrochlorua
17 *	-O-		1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.46 (3H, s), 1.64 (3H, s), 2.89 (1H, d, J = 12.9 Hz), 3.47-3.66 (3H, m), 3.81-3.97 (2H, m), 4.01-4.15 (1H, m), 4.34-4.45 (1H, m), 7.26 (1H, dd, J = 2.3, 8.8 Hz), 7.38-7.44 (1H, m), 7.44-7.50 (1H, m), 7.50-7.54 (1H, m), 7.80-7.87 (2H, m), 7.89 (1H, d, J = 8.1 Hz), 9.84-10.04 (1H, br), 10.04-10.20 (1H, br).	Dihydrochlorua

* Các ví dụ tham khảo không phải của sáng chế

Bảng 3

Cấu hình tương đối

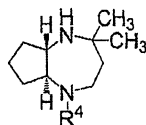


Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
18 *		1H-NMR (DMSO-d ₆) δ ppm (80°C) : 1.40 (3H, s), 1.43-1.70 (5H, m), 1.72-1.92 (2H, m), 1.95-2.23 (4H, m), 3.39-3.52 (2H, m), 3.85-4.02 (1H, br), 4.02-4.14 (1H, m), 5.64-6.00 (1H, br), 7.31-7.38 (1H, m), 7.38-7.47 (2H, m), 7.50-7.57 (1H, m), 7.72-7.85 (3H, m), 8.44-8.80 (1H, br), 9.04-9.40 (1H, br).	Dihydrochlorua
19 *		1H-NMR (DMSO-d ₆) δ ppm (80°C) : 1.31-1.51 (5H, m), 1.54 (3H, s), 1.63-1.76 (2H, m), 1.87-2.12 (3H, m), 2.12-2.23 (1H, m), 3.22-3.44 (2H, m), 3.85-4.02 (2H, m), 5.00-5.90 (1H, br), 7.33 (1H, d, J = 8.6 Hz), 7.36 (1H, d, J = 5.4 Hz), 7.70 (1H, d, J = 5.4 Hz), 7.77 (1H, s), 7.89 (1H, d, J = 8.6 Hz), 8.25-8.74 (1H, br), 9.00-9.54 (1H, br).	Dihydrochlorua
20 *		1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.34 (3H, s), 1.39-1.55 (5H, m), 1.67-1.90 (3H, m), 1.90-2.16 (3H, m), 3.17-3.38 (2H, m), 3.76-4.02 (2H, m), 7.10-7.20 (2H, m), 7.25-7.37 (2H, m), 7.37-7.90 (1H, br), 8.45-8.69 (1H, br), 8.89-9.19 (1H, br).	Dihydrochlorua

* Các ví dụ tham khảo không phải của sáng chế

Bảng 4

Cấu hình tương đối

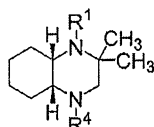


Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
21 *		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δ ppm (80°C) : 1.43 (3H, s), 1.47 (3H, s), 1.51-1.65 (1H, m), 1.72-1.90 (3H, m), 1.93-2.09 (2H, m), 2.12-2.29 (2H, m), 3.69-3.80 (1H, m), 3.81-3.92 (1H, m), 3.96-4.11 (1H, m), 4.11-4.70 (2H, br), 7.22-7.45 (4H, m), 7.70-7.85 (3H, m), 9.15-9.49 (1H, br), 9.49-9.58 (1H, br).	Dihydrochlorua
22 *		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δ ppm (80°C) : 1.46 (3H, s), 1.49 (3H, s), 1.65-1.94 (5H, m), 2.10-2.44 (3H, m), 3.69-3.80 (1H, m), 3.86-4.00 (1H, m), 4.00-4.20 (1H, m), 4.60-4.85 (1H, m), 4.85-6.06 (1H, br), 7.36-7.55 (2H, m), 7.76 (1H, d, J = 5.4 Hz), 7.78 (1H, brs), 7.99 (1H, d, J = 8.6 Hz), 9.40-9.68 (1H, br), 9.68-10.11 (1H, br).	Dihydrochlorua
23 *		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δ ppm (80°C) : 1.44 (6H, s), 1.47-1.64 (1H, m), 1.67-1.84 (3H, m), 1.86-2.13 (3H, m), 2.14-2.30 (1H, m), 3.60-3.80 (2H, m), 3.92-4.07 (1H, m), 5.80-6.70 (1H, br), 7.04 (1H, d, J = 8.9 Hz), 7.28 (1H, d, J = 8.9 Hz), 9.40-9.75 (2H, br).	Dihydrochlorua

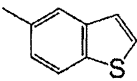
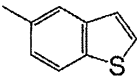
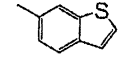
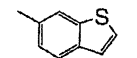
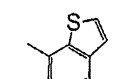
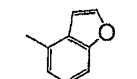
* Các ví dụ tham khảo không phải của sáng chế

Bảng 5

Cấu hình tương đối

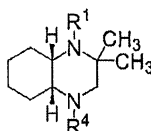


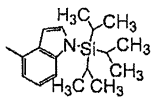
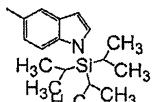
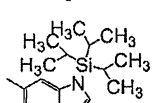
Ví dụ	R ¹	R ⁴	NMR	Muối
24	-H		¹ H-NMR (DMSO) δ ppm : 1.29-1.57 (3H, m), 1.46 (3H, s), 1.57 (3H, s), 1.69-1.91 (4H, m), 1.98-2.09 (1H, m), 3.07 (1H, d, J = 13.5 Hz), 3.51 (1H, d, J = 13.5 Hz), 3.73-3.92 (1H, m), 4.11-4.30 (1H, m), 7.18 (1H, d, J = 2.2 Hz), 7.22-7.28 (1H, m), 7.36-7.43 (2H, m), 7.68-7.80 (3H, m), 8.02-8.31 (1H, m), 9.62-9.91 (1H, br)	Hydrochlorua
25	-CH ₃		¹ H-NMR (CDCl ₃) δ ppm : 1.21-1.36 (1H, m), 1.40-1.53 (1H, m), 1.48 (3H, s), 1.58-1.77 (2H, m), 1.93 (3H, s), 1.98-2.05 (1H, m), 2.18-2.34 (1H, m), 2.37-2.58 (1H, m), 2.67-2.88 (1H, m), 2.82 (3H, d, J = 4.9 Hz), 3.26 (1H, d, J = 13.4 Hz), 3.64-3.77 (1H, m), 3.91 (1H, d, J = 13.4 Hz), 3.97-4.04 (1H, m), 7.07-7.09 (1H, m), 7.17-7.22 (1H, m), 7.30-7.35 (1H, m), 7.40-7.48 (1H, m), 7.66-7.83 (3H, m), 11.27 (1H, brs)	Hydrochlorua
26	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δ ppm : 1.2-1.5 (6H, m), 1.57 (3H, s), 1.6-1.95 (4H, m), 1.95-2.15 (1H, m), 3.05 (1H, d, J = 13.3 Hz), 3.40 (1H, d, J = 13.4 Hz), 3.75-3.9 (4H, m), 4.05-4.2 (1H, m), 4.93 (1H, br), 7.07 (1H, dd, J = 2.5, 8.9 Hz), 7.1-7.2 (2H, m), 7.36 (1H, dd, J = 2.3, 9.1 Hz), 7.63 (1H, d, J = 9.0 Hz), 7.70 (1H, d, J = 9.1 Hz), 8.05-8.3 (1H, m), 9.75-10.05 (1H, m).	Dihydrochlorua
27	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δ ppm : 0.9-1.1 (2H, m), 1.25-1.45 (1H, m), 1.45-1.7 (7H, m), 1.7-2.1 (4H, m), 2.85 (1H, d, J = 12.7 Hz), 3.43 (1H, d, J = 12.8 Hz), 3.55-3.7 (1H, m), 4.1-4.3 (1H, m), 6.92 (1H, d, J = 7.7 Hz), 7.28 (1H, dd, J = 7.8, 7.8 Hz), 7.6-7.7 (2H, m), 7.74 (1H, d, J = 5.5 Hz), 7.9-8.2 (1H, m), 9.55-9.95 (1H, m).	Dihydrochlorua

28	-H		1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.18-1.28 (1H, m), 1.38-1.50 (2H, m), 1.66 (3H, s), 1.72-2.00 (2H, m), 1.90 (3H, s), 2.07-2.22 (1H, m), 2.39-2.52 (2H, m), 3.05 (1H, d, J = 12.8 Hz), 3.43 (1H, d, J = 12.8 Hz), 3.77-3.90 (1H, m), 3.91-4.01 (1H, m), 7.04 (1H, dd, J = 8.8, 2.2 Hz), 7.21-7.25 (2H, m), 7.43 (1H, d, J = 5.4 Hz), 7.75 (1H, d, J = 8.8 Hz), 8.55-8.97 (1H, br), 9.99-10.37 (1H, br)	Hydrochlorua
29	-CH ₃		1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.17-1.34 (1H, m), 1.37-1.74 (2H, m), 1.47 (3H, s), 1.87-2.04 (1H, m), 1.90 (3H, s), 2.20-2.30 (1H, m), 2.39-2.54 (1H, m), 2.64-2.88 (2H, m), 2.75 (3H, d, J = 4.9 Hz), 3.12 (1H, d, J = 13.2 Hz), 3.69-3.74 (1H, m), 3.85-3.93 (1H, m), 3.87 (1H, d, J = 13.2 Hz), 7.01 (1H, dd, J = 8.8, 2.3 Hz), 7.21-7.32 (2H, m), 7.44 (1H, d, J = 5.4 Hz), 7.75 (1H, d, J = 8.8 Hz), 11.20 (1H, brs)	Hydrochlorua
30	-H		1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.11-1.33 (1H, m), 1.36-1.54 (2H, m), 1.65 (3H, s), 1.72-2.00 (2H, m), 1.90 (3H, s), 2.07-2.29 (1H, m), 2.34-2.60 (2H, m), 3.08 (1H, d, J = 13.2 Hz), 3.42 (1H, d, J = 13.2 Hz), 3.76-4.02 (2H, m), 7.02 (1H, dd, J = 8.7, 2.2 Hz), 7.17-7.31 (3H, m), 7.70 (1H, d, J = 8.7 Hz), 8.64-9.00 (1H, br), 10.08-10.37 (1H, br)	Hydrochlorua
31	-CH ₃		1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.20-1.33 (1H, m), 1.38-1.74 (3H, m), 1.46 (3H, s), 1.90 (3H, s), 1.97-2.11 (1H, m), 2.20-2.30 (1H, m), 2.41-2.56 (1H, m), 2.66-2.89 (1H, m), 2.81 (3H, d, J = 4.8 Hz), 3.16 (1H, d, J = 13.3 Hz), 3.61-3.74 (1H, m), 3.88 (1H, d, J = 13.3 Hz), 3.89-3.99 (1H, m), 6.99 (1H, dd, J = 8.7, 2.1 Hz), 7.20-7.31 (3H, m), 7.70 (1H, d, J = 8.7 Hz), 11.04-11.44 (1H, br)	Hydrochlorua
32	-H		1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 0.9-1.2 (2H, m), 1.25-1.45 (1H, m), 1.53 (6H, s), 1.6-1.7 (1H, m), 1.7-1.9 (2H, m), 1.9-2.15 (2H, m), 2.92 (1H, d, J = 2.8 Hz), 3.48 (1H, d, J = 12.7 Hz), 3.75-4.0 (2H, m), 7.02 (1H, d, J = 7.6 Hz), 7.34 (1H, dd, J = 7.7, 7.7 Hz), 7.48 (1H, d, J = 5.4 Hz), 7.61 (1H, d, J = 7.8 Hz), 7.76 (1H, d, J = 5.4 Hz), 8.17 (1H, br), 9.78 (1H, br)	Hydrochlorua
33	-H		1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 0.95-1.15 (2H, m), 1.3-1.45 (1H, m), 1.51 (3H, s), 1.53 (3H, s), 1.6-2.1 (5H, m), 3.04 (1H, d, J = 12.9 Hz), 3.2-3.45 (1H, m), 3.75-3.95 (1H, m), 3.95-4.15 (1H, m), 6.6-6.8 (1H, m), 7.1-7.3 (3H, m), 7.94 (1H, d, J = 2.1 Hz), 8.07 (1H, br), 9.77 (1H, br)	Hydrochlorua

Bảng 6

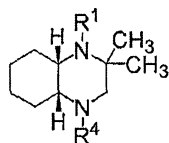
Cấu hình tương đối



Ví dụ	R ¹	R ⁴	NMR	Muối
34	-H		1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.15 (18H, d, J = 7.5 Hz), 1.20 (3H, s), 1.25-1.45 (6H, m), 1.45-1.8 (8H, m), 1.8-2.0 (1H, m), 2.83 (1H, d, J = 11.5 Hz), 3.11 (1H, d, J = 11.5 Hz), 3.6-3.65 (1H, m), 3.65-3.8 (1H, m), 6.50 (1H, d, J = 7.2 Hz), 6.64 (1H, d, J = 2.7 Hz), 7.00 (1H, dd, J = 7.9, 7.9 Hz), 7.11 (1H, d, J = 8.3 Hz), 7.16 (1H, d, J = 3.2 Hz).	—
35	-H		1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.13 (18H, d, J = 7.5 Hz), 1.21 (3H, s), 1.25-1.3 (5H, m), 1.35-1.45 (2H, m), 1.53 (1H, br), 1.6-1.8 (7H, m), 2.80 (1H, d, J = 11.7 Hz), 2.93 (1H, d, J = 11.5 Hz), 3.45-3.55 (1H, m), 3.55-3.65 (1H, m), 6.48 (1H, d, J = 2.6 Hz), 6.85 (1H, dd, J = 2.4, 9.0 Hz), 7.02 (1H, d, J = 2.4 Hz), 7.16 (1H, d, J = 3.2 Hz), 7.36 (1H, d, J = 9.1 Hz).	—
36	-H		1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.1-1.2 (18H, m), 1.21 (3H, s), 1.25-1.3 (4H, m), 1.3-1.85 (11H, m), 2.79 (1H, d, J = 11.6 Hz), 2.91 (1H, d, J = 11.6 Hz), 3.45-3.65 (2H, m), 6.45-6.5 (1H, m), 6.82 (1H, dd, J = 2.0, 8.6 Hz), 6.93 (1H, s), 7.08 (1H, d, J = 3.2 Hz), 7.45 (1H, d, J = 8.6 Hz).	—

Bảng 7

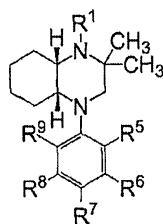
Cấu hình tương đối



Ví dụ	R ¹	R ⁴	NMR	Muối
37	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 0.95-1.15 (3H, m), 1.21 (3H, s), 1.25-1.45 (6H, m), 1.45-1.8 (2H, m), 1.8-1.95 (1H, m), 2.83 (1H, d, J = 11.5Hz), 3.11 (1H, d, J = 11.5Hz), 3.6-3.7 (1H, m), 3.75-3.85 (1H, m), 6.50 (1H, dd, J = 0.9, 7.4Hz), 6.55-6.6 (1H, m), 7.00 (1H, d, J = 8.1Hz), 7.07 (1H, dd, J = 7.7, 7.7Hz), 7.14 (1H, dd, J = 2.8, 2.8Hz), 8.18 (1H, br).	—
38	-CH ₃		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.0-1.15 (5H, m), 1.19 (3H, s), 1.2-1.5 (3H, m), 1.6-1.7 (1H, m), 2.0-2.3 (5H, m), 2.76 (1H, d, J = 11.5Hz), 3.05-3.15 (1H, m), 3.38 (1H, d, J = 11.4Hz), 3.8-3.9 (1H, m), 6.49 (1H, d, J = 7.4Hz), 6.55-6.6 (1H, m), 6.99 (1H, d, J = 7.4Hz), 7.07 (1H, dd, J = 7.8, 7.8Hz), 7.13 (1H, dd, J = 2.8, 2.8Hz), 8.11 (1H, br).	—
39	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.0-1.85 (15H, m), 2.82 (1H, d, J = 11.5Hz), 2.88 (1H, d, J = 11.5Hz), 3.45-3.55 (1H, m), 3.55-3.65 (1H, m), 6.4-6.45 (1H, m), 6.95 (1H, dd, J = 2.3, 8.8Hz), 7.04 (1H, d, J = 2.2Hz), 7.13 (1H, dd, J = 2.8, 2.8Hz), 7.25-7.3 (1H, m), 7.98 (1H, br).	—
40	-CH ₃		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.06 (3H, s), 1.1-1.55 (8H, m), 1.6-1.75 (1H, m), 1.95-2.15 (2H, m), 2.18 (3H, s), 2.80 (1H, d, J = 11.4Hz), 2.95-3.0 (1H, m), 3.10 (1H, d, J = 11.4Hz), 3.55-3.7 (1H, m), 6.35-6.45 (1H, m), 6.94 (1H, dd, J = 2.3, 8.8Hz), 7.03 (1H, d, J = 2.0Hz), 7.12 (1H, dd, J = 2.8, 2.8Hz), 7.2-7.3 (1H, m), 7.94 (1H, br).	—
41	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.0-1.4 (9H, m), 1.4-1.9 (5H, m), 2.82 (1H, d, J = 11.9Hz), 2.95 (1H, d, J = 12.0Hz), 3.0-4.5 (4H, m), 6.25 (1H, dd, J = 2.4, 2.4Hz), 6.47 (1H, s), 6.7-6.8 (2H, m), 7.10 (1H, dd, J = 2.7, 2.7Hz), 7.34 (1H, d, J = 9.3Hz), 10.65 (1H, s).	Hemifumarat
42	-CH ₃		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 0.95-1.5 (11H, m), 1.55-1.7 (1H, m), 1.85-2.1 (2H, m), 2.18 (3H, s), 2.65-4.2 (6H, m), 6.2-6.25 (1H, m), 6.60 (2H, s), 6.7-6.8 (2H, s), 7.09 (1H, dd, J = 2.4, 3.0Hz), 7.33 (1H, d, J = 8.5Hz), 10.60 (1H, s).	Fumarat
43	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 0.95-1.4 (9H, m), 1.45-1.9 (5H, m), 2.88 (2H, dd, J = 12.3, 15.1Hz), 3.5-3.6 (1H, m), 3.6-3.75 (4H, m), 6.24 (1H, dd, J = 0.6, 3.0Hz), 6.47 (1H, s), 6.85-7.0 (2H, m), 7.18 (1H, d, J = 3.0Hz), 7.27 (1H, d, J = 9.5Hz).	Hemifumarat
44	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.1-1.4 (9H, m), 1.4-1.9 (6H, m), 2.85 (1H, d, J = 12.1Hz), 3.03 (1H, d, J = 12.1Hz), 3.5-3.6 (1H, m), 3.69 (3H, s), 3.75-3.85 (1H, m), 6.24 (1H, d, J = 3.1Hz), 6.49 (2H, s), 6.7-6.85 (2H, m), 7.07 (1H, d, J = 3.1Hz), 7.34 (1H, d, J = 8.6Hz).	Fumarat
45	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.0-1.3 (2H, m), 1.3-1.45 (7H, m), 1.5-1.95 (5H, m), 2.9-3.1 (2H, m), 3.71 (1H, br), 3.8-3.95 (1H, m), 3.98 (3H, s), 6.54 (3H, s), 7.04 (1H, s), 7.27 (1H, dd, J = 1.9, 9.2Hz), 7.51 (1H, d, J = 9.1Hz), 7.83 (1H, s), 10.6 (4H, br).	3/2 Fumarat
46	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.1-1.35 (2H, m), 1.35-1.45 (4H, m), 1.50 (3H, s), 1.6-1.9 (4H, m), 1.9-2.1 (1H, m), 2.92 (1H, d, J = 13.2Hz), 3.11 (1H, d, J = 13.2Hz), 3.5-4.05 (3H, m), 5.91 (2H, d, J = 1.0Hz), 6.32 (1H, dd, J = 2.4, 8.5Hz), 6.71 (1H, d, J = 2.3Hz), 6.76 (1H, d, J = 8.4Hz), 8.06 (1H, br), 9.83 (1H, br).	Dihydrochlorua

Bảng 8

Cấu hình tương đối

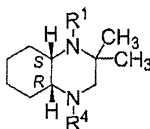


Ví dụ	R ¹	R ⁵	R ⁶	R ⁷	R ⁸	R ⁹	NMR	Muối
47	-H	-H	-H	-F	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.1-1.35 (2H, m), 1.35-1.5 (4H, m), 1.53 (3H, s), 1.6-1.95 (4H, m), 1.95-2.15 (1H, m), 2.94 (1H, d, J = 13.3Hz), 3.24 (1H, d, J = 13.2Hz), 3.65-3.85 (1H, m), 3.85-4.0 (1H, m), 5.30 (1H, br), 6.9-7.0 (2H, m), 7.0-7.1 (2H, m), 8.0-8.35 (1H, m), 10.03 (1H, d, J = 10.5Hz).	Dihydroclorua
48	-H	-H	-H	-F	-F	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.2-1.35 (6H, m), 1.52 (3H, s), 1.6-1.95 (4H, m), 1.95-2.15 (1H, m), 2.93 (1H, d, J = 13.5Hz), 3.36 (1H, d, J = 13.5Hz), 3.65-3.8 (1H, m), 3.9-4.1 (1H, m), 6.6-6.8 (1H, m), 6.9-7.1 (1H, m), 7.25 (1H, dd, J = 9.5, 19.7Hz), 8.0-8.4 (1H, m), 10.02 (1H, d, J = 11.3Hz).	Hydroclorua
49	-H	-H	-F	-H	-F	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.25-1.6 (9H, m), 1.6-2.05 (5H, m), 2.95 (1H, d, J = 14.0Hz), 3.56 (1H, d, J = 13.9Hz), 3.6-3.75 (1H, m), 4.0-4.15 (1H, m), 6.35-6.55 (1H, m), 6.5-6.75 (2H, m), 8.05-8.4 (1H, m), 9.65-10.2 (1H, m).	Hydroclorua
50	-H	-H	-F	-OCH ₃	-F	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.2-1.45 (6H, m), 1.50 (3H, s), 1.6-1.9 (4H, m), 1.9-2.05 (1H, m), 2.90 (1H, d, J = 13.7Hz), 3.42 (1H, d, J = 13.7Hz), 3.6-3.75 (1H, m), 3.78 (3H, s), 3.9-4.05 (1H, m), 6.65-6.8 (2H, m), 8.17 (1H, br), 9.86 (1H, br).	Hydroclorua
51	-CH ₃	-H	-F	-OCH ₃	-F	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 0.96 (3H, s), 1.05-1.2 (4H, m), 1.2-1.5 (4H, m), 1.55-1.75 (1H, m), 1.85-2.1 (2H, m), 2.16 (3H, s), 2.75-2.9 (2H, m), 3.12 (1H, d, J = 12.4Hz), 3.65-3.85 (4H, m), 6.55-6.65 (5H, m).	3/2 Fumarat
52	-H	-H	-Cl	-H	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.2-1.45 (6H, m), 1.51 (3H, s), 1.6-2.05 (5H, m), 2.94 (1H, d, J = 13.7Hz), 3.48 (1H, d, J = 14.0Hz), 3.65-3.8 (1H, m), 4.0-4.15 (1H, m), 6.77 (1H, dd, J = 1.5, 7.8Hz), 6.90 (1H, dd, J = 2.3, 8.4Hz), 6.95-7.0 (1H, m), 7.21 (1H, dd, J = 8.1, 8.1Hz), 8.14 (1H, br), 9.55-10.0 (1H, m).	Hydroclorua
53	-CH ₃	-H	-Cl	-H	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 0.97 (3H, s), 1.05-1.2 (4H, m), 1.2-1.5 (4H, m), 1.6-1.75 (1H, m), 1.9-2.1 (2H, m), 2.15 (3H, s), 2.65-5.05 (6H, m), 6.61 (2H, s), 6.66 (1H, dd, J = 1.2, 7.8Hz), 6.75-6.9 (2H, m), 7.15 (1H, dd, J = 8.1, 8.1Hz).	Fumarat Fumarat
54	-H	-H	-H	-Cl	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.15-1.45 (6H, m), 1.52 (3H, s), 1.6-2.1 (5H, m), 2.93 (1H, d, J = 13.6Hz), 3.39 (1H, d, J = 13.9Hz), 3.65-3.8 (1H, m), 3.9-4.1 (1H, m), 6.9-7.0 (2H, m), 7.15-7.3 (2H, m), 7.95-8.4 (1H, m), 9.65-10.1 (1H, m).	Hydroclorua
55	-CH ₃	-H	-H	-Cl	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 0.99 (3H, s), 1.05-1.5 (8H, m), 1.55-1.75 (1H, m), 1.85-2.1 (2H, m), 2.17 (3H, s), 2.8-2.95 (2H, m), 3.12 (1H, d, J = 12.3Hz), 3.7-3.85 (1H, m), 6.61 (2H, s), 6.8-6.9 (2H, m), 7.1-7.2 (2H, m).	Fumarat
56	-H	-H	-Cl	-Cl	-H	-H	1H-NMR (DMSO) δppm : 1.21-1.62 (2H, m), 1.38 (3H, s), 1.53 (3H, s), 1.67-2.09 (6H, m), 2.95 (1H, d, J = 13.6 Hz), 3.48 (1H, d, J = 13.6 Hz), 3.70-3.74 (1H, m), 4.04-4.10 (1H, m), 6.95 (1H, dd, J = 8.7, 2.6 Hz), 7.17 (1H, d, J = 2.6 Hz), 7.40 (1H, d, J = 8.7 Hz), 8.03-8.52 (1H, br), 9.77-10.21 (1H, br)	Hydroclorua

57	-CH ₃	-H	-Cl	-Cl	-H	-H	1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.23-1.72 (4H, m), 1.42 (3H, s), 1.89 (3H, s), 2.01-2.11 (1H, m), 2.20-2.29 (1H, m), 2.37-2.55 (1H, m), 2.68-2.83 (1H, m), 2.79 (3H, d, J = 4.8 Hz), 3.09 (1H, d, J = 13.5 Hz), 3.54-3.65 (1H, m), 3.76-3.83 (1H, m), 3.78 (1H, d, J = 13.5 Hz), 6.88 (1H, dd, J = 9.0, 2.9 Hz), 6.92 (1H, d, J = 2.9 Hz), 7.30 (1H, d, J = 9.0 Hz), 11.48 (1H, brs)	Hydrochlorua
58	-H	-H	-Cl	-F	-H	-H	1H-NMR (DMSO) δppm : 1.24-1.57 (3H, m), 1.37 (3H, s), 1.52 (3H, s), 1.64-1.81 (4H, m), 1.87-2.01 (1H, m), 2.92 (1H, d, J = 13.1 Hz), 3.45 (1H, d, J = 13.1 Hz), 3.65-3.79 (1H, m), 3.90-4.06 (1H, m), 6.89-6.94 (1H, m), 7.08-7.11 (1H, m), 7.20-7.27 (1H, m), 7.90-8.21 (1H, br), 9.55-9.81 (1H, br)	Hydrochlorua

Bảng 9

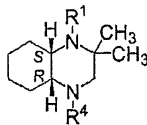
Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ	R ¹	R ⁴	NMR	Muối
59	-H		1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.15-1.35 (8H, m), 1.35-1.85 (7H, m), 2.82 (1H, d, J = 11.7Hz), 3.05 (1H, d, J = 11.8Hz), 3.45-3.55 (1H, m), 3.7-3.8 (1H, m), 3.88 (3H, s), 6.97 (1H, d, J = 2.4Hz), 7.0-7.1 (2H, m), 7.22-7.29 (1H, m), 7.55 (1H, d, J = 8.8Hz), 7.61 (1H, d, J = 9.0Hz).	-
60	-H		1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.15-1.3 (8H, m), 1.3-1.5 (6H, m), 1.65-1.85 (4H, m), 2.82 (1H, d, J = 11.7Hz), 3.04 (1H, d, J = 11.7Hz), 3.45-3.55 (1H, m), 3.7-3.8 (1H, m), 4.11 (2H, q, J = 7.0Hz), 6.96 (1H, d, J = 2.4Hz), 7.03 (1H, d, J = 2.4Hz), 7.06 (1H, dd, J = 2.5, 8.8Hz), 7.2-7.3 (1H, m), 7.55 (1H, d, J = 8.9Hz), 7.59 (1H, d, J = 9.0Hz).	-
61	-H		1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.25-1.5 (6H, m), 1.56 (3H, s), 1.65-2.1 (5H, m), 3.06 (1H, d, J = 13.4Hz), 3.48 (1H, d, J = 13.4Hz), 3.8-3.9 (1H, m), 4.1-4.2 (1H, m), 4.42 (1H, br), 7.24 (1H, d, J = 2.2Hz), 7.31 (1H, ddd, J = 4.5, 12.8, 12.8Hz), 7.47 (1H, dd, J = 2.3, 9.2Hz), 7.54 (1H, dd, J = 2.6, 10.2Hz), 7.75-7.8 (2H, m), 8.1-8.25 (1H, m), 9.75-9.95 (1H, m).	Dihydrochlorua
62	-H		1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 0.9-1.1 (2H, m), 1.3-1.4 (1H, m), 1.5-1.65 (7H, m), 1.65-1.85 (2H, m), 1.9-2.1 (2H, m), 2.81 (1H, d, J = 1.26Hz), 3.4-3.6 (2H, m), 4.2-4.35 (1H, m), 7.13 (1H, d, J = 7.0Hz), 7.43 (1H, dd, J = 7.8, 7.8Hz), 7.5-7.6 (2H, m), 7.65 (1H, d, J = 8.2Hz), 7.85-7.95 (1H, m), 7.95-8.15 (1H, m), 8.2-8.3 (1H, m), 9.65-9.85 (1H, m).	Hydrochlorua
63	-H		1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 0.9-1.15 (2H, m), 1.3-1.4 (1H, m), 1.5-1.7 (7H, m), 1.7-1.85 (2H, m), 1.9-2.1 (2H, m), 2.77 (1H, d, J = 12.6Hz), 3.3-3.45 (1H, m), 3.52 (1H, d, J = 12.6Hz), 4.2-4.3 (1H, m), 7.05-7.15 (1H, m), 7.25 (1H, dd, J = 8.2, 10.5Hz), 7.6-7.7 (2H, m), 8.0-8.15 (2H, m), 8.3-8.4 (1H, m), 9.7-9.95 (1H, m).	Hydrochlorua

Bảng 10

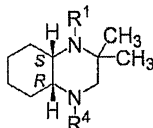
Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ	R ¹	R ⁴	NMR	Muối
64	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0.9-1.1 (2H, m), 1.3-1.4 (1H, m), 1.5-1.7 (7H, m), 1.7-1.9 (2H, m), 1.95-2.15 (2H, m), 2.89 (1H, d, J = 12.7Hz), 3.0-4.2 (4H, m), 4.3-4.4 (1H, m), 7.35-7.5 (1H, m), 7.8-8.05 (3H, m), 8.05-8.3 (1H, m), 9.1-9.4 (2H, m), 10.0-10.25 (1H, m).	Trihydroclorua
65	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0.9-1.05 (3H, m), 1.24 (3H, s), 1.35-1.45 (5H, m), 1.55-1.8 (3H, m), 1.9-2.05 (1H, m), 2.71 (1H, d, J = 11.3Hz), 3.25 (1H, d, J = 11.3Hz), 3.65-3.75 (1H, m), 3.75-3.85 (1H, m), 6.76 (1H, d, J = 5.0Hz), 7.45-7.5 (1H, m), 7.6-7.7 (1H, m), 8.0-8.1 (2H, m), 8.68 (1H, d, J = 5.0Hz).	—
66	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1.35-1.5 (6H, m), 1.62 (3H, s), 1.7-2.0 (3H, m), 2.0-2.15 (2H, m), 2.7-4.3 (4H, m), 4.25-4.4 (1H, m), 7.57 (1H, d, J = 2.8Hz), 7.90 (1H, d, J = 5.2, 8.5Hz), 8.04 (1H, dd, J = 2.7, 9.6Hz), 8.24 (1H, d, J = 9.5Hz), 8.5-8.6 (1H, m), 8.79 (1H, d, J = 8.4Hz), 8.93 (1H, dd, J = 1.3, 5.2Hz), 10.22 (1H, d, J = 10.1Hz).	Dihydroclorua
67	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1.41 (3H, s), 1.45-1.6 (3H, m), 1.62 (3H, s), 1.7-1.85 (2H, m), 1.85-2.0 (1H, m), 2.05-2.25 (2H, m), 3.27 (1H, d, J = 14.5Hz), 3.37 (1H, br), 3.75-3.85 (1H, m), 4.09 (1H, d, J = 14.4Hz), 4.4-4.5 (1H, m), 7.50 (1H, d, J = 2.1Hz), 7.85 (1H, dd, J = 2.4, 9.5Hz), 7.93 (1H, d, J = 6.8Hz), 8.25-8.35 (2H, m), 8.6-8.75 (1H, m), 9.36 (1H, s), 10.2-10.4 (1H, m).	Dihydroclorua

Bảng 11

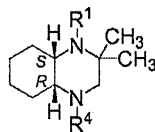
Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ	R ¹	R ⁴	NMR	Muối
68	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0.9-1.1 (2H, m), 1.22 (3H, s), 1.3-1.45 (6H, m), 1.45-1.8 (3H, m), 1.8-2.0 (1H, m), 2.65 (1H, d, J = 11.3Hz), 3.19 (1H, d, J = 11.3Hz), 3.45-3.55 (1H, m), 3.65-3.75 (1H, m), 6.79 (1H, d, J = 7.6Hz), 7.15-7.3 (1H, m), 7.38 (1H, d, J = 5.5Hz), 7.44 (1H, d, J = 5.5Hz), 7.51 (1H, d, J = 8.0Hz).	—
69	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1.1-1.35 (2H, m), 1.35-1.5 (4H, m), 1.55 (3H, s), 1.6-2.15 (5H, m), 3.03 (1H, d, J = 13.2Hz), 3.35 (1H, d, J = 13.2Hz), 3.71 (1H, br), 3.75-3.9 (1H, m), 3.95-4.15 (1H, m), 7.16 (1H, dd, J = 2.1, 9.0Hz), 7.29 (1H, d, J = 5.4Hz), 7.35 (1H, d, J = 2.0Hz), 7.68 (1H, d, J = 5.4Hz), 7.82 (1H, d, J = 8.9Hz), 8.05-8.25 (1H, m), 9.75-10.0 (1H, m).	Dihydroclorua
70	-CH ₃		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0.95-1.5 (11H, m), 1.55-1.75 (1H, m), 1.85-2.1 (2H, m), 2.19 (3H, s), 2.65-5.05 (6H, m), 6.61 (2H, s), 7.10 (1H, dd, J = 2.4, 9.0Hz), 7.24 (1H, d, J = 2.3Hz), 7.27 (1H, dd, J = 0.5, 5.4Hz), 7.62 (1H, d, J = 5.4Hz), 7.75 (1H, d, J = 8.9Hz).	Fumarat
71	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1.2-1.5 (6H, m), 1.54 (3H, s), 1.6-2.1 (5H, m), 3.03 (1H, d, J = 13.4Hz), 3.43 (1H, d, J = 13.6Hz), 3.7-3.9 (1H, m), 4.0-4.2 (1H, m), 7.14 (1H, dd, J = 2.2, 8.9Hz), 7.27 (1H, d, J = 5.4Hz), 7.4-7.55 (2H, m), 7.71 (1H, d, J = 8.8Hz), 8.14 (1H, br), 9.84 (1H, br).	Hydroclorua
72	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0.95-1.2 (2H, m), 1.3-1.45 (1H, m), 1.45-1.7 (7H, m), 1.7-1.9 (2H, m), 1.9-2.2 (2H, m), 2.91 (1H, d, J = 12.8Hz), 3.48 (1H, d, J = 12.9Hz), 3.75-4.0 (2H, m), 7.01 (1H, d, J = 7.5Hz), 7.34 (1H, dd, J = 7.7, 7.7Hz), 7.48 (1H, d, J = 5.4Hz), 7.61 (1H, d, J = 7.7Hz), 7.76 (1H, d, J = 5.4Hz), 8.24 (1H, br), 9.94 (1H, br).	Hydroclorua

Bảng 12

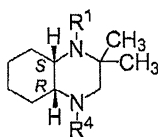
Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ	R ¹	R ⁴	NMR	Muối
73	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 0.95-1.15 (2H, m), 1.3-1.45 (1H, m), 1.51 (3H, s), 1.53 (3H, s), 1.55-2.05 (5H, m), 3.04 (1H, d, J = 12.9Hz), 3.2-3.4 (1H, m), 3.75-3.9 (1H, m), 4.0-4.15 (1H, m), 6.71 (1H, dd, J = 3.0, 5.5Hz), 7.15-7.25 (3H, m), 7.94 (1H, d, J = 2.2Hz), 8.08 (1H, br), 9.80 (1H, br).	Hydrochlorua
74	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.1-1.35 (2H, m), 1.35-1.5 (4H, m), 1.54 (3H, s), 1.6-1.95 (4H, m), 1.95-2.1 (1H, m), 3.03 (1H, d, J = 13.1Hz), 3.21 (1H, d, J = 13.1Hz), 3.75-3.9 (1H, m), 3.9-4.0 (1H, m), 4.83 (1H, br), 6.8-6.85 (1H, m), 7.03 (1H, dd, J = 2.5, 9.0Hz), 7.13 (1H, d, J = 2.4Hz), 7.46 (1H, d, J = 9.0Hz), 7.90 (1H, d, J = 2.2Hz), 8.11 (1H, br), 9.91 (1H, br).	Dihydrochlorua
75	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.15-1.5 (6H, m), 1.55 (3H, s), 1.6-1.95 (4H, m), 1.95-2.15 (1H, m), 3.01 (1H, d, J = 13.4Hz), 3.36 (1H, d, J = 13.1Hz), 3.7-3.85 (1H, m), 3.95-4.05 (1H, m), 4.50 (1H, br), 6.80 (1H, d, J = 2.1Hz), 6.98 (1H, dd, J = 1.9, 8.7Hz), 7.13 (1H, s), 7.47 (1H, d, J = 8.6Hz), 7.79 (1H, d, J = 0.7H), 8.20 (1H, br), 9.85-10.2 (1H, m).	Dihydrochlorua
76	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.1-1.3 (2H, m), 1.35-1.45 (1H, m), 1.50 (3H, s), 1.54 (3H, s), 1.6-1.9 (3H, m), 1.9-2.1 (2H, m), 3.2-3.4 (2H, m), 3.9-4.0 (1H, m), 4.15-4.25 (1H, m), 6.80 (1H, d, J = 7.2Hz), 6.93 (1H, d, J = 2.2Hz), 7.12 (1H, dd, J = 7.7, 7.7Hz), 7.21 (1H, dd, J = 0.8, 7.7Hz), 7.97 (1H, d, J = 2.2Hz), 8.1-8.35 (1H, m), 9.7-9.9 (1H, m).	Hydrochlorua
77	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.0-1.45 (11H, m), 1.6-1.8 (3H, m), 1.8-1.95 (1H, m), 2.70 (1H, d, J = 11.3Hz), 3.04 (1H, d, J = 11.3Hz), 3.50 (1H, ddd, J = 3.8, 3.8, 12.1Hz), 3.55-3.65 (1H, m), 6.47 (1H, dd, J = 3.4, 8.6Hz), 6.84 (1H, dd, J = 2.5, 2.5Hz), 6.89 (1H, dd, J = 8.6, 10.4Hz), 7.60 (1H, d, J = 2.2Hz).	—
78	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.0-1.15 (2H, m), 1.20 (3H, s), 1.25-1.45 (6H, m), 1.6-1.8 (3H, m), 1.8-1.95 (1H, m), 2.79 (1H, d, J = 11.5Hz), 3.05 (1H, d, J = 11.4Hz), 3.55-3.65 (2H, m), 6.53 (1H, d, J = 8.4Hz), 6.84 (1H, d, J = 2.2Hz), 7.14 (1H, d, J = 8.4Hz), 7.61 (1H, d, J = 2.2Hz).	—
79	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 0.95-1.1 (2H, m), 1.3-1.4 (1H, m), 1.51 (3H, s), 1.52 (3H, s), 1.6-1.7 (1H, m), 1.7-1.95 (3H, m), 1.95-2.05 (1H, m), 2.39 (3H, s), 2.95 (1H, d, J = 12.8Hz), 3.28 (1H, d, J = 12.9Hz), 3.7-3.8 (1H, m), 4.0-4.15 (1H, m), 6.61 (1H, d, J = 7.9Hz), 6.99 (1H, d, J = 8.0Hz), 7.20 (1H, d, J = 2.2Hz), 7.95 (1H, d, J = 2.2Hz), 7.95-8.15 (1H, m), 9.7-9.9 (1H, m).	Hydrochlorua
80	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 0.95-1.1 (2H, m), 1.3-1.4 (1H, m), 1.52 (6H, s), 1.55-1.65 (1H, m), 1.65-1.95 (3H, m), 1.95-2.1 (1H, m), 2.85 (1H, d, J = 12.7Hz), 3.27 (1H, d, J = 12.8Hz), 3.6-3.7 (1H, m), 3.87 (3H, s), 4.0-4.15 (1H, m), 6.61 (1H, d, J = 8.4Hz), 6.79 (1H, d, J = 8.4Hz), 7.21 (1H, d, J = 2.2Hz), 7.95 (1H, d, J = 2.2Hz), 7.95-8.15 (1H, m), 9.75-10.0 (1H, m).	Hydrochlorua
81	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.05-1.25 (2H, m), 1.35-1.45 (1H, m), 1.50 (3H, s), 1.53 (3H, s), 1.6-1.9 (3H, m), 1.9-2.1 (2H, m), 3.17 (1H, d, J = 13.0Hz), 3.29 (1H, d, J = 13.2Hz), 3.9-4.0 (1H, m), 4.0-4.1 (1H, m), 6.80 (1H, dd, J = 4.4, 8.7Hz), 6.98 (1H, dd, J = 8.9, 8.9Hz), 7.06 (1H, d, J = 2.2Hz), 8.06 (1H, d, J = 2.2Hz), 8.1-8.3 (1H, m), 9.7-9.9 (1H, m).	Hydrochlorua

Bảng 13

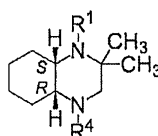
Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ	R ¹	R ⁴	NMR	Muối
82	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.1-1.2 (20H, m), 1.20 (3H, s), 1.3-1.45 (6H, m), 1.55-1.8 (6H, m), 1.8-2.0 (1H, m), 2.83 (1H, d, J = 11.5Hz), 3.11 (1H, d, J = 11.5Hz), 3.6-3.7 (1H, m), 3.7-3.8 (1H, m), 6.50 (1H, d, J = 7.4Hz), 6.64 (1H, d, J = 3.1Hz), 7.00 (1H, dd, J = 7.9, 7.9Hz), 7.11 (1H, d, J = 8.3Hz), 7.16 (1H, d, J = 3.2Hz).	-
83	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.13 (18H, d, J = 7.5Hz), 1.21 (3H, s), 1.28 (3H, s), 1.3-1.6 (5H, m), 1.55-1.8 (7H, m), 2.80 (1H, d, J = 11.6Hz), 2.93 (1H, d, J = 11.6Hz), 3.45-3.55 (1H, m), 3.55-3.65 (1H, m), 6.48 (1H, d, J = 3.1Hz), 6.85 (1H, dd, J = 2.4, 9.0Hz), 7.02 (1H, d, J = 2.4Hz), 7.16 (1H, d, J = 3.1Hz), 7.35 (1H, d, J = 9.0Hz).	-
84	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.1-1.2 (18H, m), 1.21 (3H, s), 1.29 (3H, s), 1.3-1.5 (5H, m), 1.55-1.8 (7H, m), 2.79 (1H, d, J = 11.6Hz), 2.91 (1H, d, J = 11.6Hz), 3.45-3.6 (2H, m), 6.48 (1H, d, J = 3.2Hz), 6.82 (1H, dd, J = 2.0, 8.6Hz), 6.93 (1H, s), 7.08 (1H, d, J = 3.2Hz), 7.45 (1H, d, J = 8.6Hz).	-

Bảng 14

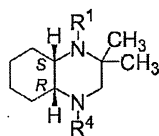
Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ	R ¹	R ⁴	NMR	Muối
85	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 0.9-1.15 (2H, m), 1.21 (3H, s), 1.25-1.45 (5H, m), 1.5-1.8 (4H, m), 1.8-2.0 (1H, m), 2.83 (1H, d, J = 11.5Hz), 3.11 (1H, d, J = 11.5Hz), 3.6-3.75 (1H, m), 3.75-3.85 (1H, m), 6.50 (1H, dd, J = 0.9, 7.4Hz), 6.55-6.6 (1H, m), 6.95-7.05 (1H, m), 7.07 (1H, dd, J = 7.7, 7.7Hz), 7.14 (1H, dd, J = 2.8, 2.8Hz), 8.15 (1H, br).	-
86	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.0-1.25 (2H, m), 1.35 (7H, br), 1.45-1.9 (5H, m), 2.93 (2H, s), 3.6-3.8 (2H, m), 6.2-6.3 (1H, m), 6.50 (2H, s), 6.86 (1H, dd, J = 2.1, 8.8Hz), 6.95 (1H, d, J = 1.8Hz), 7.15-7.3 (2H, m), 10.80 (1H, s).	Fumarat
87	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.05-1.85 (15H, m), 2.79 (1H, d, J = 11.6Hz), 2.94 (1H, d, J = 11.6Hz), 3.45-3.55 (1H, m), 3.6-3.75 (1H, m), 6.35-6.45 (1H, m), 6.79 (1H, s), 6.86 (1H, dd, J = 2.1, 8.7Hz), 7.03 (1H, dd, J = 2.4, 3.2Hz), 7.47 (1H, d, J = 8.7Hz), 7.89 (1H, br).	-

Bảng 15

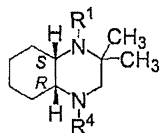
Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ	R ¹	R ⁴	NMR	Muối
88	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 0.85-1.05 (2H, m), 1.25-1.4 (4H, m), 1.40 (3H, s), 1.5-2.0 (5H, m), 2.82 (1H, d, J = 8.2Hz), 3.21 (1H, d, J = 12.2Hz), 3.74 (3H, s), 3.8-3.9 (2H, m), 6.44 (1H, dd, J = 2.5, 5.8Hz), 6.5-6.55 (3H, m), 6.95-7.05 (2H, m), 7.22 (1H, d, J = 3.1Hz).	Fumarat
89	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.0-1.2 (2H, m), 1.32 (7H, bs), 1.45-1.85 (6H, m), 2.85-2.95 (2H, m), 3.63 (1H, br), 3.65-3.8 (4H, m), 6.24 (1H, dd, J = 0.6, 3.0Hz), 6.50 (2H, s), 6.9-7.0 (2H, m), 7.19 (1H, d, J = 3.0Hz), 7.28 (1H, d, J = 8.6Hz).	Fumarat
90	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.05-1.3 (2H, m), 1.3-1.45 (7H, m), 1.5-1.9 (5H, m), 2.90 (1H, d, J = 12.4Hz), 3.08 (1H, d, J = 12.3Hz), 3.62 (1H, br), 3.70 (3H, s), 3.8-3.9 (1H, m), 6.25 (1H, d, J = 3.0Hz), 6.52 (2H, s), 6.75-6.85 (2H, m), 7.09 (1H, d, J = 3.1Hz), 7.35 (1H, d, J = 8.6Hz).	Fumarat
91	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 0.6-2.4 (15H, m), 2.7-3.3 (2H, m), 3.4-3.8 (2H, m), 3.85 (3H, s), 6.95-7.05 (2H, m), 7.15-7.3 (2H, m).	-

Bảng 16

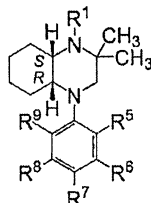
Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ	R ¹	R ⁴	NMR	Muối
92	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.1-1.4 (9H, m), 1.45-1.75 (4H, m), 1.8-1.95 (1H, m), 2.80 (1H, d, J = 12.3Hz), 3.20 (1H, d, J = 12.3Hz), 3.4-3.5 (1H, m), 3.8-3.9 (1H, m), 6.51 (1H, s), 7.20 (1H, dd, J = 2.5, 9.1Hz), 7.51 (1H, d, J = 2.4Hz), 7.85 (1H, d, J = 9.1Hz), 9.01 (1H, s).	Hemifumar
93	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.0-1.2 (2H, m), 1.3-1.45 (1H, m), 1.48 (3H, s), 1.50 (3H, s), 1.55-1.7 (1H, m), 1.7-2.15 (6H, m), 2.7-2.95 (5H, m), 3.28 (1H, d, J = 12.8Hz), 3.35-3.45 (1H, m), 3.75-3.95 (1H, m), 6.68 (1H, d, J = 7.8Hz), 6.90 (1H, d, J = 7.2Hz), 7.05 (1H, dd, J = 7.6, 7.6Hz), 7.95-8.2 (1H, m), 9.75-10.0 (1H, m).	Hydrochlorua
94	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.15-1.3 (2H, m), 1.3-1.5 (4H, m), 1.53 (3H, s), 1.6-1.9 (4H, m), 1.9-2.1 (3H, m), 2.74 (2H, t, J = 7.3Hz), 2.79 (2H, t, J = 7.4Hz), 2.93 (1H, d, J = 13.2Hz), 3.22 (1H, d, J = 13.3Hz), 3.65-3.8 (1H, m), 3.85-4.0 (1H, m), 6.70 (1H, dd, J = 2.2, 8.2Hz), 6.8-6.85 (1H, m), 7.05 (1H, d, J = 8.2Hz), 7.6-8.4 (2H, m), 9.85-10.2 (1H, m).	Dihydrocloru
95	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.1-1.3 (2H, m), 1.35-1.5 (4H, m), 1.51 (3H, s), 1.6-1.9 (4H, m), 2.0-2.1 (1H, m), 2.95 (1H, d, J = 13.0Hz), 3.02 (1H, d, J = 13.0Hz), 3.11 (2H, t, J = 8.6Hz), 3.7-3.85 (2H, m), 4.44 (2H, t, J = 8.6Hz), 4.7-5.5 (1H, m), 6.6-6.7 (2H, m), 6.85-6.95 (1H, m), 8.09 (1H, br), 9.94 (1H, br).	Dihydrocloru

Bảng 17

Cấu hình tuyệt đối

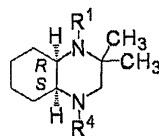


Ví dụ	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	R ⁶	NMR	Muối
96	-H	-F	-H	-H	-H	-H	¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.1-1.25 (2H, m), 1.35-1.45 (1H, m), 1.46 (3H, s), 1.49 (3H, s), 1.6-1.85 (3H, m), 1.85-2.05 (2H, m), 2.93 (1H, d, J = 13.1Hz), 3.27 (1H, d, J = 13.2Hz), 3.55-3.65 (1H, m), 3.8-3.9 (1H, m), 6.95-7.05 (1H, m), 7.05-7.2 (3H, m), 8.0-8.2 (1H, m), 9.55-9.75 (1H, m).	Hydrochlorua
97	-H	-H	-H	-F	-H	-H	¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.1-1.35 (2H, m), 1.35-1.45 (4H, m), 1.53 (3H, s), 1.6-1.95 (4H, m), 1.95-2.15 (1H, m), 2.94 (1H, d, J = 13.3Hz), 3.24 (1H, d, J = 13.3Hz), 3.65-3.85 (1H, m), 3.85-4.0 (1H, m), 4.2-5.8 (1H, m), 6.85-7.0 (2H, m), 7.0-7.1 (2H, m), 8.19 (1H, br), 10.05 (1H, br).	Dihydrocloru
98	-H	-H	-F	-OCH ₃	-H	-H	¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.2-1.35 (2H, m), 1.35-1.45 (4H, m), 1.52 (3H, s), 1.6-1.9 (4H, m), 2.0-2.1 (1H, m), 2.90 (1H, d, J = 13.3Hz), 3.22 (1H, d, J = 13.2Hz), 3.65-3.8 (4H, m), 3.85-3.95 (1H, m), 6.6-6.7 (1H, m), 6.89 (1H, dd, J = 2.9, 14.7Hz), 7.02 (1H, dd, J = 9.5, 9.5Hz), 8.05-8.25 (1H, m), 9.94 (1H, br).	Dihydrocloru
99	-H	-H	-OCH ₃	-F	-H	-H	¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.2-1.45 (6H, m), 1.55 (3H, s), 1.6-1.95 (4H, m), 2.0-2.15 (1H, m), 2.95 (1H, d, J = 13.2Hz), 3.24 (1H, d, J = 13.2Hz), 3.7-3.8 (1H, m), 3.82 (3H, s), 3.9-4.0 (1H, m), 6.4-6.5 (1H, m), 6.70 (1H, dd, J = 2.8, 7.6Hz), 7.03 (1H, dd, J = 8.9, 11.3Hz), 8.0 (1H, br), 8.15-8.35 (1H, m), 10.0-10.15 (1H, m).	Dihydrocloru
100	-H	-F	-F	-H	-H	-H	¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.15-1.3 (2H, m), 1.35-1.45 (1H, m), 1.46 (3H, s), 1.50 (3H, s), 1.6-1.85 (3H, m), 1.9-2.05 (2H, m), 3.00 (1H, d, J = 13.2Hz), 3.28 (1H, d, J = 13.2Hz), 3.6-3.7 (1H, m), 3.8-3.9 (1H, m), 6.85-6.95 (1H, m), 6.95-7.05 (1H, m), 7.05-7.15 (1H, m), 8.05-8.35 (1H, m), 9.7-9.9 (1H, m).	Hydrochlorua
101	-H	-H	-H	-F	-F	-H	¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.05-1.4 (9H, m), 1.4-1.9 (5H, m), 2.72 (1H, d, J = 12.5Hz), 2.8-4.6 (6H, m), 6.54 (2H, s), 6.6-6.7 (1H, m), 6.85-7.0 (1H, m), 7.20 (1H, dd, J = 9.5, 19.9Hz).	Fumarat
102	-H	-H	-F	-F	-F	-H	¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.25-1.5 (6H, m), 1.51 (3H, s), 1.65-2.1 (5H, m), 2.92 (1H, d, J = 13.8Hz), 3.46 (1H, d, J = 13.8Hz), 3.65-3.75 (1H, m), 4.0-4.1 (1H, m), 6.8-6.95 (2H, m), 8.15-8.35 (1H, m), 9.85-10.1 (1H, m).	Hydrochlorua
103	-H	-H	-F	-OCH ₃	-F	-H	¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.25-1.55 (9H, m), 1.6-1.85 (4H, m), 1.85-2.05 (1H, m), 2.90 (1H, d, J = 13.8Hz), 3.43 (1H, d, J = 12.8Hz), 3.65-3.75 (1H, m), 3.78 (3H, s), 3.95-4.05 (1H, m), 6.6-6.8 (2H, m), 8.06 (1H, br), 9.57 (1H, br).	Hydrochlorua
104	-H	-Cl	-H	-H	-H	-H	¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.0-1.2 (2H, m), 1.3-1.4 (1H, m), 1.48 (3H, s), 1.50 (3H, s), 1.6-1.85 (3H, m), 1.85-2.1 (2H, m), 2.74 (1H, d, J = 12.8Hz), 3.41 (1H, d, J = 13.1Hz), 3.5-3.6 (1H, m), 3.8-3.9 (1H, m), 7.05-7.15 (1H, m), 7.17 (1H, dd, J = 1.4, 8.0Hz), 7.25-7.35 (1H, m), 7.44 (1H, d, J = 1.5, 7.9Hz), 8.02 (1H, br), 9.63 (1H, br).	Hydrochlorua

105	-H	-H	-Cl	-OCH ₃	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.15-1.45 (6H, m), 1.51 (3H, s), 1.6-1.9 (4H, m), 1.95-2.1 (1H, m), 2.92 (1H, d, J = 13.3Hz), 3.20 (1H, d, J = 13.1Hz), 3.7-3.8 (4H, m), 3.9-4.0 (1H, m), 5.9 (1H, br), 6.88 (1H, dd, J = 2.9, 9.1Hz), 7.0-7.05 (1H, m), 8.11 (1H, br), 9.90 (1H, br).	Dihydrochloru
106	-H	-H	-H	-Cl	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.2-1.45 (6H, m), 1.51 (3H, s), 1.6-2.1 (5H, m), 2.93 (1H, d, J = 13.6Hz), 3.40 (1H, d, J = 13.8Hz), 3.65-3.85 (1H, m), 3.9-4.1 (1H, m), 6.8-7.05 (2H, m), 7.1-7.35 (2H, m), 8.14 (1H, br), 9.77 (1H, br).	Hydrochlorua
107	-CH ₃	-H	-H	-Cl	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 0.98 (3H, s), 1.05-1.2 (4H, m), 1.2-1.45 (4H, m), 1.55-1.75 (1H, m), 1.85-2.1 (2H, m), 2.16 (3H, s), 2.65-4.2 (4H, m), 6.61 (2H, s), 6.8-6.9 (2H, m), 7.1-7.2 (2H, m), 12.8 (2H, br).	Fumarat
108	-H	-H	-OCH ₃	-Cl	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.2-1.5 (6H, m), 1.5-1.6 (3H, m), 1.6-1.95 (4H, m), 2.0-2.1 (1H, m), 2.95 (1H, d, J = 13.5Hz), 3.3-3.5 (1H, m), 3.7-3.8 (1H, m), 3.84 (3H, s), 4.0-4.1 (1H, m), 6.52 (1H, dd, J = 2.6, 8.9Hz), 6.63 (1H, d, J = 2.6Hz), 7.19 (1H, d, J = 8.8Hz), 8.19 (1H, br), 9.75-10.1 (1H, m).	Hydrochlorua
109	-H	-Cl	-Cl	-H	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.05-1.25 (2H, m), 1.35-1.45 (1H, m), 1.47 (3H, s), 1.49 (3H, s), 1.6-1.85 (3H, m), 1.85-2.05 (2H, m), 2.76 (1H, d, J = 12.8Hz), 3.42 (1H, d, J = 13.0Hz), 3.5-3.6 (1H, m), 3.8-3.9 (1H, m), 7.18 (1H, dd, J = 1.6, 7.9Hz), 7.31 (1H, dd, J = 8.0, 8.0Hz), 7.37 (1H, dd, J = 1.5, 8.0Hz), 8.01 (1H, br), 9.5-9.7 (1H, m).	Hydrochlorua
110	-H	-H	-Cl	-Cl	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.2-1.45 (6H, m), 1.52 (3H, s), 1.6-2.15 (5H, m), 2.95 (1H, d, J = 13.7Hz), 3.49 (1H, d, J = 13.4Hz), 3.6-3.8 (1H, m), 3.95-4.15 (1H, m), 6.95 (1H, dd, J = 2.6, 9.1Hz), 7.05-7.25 (1H, m), 7.40 (1H, d, J = 9.0Hz), 7.95-8.4 (1H, m), 9.6-10.15 (1H, m).	Hydrochlorua
111	-CH ₃	-H	-Cl	-Cl	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 0.96 (3H, s), 1.05-1.2 (4H, m), 1.2-1.5 (4H, m), 1.6-1.75 (1H, m), 1.85-2.05 (2H, m), 2.14 (3H, s), 2.75-2.95 (2H, m), 3.17 (1H, d, J = 12.4Hz), 3.7-3.9 (1H, m), 6.62 (3H, s), 6.87 (1H, dd, J = 2.9, 9.1Hz), 7.04 (1H, d, J = 2.9Hz), 7.33 (1H, d, J = 9.0Hz), 11.0 (3H, br).	3/2 Fumarat
112	-H	-H	-Cl	-F	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.15-1.45 (6H, m), 1.51 (3H, s), 1.6-1.9 (4H, m), 1.9-2.05 (1H, s), 2.01 (1H, d, J = 8.2Hz), 3.3-3.45 (1H, m), 3.65-3.8 (1H, m), 3.95-4.1 (1H, m), 6.85-7.0 (1H, m), 7.12 (1H, dd, J = 3.0, 6.2Hz), 7.25 (1H, dd, J = 9.1, 9.1Hz), 8.13 (1H, br), 9.86 (1H, br).	Hydrochlorua
113	-H	-H	-F	-Cl	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.2-1.45 (6H, m), 1.51 (3H, s), 1.6-2.1 (5H, m), 2.94 (1H, d, J = 13.7Hz), 3.50 (1H, d, J = 13.6Hz), 3.65-3.8 (1H, m), 3.95-4.15 (1H, m), 6.80 (1H, dd, J = 2.6, 9.1Hz), 7.01 (1H, dd, J = 2.7, 13.4Hz), 7.34 (1H, dd, J = 9.0, 9.0Hz), 8.22 (1H, br), 9.90 (1H, br).	Hydrochlorua

Bảng 18

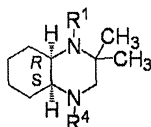
Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ	R ¹	R ⁴	NMR	Muối
114	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.15-1.35 (8H, m), 1.35-1.85 (7H, m), 2.82 (1H, d, J = 11.7Hz), 3.05 (1H, d, J = 11.7Hz), 3.45-3.55 (1H, m), 3.7-3.8 (1H, m), 3.88 (3H, s), 6.97 (1H, d, J = 2.3Hz), 7.03 (1H, d, J = 2.4Hz), 7.06 (1H, dd, J = 2.6, 8.8Hz), 7.26 (1H, dd, J = 2.5, 9.0Hz), 7.55 (1H, d, J = 8.8Hz), 7.61 (1H, d, J = 9.0Hz).	-
115	-CH ₃		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.05 (3H, s), 1.15-1.5 (8H, m), 1.65-1.8 (1H, m), 2.0-2.15 (2H, m), 2.18 (3H, s), 2.9-3.0 (2H, m), 3.09 (1H, d, J = 11.7Hz), 3.7-3.8 (1H, m), 3.88 (3H, s), 6.95 (1H, d, J = 2.4Hz), 7.0-7.1 (2H, m), 7.15-7.3 (1H, m), 7.55 (1H, d, J = 8.7Hz), 7.59 (1H, d, J = 9.1Hz).	-
116	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.15-1.3 (8H, m), 1.3-1.85 (10H, m), 2.82 (1H, d, J = 11.7Hz), 3.04 (1H, d, J = 11.7Hz), 3.45-3.55 (1H, m), 3.7-3.8 (1H, m), 4.11 (2H, q, J = 7.0Hz), 6.96 (1H, d, J = 2.4Hz), 7.03 (1H, d, J = 2.4Hz), 7.06 (1H, dd, J = 2.5, 8.8Hz), 7.2-7.3 (1H, m), 7.55 (1H, d, J = 8.9Hz), 7.59 (1H, d, J = 9.0Hz).	-
117	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.25-1.5 (6H, m), 1.57 (3H, s), 1.65-2.15 (5H, m), 3.06 (1H, d, J = 13.4Hz), 3.47 (1H, d, J = 13.5Hz), 3.8-3.9 (1H, m), 4.15-4.25 (1H, m), 5.02 (1H, br), 7.24 (1H, d, J = 2.2Hz), 7.31 (1H, ddd, J = 4.5, 12.8, 12.8Hz), 7.47 (1H, dd, J = 2.2, 9.2Hz), 7.54 (1H, dd, J = 2.6, 10.2Hz), 7.75-7.8 (2H, m), 8.15-8.3 (1H, m), 9.9-10.0 (1H, m).	Dihydrochloru
118	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 0.85-1.1 (2H, m), 1.3-1.45 (1H, m), 1.45-1.7 (7H, m), 1.7-1.9 (2H, m), 1.9-2.1 (2H, m), 2.81 (1H, d, J = 12.6Hz), 3.45-3.6 (2H, m), 4.15-4.3 (1H, m), 7.12 (1H, d, J = 7.1Hz), 7.43 (1H, dd, J = 7.8, 7.8Hz), 7.5-7.6 (2H, m), 7.65 (1H, d, J = 8.2Hz), 7.85-7.95 (1H, m), 8.0-8.2 (1H, m), 8.2-8.3 (1H, m), 9.7-9.95 (1H, m).	Hydrochlorua
119	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 0.9-1.15 (2H, m), 1.3-1.4 (1H, m), 1.5-1.7 (7H, m), 1.7-1.9 (2H, m), 1.9-2.1 (2H, m), 2.77 (1H, d, J = 12.6Hz), 3.3-3.45 (1H, m), 3.52 (1H, d, J = 12.6Hz), 4.2-4.3 (1H, m), 7.05-7.15 (1H, m), 7.25 (1H, dd, J = 8.2, 10.5Hz), 7.6-7.7 (2H, m), 8.0-8.2 (2H, m), 8.3-8.4 (1H, m), 9.8-10.0 (1H, m).	Hydrochlorua

Bảng 19

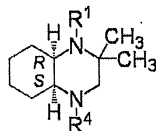
Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ	R ¹	R ⁴	NMR	Muối
120	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 0.9-1.1 (2H, m), 1.3-1.4 (1H, m), 1.5-1.7 (7H, m), 1.7-1.85 (2H, m), 1.95-2.1 (2H, m), 2.89 (1H, d, J = 12.8Hz), 3.0-3.9 (4H, m), 4.3-4.4 (1H, m), 7.41 (1H, d, J = 7.0Hz), 7.8-7.9 (1H, m), 7.9-8.0 (2H, m), 8.1-8.2 (1H, m), 9.1-9.25 (2H, m), 9.98 (1H, br).	Trihydrochloru
121	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 0.9-1.05 (3H, m), 1.24 (3H, s), 1.35-1.45 (5H, m), 1.55-1.8 (3H, m), 1.9-2.05 (1H, m), 2.71 (1H, d, J = 11.3Hz), 3.25 (1H, d, J = 11.4Hz), 3.65-3.75 (1H, m), 3.75-3.85 (1H, m), 6.76 (1H, d, J = 5.0Hz), 7.45-7.5 (1H, m), 7.6-7.7 (1H, m), 8.0-8.1 (2H, m), 8.68 (1H, d, J = 5.0Hz).	—
122	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.35-1.5 (6H, m), 1.61 (3H, s), 1.7-2.0 (3H, m), 2.0-2.15 (2H, m), 2.8-4.2 (4H, m), 4.25-4.4 (1H, m), 7.56 (1H, d, J = 2.6Hz), 7.89 (1H, d, J = 5.2, 8.5Hz), 8.04 (1H, dd, J = 2.7, 9.6Hz), 8.23 (1H, d, J = 9.5Hz), 8.45-8.6 (1H, m), 8.78 (1H, d, J = 8.3Hz), 8.92 (1H, dd, J = 1.3, 5.2Hz), 10.21 (1H, d, J = 10.6Hz).	Dihydrochloru
123	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.41 (3H, s), 1.45-1.6 (3H, m), 1.63 (3H, s), 1.7-1.85 (2H, m), 1.85-2.05 (1H, m), 2.05-2.25 (2H, m), 3.28 (1H, d, J = 14.5Hz), 3.39 (1H, br), 3.75-3.85 (1H, m), 4.10 (1H, d, J = 14.4Hz), 4.4-4.5 (1H, m), 7.51 (1H, d, J = 2.0Hz), 7.86 (1H, dd, J = 2.4, 9.5Hz), 7.94 (1H, d, J = 6.8Hz), 8.25-8.35 (2H, m), 8.65-8.85 (1H, m), 9.37 (1H, s), 10.3-10.45 (1H, m).	Dihydrochloru

Bảng 20

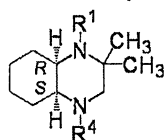
Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ	R ¹	R ⁴	NMR	Muối
124	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 0.9-1.15 (2H, m), 1.21 (3H, s), 1.3-1.45 (5H, m), 1.45-1.8 (4H, m), 1.8-2.0 (1H, m), 2.64 (1H, d, J = 11.2Hz), 3.18 (1H, d, J = 11.2Hz), 3.45-3.55 (1H, m), 3.65-3.75 (1H, m), 6.78 (1H, d, J = 7.7Hz), 7.15-7.3 (1H, m), 7.37 (1H, d, J = 5.5Hz), 7.45 (1H, d, J = 5.6Hz), 7.51 (1H, d, J = 8.0Hz).	—
125	-CH ₃		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 0.8-1.05 (2H, m), 1.13 (3H, s), 1.15-1.45 (6H, m), 1.5-1.65 (1H, m), 2.0-2.2 (2H, m), 2.23 (3H, s), 2.61 (1H, d, J = 11.6Hz), 2.8-3.9 (3H, m), 6.61 (4H, s), 6.81 (1H, d, J = 7.6Hz), 7.24 (1H, dd, J = 7.8, 7.8Hz), 7.46 (1H, d, J = 5.6Hz), 7.58 (1H, d, J = 8.0Hz), 7.69 (1H, d, J = 5.5Hz), 13.0 (4H, br).	Difumarat
126	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.2-1.35 (2H, m), 1.35-1.5 (4H, m), 1.54 (3H, s), 1.6-2.1 (5H, m), 3.03 (1H, d, J = 13.2Hz), 3.25-3.4 (1H, m), 3.75-3.9 (1H, m), 3.95-4.15 (1H, m), 7.16 (1H, dd, J = 2.2, 8.9Hz), 7.29 (1H, d, J = 5.4Hz), 7.35 (1H, d, J = 2.1Hz), 7.68 (1H, d, J = 5.4Hz), 7.82 (1H, d, J = 8.9Hz), 7.95-8.3 (1H, m), 9.65-9.95 (1H, m).	Hydroclorua
127	-CH ₃		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 0.95-1.5 (11H, m), 1.55-1.75 (1H, m), 1.85-2.1 (2H, m), 2.18 (3H, s), 2.6-4.75 (6H, m), 6.61 (2H, s), 7.10 (1H, dd, J = 2.4, 9.0Hz), 7.24 (1H, d, J = 2.3Hz), 7.27 (1H, d, J = 5.4Hz), 7.62 (1H, d, J = 5.3Hz), 7.75 (1H, d, J = 8.9Hz).	Fumarat
128	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.2-1.5 (6H, m), 1.53 (3H, s), 1.6-2.05 (5H, m), 3.03 (1H, d, J = 13.5Hz), 3.44 (1H, d, J = 13.5Hz), 3.75-3.9 (1H, m), 4.0-4.15 (1H, m), 7.14 (1H, dd, J = 2.2, 8.9Hz), 7.27 (1H, d, J = 5.4Hz), 7.44 (1H, d, J = 5.4Hz), 7.48 (1H, d, J = 1.8Hz), 7.71 (1H, d, J = 8.8Hz), 7.95-8.2 (1H, m), 9.55-9.8 (1H, m).	Hydroclorua
129	-CH ₃		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.25-1.5 (6H, m), 1.61 (3H, s), 1.65-1.9 (3H, m), 2.05-2.3 (2H, m), 2.74 (3H, d, J = 4.7Hz), 3.27 (1H, d, J = 13.9Hz), 3.58 (1H, d, J = 13.8Hz), 3.7-3.85 (1H, m), 4.1-4.25 (1H, m), 7.15 (1H, dd, J = 2.3, 8.9Hz), 7.28 (1H, d, J = 5.4Hz), 7.44 (1H, d, J = 5.4Hz), 7.49 (1H, d, J = 1.9Hz), 7.72 (1H, d, J = 8.8Hz), 9.42 (1H, br).	Hydroclorua
130	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 0.95-1.2 (2H, m), 1.3-1.45 (1H, m), 1.53 (6H, s), 1.55-1.7 (1H, m), 1.7-1.9 (2H, m), 1.9-2.15 (2H, m), 2.92 (1H, d, J = 12.9Hz), 3.48 (1H, d, J = 12.8Hz), 3.75-4.0 (2H, m), 7.02 (1H, d, J = 7.6Hz), 7.35 (1H, dd, J = 7.7, 7.7Hz), 7.48 (1H, d, J = 5.4Hz), 7.61 (1H, d, J = 7.9Hz), 7.76 (1H, d, J = 5.4Hz), 8.18 (1H, br), 9.81 (1H, br).	Hydroclorua

Bảng 21

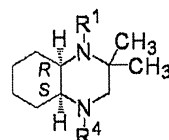
Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ	R ¹	R ⁴	NMR	Muối
131	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 0.95-1.15 (2H, m), 1.3-1.45 (1H, m), 1.52 (3H, s), 1.54 (3H, s), 1.6-2.1 (5H, m), 3.03 (1H, d, J = 13.0Hz), 3.30 (1H, d, J = 13.4Hz), 3.75-3.9 (1H, m), 4.0-4.15 (1H, m), 6.65-6.75 (1H, m), 7.1-7.25 (3H, m), 7.94 (1H, d, J = 2.2Hz), 8.0-8.25 (1H, m), 9.7-10.05 (1H, m).	Hydrochlorua
132	-CH ₃		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.0-1.25 (2H, m), 1.3-1.4 (1H, m), 1.43 (3H, s), 1.55-1.9 (6H, m), 2.1-2.35 (2H, m), 2.75 (3H, d, J = 4.7Hz), 3.21 (1H, d, J = 13.3Hz), 3.55 (1H, d, J = 13.3Hz), 3.85-4.1 (2H, m), 6.65-6.75 (1H, m), 7.15-7.25 (3H, m), 7.95 (1H, d, J = 2.2Hz), 9.48 (1H, br).	Hydrochlorua
133	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.1-1.35 (2H, m), 1.35-1.5 (4H, m), 1.55 (3H, s), 1.6-1.95 (4H, m), 1.95-2.1 (1H, m), 3.03 (1H, d, J = 13.1Hz), 3.20 (1H, d, J = 12.9Hz), 3.75-3.9 (1H, m), 3.9-4.0 (1H, m), 5.29 (1H, br), 6.8-6.85 (1H, m), 7.03 (1H, dd, J = 2.4, 9.0Hz), 7.13 (1H, d, J = 2.3Hz), 7.45 (1H, d, J = 9.0Hz), 7.89 (1H, d, J = 2.2Hz), 8.15 (1H, br), 9.99 (1H, br).	Dihydrocloru
134	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.2-1.5 (6H, m), 1.56 (3H, s), 1.6-2.0 (4H, m), 2.0-2.15 (1H, m), 3.01 (1H, d, J = 13.4Hz), 3.35 (1H, d, J = 13.3Hz), 3.65-3.85 (1H, m), 3.95-4.15 (1H, m), 6.75-6.85 (1H, m), 6.98 (1H, dd, J = 2.1, 8.7Hz), 7.13 (1H, s), 7.47 (1H, d, J = 8.6Hz), 7.5-8.0 (2H, m), 8.15-8.35 (1H, m), 10.0-10.2 (1H, m).	Dihydrocloru
135	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.1-1.3 (2H, m), 1.35-1.45 (1H, m), 1.50 (3H, s), 1.55 (3H, s), 1.6-1.9 (3H, m), 1.9-2.1 (2H, m), 3.2-3.4 (2H, m), 3.85-4.0 (1H, m), 4.15-4.25 (1H, m), 6.80 (1H, d, J = 7.0Hz), 6.94 (1H, d, J = 2.2Hz), 7.12 (1H, dd, J = 7.7, 7.7Hz), 7.21 (1H, dd, J = 0.8, 7.7Hz), 7.97 (1H, d, J = 2.2Hz), 8.1-8.35 (1H, m), 9.75-9.95 (1H, m).	Hydrochlorua
136	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.0-1.45 (11H, m), 1.6-1.8 (3H, m), 1.8-1.95 (1H, m), 2.70 (1H, d, J = 11.3Hz), 3.04 (1H, d, J = 11.4Hz), 3.45-3.55 (1H, m), 3.55-3.65 (1H, m), 6.47 (1H, dd, J = 3.4, 8.6Hz), 6.84 (1H, dd, J = 2.5, 2.5Hz), 6.89 (1H, dd, J = 8.6, 10.4Hz), 7.60 (1H, d, J = 2.1Hz).	—
137	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.0-1.15 (2H, m), 1.20 (3H, s), 1.25-1.45 (6H, m), 1.6-1.8 (3H, m), 1.8-1.95 (1H, m), 2.79 (1H, d, J = 11.5Hz), 3.05 (1H, d, J = 11.4Hz), 3.55-3.65 (2H, m), 6.53 (1H, d, J = 8.4Hz), 6.84 (1H, d, J = 2.2Hz), 7.14 (1H, d, J = 8.4Hz), 7.61 (1H, d, J = 2.2Hz).	—
138	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 0.95-1.1 (2H, m), 1.3-1.4 (1H, m), 1.51 (3H, s), 1.53 (3H, s), 1.6-1.7 (1H, m), 1.7-2.0 (3H, m), 2.0-2.05 (1H, m), 2.39 (3H, s), 2.95 (1H, d, J = 12.8Hz), 3.28 (1H, d, J = 12.9Hz), 3.7-3.8 (1H, m), 4.0-4.15 (1H, m), 6.61 (1H, d, J = 7.9Hz), 6.99 (1H, d, J = 8.1Hz), 7.20 (1H, d, J = 2.2Hz), 7.95 (1H, d, J = 2.2Hz), 8.0-8.15 (1H, m), 9.57-9.95 (1H, m).	Hydrochlorua
139	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 0.9-1.1 (2H, m), 1.3-1.4 (1H, m), 1.52 (6H, s), 1.55-1.65 (1H, m), 1.65-1.95 (3H, m), 1.95-2.1 (1H, m), 2.86 (1H, d, J = 12.8Hz), 3.27 (1H, d, J = 12.8Hz), 3.6-3.7 (1H, m), 3.87 (3H, s), 4.0-4.15 (1H, m), 6.61 (1H, d, J = 8.4Hz), 6.79 (1H, d, J = 8.4Hz), 7.21 (1H, d, J = 2.2Hz), 7.95 (1H, d, J = 2.1Hz), 7.95-8.15 (1H, m), 9.7-9.9 (1H, m).	Hydrochlorua
140	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.05-1.25 (2H, m), 1.35-1.45 (1H, m), 1.50 (3H, s), 1.54 (3H, s), 1.6-1.9 (3H, m), 1.9-2.1 (2H, m), 3.17 (1H, d, J = 13.1Hz), 3.29 (1H, d, J = 13.2Hz), 3.9-4.0 (1H, m), 4.0-4.1 (1H, m), 6.80 (1H, dd, J = 4.4, 8.7Hz), 6.98 (1H, dd, J = 8.9, 8.9Hz), 7.06 (1H, d, J = 2.2Hz), 8.06 (1H, d, J = 2.2Hz), 8.1-8.3 (1H, m), 9.75-9.95 (1H, m).	Hydrochlorua

Cấu hình tuyệt đối

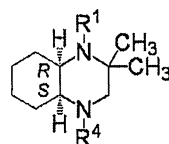
Bảng 22



Ví dụ	R ¹	R ⁴	NMR	Muối
141	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.1-1.2 (20H, m), 1.20 (3H, s), 1.3-1.45 (6H, m), 1.55-1.8 (6H, m), 1.8-2.0 (1H, m), 2.83 (1H, d, J = 11.5Hz), 3.11 (1H, d, J = 11.6Hz), 3.6-3.7 (1H, m), 3.7-3.8 (1H, m), 6.50 (1H, d, J = 7.5Hz), 6.64 (1H, d, J = 3.2Hz), 7.00 (1H, dd, J = 7.9, 7.9Hz), 7.11 (1H, d, J = 8.3Hz), 7.16 (1H, d, J = 3.2Hz).	—
142	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.13 (18H, d, J = 7.5Hz), 1.21 (3H, s), 1.28 (3H, s), 1.3-1.6 (5H, m), 1.6-1.8 (7H, m), 2.80 (1H, d, J = 11.7Hz), 2.93 (1H, d, J = 11.6Hz), 3.45-3.55 (1H, m), 3.55-3.65 (1H, m), 6.48 (1H, dd, J = 0.7, 3.1Hz), 6.85 (1H, dd, J = 2.4, 9.0Hz), 7.02 (1H, d, J = 2.3Hz), 7.16 (1H, d, J = 3.1Hz), 7.36 (1H, d, J = 9.0Hz).	—

Bảng 23

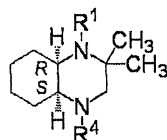
Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ	R ¹	R ⁴	NMR	Muối
143	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 0.9-1.15 (2H, m), 1.21 (3H, s), 1.25-1.45 (5H, m), 1.45-1.8 (4H, m), 1.8-2.0 (1H, m), 2.83 (1H, d, J = 11.5Hz), 3.11 (1H, d, J = 11.5Hz), 3.6-3.75 (1H, m), 3.75-3.9 (1H, m), 6.50 (1H, d, J = 7.3Hz), 6.55-6.65 (1H, m), 7.00 (1H, d, J = 8.0Hz), 7.07 (1H, dd, J = 7.7, 7.7Hz), 7.14 (1H, dd, J = 2.8, 2.8Hz), 8.16 (1H, br).	—
144	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.0-1.25 (2H, m), 1.33 (7H, bs), 1.45-1.9 (5H, m), 2.8-3.0 (2H, m), 3.0-4.05 (5H, m), 6.2-6.3 (1H, m), 6.50 (2H, s), 6.86 (1H, dd, J = 2.2, 8.8Hz), 6.95 (1H, d, J = 1.9Hz), 7.15-7.3 (2H, m), 10.79 (1H, s).	Fumarat
145	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 0.85-1.05 (2H, m), 1.25-1.4 (4H, m), 1.42 (3H, s), 1.5-2.0 (5H, m), 2.84 (1H, d, J = 12.3Hz), 3.24 (1H, d, J = 12.3Hz), 3.74 (3H, s), 3.8-3.95 (2H, m), 6.45 (1H, dd, J = 2.2, 6.2Hz), 6.5-6.55 (3H, m), 6.95-7.05 (2H, m), 7.23 (1H, d, J = 3.1Hz).	Fumarat
146	-CH ₃		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.0-1.5 (11H, m), 1.6-1.7 (1H, m), 2.05-2.3 (5H, m), 2.75 (1H, d, J = 11.4Hz), 3.05-3.15 (1H, m), 3.38 (1H, d, J = 11.5Hz), 3.75 (3H, s), 3.8-3.9 (1H, m), 6.45-6.55 (2H, m), 6.92 (1H, d, J = 8.2Hz), 6.96 (1H, d, J = 3.1Hz), 7.10 (1H, dd, J = 0.7, 3.1Hz).	—
147	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.0-1.2 (2H, m), 1.33 (7H, bs), 1.45-1.85 (6H, m), 2.85-2.95 (2H, m), 3.64 (1H, br), 3.7-3.8 (4H, m), 6.24 (1H, dd, J = 0.7, 3.0Hz), 6.51 (2H, s), 6.9-7.0 (2H, m), 7.19 (1H, d, J = 3.0Hz), 7.28 (1H, d, J = 8.6Hz).	Fumarat
148	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.05-1.3 (2H, m), 1.3-1.45 (7H, m), 1.5-1.9 (5H, m), 2.93 (1H, d, J = 12.3Hz), 3.09 (1H, d, J = 12.4Hz), 3.65 (1H, br), 3.70 (3H, s), 3.8-3.95 (1H, m), 6.25 (1H, d, J = 3.0Hz), 6.51 (2H, s), 6.75-6.85 (2H, m), 7.09 (1H, d, J = 3.1Hz), 7.36 (1H, d, J = 9.2Hz).	Fumarat
149	-CH ₃		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.06 (3H, s), 1.1-1.5 (8H, m), 1.65-1.75 (1H, m), 2.0-2.15 (2H, m), 2.18 (3H, s), 2.87 (1H, d, J = 11.4Hz), 2.95-3.0 (1H, m), 3.10 (1H, d, J = 11.4Hz), 3.65-3.75 (4H, m), 6.34 (1H, dd, J = 0.7, 3.1Hz), 6.62 (1H, d, J = 1.8Hz), 6.8-6.9 (2H, m), 7.44 (1H, d, J = 8.7Hz).	—
150	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 0.7-2.3 (15H, m), 2.7-3.2 (2H, m), 3.5-3.8 (2H, m), 3.85 (3H, s), 6.95-7.05 (2H, m), 7.15-7.3 (2H, m).	—

Bảng 24

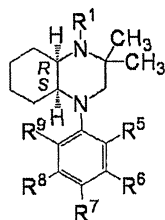
Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ	R ¹	R ⁴	NMR	Muối
151	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.1-1.4 (9H, m), 1.45-1.8 (4H, m), 1.8-1.95 (1H, m), 2.81 (1H, d, J = 12.3Hz), 3.22 (1H, d, J = 12.4Hz), 3.45-3.5 (1H, m), 3.85-3.95 (1H, m), 6.52 (1H, s), 7.20 (1H, dd, J = 2.5, 9.1Hz), 7.51 (1H, d, J = 2.4Hz), 7.85 (1H, d, J = 9.1Hz), 9.02 (1H, s).	Hemifumarat
152	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.0-1.2 (2H, m), 1.3-1.45 (1H, m), 1.48 (3H, s), 1.50 (3H, s), 1.55-1.7 (1H, m), 1.7-2.15 (6H, m), 2.7-2.95 (5H, m), 3.28 (1H, d, J = 12.8Hz), 3.35-3.45 (1H, m), 3.8-3.9 (1H, m), 6.68 (1H, d, J = 7.8Hz), 6.90 (1H, d, J = 7.3Hz), 7.05 (1H, dd, J = 7.6, 7.6Hz), 7.95-8.2 (1H, m), 9.7-9.95 (1H, m).	Hydroclorua
153	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.15-1.3 (2H, m), 1.35-1.5 (4H, m), 1.53 (3H, s), 1.6-1.9 (4H, m), 1.9-2.1 (3H, m), 2.74 (2H, t, J = 7.3Hz), 2.79 (2H, t, J = 7.4Hz), 2.93 (1H, d, J = 13.3Hz), 3.22 (1H, d, J = 13.3Hz), 3.65-3.8 (1H, m), 3.85-4.0 (1H, m), 6.70 (1H, dd, J = 2.2, 8.2Hz), 6.8-6.85 (1H, m), 7.05 (1H, d, J = 8.2Hz), 7.33 (1H, br), 8.0-8.3 (1H, m), 9.9-10.1 (1H, m).	Dihydrocloru
154	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.1-1.3 (2H, m), 1.35-1.5 (4H, m), 1.52 (3H, s), 1.6-1.9 (4H, m), 2.0-2.1 (1H, m), 2.95 (1H, d, J = 13.0Hz), 3.02 (1H, d, J = 13.0Hz), 3.11 (2H, t, J = 8.6Hz), 3.7-3.85 (2H, m), 4.44 (2H, t, J = 8.6Hz), 5.96 (1H, br), 6.6-6.7 (2H, m), 6.85-6.95 (1H, m), 8.0-8.25 (1H, m), 9.9-10.2 (1H, m).	Dihydrocloru

Bảng 25

Cấu hình tuyệt đối

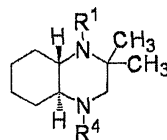


Ví dụ	R ¹	R ⁵	R ⁶	R ⁷	R ⁸	R ⁹	NMR	Muối
155	-H	-F	-H	-H	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.1-1.25 (2H, m), 1.3-1.45 (1H, m), 1.46 (3H, s), 1.49 (3H, s), 1.65-1.85 (3H, m), 1.85-2.05 (2H, m), 2.93 (1H, d, J = 13.0Hz), 3.27 (1H, d, J = 13.1Hz), 3.55-3.65 (1H, m), 3.8-3.9 (1H, m), 6.95-7.05 (1H, m), 7.05-7.2 (3H, m), 8.09 (1H, br), 9.68 (1H, br).	Hydroclorua
156	-H	-H	-H	-F	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.15-1.45 (6H, m), 1.52 (3H, s), 1.6-2.15 (5H, m), 2.94 (1H, d, J = 13.3Hz), 3.25 (1H, d, J = 13.1Hz), 3.35-3.4 (3H, m), 6.85-7.0 (2H, m), 7.0-7.1 (2H, m), 8.16 (1H, br), 9.94 (1H, br).	Dihydrocloru
157	-CH ₃	-H	-H	-F	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 0.98 (3H, s), 1.0-1.1 (1H, m), 1.16 (3H, s), 1.2-1.45 (4H, m), 1.55-1.7 (1H, m), 1.85-2.05 (2H, s), 2.15 (3H, s), 2.35-4.55 (4H, m), 6.59 (2H, s), 6.8-6.9 (2H, m), 6.9-7.05 (2H, m), 12.9 (2H, br).	Fumarat
158	-H	-H	-F	-OCH ₃	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.2-1.35 (2H, m), 1.35-1.45 (4H, m), 1.51 (3H, s), 1.6-1.9 (4H, m), 1.95-2.1 (1H, m), 2.90 (1H, d, J = 13.4Hz), 3.22 (1H, d, J = 13.3Hz), 3.65-3.8 (4H, m), 3.85-3.95 (1H, m), 6.6-6.7 (1H, m), 6.89 (1H, dd, J = 2.9, 14.7Hz), 7.02 (1H, dd, J = 9.5, 9.5Hz), 8.12 (1H, m), 9.90 (1H, br).	Hydroclorua
159	-H	-H	-OCH ₃	-F	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.2-1.5 (6H, m), 1.54 (3H, s), 1.6-1.95 (4H, m), 2.0-2.15 (1H, m), 2.95 (1H, d, J = 13.3Hz), 3.24 (1H, d, J = 13.2Hz), 3.7-3.8 (1H, m), 3.82 (3H, s), 3.9-4.05 (1H, m), 6.4-6.5 (1H, m), 6.70 (1H, dd, J = 2.8, 7.6Hz), 7.03 (1H, dd, J = 8.9, 11.3Hz), 7.75 (1H, br), 8.15-8.35 (1H, m), 10.0-10.15 (1H, m).	Hydroclorua
160	-H	-F	-F	-H	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.15-1.3 (2H, m), 1.35-1.45 (1H, m), 1.46 (3H, s), 1.50 (3H, s), 1.6-1.85 (4H, m), 1.9-2.05 (3H, m), 3.00 (1H, d, J = 13.2Hz), 3.28 (1H, d, J = 13.4Hz), 3.6-3.7 (1H, m), 3.8-3.9 (1H, m), 6.85-6.95 (1H, m), 6.95-7.05 (1H, m), 7.05-7.15 (1H, m), 8.1-8.3 (1H, m), 9.7-9.9 (1H, m).	Hydroclorua
161	-H	-H	-F	-F	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.2-1.5 (6H, m), 1.52 (3H, s), 1.6-2.15 (5H, m), 2.93 (1H, d, J = 13.5Hz), 3.2-3.45 (1H, m), 3.65-3.8 (1H, m), 3.9-4.1 (1H, m), 6.65-6.8 (1H, m), 6.95-7.1 (1H, m), 7.25 (1H, dd, J = 9.4, 19.8Hz), 8.0-8.35 (1H, m), 9.75-10.1 (1H, m).	Hydroclorua
162	-CH ₃	-H	-F	-F	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 0.97 (3H, s), 1.05-1.2 (4H, m), 1.2-1.45 (4H, m), 1.6-1.75 (1H, m), 1.85-2.05 (2H, s), 2.14 (3H, s), 2.65-4.05 (4H, m), 6.55-6.7 (3H, m), 6.8-6.95 (1H, m), 7.18 (1H, dd, J = 9.5, 20.0Hz), 13.0 (2H, br).	Fumarat

163	-H	-H	-F	-F	-F	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δ ppm : 1.25-1.5 (6H, m), 1.50 (3H, s), 1.65-1.9 (4H, m), 1.95-2.05 (1H, m), 2.92 (1H, d, J = 13.8Hz), 3.47 (1H, d, J = 13.8Hz), 3.65-3.8 (1H, m), 4.0-4.1 (1H, m), 6.8-6.95 (2H, m), 8.1-8.3 (1H, m), 9.75-9.95 (1H, m).	Hydrochlorua
164	-H	-H	-F	-OCH ₃	-F	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δ ppm : 1.2-1.45 (6H, m), 1.50 (3H, s), 1.6-1.9 (4H, m), 1.9-2.1 (1H, m), 2.90 (1H, d, J = 13.6Hz), 3.42 (1H, d, J = 13.8Hz), 3.6-3.75 (1H, m), 3.78 (3H, s), 3.95-4.05 (1H, m), 6.6-6.85 (2H, m), 8.16 (1H, br), 9.85 (1H, br).	Hydrochlorua
165	-H	-Cl	-H	-H	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δ ppm : 1.0-1.2 (2H, m), 1.3-1.45 (1H, m), 1.49 (3H, s), 1.51 (3H, s), 1.6-1.85 (3H, m), 1.9-2.1 (2H, m), 2.73 (1H, d, J = 12.8Hz), 3.41 (1H, d, J = 12.8Hz), 3.45-3.55 (1H, m), 3.75-3.9 (1H, m), 7.05-7.15 (1H, m), 7.17 (1H, dd, J = 1.4, 8.0Hz), 7.25-7.35 (1H, m), 7.44 (1H, d, J = 1.5, 8.0Hz), 8.09 (1H, br), 9.7-9.9 (1H, m).	Hydrochlorua
166	-H	-H	-Cl	-OCH ₃	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δ ppm : 1.15-1.45 (6H, m), 1.52 (3H, s), 1.6-1.9 (4H, m), 2.0-2.1 (1H, m), 2.92 (1H, d, J = 13.2Hz), 3.19 (1H, d, J = 13.1Hz), 3.7-3.8 (4H, m), 3.85-3.95 (1H, m), 5.9 (1H, br), 6.88 (1H, dd, J = 2.9, 9.0Hz), 7.0-7.05 (1H, m), 8.15 (1H, br), 10.00 (1H, br).	Dihydrochloru
167	-H	-H	-H	-Cl	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δ ppm : 1.2-1.45 (6H, m), 1.51 (3H, s), 1.6-2.1 (5H, m), 2.93 (1H, d, J = 13.7Hz), 3.2-3.5 (1H, m), 3.65-3.85 (1H, m), 3.9-4.1 (1H, m), 6.96 (2H, d, J = 9.0Hz), 7.24 (2H, d, J = 8.9Hz), 8.14 (1H, br), 9.45-10.0 (1H, m).	Hydrochlorua
168	-CH ₃	-H	-H	-Cl	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δ ppm : 0.97 (3H, s), 1.05-1.2 (4H, m), 1.2-1.45 (4H, m), 1.6-1.75 (1H, m), 1.85-2.05 (2H, m), 2.14 (3H, s), 2.65-4.35 (4H, m), 6.61 (2H, s), 6.8-6.9 (2H, m), 7.1-7.2 (2H, m), 12.9 (2H, br).	Fumarat
169	-H	-Cl	-Cl	-H	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δ ppm : 1.05-1.25 (2H, m), 1.35-1.45 (1H, m), 1.47 (3H, s), 1.49 (3H, s), 1.6-1.85 (3H, m), 1.9-2.05 (2H, m), 2.76 (1H, d, J = 12.8Hz), 3.42 (1H, d, J = 13.0Hz), 3.5-3.6 (1H, m), 3.8-3.9 (1H, m), 7.18 (1H, dd, J = 1.5, 7.9Hz), 7.31 (1H, dd, J = 8.0, 8.0Hz), 7.37 (1H, dd, J = 1.5, 8.0Hz), 8.02 (1H, br), 9.61 (1H, br).	Hydrochlorua
170	-H	-H	-Cl	-Cl	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δ ppm : 1.2-1.45 (6H, m), 1.51 (3H, s), 1.6-2.1 (5H, m), 2.95 (1H, d, J = 13.7Hz), 3.49 (1H, d, J = 13.7Hz), 3.65-3.8 (1H, m), 4.0-4.15 (1H, m), 6.95 (1H, dd, J = 3.0, 9.1Hz), 7.18 (1H, d, J = 2.9Hz), 7.40 (1H, d, J = 9.0Hz), 7.95-8.35 (1H, m), 9.6-10.05 (1H, m).	Hydrochlorua
171	-CH ₃	-H	-Cl	-Cl	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δ ppm : 0.95 (3H, s), 1.05-1.2 (4H, m), 1.2-1.5 (4H, m), 1.55-1.75 (1H, m), 1.85-2.05 (2H, m), 2.13 (3H, s), 2.75-2.9 (2H, m), 3.17 (1H, d, J = 12.4Hz), 3.75-3.85 (1H, m), 6.62 (3H, s), 6.87 (1H, dd, J = 2.9, 9.1Hz), 7.04 (1H, d, J = 2.9Hz), 7.33 (1H, d, J = 9.0Hz), 11.0 (3H, br).	3/2 Fumarat
172	-H	-H	-Cl	-F	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δ ppm : 1.1-1.45 (6H, m), 1.50 (3H, s), 1.6-1.9 (4H, m), 1.9-2.1 (1H, s), 2.00 (1H, d, J = 8.2Hz), 3.25-3.45 (1H, m), 3.65-3.85 (1H, m), 3.9-4.1 (1H, m), 6.85-7.0 (1H, m), 7.12 (1H, dd, J = 3.0, 6.3Hz), 7.25 (1H, dd, J = 9.1, 9.1Hz), 8.12 (1H, br), 9.82 (1H, br).	Hydrochlorua
173	-H	-H	-F	-Cl	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δ ppm : 1.2-1.45 (6H, m), 1.50 (3H, s), 1.6-2.1 (5H, m), 2.94 (1H, d, J = 13.8Hz), 3.51 (1H, d, J = 13.9Hz), 3.65-3.85 (1H, m), 3.95-4.15 (1H, m), 6.80 (1H, dd, J = 2.5, 8.9Hz), 7.01 (1H, dd, J = 2.8, 13.4Hz), 7.34 (1H, dd, J = 9.0, 9.0Hz), 8.16 (1H, br), 9.77 (1H, br).	Hydrochlorua
174	-H	-H	-OCH ₃	-Cl	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δ ppm : 1.2-1.5 (6H, m), 1.53 (3H, s), 1.65-1.95 (4H, m), 1.95-2.1 (1H, m), 2.95 (1H, d, J = 13.5Hz), 3.3-3.45 (1H, m), 3.7-3.8 (1H, m), 3.84 (3H, s), 4.0-4.1 (1H, m), 6.52 (1H, dd, J = 2.7, 8.9Hz), 6.63 (1H, d, J = 2.6Hz), 7.19 (1H, d, J = 8.8Hz), 8.18 (1H, br), 9.88 (1H, br).	Hydrochlorua

Bảng 26

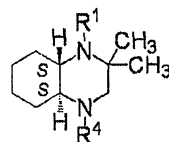
Cấu hình tương đối



Ví dụ	R ¹	R ⁴	NMR	Muối
175	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.04-1.21 (1H, m), 1.25-1.46 (2H, m), 1.64-1.88 (3H, m), 1.67 (3H, s), 1.77 (3H, s), 2.00-2.12 (1H, m), 2.34-2.40 (1H, m), 2.68 (1H, d, J = 12.5 Hz), 3.13-3.29 (2H, m), 3.42 (1H, d, J = 12.5 Hz), 7.29-7.34 (1H, m), 7.41-7.51 (2H, m), 7.60 (1H, s), 7.77-7.82 (3H, m), 9.51 (1H, brs), 9.79 (1H, brs)	Hydrochlorua
176	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.00-1.11 (1H, m), 1.25-1.39 (2H, m), 1.58-1.81 (3H, m), 1.65 (3H, s), 1.75 (3H, s), 1.96-2.10 (1H, m), 2.32-2.37 (1H, m), 2.82 (1H, d, J = 12.5 Hz), 3.06-3.15 (1H, m), 3.18-3.36 (2H, m), 3.39 (1H, d, J = 12.5 Hz), 7.19 (1H, d, J = 8.5 Hz), 7.29 (1H, d, J = 5.4 Hz), 7.47 (1H, d, J = 5.4 Hz), 7.64 (1H, s), 7.81 (1H, d, J = 8.5 Hz), 9.46 (1H, brs), 9.75 (1H, brs)	Hydrochlorua
177	-H		¹ H-NMR (DMSO) δppm : 0.92-1.37 (3H, m), 1.27 (3H, s), 1.40-1.60 (3H, m), 1.52 (3H, s), 1.60-1.75 (1H, m), 1.80-1.90 (1H, m), 2.60-2.73 (1H, m), 2.78 (1H, d, J = 12.1 Hz), 2.97 (1H, d, J = 12.1 Hz), 3.00-3.12 (1H, m), 3.13-3.69 (3H, br), 3.76 (3H, s), 6.36 (1H, d, J = 3.0 Hz), 6.50 (2H, s), 6.94 (1H, dd, J = 8.6, 1.6 Hz), 7.28 (1H, d, J = 1.6 Hz), 7.30 (1H, d, J = 3.0 Hz), 7.36 (1H, d, J = 8.6 Hz)	Fumarat
178	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 0.97-1.09 (1H, m), 1.23-1.38 (2H, m), 1.62-1.68 (3H, m), 1.63 (3H, s), 1.68 (3H, s), 1.92-2.05 (1H, m), 2.29-2.36 (1H, m), 2.73 (1H, d, J = 12.4 Hz), 2.94-3.03 (1H, m), 3.11-3.22 (1H, m), 3.28 (1H, d, J = 12.4 Hz), 7.02 (1H, dd, J = 8.5, 2.4 Hz), 7.25 (1H, d, J = 2.4 Hz), 7.39 (1H, d, J = 8.5 Hz), 9.50 (1H, brs), 9.78 (1H, brs)	Hydrochlorua

Bảng 27

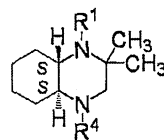
Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ	R ¹	R ⁴	NMR	Muối
179	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.26-2.30 (8H, m), 1.79 (3H, s), 2.17 (3H, s), 2.51-2.57 (1H, m), 3.36 (1H, d, J = 13.2 Hz), 3.90-4.30 (2H, m), 4.08 (1H, d, J = 13.2 Hz), 7.56-7.69 (2H, m), 7.83-8.01 (4H, m), 8.50 (1H, brs), 10.07 (1H, brs), 10.26 (1H, brs)	Dihydrochloru
180	-CH ₃		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.20-1.36 (1H, m), 1.42-1.76 (4H, m), 1.76 (3H, s), 1.91-1.93 (1H, m), 2.03-2.18 (1H, m), 2.16 (3H, s), 2.30-2.53 (2H, m), 2.85 (3H, d, J = 4.9 Hz), 3.49 (1H, d, J = 13.6 Hz), 4.06-4.21 (1H, m), 4.68 (1H, d, J = 13.6 Hz), 4.95-5.05 (1H, m), 7.55-7.67 (2H, m), 7.89-8.05 (4H, m), 8.95 (1H, br), 13.17 (1H, brs)	Dihydrochloru
181	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0.94-1.25 (2H, m), 1.25-1.45 (5H, m), 1.45-1.55 (1H, m), 1.55-1.80 (5H, m), 1.95-2.10 (1H, m), 2.82 (1H, d, J = 12.4 Hz), 2.97-3.11 (2H, m), 3.36-3.51 (1H, m), 7.40 (1H, d, J = 7.3 Hz), 7.50-7.59 (3H, m), 7.79 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.89-7.96 (1H, m), 8.42-8.48 (1H, m), 8.97-9.24 (1H, br), 9.50-9.80 (1H, br).	Hydrochlorua
182	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.21-2.12 (8H, m), 1.77 (3H, s), 2.11 (3H, s), 2.49-2.55 (1H, m), 3.27 (1H, d, J = 13.1 Hz), 3.64-4.22 (3H, m), 3.94 (3H,s), 7.15-7.24 (2H, m), 7.68-7.85 (3H, m), 8.25 (1H, brs), 10.04 (2H, brs)	Dihydrochloru
183	-CH ₃		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.20-1.50 (2H, m), 1.63-2.28 (7H, m), 1.70 (3H, s), 1.95 (3H, s), 2.81 (3H, d, J = 4.9 Hz), 3.27 (1H, d, J = 13.2 Hz), 3.49-3.85 (1H, m), 3.94 (3H, s), 4.22-4.70 (2H, br), 7.14-7.25 (2H, m), 7.68-7.82 (3H, m), 7.97-8.60 (1H, br), 12.21 (1H, brs)	Dihydrochloru
184	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.01-1.48 (6H, m), 1.48-1.85 (7H, m), 1.95-2.12 (1H, m), 2.88-3.33 (4H, m), 4.45-5.45 (1H, br), 7.30-7.48 (2H, m), 7.62-7.75 (2H, m), 7.89 (1H, d, J = 8.8 Hz), 7.99 (1H, dd, J = 5.8, 9.1 Hz), 9.07-9.38 (1H, br), 9.60-9.88 (1H, br).	Dihydrochloru

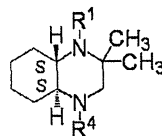
Bảng 28

Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ	R ¹	R ⁴	NMR	Muối
185	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 0.96-1.07 (1H, m), 1.25-1.33 (2H, m), 1.48-1.86 (3H, m), 1.65 (3H, s), 1.85 (3H, s), 1.95-2.12 (1H, m), 2.37-2.42 (1H, m), 2.86 (1H, d, J = 12.7 Hz), 3.20-3.35 (2H, m), 3.32 (1H, d, J = 12.7 Hz), 7.26 (1H, d, J = 7.7 Hz), 7.35 (1H, dd, J = 7.7, 7.7 Hz), 7.41 (1H, d, J = 5.5 Hz), 7.53 (1H, d, J = 5.5 Hz), 7.72 (1H, d, J = 7.7 Hz), 9.57 (1H, brs), 9.87 (1H, brs)	Hydrochlorua
186	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.18-2.18 (8H, m), 1.76 (3H, s), 2.17 (3H, s), 2.47-2.54 (1H, m), 3.26 (1H, d, J = 12.9 Hz), 3.72-4.05 (2H, m), 3.92 (1H, d, J = 12.9 Hz), 7.41 (1H, d, J = 5.5 Hz), 7.59 (1H, d, J = 5.5 Hz), 7.65-7.80 (1H, m), 7.96 (1H, d, J = 8.7 Hz), 8.34 (1H, brs), 10.15 (2H, brs)	Dihydrochloru
187	-CH ₃		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.23-1.76 (5H, m), 1.75 (3H, s), 1.84-2.21 (2H, m), 2.14 (3H, s), 2.24-2.44 (2H, m), 2.86 (3H, d, J = 4.9 Hz), 3.49 (1H, d, J = 13.6 Hz), 4.06-4.20 (1H, m), 4.65 (1H, d, J = 13.6 Hz), 4.90-5.01 (1H, m), 7.46 (1H, d, J = 5.5 Hz), 7.65 (1H, d, J = 5.5 Hz), 7.74-9.30 (2H, br), 7.97-8.10 (1H, m), 13.12 (1H, brs)	Dihydrochloru
188	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.26-2.06 (6H, m), 1.75 (3H, s), 2.05 (3H, s), 2.46-2.52 (1H, m), 3.23 (1H, d, J = 13.4 Hz), 3.70-4.05 (2H, br), 3.86 (1H, d, J = 13.4 Hz), 7.36 (1H, d, J = 5.5 Hz), 7.56 (1H, d, J = 5.5 Hz), 7.67 (1H, brs), 7.89 (1H, d, J = 8.6 Hz), 8.38 (1H, brs), 10.03 (2H, brs)	Dihydrochloru
189	-CH ₃		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.18-1.35 (1H, m), 1.39-1.53 (1H, m), 1.55-1.75 (2H, m), 1.74 (3H, s), 1.84-1.96 (1H, m), 2.02-2.39 (4H, m), 2.08 (3H, s), 2.84 (3H, d, J = 4.9 Hz), 3.42 (1H, d, J = 13.5 Hz), 3.96-4.07 (1H, m), 4.56 (1H, d, J = 13.5 Hz), 4.76-4.84 (1H, m), 7.39 (1H, d, J = 5.5 Hz), 7.63 (1H, d, J = 5.5 Hz), 7.90-7.99 (2H, m), 8.780 (1H, br), 13.05 (1H, brs)	Dihydrochloru
190	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 0.95-1.48 (6H, m), 1.48-1.80 (7H, m), 1.90-2.07 (1H, m), 2.87-3.16 (3H, m), 3.16-3.32 (1H, m), 7.23 (1H, d, J = 7.5 Hz), 7.40-7.52 (2H, m), 7.67-7.79 (2H, m), 8.92-9.22 (1H, br), 9.40-9.70 (1H, br)	Cấu hình tuyệt

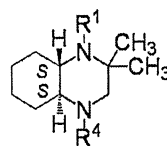
Bảng 29



Ví dụ	R ¹	R ⁴	NMR	Muối
191	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δ ppm : 0.95-1.46 (6H, m), 1.46-1.85 (7H, m), 1.95-2.12 (1H, m), 2.80-3.40 (4H, m), 5.50-6.60 (1H, br), 6.75-7.20 (2H, m), 7.20-7.37 (1H, m), 7.37-1.53 (1H, m), 7.99 (1H, s), 9.00-9.50 (1H, br), 9.60-10.05 (1H, br).	Dihydrochloru
192	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δ ppm at 80 °C: 0.96-1.26 (2H, m), 1.26-1.51 (5H, m), 1.51-1.61 (1H, m), 1.61-1.78 (5H, m), 1.99-2.08 (1H, m), 2.80 (1H, d, J = 12.3 Hz), 3.05-3.32 (3H, m), 3.58-4.12 (1H, br), 7.01 (1H, dd, J = 3.8, 8.5 Hz), 7.08-7.18 (2H, m), 8.01 (1H, d, J = 2.1 Hz), 9.10-9.35 (1H, br), 9.38-9.75 (1H, br).	Dihydrochloru
193	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δ ppm at 80 °C: 0.98-1.27 (2H, m), 1.27-1.46 (4H, m), 1.46-1.60 (2H, m), 1.60-1.80 (5H, m), 1.98-2.10 (1H, m), 2.84 (1H, d, J = 12.4 Hz), 3.05-3.35 (3H, m), 3.45-3.90 (1H, br), 7.05 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.08-7.13 (1H, br), 7.36 (1H, d, J = 8.2 Hz), 8.03 (1H, d, J = 2.2 Hz), 8.98-9.35 (1H, br), 9.35-9.72 (1H, br).	Dihydrochloru
194	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δ ppm: 0.82-1.05 (2H, m), 1.07 (3H, s), 1.19-1.43 (3H, m), 1.49 (3H, s), 1.56-1.68 (1H, m), 1.68-1.90 (3H, m), 2.35-2.51 (4H, m), 2.51-2.70 (1H, m), 2.78-2.92 (2H, m), 6.83-6.89 (2H, m), 7.01 (1H, d, J = 7.8 Hz), 7.56 (1H, d, J = 2.1 Hz).	—
195	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δ ppm at 80 °C: 0.96-1.25 (2H, m), 1.25-1.60 (6H, m), 1.60-1.79 (5H, m), 1.98-2.10 (1H, m), 2.76 (1H, d, J = 12.3 Hz), 2.99-3.37 (3H, m), 3.93 (3H, s), 4.52-4.86 (1H, br), 6.86 (1H, d, J = 8.4 Hz), 6.95 (1H, d = 8.4 Hz), 6.98-7.09 (1H, br), 7.87 (1H, d, J = 2.1 Hz), 9.02-9.40 (1H, br), 9.40-9.75 (1H, br).	Dihydrochloru
196	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δ ppm: 1.16-1.36 (1H, m), 1.41-1.63 (2H, m), 1.73-2.10 (5H, m), 1.78 (3H, s), 2.17 (3H, s), 2.36-2.69 (1H, m), 3.36 (1H, d, J = 12.8 Hz), 3.82-4.40 (2H, br), 4.09 (1H, d, J = 12.8 Hz), 6.88 (1H, d, J = 2.0 Hz), 7.62 (1H, d, J = 8.7 Hz), 7.74 (1H, d, J = 2.0 Hz), 7.70-8.76 (2H, br), 9.50-10.65 (2H, br).	Dihydrochloru
197	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δ ppm at 80 °C: 1.03-1.44 (6H, m), 1.51-1.79 (7H, m), 2.00-2.10 (1H, m), 2.87 (1H, d, J = 12.4 Hz), 2.94-3.05 (1H, m), 3.10-3.23 (2H, m), 4.64-5.12 (1H, br), 6.88 (1H, d, J = 1.4 Hz), 7.05-7.09 (1H, m), 7.33-7.36 (1H, br), 7.59 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.89 (1H, J = 2.2 Hz), 8.97-9.26 (1H, br), 9.45-9.82 (1H, br).	Dihydrochloru

Bảng 30

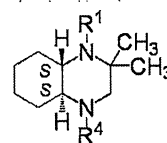
Cấu hình tuyệt đối



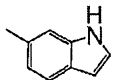
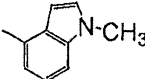
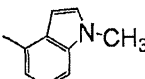
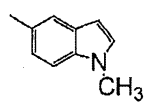
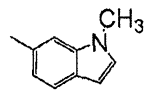
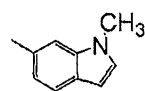
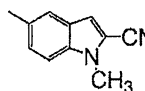
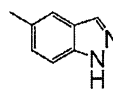
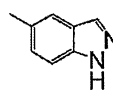
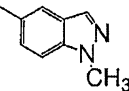
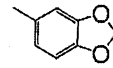
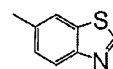
Ví dụ	R ¹	R ⁴	NMR	Muối
198	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 0.93-1.80 (35H, m), 1.80-2.05 (1H, br), 2.40-2.70 (2H, m), 2.81-2.95 (1H, m), 3.00-3.15 (1H, m), 6.72 (1H, d, J = 2.7 Hz), 6.80 (1H, d, J = 7.4 Hz), 7.00-7.13 (1H, m), 7.17 (1H, d, J = 3.2 Hz), 7.23-7.34 (1H, m).	—
199	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 0.99-1.50 (5H, m), 1.07 (3H, s), 1.13 (9H, s), 1.15 (9H, s), 1.42 (3H, s), 1.58-1.73 (7H, m), 2.23-2.31 (1H, m), 2.68 (1H, d, J = 11.2 Hz), 2.73-2.79 (1H, m), 2.83 (1H, d, J = 11.2 Hz), 6.55 (1H, dd, J = 3.2, 0.7 Hz), 6.92 (1H, dd, J = 8.8, 2.1 Hz), 7.21 (1H, d, J = 3.2 Hz), 7.34 (1H, d, J = 2.1 Hz), 7.37 (1H, d, J = 8.8 Hz)	—
200	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 0.85-1.85 (36H, m), 2.25-2.39 (1H, m), 2.60 (1H, d, J = 11.2 Hz), 2.76-2.90 (2H, m), 6.54-6.60 (1H, m), 6.90 (1H, dd, J = 1.7, 8.3 Hz), 7.17-7.32 (2H, m), 7.50 (1H, d, J = 8.3 Hz).	Dihydrochloru
201	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.01-1.44 (5H, m), 1.08 (3H, s), 1.13 (9H, s), 1.15 (9H, s), 1.42 (3H, s), 1.56-1.83 (7H, m), 2.25-2.33 (1H, m), 2.67 (1H, d, J = 11.3 Hz), 2.77-2.83 (1H, m), 2.82 (1H, d, J = 11.3 Hz), 7.13 (1H, dd, J = 8.9, 2.0 Hz), 7.43 (1H, d, J = 2.0 Hz), 7.45 (1H, d, J = 8.9 Hz), 8.15 (1H, d, J = 0.8 Hz)	—

Bảng 31

Cấu hình tuyệt đối

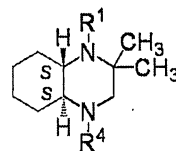


Ví dụ	R ¹	R ⁴	NMR	Điểm nóng chảy (°C)	Muối
202	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 0.80-1.18 (5H, m), 1.18-1.46 (3H, m), 1.46-1.66 (4H, m), 1.66-2.05 (3H, m), 2.40-2.70 (2H, m), 2.80-2.98 (1H, m), 3.03 (1H, d, J = 11.3 Hz), 6.64-6.72 (1H, m), 6.83 (1H, dd, J = 1.6, 6.6 Hz), 7.07-7.20 (3H, m), 8.16-8.35 (1H, br).	—	—
203	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 0.95-1.08 (1H, m), 1.07 (3H, s), 1.13-1.37 (4H, m), 1.43 (3H, s), 1.55-1.73 (4H, m), 2.25-2.33 (1H, m), 2.68 (1H, d, J = 11.1 Hz), 2.75-2.83 (1H, m), 2.81 (1H, d, J = 11.1 Hz), 6.48-6.50 (1H, m), 7.01 (1H, dd, J = 8.6, 1.9 Hz), 7.17-7.20 (1H, m), 7.30 (1H, d, J = 8.6 Hz), 7.38 (1H, d, J = 1.9 Hz), 8.11 (1H, brs)	—	—
204	-CH ₃		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.01-1.30 (3H, m), 1.09 (3H, s), 1.22 (3H, s), 1.50-1.76 (4H, m), 1.99-2.15 (1H, m), 2.25 (3H, s), 2.27-2.36 (1H, m), 2.54-2.64 (1H, m), 2.70 (1H, d, J = 11.2 Hz), 2.91 (1H, d, J = 11.2 Hz), 6.48-6.50 (1H, m), 7.02 (1H, dd, J = 8.6, 1.5 Hz), 7.17-7.20 (1H, m), 7.31 (1H, d, J = 8.6 Hz), 7.39 (1H, s), 8.10 (1H, brs)	—	—

205	-H		1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 0.80-1.40 (8H, m), 1.43 (3H, s), 1.55-1.86 (4H, m), 2.27-2.40 (1H, m), 2.68 (1H, d, J = 11.3 Hz), 2.75-2.91 (2H, m), 6.48-6.56 (1H, m), 6.94 (1H, dd, J = 1.8, 8.4 Hz), 7.13-7.22 (2H, m), 7.53 (1H, d, J = 8.4 Hz), 8.15-8.48 (1H, br).	—
206	-H		1H-NMR (MeOH-d ₄) δppm : 0.87-1.95 (14H, m), 2.66-3.02 (3H, m), 3.09-3.30 (3H, m), 3.69 (3H, s), 6.43 (1H, s), 6.58 (1H, s), 6.77 (1H, d, J = 7.6 Hz), 6.93-7.20 (3H, m).	Hemifumarat
207	-CH ₃		1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 0.85-1.55 (11H, m), 1.63-1.85 (2H, m), 2.05-2.20 (1H, m), 2.41 (3H, brs), 2.60-3.00 (4H, m), 3.00-4.80 (5H, m), 6.35-6.52 (1H, br), 6.56 (2H, s), 6.79 (1H, d, J = 7.5 Hz), 7.03-7.15 (1H, m), 7.15-7.30 (2H, m).	Fumarat
208	-CH ₃		1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 0.89-1.40 (10H, m), 1.40-10.58 (2H, m), 10.63-10.80 (1H, m), 2.01-2.27 (1H, m), 2.39 (3H, s), 2.55-2.78 (3H, m), 2.92-3.06 (1H, m), 4.65 (5H, m), 6.35 (1H, d, J = 2.6 Hz), 6.55 (2H, s), 6.90-7.00 (1H, m), 7.24-7.32 (2H, m), 7.34 (1H, d, J = 8.6 Hz).	Fumarat
209	-H		1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 0.90-1.63 (12H, m), 1.63-1.77 (1H, m), 1.82-1.99 (1H, m), 2.60-2.88 (2H, m), 2.91-3.14 (2H, m), 3.75 (3H, s), 3.80-5.30 (2H, br), 6.36 (1H, d, J = 3.0 Hz), 6.48 (2H, s), 6.85 (1H, d, J = 8.4 Hz), 7.14 (1H, s), 7.27 (1H, d, J = 3.0 Hz), 7.46 (1H, d, J = 8.4 Hz), 8.76-10.00 (1H, br).	Fumarat
210	-CH ₃		1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 0.90-1.35 (10H, m), 1.40-1.55 (2H, m), 1.55-1.80 (1H, m), 2.02-2.16 (1H, m), 2.39 (3H, s), 2.55-2.80 (3H, m), 2.90-3.08 (1H, m), 3.15-4.70 (5H, m), 6.32-6.40 (1H, m), 6.56 (2H, s), 6.85 (1H, dd, J = 1.5, 8.4 Hz), 7.14 (1H, s), 7.26 (1H, d, J = 3.1 Hz), 7.45 (1H, d, J = 8.4 Hz).	Fumarat
211	-H		209.8 - 214.2	Fumarat
212	-H		1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 0.96-1.16 (1H, m), 1.09 (3H, s), 1.19-1.39 (4H, m), 1.44 (3H, s), 1.52-1.62 (2H, m), 1.69-1.82 (2H, m), 2.27-2.35 (1H, m), 2.68 (1H, d, J = 11.1 Hz), 2.75-2.85 (1H, m), 2.81 (1H, d, J = 11.1 Hz), 7.22 (1H, dd, J = 8.8, 1.9 Hz), 7.37-7.46 (2H, m), 8.01 (1H, s), 9.54-10.80 (1H, br)	—
213	-CH ₃		1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 0.99-1.30 (4H, m), 1.10 (3H, s), 1.22 (3H, s), 1.41-1.67 (2H, br), 1.70-1.80 (1H, m), 1.98-2.16 (1H, m), 2.26 (3H, s), 2.20-2.37 (1H, m), 2.57-2.64 (1H, m), 2.69 (1H, d, J = 11.1 Hz), 2.89 (1H, d, J = 11.1 Hz), 5.85 (1H, s), 7.21-7.28 (1H, m), 7.40-7.53 (2H, m), 8.01 (1H, s)	—
214	-H		1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.00-1.51 (7H, m), 1.51-1.85 (6H, m), 1.92-2.20 (1H, brs), 2.60-3.70 (4H, m), 4.04 (3H, s), 6.85-7.90 (3H, m), 7.90-8.18 (1H, brs), 8.75-10.40 (3H, brm).	Dihydrochloru
215	-H		1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 0.95-1.40 (6H, m), 1.40-1.65 (6H, m), 1.85-1.80 (1H, m), 1.85-2.00 (1H, m), 2.65-2.80 (2H, m), 2.85-3.00 (1H, m), 3.00-3.21 (1H, m), 3.98-4.55 (1H, br), 6.00 (2H, s), 6.55-6.65 (1H, m), 6.73 (1H, d, J = 1.6 Hz), 6.86 (1H, d, J = 8.2 Hz), 8.65-8.95 (1H, br), 9.22-9.52 (1H, br).	Dihydrochloru
216	-H		1H-NMR (DMSO) δppm : 1.04-1.46 (4H, m), 1.35 (3H, s), 1.50-1.75 (4H, m), 1.59 (3H, s), 1.94-1.99 (1H, m), 2.82-2.92 (1H, m), 2.97 (1H, d, J = 12.3 Hz), 3.07 (1H, d, J = 12.3 Hz), 3.13-3.28 (1H, m), 7.28 (1H, dd, J = 8.5, 1.8 Hz), 7.81 (1H, d, J = 1.8 Hz), 8.12 (1H, d, J = 8.5 Hz), 8.85-9.05 (1H, br), 9.41 (1H, s), 9.48-9.56 (1H, br)	Dihydrochloru

Bảng 32

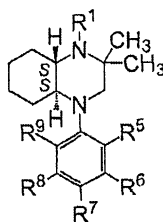
Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ	R ¹	R ⁴	NMR	Điểm nóng chảy (°C)	Muối
217	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1.00-1.44 (6H, m), 1.50-1.79 (7H, m), 1.96-2.08 (1H, m), 2.82-3.00 (2H, m), 3.00-3.25 (2H, m), 3.61 (3H, s), 6.62 (1H, d, J = 9.5 Hz), 7.38-7.46 (1H, m), 7.48-7.58 (2H, m), 7.91 (1H, d, J = 9.5 Hz), 7.98-8.62 (1H, br), 9.14-9.37 (1H, br), 9.65-9.88 (1H, br).		Dihydrocloru
218	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0.87-1.03 (1H, m), 1.09 (3H, m), 1.15-1.46 (4H, m), 1.46-1.65 (5H, m), 1.65-1.88 (2H, m), 2.47-2.60 (1H, m), 2.65 (1H, d, J = 11.3 Hz), 2.76 (1H, d, J = 11.3 Hz), 2.90-3.04 (1H, m), 7.25 (1H, d, J = 7.3 Hz), 7.40 (1H, dd, J = 4.2, 8.5 Hz), 7.65-7.72 (1H, m), 7.91 (1H, d, J = 8.5 Hz), 8.85 (1H, d, J = 8.5 Hz), 8.90 (1H, dd, J = 1.7, 4.2 Hz).		—
219	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0.93-1.12 (5H, m), 1.22-1.48 (3H, m), 1.55-1.70 (4H, m), 1.73-1.90 (3H, m), 2.50 (1H, d, J = 11.5 Hz), 2.55-2.65 (1H, m), 2.92-3.05 (2H, m), 7.09 (1H, d, J = 4.8 Hz), 7.49-7.56 (1H, m), 7.65-7.72 (1H, m), 8.05-8.10 (1H, m), 8.36 (1H, dd, J = 1.0, 8.4 Hz), 8.84 (1H, d, J = 4.8 Hz).		—
220	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0.80-1.17 (5H, m), 1.21-1.50 (6H, m), 1.61-1.88 (4H, m), 2.42-2.50 (1H, m), 2.74 (1H, d, J = 11.4 Hz), 2.80-2.90 (1H, m), 2.96 (1H, d, J = 11.4 Hz), 7.31-7.39 (2H, m), 7.50 (1H, dd, J = 2.4, 9.0 Hz), 8.01 (1H, d, J = 9.0 Hz), 8.06 (1H, dd, J = 1.1, 8.3 Hz), 8.81 (1H, dd, J = 1.7, 4.2 Hz).		—
221	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 1.04-1.20 (4H, m), 1.20-1.48 (7H, m), 1.67-1.86 (3H, m), 1.96 (1H, dd, J = 3.0, 13.0), 2.61-2.70 (1H, m), 2.82-2.95 (2H, m), 3.07 (1H, d, J = 12.0 Hz), 7.20 (1H, d, J = 1.8 Hz), 7.32 (1H, dd, J = 2.1, 8.8 Hz), 7.50 (1H, d, J = 5.8 Hz), 7.84 (1H, d, J = 8.8 Hz), 8.41 (1H, d, J = 5.8 Hz), 9.09 (1H, s).		—

Bảng 33

Cấu hình tuyệt đối



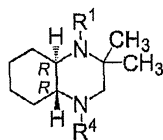
Ví dụ	R ¹	R ⁶	R ⁸	R ⁷	R ⁵	R ⁹	NMR	Muối
222	-H	-H	-H	-F	-H	-H	1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.21-1.36 (1H, m), 1.44-1.61 (2H, m), 1.68-2.00 (3H, m), 1.78 (3H, s), 2.09-2.33 (1H, m), 2.22 (3H, s), 2.51-2.55 (1H, m), 3.42 (1H, d, J = 13.2 Hz), 3.92-4.12 (1H, m), 4.15 (1H, d, J = 13.2 Hz), 4.37-4.44 (1H, m), 7.22-7.27 (4H, m), 7.90-8.46 (1H, br), 9.90-10.18 (1H, m), 10.32-10.60 (1H, brs)	Dihydrochloru
223	-CH ₃	-H	-H	-F	-H	-H	1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 0.90-1.10 (1H, m), 1.14-1.38 (2H, m), 1.40-1.75 (2H, m), 1.53 (3H, s), 1.59 (3H, s), 1.85-1.95 (1H, m), 2.01-2.23 (2H, m), 2.72 (3H, d, J = 5.0 Hz), 2.75 (1H, d, J = 12.9 Hz), 2.87-3.06 (1H, m), 3.40-3.50 (1H, m), 3.80 (1H, d, J = 12.9 Hz), 6.98-7.04 (2H, m), 7.18-7.23 (2H, m), 12.10 (1H, brs)	Dihydrochloru
224	-H	-H	-F	-F	-H	-H	1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.17-1.46 (3H, m), 1.53-1.74 (2H, m), 1.66 (3H, s), 1.79 (3H, s), 1.79 (1H, brs), 1.88-2.05 (1H, m), 2.24-2.46 (1H, m), 2.88 (1H, d, J = 12.5 Hz), 3.10-3.40 (2H, m), 3.43 (1H, d, J = 12.5 Hz), 7.13-7.18 (2H, m), 7.20-7.28 (1H, m), 9.40-9.75 (1H, br), 9.76-10.08 (1H, br)	Hydrochlorua
225	-CH ₃	-H	-F	-F	-H	-H	1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.19-1.41 (3H, m), 1.61 (6H, brs), 1.80-2.02 (1H, m), 2.04-2.24 (2H, m), 2.74 (3H, d, J = 5.0 Hz), 2.87 (1H, d, J = 12.8 Hz), 3.08-3.20 (1H, m), 3.62-3.78 (1H, m), 3.92 (1H, d, J = 12.8 Hz), 7.11-7.19 (2H, m), 7.27-7.32 (1H, m), 12.08 (1H, brs)	Hydrochlorua
226	-H	-H	-Cl	-F	-H	-H	1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.13-1.42 (3H, m), 1.47-1.81 (3H, m), 1.65 (3H, s), 1.74 (3H, s), 1.88-2.05 (1H, m), 2.32-2.38 (1H, m), 2.80 (1H, d, J = 12.5 Hz), 3.07-3.16 (1H, m), 3.19-3.29 (1H, m), 3.36 (1H, d, J = 12.5 Hz), 7.07-7.21 (2H, m), 7.34 (1H, dd, J = 6.5, 2.3 Hz), 9.56 (1H, brs), 9.82-9.86 (1H, br)	Hydrochlorua
227	-H	-H	-CH ₃	-F	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.00-1.45 (6H, m), 1.45-1.81 (7H, m), 1.81-2.10 (1H, m), 2.22 (3H, d, J = 1.5 Hz), 2.78-3.00 (2H, m), 3.00-3.27 (2H, m), 4.10-4.98 (1H, br), 6.96-7.23 (3H, m), 9.00-9.40 (1H, br), 9.58-9.92 (1H, br)	Dihydrochloru
228	-H	-H	-OCH ₃	-F	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm at 80 °C: 1.00-1.43 (6H, m), 1.49-1.77 (7H, m), 1.97-2.08 (1H, m), 2.81 (1H, d, J = 12.3 Hz), 2.84-2.93 (1H, m), 3.04-3.18 (2H, m), 3.83 (3H, s), 4.30-4.57 (1H, br), 6.68-6.74 (1H, m), 6.86 (1H, dd, J = 2.5, 7.9 Hz), 7.11 (1H, dd, J = 8.6, 11.4 Hz), 8.94-9.25 (1H, br), 9.49-9.80 (1H, br)	Dihydrochloru
229	-H	-H	-F	-CH ₃	-H	-H	1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.21-1.51 (2H, m), 1.62-1.97 (5H, m), 1.72 (3H, s), 2.03 (3H, s), 2.29 (3H, s), 2.44-2.49 (1H, m), 3.21 (1H, d, J = 12.9 Hz), 3.66-3.87 (2H, m), 3.21 (1H, d, J = 12.9 Hz), 7.25-7.31 (1H, m), 7.47-7.62 (2H, m), 10.00 (2H, brs)	Hydrochlorua

230	-CH ₃	-H	-F	-CH ₃	-H	-H	1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.20-1.40 (3H, m), 1.48-1.75 (2H, m), 1.61 (3H, s), 1.64 (3H, s), 1.84-1.93 (1H, m), 2.11-2.16 (2H, m), 2.26 (3H, d, J = 1.9 Hz), 2.73 (3H, d, J = 5.0 Hz), 2.90 (1H, d, J = 12.9 Hz), 3.12-3.24 (1H, m), 3.65-3.80 (1H, m), 3.92 (1H, d, J = 12.9 Hz), 7.09-7.21 (3H, m), 12.33 (1H, brs)	Hydrochlorua
231	-H	-H	-F	-Cl	-H	-H	1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.01-1.12 (1H, m), 1.20-1.39 (2H, m), 1.56-2.04 (4H, m), 1.63 (3H, s), 1.69 (3H, s), 2.31-2.36 (1H, m), 2.76 (1H, d, J = 12.4 Hz), 2.97-3.04 (1H, m), 3.13-3.24 (1H, m), 3.29 (1H, d, J = 12.4 Hz), 6.91-7.01 (2H, m), 7.34 (1H, dd, J = 8.4, 8.3 Hz), 9.50 (1H, brs), 9.80 (1H, brs)	Hydrochlorua
232	-CH ₃	-H	-F	-Cl	-H	-H	1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.00-1.13 (1H, m), 1.17-1.40 (2H, m), 1.53 (3H, s), 1.60 (3H, s), 1.60-1.81 (3H, m), 1.90-1.94 (1H, m), 2.04-2.25 (1H, m), 2.72 (3H, d, J = 4.9 Hz), 2.78 (1H, d, J = 12.8 Hz), 2.92-3.04 (1H, m), 3.46-3.55 (1H, m), 3.81 (1H, d, J = 12.8 Hz), 7.00-7.08 (2H, m), 7.32-7.39 (1H, m), 12.26 (1H, brs)	Hydrochlorua
233	-H	-H	-F	-OCH ₃	-F	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.02-1.34 (3H, m), 1.33 (3H, s), 1.51 (3H, s), 1.54-1.73 (4H, m), 1.96-2.01 (1H, m), 2.76-2.83 (1H, m), 2.89 (1H, d, J = 12.5 Hz), 2.98 (1H, d, J = 12.5 Hz), 3.08-3.18 (1H, m), 3.87 (3H, s), 4.76 (1H, s), 6.86-6.96 (2H, m), 9.01-9.09 (1H, m), 9.70-9.75 (1H, m)	Dihydrochloru
234	-H	-H	-F	-OCH ₃	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.05-1.45 (6H, m), 1.45-1.80 (7H, m), 1.95-2.08 (1H, m), 2.70-2.90 (2H, m), 2.95-3.23 (2H, m), 3.81 (3H, s), 4.65-5.40 (1H, br), 6.88-7.08 (2H, m), 7.08-7.22 (1H, m), 8.90-9.25 (1H, br), 9.55-9.85 (1H, br).	Dihydrochloru
235	-H	-H	-Cl	-H	-H	-H	1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.05-1.13 (1H, m), 1.23-1.35 (2H, m), 1.50-1.78 (3H, m), 1.63 (3H, s), 1.71 (3H, s), 1.92-2.08 (1H, m), 2.31-2.36 (1H, m), 2.78 (1H, d, J = 12.7 Hz), 3.00-3.09 (1H, m), 3.15-3.26 (1H, m), 3.31 (1H, d, J = 12.7 Hz), 7.07-7.10 (1H, m), 7.15-7.19 (2H, m), 7.23-7.29 (1H, m), 9.50 (1H, brs), 9.79 (1H, brs)	Hydrochlorua
236	-CH ₃	-H	-Cl	-H	-H	-H	1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.18-1.50 (2H, m), 1.60-1.81 (2H, m), 1.71 (3H, s), 1.91-2.30 (5H, m), 2.00 (3H, s), 2.80 (3H, d, J = 4.9 Hz), 3.32 (1H, d, J = 13.4 Hz), 3.81-3.94 (1H, m), 4.42 (1H, d, J = 13.4 Hz), 4.61-4.70 (1H, m), 7.42-7.50 (2H, m), 7.97 (1H, brs), 8.13 (1H, brs), 13.7 (1H, brs)	Dihydrochloru
237	-H	-H	-Cl	-CN	-H	-H	1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.05-1.20 (1H, m), 1.23-1.44 (2H, m), 1.54-2.10 (4H, m), 1.63 (3H, s), 1.68 (3H, s), 2.35-2.40 (1H, m), 2.89 (1H, d, J = 12.7 Hz), 3.19 (2H, br), 3.34 (1H, d, J = 12.7 Hz), 7.06 (1H, dd, J = 8.4, 2.0 Hz), 7.20 (1H, d, J = 2.0 Hz), 7.61 (1H, d, J = 8.4 Hz), 9.62 (1H, brs), 9.90 (1H, br)	Hydrochlorua
238	-CH ₃	-H	-Cl	-CN	-H	-H	1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.01-1.15 (1H, m), 1.23-1.46 (2H, m), 1.50 (3H, s), 1.61 (3H, s), 1.61-1.98 (3H, m), 2.09-2.27 (2H, m), 2.72 (3H, d, J = 4.9 Hz), 2.87 (1H, d, J = 13.0 Hz), 2.91-3.03 (1H, m), 3.63-3.72 (1H, m), 3.84 (1H, d, J = 13.0 Hz), 7.14 (1H, dd, J = 8.4, 2.1 Hz), 7.26 (1H, d, J = 2.1 Hz), 7.62 (1H, d, J = 8.4 Hz), 12.38 (1H, brs)	Hydrochlorua
239	-H	-H	-Cl	-CH ₃	-H	-H	1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.25-2.04 (7H, m), 1.75 (3H, s), 2.13 (3H, s), 2.40 (3H, s), 2.48-2.53 (1H, m), 3.33 (1H, d, J = 13.1 Hz), 3.68-3.92 (1H, m), 3.97 (1H, d, J = 13.1 Hz), 4.10-4.17 (1H, m), 7.36 (1H, d, J = 8.4 Hz), 7.78 (1H, d, J = 8.4 Hz), 8.00 (1H, s), 10.03-10.07 (1H, m), 10.20-10.30 (1H, m)	Hydrochlorua

240	-CH ₃	-H	-Cl	-CH ₃	-H	-H	1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.14-1.41 (3H, m), 1.47-1.74 (2H, m), 1.58 (3H, s), 1.60 (3H, s), 1.89-1.93 (1H, m), 2.10-2.22 (2H, m), 2.35 (3H, s), 2.72 (3H, d, J = 4.9 Hz), 2.83 (1H, d, J = 12.9 Hz), 3.00-3.15 (1H, m), 3.45-3.67 (1H, m), 3.85 (1H, d, J = 12.9 Hz), 7.11-7.22 (2H, m), 7.32 (1H, s), 12.24 (1H, brs)	Hydrochlorua
241	-H	-H	-Cl	-OCH ₃	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 0.95-1.41 (6H, m), 1.41-1.80 (7H, m), 1.88-2.05 (1H, m), 2.69-2.90 (2H, m), 2.93-3.05 (1H, m), 3.05-3.24 (1H, m), 3.83 (3H, s), 4.15-5.35 (1H, br), 7.02-7.25 (3H, m), 8.87-9.18 (1H, br), 9.40-9.72 (1H, br).	Dihydrochloru
242	-H	-H	-H	-Cl	-H	-H	1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.13-1.24 (1H, m), 1.25-1.36 (2H, m), 1.60-1.83 (3H, m), 1.64 (3H, s), 1.74 (3H, s), 1.89-2.02 (1H, m), 2.32-2.37 (1H, m), 2.80 (1H, d, J = 12.5 Hz), 3.12-3.16 (1H, m), 3.22-3.29 (1H, m), 3.36 (1H, d, J = 12.5 Hz), 7.19-7.22 (2H, m), 7.29-7.33 (2H, m), 9.52 (1H, brs), 9.81 (1H, brs)	Hydrochlorua
243	-CH ₃	-H	-H	-Cl	-H	-H	1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.02-1.40 (3H, m), 1.48-1.75 (2H, m), 1.61 (3H, s), 1.63 (3H, s), 1.80-2.02 (1H, m), 2.11-2.16 (2H, m), 2.74 (3H, d, J = 5.0 Hz), 2.88 (1H, d, J = 12.9 Hz), 3.10-3.22 (1H, m), 3.66-3.78 (1H, m), 3.93 (1H, d, J = 12.9 Hz), 7.30-7.38 (4H, m), 12.28 (1H, brs)	Hydrochlorua
244	-H	-H	-CH ₃	-Cl	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 0.90-1.79 (13H, m), 1.79-1.95 (1H, m), 2.29 (3H, s), 2.58-3.08 (4H, m), 3.10-4.90 (3H, br), 6.48 (2H, s), 6.89-7.00 (1H, m), 7.07 (1H, d, J = 2.3 Hz), 7.33 (1H, d, J = 8.5 Hz).	Fumarat
245	-H	-H	-OCH ₃	-Cl	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.00-1.45 (6H, m), 1.45-1.82 (7H, m), 1.95-2.10 (1H, m), 2.78-3.10 (3H, m), 3.10-3.27 (1H, m), 3.85 (3H, s), 4.00-4.55 (1H, br), 6.73 (1H, dd, J = 2.1, 8.4 Hz), 6.80 (1H, d, J = 2.1 Hz), 7.37 (1H, d, J = 8.4 Hz), 8.90-9.19 (1H, br), 9.51-9.85 (1H, br).	Dihydrochloru
246	-H	-H	-Cl	-Cl	-H	-H	1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.15-1.45 (3H, m), 1.58-1.81 (3H, m), 1.65 (3H, s), 1.75 (3H, s), 1.88-2.04 (1H, m), 2.32-2.38 (1H, m), 2.82 (1H, d, J = 12.6 Hz), 3.12-3.31 (2H, m), 3.38 (1H, d, J = 12.6 Hz), 7.15 (1H, dd, J = 8.5, 2.3 Hz), 7.40 (1H, d, J = 2.3 Hz), 7.42 (1H, d, J = 8.5 Hz), 9.57 (1H, br), 9.82 (1H, br)	Hydrochlorua
247	-CH ₃	-H	-Cl	-Cl	-H	-H	1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.23-1.49 (2H, m), 1.60-1.75 (2H, m), 1.69 (3H, s), 1.91 (3H, s), 1.91-2.15 (3H, m), 2.22-2.28 (1H, m), 2.79 (3H, d, J = 4.9 Hz), 3.23 (1H, d, J = 13.2 Hz), 3.64-3.76 (1H, m), 4.33 (1H, d, J = 13.2 Hz), 4.43-4.52 (1H, m), 7.56 (1H, d, J = 8.7 Hz), 7.82 (1H, dd, J = 8.7, 2.3 Hz), 8.14 (1H, d, J = 2.3 Hz), 12.88 (1H, brs)	Hydrochlorua
248	-H	-H	-H	-OCH ₃	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.02-1.50 (7H, m), 1.50-1.82 (6H, m), 1.96-2.18 (1H, m), 2.60-3.60 (4H, m), 3.76 (3H, s), 6.85-7.10 (2H, m), 7.10-7.68 (2H, m), 8.60-10.90 (3H, m).	Dihydrochloru
249	-H	-H	-OCH ₃	-F	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm at 80 °C: 1.00-1.43 (6H, m), 1.49-1.77 (7H, m), 1.97-2.08 (1H, m), 2.81 (1H, d, J = 12.3 Hz), 2.84-2.93 (1H, m), 3.04-3.18 (2H, m), 3.83 (3H, s), 4.30-4.57 (1H, br), 6.68-6.74 (1H, m), 6.86 (1H, dd, J = 2.5, 7.9 Hz), 7.11 (1H, dd, J = 8.6, 11.4 Hz), 8.94-9.25 (1H, br), 9.49-9.80 (1H, br).	Dihydrochloride :u

Bảng 34

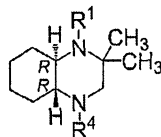
Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ	R ¹	R ⁴	NMR	Muối
250	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.10-1.47 (3H, m), 1.48-2.16 (4H, m), 1.69 (3H, s), 1.78 (3H, s), 2.30-2.54 (1H, m), 2.95 (1H, d, J = 12.5 Hz), 3.20-3.50 (2H, br), 3.52 (1H, d, J = 12.5 Hz), 7.37-7.52 (2H, m), 7.60-8.00 (4H, m), 9.18-10.05 (2H, br)	Hydrochlorua
251	-CH ₃		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.20-1.35 (1H, m), 1.41-1.55 (1H, m), 1.59-1.82 (2H, m), 1.75 (3H, s), 1.91-2.01 (1H, m), 2.02-2.15 (2H, m), 2.14 (3H, s), 2.30-2.44 (2H, m), 2.85 (3H, d, J = 4.8 Hz), 3.49 (1H, d, J = 13.5 Hz), 4.07-4.19 (1H, m), 4.66 (1H, d, J = 13.5 Hz), 4.92-5.01 (1H, m), 7.59-7.66 (2H, m), 7.89-8.04 (4H, m), 8.87 (1H, br), 13.11 (1H, brs)	Dihydrocloru
252	-H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 0.94-1.25 (2H, m), 1.25-1.45 (5H, m), 1.45-1.55 (1H, m), 1.55-1.80 (5H, m), 1.95-2.10 (1H, m), 2.82 (1H, d, J = 12.4 Hz), 2.97-3.11 (2H, m), 3.36-3.51 (1H, m), 7.40 (1H, d, J = 7.3 Hz), 7.50-7.59 (3H, m), 7.79 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.89-7.96 (1H, m), 8.42-8.48 (1H, m), 8.97-9.24 (1H, br), 9.50-9.80 (1H, br)	Hydrochlorua
253	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.23-2.17 (8H, m), 1.76 (3H, s), 2.09 (3H, s), 2.48-2.53 (1H, m), 3.27 (1H, d, J = 1.23 Hz), 3.66-4.18 (3H, m), 3.94 (3H, s), 7.15 (1H, d, J = 2.4 Hz), 7.23 (1H, dd, J = 9.0, 2.4 Hz), 7.74 (1H, brs), 7.79-7.85 (2H, m), 8.24 (1H, brs), 9.87-10.19 (2H, br)	Dihydrocloru
254	-H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.20-2.05 (8H, m), 1.73 (3H, s), 2.00 (3H, s), 2.44-2.48 (1H, m), 3.15 (1H, d, J = 10.7 Hz), 3.55-3.88 (3H, br), 7.38 (1H, d, J = 5.5 Hz), 7.49-7.69 (1H, m), 7.55 (1H, d, J = 5.5 Hz), 7.92 (1H, d, J = 8.6 Hz), 8.14 (1H, brs), 9.94 (2H, brs)	Dihydrocloru

Bảng 35

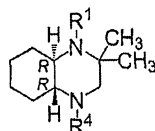
Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ	R ¹	R ⁴	NMR	Muối
255	-H		1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 0.95-1.82 (13H, m), 1.97-2.12 (1H, m), 2.80-3.35 (4H, m), 6.07-6.72 (1H, br), 6.72-7.20 (2H, m), 7.23-7.35 (1H, m), 7.35-7.53 (1H, m), 7.99 (1H, br), 9.00-9.50 (1H, br), 9.55-10.10 (1H, br).	Dihydrochloru
256	-H		1H-NMR (DMSO-d ₆) δ ppm at 80 °C: 0.96-1.26 (2H, m), 1.26-1.51 (5H, m), 1.51-1.61 (1H, m), 1.81-1.78 (5H, m), 1.99-2.08 (1H, m), 2.80 (1H, d, J = 12.3 Hz), 3.05-3.32 (3H, m), 3.58-4.12 (1H, br), 7.01 (1H, dd, J = 3.8, 8.5 Hz), 7.08-7.18 (2H, m), 8.01 (1H, d, J = 2.1 Hz), 9.10-9.35 (1H, br), 9.38-9.75 (1H, br).	Dihydrochloru
257	-H		1H-NMR (DMSO-d ₆) δ ppm at 80 °C: 0.98-1.27 (2H, m), 1.27-1.46 (4H, m), 1.46-1.60 (2H, m), 1.60-1.80 (5H, m), 1.98-2.10 (1H, m), 2.84 (1H, d, J = 12.4 Hz), 3.05-3.35 (3H, m), 3.45-3.90 (1H, br), 7.05 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.08-7.13 (1H, br), 7.36 (1H, d, J = 8.2 Hz), 8.03 (1H, d, J = 2.2 Hz), 8.98-9.35 (1H, br), 9.35-9.72 (1H, br).	Dihydrochloru
258	-H		1H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0.82-1.05 (2H, m), 1.07 (3H, s), 1.19-1.43 (3H, m), 1.49 (3H, s), 1.56-1.68 (1H, m), 1.68-1.90 (3H, m), 2.35-2.51 (4H, m), 2.51-2.70 (1H, m), 2.78-2.92 (2H, m), 6.83-6.89 (2H, m), 7.01 (1H, d, J = 7.8 Hz), 7.56 (1H, d, J = 2.1 Hz).	—
259	-H		1H-NMR (DMSO-d ₆) δ ppm at 80 °C: 0.96-1.25 (2H, m), 1.25-1.60 (6H, m), 1.60-1.79 (5H, m), 1.98-2.10 (1H, m), 2.76 (1H, d, J = 12.3 Hz), 2.99-3.37 (3H, m), 3.93 (3H, s), 4.52-4.86 (1H, br), 6.86 (1H, d, J = 8.4 Hz), 6.95 (1H, d, J = 8.4 Hz), 6.98-7.09 (1H, br), 7.87 (1H, d, J = 2.1 Hz), 9.02-9.40 (1H, br), 9.40-9.75 (1H, br).	Dihydrochloru
260	-H		1H-NMR (DMSO-d ₆) δ ppm at 80 °C: 1.03-1.44 (6H, m), 1.51-1.79 (7H, m), 2.00-2.10 (1H, m), 2.87 (1H, d, J = 12.4 Hz), 2.94-3.05 (1H, m), 3.10-3.23 (2H, m), 4.64-5.12 (1H, br), 6.88 (1H, d, J = 1.4 Hz), 7.05-7.09 (1H, m), 7.33-7.36 (1H, br), 7.59 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.89 (1H, J = 2.2 Hz), 8.97-9.26 (1H, br), 9.45-9.82 (1H, br).	Dihydrochloru

Bảng 36

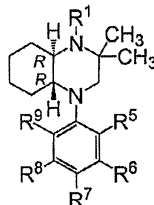
Cấu hình tuyệt đối



Example	R ¹	R ⁴	NMR	Điểm nóng chảy (°C)	Muối
261	-H			209.8 - 214.2	Fumarat
262	-H		1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1.00-1.44 (6H, m), 1.50-1.79 (7H, m), 1.96-2.08 (1H, m), 2.82-3.00 (2H, m), 3.00-3.25 (2H, m), 3.61 (3H, s), 6.62 (1H, d, J = 9.5 Hz), 7.38-7.46 (1H, m), 7.48-7.58 (2H, m), 7.91 (1H, d, J = 9.5 Hz), 7.98-8.62 (1H, br), 9.14-9.37 (1H, br), 9.65-9.88 (1H, br). 1H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0.87-1.03 (1H, m), 1.09 (3H, m), 1.15-1.46 (4H, m), 1.46-1.65 (5H, m), 1.65-1.88 (2H, m), 2.47-2.60 (1H, m), 2.65 (1H, d, J = 11.3 Hz), 2.76 (1H, d, J = 11.3 Hz), 2.90-3.04 (1H, m), 7.25 (1H, d, J = 7.3 Hz), 7.40 (1H, dd, J = 4.2, 8.5 Hz), 7.65-7.72 (1H, m), 7.91 (1H, d, J = 8.5 Hz), 8.85 (1H, d, J = 8.5 Hz), 8.90 (1H, dd, J = 1.7, 4.2 Hz).		Dihydrocloru
263	-H		1H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0.93-1.12 (5H, m), 1.22-1.48 (3H, m), 1.55-1.70 (4H, m), 1.73-1.90 (3H, m), 2.50 (1H, d, J = 11.5 Hz), 2.55-2.65 (1H, m), 2.92-3.05 (2H, m), 7.09 (1H, d, J = 4.8 Hz), 7.49-7.56 (1H, m), 7.65-7.72 (1H, m), 8.05-8.10 (1H, m), 8.36 (1H, dd, J = 1.0, 8.4 Hz), 8.84 (1H, d, J = 4.8 Hz).		—
264	-H		1H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0.80-1.17 (5H, m), 1.21-1.50 (6H, m), 1.61-1.88 (4H, m), 2.42-2.50 (1H, m), 2.74 (1H, d, J = 11.4 Hz), 2.80-2.90 (1H, m), 2.96 (1H, d, J = 11.4 Hz), 7.31-7.39 (2H, m), 7.50 (1H, dd, J = 2.4, 9.0 Hz), 8.01 (1H, d, J = 9.0 Hz), 8.06 (1H, dd, J = 1.1, 8.3 Hz), 8.81 (1H, dd, J = 1.7, 4.2 Hz).		—
265	-H		1H-NMR (CDCl ₃) δppm: 1.04-1.20 (4H, m), 1.20-1.48 (7H, m), 1.67-1.86 (3H, m), 1.96 (1H, dd, J = 3.0, 13.0), 2.61-2.70 (1H, m), 2.82-2.95 (2H, m), 3.07 (1H, d, J = 12.0 Hz), 7.20 (1H, d, J = 1.8 Hz), 7.32 (1H, dd, J = 2.1, 8.8 Hz), 7.50 (1H, d, J = 5.8 Hz), 7.84 (1H, d, J = 8.8 Hz), 8.41 (1H, d, J = 5.8 Hz), 9.09 (1H, s).		—
266	-H				—

Bảng 37

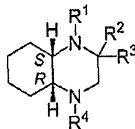
Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ	R1	R5	R6	R7	R8	R9	NMR	Muối
267	-H	-H	-H	-F	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δ ppm : 0.99-1.44 (6H, m), 1.44-1.80 (7H, m), 1.93-2.10 (1H, m), 2.75-2.99 (2H, m), 2.99-3.28 (2H, m), 5.08-6.80 (1H, br), 7.10-7.33 (4H, m), 8.96-9.42 (1H, br), 9.58-9.94 (1H, br).	Dihydrochloru
268	-H	-H	-OCH ₃	-F	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δ ppm at 80 °C: 1.00-1.43 (6H, m), 1.49-1.77 (7H, m), 1.97-2.08 (1H, m), 2.81 (1H, d, J = 12.3 Hz), 2.84-2.93 (1H, m), 3.04-3.18 (2H, m), 3.83 (3H, s), 4.30-4.57 (1H, br), 6.68-6.74 (1H, m), 6.86 (1H, dd, J = 2.5, 7.9 Hz), 7.11 (1H, dd, J = 8.6, 11.4 Hz), 8.94-9.25 (1H, br), 9.49-9.80 (1H, br).	Dihydrochloru
269	-H	-H	-Cl	-CN	-H	-H	1H-NMR (CDCl ₃) δ ppm : 1.02-1.17 (1H, m), 1.25-1.44 (2H, m), 1.62-2.05 (4H, m), 1.63 (3H, s), 1.68 (3H, s), 2.35-2.41 (1H, m), 2.89 (1H, d, J = 12.8 Hz), 3.20 (2H, br), 3.35 (1H, d, J = 12.8 Hz), 7.07 (1H, dd, J = 8.4, 2.0 Hz), 7.20 (1H, d, J = 2.0 Hz), 7.61 (1H, d, J = 8.4 Hz), 9.61 (1H, brs), 9.89 (1H, br)	Hydrochlorua
270	-H	-H	-H	-Cl	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δ ppm : 0.95-1.45 (6H, m), 1.45-1.80 (7H, m), 1.88-2.06 (1H, m), 2.70-3.05 (3H, m), 3.08-3.28 (1H, m), 3.50-3.94 (1H, br), 7.13 (2H, d, J = 8.7 Hz), 7.39 (2H, d, J = 8.7 Hz), 8.66-9.20 (1H, br), 9.20-9.80 (1H, br).	Dihydrochloru
271	-H	-H	-OCH ₃	-Cl	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δ ppm : 1.00-1.45 (6H, m), 1.45-1.83 (7H, m), 1.90-2.08 (1H, m), 2.70-2.87 (1H, m), 2.87-3.08 (2H, m), 3.08-3.28 (1H, m), 3.85 (3H, s), 6.72 (1H, dd, J = 2.2, 8.4 Hz), 6.79 (1H, d, J = 2.2 Hz), 7.36 (1H, d, J = 8.4 Hz), 8.73-9.10 (1H, br), 9.34-9.70 (1H, br).	Hydrochlorua
272	-H	-H	-Cl	-Cl	-H	-H	1H-NMR (CDCl ₃) δ ppm : 0.98-1.14 (1H, m), 1.26-1.39 (2H, m), 1.55-1.78 (3H, m), 1.62 (3H, s), 1.68 (3H, s), 1.92-2.05 (1H, m), 2.30-2.35 (1H, m), 2.73 (1H, d, J = 12.5 Hz), 2.95-3.03 (1H, m), 3.11-3.23 (1H, m), 3.28 (1H, d, J = 12.5 Hz), 7.20 (1H, dd, J = 8.5, 2.4 Hz), 7.25 (1H, d, J = 2.4 Hz), 7.39 (1H, d, J = 8.5 Hz), 9.49 (1H, br), 9.79 (1H, br)	Hydrochlorua
273	-CH ₃	-H	-Cl	-Cl	-H	-H	1H-NMR (CDCl ₃) δ ppm : 1.23-1.49 (2H, m), 1.60-1.74 (2H, m), 1.69 (3H, s), 1.87-2.15 (3H, m), 1.91 (3H, s), 2.21-2.28 (1H, m), 2.78 (3H, d, J = 4.9 Hz), 3.22 (1H, d, J = 13.2 Hz), 3.63-3.75 (1H, m), 4.32 (1H, d, J = 13.2 Hz), 4.42-4.51 (1H, m), 7.56 (1H, d, J = 8.7 Hz), 7.81 (1H, dd, J = 8.7, 2.0 Hz), 8.14 (1H, d, J = 2.0 Hz), 12.71 (1H, brs)	Hydrochlorua

Bảng 38

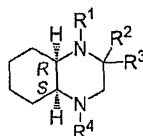
Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ	R ¹	R ² , R ³	R ⁴	NMR	Muối
274		-H, -H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.25-1.7 (5H, m), 1.75-1.9 (1H, m), 2.05-2.2 (2H, m), 2.3-2.4 (1H, m), 2.6-2.7 (1H, m), 2.8-2.9 (1H, m), 2.92 (1H, d, J = 13.1Hz), 3.0-3.15 (2H, m), 3.65-3.75 (1H, m), 4.20 (1H, d, J = 13.1Hz), 6.7-6.8 (2H, m), 7.1-7.2 (2H, m), 7.2-7.3 (1H, m), 7.3-7.4 (4H, m).	—
275	-H	-H, -H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.2-1.4 (2H, m), 1.4-1.5 (1H, m), 1.5-1.95 (4H, m), 1.95-2.05 (1H, m), 2.95-3.2 (2H, m), 3.25-3.4 (1H, m), 3.4-3.6 (2H, m), 3.95-4.1 (1H, m), 6.48 (1H, br), 6.80 (1H, dd, J = 7.2, 7.2Hz), 6.9-7.0 (2H, m), 7.2-7.3 (2H, m), 9.22 (1H, br), 9.87 (1H, br).	Dihydrocloru
276	-H	-(CH ₂) ₃ -		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.25-1.4 (2H, m), 1.4-2.35 (10H, m), 2.3-2.6 (2H, m), 3.04 (1H, d, J = 13.3Hz), 3.35-3.5 (1H, m), 3.67 (1H, d, J = 13.4Hz), 3.7-4.3 (2H, m), 6.95-7.05 (2H, m), 7.2-7.3 (2H, m), 8.95-9.2 (1H, m), 10.1-10.3 (1H, m).	Dihydrocloru
277	-H	-(CH ₂) ₃ -		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.05-1.35 (3H, m), 1.35-1.45 (1H, m), 1.45-1.65 (3H, m), 1.65-1.9 (5H, m), 1.9-2.0 (1H, m), 2.0-2.1 (1H, m), 2.2-2.3 (1H, m), 2.93 (1H, d, J = 11.4Hz), 3.25-3.35 (1H, m), 3.39 (1H, d, J = 11.4Hz), 3.7-3.8 (1H, m), 3.89 (3H, s), 7.01 (1H, d, J = 2.4Hz), 7.04 (1H, d, J = 2.5Hz), 7.07 (1H, dd, J = 2.6, 8.8Hz), 7.25-7.3 (1H, m), 7.58 (1H, d, J = 8.9Hz), 7.61 (1H, d, J = 9.1Hz).	—
278	-H	-(CH ₂) ₃ -		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.2-1.35 (2H, m), 1.4-2.15 (10H, m), 2.35-2.6 (2H, m), 3.14 (1H, d, J = 12.5Hz), 3.4-3.55 (1H, m), 3.64 (1H, d, J = 13.1Hz), 3.95-4.05 (1H, m), 4.05-4.4 (1H, m), 7.19 (1H, dd, J = 2.4, 8.9Hz), 7.31 (1H, d, J = 5.3Hz), 7.41 (1H, d, J = 2.0Hz), 7.69 (1H, d, J = 5.4Hz), 7.83 (1H, d, J = 8.9Hz), 8.9-9.1 (1H, m), 11-12.5 (1H, m).	Dihydrocloru

Bảng 39

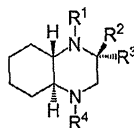
Cấu hình tuyệt đối



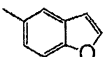
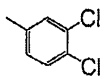
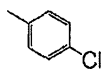
Ví dụ	R ¹	R ² , R ³	R ⁴	NMR	Điểm nóng chảy (°C)	Muối
279		-H, -H		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.25-1.5 (4H, m), 1.55-1.7 (1H, m), 1.75-1.85 (1H, m), 2.05-2.2 (2H, m), 2.3-2.4 (1H, m), 2.6-2.7 (1H, m), 2.8-2.9 (1H, m), 2.92 (1H, d, J = 13.2Hz), 3.0-3.15 (2H, m), 3.65-3.8 (1H, m), 4.20 (1H, d, J = 13.1Hz), 6.7-6.8 (2H, m), 7.1-7.2 (2H, m), 7.2-7.3 (1H, m), 7.3-7.4 (4H, m). ¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.2-1.4 (2H, m), 1.4-1.5 (1H, m), 1.5-1.95 (4H, m), 1.95-2.05 (1H, m), 3.0-3.2 (2H, m), 3.25-3.4 (1H, m), 3.4-3.6 (2H, m), 3.95-4.1 (1H, m), 5.65 (1H, br), 6.79 (1H, dd, J = 7.2, 7.2Hz), 6.9-7.0 (2H, m), 7.2-7.3 (2H, m), 9.16 (1H, br), 9.81 (1H, br).	—	—
280	-H	-H, -H		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.25-1.4 (2H, m), 1.4-2.15 (10H, m), 2.3-2.6 (2H, m), 3.03 (1H, d, J = 12.5Hz), 3.35-3.5 (1H, m), 3.65-3.85 (2H, m), 3.9-4.0 (1H, m), 6.95-7.05 (2H, m), 7.2-7.3 (2H, m), 8.9-9.15 (1H, m), 10.05-12.5 (1H, m).	—	Dihydrocloru
281	-H	-(CH ₂) ₃ -		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.05-1.35 (3H, m), 1.35-1.45 (1H, m), 1.45-1.65 (3H, m), 1.65-1.9 (5H, m), 1.9-2.0 (1H, m), 2.0-2.1 (1H, m), 2.2-2.3 (1H, m), 2.93 (1H, d, J = 11.4Hz), 3.25-3.35 (1H, m), 3.39 (1H, d, J = 11.4Hz), 3.7-3.8 (1H, m), 3.89 (3H, s), 7.01 (1H, d, J = 2.4Hz), 7.04 (1H, d, J = 2.5Hz), 7.07 (1H, dd, J = 2.6, 8.8Hz), 7.25-7.3 (1H, m), 7.58 (1H, d, J = 8.8Hz), 7.61 (1H, d, J = 9.0Hz). ¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.2-1.35 (2H, m), 1.4-2.15 (10H, m), 2.4-2.6 (2H, m), 3.15 (1H, d, J = 12.1Hz), 3.4-3.55 (1H, m), 3.64 (1H, d, J = 13.0Hz), 3.95-4.1 (1H, m), 4.2-4.6 (1H, m), 7.19 (1H, dd, J = 2.4, 8.9Hz), 7.31 (1H, d, J = 5.2Hz), 7.41 (1H, d, J = 2.0Hz), 7.69 (1H, d, J = 5.4Hz), 7.83 (1H, d, J = 8.9Hz), 8.9-9.1 (1H, m), 10.1-10.3 (1H, m).	—	Dihydrocloru
282	-H	-(CH ₂) ₃ -		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.05-1.35 (3H, m), 1.35-1.45 (1H, m), 1.45-1.65 (3H, m), 1.65-1.9 (5H, m), 1.9-2.0 (1H, m), 2.0-2.1 (1H, m), 2.2-2.3 (1H, m), 2.93 (1H, d, J = 11.4Hz), 3.25-3.35 (1H, m), 3.39 (1H, d, J = 11.4Hz), 3.7-3.8 (1H, m), 3.89 (3H, s), 7.01 (1H, d, J = 2.4Hz), 7.04 (1H, d, J = 2.5Hz), 7.07 (1H, dd, J = 2.6, 8.8Hz), 7.25-7.3 (1H, m), 7.58 (1H, d, J = 8.8Hz), 7.61 (1H, d, J = 9.0Hz). ¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.2-1.35 (2H, m), 1.4-2.15 (10H, m), 2.4-2.6 (2H, m), 3.15 (1H, d, J = 12.1Hz), 3.4-3.55 (1H, m), 3.64 (1H, d, J = 13.0Hz), 3.95-4.1 (1H, m), 4.2-4.6 (1H, m), 7.19 (1H, dd, J = 2.4, 8.9Hz), 7.31 (1H, d, J = 5.2Hz), 7.41 (1H, d, J = 2.0Hz), 7.69 (1H, d, J = 5.4Hz), 7.83 (1H, d, J = 8.9Hz), 8.9-9.1 (1H, m), 10.1-10.3 (1H, m).	—	—
283	-H	-(CH ₂) ₃ -		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.05-1.35 (3H, m), 1.35-1.45 (1H, m), 1.45-1.65 (3H, m), 1.65-1.9 (5H, m), 1.9-2.0 (1H, m), 2.0-2.1 (1H, m), 2.2-2.3 (1H, m), 2.93 (1H, d, J = 11.4Hz), 3.25-3.35 (1H, m), 3.39 (1H, d, J = 11.4Hz), 3.7-3.8 (1H, m), 3.89 (3H, s), 7.01 (1H, d, J = 2.4Hz), 7.04 (1H, d, J = 2.5Hz), 7.07 (1H, dd, J = 2.6, 8.8Hz), 7.25-7.3 (1H, m), 7.58 (1H, d, J = 8.8Hz), 7.61 (1H, d, J = 9.0Hz). ¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.2-1.35 (2H, m), 1.4-2.15 (10H, m), 2.4-2.6 (2H, m), 3.15 (1H, d, J = 12.1Hz), 3.4-3.55 (1H, m), 3.64 (1H, d, J = 13.0Hz), 3.95-4.1 (1H, m), 4.2-4.6 (1H, m), 7.19 (1H, dd, J = 2.4, 8.9Hz), 7.31 (1H, d, J = 5.2Hz), 7.41 (1H, d, J = 2.0Hz), 7.69 (1H, d, J = 5.4Hz), 7.83 (1H, d, J = 8.9Hz), 8.9-9.1 (1H, m), 10.1-10.3 (1H, m).	—	Dihydrocloru

Bảng 40

Cấu hình tương đối

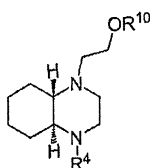


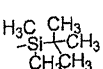
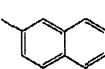
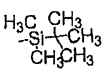
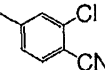
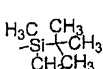
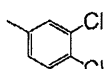
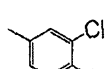
Ví dụ	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	NMR	Muối
284	-H	-H	-CH ₃		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.18-1.48 (2H, m), 1.62-2.08 (8H, m), 2.56-2.61 (1H, m), 3.63-3.66 (1H, m), 4.23 (1H, brs), 4.67 (3H, brs), 7.61-8.26 (7H, m), 9.60-9.81 (1H, m), 11.36 (1H, br), 14.02 (1H, brs)	Dihydrochloru
285	-H	-H	-CH ₃		¹ H-NMR (DMSO) δppm : 1.02-1.43 (3H, m), 1.30 (3H, d, J = 6.4 Hz), 1.44-1.88 (4H, m), 1.95-2.20 (1H, m), 2.97-3.53 (6H, m), 7.26-7.46 (1H, br), 7.50 (1H, d, J = 5.4 Hz), 7.69-8.00 (1H, br), 7.86 (1H, d, J = 5.4 Hz), 8.09 (1H, d, J = 8.2 Hz), 9.28-10.12 (2H, br)	Dihydrochloru
286	-H	-H	-CH ₃		¹ H-NMR (DMSO) δppm : 0.87-1.06 (1H, m), 1.17-1.35 (2H, m), 1.24 (3H, d, J = 6.3 Hz), 1.41-1.84 (4H, m), 1.92-2.07 (1H, m), 2.88-3.08 (3H, m), 3.24 (1H, d, J = 12.4 Hz), 3.31-3.52 (1H, br), 7.16 (1H, dd, J = 8.6, 2.1 Hz), 7.40 (1H, d, J = 2.1 Hz), 7.60 (1H, d, J = 8.6 Hz), 9.02-9.33 (1H, br), 9.50-9.85 (1H, br)	Hydrochlorua
287	-H	-H	-C ₂ H ₅		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.05 (3H, t, J = 7.3 Hz), 1.24-1.48 (2H, m), 1.51-2.14 (6H, br), 2.18-2.41 (1H, br), 2.43-2.76 (1H, m), 2.83-5.31 (5H, br), 7.33-8.24 (6H, br), 9.15-10.20 (1.3H, br), 11.04-11.78 (0.3H, br), 13.30-13.79 (0.4H, br)	Hydrochlorua
288	-CH ₃	-H	-C ₂ H ₅		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.06 (3H, t, J = 7.5 Hz), 1.22-2.25 (10H, m), 2.26-2.45 (2H, m), 2.94 (3H, s), 3.31-4.97 (4H, br), 7.36-8.02 (7H, m), 12.47-13.27 (1H, br)	Dihydrochloru
289	-H	-C ₂ H ₅	-C ₂ H ₅		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 0.80-2.47 (11H, m), 0.99 (3H, t, J = 7.4 Hz), 1.17 (3H, t, J = 7.3 Hz), 2.66-2.76 (1H, m), 2.86-3.18 (1H, br), 3.38-3.43 (1H, m), 3.65-4.01 (2H, m), 4.02-4.36 (1H, m), 7.54-7.61 (2H, m), 7.80-7.96 (5H, m), 9.37 (1H, brs), 9.80-10.49 (1H, br)	Dihydrochloru
290	-H	-H	-C ₂ H ₅		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.07 (3H, t, J = 7.5 Hz), 1.25-1.42 (2H, m), 1.48-1.85 (7H, m), 1.93-2.10 (2H, m), 2.16-2.40 (1H, m), 2.50-2.69 (1H, m), 2.91-5.05 (4H, br), 7.33-8.76 (4H, br & m), 9.19-9.85 (1H, br), 11.09-11.67 (0.4H, br), 13.40-13.82 (0.6H, br)	Dihydrochloru
291	-H	-C ₂ H ₅	-C ₂ H ₅		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 0.80-2.44 (11H, m), 0.97 (3H, t, J = 7.4 Hz), 1.15 (3H, t, J = 7.4 Hz), 2.60-2.66 (1H, m), 2.78-3.09 (1H, m), 3.20-3.37 (1H, m), 3.45-4.16 (3H, m), 7.37 (1H, d, J = 5.4 Hz), 7.49-7.71 (1H, m), 7.55 (1H, d, J = 5.4 Hz), 7.86-7.96 (1H, m), 8.01-8.47 (1H, br), 9.02-9.48 (1H, br), 9.69-10.18 (1H, br)	Dihydrochloru
292	-H	-H	-C ₂ H ₅		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.07 (3H, t, J = 7.5 Hz), 1.23-1.50 (3H, m), 1.51-2.13 (8H, m), 2.16-2.39 (1H, m), 2.50-2.71 (1H, m), 2.90-5.09 (4H, br), 7.30-7.46 (1H, m), 7.46-8.33 (3H, br), 9.10-9.91 (1H, br), 10.95-11.65 (0.4H, br), 13.37-13.92 (0.6H, br)	Dihydrochloru
293	-H	-C ₂ H ₅	-C ₂ H ₅		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 0.80-2.45 (10H, m), 0.97 (3H, t, J = 7.3 Hz), 1.45 (3H, t, J = 7.3 Hz), 2.60-2.66 (1H, m), 2.74-3.05 (1H, m), 3.11-3.42 (1H, m), 3.51-3.97 (3H, m), 7.37 (1H, d, J = 5.4 Hz), 7.50-7.68 (2H, m), 7.53 (1H, d, J = 5.5 Hz), 7.83-7.88 (1H, m), 8.02-8.53 (1H, br), 9.12-9.46 (1H, br), 9.66-10.18 (1H, br)	Dihydrochloru

294	-H	-C ₂ H ₅	-C ₂ H ₅		1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 0.87-2.38 (11H, m), 0.98 (3H, t, J = 7.4 Hz), 1.14 (3H, t, J = 7.2 Hz), 2.49-2.73 (1H, m), 2.73-3.11 (1H, m), 3.31-3.42 (1H, m), 3.52-4.26 (3H, m), 6.82 (1H, d, J = 1.9 Hz), 7.54-7.68 (2H, m), 7.71 (1H, d, J = 1.9 Hz), 7.79-8.30 (1H, br), 8.94-9.51 (1H, br), 9.75-10.34 (1H, br)	Dihydrocloru
295	-H	-H	-C ₂ H ₅		1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.08 (3H, t, J = 7.5 Hz), 1.25-1.43 (2H, m), 1.54-2.05 (6H, m), 2.15-2.34 (1H, m), 2.50-2.64 (1H, m), 3.56 (1H, d, J = 11.1 Hz), 3.84-4.04 (1H, m), 4.10-4.46 (3H, m), 7.62 (1H, d, J = 8.6 Hz), 7.72 (1H, d, J = 8.6 Hz), 7.97 (1H, s), 9.25-9.53 (1H, br), 10.75-11.16 (1H, br)	Hydroclorua
296	-H	-H	-C ₃ H ₇		1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 0.93 (3H, t, J = 7.3 Hz), 1.2-1.4 (2H, m), 1.4-1.6 (3H, m), 1.6-1.9 (6H, m), 2.05-2.15 (1H, m), 2.8-2.9 (1H, m), 3.25 (1H, br), 3.5-3.6 (2H, m), 4.0-4.1 (1H, m), 6.95-7.05 (2H, m), 7.2-7.3 (2H, m), 8.35-8.6 (1H, m), 9.3-9.5 (1H, m)	Hydroclorua

Bảng 41

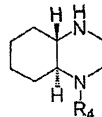
Cấu hình tương đối



Ví dụ	R ¹⁰	R ⁴	NMR	Muối
297			1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 0.08 (6H, s), 0.91 (9H, s), 1.04-1.35 (4H, m), 1.53-1.80 (3H, m), 2.18-2.33 (2H, m), 2.60-2.76 (2H, m), 2.80-3.01 (3H, m), 3.09-3.13 (2H, m), 3.69-3.85 (2H, m), 7.29-7.48 (3H, m), 7.52-7.53 (1H, m), 7.73-7.80 (3H, m)	—
298			1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 0.06 (6H, s), 0.90 (9H, s), 1.04-1.37 (5H, m), 1.61-1.75 (2H, m), 1.79-1.84 (2H, m), 2.15-2.20 (1H, m), 2.32-2.40 (1H, m), 2.58-2.68 (1H, m), 2.71-2.90 (3H, m), 2.97-3.14 (2H, m), 3.19-3.26 (1H, m), 3.64-3.79 (2H, m), 6.93 (1H, dd, J = 8.5, 2.1 Hz), 7.07 (1H, d, J = 2.1 Hz), 7.52 (1H, d, J = 8.5 Hz)	—
299			1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 0.07 (6H, s), 0.81-1.90 (3H, m), 0.90 (9H, s), 1.55-1.78 (4H, m), 2.14-2.24 (2H, m), 2.46-2.54 (1H, m), 2.57-2.67 (1H, m), 2.72-2.82 (1H, m), 2.85-2.97 (4H, m), 3.66-3.81 (2H, m), 6.97 (1H, dd, J = 8.6, 2.4 Hz), 7.22 (1H, d, J = 2.4 Hz), 7.34 (1H, d, J = 8.6 Hz)	—
300	-H		1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.25-1.53 (2H, m), 1.61-1.70 (1H, m), 1.74-1.80 (2H, m), 1.89-2.04 (2H, m), 2.38-2.43 (1H, m), 3.08-3.16 (1H, m), 3.53-3.59 (1H, m), 3.66-3.73 (1H, m), 3.88-3.94 (1H, m), 4.06-4.14 (3H, m), 4.35-4.43 (2H, m), 4.61-4.78 (1H, m), 7.61 (1H, d, J = 8.7 Hz), 7.71 (1H, d, J = 8.7 Hz), 8.00 (1H, brs), 12.52 (1H, brs)	Hydroclorua

Bảng 42

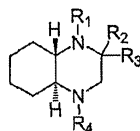
Cấu hình tương đối



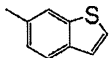
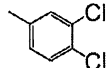
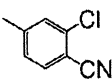
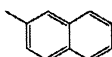
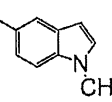
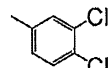
Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
301		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.25-1.50 (2H, m), 1.60-2.05 (5H, m), 2.35-2.70 (1H, m), 2.81-5.38 (6H, br), 7.32-8.89 (7H, br), 9.47-10.31 (1H, br), 10.55-11.77 (0.45H, br), 13.51-14.36 (0.55H, br)	Hydrochlorua
302		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.25-1.51 (2H, m), 1.63-2.09 (5H, m), 2.50-2.56 (1H, m), 3.56-3.91 (2H, m), 3.91-5.16 (4H, br), 7.46 (1H, d, J = 5.5 Hz), 7.55-8.76 (3H, br), 7.66 (1H, d, J = 5.5 Hz), 9.46-10.11 (1H, br), 10.94-11.83 (1H, br), 13.61-14.25 (1H, br)	Dihydrochloru
303		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.24-1.49 (2H, br), 1.51-2.00 (5H, m), 2.33-2.54 (1H, m), 3.30-3.79 (5H, m), 3.81-4.15 (1H, br), 7.34 (1H, d, J = 8.6 Hz), 7.50 (1H, d, J = 8.6 Hz), 7.59 (1H, s), 10.01 (1H, brs), 10.14-10.56 (1H, br)	Hydrochlorua

Bảng 43

Cấu hình tương đối

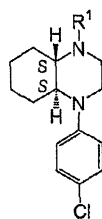


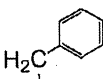
Ví dụ	R ¹	R ² , R ³	R ⁴	NMR	Muối
304	-H	-(CH ₂) ₃ -		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.2-1.35 (2H, m), 1.4-2.1 (10H, m), 2.3-2.5 (2H, m), 3.03 (1H, d, J = 13.2 Hz), 3.35-3.45 (1H, m), 3.68 (1H, d, J = 13.4 Hz), 3.9-4.0 (1H, m), 4.35 (1H, br), 6.95-7.05 (2H, m), 7.2-7.3 (2H, m), 8.9-9.1 (1H, m), 10.0-10.15 (1H, m)	Dihydrochloru
305	-H	-(CH ₂) ₄ -		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.20-1.58 (2H, m), 1.60-2.17 (10H, m), 2.29-2.37 (1H, m), 2.46-2.67 (2H, m), 2.96-3.29 (1H, br), 3.33 (1H, d, J = 13.2 Hz), 3.60-3.98 (1H, br), 3.98-4.41 (2H, br), 7.56-7.60 (2H, m), 7.80-7.98 (4H, m), 8.11-8.71 (1H, br), 9.63-10.08 (1H, br), 10.13-10.87 (1H, br)	Hydrochlorua
306	-CH ₃	-(CH ₂) ₄ -		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.20-1.33 (1H, m), 1.40-2.08 (12H, m), 2.24-2.44 (2H, m), 2.58-2.69 (1H, m), 2.83 (3H, d, J = 4.8 Hz), 3.45 (1H, d, J = 13.4 Hz), 3.58-3.83 (1H, m), 3.87-4.14 (1H, m), 4.08 (1H, d, J = 13.4 Hz), 4.74-4.96 (1H, m), 7.55-7.65 (2H, m), 7.88-8.03 (4H, m), 8.42-9.20 (1H, br), 13.33 (1H, brs)	Dihydrochloru
307	H	-(CH ₂) ₄ -		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.18-1.35 (1H, m), 1.41-2.17 (12H, m), 2.30-2.38 (1H, m), 2.51-2.67 (2H, m), 3.00-3.32 (1H, br), 3.36 (1H, d, J = 12.4 Hz), 3.65-4.47 (3H, br), 7.43 (1H, d, J = 5.5 Hz), 7.61 (1H, d, J = 5.5 Hz), 7.66-7.96 (1H, br), 7.99 (1H, d, J = 8.6 Hz), 8.12-8.19 (1H, br), 9.65-10.02 (1H, br), 10.29-10.83 (1H, br)	Dihydrochloru

308	H	-(CH ₂) ₄ -		1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.20-1.36 (1H, m), 1.41-2.21 (12H, m), 2.29-2.37 (1H, m), 2.49-2.58 (1H, m), 2.61-2.67 (1H, m), 3.07-3.30 (1H, br), 3.36 (1H, d, J = 13.1 Hz), 3.66-3.97 (1H, br), 3.98-4.32 (2H, br), 7.38 (1H, d, J = 5.5 Hz), 7.59 (1H, d, J = 5.5 Hz), 7.67-7.90 (1H, br), 7.93 (1H, d, J = 8.6 Hz), 8.11-8.93 (1H, br), 9.56-10.03 (1H, br), 10.20-10.81 (1H, br)	Dihydrochloru
309	H	-(CH ₂) ₄ -		1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 0.91-1.13 (1H, m), 1.23-1.38 (2H, m), 1.46-2.12 (10H, m), 2.33-2.48 (3H, m), 2.76 (1H, d, J = 12.5 Hz), 2.94-3.12 (2H, m), 3.32 (1H, d, J = 12.5 Hz), 7.03 (1H, dd, J = 8.5, 2.4 Hz), 7.26 (1H, d, J = 2.4 Hz), 7.39 (1H, d, J = 8.5 Hz), 9.75 (2H, brs)	Hydrochlorua
310	H	-(CH ₂) ₄ -		1H-NMR (DMSO) δppm : 0.96-2.27 (16H, m), 2.97-3.59 (4H, m), 7.10 (1H, d, J = 8.7 Hz), 7.31 (1H, s), 7.78 (1H, d, J = 8.7 Hz), 8.93-9.28 (1H, br), 9.32-9.67 (1H, br)	Hydrochlorua
311	H	-(CH ₂) ₅ -		1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 1.18-2.19 (16H, m), 2.30-2.35 (1H, m), 2.47-2.52 (1H, m), 3.04 (1H, br), 3.44-3.67 (3H, m), 7.47-7.61 (3H, m), 7.83-7.89 (4H, m), 9.64 (2H, br)	Hydrochlorua
312	H	-(CH ₂) ₅ -		1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 0.89-1.01 (1H, m), 1.08-1.70 (15H, m), 1.86-1.90 (1H, m), 2.42-2.47 (1H, m), 2.64-2.73 (1H, m), 2.79 (1H, d, J = 12.2 Hz), 3.00-3.08 (1H, m), 3.15 (1H, d, J = 12.2 Hz), 3.76 (3H, s), 3.47-4.70 (3H, br), 6.36 (1H, d, J = 3.0 Hz), 6.49 (2H, s), 6.93 (1H, dd, J = 8.6, 1.4 Hz), 7.27 (1H, d, J = 1.4 Hz), 7.29 (1H, d, J = 3.0 Hz), 7.36 (1H, d, J = 8.6 Hz)	Fumarat
313	H	-(CH ₂) ₅ -		1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 0.96-1.08 (1H, m), 1.23-1.45 (6H, m), 1.06-2.13 (8H, m), 2.20-2.25 (1H, m), 2.35-2.40 (1H, m), 2.62-2.67 (1H, m), 3.03-3.31 (4H, m), 7.03 (1H, dd, J = 8.5, 2.4 Hz), 7.26 (1H, d, J = 2.4 Hz), 7.40 (1H, d, J = 8.5 Hz), 9.49 (2H, brs)	Hydrochlorua

Bảng 44

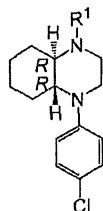
Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ	R ¹	NMR	Muối
314		1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 0.9-1.1 (1H, m), 1.15-1.4 (3H, m), 1.55-1.7 (2H, m), 1.75-1.85 (1H, m), 2.1-2.2 (1H, m), 2.25-2.45 (2H, m), 2.55-2.7 (1H, m), 2.7-2.8 (1H, m), 2.85-2.95 (2H, m), 3.21 (1H, d, J = 13.4Hz), 4.18 (1H, d, J = 13.4Hz), 7.05-7.1 (2H, m), 7.2-7.35 (7H, m).	—
315	-H	1H-NMR (CDCl ₃) δppm : 0.9-1.4 (4H, m), 1.5-1.65 (2H, m), 1.7-1.9 (2H, m), 2.05-2.2 (1H, m), 2.32 (3H, s), 2.45-2.6 (2H, m), 2.8-2.9 (1H, m), 2.9-3.1 (2H, m), 7.0-7.1 (2H, m), 7.2-7.3 (2H, m).	—

Bảng 45

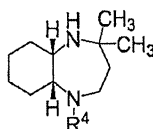
Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ	R ¹	NMR	Muối
316		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 0.95-1.1 (1H, m), 1.15-1.45 (3H, m), 1.5-1.7 (2H, m), 1.75-1.85 (1H, m), 2.1-2.25 (1H, m), 2.25-2.45 (2H, m), 2.55-2.7 (1H, m), 2.7-2.8 (1H, m), 2.85-3.0 (2H, m), 3.21 (1H, d, J = 13.3Hz), 4.18 (1H, d, J = 13.4Hz), 7.0-7.1 (2H, m), 7.2-7.35 (7H, m).	—
317	-H	¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 0.85-1.05 (1H, m), 1.1-1.4 (2H, m), 1.4-1.65 (3H, m), 1.65-1.8 (1H, m), 1.9-2.05 (1H, m), 2.8-3.0 (2H, m), 3.0-3.2 (3H, m), 3.2-3.5 (1H, m), 7.1-7.2 (2H, m), 7.35-7.45 (2H, m), 9.2-9.7 (2H, m).	Hydrochlorua
318	-CH ₃	¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm : 0.9-1.4 (4H, m), 1.5-1.65 (2H, m), 1.7-1.9 (2H, m), 2.05-2.2 (1H, m), 2.32 (3H, s), 2.45-2.6 (2H, m), 2.8-2.9 (1H, m), 2.9-3.1 (2H, m), 7.0-7.15 (2H, m), 7.2-7.3 (2H, m).	—

Bảng 46

Cấu hình tương đối

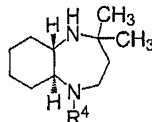


Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
319 *		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.35 (3H, s), 1.45-1.67 (6H, m), 1.67-2.00 (4H, m), 2.16-2.30 (2H, m), 2.30-2.43 (1H, m), 3.39-3.48 (1H, m), 3.62-3.72 (1H, m), 3.88-3.96 (1H, m), 3.09-4.08 (1H, m), 6.05-6.75 (1H, br), 7.10 (1H, s), 7.20-7.25 (1H, m), 7.25-7.34 (1H, m), 7.33-7.40 (1H, m), 7.68-7.80 (3H, m), 8.22-8.35 (1H, br), 9.30-9.45 (1H, br).	Dihydrochloru
320 *		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm at 80 °C: 1.37-1.55 (5H, m), 1.55-1.70 (4H, m), 1.71-2.00 (4H, m), 2.19-2.40 (3H, m), 3.35-3.50 (1H, m), 3.52-3.66 (1H, m), 3.84-3.97 (2H, m), 5.53-5.86 (1H, br), 7.06 (1H, dd, J = 2.4, 8.9 Hz), 7.28 (1H, d, J = 5.4 Hz), 7.36 (1H, d, J = 2.4 Hz), 7.60 (1H, d, J = 5.4 Hz), 7.76 (1H, d, J = 8.9 Hz), 8.07-8.40 (1H, br), 9.20-9.57 (1H, br).	Dihydrochloru
321 *		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.32 (3H, s), 1.43-1.61 (6H, m), 1.65-1.89 (4H, m), 2.07-2.17 (1H, m), 2.17-2.27 (1H, m), 2.27-2.40 (1H, m), 3.27-3.36 (1H, m), 3.40-3.55 (1H, m), 3.79-3.90 (2H, m), 5.00-6.60 (1H, br), 6.84 (2H, d, J = 8.9 Hz), 7.19 (2H, d, J = 8.9 Hz), 8.19-8.35 (1H, br), 9.25-9.44 (1H, br).	Dihydrochloru
322 *		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.32 (3H, s), 1.40-1.63 (6H, m), 1.63-1.90 (4H, m), 2.07-2.25 (2H, m), 2.30-2.33 (1H, m), 3.27-3.38 (1H, m), 3.48-3.59 (1H, m), 3.78-3.86 (1H, m), 3.86-3.95 (1H, m), 5.30-6.75 (1H, br), 6.83 (1H, d, J = 3.0, 9.1 Hz), 7.02 (1H, d, J = 3.0 Hz), 7.35 (1H, d, J = 9.1 Hz), 8.23-8.40 (1H, br), 9.22-9.45 (1H, br).	Dihydrochloru

* Các ví dụ tham khảo không phải của sáng

Bảng 47

Cấu hình tương đối

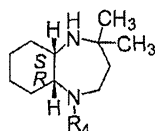


Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
323 *		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.39 (3H, s), 1.43-1.65 (7H, m), 1.71-1.90 (4H, m), 1.93-2.06 (1H, m), 2.35-2.45 (1H, m), 3.60-3.79 (4H, m), 5.40-6.15 (1H, br), 6.90 (1H, s), 7.09-7.20 (2H, m), 7.30-7.40 (1H, m), 7.65-7.72 (2H, m), 7.75 (1H, d, J = 9.0 Hz), 8.60-8.80 (1H, br), 8.80-9.00 (1H, br).	Dihydrochloru
324 *		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm at 80 °C: 1.38-1.54 (10H, m), 1.69-2.02 (5H, m), 2.41-2.50 (1H, m), 3.55-3.85 (4H, m), 4.97-5.80 (1H, br), 6.94-7.10 (1H, br), 7.18-7.40 (2H, m), 7.59 (1H, d, J = 5.4 Hz), 7.78 (1H, d, J = 8.9 Hz), 8.75-8.92 (1H, br), 8.92-9.30 (1H, br).	Dihydrochloru
325 *		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.33-1.52 (10H, m), 1.64-1.82 (4H, m), 1.82-1.93 (1H, m), 2.30-2.40 (1H, m), 3.40-3.54 (2H, m), 3.54-3.70 (2H, m), 4.45-5.20 (1H, br), 6.66 (2H, d, J = 9.0 Hz), 7.19 (2H, d, J = 9.0 Hz), 8.55-8.70 (1H, br), 8.75-8.92 (1H, br).	Dihydrochloru
326 *		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.33-1.59 (10H, m), 1.61-1.90 (5H, m), 2.33-2.45 (1H, m), 3.45-3.56 (2H, m), 3.56-3.71 (2H, m), 5.05-6.00 (1H, br), 6.65 (1H, dd, J = 2.8, 9.1 Hz), 6.78 (1H, d, J = 2.8 Hz), 7.34 (1H, d, J = 9.1 Hz), 8.70-8.89 (1H, br), 9.00-9.15 (1H, br).	Dihydrochloru

* Các ví dụ tham khảo không phải của sáng

Bảng 48

Cấu hình tuyệt đối

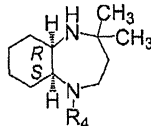


Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
327 *		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.35 (3H, s), 1.45-1.67 (6H, m), 1.67-2.00 (4H, m), 2.16-2.30 (2H, m), 2.30-2.43 (1H, m), 3.39-3.48 (1H, m), 3.62-3.72 (1H, m), 3.88-3.98 (1H, m), 3.09-4.08 (1H, m), 6.05-6.75 (1H, br), 7.10 (1H, s), 7.20-7.25 (1H, m), 7.25-7.34 (1H, m), 7.33-7.40 (1H, m), 7.66-7.80 (3H, m), 8.22-8.35 (1H, br), 9.30-9.45 (1H, br).	Dihydrochloru
328 *		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm at 80 °C: 1.37-1.55 (5H, m), 1.55-1.70 (4H, m), 1.71-2.00 (4H, m), 2.19-2.40 (3H, m), 3.35-3.50 (1H, m), 3.52-3.66 (1H, m), 3.84-3.97 (2H, m), 5.53-5.86 (1H, br), 7.06 (1H, dd, J = 2.4, 8.9 Hz), 7.28 (1H, d, J = 5.4 Hz), 7.36 (1H, d, J = 2.4 Hz), 7.60 (1H, d, J = 5.4 Hz), 7.76 (1H, d, J = 8.9 Hz), 8.07-8.40 (1H, br), 9.20-9.57 (1H, br).	Dihydrochloru
329 *		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.33-1.52 (10H, m), 1.64-1.82 (4H, m), 1.82-1.93 (1H, m), 2.30-2.40 (1H, m), 3.40-3.54 (2H, m), 3.54-3.70 (2H, m), 4.45-5.20 (1H, br), 6.66 (2H, d, J = 9.0 Hz), 7.19 (2H, d, J = 9.0 Hz), 8.55-8.70 (1H, br), 8.75-8.92 (1H, br).	Dihydrochloru
330 *		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.32 (3H, s), 1.40-1.63 (6H, m), 1.63-1.90 (4H, m), 2.07-2.25 (2H, m), 2.30-2.33 (1H, m), 3.27-3.38 (1H, m), 3.48-3.59 (1H, m), 3.78-3.86 (1H, m), 3.86-3.95 (1H, m), 5.30-6.75 (1H, br), 6.83 (1H, d, J = 3.0, 9.1 Hz), 7.02 (1H, d, J = 3.0 Hz), 7.35 (1H, d, J = 9.1 Hz), 8.23-8.40 (1H, br), 9.22-9.45 (1H, br).	Dihydrochloru

* Các ví dụ tham khảo không phải của sáng

Bảng 49

Cấu hình tuyệt đối

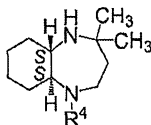


Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
331 *		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.35 (3H, s), 1.45-1.67 (6H, m), 1.67-2.00 (4H, m), 2.16-2.30 (2H, m), 2.30-2.43 (1H, m), 3.39-3.48 (1H, m), 3.62-3.72 (1H, m), 3.88-3.96 (1H, m), 3.09-4.08 (1H, m), 6.05-6.75 (1H, br), 7.10 (1H, s), 7.20-7.25 (1H, m), 7.25-7.34 (1H, m), 7.33-7.40 (1H, m), 7.66-7.80 (3H, m), 8.22-8.35 (1H, br), 9.30-9.45 (1H, br).	Dihydrocloru
332 *		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δ ppm at 80 °C: 1.37-1.55 (5H, m), 1.55-1.70 (4H, m), 1.71-2.00 (4H, m), 2.19-2.40 (3H, m), 3.35-3.50 (1H, m), 3.52-3.66 (1H, m), 3.84-3.97 (2H, m), 5.53-5.86 (1H, br), 7.06 (1H, dd, J = 2.4, 8.9 Hz), 7.28 (1H, d, J = 5.4 Hz), 7.36 (1H, d, J = 2.4 Hz), 7.60 (1H, d, J = 5.4 Hz), 7.76 (1H, d, J = 8.9 Hz), 8.07-8.40 (1H, br), 9.20-9.57 (1H, br).	Dihydrocloru
333 *		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.33-1.52 (10H, m), 1.64-1.82 (4H, m), 1.82-1.93 (1H, m), 2.30-2.40 (1H, m), 3.40-3.54 (2H, m), 3.54-3.70 (2H, m), 4.45-5.20 (1H, br), 6.66 (2H, d, J = 9.0 Hz), 7.19 (2H, d, J = 9.0 Hz), 8.55-8.70 (1H, br), 8.75-8.92 (1H, br).	Dihydrocloru
334 *		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.32 (3H, s), 1.40-1.63 (6H, m), 1.63-1.90 (4H, m), 2.07-2.25 (2H, m), 2.30-2.33 (1H, m), 3.27-3.38 (1H, m), 3.48-3.59 (1H, m), 3.78-3.86 (1H, m), 3.86-3.95 (1H, m), 5.30-6.75 (1H, br), 6.83 (1H, d, J = 3.0, 9.1 Hz), 7.02 (1H, d, J = 3.0 Hz), 7.35 (1H, d, J = 9.1 Hz), 8.23-8.40 (1H, br), 9.22-9.45 (1H, br).	Dihydrocloru

* Các ví dụ tham khảo không phải của sáng

Bảng 50

Cấu hình tuyệt đối

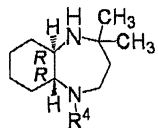


Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
335 *		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.39 (3H, s), 1.43-1.65 (7H, m), 1.71-1.90 (4H, m), 1.93-2.06 (1H, m), 2.35-2.45 (1H, m), 3.60-3.79 (4H, m), 5.40-6.15 (1H, br), 6.90 (1H, s), 7.09-7.20 (2H, m), 7.30-7.40 (1H, m), 7.65-7.72 (2H, m), 7.75 (1H, d, J = 9.0 Hz), 8.60-8.80 (1H, br), 8.80-9.00 (1H, br).	Dihydrocloru
336 *		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δ ppm at 80 °C: 1.38-1.54 (10H, m), 1.69-2.02 (5H, m), 2.41-2.50 (1H, m), 3.55-3.85 (4H, m), 4.97-5.80 (1H, br), 6.94-7.10 (1H, br), 7.18-7.40 (2H, m), 7.59 (1H, d, J = 5.4 Hz), 7.78 (1H, d, J = 8.9 Hz), 8.75-8.92 (1H, br), 8.92-9.30 (1H, br).	Dihydrocloru
337 *		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.33-1.52 (10H, m), 1.64-1.82 (4H, m), 1.82-1.93 (1H, m), 2.30-2.40 (1H, m), 3.40-3.54 (2H, m), 3.54-3.70 (2H, m), 4.45-5.20 (1H, br), 6.66 (2H, d, J = 9.0 Hz), 7.19 (2H, d, J = 9.0 Hz), 8.55-8.70 (1H, br), 8.75-8.92 (1H, br).	Dihydrocloru
338 *		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.33-1.59 (10H, m), 1.61-1.90 (5H, m), 2.33-2.45 (1H, m), 3.45-3.56 (2H, m), 3.56-3.71 (2H, m), 5.05-6.00 (1H, br), 6.65 (1H, dd, J = 2.8, 9.1 Hz), 6.78 (1H, d, J = 2.8 Hz), 7.34 (1H, d, J = 9.1 Hz), 8.70-8.89 (1H, br), 9.00-9.15 (1H, br).	Dihydrocloru

* Các ví dụ tham khảo không phải của sáng

Bảng 51

Cấu hình tuyệt đối

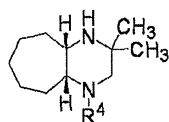


Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
339 *		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.39 (3H, s), 1.43-1.65 (7H, m), 1.71-1.90 (4H, m), 1.93-2.06 (1H, m), 2.35-2.45 (1H, m), 3.60-3.79 (4H, m), 5.40-6.15 (1H, br), 6.90 (1H, s), 7.09-7.20 (2H, m), 7.30-7.40 (1H, m), 7.65-7.72 (2H, m), 7.75 (1H, d, J = 9.0 Hz), 8.60-8.80 (1H, br), 8.80-9.00 (1H, br).	Dihydrochloru
340 *		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δ ppm at 80 °C: 1.38-1.54 (10H, m), 1.69-2.02 (5H, m), 2.41-2.50 (1H, m), 3.55-3.85 (4H, m), 4.97-5.80 (1H, br), 6.94-7.10 (1H, br), 7.18-7.40 (2H, m), 7.59 (1H, d, J = 5.4 Hz), 7.78 (1H, d, J = 8.9 Hz), 8.75-8.92 (1H, br), 8.92-9.30 (1H, br).	Dihydrochloru
341 *		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.33-1.52 (10H, m), 1.64-1.82 (4H, m), 1.82-1.93 (1H, m), 2.30-2.40 (1H, m), 3.40-3.54 (2H, m), 3.54-3.70 (2H, m), 4.45-5.20 (1H, br), 6.66 (2H, d, J = 9.0 Hz), 7.19 (2H, d, J = 9.0 Hz), 8.55-8.70 (1H, br), 8.75-8.92 (1H, br).	Dihydrochloru
342 *		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.33-1.59 (10H, m), 1.61-1.90 (5H, m), 2.33-2.45 (1H, m), 3.45-3.58 (2H, m), 3.56-3.71 (2H, m), 5.05-6.00 (1H, br), 6.65 (1H, dd, J = 2.8, 9.1 Hz), 6.78 (1H, d, J = 2.8 Hz), 7.34 (1H, d, J = 9.1 Hz), 8.70-8.89 (1H, br), 9.00-9.15 (1H, br).	Dihydrochloru

* Các ví dụ tham khảo không phải của sáng

Bảng 52

Cấu hình tương đối

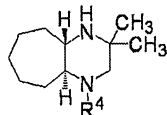


Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
343 *		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.10-1.92 (14H, m), 2.23-2.44 (2H, m), 2.94 (1H, d, J = 13.3), 3.51 (1H, d, J = 13.3 Hz), 3.76-3.94 (1H, m), 4.10-4.22 (1H, m), 5.80-6.30 (1H, br), 7.11 (1H, d, J = 1.6 Hz), 7.22-7.31 (1H, m), 7.36-7.50 (2H, m), 7.66-7.85 (3H, m), 8.66-8.92 (1H, br), 9.80-9.08 (1H, br).	Dihydrochloru
344 *		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.10-1.38 (3H, m), 1.38-1.65 (8H, m), 1.65-1.92 (3H, m), 2.15-2.40 (2H, m), 2.89 (1H, d, J = 13.3 Hz), 3.37 (1H, d, J = 13.3 Hz), 3.77-3.95 (1H, m), 4.00-4.14 (1H, m), 7.17 (1H, dd, J = 2.3, 8.9 Hz), 7.28-7.38 (2H, m), 7.68 (1H, d, J = 5.4 Hz), 7.83 (1H, d, J = 8.9 Hz), 8.44-8.74 (1H, br), 9.65-9.90 (1H, br).	Hydrochlorua
345 *		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.10-1.95 (14H, m), 2.16-2.45 (2H, m), 2.82 (1H, d, J = 13.5), 3.40 (1H, d, J = 13.5 Hz), 3.70-3.89 (1H, m), 3.89-4.07 (1H, m), 6.93 (2H, d, J = 9.0 Hz), 7.26 (2H, d, J = 9.0 Hz), 8.54-8.88 (1H, br), 9.66-9.99 (1H, br).	Hydrochlorua
346 *		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.10-1.90 (14H, m), 2.19-2.45 (2H, m), 2.83 (1H, d, J = 13.6 Hz), 3.50 (1H, d, J = 13.6 Hz), 3.68-3.86 (1H, br), 3.94-4.07 (1H, br), 6.92 (1H, dd, J = 2.9, 9.0 Hz), 7.14 (1H, d, J = 2.9 Hz), 7.42 (1H, d, J = 9.0 Hz), 8.55-8.88 (1H, br), 9.62-9.98 (1H, br).	Hydrochlorua

* Các ví dụ tham khảo không phải của sáng

Bảng 53

Cấu hình tương đối

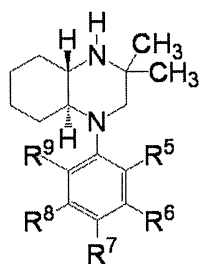


Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
347 *		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.37 (3H, s), 1.42-1.88 (12H, m), 2.10-2.25 (1H, m), 3.13 (1H, d, J = 13.4 Hz), 3.28-3.63 (3H, m), 3.92-4.48 (1H, br), 7.26-7.51 (4H, m), 7.76-7.92 (3H, m), 8.85-9.15 (1H, br), 9.50-9.70 (1H, br).	Dihydrocloru
348 *		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.00 (3H, s), 1.20-1.70 (13H, m), 1.70-1.85 (1H, m), 2.70-2.95 (4H, m), 7.05 (1H, dd, J = 2.1, 8.7 Hz), 7.34 (1H, d, J = 5.4 Hz), 7.39 (1H, d, J = 2.1 Hz), 7.67 (1H, d, J = 5.4 Hz), 7.82 (1H, d, J = 8.7 Hz).	—
349 *		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.33 (3H, s), 1.37-1.81 (12H, m), 2.07-2.22 (1H, m), 3.00 (1H, d, J = 13.6 Hz), 3.21-3.50 (3H, m), 3.88-4.20 (1H, br), 6.97 (2H, d, J = 8.8 Hz), 7.31 (2H, d, J = 8.8 Hz), 8.66-9.00 (1H, br), 9.33-9.65 (1H, m).	Dihydrocloru
350 *		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm : 1.33 (3H, s), 1.36 (3H, s), 1.50-1.90 (9H, m), 2.07-2.28 (1H, m), 3.07 (1H, d, J = 14.2 Hz), 3.32-3.66 (3H, m), 6.88 (1H, dd, J = 2.8, 8.9 Hz), 7.09 (1H, d, J = 2.8 Hz), 7.43 (1H, d, J = 8.9 Hz), 8.70-8.92 (1H, br), 9.35-9.58 (1H, br).	Hydroclorua

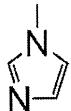
* Các ví dụ tham khảo không phải của sáng

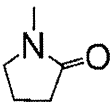
Bảng 54

Cấu hình tương đối



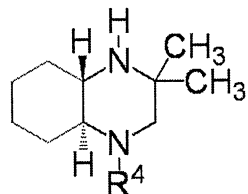
Ví dụ	R ⁵	R ⁶	R ⁷	R ⁸	R ⁹	MS(M+1)
351	-H	-H	-H	-H	-H	245
352	-H	-H	-CH ₃	-H	-H	259
353	-H	-CH ₃	-H	-H	-H	259
354	-H	-F	-H	-H	-H	263
355	-H	-H	-CN	-H	-H	270
356	-H	-CH ₃	-CH ₃	-H	-H	273
357	-H	-C ₂ H ₅	-H	-H	-H	273
358	-H	-CH ₃	-H	-CH ₃	-H	273
359	-H	-H	-C ₂ H ₅	-H	-H	273
360	-H	-OCH ₃	-H	-H	-H	275
361	-H	-F	-H	-F	-H	281
362	-H	-CH ₃	-CN	-H	-H	284
363	-H	-H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-H	-H	287
364	-H	-CH(CH ₃) ₂	-H	-H	-H	287
365	-H	-H	-CH(CH ₃) ₂	-H	-H	287
366	-H	-F	-CN	-H	-H	288

367	-H	-CN	-H	-F	-H	288
368	-H	-N(CH ₃) ₂	-H	-H	-H	288
369	-H	-H	-N(CH ₃) ₂	-H	-H	288
370	-H	-OC ₂ H ₅	-H	-H	-H	289
371	-H	-CH ₃	-OCH ₃	-H	-H	289
372	-H	-H	-OCH ₂ CH ₃	-H	-H	289
373	-H	-CH ₃	-F	-CH ₃	-H	291
374	-H	-H	-SCH ₃	-H	-H	291
375	-H	-SCH ₃	-H	-H	-H	291
376	-OCH ₃	-H	-H	-F	-H	293
377	-H	-F	-H	-Cl	-H	297
378	-H	-F	-F	-F	-H	299
379	-H	-H	-C(CH ₃) ₃	-H	-H	301
380	-H	-CH ₃	-OCH ₃	-CH ₃	-H	303
381	-H	-OCH(CH ₃) ₂	-H	-H	-H	303
382	-H	-OCH ₃	-OCH ₃	-H	-H	305
383	-H	-H	-SCH ₂ CH ₃	-H	-H	305
384	-OCH ₃	-H	-H	-Cl	-H	309
385	-H	-OCH ₃	-F	-F	-H	311
386	-H	-H		-H	-H	311

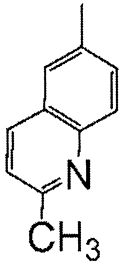
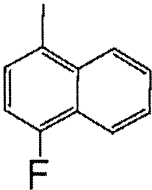
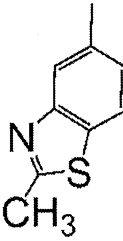
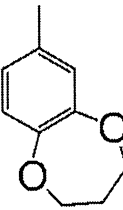
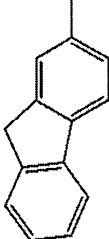
387	-H	-CF ₃	-H	-H	-H	313
388	-H	-H	-CF ₃	-H	-H	313
389	-Cl	-H	-Cl	-H	-H	313
390	-H	-Cl	-H	-Cl	-H	313
391	-H	-CF ₃	-CH ₃	-H	-H	327
392	-H	-H		-H	-H	328
393	-H	-H	-OCF ₃	-H	-H	329
394	-H	-CF ₃	-H	-F	-H	331
395	-F	-H	-CF ₃	-H	-H	331
396	-H	-F	-CF ₃	-H	-H	331
397	-F	-CF ₃	-H	-H	-H	331
398	-H	-CF ₃	-F	-H	-H	331
399	-H	-CF ₃	-OCH ₃	-H	-H	343
400	-H	-CF ₃	-Cl	-H	-H	347

Bảng 55

Cấu hình tương đối

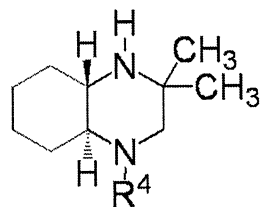


Ví dụ	R ⁴	MS(M+1)
401		285
402		285
403		287
404		299
405		302
406		303
407		303

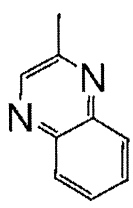
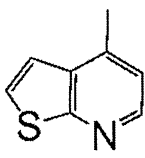
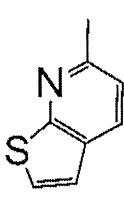
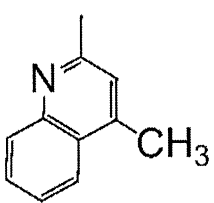
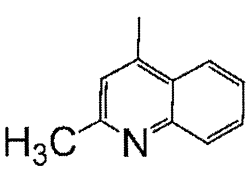
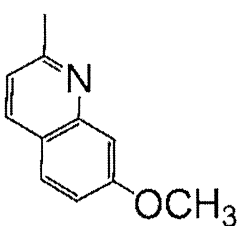
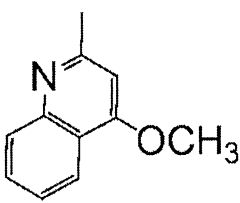
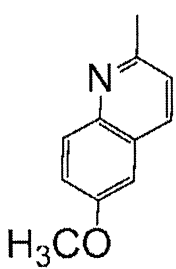
408		310
409		313
410		316
411		317
412		333

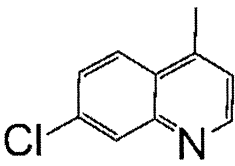
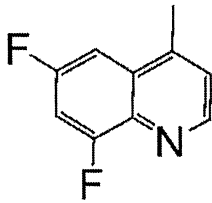
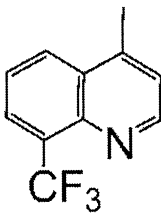
Bảng 56

Cấu hình tương đối



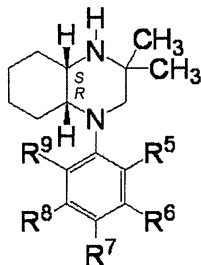
Ví dụ	R ⁴	MS(M+1)
413		251
414		260
415		260
416		276
417		296
418		296
419		296

420		297
421		302
422		302
423		310
424		310
425		326
426		326
427		326

428	 <chem>Cc1ccc2cc(Cl)ccc2n1</chem>	330
429	 <chem>Cc1ccc2cc(F)c(F)cc2n1</chem>	332
430	 <chem>Cc1ccc2cc(C(F)(F)F)ccc2n1</chem>	364

Bảng 57

Cấu hình tuyệt đối

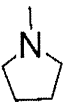
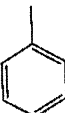
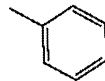


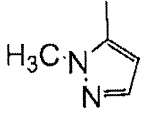
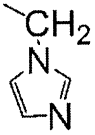
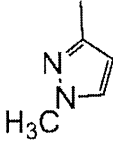
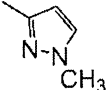
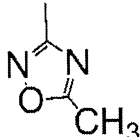
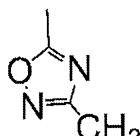
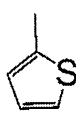
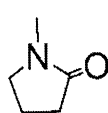
Ví dụ	R ⁵	R ⁶	R ⁷	R ⁸	R ⁹	MS(M+1)
431	-H	-H	-H	-H	-H	245
432	-H	-H	-CH ₃	-H	-H	259
433	-H	-CH ₃	-H	-H	-H	259
434	-CH ₃	-H	-H	-H	-H	259
435	-H	-CN	-H	-H	-H	270
436	-CN	-H	-H	-H	-H	270
437	-H	-H	-CN	-H	-H	270
438	-H	-CH ₃	-CH ₃	-H	-H	273
439	-H	-CH ₃	-H	-CH ₃	-H	273
440	-CH ₃	-CH ₃	-H	-H	-H	273
441	-H	-H	-C ₂ H ₅	-H	-H	273

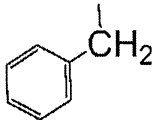
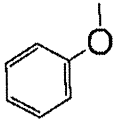
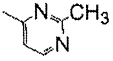
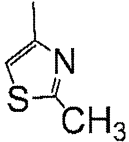
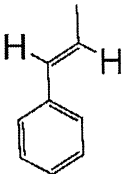
442	-H	-OCH ₃	-H	-H	-H	275
443	-OCH ₃	-H	-H	-H	-H	275
444	-CH ₃	-F	-H	-H	-H	277
445	-H	-CH ₃	-F	-H	-H	277
446	-F	-H	-H	-CH ₃	-H	277
447	-H	-F	-CH ₃	-H	-H	277
448	-CH ₃	-H	-F	-H	-H	277
449	-F	-H	-H	-F	-H	281
450	-F	-H	-F	-H	-H	281
451	-H	-CH ₃	-CN	-H	-H	284
452	-H	-C(O)CH ₃	-H	-H	-H	287
453	-H	-H	-C(O)CH ₃	-H	-H	287
454	-CH ₃	-H	-CH ₃	-CH ₃	-H	287
455	-H	-H	-CH(CH ₃) ₂	-H	-H	287
456	-F	-H	-CN	-H	-H	288
457	-H	-F	-CN	-H	-H	288

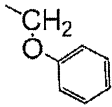
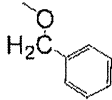
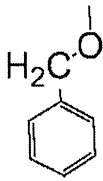
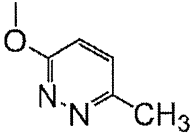
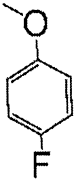
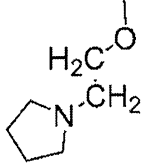
458	-H	-CN	-F	-H	-H	288
459	-H	-N(CH ₃) ₂	-H	-H	-H	288
460	-H	-H	-N(CH ₃) ₂	-H	-H	288
461	-CH ₃	-H	-OCH ₃	-H	-H	289
462	-H	-CH ₃	-OCH ₃	-H	-H	289
463	-H	-CH ₃	-F	-CH ₃	-H	291
464	-CH ₃	-F	-CH ₃	-H	-H	291
465	-H	-H	-SCH ₃	-H	-H	291
466	-H	-SCH ₃	-H	-H	-H	291
467	-OCH ₃	-H	-H	-F	-H	293
468	-CH ₃	-Cl	-H	-H	-H	293
469	-H	-CH ₃	-Cl	-H	-H	293
470	-H	-Cl	-CH ₃	-H	-H	293
471	-CH ₃	-H	-Cl	-H	-H	293
472	-F	-H	-H	-Cl	-H	297
473	-H	-F	-H	-Cl	-H	297

474	-F	-H	-Cl	-H	-H	297
475	-F	-F	-H	-F	-H	299
476	-H	-H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-H	-H	301
477	-H	-H	-C(CH ₃) ₃	-H	-H	301
478	-H	-H	-CH ₂ N(CH ₃) ₂	-H	-H	302
479	-H	-CH ₂ N(CH ₃) ₂	-H	-H	-H	302
480	-OCH(CH ₃) ₂	-H	-H	-H	-H	303
481	-H	-CH ₃	-OCH ₃	-CH ₃	-H	303
482	-H	-Cl	-CN	-H	-H	304
483	-H	-OCH ₃	-H	-OCH ₃	-H	305
484	-H	-OCH ₃	-OCH ₃	-H	-H	305
485	-OCH ₃	-H	-H	-OCH ₃	-H	305
486	-OCH ₃	-F	-H	-F	-H	311
487	-H	-OCH ₃	-F	-F	-H	311
488	-OCH ₃	-H	-F	-F	-H	311
489	-H	-H	-OCHF ₂	-H	-H	311

490		-H	-H	-H	-H	311
491	-H	-H		-H	-H	311
492	-H		-H	-H	-H	311
493	-H		-H	-H	-H	311
494	-CF ₃	-H	-H	-H	-H	313
495	-H	-CF ₃	-H	-H	-H	313
496	-H	-H	-CF ₃	-H	-H	313
497	-Cl	-H	-Cl	-H	-H	313
498	-H	-Cl	-H	-Cl	-H	313
499	-H	-H		-H	-H	314
500	-H	-CH ₃	-N(CH ₃) ₂	-CH ₃	-H	316
501		-H	-H	-H	-H	321
502	-H	-H		-H	-H	321
503	-H		-H	-H	-H	321
504	-H	-Cl	-OC ₂ H ₅	-H	-H	323

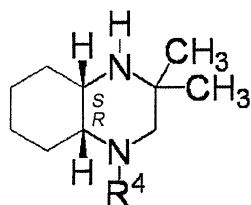
505	-H	-H		-H	-H	325
506	-H		-H	-H	-H	325
507	-H	-H		-H	-H	325
508	-H		-H	-H	-H	325
509	-H	-CF ₃	-CH ₃	-H	-H	327
510	-H	-H		-H	-H	327
511	-H	-H		-H	-H	327
512	-H	-H		-H	-H	327
513	-H	-H		-H	-H	328
514	-H	-OCF ₃	-H	-H	-H	329
515	-OCF ₃	-H	-H	-H	-H	329
516	-H	-H	-OCF ₃	-H	-H	329

517	-H	-F	-CF ₃	-H	-H	331
518	-H	-CF ₃	-F	-H	-H	331
519	-H	-H	-O(CH ₂) ₂ N(CH ₃) ₂	-H	-H	332
520	-H	-OCH ₃	-OCH ₃	-OCH ₃	-H	335
521		-H	-H	-H	-H	335
522	-H	-H		-H	-H	335
523	-H	-H		-H	-H	337
524	-H		-H	-H	-H	337
525	-H	-H		-H	-H	342
526	-H	-CF ₃	-OCH ₃	-H	-H	343
527	-H	-H	-O(CH ₂) ₅ CH ₃	-H	-H	345
528	-H	-H	-O(CH ₂) ₃ N(CH ₃) ₂	-H	-H	346
529	-H	-H		-H	-H	347
530	-H	-Cl	-CF ₃	-H	-H	347

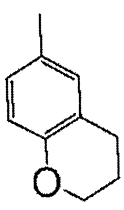
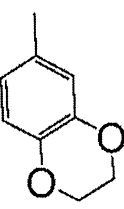
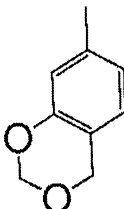
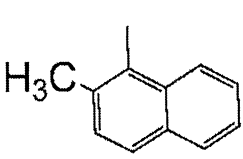
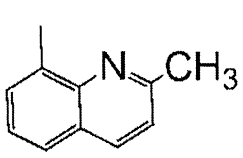
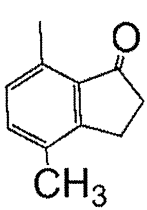
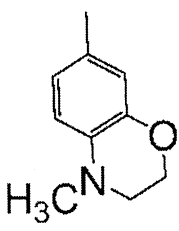
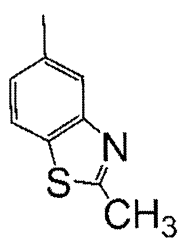
531	-H	-CF ₃	-Cl	-H	-H	347
532	-Cl	-Cl	-H	-Cl	-H	347
533	-H		-H	-H	-H	351
534		-H	-H	-H	-H	351
535	-H		-H	-H	-H	351
536	-H	-H		-H	-H	351
537	-H	-H	-SO ₂ N(CH ₃) ₂	-H	-H	352
538	-H	-H		-H	-H	353
539	-H		-H	-H	-H	355
540	-H	-H		-H	-H	358
541	-H	-H	-CH ₂ N(i-Pr) ₂	-H	-H	358
542	-H	-CF ₃	-H	-CF ₃	-H	381

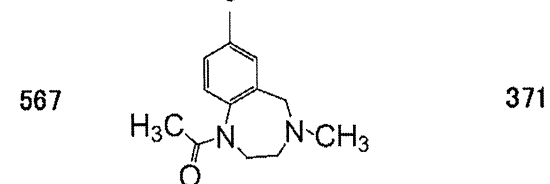
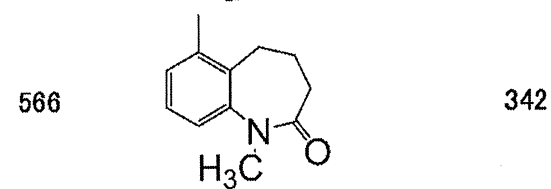
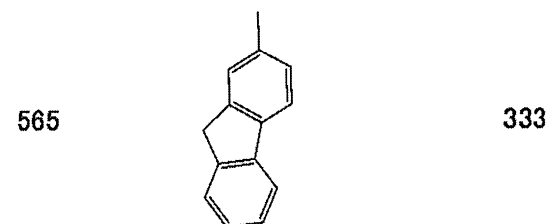
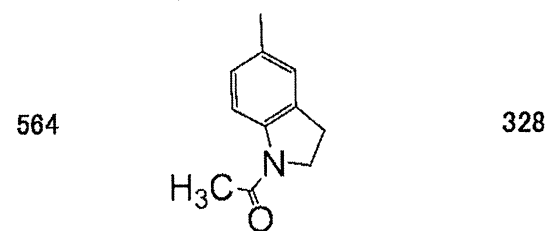
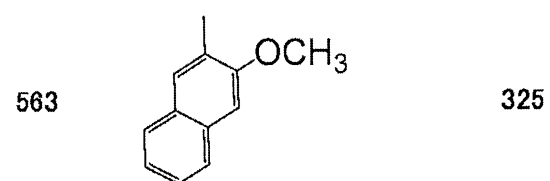
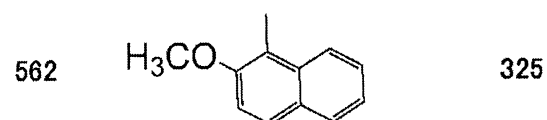
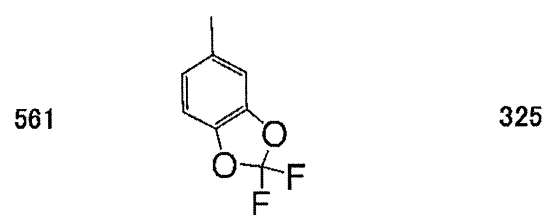
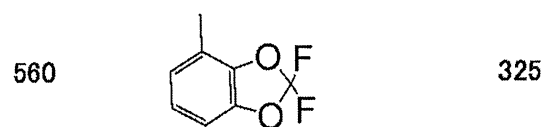
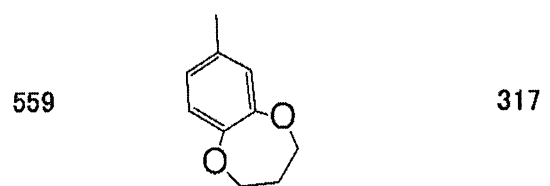
Bảng 58

Cấu hình tuyệt đối

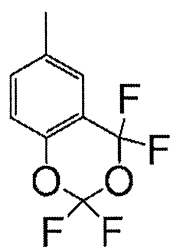


Ví dụ	R ⁴	MS(M+1)
543		287
544		289
545		295
546		296
547		296
548		297
549		298
550		300

551		301
552		303
553		303
554		309
555		310
556		313
557		316
558		316

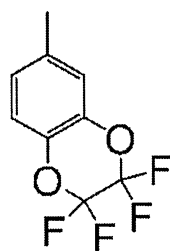


568



375

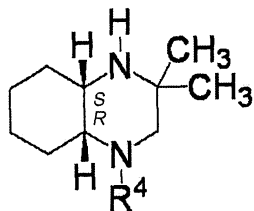
569



375

Bảng 59

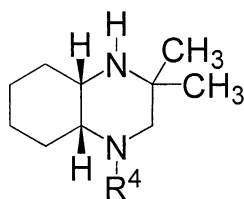
Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ	R ⁴	MS(M+1)
570		246
571		251
572		260
573		260
574		265
575		276
576		296
577		301
578		314

Bảng 63

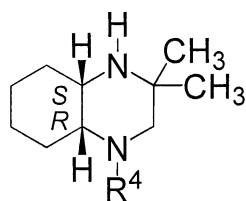
Cấu hình tương đối



Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
588		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,1-1,3 (2H, m), 1,3-1,45 (4H, m), 1,52 (3H, s), 1,6-1,9 (4H, m), 1,95-2,1 (1H, m), 2,93 (1H, d, J = 13,1Hz), 3,11 (1H, d, J = 13,3Hz), 3,68 (3H, d, J = 0,6Hz), 3,7-4,4 (3H, m), 6,82 (2H, d, J = 9,0Hz), 6,89 (2H, d, J = 9,1Hz), 8,09 (1H, br), 9,83 (1H, br)	2 Hydroclorua

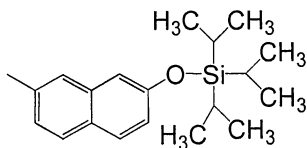
Bảng 64

Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
589		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 1,07-1,15 (18H, m), 1,17-1,34 (12H, m), 1,35-1,50 (2H, m), 1,64-1,86 (4H, m), 2,82 (1H, d, J = 11,6Hz), 3,04 (1H, d, J = 11,7Hz), 3,47-3,53 (1H, m), 3,69-3,78 (1H, m), 6,95 (1H, d, J = 2,3Hz), 7,03 (1H, dd, J = 2,4, 8,8Hz), 7,10 (1H, d, J = 2,4Hz), 7,23 (1H, d, J = 2,4, 9,1Hz), 7,51 (1H, d, J = 8,9Hz), 7,55 (1H, d, J = 9,1Hz).	-

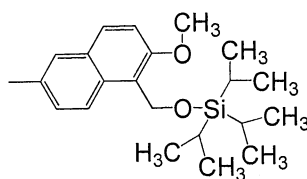
590



$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 1,13 (18H, d, $J = 7,3\text{Hz}$), 1,20-1,36 (12H, m), 1,36-1,64 (2H, m), 1,68-1,86 (4H, m), 2,83 (1H, d, $J = 12,0\text{Hz}$), 3,12 (1H, d, $J = 11,9\text{Hz}$), 3,45-3,55 (1H, m), 3,75-3,85 (1H, m), 6,82 (1H, d, $J = 2,3\text{Hz}$), 6,86 (1H, dd, $J = 2,4, 8,7\text{Hz}$), 7,02 (1H, d, $J = 2,3\text{Hz}$), 7,10 (1H, dd, $J = 2,4, 9,0\text{Hz}$), 7,53 (1H, d, $J = 8,7\text{Hz}$), 7,59 (1H, d, $J = 9,0\text{Hz}$).

-

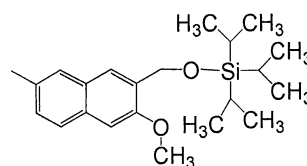
591



$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 1,03-1,12 (18H, m), 1,12-1,32 (12H, m), 1,32-1,65 (2H, m), 1,66-1,84 (4H, m), 2,82 (1H, d, $J = 11,7\text{Hz}$), 3,08 (1H, d, $J = 11,8\text{Hz}$), 3,47-3,53 (1H, m), 3,73-3,81 (1H, m), 3,88 (3H, s), 5,17 (1H, d, $J = 11,0\text{Hz}$), 5,24 (1H, d, $J = 11,0\text{Hz}$), 6,94 (1H, d, $J = 2,5\text{Hz}$), 7,16 (1H, d, $J = 9,0\text{Hz}$), 7,31 (1H, dd, $J = 2,5, 9,4\text{Hz}$), 7,58 (1H, d, $J = 9,0\text{Hz}$), 8,12 (1H, d, $J = 9,4\text{Hz}$).

-

592

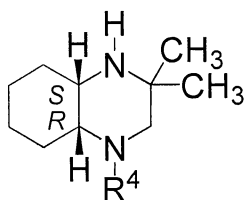


$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 1,14 (18H, d, $J = 6,6\text{Hz}$), 1,19-1,35 (13H, m), 1,35-1,65 (1H, m), 1,65-1,84 (4H, m), 2,83 (1H, d, $J = 11,6\text{Hz}$), 3,04 (1H, d, $J = 11,6\text{Hz}$), 3,5-3,6 (1H, m), 3,7-3,8 (1H, m), 3,87 (3H, s), 4,93 (2H, d, $J = 1,0\text{Hz}$), 6,96 (1H, s), 6,99 (1H, d, $J = 2,2\text{Hz}$), 7,21 (1H, dd, $J = 2,4, 9,0\text{Hz}$), 7,59 (1H, d, $J = 9,0\text{Hz}$), 7,77 (1H, s).

-

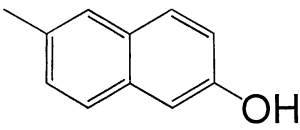
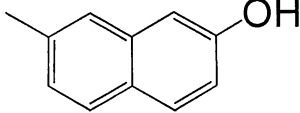
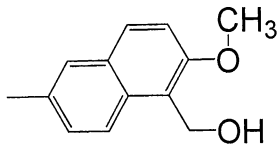
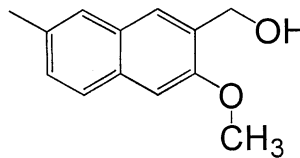
Bảng 65

Cấu hình tuyệt đối

Ví dụ. R^4

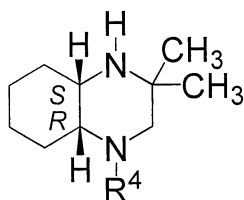
NMR

Muối

593		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 1,15-1,33 (9H, m), 1,33-1,50 (2H, m), 1,64-1,84 (4H, m), 2,82 (1H, d, $J = 11,8\text{Hz}$), 3,04 (1H, d, $J = 11,8\text{Hz}$), 3,49-3,56 (1H, m), 3,69-3,78 (1H, m), 6,96 (1H, d, $J = 2,4\text{Hz}$), 6,99-7,06 (2H, m), 7,22-7,28 (1H, m), 7,52-7,58 (2H, m).	-
594		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 1,17-1,36 (9H, m), 1,36-1,52 (2H, m), 1,65-1,86 (4H, m), 2,83 (1H, d, $J = 11,9\text{Hz}$), 3,13 (1H, d, $J = 12,0\text{Hz}$), 3,45-3,55 (1H, m), 3,75-3,85 (1H, m), 6,8-6,85 (2H, m), 6,94 (1H, d, $J = 2,4\text{Hz}$), 7,10 (1H, d, $J = 2,4, 9,1\text{Hz}$), 7,57 (1H, d, $J = 8,7\text{Hz}$), 7,60 (1H, d, $J = 9,1\text{Hz}$).	-
595		$^1\text{H-NMR}$ (DMSO-d_6) δ ppm: 1,1-1,2 (1H, m), 1,2-1,4 (8H, m), 1,5-1,9 (5H, m), 2,89 (1H, d, $J = 12,4\text{Hz}$), 3,22 (1H, d, $J = 12,5\text{Hz}$), 3,62 (1H, br), 3,85 (3H, s), 3,95-4,05 (1H, m), 4,85 (2H, s), 6,53 (2H, s), 7,07 (1H, d, $J = 2,4\text{Hz}$), 7,28 (1H, d, $J = 9,1\text{Hz}$), 7,39 (1H, dd, $J = 2,5, 9,5\text{Hz}$), 7,67 (1H, d, $J = 9,0\text{Hz}$), 7,98 (1H, d, $J = 9,4\text{Hz}$).	Fumarat
596		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 0,99 (1H, br), 1,15-1,35 (8H, m), 1,35-1,5 (2H, m), 1,5-1,85 (4H, m), 2,44 (1H, br), 2,81 (1H, d, $J = 11,7\text{Hz}$), 3,05 (1H, d, $J = 11,8\text{Hz}$), 3,45-3,55 (1H, m), 3,7-3,8 (1H, m), 3,93 (3H, s), 4,79 (2H, s), 6,98 (1H, d, $J = 2,4\text{Hz}$), 7,02 (1H, s), 7,21-7,28 (1H, m), 7,54 (1H, s), 7,60 (1H, d, $J = 9,0\text{Hz}$).	-

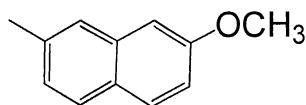
Bảng 66

Cấu hình tuyệt đối



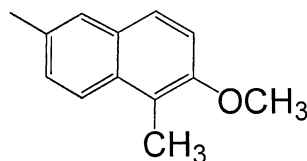
Ví dụ.	R^4	NMR	Muối
--------	--------------	-----	------

597



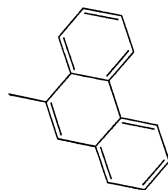
¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 1,15-1,65 (1H, m), 1,65-1,9 (4H, m), 2,84 (1H, d, J = 12,0Hz), 3,13 (1H, d, J = 11,9Hz), 3,50 (1H, bs), 3,75-3,85 (1H, m), 3,89 (3H, s), 6,89 (1H, dd, J = 2,5, 8,8Hz), 6,92 (1H, d, J = 2,3Hz), 6,97 (1H, d, J = 2,4Hz), 7,11 (1H, dd, J = 2,4, 9,0Hz), 7,57 (1H, d, J = 8,8Hz), 7,60 (1H, d, J = 9,0Hz).

598



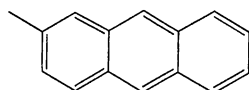
¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 1,08 (1H, br), 1,15-1,35 (8H, m), 1,35-1,5 (2H, m), 1,65-1,85 (4H, m), 2,50 (3H, s), 2,82 (1H, d, J = 11,8Hz), 3,07 (1H, d, J = 11,7Hz), 3,45-3,55 (1H, m), 3,7-3,8 (1H, m), 3,90 (3H, s), 6,96 (1H, d, J = 2,6Hz), 7,18 (1H, d, J = 9,0Hz), 7,30 (1H, dd, J = 2,6, 9,4Hz), 7,51 (1H, d, J = 8,9Hz), 7,81 (1H, d, J = 9,4Hz).

599



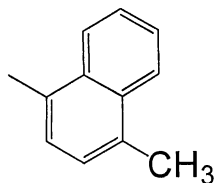
¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 0,81-1,00 (1H, m), 1,03-1,13 (1H, m), 1,27 (3H, s), 1,33-1,43 (2H, m), 1,46 (3H, s), 1,54-1,72 (2H, m), 1,72-1,82 (1H, m), 1,85-2,0 (1H, m), 2,69 (1H, d, J = 11,1Hz), 3,3-3,4 (2H, m), 3,75-3,85 (1H, m), 7,15 (1H, s), 7,5-7,55 (2H, m), 7,6-7,7 (2H, m), 7,7-7,8 (1H, m), 8,3-8,4 (1H, m), 8,55-8,65 (1H, m), 8,65-8,75 (1H, m).

600



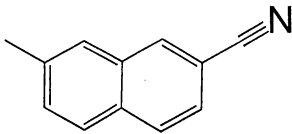
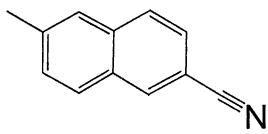
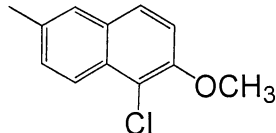
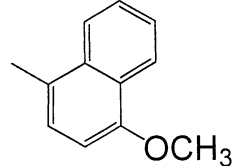
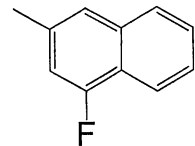
¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 1,00 (1H, br), 1,19-1,37 (8H, m), 1,39-1,51 (2H, m), 1,68-1,79 (3H, m), 1,79-1,93 (1H, m), 2,90 (1H, d, J = 11,8Hz), 3,18 (1H, d, J = 11,9Hz), 3,5-3,6 (1H, m), 3,8-3,9 (1H, m), 7,05 (1H, d, J = 2,1Hz), 7,3-7,45 (3H, m), 7,8-7,95 (3H, m), 8,15 (1H, s), 8,25 (1H, s).

601

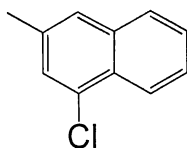


¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 0,85-1,0 (1H, m), 1,0-1,1 (1H, m), 1,3-1,4 (1H, m), 1,5-1,65 (7H, m), 1,65-1,85 (2H, m), 1,85-2,1 (2H, m), 2,59 (3H, s), 2,76 (1H, d, J = 12,6Hz), 3,3-3,5 (1H, m), 3,51 (1H, d, J = 13,1Hz), 4,15-4,3 (1H, m), 7,02 (1H, d, J = 7,5Hz), 7,28 (1H, d, J = 8,0Hz), 7,5-7,65 (2H, m), 7,95-8,15 (2H, m), 8,25-8,35 (1H, m), 9,6-9,8 (1H, m).

Hydrochlorua

602		¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,29-1,51 (6H, m), 1,56 (3H, s), 1,65-2,1 (5H, m), 3,09 (1H, d, J = 13,6Hz), 3,62 (1H, d, J = 13,5Hz), 3,8-3,9 (1H, m), 4,2-4,3 (1H, m), 7,32 (1H, d, J = 2,2Hz), 7,50 (1H, dd, J = 1,6, 8,4Hz), 7,63 (1H, dd, J = 2,5, 9,2Hz), 7,87-7,98 (2H, m), 8,11-8,29 (2H, m), 9,74 (1H, br).	Hydrochlorua
603		¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,32-1,54 (6H, m), 1,58 (3H, s), 1,67-1,90 (3H, m), 1,90-2,14 (2H, m), 3,11 (1H, d, J = 13,8Hz), 3,71 (1H, d, J = 13,8Hz), 3,75-3,9 (1H, m), 4,25-4,35 (1H, m), 7,29 (1H, d, J = 2,2Hz), 7,5-7,65 (2H, m), 7,81 (1H, d, J = 8,6Hz), 7,91 (1H, d, J = 9,2Hz), 8,25-8,45 (2H, m), 9,9-10,1 (1H, m).	Hydrochlorua
604		¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 0,96 (1H, br), 1,15-1,35 (8H, m), 1,35-1,5 (2H, m), 1,65-1,9 (4H, m), 2,83 (1H, d, J = 11,8Hz), 3,09 (1H, d, J = 11,8Hz), 3,45-3,55 (1H, m), 3,75-3,85 (1H, m), 3,99 (3H, s), 6,95 (1H, d, J = 2,4Hz), 7,20 (1H, d, J = 9,0Hz), 7,37 (1H, dd, J = 2,5, 9,4Hz), 7,56 (1H, d, J = 9,0Hz), 8,06 (1H, d, J = 9,3Hz).	-
605		¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 0,9-1,0 (1H, m), 1,1-1,2 (1H, m), 1,3-1,4 (1H, m), 1,52 (3H, s), 1,55-1,7 (4H, m), 1,7-1,85 (2H, m), 1,85-2,05 (2H, m), 2,73 (1H, d, J = 12,5Hz), 3,3-3,6 (2H, m), 3,94 (3H, s), 4,15-4,3 (1H, m), 6,88 (1H, d, J = 8,2Hz), 7,06 (1H, d, J = 8,1Hz), 7,5-7,55 (1H, m), 7,55-7,6 (1H, m), 7,95 (1H, br), 8,16 (1H, dd, J = 1,0, 8,3Hz), 8,24 (1H, d, J = 8,1Hz), 9,45-9,6 (1H, m).	Hydrochlorua
606		¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,26-1,51 (6H, m), 1,57 (3H, s), 1,66-2,12 (5H, m), 3,06 (1H, d, J = 13,6Hz), 3,57 (1H, d, J = 13,6Hz), 3,74-3,86 (1H, m), 4,15-4,26 (1H, m), 7,05 (1H, d, J = 1,8Hz), 7,28-7,37 (2H, m), 7,43-7,52 (1H, m), 7,75 (1H, d, J = 8,4Hz), 7,84 (1H, d, J = 8,2Hz), 8,23 (1H, br), 9,90 (1H, br).	Hydrochlorua

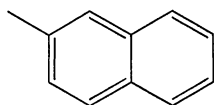
607



¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,28-1,52 (6H, m), 1,57 (3H, s), 1,64-1,97 (4H, m), 2,02-2,16 (1H, m), 3,08 (1H, d, J = 13,5Hz), 3,56 (1H, d, J = 13,6Hz), 3,8-3,9 (1H, m), 3,95-4,1 (1H, m), 7,23 (1H, d, J = 2,0Hz), 7,36-7,45 (1H, m), 7,45-7,54 (1H, m), 7,65 (1H, d, J = 2,3Hz), 7,78 (1H, d, J = 8,1Hz), 7,97 (1H, d, J = 8,3Hz), 8,1-8,35 (1H, m), 9,90 (1H, br).

Hydrochlorua

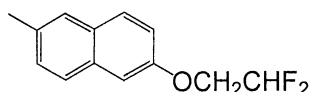
608



¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,26-1,52 (6H, m), 1,57 (3H, s), 1,66-2,02 (4H, m), 2,02-2,12 (1H, m), 3,07 (1H, d, J = 13,4Hz), 3,51 (1H, d, J = 13,4Hz), 3,65-3,9 (2H, m), 4,15-4,25 (1H, m), 7,18 (1H, d, J = 2,2Hz), 7,22-7,3 (1H, m), 7,35-7,47 (2H, m), 7,65-7,85 (3H, m), 8,1-8,3 (1H, m), 9,8-10,0 (1H, m).

2 Hydrochlorua

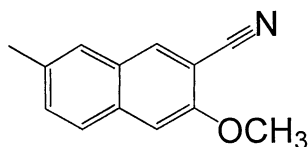
609



¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,06-1,16 (1H, m), 1,16-1,39 (8H, m), 1,46-1,78 (4H, m), 1,78-1,93 (1H, m), 2,81 (1H, d, J = 12,2Hz), 2,9-4,0 (5H, m), 4,30-4,42 (2H, m), 6,27-6,58 (2H, m), 7,06 (1H, d, J = 2,1Hz), 7,10 (1H, dd, J = 2,6, 8,9Hz), 7,26 (1H, d, J = 2,5Hz), 7,35 (1H, dd, J = 2,6, 9,4Hz), 7,61-7,68 (2H, m).

1/2 Fumarat

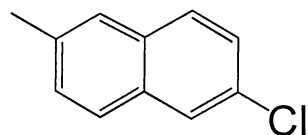
610



¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,23-1,52 (6H, m), 1,59 (3H, s), 1,64-2,03 (4H, m), 2,03-2,16 (1H, m), 3,07 (1H, d, J = 13,3Hz), 3,45 (1H, d, J = 14,0Hz), 3,75-3,85 (1H, m), 3,95 (3H, s), 4,1-4,2 (1H, m), 4,77 (1H, br), 7,25 (1H, d, J = 2,2Hz), 7,46 (1H, s), 7,58 (1H, dd, J = 2,4, 9,2Hz), 7,81 (1H, d, J = 9,2Hz), 8,23 (1H, s), 8,25-8,4 (1H, m), 10,13 (1H, br).

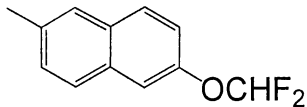
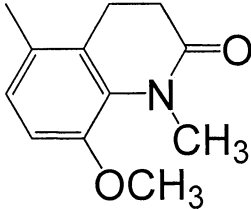
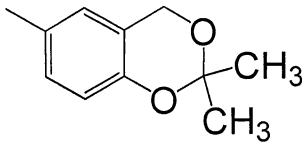
2 Hydrochlorua

611



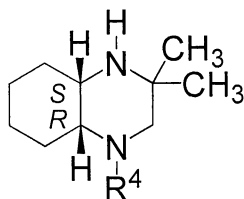
¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,12-1,20 (1H, m), 1,21-1,39 (8H, m), 1,47-1,79 (4H, m), 1,79-1,95 (1H, m), 2,84 (1H, d, J = 12,3Hz), 2,85-3,75 (5H, m), 3,9-4,0 (1H, m), 6,54 (2H, s), 7,12 (1H, d, J = 2,2Hz), 7,34 (1H, dd, J = 2,2, 8,7Hz), 7,43 (1H, dd, J = 2,4, 9,2Hz), 7,65-7,75 (2H, m), 7,80 (1H, d, J = 2,1Hz).

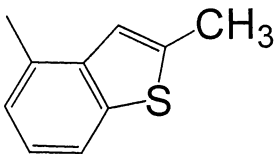
Fumarat

612		$^1\text{H-NMR}$ (DMSO- d_6) δ ppm: 1,05-1,19 (1H, m), 1,19-1,40 (8H, m), 1,46-1,80 (4H, m), 1,80-1,96 (1H, m), 2,83 (1H, d, $J = 12,3\text{Hz}$), 2,9-4,3 (5H, m), 6,51 (1H, s), 7,05-7,45 (4H, m), 7,49 (1H, d, $J = 2,3\text{Hz}$), 7,7-7,8 (2H, m).	1/2 Fumarat
613		$^1\text{H-NMR}$ (DMSO- d_6) δ ppm: 1,0-1,15 (2H, m), 1,3-1,4 (1H, m), 1,48 (3H, s), 1,50 (3H, s), 1,55-1,65 (1H, m), 1,7-1,8 (2H, m), 1,8-2,0 (2H, m), 2,25-2,35 (1H, m), 2,4-2,5 (1H, m), 2,6-2,75 (2H, m), 2,95-3,1 (2H, m), 3,21 (3H, s), 3,3-3,5 (1H, m), 3,78 (3H, s), 3,85-3,95 (1H, m), 6,78 (1H, d, $J = 8,9\text{Hz}$), 6,93 (1H, d, $J = 8,9\text{Hz}$), 7,99 (1H, br), 9,64 (1H, br).	Hydroclorua
614		$^1\text{H-NMR}$ (DMSO- d_6) δ ppm: 1,08-1,37 (9H, m), 1,42 (6H, s), 1,47-1,85 (5H, m), 2,76 (1H, d, $J = 12,4\text{Hz}$), 2,95 (1H, d, $J = 12,3\text{Hz}$), 3,53 (1H, br), 3,63-3,73 (1H, m), 4,74 (2H, s), 6,52 (2H, s), 6,58 (1H, d, $J = 2,7\text{Hz}$), 6,65 (1H, d, $J = 8,9\text{Hz}$), 6,76 (1H, dd, $J = 2,8, 9,0\text{Hz}$).	Fumarat

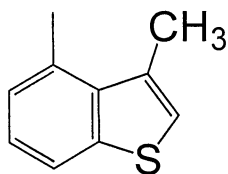
Bảng 67

Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ	R^4	NMR	Muối
615		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl $_3$) δ ppm: 0,91-1,09 (3H, m), 1,20 (3H, s), 1,31-1,43 (5H, m), 1,54-1,78 (3H, m), 1,81-1,95 (1H, m), 2,55-2,65 (4H, m), 3,15 (1H, d, $J = 11,2\text{Hz}$), 3,4-3,5 (1H, m), 3,65-3,7 (1H, m), 6,72-6,77 (1H, m), 7,05 (1H, s), 7,13 (1H, dd, $J = 7,8, 7,8\text{Hz}$), 7,37 (1H, d, $J = 8,0\text{Hz}$).	-

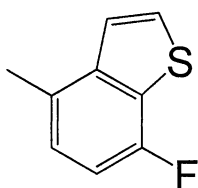
616



¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 0,85-1,08 (3H, m), 1,21 (3H, s), 1,29-1,42 (5H, m), 1,52-1,68 (2H, m), 1,68-1,88 (2H, m), 2,58 (1H, d, J = 11,0Hz), 2,77 (3H, d, J = 0,9Hz), 3,02-3,12 (1H, m), 3,20 (1H, d, J = 11,0Hz), 3,66 (1H, br), 6,91 (1H, d, J = 7,5Hz), 6,98 (1H, d, J = 0,8Hz), 7,19 (1H, dd, J = 7,8, 7,8Hz), 7,52 (1H, dd, J = 0,7, 8,0Hz).

-

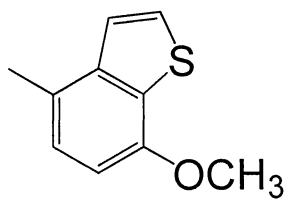
617



¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 0,90-1,08 (3H, m), 1,20 (3H, s), 1,32-1,43 (5H, m), 1,45-1,78 (3H, m), 1,81-1,95 (1H, m), 2,57 (1H, d, J = 11,1Hz), 3,14 (1H, d, J = 11,1Hz), 3,33-3,42 (1H, m), 3,62-3,71 (1H, m), 6,71 (1H, dd, J = 4,1, 8,4Hz), 6,92 (1H, dd, J = 8,9, 8,9Hz), 7,41 (1H, d, J = 5,4Hz), 7,46 (1H, dd, J = 3,7, 5,4Hz).

-

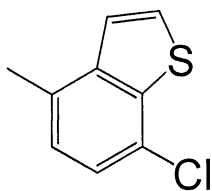
618



¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 0,9-1,1 (2H, m), 1,20 (3H, s), 1,3-1,45 (5H, m), 1,45-1,8 (4H, m), 1,8-1,95 (1H, m), 2,56 (1H, d, J = 11,1Hz), 3,14 (1H, d, J = 11,1Hz), 3,3-3,4 (1H, m), 3,6-3,7 (1H, m), 3,96 (3H, s), 6,66 (1H, d, J = 8,2Hz), 6,74 (1H, d, J = 8,2Hz), 7,39 (1H, d, J = 5,4Hz), 7,45 (1H, d, J = 5,4Hz).

-

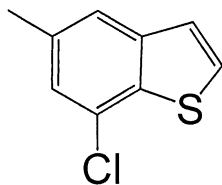
619



¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 0,92-1,08 (3H, m), 1,20 (3H, s), 1,30-1,43 (5H, m), 1,47-1,78 (3H, m), 1,82-1,96 (1H, m), 2,61 (1H, d, J = 11,2Hz), 3,13 (1H, d, J = 11,2Hz), 3,42-3,52 (1H, m), 3,63-3,71 (1H, m), 6,74 (1H, d, J = 8,2Hz), 7,21 (1H, d, J = 8,2Hz), 7,43 (1H, d, J = 5,5Hz), 7,47 (1H, d, J = 5,5Hz).

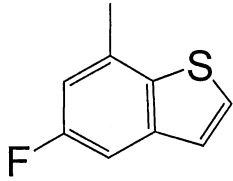
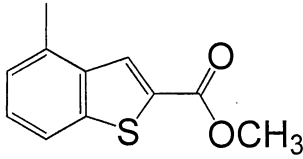
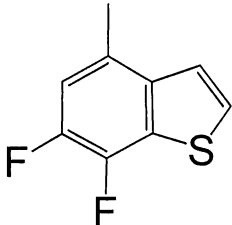
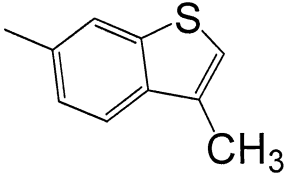
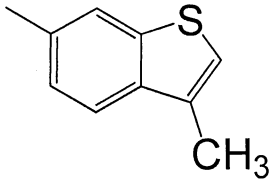
-

620

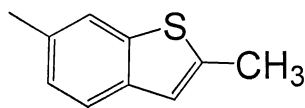


¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 0,94 (1H, br), 1,14-1,33 (8H, m), 1,33-1,49 (2H, m), 1,65-1,85 (4H, m), 2,80 (1H, d, J = 11,7Hz), 2,97 (1H, d, J = 11,6Hz), 3,45-3,55 (1H, m), 3,6-3,7 (1H, m), 7,04 (1H, d, J = 2,1Hz), 7,10 (1H, d, J = 2,2Hz), 7,20 (1H, d, J = 5,4Hz), 7,41 (1H, d, J = 5,5Hz).

-

621		¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,02-1,19 (2H, m), 1,32-1,44 (1H, m), 1,51 (3H, s), 1,52 (3H, s), 1,58-1,88 (3H, m), 1,92-2,09 (2H, m), 3,00 (1H, d, J = 13,0Hz), 3,46 (1H, d, J = 13,1Hz), 3,9-4,0 (1H, m), 3,95-4,08 (1H, m), 6,96 (1H, dd, J = 2,0, 11,0Hz), 7,41 (1H, dd, J = 2,2, 9,1Hz), 7,46 (1H, d, J = 5,4Hz), 7,86 (1H, d, J = 5,4Hz), 8,14 (1H, br), 9,76 (1H, br).	Hydroclorua
622		¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 0,92-1,12 (2H, m), 1,13-2,02 (13H, m), 2,66 (1H, d, J = 11,6Hz), 3,22 (1H, br), 3,45-3,6 (1H, m), 3,77 (1H, br), 3,96 (3H, s), 6,81 (1H, d, J = 7,6Hz), 7,33 (1H, dd, J = 7,8, 7,8Hz), 7,46 (1H, d, J = 7,8Hz), 8,13 (1H, s).	-
623		¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 0,94-1,12 (2H, m), 1,28-1,43 (1H, m), 1,51 (3H, s), 1,53 (3H, s), 1,58-2,07 (5H, m), 2,84 (1H, d, J = 12,6Hz), 3,41 (1H, d, J = 13,0Hz), 3,6-3,7 (1H, m), 4,15-4,25 (1H, m), 7,11 (1H, dd, J = 6,5, 12,6Hz), 7,77 (1H, dd, J = 3,8, 5,4Hz), 7,84 (1H, d, J = 5,4Hz), 8,05 (1H, br), 9,85 (1H, br).	Hydroclorua
624		¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,17-1,52 (6H, m), 1,52-1,63 (3H, m), 1,63-1,74 (1H, m), 1,74-1,98 (3H, m), 1,98-2,16 (1H, m), 2,33 (3H, d, J = 1,0Hz), 3,03 (1H, d, J = 13,4Hz), 3,33-3,5 (1H, m), 3,53-3,97 (2H, m), 4,03-4,18 (1H, m), 7,03-7,12 (1H, m), 7,15 (1H, dd, J = 2,1, 8,9Hz), 7,4-7,5 (1H, m), 7,59 (1H, d, J = 8,8Hz), 8,1-8,35 (1H, m), 9,8-10,1 (1H, m).	2 Hydroclorua
625		¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,1-1,4 (9H, m), 1,49-1,93 (6H, m), 2,31 (3H, d, J = 1,2Hz), 2,83 (1H, d, J = 12,4Hz), 3,19 (1H, d, J = 12,4Hz), 3,25-3,85 (3H, m), 3,85-3,95 (1H, m), 6,52 (2H, s), 7,01 (1H, d, J = 1,2Hz), 7,10 (1H, dd, J = 2,3, 9,0Hz), 7,34 (1H, d, J = 2,2Hz), 7,55 (1H, d, J = 8,8Hz).	Fumarat

626

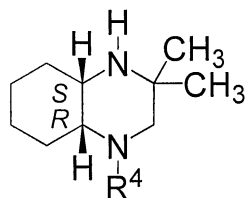


¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,09-1,17 (1H, m), 1,17-1,41 (8H, m), 1,45-1,76 (4H, m), 1,76-1,89 (1H, m), 2,47 (3H, d, J = 1,1Hz), 2,78 (1H, d, J = 12,2Hz), 3,11 (1H, d, J = 12,2Hz), 3,47 (3H, m), 3,75-3,85 (1H, m), 6,50 (1H, s), 6,90 (1H, s), 6,99 (1H, dd, J = 2,3, 8,9Hz), 7,25 (1H, d, J = 2,2Hz), 7,48 (1H, d, J = 8,8Hz).

1/2 Fumarat

Bảng 68

Cấu hình tuyệt đối



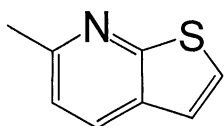
Ví dụ

R⁴

NMR

Muối

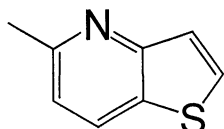
627



¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 0,99 (1H, br), 1,20 (3H, s), 1,22 (3H, s), 1,29-1,51 (4H, m), 1,68-1,82 (3H, m), 1,82-1,95 (1H, m), 2,79 (1H, d, J = 12,8Hz), 3,35-3,45 (1H, m), 3,91 (1H, d, J = 12,8Hz), 4,2-4,3 (1H, m), 6,66 (1H, d, J = 9,0Hz), 7,03 (2H, s), 7,77 (1H, d, J = 8,9Hz).

-

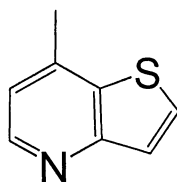
628



¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,35-1,63 (9H, m), 1,69-1,97 (3H, m), 1,97-2,16 (2H, m), 3,05-3,35 (1H, m), 3,35-4,3 (2H, m), 4,3-4,8 (2H, m), 7,1-7,35 (1H, m), 7,4-7,75 (1H, m), 8,0-8,2 (1H, m), 8,25-8,7 (2H, m), 9,85-10,35 (1H, m).

2 Hydroclorua

629

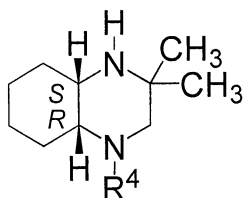


¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,43-1,54 (5H, m), 1,64 (3H, s), 1,71-1,83 (2H, m), 1,83-2,06 (2H, m), 2,06-2,17 (1H, m), 2,4-2,6 (1H, m), 3,56 (1H, d, J = 15,1Hz), 3,85-4,0 (1H, m), 4,25 (1H, d, J = 15,0Hz), 4,65-4,75 (1H, m), 7,28 (1H, d, J = 7,2Hz), 7,69 (1H, d, J = 5,7Hz), 8,5-8,6 (2H, m), 8,9-9,1 (1H, m), 10,35-10,65 (1H, m), 15,15 (1H, br).

2 Hydroclorua

Bảng 69

Cấu hình tuyệt đối



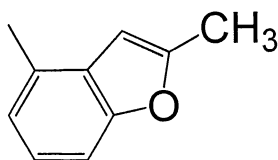
Ví dụ

R⁴

NMR

Muối

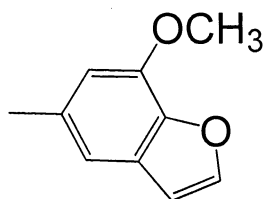
630



¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 0,85-1,17 (3H, m), 1,20 (3H, s), 1,31 (3H, s), 1,33-1,45 (2H, m), 1,5-1,78 (3H, m), 1,81-1,95 (1H, m), 2,45 (3H, d, J = 1,0Hz), 2,80 (1H, d, J = 11,5Hz), 3,05 (1H, d, J = 11,5Hz), 3,55-3,64 (2H, m), 6,39 (1H, s), 6,56 (1H, dd, J = 0,5, 7,7Hz), 6,99 (1H, d, J = 8,2Hz), 7,06 (1H, dd, J = 7,9, 7,9Hz).

-

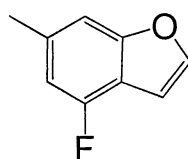
631



¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 1,10-1,27 (5H, m), 1,29 (3H, s), 1,35-1,48 (2H, m), 1,48-1,83 (5H, m), 2,77-2,89 (2H, m), 3,49-3,55 (1H, m), 3,55-3,63 (1H, m), 4,01 (3H, s), 6,50 (1H, d, J = 2,0Hz), 6,58 (1H, d, J = 2,1Hz), 6,63 (1H, d, J = 2,1Hz), 7,53 (1H, d, J = 2,0Hz).

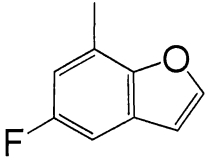
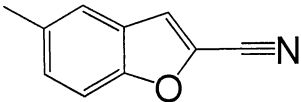
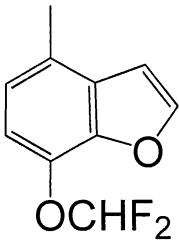
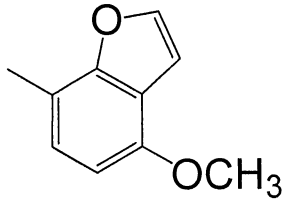
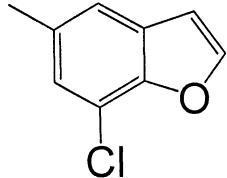
-

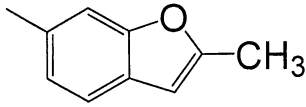
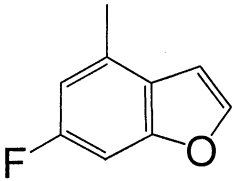
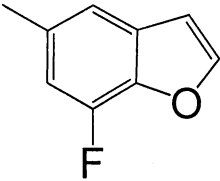
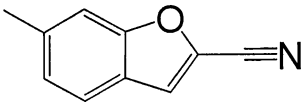
632



¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,05-1,22 (2H, m), 1,34-1,45 (1H, m), 1,48 (3H, s), 1,53 (3H, s), 1,60-2,07 (5H, m), 3,13 (1H, d, J = 13,2Hz), 3,28 (1H, d, J = 13,4Hz), 3,88-3,89 (1H, m), 3,89-4,02 (1H, m), 6,62 (1H, dd, J = 2,1, 12,3Hz), 7,09 (1H, dd, J = 1,3, 8,7Hz), 7,22 (1H, dd, J = 0,7, 2,2Hz), 7,96 (1H, d, J = 2,3Hz), 8,05-8,2 (1H, m), 9,7-9,95 (1H, m).

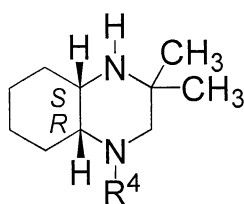
Hydroclorua

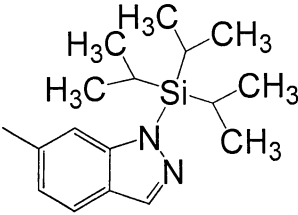
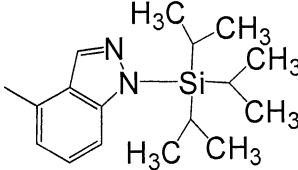
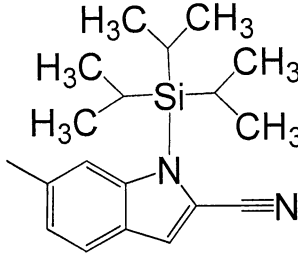
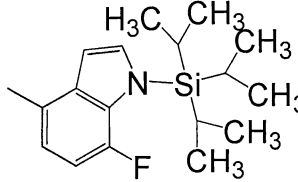
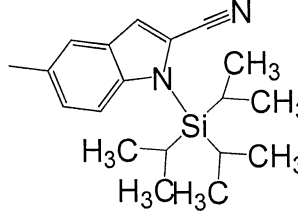
633		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,16-1,35 (2H, m), 1,35-1,45 (1H, m), 1,47 (3H, s), 1,54 (3H, s), 1,66-1,92 (3H, m), 1,92-2,14 (2H, m), 3,25 (1H, d, J = 13,5Hz), 3,45 (1H, d, J = 13,4Hz), 3,85-4,0 (1H, m), 4,2-4,35 (1H, m), 6,68 (1H, dd, J = 2,4, 12,1Hz), 6,89-7,04 (2H, m), 8,02 (1H, d, J = 2,2Hz), 8,26 (1H, br), 9,89 (1H, br).	Hydroclorua
634		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,18-1,36 (2H, m), 1,36-1,49 (4H, m), 1,49-1,57 (3H, m), 1,62-1,94 (4H, m), 1,94-2,12 (1H, m), 3,03 (1H, d, J = 13,3Hz), 3,25-3,4 (1H, m), 3,75-3,9 (1H, m), 3,95-4,15 (1H, m), 7,22 (1H, s), 7,37 (1H, dd, J = 2,5, 9,3Hz), 7,62 (1H, d, J = 9,2Hz), 7,95 (1H, s), 8,18 (1H, br), 9,6-10,1 (1H, m).	Hydroclorua
635		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,85-1,1 (2H, m), 1,2-1,35 (7H, m), 1,45-1,85 (4H, m), 1,85-2,05 (1H, m), 2,81 (1H, d, J = 12,0Hz), 2,9-4,4 (5,5H, m), 6,52 (1,5H, s), 6,60 (1H, d, J = 8,6Hz), 7,0-7,4 (3H, m), 8,00 (1H, d, J = 2,2Hz).	3/4 Fumarat
636		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,0-1,2 (2H, m), 1,35-1,44 (1H, m), 1,50 (3H, s), 1,53 (3H, s), 1,59-2,07 (5H, m), 3,05 (1H, d, J = 12,8Hz), 3,27 (1H, d, J = 13,0Hz), 3,84 (3H, s), 3,89-4,02 (2H, m), 6,66 (1H, d, J = 8,5Hz), 6,75 (1H, d, J = 8,4Hz), 6,93 (1H, J = 2,2Hz), 7,92 (1H, d, J = 2,2Hz), 8,0-8,2 (1H, m), 9,55-9,8 (1H, m).	Hydroclorua
637		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,21-1,37 (2H, m), 1,37-1,49 (4H, m), 1,52 (3H, s), 1,63-1,92 (4H, m), 1,92-2,10 (1H, m), 3,02 (1H, d, J = 13,2Hz), 3,29 (1H, d, J = 13,5Hz), 3,75-3,9 (1H, m), 3,95-4,1 (1H, m), 6,92 (1H, d, J = 2,2Hz), 7,12 (1H, d, J = 2,1Hz), 7,16 (1H, d, J = 2,1Hz), 8,01 (1H, d, J = 2,1Hz), 8,06 (1H, br), 9,72 (1H, br).	Hydroclorua

638		¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,18-1,37 (2H, m), 1,37-1,48 (4H, m), 1,55 (3H, s), 1,61-1,98 (4H, m), 1,99-2,15 (1H, m), 2,38 (3H, s), 3,00 (1H, d, J = 13,3Hz), 3,28 (1H, d, J = 13,2Hz), 3,7-3,85 (1H, m), 3,95-4,05 (1H, m), 4,34 (1H, br), 6,40 (1H, s), 6,89 (1H, dd, J = 2,1, 8,6Hz), 7,05 (1H, d, J = 1,4Hz), 7,33 (1H, d, J = 8,5Hz), 8,22 (1H, br), 10,07 (1H, br).	2 Hydroclorua
639		¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,28-1,48 (6H, m), 1,52 (3H, s), 1,64-1,93 (4H, m), 1,95-2,06 (1H, m), 2,99 (1H, d, J = 13,6Hz), 3,46 (1H, d, J = 13,4Hz), 3,5-3,95 (2H, m), 4,05-4,15 (1H, m), 6,83-6,92 (2H, m), 7,01 (1H, s), 7,83 (1H, d, J = 2,1Hz), 8,14 (1H, br), 9,82 (1H, br).	2 Hydroclorua
640		¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,18-1,49 (6H, m), 1,53 (3H, s), 1,62-1,93 (4H, m), 1,95-2,12 (1H, m), 3,00 (1H, d, J = 13,2Hz), 3,30 (1H, d, J = 13,2Hz), 3,7-3,85 (1H, m), 3,95-4,1 (1H, m), 4,95 (1H, br), 6,91 (1H, dd, J = 2,1, 3,0Hz), 6,94 (1H, d, J = 2,1Hz), 7,01 (1H, dd, J = 2,1, 14,3Hz), 7,99 (1H, d, J = 2,1Hz), 8,14 (1H, br), 9,89 (1H, br).	2 Hydroclorua
641		¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,12-1,29 (8H, m), 1,29-1,40 (2H, m), 1,45-1,76 (4H, m), 1,82-1,96 (1H, m), 2,80 (1H, d, J = 12,6Hz), 2,85-3,85 (4H, m), 3,85-3,95 (1H, m), 6,55 (2H, s), 7,08 (1H, s), 7,12 (1H, dd, J = 2,1, 9,0Hz), 7,56 (1H, d, J = 8,9Hz), 7,88 (1H, d, J = 0,6Hz).	Fumarat

Bảng 70

Cấu hình tuyệt đối

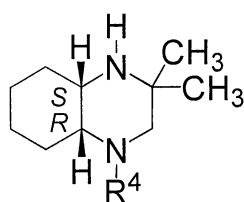


Ví dụ.	R ⁴	NMR	Muối
642		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 1,10-1,20 (20H, m), 1,22 (3H, s), 1,25-1,36 (4H, m), 1,37-1,50 (2H, m), 1,64-1,88 (7H, m), 2,82 (1H, d, J = 11,8Hz), 3,02 (1H, d, J = 11,8Hz), 3,45-3,55 (1H, m), 3,6-3,7 (1H, m), 6,82 (1H, s), 6,86 (1H, dd, J = 2,0, 8,9Hz), 7,54 (1H, d, J = 8,8Hz), 8,04 (1H, d, J = 0,9Hz).	-
643		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 1,11-1,19 (19H, m), 1,21 (3H, s), 1,23-1,32 (2H, m), 1,35 (3H, s), 1,37-1,47 (2H, m), 1,63-1,86 (6H, m), 1,90-2,04 (1H, m), 3,04 (1H, d, J = 11,9Hz), 3,09 (1H, d, J = 12,0Hz), 3,55-3,65 (1H, m), 3,8-3,9 (1H, m), 6,41 (1H, d, J = 7,5Hz), 7,05 (1H, d, J = 8,5Hz), 7,16 (1H, dd, J = 7,6, 8,3Hz), 8,26 (1H, d, J = 0,8Hz).	-
644		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 1,14-1,23 (21H, m), 1,23-1,33 (6H, m), 1,38-1,50 (2H, m), 1,63-1,88 (4H, m), 1,93-2,06 (3H, m), 2,82 (1H, d, J = 11,8Hz), 3,00 (1H, d, J = 11,8Hz), 3,44-3,50 (1H, m), 3,56-3,65 (1H, m), 6,88-6,94 (2H, m), 7,28 (1H, d, J = 0,4Hz), 7,42-7,47 (1H, m).	-
645		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 1,02-1,17 (21H, m), 1,19 (3H, s), 1,31-1,42 (5H, m), 1,59-1,77 (6H, m), 1,79-1,92 (1H, m), 2,67 (1H, d, J = 11,3Hz), 3,09 (1H, d, J = 11,3Hz), 3,45-3,6 (1H, m), 3,6-3,7 (1H, m), 6,39 (1H, dd, J = 3,4, 8,3Hz), 6,65 (1H, dd, J = 3,2, 3,2Hz), 6,72 (1H, d, J = 8,2, 12,7Hz), 7,25 (1H, d, J = 3,2Hz).	-
646		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,95 (1H, br), 1,15-1,30 (26H, m), 1,32-1,49 (2H, m), 1,63-1,82 (4H, m), 1,93-2,08 (3H, m), 2,78 (1H, d, J = 11,6Hz), 2,93 (1H, d, J = 11,6Hz), 3,45-3,55 (1H, m), 3,6-3,7 (1H, m), 6,92 (1H, d, J = 2,4Hz), 7,07 (1H, dd, J = 2,6, 9,4Hz), 7,23-7,28 (1H, m), 7,46 (1H, d, J = 9,4Hz).	-

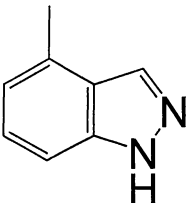
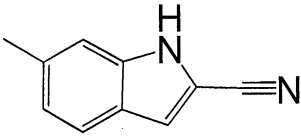
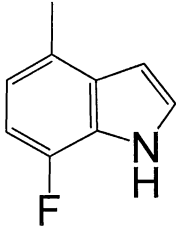
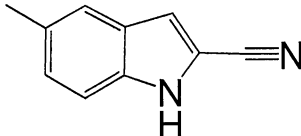
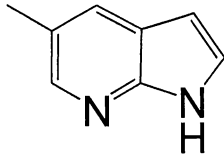
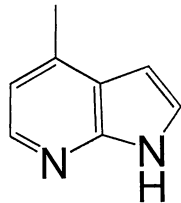
647		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 1,07-1,16 (19H, m), 1,17-1,32 (8H, m), 1,32-1,48 (2H, m), 1,61-1,89 (7H, m), 2,8-2,9 (2H, m), 3,5-3,55 (1H, m), 3,55-3,65 (1H, m), 6,40 (1H, d, $J = 3,4\text{Hz}$), 7,21 (1H, d, $J = 3,4\text{Hz}$), 7,31 (1H, d, $J = 2,7\text{Hz}$), 8,06 (1H, d, $J = 2,7\text{Hz}$).	-
648		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 1,03-1,17 (19H, m), 1,19-1,36 (8H, m), 1,36-1,49 (2H, m), 1,63-1,90 (6H, m), 1,95-2,11 (1H, m), 3,05 (1H, d, $J = 12,5\text{Hz}$), 3,38 (1H, d, $J = 12,5\text{Hz}$), 3,45-3,55 (1H, m), 3,95-4,05 (1H, m), 6,33 (1H, d, $J = 5,6\text{Hz}$), 6,54 (1H, d, $J = 3,6\text{Hz}$), 7,10 (1H, d, $J = 3,6\text{Hz}$), 7,98 (1H, d, $J = 5,6\text{Hz}$).	-
649		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 1,1-1,18 (19H, m), 1,18-1,22 (4H, m), 1,34 (3H, s), 1,36-1,44 (2H, m), 1,61-1,83 (7H, m), 1,85-1,98 (1H, m), 2,81 (1H, d, $J = 11,5\text{Hz}$), 3,07 (1H, d, $J = 11,4\text{Hz}$), 3,6-3,65 (1H, m), 3,65-3,75 (1H, m), 6,30 (1H, dd, $J = 3,0, 8,2\text{Hz}$), 6,86 (1H, dd, $J = 8,2, 12,0\text{Hz}$), 8,24 (1H, d, $J = 3,1\text{Hz}$).	-

Bảng 71

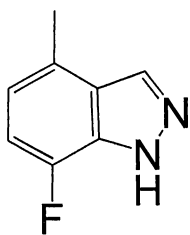
Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ.	R^4	NMR	Muối
650		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 1,03 (1H, br), 1,15-1,34 (8H, m), 1,34-1,52 (2H, m), 1,62-1,90 (4H, m), 2,81 (1H, d, $J = 11,8\text{Hz}$), 3,05 (1H, d, $J = 11,8\text{Hz}$), 3,43-3,55 (1H, m), 3,69-3,81 (1H, m), 6,71 (1H, s), 6,92 (1H, d, $J = 2,0, 9,0\text{Hz}$), 7,56 (1H, d, $J = 8,8\text{Hz}$), 7,89 (1H, d, $J = 0,9\text{Hz}$), 9,76 (1H, br).	-

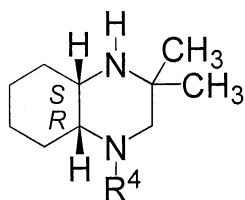
651		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,95-1,25 (6H, m), 1,33 (3H, s), 1,37-1,47 (2H, m), 1,64-1,80 (3H, m), 1,88-2,00 (1H, m), 3,02 (1H, d, J = 11,8Hz), 3,09 (1H, d, J = 11,8Hz), 3,62-3,68 (1H, m), 3,83-3,92 (1H, m), 6,4-6,45 (1H, m), 6,97 (1H, d, J = 8,3Hz), 7,23 (1H, dd, J = 7,7, 8,1Hz), 8,11 (1H, d, J = 1,0Hz), 10,05 (1H, br).	-
652		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,95 (1H, br), 1,15-1,33 (8H, m), 1,33-1,50 (2H, m), 1,64-1,88 (4H, m), 2,80 (1H, d, J = 11,8Hz), 3,03 (1H, d, J = 11,8Hz), 3,45-3,55 (1H, m), 3,65-3,75 (1H, m), 6,66 (1H, s), 6,95 (1H, dd, J = 2,1, 9,0Hz), 7,06 (1H, dd, J = 0,8, 2,0Hz), 7,46 (1H, d, J = 9,0Hz), 8,22 (1H, bs).	-
653		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,93-1,13 (3H, m), 1,20 (3H, s), 1,27-1,45 (5H, m), 1,58-1,79 (3H, m), 1,79-1,94 (1H, m), 2,70 (1H, d, J = 11,3Hz), 3,08 (1H, d, J = 11,3Hz), 3,6-3,7 (2H, m), 6,35 (1H, dd, J = 3,8, 8,3Hz), 6,61 (1H, dd, J = 3,3, 5,5Hz), 6,76 (1H, dd, J = 8,3, 10,7Hz), 7,18 (1H, dd, J = 2,8, 2,8Hz), 8,33 (1H, br).	-
654		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,80-1,25 (6H, m), 1,28 (3H, s), 1,31-1,48 (2H, m), 1,63-1,82 (4H, m), 2,81 (1H, d, J = 11,6Hz), 2,89 (1H, d, J = 11,6Hz), 3,5-3,6 (1H, m), 3,6-3,7 (1H, m), 6,95 (1H, d, J = 2,1Hz), 7,03 (1H, dd, J = 0,7, 2,0Hz), 7,17 (1H, dd, J = 2,3, 9,1Hz), 7,28 (1H, d, J = 9,0Hz), 8,64 (1H, br).	-
655		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,0-1,25 (2H, m), 1,25-1,35 (7H, m), 1,45-1,9 (5H, m), 2,55-4,35 (6H, m), 6,27 (1H, dd, J = 1,9, 3,3Hz), 6,49 (1H, s), 7,33 (1H, dd, J = 2,9, 2,9Hz), 7,40 (1H, d, J = 2,5Hz), 8,04 (1H, d, J = 2,6Hz), 11,30 (1H, s).	1/2 Fumarat
656		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 1,00 (1H, br), 1,18-1,36 (7H, m), 1,36-1,52 (3H, m), 1,64-1,83 (3H, m), 1,98-2,13 (1H, m), 3,09 (1H, d, J = 12,6Hz), 3,43 (1H, d, J = 12,5Hz), 3,52 (1H, br), 4,0-4,1 (1H, m), 6,36 (1H, d, J = 5,7Hz), 6,51 (1H, d, J = 3,6Hz), 7,13 (1H, d, J = 3,6Hz), 8,03 (1H, d = 5,7Hz), 9,99 (1H, br).	-

657



$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 1,03-1,17 (2H, m), 1,22 (3H, s), 1,33 (3H, s), 1,36-1,45 (2H, m), 1,62-1,79 (3H, m), 1,83-1,96 (1H, m), 2,83 (1H, d, $J = 11,5\text{Hz}$), 3,05 (1H, d, $J = 11,5\text{Hz}$), 3,65-3,7 (1H, m), 3,7-3,8 (1H, m), 6,28 (1H, dd, $J = 3,3, 8,3\text{Hz}$), 6,91 (1H, dd, $J = 8,3, 10,3\text{Hz}$), 8,12 (1H, d, $J = 3,3\text{Hz}$), 10,26 (1H, br).

Bảng 72
Cấu hình tuyệt đối



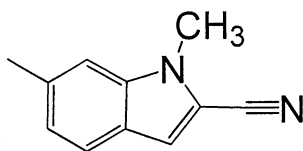
Ví dụ.

 R^4

NMR

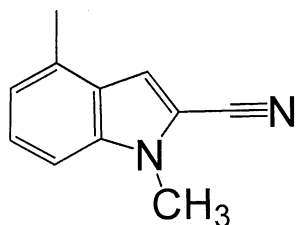
Muối

658



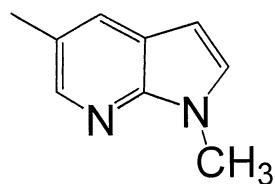
$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 0,75-1,65 (11H, m), 1,65-1,9 (4H, m), 2,82 (1H, d, $J = 11,7\text{Hz}$), 3,03 (1H, d, $J = 11,7\text{Hz}$), 3,46-3,54 (1H, m), 3,71-3,79 (1H, m), 3,80 (3H, s), 6,51 (1H, d, $J = 1,6\text{Hz}$), 6,96 (1H, dd, $J = 2,1, 9,0\text{Hz}$), 7,02 (1H, s), 7,46 (1H, d, $J = 9,0\text{Hz}$).

659



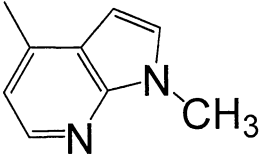
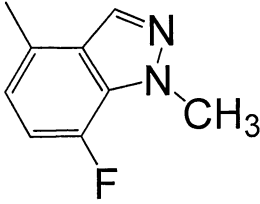
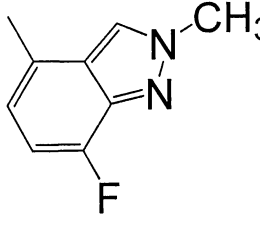
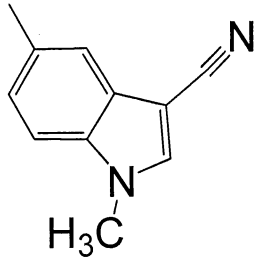
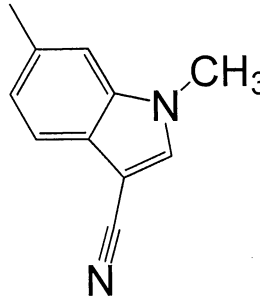
$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 0,85-1,15 (3H, m), 1,20 (3H, s), 1,32 (3H, s), 1,35-1,45 (1H, m), 1,6-1,8 (4H, m), 1,85-2,0 (1H, m), 2,80 (1H, d, $J = 11,5\text{Hz}$), 3,10 (1H, d, $J = 11,6\text{Hz}$), 3,6-3,7 (1H, m), 3,7-3,8 (1H, m), 3,85 (3H, s), 6,52 (1H, d, $J = 7,6\text{Hz}$), 6,89 (1H, d, $J = 8,4\text{Hz}$), 7,20 (1H, s), 7,25-7,3 (1H, m).

660



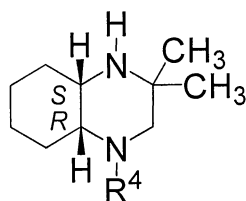
$^1\text{H-NMR}$ (DMSO-d_6) δ ppm: 1,0-1,25 (2H, m), 1,25-1,4 (7H, m), 1,45-1,9 (5H, m), 2,93 (2H, s), 3,38 (3H, br), 3,63 (1H, br), 3,70-3,83 (4H, m), 6,28 (1H, d, $J = 3,4\text{Hz}$), 6,53 (2H, s), 7,39 (1H, d, $J = 3,3\text{Hz}$), 7,43 (1H, d, $J = 2,6\text{Hz}$), 8,10 (1H, d, $J = 2,6\text{Hz}$).

Fumarat

661		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,15-1,4 (9H, m), 1,5-1,8 (4H, m), 1,95-2,15 (1H, m), 3,09 (1H, d, J = 12,9Hz), 3,43 (1H, d, J = 12,8Hz), 3,55-3,65 (1H, m), 3,73 (3H, s), 4,05-4,15 (1H, m), 6,41 (1H, d, J = 5,6Hz), 6,49 (1H, d, J = 3,6Hz), 6,55 (2H, s), 7,26 (1H, d, J = 3,6Hz), 7,93 (1H, d, J = 5,6Hz).	Fumarat
662		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,95-1,15 (2H, m), 1,30-1,42 (1H, m), 1,51 (3H, s), 1,54 (3H, s), 1,57-1,66 (1H, m), 1,69-1,98 (3H, m), 1,98-2,09 (1H, m), 2,99 (1H, d, J = 12,9Hz), 3,26 (1H, d, J = 12,8Hz), 3,9-4,0 (1H, m), 4,05-4,2 (4H, s), 6,39 (1H, dd, J = 3,0, 8,3Hz), 7,05 (1H, dd, J = 8,2, 11,8Hz), 8,14 (1H, br), 8,38 (1H, d, J = 2,3Hz), 9,95 (1H, br).	Hydroclorua
663		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,00-1,16 (2H, m), 1,34-1,44 (1H, m), 1,50 (3H, s), 1,52 (3H, s), 1,58-1,95 (4H, m), 1,98-2,09 (1H, m), 2,98 (1H, d, J = 13,0Hz), 3,24 (1H, d, J = 13,0Hz), 3,85-3,95 (1H, m), 3,95-4,1 (1H, m), 4,17 (3H, s), 6,24 (1H, dd, J = 3,2, 8,0Hz), 6,85 (1H, dd, J = 8,0, 11,5Hz), 7,95-8,2 (1H, m), 8,74 (1H, d, J = 2,7Hz), 9,75-9,95 (1H, m).	Hydroclorua
664		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,05-1,3 (2H, m), 1,3-1,45 (7H, m), 1,5-1,7 (2H, m), 1,7-1,9 (3H, m), 2,97 (1H, d, J = 12,4Hz), 3,17 (1H, d, J = 12,7Hz), 3,72 (1H, br), 3,81 (3H, s), 3,9-4,0 (1H, m), 6,58 (6H, s), 6,98 (1H, d, J = 2,0Hz), 7,14 (1H, dd, J = 2,2, 9,1Hz), 7,49 (1H, d, J = 9,0Hz), 8,10 (1H, s).	3 Fumarat
665		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,05-1,15 (1H, m), 1,15-1,35 (9H, m), 1,45-1,75 (3H, m), 1,75-1,9 (1H, m), 2,80 (1H, d, J = 11,9Hz), 3,0-3,6 (4H, m), 3,77 (3H, s), 3,8-3,9 (1H, m), 6,51 (1H, s), 6,90 (1H, d, J = 1,8Hz), 7,03 (1H, dd, J = 2,0, 8,9Hz), 7,43 (1H, d, J = 8,8Hz), 7,99 (1H, s).	1/2 Fumarat

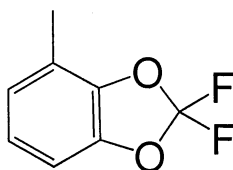
Bảng 73

Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ.	R ⁴	NMR	Muối
666		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,00-1,25 (2H, m), 1,31-1,42 (1H, m), 1,46 (3H, s), 1,49 (3H, s), 1,58-1,69 (1H, m), 1,69-1,84 (2H, m), 1,84-2,05 (3H, m), 2,05-2,2 (1H, m), 2,70-2,92 (5H, m), 3,24 (1H, d, J = 13,0Hz), 3,45-3,57 (1H, m), 3,80-3,93 (1H, m), 6,53 (1H, dd, J = 2,0, 11,6Hz), 6,66-6,76 (1H, m), 7,9-8,2 (1H, m), 9,7-10,0 (1H, m).	Hydroclorua
667		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,00-1,21 (2H, m), 1,29-1,41 (1H, m), 1,48 (6H, s), 1,55-1,67 (1H, m), 1,67-2,06 (5H, m), 2,07-2,21 (1H, m), 2,70 (1H, d, J = 12,7Hz), 2,78-3,00 (4H, m), 3,21-3,39 (2H, m), 3,78-3,89 (1H, m), 6,74 (1H, dd, J = 4,4, 8,6Hz), 6,88 (1H, dd, J = 8,6, 8,6Hz), 8,01 (1H, br), 9,74 (1H, br).	Hydroclorua
668		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,10-1,24 (1H, m), 1,34-1,42 (1H, m), 1,45 (3H, s), 1,48 (3H, s), 1,58-2,03 (6H, m), 2,03-2,19 (1H, m), 2,72-2,95 (5H, m), 3,27 (1H, d, J = 12,9Hz), 3,38-3,55 (1H, m), 3,79-3,95 (1H, m), 4,28-4,11 (1H, m), 6,72 (1H, d, J = 1,5Hz), 6,94 (1H, s), 7,9-8,1 (1H, m), 9,6-9,8 (1H, m).	Hydroclorua
669		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,20-1,48 (6H, m), 1,51 (3H, s), 1,63-1,93 (4H, m), 1,93-2,10 (1H, m), 2,96 (1H, d, J = 13,4Hz), 3,29 (1H, d, J = 14,0Hz), 3,7-3,85 (1H, m), 3,9-4,05 (1H, m), 6,70 (1H, dd, J = 2,5, 8,9Hz), 7,12 (1H, d, J = 2,4Hz), 7,23 (1H, d, J = 8,9Hz), 8,15 (1H, br), 9,86 (1H, br).	Hydroclorua

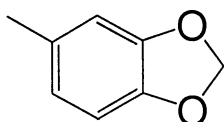
670



$^1\text{H-NMR}$ (DMSO- d_6) δ ppm: 1,1-1,25 (9H, m), 1,25-1,4 (1H, m), 1,45-1,75 (4H, m), 1,9-2,05 (1H, m), 2,92 (1H, d, $J = 12,2\text{Hz}$), 3,06 (1H, d, $J = 12,3\text{Hz}$), 3,1-3,63 (3H, m), 3,63-3,70 (1H, m), 6,57 (2H, s), 6,71 (1H, d, $J = 8,6\text{Hz}$), 6,75-6,81 (1H, m), 7,04 (1H, dd, $J = 8,3, 8,3\text{Hz}$).

Fumarat

671

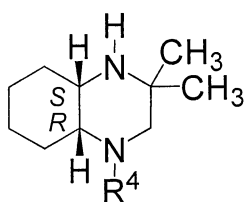


$^1\text{H-NMR}$ (DMSO- d_6) δ ppm: 1,15-1,31 (2H, m), 1,35-1,46 (4H, m), 1,50 (3H, s), 1,61-1,87 (4H, m), 1,93-2,07 (1H, m), 2,92 (1H, d, $J = 13,2\text{Hz}$), 3,11 (1H, d, $J = 13,2\text{Hz}$), 3,7-3,8 (1H, m), 3,8-3,9 (1H, m), 5,88-5,95 (2H, m), 6,32 (1H, d, $J = 2,4, 8,5\text{Hz}$), 6,71 (1H, d, $J = 2,4\text{Hz}$), 6,76 (1H, d, $J = 8,5\text{Hz}$), 7,9-8,15 (1H, m), 9,7-9,9 (1H, m).

Hydroclorua

Bảng 74

Cấu hình tuyệt đối



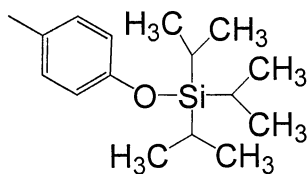
Ví dụ.

 R^4

NMR

Muối

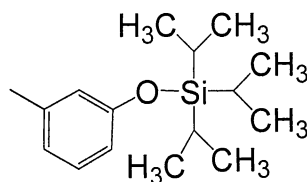
672



$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 1,02-1,15 (19H, m), 1,15-1,28 (11H, m), 1,29-1,46 (2H, m), 1,60-1,76 (4H, m), 2,67 (1H, d, $J = 11,6\text{Hz}$), 2,83 (1H, d, $J = 11,6\text{Hz}$), 3,4-3,55 (2H, m), 6,69-6,74 (2H, m), 6,74-6,79 (2H, m).

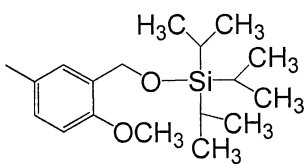
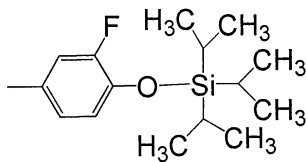
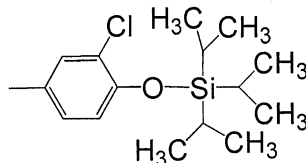
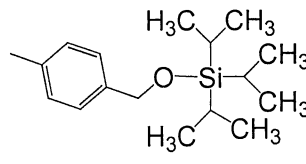
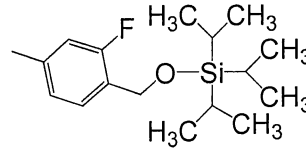
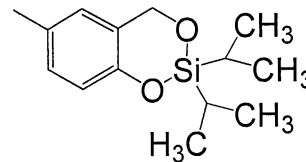
-

673



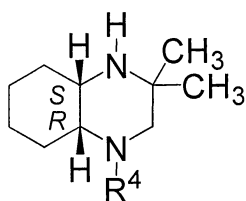
$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 1,11 (18H, d, $J = 7,0\text{Hz}$), 1,16-1,33 (11H, m), 1,33-1,59 (3H, m), 1,65-1,78 (4H, m), 2,68 (1H, d, $J = 11,8\text{Hz}$), 2,97 (1H, d, $J = 11,9\text{Hz}$), 3,4-3,45 (1H, m), 3,55-3,6 (1H, m), 6,28 (1H, dd, $J = 1,9, 7,6\text{Hz}$), 6,37 (1H, dd, $J = 2,3, 2,3\text{Hz}$), 6,43 (1H, dd, $J = 2,4, 7,8\text{Hz}$), 7,03 (1H, dd, $J = 8,1, 8,1\text{Hz}$).

-

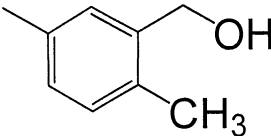
674		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 1,04-1,15 (19H, m), 1,15-1,30 (11H, m), 1,32-1,47 (2H, m), 1,47-1,77 (4H, m), 2,70 (1H, d, $J = 11,7\text{Hz}$), 2,92 (1H, d, $J = 11,7\text{Hz}$), 3,41-3,48 (1H, m), 3,54-3,63 (1H, m), 3,75 (3H, s), 4,78-4,88 (2H, m), 6,65 (1H, dd, $J = 3,0, 8,7\text{Hz}$), 6,71 (1H, d, $J = 8,8\text{Hz}$), 7,22 (1H, d, $J = 2,9\text{Hz}$).	-
675		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 1,06-1,14 (18H, m), 1,15-1,29 (12H, m), 1,29-1,48 (2H, m), 1,58-1,76 (4H, m), 2,65 (1H, d, $J = 11,8\text{Hz}$), 2,83 (1H, d, $J = 11,6\text{Hz}$), 3,35-3,45 (1H, m), 3,45-3,55 (1H, m), 6,40-6,48 (1H, m), 6,55 (1H, dd, $J = 2,9, 14,1\text{Hz}$), 6,79 (1H, dd, $J = 9,4, 9,4\text{Hz}$).	-
676		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 1,11 (18H, d, $J = 7,3\text{Hz}$), 1,16-1,21 (4H, m), 1,21-1,33 (7H, m), 1,34-1,47 (2H, m), 1,47-1,78 (5H, m), 2,66 (1H, d, $J = 11,6\text{Hz}$), 2,81 (1H, d, $J = 11,6\text{Hz}$), 3,4-3,55 (2H, m), 6,61 (1H, d, $J = 3,0, 8,9\text{Hz}$), 6,78 (1H, d, $J = 8,9\text{Hz}$), 6,81 (1H, d, $J = 3,0\text{Hz}$).	-
677		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 1,06-1,11 (18H, m), 1,11-1,22 (7H, m), 1,23 (3H, s), 1,25-1,80 (8H, m), 2,71 (1H, d, $J = 11,8\text{Hz}$), 3,01 (1H, d, $J = 11,9\text{Hz}$), 3,4-3,5 (1H, m), 3,6-3,7 (1H, m), 4,73 (2H, s), 6,79-6,85 (2H, m), 7,18-7,23 (2H, m).	-
678		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 1,05-1,12 (18H, m), 1,12-1,48 (13H, m), 1,48-1,82 (5H, m), 2,70 (1H, d, $J = 11,9\text{Hz}$), 2,99 (1H, d, $J = 12,0\text{Hz}$), 3,35-3,45 (1H, m), 3,55-3,65 (1H, m), 4,77 (2H, s), 6,47 (1H, dd, $J = 2,4, 13,9\text{Hz}$), 6,61 (1H, dd, $J = 2,4, 8,6\text{Hz}$), 7,32 (1H, dd, $J = 8,8, 8,8\text{Hz}$).	-
679		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 1,03 (18H, d, $J = 2,4\text{Hz}$), 1,13-1,27 (9H, m), 1,27-1,77 (6H, m), 2,67 (1H, d, $J = 11,5\text{Hz}$), 2,80 (1H, d, $J = 11,5\text{Hz}$), 3,4-3,55 (2H, m), 4,96 (2H, s), 6,42 (1H, d, $J = 2,8\text{Hz}$), 6,70 (1H, dd, $J = 2,9, 8,8\text{Hz}$), 6,80 (1H, d, $J = 8,8\text{Hz}$).	-

Bảng 75

Cấu hình tuyệt đối

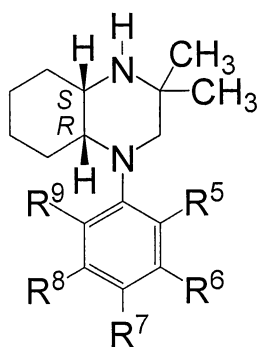


Ví dụ.	R ⁴	NMR	Muối
680		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 1,02-1,30 (9H, m), 1,30-1,49 (2H, m), 1,50-1,83 (4H, m), 2,70 (1H, d, J = 10,4Hz), 2,81 (1H, d, J = 11,4Hz), 3,4-3,6 (2H, m), 6,75 (4H, bs).	-
681		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 1,16-1,30 (8H, m), 1,30-1,49 (3H, m), 1,60-1,83 (4H, m), 2,71 (1H, d, J = 12,0Hz), 3,03 (1H, d, J = 12,0Hz), 3,38-3,45 (1H, m), 3,56-3,68 (1H, m), 6,17-6,23 (1H, m), 6,33 (1H, dd, J = 2,3, 2,3Hz), 6,43 (1H, dd, J = 2,2, 8,3Hz), 7,06 (1H, dd, J = 8,1, 8,1Hz).	-
682		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,1-1,25 (2H, m), 1,3-1,4 (7H, m), 1,5-1,9 (5H, m), 2,87 (1H, d, J = 12,4Hz), 2,97 (1H, d, J = 12,6Hz), 3,63-3,78 (5H, m), 4,44 (2H, s), 6,54 (3H, s), 6,73 (1H, dd, J = 2,9, 8,8Hz), 6,80 (1H, d, J = 8,8Hz), 6,99 (1H, d, J = 2,8Hz).	3/2 Fumarat
683		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 1,09-2,34 (16H, m), 2,81 (1H, d, J = 12,1Hz), 2,85-3,1 (1H, m), 3,5-3,6 (1H, m), 3,6-3,75 (1H, m), 6,73 (1H, dd, J = 2,8, 8,9Hz), 6,81 (1H, d, J = 2,8Hz), 6,92 (1H, d, J = 8,8Hz).	-
684		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 1,15-1,60 (12H, m), 1,61-1,83 (4H, m), 2,72 (1H, d, J = 12,0Hz), 3,03 (1H, d, J = 11,9Hz), 3,4-3,45 (1H, m), 3,6-3,7 (1H, m), 4,56 (2H, s), 6,80-6,86 (2H, m), 7,20-7,25 (2H, m).	-
685		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,92 (1H, br), 1,16-1,36 (8H, m), 1,37-1,48 (2H, m), 1,57 (1H, br), 1,62-1,84 (4H, m), 2,71 (1H, d, J = 12,0Hz), 3,02 (1H, d, J = 12,0H), 3,35-3,45	-

		(1H, m), 3,55-3,65 (1H, m), 4,62 (2H, s), 6,51 (1H, dd, J = 2,5, 14,0Hz), 6,59 (1H, dd, J = 2,5, 8,5Hz), 7,19 (1H, dd, J = 8,8, 8,8Hz).
686		1H-NMR (CDCl3) δppm: 0,92-1,02 (1H, m), 1,02-1,18 (7H, m), 1,19-1,32 (1H, m), 1,35-1,66 (5H, m), 1,69-1,83 (1H, m), 2,60 (1H, d, J = 11,3Hz), 2,69 (1H, d, J = 11,3Hz), 3,32 (1H, br), 3,41-3,50 (1H, m), 4,43 (2H, d, J = 4,6Hz), 4,88 (1H, t, J = 5,4Hz), 6,55 (1H, dd, J = 2,9, 8,7Hz), 6,60 (1H, d, J = 8,6Hz), 6,83 (1H, d, J = 2,7Hz), 8,55 (1H, s).

Bảng 76

Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ	R ⁵	R ⁶	R ⁷	R ⁸	R ⁹	NMR	Muối
687	-H	-H	-OCH ₃	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,1-1,3 (2H, m), 1,35-1,45 (4H, m), 1,52 (3H, s), 1,6-1,9 (4H, m), 1,95-2,1 (1H, m), 2,93 (1H, d, J = 13,1Hz), 3,10 (1H, d, J = 13,0Hz), 3,68 (3H, s), 3,7-3,9 (2H, m), 4,35-5,75 (1H, m), 6,75-6,85 (2H, m), 6,85-6,95 (2H, m), 8,11 (1H, br), 9,92 (1H, br).	Hydroclorua
688	-CH ₃	-Cl	-H	-H	-H	1H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,93-1,1 (2H, m), 1,17 (3H, s), 1,31 (3H, s), 1,35-1,43 (2H, m), 1,55-1,75 (3H, m), 1,78-1,93 (1H, m), 2,37 (3H, s), 2,42 (1H, d, J = 11,0Hz), 2,83-2,91 (1H, m), 3,10 (1H, d, J = 11,0Hz), 3,5-3,6 (1H, m), 6,79 (1H, dd, J = 2,1, 7,1Hz),	-

6,99-7,09 (2H, m).					
689	-CH ₃	-H	-H	-H	-H
1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,0-1,17 (2H, m), 1,3-1,43 (1H, m), 1,49 (3H, s), 1,52 (3H, s), 1,56-1,68 (1H, m), 1,68-1,87 (2H, m), 1,87-2,1 (2H, m), 2,30 (3H, s), 2,62 (1H, d, J = 12,6Hz), 3,11-3,23 (1H, m), 3,25-3,45 (1H, m), 3,78-3,92 (1H, m), 6,92-7,04 (2H, m), 7,08-7,22 (2H, m), 8,03 (1H, br), 9,65-9,95 (1H, m)." Hydrochlorua					
690	-H	-H	-CH ₃	-H	-H
1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,18-1,35 (2H, m), 1,35-1,48 (4H, m), 1,52 (3H, s), 1,62-1,9 (4H, m), 1,98-2,04 (1H, m), 2,19 (3H, s), 2,91 (1H, d, J = 13,3Hz), 3,25 (1H, d, J = 13,3Hz), 3,7-3,8 (1H, m), 3,9-4,0 (1H, m), 4,1-4,45 (1H, m), 6,8-6,87 (2H, m), 6,98-7,07 (2H, m), 8,05-8,25 (1H, m), 9,8-10,05 (1H, m)." 2 Hydrochlorua					
691	-CH ₃	-CH ₃	-H	-H	-H
1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,98-1,15 (2H, m), 1,3-1,42 (1H, m), 1,49 (3H, s), 1,52 (3H, s), 1,55-1,67 (1H, m), 1,67-1,83 (2H, m), 1,83-2,008 (2H, m), 2,20 (3H, s), 2,22 (3H, s), 2,59 (1H, d, J = 12,6Hz), 3,05-3,15 (1H, m), 3,25-3,4 (1H, m), 3,82-3,96 (1H, m), 6,82 (1H, d, J = 7,8Hz), 6,91 (1H, d, J = 7,4Hz), 7,03 (1H, dd, J = 7,7, 7,7Hz), 7,98 (1H, br), 9,65-9,8 (1H, m). Hydrochlorua					
692	-H	-CH ₃	-Cl	-H	-H
1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,22-1,47 (6H, m), 1,53 (3H, s), 1,63-1,93 (4H, m), 1,97-2,08 (1H, m), 2,27 (3H, s), 2,93 (1H, d, J = 13,6Hz), 3,36 (1H, d, J = 13,5Hz), 3,7-3,8 (1H, m), 3,8-4,1 (2H, m), 6,79 (1H, dd, J = 3,0, 8,9Hz), 6,93 (1H, d, J = 2,9Hz), 7,20 (1H, d, J = 8,8Hz), 8,1-8,3 (1H, m), 9,85-10,05 (1H, m). 2 Hydrochlorua					
693	-H	-CH ₃	-F	-H	-H
1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,16-1,33 (2H, m), 1,36-1,45 (4H, m), 1,52 (3H, s), 1,62-1,9 (4H, m), 1,98-2,04 (1H, m), 2,19 (3H, s), 2,91 (1H, d, J = 13,3Hz), 3,25 (1H, d, J = 13,3Hz), 3,7-3,8 (1H, m), 3,9-4,0 (1H, m), 4,1-4,45 (1H, m), 6,8-6,87 (2H, m), 6,98-7,07 (2H, m), 8,05-8,25 (1H, m), 9,8-10,05 (1H, m)." 2 Hydrochlorua					

						m), 2,0-2,08 (1H, m), 2,18 (3H, d, J = 1,7Hz), 2,93 (1H, d, J = 13,3Hz), 3,21 (1H, d, J = 13,2Hz), 3,7-3,8 (1H, m), 3,9-4,0 (1H, m), 4,15-4,55 (1H, m), 6,72-6,8 (1H, m), 6,81-6,89 (1H, m), 6,97 (1H, dd, J = 9,1, 9,1Hz), 8,05-8,25 (1H, m), 9,85-10,1 (1H, m).
694	-CH ₃	-F	-H	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,0-1,2 (2H, m), 1,3-1,45 (1H, m), 1,49 (3H, s), 1,51 (3H, s), 1,56-1,84 (3H, m), 1,84-2,06 (2H, m), 2,20 (3H, d, J = 2,2Hz), 2,67 (1H, d, J = 12,7Hz), 3,15-3,25 (1H, m), 3,29-3,42 (1H, m), 3,85-4,0 (1H, m), 6,83 (1H, d, J = 8,0Hz), 6,89 (1H, dd, J = 8,8, 8,8Hz), 7,16 (1H, dd, J = 7,9, 15,3Hz), 8,02 (1H, br), 9,72 (1H, br). Hydrochlorua
695	-H	-Cl	-H	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,25-1,46 (6H, m), 1,52 (3H, s), 1,63-1,95 (4H, m), 1,95-2,1 (1H, m), 2,95 (1H, d, J = 13,7Hz), 3,47 (1H, d, J = 13,6Hz), 3,7-3,8 (1H, m), 4,0-4,1 (1H, m), 6,77 (1H, dd, J = 1,4, 7,8Hz), 6,90 (1H, d, J = 2,2, 8,4Hz), 6,96-7,01 (1H, m), 7,21 (1H, dd, J = 8,1, 8,1Hz), 8,17 (1H, br), 9,85 (1H, br). Hydrochlorua
696	-CH ₃	-OCH ₃	-H	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,0-1,2 (2H, m), 1,3-1,4 (1H, m), 1,48 (3H, s), 1,51 (3H, s), 1,55-1,65 (1H, m), 1,65-1,85 (2H, m), 1,85-2,05 (2H, m), 2,13 (3H, s), 2,62 (1H, d, J = 12,6Hz), 3,1-3,2 (1H, m), 3,3-3,4 (1H, m), 3,76 (3H, s), 3,8-3,9 (1H, m), 6,61 (1H, d, J = 7,9Hz), 6,72 (1H, d, J = 8,1Hz), 7,10 (1H, dd, J = 8,1, 8,1Hz), 8,01 (1H, br), 9,71 (1H, br). Hydrochlorua
697	-H	-Cl	-CH ₃	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,24-1,47 (6H, m), 1,51 (3H, s), 1,63-1,91 (4H, m), 1,91-2,08 (1H, m), 2,20 (3H, s), 2,91 (1H, d, J = 13,5Hz), 3,23-3,42 (1H, m), 3,66-3,80 (1H, m), 3,94-4,08 (1H, m), 6,84 (1H, dd, J = 2,6, 8,5Hz), Hydrochlorua

						6,97 (1H, d, J = 2,6Hz), 7,16 (1H, d, J = 8,6Hz), 8,12 (1H, br), 9,82 (1H, br).
698	-H	-F	-CH3	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 1,25-1,45 (6H, m), 1,51 (3H, s), 1,65-1,9 (4H, m), 2,0-2,05 (1H, m), 2,10 (3H, s), 2,91 (1H, d, J = 13,6Hz), 3,3-3,45 (1H, m), 3,7-3,8 (1H, m), 3,95-4,05 (1H, m), 6,67 (1H, dd, J = 2,5, 8,5Hz), 6,74 (1H, dd, J = 2,4, 13,5Hz), 7,08 (1H, dd, J = 8,9, 8,9Hz), 8,0-8,3 (1H, m), 9,75-10,0 (1H, m). Hydrochlorua
699	-H	-H	-OCHF2	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 1,21-1,35 (2H, m), 1,35-1,48 (4H, m), 1,53 (3H, s), 1,63-1,95 (4H, m), 1,98-2,12 (1H, m), 2,94 (1H, d, J = 13,4Hz), 3,32 (1H, d, J = 13,3Hz), 3,7-3,8 (1H, m), 3,9-4,05 (1H, m), 6,85-7,26 (5H, m), 8,20 (1H, br), 9,99 (1H, br). Hydrochlorua
700	-H	-H	-OCF3	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 1,25-1,49 (6H, m), 1,49-1,57 (3H, m), 1,65-1,95 (4H, m), 1,95-2,09 (1H, m), 2,96 (1H, d, J = 13,6Hz), 3,39-3,48 (1H, m), 3,71-3,83 (1H, m), 3,98-4,09 (1H, m), 6,98-7,05 (2H, m), 7,16-7,24 (2H, m), 8,16 (1H, br), 9,65-10,1 (1H, m). Hydrochlorua
701	-H	-Cl	-CN	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 1,10 (3H, s), 1,15-1,25 (4H, m), 1,25-1,45 (2H, m), 1,45-1,7 (4H, m), 1,85-2,0 (1H, m), 2,76 (1H, d, J = 12,8Hz), 2,85-3,85 (4H, m), 3,85-3,95 (1H, m), 6,56 (1H, s), 6,94 (1H, dd, J = 2,5, 9,1Hz), 7,09 (1H, d, J = 2,4Hz), 7,59 (1H, d, J = 9,0Hz). 1/2 Fumarat
702	-H	-F	-OCF3	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 1,25-1,5 (6H, m), 1,52 (3H, s), 1,65-2,1 (5H, m), 2,97 (1H, d, J = 13,8Hz), 3,54 (1H, d, J = 13,6Hz), 3,65-3,8 (1H, m), 4,0-4,15 (1H, m), 6,81 (1H, dd, J = 2,2, 9,3Hz), 7,05 (1H, dd, J = 2,9, 14,4Hz), 7,34 (1H, dd, J = 9,0, 9,0Hz), 8,24 (1H, br), 9,92 (1H, m). Hydrochlorua

br).					
703	-H	-F	-OCHF ₂	-H	-H
1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,10-1,37 (9H, m), 1,44-1,75 (4H, m), 1,75-1,90 (1H, m), 2,68 (1H, d, J = 12,4Hz), 3,15 (1H, d, J = 12,4Hz), 3,25-3,45 (1H, m), 3,7-3,8 (1H, m), 6,51 (1H, m), 6,67 (1H, d, J = 2,1, 9,1Hz), 6,81-7,24 (3H, m)					
704	-H	-Cl	-OCHF ₂	-H	-H
1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,07-1,36 (9H, m), 1,43-1,58 (1H, m), 1,58-1,72 (3H, m), 1,73-1,89 (1H, m), 2,67 (1H, d, J = 12,2Hz), 3,0-3,7 (4H, m), 3,7-3,8 (1H, m), 6,52 (1H, s), 6,82-7,24 (4H, m).					
705	-H	-CHF ₂	-H	-H	-H
1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,15-1,41 (9H, m), 1,48-1,92 (5H, m), 2,75 (1H, d, J = 12,7Hz), 2,8-4,4 (6H, m), 6,46 (1H, d, J = 7,8Hz), 6,54 (2H, s), 6,62 (1H, s), 6,76 (1H, dd, J = 2,1, 8,5Hz), 7,0-7,4 (2H, m).					
706	-H	-OCHF ₂	-F	-H	-H
1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,97-1,36 (9H, m), 1,43-1,73 (4H, m), 1,73-1,87 (1H, m), 2,67 (1H, d, J = 12,1Hz), 2,95-3,8 (5H, m), 6,52 (1H, s), 6,7-6,8 (2H, m), 7,0-7,4 (2H, m).					
707	-H	-OCHF ₂	-Cl	-H	-H
1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,11-1,37 (9H, m), 1,45-1,74 (4H, m), 1,77-1,91 (1H, m), 2,69 (1H, d, J = 12,3Hz), 2,75-4,2 (5H, m), 6,52 (1H, s), 6,73-6,83 (2H, m), 7,03-7,43 (2H, m).					
708	-H	-CN	-OCHF ₂	-H	-H
1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,06-1,21 (7H, m), 1,21-1,36 (2H, m), 1,41-1,70 (4H, m), 1,74-1,89 (1H, m), 2,68 (1H, d, J = 12,3Hz), 2,9-3,75 (4H, m), 3,75-3,85 (1H, m), 6,54 (1H, s), 6,99-7,14 (4H, m).					
709	-H	-OCHF ₂	-OCHF ₂	-H	-H
1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,1-1,4 (9H, m), 1,45-1,75 (4H, m), 1,75-1,9 (1H, m), 2,69 (1H, d, J =					

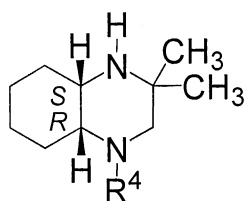
		2				12,2Hz), 2,8-4,3 (5H, m), 6,52 (1H, s), 6,71-7,38 (5H, m).
710	-H	-F	-OCHF2	-F	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δ ppm: 1,08-1,22 (7H, m), 1,25-1,40 (2H, m), 1,42-1,72 (4H, m), 1,76-1,92 (1H, m), 2,66 (1H, d, J = 12,5Hz), 2,8-4,35 (5H, m), 6,53 (1H, s), 6,66-6,76 (2H, m), 7,05 (1H, t, J = 72,9Hz). 1/2 Fumarat
711	-H	-H	- OCH2CH F2	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δ ppm: 1,15-1,31 (2H, m), 1,32-1,49 (4H, m), 1,52 (3H, s), 1,62-1,89 (4H, m), 1,98-2,08 (1H, m), 2,93 (1H, d, J = 13,1Hz), 3,16 (1H, d, J = 13,2Hz), 3,7-3,8 (1H, m), 3,80-4,27 (4H, m), 6,18-6,50 (1H, m), 6,90 (4H, s), 8,0-8,25 (1H, m), 9,8-10,1 (1H, m). 2 Hydrochlorua
712	-H	-F	- OCH2CF2	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δ ppm: 1,20-1,46 (6H, m), 1,51 (3H, s), 1,63-1,89 (4H, m), 1,92-2,08 (1H, m), 2,91 (1H, d, J = 13,4Hz), 3,29 (1H, d, J = 12,8Hz), 3,67-3,79 (1H, m), 3,88-4,01 (1H, m), 4,20-4,33 (2H, m), 6,18-6,52 (1H, m), 6,68 (1H, dd, J = 1,8, 9,1Hz), 6,91 (1H, dd, J = 2,9, 14,7Hz), 7,10 (1H, dd, J = 9,5, 9,5Hz), 8,0-8,2 (1H, m), 9,75-9,95 (1H, m). Hydrochlorua
713	-H	-CH3	-OCHCF2	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δ ppm: 1,06-1,16 (1H, m), 1,16-1,37 (8H, m), 1,45-1,88 (5H, m), 2,17 (3H, s), 2,69 (1H, d, J = 12,0Hz), 3,04 (1H, d, J = 12,0Hz), 3,1-3,9 (4H, m), 6,50 (1H, s), 6,71 (1H, dd, J = 3,0, 8,9Hz), 6,75-7,16 (3H, m). 1/2 Fumarat
714	-H	-OCH3	-OCHCF2	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δ ppm: 1,08-1,18 (1H, m), 1,18-1,27 (7H, m), 1,27-1,38 (1H, m), 1,44-1,60 (1H, m), 1,60-1,74 (3H, m), 1,74-1,88 (1H, m), 2,71 (1H, d, J = 12,1Hz), 3,08 (1H, d, J = 12,2Hz), 3,15-3,85 (7H, m), 6,40 (1H, dd, J = 2,7, 8,9Hz), 6,50 (1H, s), 6,57 (1H, d, J = 2,6Hz), 1/2 Fumarat

6,62-7,02 (2H, m).

715	OCHCF_2	-H	-H	-H	-H	¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,94-1,14 (1H, m), 1,14-1,15 (1H, m), 1,18 (3H, s), 1,26 (3H, s), 1,28-1,43 (2H, m), 1,48 (1H, br), 1,61-1,73 (3H, m), 1,76-1,90 (1H, m), 2,49 (1H, d, J = 11,2Hz), 3,05 (1H, d, J = 11,2Hz), 3,45-3,6 (2H, m), 6,55 (1H, dd, J = 70,2, 81,4Hz), 6,91 (1H, dd, J = 1,4, 8,0Hz), 6,93-6,99 (1H, m), 7,07-7,18 (2H, m)
-----	------------------	----	----	----	----	---

Bảng 77

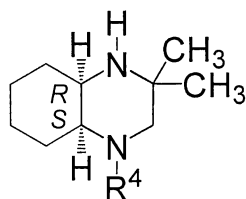
Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
716		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,05-1,25 (2H, m), 1,35-1,45 (1H, m), 1,47 (3H, s), 1,50 (3H, s), 1,6-2,05 (5H, m), 2,15 (3H, d, J = 0,7Hz), 2,70 (1H, d, J = 12,8Hz), 3,20 (1H, d, J = 12,9Hz), 3,25-3,4 (1H, m), 3,8-3,9 (1H, m), 6,77 (1H, d, J = 3,2Hz), 7,09 (1H, dd, J = 1,0, 3,3Hz), 7,9-8,1 (1H, m), 9,6-9,75 (1H, m).	-
717		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,95-1,15 (2H, m), 1,3-1,45 (1H, m), 1,52 (3H, s), 1,56 (3H, s), 1,6-1,7 (1H, m), 1,7-2,1 (4H, m), 2,87 (1H, d, J = 12,8Hz), 3,36 (1H, d, J = 13,1Hz), 3,65-3,75 (1H, m), 4,1-4,2 (1H, m), 7,06 (1H, s), 7,35-7,45 (2H, m), 7,9-8,0 (2H, m), 8,0-8,15 (1H, m), 9,6-9,8 (1H, m).	Hydroclorua

Bảng 78

Cấu hình tuyệt đối

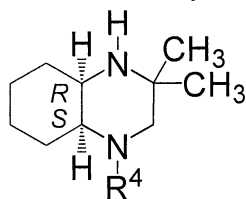


Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
718		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 1,08-1,15 (18H, m), 1,19-1,34 (12H, m), 1,35-1,48 (2H, m), 1,64-1,85 (4H, m), 2,82 (1H, d, J = 11,6Hz), 3,04 (1H, d, J = 11,7Hz), 3,45-3,55 (1H, m), 3,7-3,8 (1H, m), 6,95 (1H, d, J = 2,2Hz), 7,03 (1H, dd, J = 2,5, 8,8Hz), 7,10 (1H, d, J = 2,4Hz), 7,23 (1H, d, J = 2,5, 9,1Hz), 7,51 (1H, d, J = 8,8Hz), 7,55 (1H, d, J = 9,1Hz).	-
719		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 1,13 (18H, d, J = 7,3Hz), 1,18-1,36 (12H, m), 1,36-1,65 (2H, m), 1,65-1,87 (4H, m), 2,83 (1H, d, J = 11,9Hz), 3,12 (1H, d, J = 11,9Hz), 3,45-3,55 (1H, m), 3,75-3,85 (1H, m), 6,82 (1H, d, J = 2,3Hz), 6,86 (1H, dd, J = 2,4, 8,7Hz), 7,02 (1H, d, J = 2,3Hz), 7,10 (1H, dd, J = 2,4, 9,0Hz), 7,53 (1H, d, J = 8,7Hz), 7,59 (1H, d, J = 9,0Hz).	-
720		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 1,04-1,12 (18H, m), 1,12-1,32 (12H, m), 1,32-1,64 (2H, m), 1,65-1,86 (4H, m), 2,82 (1H, d, J = 11,8Hz), 3,08 (1H, d, J = 11,8Hz), 3,47-3,53 (1H, m), 3,73-3,81 (1H, m), 3,88 (3H, s), 5,17 (1H, d, J = 11,0Hz), 5,24 (1H, d, J = 11,0Hz), 6,94 (1H, d, J = 2,5Hz), 7,16 (1H, d, J = 9,0Hz), 7,31 (1H, dd, J = 2,5, 9,4Hz), 7,58 (1H, d, J = 9,0Hz), 8,12 (1H, d, J = 9,4Hz).	-
721		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 1,14 (18H, d, J = 6,7Hz), 1,19-1,33 (13H, m), 1,33-1,65 (1H, m), 1,65-1,84 (4H, m), 2,83 (1H, d, J = 11,6Hz), 3,04 (1H, d, J = 11,6Hz), 3,5-3,6 (1H, m), 3,7-3,8 (1H, m), 3,87 (3H, s), 4,93 (2H, d, J = 0,9Hz), 6,96 (1H, s), 6,99	-

(1H, d, J = 2,2Hz), 7,21 (1H, dd, J = 2,4, 9,0Hz), 7,59 (1H, d, J = 9,0Hz), 7,77 (1H, s).

Bảng 79

Cấu hình tuyệt đối

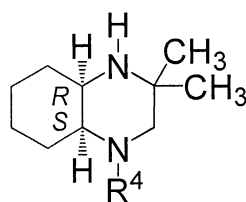


Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
722		1H-NMR (CDCl ₃) δppm: 1,14-1,51 (11H, m), 1,65-1,85 (4H, m), 2,83 (1H, d, J = 11,7Hz), 3,05 (1H, d, J = 11,8Hz), 3,52-3,57 (1H, m), 3,69-3,79 (1H, m), 6,97 (1H, d, J = 2,3Hz), 6,99-7,06 (2H, m), 7,22-7,28 (1H, m), 7,52-7,58 (2H, m).	-
723		1H-NMR (CDCl ₃) δppm: 1,18-1,36 (9H, m), 1,35-1,51 (2H, m), 1,66-1,86 (4H, m), 2,84 (1H, d, J = 11,9Hz), 3,13 (1H, d, J = 12,0Hz), 3,45-3,55 (1H, m), 3,75-3,85 (1H, m), 6,8-6,85 (2H, m), 6,94 (1H, d, J = 2,4Hz), 7,10 (1H, d, J = 2,4, 9,1Hz), 7,57 (1H, d, J = 8,7Hz), 7,60 (1H, d, J = 9,0Hz).	-
724		1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,1-1,2 (1H, m), 1,2-1,4 (8H, m), 1,5-1,9 (5H, m), 2,86 (1H, d, J = 12,2Hz), 3,20 (1H, d, J = 12,5Hz), 3,58 (1H, br), 3,85 (3H, s), 3,9-4,0 (1H, m), 4,85 (2H, s), 6,54 (2H, s), 7,05 (1H, d, J = 2,4Hz), 7,28 (1H, d, J = 9,1Hz), 7,39 (1H, dd, J = 2,5, 9,5Hz), 7,66 (1H, d, J = 9,0Hz), 7,97 (1H, d, J = 9,4Hz).	Fumarat
725		1H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,97 (1H, br), 1,15-1,35 (8H, m), 1,35-1,5 (2H, m), 1,65-1,85 (4H, m), 2,42 (1H, t, J = 6,5Hz), 2,82 (1H, d, J = 11,8Hz), 3,05	-

(1H, d, J = 11,7H), 3,45-3,55 (1H, m), 3,7-3,8 (1H, m), 3,94 (3H, s), 4,79 (2H, d, J = 5,9Hz), 6,98 (1H, d, J = 2,4Hz), 7,02 (1H, s), 7,21-7,28 (1H, m), 7,54 (1H, s), 7,60 (1H, d, J = 9,0Hz).

Bảng 80

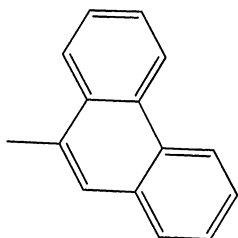
Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
726		1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,9-1,05 (1H, m), 1,05-1,2 (1H, m), 1,3-1,45 (1H, m), 1,52 (3H, s), 1,55-1,65 (4H, m), 1,65-1,85 (2H, m), 1,85-2,05 (2H, m), 2,73 (1H, d, J = 12,5Hz), 3,25-3,6 (2H, m), 3,94 (3H, s), 4,15-4,3 (1H, m), 6,88 (1H, d, J = 8,2Hz), 7,06 (1H, d, J = 8,0Hz), 7,5-7,55 (1H, m), 7,55-7,6 (1H, m), 7,96 (1H, br), 8,16 (1H, dd, J = 1,0, 8,3Hz), 8,24 (1H, d, J = 8,1Hz), 9,4-9,6 (1H, m).	Hydroclorua
727		1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,85-1,0 (1H, m), 1,0-1,15 (1H, m), 1,3-1,4 (1H, m), 1,5-1,65 (7H, m), 1,65-1,85 (2H, m), 1,85-2,1 (2H, m), 2,59 (3H, s), 2,76 (1H, d, J = 12,5Hz), 3,3-3,45 (1H, m), 3,51 (1H, d, J = 12,5Hz), 4,15-4,3 (1H, m), 7,02 (1H, d, J = 7,5Hz), 7,28 (1H, d, J = 7,4Hz), 7,5-7,65 (2H, m), 7,95-8,15 (2H, m), 8,25-8,35 (1H, m), 9,6-9,8 (1H, m).	Hydroclorua
728		1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,23-1,54 (6H, m), 1,58 (3H, s), 1,64-2,02 (4H, m), 2,02-2,15 (1H, m), 3,07 (1H, d, J = 13,4Hz), 3,50 (1H, d, J = 13,4Hz), 3,75-3,9 (1H, m), 3,9-4,53 (2H, m), 7,18 (1H, d, J = 2,2Hz), 7,22-7,32 (1H, m), 7,32-7,46 (2H, m), 7,65-7,82 (3H, m), 8,26	2 Hydroclorua

(1H, br), 10,02 (1H, br).

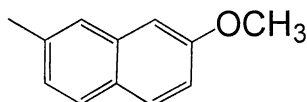
729



¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 0,83-0,99 (1H, m), 1,021,13 (1H, m), 1,27 (3H, s), 1,32-1,42 (2H, m), 1,46 (3H, s), 1,54-1,71 (2H, m), 1,71-1,81 (1H, m), 1,85-1,99 (1H, m), 2,69 (1H, d, J = 11,1Hz), 3,3-3,45 (2H, m), 3,75-3,85 (1H, m), 7,15 (1H, s), 7,5-7,55 (2H, m), 7,6-7,7 (2H, m), 7,7-7,8 (1H, m), 8,3-8,4 (1H, m), 8,55-8,65 (1H, m), 8,65-8,75 (1H, m).

-

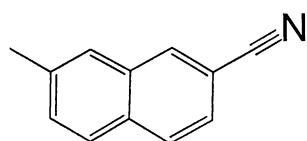
730



¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 0,9-1,65 (11H, m), 1,65-1,9 (4H, m), 2,84 (1H, d, J = 12,0Hz), 3,13 (1H, d, J = 11,9Hz), 3,50 (1H, bs), 3,75-3,85 (1H, m), 3,89 (3H, s), 6,89 (1H, dd, J = 2,5, 8,8Hz), 6,92 (1H, d, J = 2,4Hz), 6,97 (1H, d, J = 2,4Hz), 7,11 (1H, dd, J = 2,5, 9,0Hz), 7,57 (1H, d, J = 8,8Hz), 7,60 (1H, d, J = 9,0Hz).

-

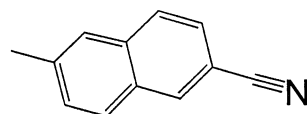
731



¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,3-1,5 (6H, m), 1,55 (3H, s), 1,65-2,05 (5H, m), 3,08 (1H, d, J = 13,6Hz), 3,62 (1H, d, J = 13,6Hz), 3,8-3,9 (1H, m), 4,2-4,3 (1H, m), 7,32 (1H, d, J = 2,1Hz), 7,50 (1H, dd, J = 1,6, 8,4Hz), 7,63 (1H, dd, J = 2,5, 9,2Hz), 7,85-8,0 (2H, m), 8,11-8,2 (1H, m), 8,26 (1H, s), 9,6-9,75 (1H, m).

Hydrochlorua

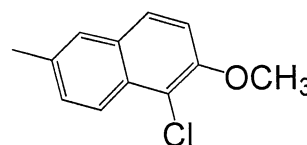
732



¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,32-1,54 (6H, m), 1,57 (3H, s), 1,66-2,13 (5H, m), 3,10 (1H, d, J = 13,9Hz), 3,72 (1H, d, J = 13,7Hz), 3,75-3,9 (1H, m), 4,25-4,35 (1H, m), 7,29 (1H, d, J = 2,2Hz), 7,5-7,65 (2H, m), 7,81 (1H, d, J = 8,6Hz), 7,91 (1H, d, J = 9,2Hz), 8,15-8,45 (2H, m), 9,92 (1H, br).

Hydrochlorua

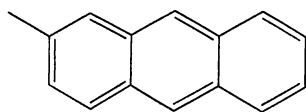
733



¹H-NMR (DMSO) δppm: 1,0-1,35 (9H, m), 1,4-1,6 (2H, m), 1,6-1,7 (3H, m), 1,8-1,95 (1H, m), 2,72 (1H, d, J = 12,3Hz), 3,12 (1H, d, J = 11,1Hz), 3,3-3,4 (1H, m), 3,8-3,9 (1H, m), 3,92 (3H, s), 7,09 (1H, d, J = 1,8Hz), 7,39 (1H, d, J = 9,2Hz), 7,49 (1H, dd, J = 2,4, 9,5Hz), 7,71 (1H, d, J = 9,0Hz), 7,89 (1H, d, J = 9,4Hz).

-

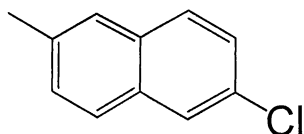
734



¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 1,00 (1H, br), 1,19-1,37 (8H, m), 1,38-1,51 (2H, m), 1,67-1,79 (3H, m), 1,79-1,93 (1H, m), 2,90 (1H, d, J = 11,8Hz), 3,18 (1H, d, J = 11,9Hz), 3,53 (1H, br), 3,8-3,9 (1H, m), 7,05 (1H, d, J = 2,1Hz), 7,3-7,45 (3H, m), 7,8-7,95 (3H, m), 8,15 (1H, s), 8,25 (1H, s).

-

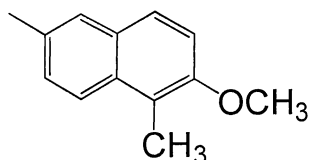
735



¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,15-1,25 (1H, m), 1,25-1,4 (8H, m), 1,5-1,95 (5H, m), 2,88 (1H, d, J = 12,6Hz), 3,31 (1H, d, J = 12,4Hz), 3,54 (1H, br), 3,95-4,05 (1H, m), 6,54 (2H, s), 7,13 (1H, d, J = 2,1Hz), 7,34 (1H, dd, J = 2,2, 8,7Hz), 7,44 (1H, dd, J = 2,4, 9,2Hz), 7,67-7,76 (2H, m), 7,81 (1H, d, J = 2,1Hz).

Fumarat

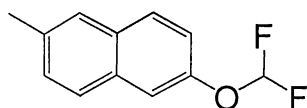
736



¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 1,09 (1H, br), 1,15-1,35 (8H, m), 1,35-1,5 (2H, m), 1,65-1,85 (4H, m), 2,50 (3H, s), 2,82 (1H, d, J = 11,6Hz), 3,07 (1H, d, J = 11,8Hz), 3,45-3,55 (1H, m), 3,7-3,8 (1H, m), 3,90 (3H, s), 6,96 (1H, d, J = 2,5Hz), 7,18 (1H, d, J = 9,0Hz), 7,30 (1H, dd, J = 2,6, 9,4Hz), 7,51 (1H, d, J = 9,0Hz), 7,81 (1H, d, J = 9,3Hz).

-

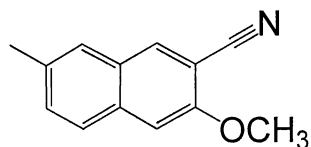
737



¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,06-1,19 (1H, m), 1,19-1,39 (8H, m), 1,47-1,80 (4H, m), 1,80-1,96 (1H, m), 2,83 (1H, d, J = 12,2Hz), 2,9-4,4 (5H, m), 6,51 (1H, s), 7,05-7,45 (4H, m), 7,49 (1H, d, J = 2,4Hz), 7,7-7,8 (2H, m).

1/2 Fumarat

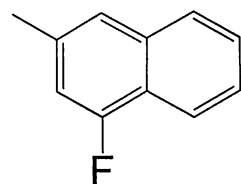
738



¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,23-1,54 (6H, m), 1,60 (3H, s), 1,66-2,06 (4H, m), 2,06-2,20 (1H, m), 3,07 (1H, d, J = 13,4Hz), 3,45 (1H, d, J = 13,9Hz), 3,75-3,9 (1H, m), 3,95 (3H, s), 4,1-4,2 (1H, m), 4,77 (1H, br), 7,25 (1H, d, J = 2,2Hz), 7,46 (1H, s), 7,58 (1H, dd, J = 2,4, 9,2Hz), 7,81 (1H, d, J = 9,2Hz), 8,23 (1H, s), 8,25-8,4 (1H, m), 10,18 (1H, br).

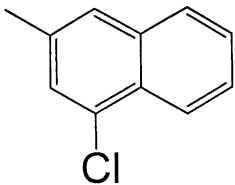
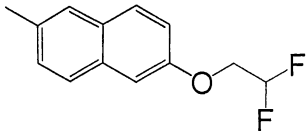
2 Hydrochlorua

739



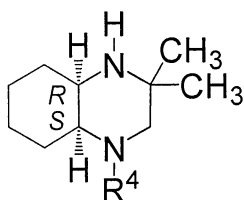
¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,27-1,50 (6H, m), 1,58 (3H, s), 1,65-2,13 (5H, m), 3,06 (1H, d, J = 13,6Hz), 3,56 (1H, d, J = 13,6Hz), 3,73-3,87 (1H, m), 4,14-4,26 (1H, m), 7,05 (1H, d, J = 1,8Hz), 7,28-7,38 (2H, m), 7,43-7,52 (1H, m), 7,75 (1H, d, J = 8,5Hz), 7,84 (1H, d, J =

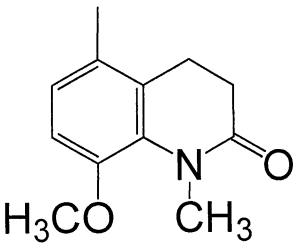
Hydrochlorua

		8,2Hz), 8,15-8,4 (1H, m), 9,9-10,1 (1H, m).	
740		1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 1,28-1,50 (6H, m), 1,57 (3H, s), 1,66-2,00 (4H, m), 2,00-2,18 (1H, m), 3,08 (1H, d, J = 13,5Hz), 3,56 (1H, d, J = 13,5Hz), 3,75-3,9 (1H, m), 3,95-4,1 (1H, m), 7,23 (1H, d, J = 2,0Hz), 7,36-7,45 (1H, m), 7,45-7,54 (1H, m), 7,65 (1H, d, J = 2,4Hz), 7,78 (1H, d, J = 8,1Hz), 7,97 (1H, d, J = 8,4Hz), 8,1-8,35 (1H, m), 9,8-10,1 (1H, m).	Hydroclorua
741		1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 1,06-1,17 (1H, m), 1,17-1,39 (8H, m), 1,46-1,79 (4H, m), 1,79-1,92 (1H, m), 2,82 (1H, d, J = 12,1Hz), 2,9-4,2 (5H, m), 4,30-4,41 (2H, m), 6,27-6,59 (2H, m), 7,06 (1H, d, J = 2,1Hz), 7,10 (1H, dd, J = 2,6, 8,9Hz), 7,26 (1H, d, J = 2,5Hz), 7,36 (1H, dd, J = 2,4, 9,2Hz), 7,60-7,68 (2H, m).	1/2 Fumarat

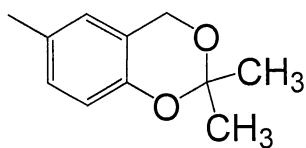
Bảng 81

Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
742		1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 1,0-1,15 (2H, m), 1,3-1,45 (1H, m), 1,48 (3H, s), 1,50 (3H, s), 1,55-1,65 (1H, m), 1,65-1,8 (2H, m), 1,8-2,0 (2H, m), 2,25-2,35 (1H, m), 2,4-2,5 (1H, m), 2,6-2,75 (2H, m), 2,95-3,1 (2H, m), 3,21 (3H, s), 3,3-3,5 (1H, m), 3,78 (3H, s), 3,85-3,95 (1H, m), 6,78 (1H, d, J = 8,9Hz), 6,93 (1H, d, J = 8,9Hz), 7,97 (1H, br), 9,59 (1H, br).	Hydroclorua

743

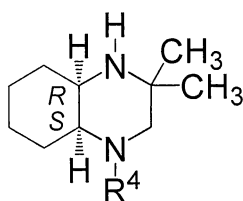


¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,08-1,37 (9H, m), 1,42 (6H, s), 1,48-1,83 (5H, m), 2,74 (1H, d, J = 12,2Hz), 2,94 (1H, d, J = 12,3Hz), 3,51 (1H, br), 3,6-3,75 (1H, m), 4,73 (2H, s), 6,53 (2H, s), 6,57 (1H, d, J = 2,6Hz), 6,65 (1H, d, J = 8,9Hz), 6,75 (1H, dd, J = 2,8, 9,0Hz).

Fumarat

Bảng 82

Cấu hình tuyệt đối



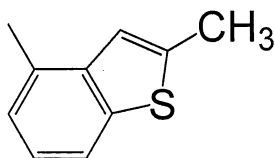
Ví dụ

R⁴

NMR

Muối

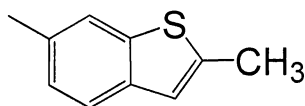
744



¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 0,94-1,09 (3H, m), 1,20 (3H, s), 1,34 (3H, s), 1,36-1,44 (2H, m), 1,45-1,79 (3H, m), 1,81-1,94 (1H, m), 2,55-2,65 (4H, m), 3,15 (1H, d, J = 11,2Hz), 3,4-3,5 (1H, m), 3,65-3,7 (1H, m), 6,74 (1H, dd, J = 0,6, 7,6Hz), 7,05 (1H, s), 7,13 (1H, dd, J = 7,8, 7,8Hz), 7,38 (1H, d, J = 8,0Hz).

-

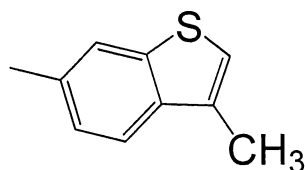
745



¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,1-1,2 (1H, m), 1,2-1,4 (8H, m), 1,45-1,75 (4H, m), 1,75-1,9 (1H, m), 2,47 (3H, d, J = 1,2Hz), 2,6-2,7 (6H, m), 6,49 (1H, s), 6,90 (1H, s), 6,99 (1H, dd, J = 2,3, 8,8Hz), 7,25 (1H, d, J = 2,1Hz), 7,48 (1H, d, J = 8,8Hz).

1/2 Fumarat

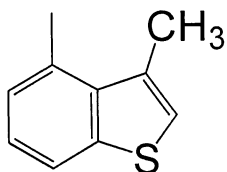
746



¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,1-1,4 (9H, m), 1,5-1,95 (5H, m), 2,31 (3H, d, J = 1,2Hz), 2,6-5,0 (7H, m), 6,52 (2H, s), 7,01 (1H, d, J = 1,2Hz), 7,11 (1H, dd, J = 2,3, 8,9Hz), 7,34 (1H, d, J = 2,2Hz), 7,55 (1H, d, J = 8,8Hz).

1/2 Fumarat

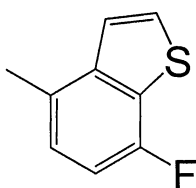
747



¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 0,93-1,10 (2H, m), 1,28-1,42 (1H, m), 1,51-1,66 (7H, m), 1,70-2,00 (3H, m), 2,00-2,18 (1H, m), 2,69 (3H, s), 2,80 (1H, d, J = 12,5Hz), 3,2-3,3 (1H, m), 3,48 (1H, d, J = 12,6Hz), 3,85-3,95 (1H, m), 7,02 (1H, d, J = 7,5Hz), 7,26 (1H, d, J = 7,8, 7,8Hz), 7,36 (1H, d, J = 0,6Hz), 7,69 (1H, d, J = 7,6Hz), 7,95-8,15 (1H, m), 9,95-10,1 (1H, m).

Hydrochlorua

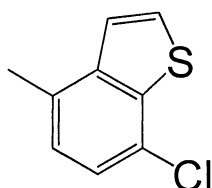
748



¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 0,92-1,08 (3H, m), 1,20 (3H, s), 1,32-1,43 (5H, m), 1,45-1,78 (3H, m), 1,81-1,94 (1H, m), 2,57 (1H, d, J = 11,1Hz), 3,14 (1H, d, J = 11,1Hz), 3,33-3,41 (1H, m), 3,63-3,70 (1H, m), 6,71 (1H, dd, J = 4,1, 8,4Hz), 6,92 (1H, dd, J = 8,9, 8,9Hz), 7,41 (1H, d, J = 5,4Hz), 7,46 (1H, dd, J = 3,7, 5,4Hz).

-

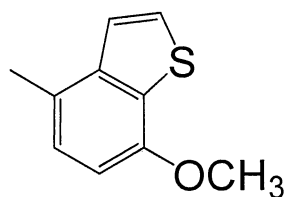
749



¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 0,92-1,08 (3H, m), 1,20 (3H, s), 1,29-1,42 (5H, m), 1,45-1,78 (3H, m), 1,82-1,96 (1H, m), 2,61 (1H, d, J = 11,2Hz), 3,15 (1H, d, J = 11,1Hz), 3,42-3,50 (1H, m), 3,64-3,71 (1H, m), 6,74 (1H, d, J = 8,2Hz), 7,21 (1H, d, J = 8,2Hz), 7,43 (1H, d, J = 5,5Hz), 7,47 (1H, d, J = 5,5Hz).

-

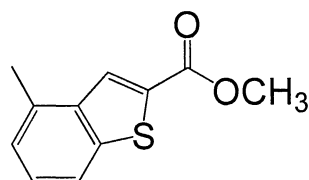
750



¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 0,9-1,1 (2H, m), 1,20 (3H, s), 1,3-1,45 (5H, m), 1,45-1,8 (4H, m), 1,8-1,95 (1H, m), 2,56 (1H, d, J = 11,1Hz), 3,14 (1H, d, J = 11,1Hz), 3,3-3,4 (1H, m), 3,6-3,7 (1H, m), 3,96 (3H, s), 6,66 (1H, d, J = 8,2Hz), 6,74 (1H, d, J = 8,2Hz), 7,39 (1H, d, J = 5,4Hz), 7,45 (1H, d, J = 5,4Hz).

-

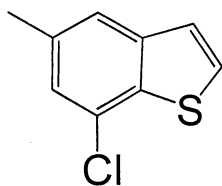
751



¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 0,95-1,1 (2H, m), 1,22 (3H, s), 1,3-1,45 (5H, m), 1,45-1,85 (4H, m), 1,85-2,0 (1H, m), 2,65 (1H, d, J = 11,2Hz), 3,17 (1H, d, J = 11,2Hz), 3,45-3,55 (1H, m), 3,7-3,8 (1H, m), 3,96 (3H, s), 6,77-6,82 (1H, m), 7,33 (1H, dd, J = 7,9, 7,9Hz), 7,45 (1H, d, J = 8,1Hz), 8,14 (1H, d, J = 0,5Hz).

-

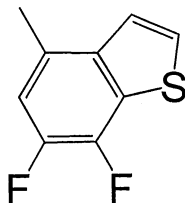
752



¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 0,93 (1H, br), 1,16-1,33 (8H, m), 1,33-1,49 (2H, m), 1,64-1,85 (4H, m), 2,80 (1H, d, J = 11,6Hz), 2,97 (1H, d, J = 11,7Hz), 3,48 (1H, br), 3,6-3,7 (1H, m), 7,04 (1H, d, J = 2,1Hz), 7,10 (1H, d, J = 2,2Hz), 7,20 (1H, d, J = 5,4Hz), 7,41 (1H, d, J = 5,5Hz).

-

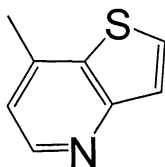
753



¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 0,94-1,14 (2H, m), 1,29-1,44 (1H, m), 1,51 (3H, s), 1,53 (3H, s), 1,58-2,07 (5H, m), 2,84 (1H, d, J = 12,9Hz), 3,41(1H, d, J = 13,0Hz), 3,6-3,7 (1H, m), 4,15-4,25 (1H, m), 7,11 (1H, dd, J = 6,5, 12,6Hz), 7,77 (1H, dd, J = 3,8, 5,4Hz), 7,84 (1H, d, J = 5,4Hz), 8,04 (1H, br), 9,81 (1H, br).

Hydroclorua

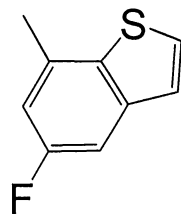
754



¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,38-1,57 (5H, m), 1,64 (3H, s), 1,70-2,02 (4H, m), 2,03-2,14 (1H, m), 2,37-2,54 (1H, m), 3,55 (1H, d, J = 15,0Hz), 3,9-4,0 (1H, m), 4,23 (1H, d, J = 15,3Hz), 4,6-4,75 (1H, m), 7,27 (1H, d, J = 7,2Hz), 7,67 (1H, d, J = 5,7Hz), 8,45-8,6 (2H, m), 8,88 (1H, br), 10,33 (1H, m), 14,95 (1H, br).

2 Hydroclorua

755

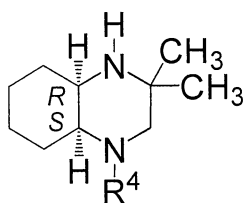


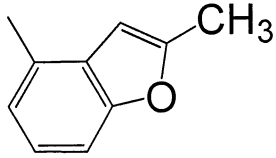
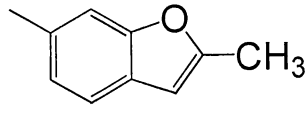
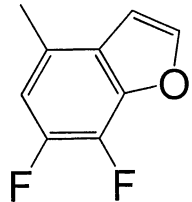
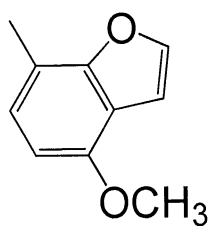
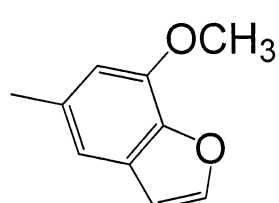
¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,0-1,19 (2H, m), 1,31-1,46 (1H, m), 1,51 (3H, s), 1,52 (3H, s), 1,60-1,89 (3H, m), 1,93-2,08 (2H, m), 3,00 (1H, d, J = 12,9Hz), 3,46 (1H, d, J = 13,0Hz), 3,90-4,01 (1H, m), 3,95-4,08 (1H, m), 6,96 (1H, dd, J = 2,1, 11,0Hz), 7,41 (1H, dd, J = 2,2, 9,1Hz), 7,46 (1H, d, J = 5,4Hz), 7,86 (1H, d, J = 5,4Hz), 8,16 (1H, br), 9,78 (1H, br).

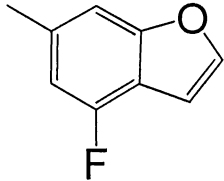
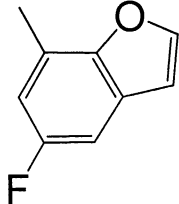
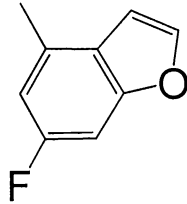
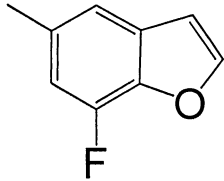
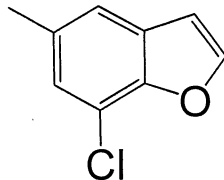
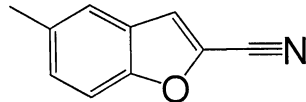
Hydroclorua

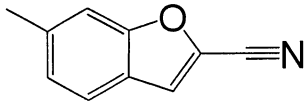
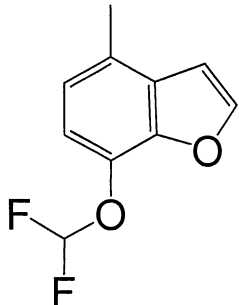
Bảng 83

Cấu hình tuyệt đối



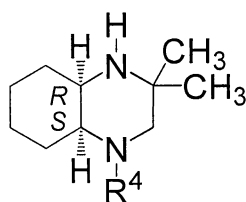
Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
756		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 1,02-1,17 (3H, m), 1,20 (3H, s), 1,31 (3H, s), 1,34-1,46 (2H, m), 1,47-1,79 (3H, m), 1,81-1,95 (1H, m), 2,45 (3H, d, J = 1,0Hz), 2,80 (1H, d, J = 11,5Hz), 3,05 (1H, d, J = 11,5Hz), 3,55-3,65 (2H, m), 6,39 (1H, dd, J = 1,0, 1,0Hz), 6,56 (1H, dd, J = 0,8, 7,7Hz), 6,95-7,05 (1H, m), 7,06 (1H, dd, J = 7,9, 7,9Hz).	-
757		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,17-1,37 (2H, m), 1,37-1,52 (4H, m), 1,56 (3H, s), 1,61-1,73 (1H, m), 1,73-1,99 (3H, m), 2,00-2,15 (1H, m), 2,37 (3H, d, J = 0,9Hz), 3,00 (1H, d, J = 13,3Hz), 3,28 (1H, d, J = 13,2Hz), 3,7-3,85 (1H, m), 3,95-4,1 (1H, m), 4,92 (1H, br), 6,40 (1H, d, J = 0,8Hz), 6,89 (1H, dd, J = 2,1, 8,6Hz), 7,05 (1H, d, J = 1,5Hz), 7,33 (1H, d, J = 8,5Hz), 8,15-8,35 (1H, m), 10,0-10,2 (1H, m).	2 Hydroclorua
758		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,01-1,19 (2H, m), 1,33-1,44 (1H, m), 1,48 (3H, s), 1,51 (3H, s), 1,59-2,07 (5H, m), 3,01 (1H, d, J = 13,0Hz), 3,28 (1H, d, J = 13,1Hz), 3,75-3,9 (1H, m), 4,0-4,15 (1H, m), 6,83 (1H, dd, J = 5,9, 13,5Hz), 7,36 (1H, dd, J = 2,6, 2,6Hz), 8,0-8,2 (2H, m), 9,7-9,9 (1H, m).	Hydroclorua
759		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,0-1,2 (2H, m), 1,34-1,44 (1H, m), 1,50 (3H, s), 1,53 (3H, s), 1,60-2,06 (5H, m), 3,05 (1H, d, J = 12,8Hz), 3,27 (1H, d, J = 13,0Hz), 3,84 (3H, s), 3,88-4,00 (2H, m), 6,66 (1H, d, J = 8,5Hz), 6,75 (1H, d, J = 8,5Hz), 6,93 (1H, J = 2,2Hz), 7,92 (1H, d, J = 2,2Hz), 8,0-8,25 (1H, m), 9,55-9,8 (1H, m).	Hydroclorua
760		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,99-1,27 (5H, m), 1,28 (3H, s), 1,33-1,47 (2H, m), 1,48-1,84 (5H, m), 2,77-2,90 (2H, m), 3,45-3,55 (1H, m), 3,55-3,65 (1H, m), 4,01 (3H, s), 6,51 (1H, d, J = 2,0Hz), 6,58 (1H, d, J = 2,1Hz), 6,63 (1H, d, J = 2,1Hz), 7,53 (1H, d, J = 2,0Hz).	-

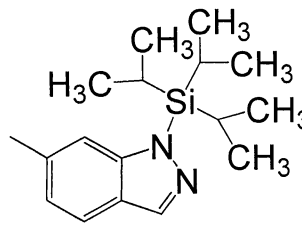
761		¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,05-1,25 (2H, m), 1,35-1,45 (1H, m), 1,48 (3H, s), 1,52 (3H, s), 1,6-2,05 (5H, m), 3,13 (1H, d, J = 13,2Hz), 3,28 (1H, d, J = 13,5Hz), 3,9-4,0 (1H, m), 4,0-4,1 (1H, m), 6,63 (1H, dd, J = 2,1, 12,3Hz), 7,09 (1H, dd, J = 1,3, 8,7Hz), 7,22 (1H, dd, J = 0,7, 2,2Hz), 7,96 (1H, d, J = 2,3Hz), 8,0-8,2 (1H, m), 9,6-9,9 (1H, m).	Hydrochlorua
762		¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,16-1,34 (2H, m), 1,35-1,45 (1H, m), 1,47 (3H, s), 1,54 (3H, s), 1,66-1,89 (3H, m), 1,92-2,11 (2H, m), 3,25 (1H, d, J = 13,6Hz), 3,45 (1H, d, J = 13,4Hz), 3,83-4,02 (1H, m), 4,20-4,38 (1H, m), 6,68 (1H, dd, J = 2,0, 12,2Hz), 6,87-7,05 (2H, m), 8,02 (1H, d, J = 2,1Hz), 8,24 (1H, br), 9,7-10,0 (1H, m).	Hydrochlorua
763		¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,27-1,47 (6H, m), 1,53 (3H, s), 1,61-1,96 (4H, m), 1,97-2,09 (1H, m), 3,00 (1H, d, J = 13,6Hz), 3,45 (1H, d, J = 13,5Hz), 3,71-3,81 (1H, m), 4,05-4,15 (1H, m), 6,81-6,93 (2H, m), 6,98-7,04 (1H, m), 7,83 (1H, d, J = 2,2Hz), 8,1-8,3 (1H, m), 9,8-10,0 (1H, m).	Hydrochlorua
764		¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,18-1,48 (6H, m), 1,53 (3H, s), 1,62-1,93 (4H, m), 1,95-2,13 (1H, m), 3,00 (1H, d, J = 13,3Hz), 3,30 (1H, d, J = 13,2Hz), 3,7-3,85 (1H, m), 3,95-4,1 (1H, m), 4,83 (1H, br), 6,91 (1H, dd, J = 2,2, 3,0Hz), 6,94 (1H, d, J 2,1Hz), 7,01 (1H, dd, J = 2,1, 14,2Hz), 7,99 (1H, d, J = 2,1Hz), 8,12 (1H, br), 9,86 (1H, br).	2 Hydrochlorua
765		¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,21-1,37 (2H, m), 1,37-1,47 (4H, m), 1,52 (3H, s), 1,62-1,90 (4H, m), 1,95-2,08 (1H, m), 3,02 (1H, d, J = 13,2Hz), 3,29 (1H, d, J = 13,2Hz), 3,75-3,9 (1H, m), 3,95-4,1 (1H, m), 6,92 (1H, d, J = 2,2Hz), 7,12 (1H, d, J = 2,2Hz), 7,16 (1H, d, J = 2,2Hz), 8,01 (1H, d, J = 2,1Hz), 8,06 (1H, br), 9,74 (1H, br).	Hydrochlorua
766		¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,19-1,36 (2H, m), 1,38-1,48 (4H, m), 1,52 (3H, s), 1,62-1,89 (4H, m), 1,93-2,06 (1H, m), 3,03 (1H, d, J = 13,3Hz), 3,25-3,4 (1H,	Hydrochlorua

		m), 3,75-3,9 (1H, m), 4,0-4,1 (1H, m), 7,22 (1H, d, J = 2,4Hz), 7,37 (1H, dd, J = 2,5, 9,3Hz), 7,62 (1H, d, J = 9,2Hz), 7,95 (1H, d, J = 0,7Hz), 8,06 (1H, br), 9,64 (1H, br).	
767		$^1\text{H-NMR}$ (DMSO- d_6) δ ppm: 1,15-1,29 (8H, m), 1,29-1,40 (2H, m), 1,48-1,80 (4H, m), 1,80-1,96 (1H, m), 2,83 (1H, d, J = 12,8Hz), 2,9-3,85 (4H, m), 3,9-4,0 (1H, m), 6,55 (2H, s), 7,09 (1H, s), 7,13 (1H, dd, J = 2,1, 8,9Hz), 7,56 (1H, d, J = 8,9Hz), 7,89 (1H, d, J = 0,6Hz).	Fumarat
768		$^1\text{H-NMR}$ (DMSO- d_6) δ ppm: 0,85-1,1 (2H, m), 1,2-1,35 (7H, m), 1,4-1,8 (4H, m), 1,85-2,05 (1H, m), 2,78 (1H, d, J = 11,8Hz), 2,85-4,5 (5H, m), 6,5 (1H, s), 6,58 (1H, d, J = 8,6Hz), 7,0-7,4 (3H, m), 7,99 (1H, d, J = 2,2Hz).	1/2 Fumarat

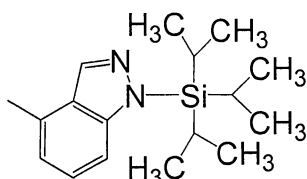
Bảng 84

Cấu hình tuyệt đối



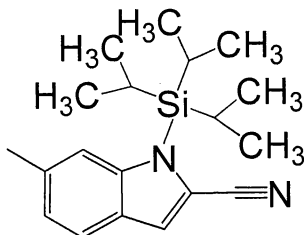
Ví dụ.	R^4	NMR	Muối
769		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 1,11-1,18 (20H, m), 1,22 (3H, s), 1,26-1,36 (4H, m), 1,37-1,49 (2H, m), 1,64-1,87 (7H, m), 2,82 (1H, d, J = 11,8Hz), 3,02 (1H, d, J = 11,8Hz), 3,45-3,55 (1H, m), 3,6-3,7 (1H, m), 6,82 (1H, s), 6,86 (1H, dd, J = 2,0, 8,9Hz), 7,54 (1H, d, J = 8,8Hz), 8,04 (1H, d, J = 0,8Hz).	-

770



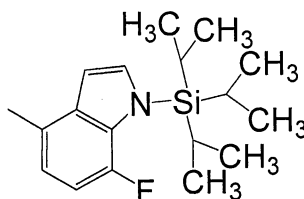
¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 1,11-1,19 (19H, m), 1,21 (3H, s), 1,23-1,31 (2H, m), 1,35 (3H, s), 1,37-1,46 (2H, m), 1,62-1,85 (6H, m), 1,95-2,04 (1H, m), 3,03 (1H, d, J = 11,9Hz), 3,09 (1H, d, J = 12,0Hz), 3,55-3,65 (1H, m), 3,8-3,9 (1H, m), 6,41 (1H, d, J = 7,5Hz), 7,05 (1H, d, J = 8,4Hz), 7,16 (1H, dd, J = 7,6, 8,3Hz), 8,26 (1H, d, J = 0,8Hz).

771



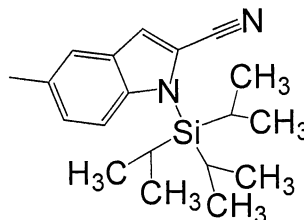
¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 1,17-1,23 (21H, m), 1,25-1,33 (5H, m), 1,33-1,50 (3H, m), 1,62-1,90 (4H, m), 1,93-2,05 (3H, m), 2,82 (1H, d, J = 11,8Hz), 3,00 (1H, d, J = 11,8Hz), 3,45-3,50 (1H, m), 3,55-3,65 (1H, m), 6,88-6,95 (2H, m), 7,28 (1H, s), 7,41-7,48 (1H, m).

772



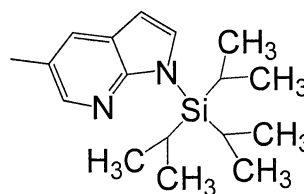
¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 0,93-1,17 (21H, m), 1,19 (3H, s), 1,23-1,44 (5H, m), 1,58-1,78 (6H, m), 1,78-1,93 (1H, m), 2,67 (1H, d, J = 11,2Hz), 3,09 (1H, d, J = 11,2Hz), 3,5-3,6 (1H, m), 3,6-3,7 (1H, m), 6,39 (1H, dd, J = 3,4, 8,3Hz), 6,65 (1H, dd, J = 3,2, 3,2Hz), 6,72 (1H, d, J = 8,2, 12,7Hz), 7,25 (1H, d, J = 3,2Hz).

773



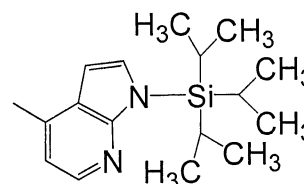
¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 1,12-1,29 (27H, m), 1,30-1,48 (2H, m), 1,62-1,82 (4H, m), 1,93-2,07 (3H, m), 2,78 (1H, d, J = 11,6Hz), 2,93 (1H, d, J = 11,6Hz), 3,45-3,55 (1H, m), 3,6-3,7 (1H, m), 6,92 (1H, d, J = 2,4Hz), 7,07 (1H, dd, J = 2,5, 9,4Hz), 7,24 (1H, s), 7,46 (1H, d, J = 9,4Hz).

774



¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 1,09-1,16 (19H, m), 1,20 (3H, s), 1,23-1,32 (5H, m), 1,33-1,48 (2H, m), 1,61-1,90 (7H, m), 2,81-2,91 (2H, m), 3,49-3,55 (1H, m), 3,55-3,63 (1H, m), 6,40 (1H, d, J = 3,4Hz), 7,21 (1H, d, J = 3,4Hz), 7,31 (1H, d, J = 2,8Hz), 8,06 (1H, d, J = 2,7Hz).

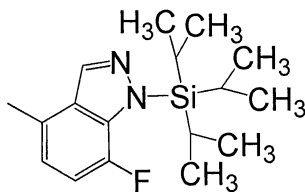
775



¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 1,07-1,17 (19H, m), 1,21 (3H, s), 1,23-1,35 (5H, m), 1,37-1,49 (2H, m), 1,63-1,90 (6H, m), 1,96-2,09 (1H, m), 3,05 (1H, d, J = 12,6Hz), 3,38 (1H, d, J = 12,5Hz), 3,48-3,54 (1H, m), 3,94-4,02 (1H, m), 6,33 (1H, d, J = 5,6Hz), 6,54 (1H, d, J = 3,6Hz), 7,10 (1H,

d, J = 3,6Hz), 7,98 (1H, d, J = 5,5Hz).

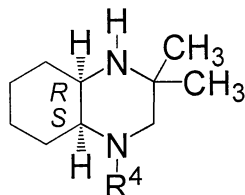
776



¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 1,1-1,18 (19H, m), 1,18-1,22 (4H, m), 1,34 (3H, s), 1,36-1,44 (2H, m), 1,61-1,84 (7H, m), 1,86-1,98 (1H, m), 2,81 (1H, d, J = 11,4Hz), 3,07 (1H, d, J = 11,4Hz), 3,6-3,65 (1H, m), 3,65-3,75 (1H, m), 6,30 (1H, dd, J = 3,0, 8,2Hz), 6,86 (1H, dd, J = 8,2, 12,0Hz), 8,24 (1H, d, J = 3,1Hz).

Bảng 85

Cấu hình tuyệt đối



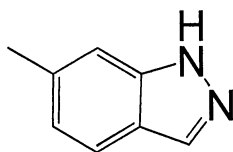
Ví dụ.

R⁴

NMR

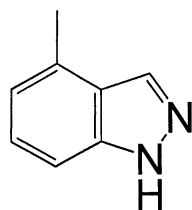
Muối

777



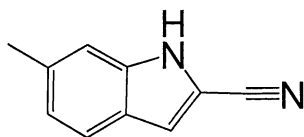
¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 1,07 (1H, br), 1,16-1,33 (8H, m), 1,35-1,50 (2H, m), 1,64-1,88 (4H, m), 2,81 (1H, d, J = 11,8Hz), 3,05 (1H, d, J = 11,8Hz), 3,46-3,53 (1H, m), 3,68-3,79 (1H, m), 6,71 (1H, s), 6,92 (1H, d, J = 2,0, 9,0Hz), 7,5-7,6 (1H, m), 7,89 (1H, d, J = 0,9Hz), 9,7 (1H, br).

778



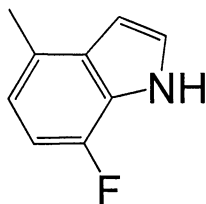
¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 0,94-1,24 (6H, m), 1,33 (3H, s), 1,37-1,47 (2H, m), 1,63-1,80 (3H, m), 1,88-2,02 (1H, m), 3,02 (1H, d, J = 11,8Hz), 3,09 (1H, d, J = 11,9Hz), 3,62-3,68 (1H, m), 3,83-3,92 (1H, m), 6,43 (1H, d, J = 7,6Hz), 6,97 (1H, d, J = 8,3Hz), 7,23 (1H, dd, J = 7,7, 8,1Hz), 8,10 (1H, d, J = 0,9Hz), 9,96 (1H, br).

779



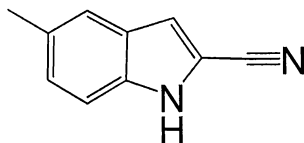
¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 0,95 (1H, br), 1,15-1,35 (8H, m), 1,35-1,52 (2H, m), 1,52-1,90 (4H, m), 2,81 (1H, d, J = 11,9Hz), 3,03 (1H, d, J = 11,8Hz), 3,45-3,55 (1H, m), 3,65-3,8 (1H, m), 6,66 (1H, s), 6,95 (1H, dd, J = 2,1, 9,0Hz), 7,06 (1H, dd, J = 0,8, 2,0Hz), 7,46 (1H, d, J = 9,0Hz), 8,23 (1H, bs).

780



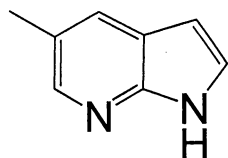
¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 0,95-1,11 (3H, m), 1,20 (3H, s), 1,28-1,44 (5H, m), 1,59-1,79 (3H, m), 1,79-1,93 (1H, m), 2,70 (1H, d, J = 11,3Hz), 3,08 (1H, d, J = 11,3Hz), 3,6-3,7 (2H, m), 6,35 (1H, dd, J = 3,8, 8,3Hz), 6,61 (1H, dd, J = 3,2, 5,6Hz), 6,76 (1H, dd, J = 8,3, 10,7Hz), 7,17 (1H, dd, J = 2,8, 2,8Hz), 8,39 (1H, br).

781



¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 1,01 (1H, br), 1,10-1,26 (5H, m), 1,28 (3H, s), 1,31-1,48 (2H, m), 1,61-1,83 (4H, m), 2,81 (1H, d, J = 11,5Hz), 2,89 (1H, d, J = 11,5Hz), 3,5-3,6 (1H, m), 3,6-3,7 (1H, m), 6,95 (1H, d, J = 2,1Hz), 7,04 (1H, dd, J = 0,8, 2,0Hz), 7,17 (1H, dd, J = 2,3, 9,1Hz), 7,28 (1H, d, J = 9,1Hz), 8,68 (1H, br).

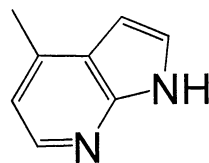
782



¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,00-1,37 (9H, m), 1,47-1,9 (5H, m), 2,90 (2H, s), 2,95-4,35 (4H, m), 6,27 (1H, dd, J = 1,9, 3,3Hz), 6,49 (1H, s), 7,34 (1H, dd, J = 2,9, 2,9Hz), 7,40 (1H, d, J = 2,5Hz), 8,04 (1H, d, J = 2,6Hz), 11,30 (1H, s).

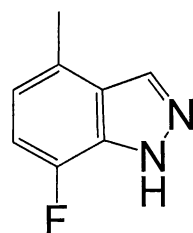
1/2 Fumarat

783



¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 0,81-1,37 (8H, m), 1,37-1,51 (3H, m), 1,65-1,83 (3H, m), 1,98-2,13 (1H, m), 3,09 (1H, d, J = 12,6Hz), 3,4-3,5 (1H, m), 3,5-3,55 (1H, m), 4,0-4,1 (1H, m), 6,36 (1H, d, J = 5,7Hz), 6,50 (1H, d, J = 3,6Hz), 7,1-7,2 (1H, m), 8,0-8,1 (1H, m), 9,7-10,6 (1H, m).

784

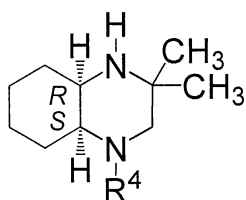


¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 1,02-1,17 (2H, m), 1,22 (3H, s), 1,34 (3H, s), 1,36-1,45 (2H, m), 1,62-1,80 (3H, m), 1,83-1,96 (1H, m), 2,84 (1H, d, J = 11,5Hz), 3,05 (1H, d, J = 11,5Hz), 3,65-3,7 (1H, m), 3,7-3,8 (1H, m), 6,28 (1H, dd, J = 3,3, 8,3Hz), 6,91 (1H, dd, J = 8,2, 10,4Hz),

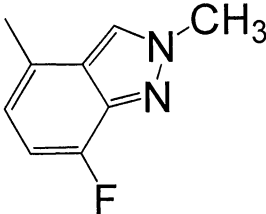
8,12 (1H, d, J = 3,4Hz), 10,38 (1H, br).

Bảng 86

Cấu hình tuyệt đối



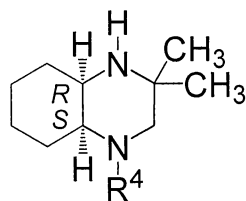
Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
785		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 1,15-1,32 (9H, m), 1,33-1,50 (2H, m), 1,64-1,88 (4H, m), 2,82 (1H, d, J = 11,7Hz), 3,03 (1H, d, J = 11,7Hz), 3,46-3,54 (1H, m), 3,71-3,79 (1H, m), 3,80 (3H, s), 6,51 (1H, d, J = 1,7Hz), 6,96 (1H, dd, J = 2,1, 9,0Hz), 7,02 (1H, s), 7,46 (1H, d, J = 9,0Hz).	-
786		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,0-1,25 (2H, m), 1,25-1,4 (7H, m), 1,45-1,9 (5H, m), 2,94 (2H, s), 3,36 (3H, br), 3,66 (1H, br), 3,7-3,8 (4H, m), 6,29 (1H, d, J = 3,3Hz), 6,54 (2H, s), 7,39 (1H, d, J = 3,3Hz), 7,43 (1H, d, J = 2,2Hz), 8,10 (1H, d, J = 2,5Hz).	Fumarat
787		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,15-1,4 (9H, m), 1,5-1,8 (4H, m), 2,0-2,15 (1H, m), 3,09 (1H, d, J = 12,9Hz), 3,43 (1H, d, J = 12,4Hz), 3,55-3,65 (1H, m), 3,73 (3H, s), 4,05-4,15 (1H, m), 6,41 (1H, d, J = 5,6Hz), 6,49 (1H, d, J = 3,6Hz), 6,55 (2H, s), 7,26 (1H, d, J = 3,6Hz), 7,93 (1H, d, J = 5,6Hz).	Fumarat
788		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,97-1,13 (2H, m), 1,33-1,44 (1H, m), 1,51 (3H, s), 1,53 (3H, s), 1,58-1,67 (1H, m), 1,67-1,96 (3H, m), 1,96-2,07 (1H, m), 3,00 (1H, d, J = 12,9Hz), 3,26 (1H, d, J = 13,0Hz), 3,85-4,0 (1H, m), 4,05-4,2 (4H, m), 6,40 (1H,	Hydroclorua

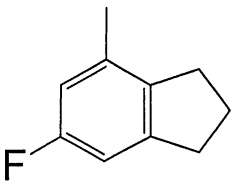
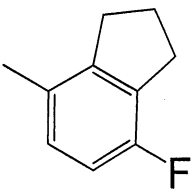
		dd, J = 3,0, 8,3Hz), 7,05 (1H, dd, J = 8,2, 11,8Hz), 8,0-8,2 (1H, m), 8,38 (1H, d, J = 2,3Hz), 9,65-9,9 (1H, m).
789		1H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,00-1,16 (2H, m), 1,34-1,44 (1H, m), 1,50 (3H, s), 1,53 (3H, s), 1,58-1,96 (4H, m), 1,98-2,09 (1H, m), 2,98 (1H, d, J = 12,9Hz), 3,24 (1H, d, J = 13,0Hz), 3,85-3,95 (1H, m), 3,95-4,08 (1H, m), 4,17 (3H, s), 6,24 (1H, dd, J = 3,2, 8,0Hz), 6,85 (1H, dd, J = 8,0, 11,5Hz), 7,95-8,2 (1H, m), 8,74 (1H, d, J = 2,8Hz), 9,7-10,0 (1H, m).

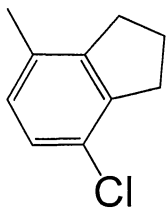
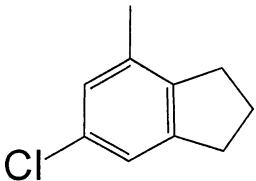
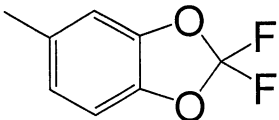
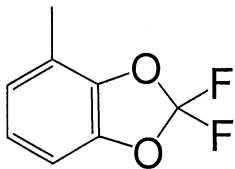
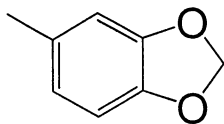
Hydroclorua

Bảng 87

Cấu hình tuyệt đối

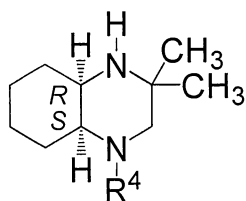


Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
790		1H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,01-1,25 (2H, m), 1,32-1,42 (1H, m), 1,46 (3H, s), 1,48 (3H, s), 1,58-2,03 (6H, m), 2,05-2,18 (1H, m), 2,70-2,93 (5H, m), 3,24 (1H, d, J = 12,9Hz), 3,45-3,57 (1H, m), 3,81-3,93 (1H, m), 6,53 (1H, d, J = 11,4Hz), 6,70 (1H, d, J = 8,4Hz), 8,02 (1H, br), 9,72 (1H, br).	Hydroclorua
791		1H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 0,90-1,21 (2H, m), 1,28-1,41 (1H, m), 1,48 (6H, s), 1,57-1,67 (1H, m), 1,67-2,06 (5H, m), 2,08-2,21 (1H, m), 2,70 (1H, d, J = 12,4Hz), 2,78-3,00 (4H, m), 3,22-3,42 (2H, m), 3,77-3,92 (1H, m), 6,74 (1H, dd, J = 4,3, 8,6Hz), 6,88 (1H, dd, J = 8,6, 8,6Hz), 8,01 (1H, br), 9,73 (1H, br).	Hydroclorua

792		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 0,75-1,15 (3H, m), 1,17 (3H, s), 1,27 (3H, s), 1,3-1,45 (2H, m), 1,45-1,75 (3H, m), 1,75-1,95 (1H, m), 1,95-2,1 (1H, m), 2,1-2,25 (1H, m), 2,52 (1H, d, $J = 11,2\text{Hz}$), 2,85-3,05 (5H, m), 3,1-3,2 (1H, m), 3,45-3,55 (1H, m), 6,58 (1H, d, $J = 8,4\text{Hz}$), 7,03 (1H, d, $J = 8,4\text{Hz}$).	-
793		$^1\text{H-NMR}$ (DMSO-d_6) δ ppm: 1,11-1,24 (1H, m), 1,34-1,42 (1H, m), 1,45 (3H, s), 1,47 (3H, s), 1,59-2,03 (6H, m), 2,05-2,17 (1H, m), 2,7-2,95 (5H, m), 3,27 (1H, d, $J = 12,9\text{Hz}$), 3,38-3,55 (1H, m), 3,79-3,95 (1H, m), 4,28-4,11 (1H, m), 6,72 (1H, d, $J = 1,5\text{Hz}$), 6,94 (1H, s), 7,9-8,1 (1H, m), 9,6-9,8 (1H, m).	Hydroclorua
794		$^1\text{H-NMR}$ (DMSO-d_6) δ ppm: 1,20-1,48 (6H, m), 1,52 (3H, s), 1,62-1,93 (4H, m), 1,96-2,12 (1H, m), 2,97 (1H, d, $J = 13,4\text{Hz}$), 3,29 (1H, d, $J = 13,4\text{Hz}$), 3,7-3,85 (1H, m), 3,9-4,05 (1H, m), 6,70 (1H, dd, $J = 2,4, 8,9\text{Hz}$), 7,12 (1H, d, $J = 2,4\text{Hz}$), 7,23 (1H, d, $J = 8,9\text{Hz}$), 8,18 (1H, br), 9,94 (1H, br).	Hydroclorua
795		$^1\text{H-NMR}$ (DMSO-d_6) δ ppm: 1,1-1,25 (9H, m), 1,25-1,35 (1H, m), 1,45-1,75 (4H, m), 1,9-2,05 (1H, m), 2,94 (1H, d, $J = 12,2\text{Hz}$), 3,07 (1H, d, $J = 12,3\text{Hz}$), 3,11-3,62 (3H, m), 3,63-3,71 (1H, m), 6,57 (2H, s), 6,72 (1H, d, $J = 8,0\text{Hz}$), 6,75-6,81 (1H, m), 7,04 (1H, dd, $J = 8,3, 8,3\text{Hz}$).	Fumarat
796		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 0,65-1,3 (9H, m), 1,3-1,95 (6H, m), 2,69 (1H, d, $J = 11,5\text{Hz}$), 2,79 (1H, d, $J = 11,6\text{Hz}$), 3,4-3,55 (2H, m), 5,84-5,90 (2H, m), 6,25 (1H, dd, $J = 11,6\text{Hz}$), 6,51 (1H, d, $J = 2,4\text{Hz}$), 6,69 (1H, d, $J = 8,5\text{Hz}$).	-

Bảng 88

Cấu hình tuyệt đối

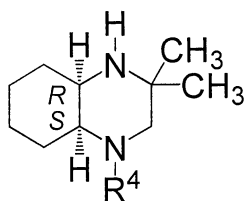


Ví dụ.	R ⁴	NMR	Muối
797		1H-NMR (CDCl ₃) δppm: 1,01-1,13 (19H, m), 1,14-1,28 (11H, m), 1,31-1,46 (2H, m), 1,60-1,76 (4H, m), 2,67 (1H, d, J = 11,6Hz), 2,83 (1H, d, J = 11,5Hz), 3,4-3,55 (2H, m), 6,69-6,74 (2H, m), 6,74-6,80 (2H, m).	-
798		1H-NMR (CDCl ₃) δppm: 1,07-1,16 (19H, m), 1,16-1,33 (11H, m), 1,33-1,47 (2H, m), 1,62-1,80 (4H, m), 2,68 (1H, d, J = 12,0Hz), 2,97 (1H, d, J = 11,9Hz), 3,4-3,45 (1H, m), 3,55-3,6 (1H, m), 6,25-6,35 (1H, m), 6,37 (1H, dd, J = 2,4, 7,8Hz), 6,43 (1H, dd, J = 1,9, 8,3Hz), 7,03 (1H, dd, J = 8,1, 8,1Hz).	-
799		1H-NMR (CDCl ₃) δppm: 1,07-1,14 (19H, m), 1,14-1,29 (11H, m), 1,29-1,47 (2H, m), 1,59-1,77 (4H, m), 2,70 (1H, d, J = 11,7Hz), 2,92 (1H, d, J = 11,7Hz), 3,4-3,5 (1H, m), 3,55-3,65 (1H, m), 3,75 (3H, s), 4,78-4,89 (2H, m), 6,65 (1H, dd, J = 3,1, 8,8Hz), 6,71 (1H, d, J = 8,8Hz), 7,22 (1H, d, J = 3,0Hz).	-
800		1H-NMR (CDCl ₃) δppm: 1,06-1,13 (18H, m), 1,14-1,29 (12H, m), 1,32-1,48 (2H, m), 1,48-1,76 (4H, m), 2,65 (1H, d, J = 11,8Hz), 2,83 (1H, d, J = 11,6Hz), 3,35-3,45 (1H, m), 3,45-3,55 (1H, m), 6,39-6,48 (1H, m), 6,55 (1H, dd, J = 2,9, 14,1Hz), 6,79 (1H, dd, J = 9,4, 9,4Hz).	-

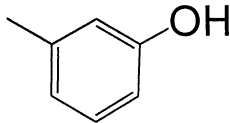
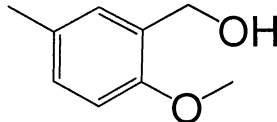
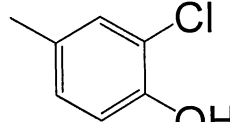
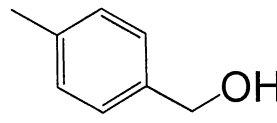
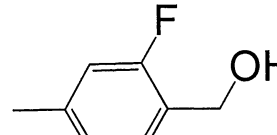
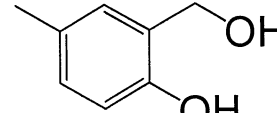
801		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 1,11 (18H, d, $J = 7,2\text{Hz}$), 1,15-1,21 (4H, m), 1,21-1,33 (7H, m), 1,34-1,47 (2H, m), 1,47-1,77 (5H, m), 2,66 (1H, d, $J = 11,5\text{Hz}$), 2,81 (1H, d, $J = 11,6\text{Hz}$), 3,4-3,55 (2H, m), 6,61 (1H, d, $J = 3,0, 8,9\text{Hz}$), 6,78 (1H, d, $J = 8,9\text{Hz}$), 6,81 (1H, d, $J = 3,0\text{Hz}$).	-
802		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 1,04-1,11 (18H, m), 1,11-1,22 (7H, m), 1,23 (3H, s), 1,26-1,49 (4H, m), 1,64-1,79 (4H, m), 2,71 (1H, d, $J = 11,9\text{Hz}$), 3,01 (1H, d, $J = 11,9\text{Hz}$), 3,4-3,5 (1H, m), 3,6-3,7 (1H, m), 4,73 (2H, s), 6,79-6,86 (2H, m), 7,18-7,23 (2H, m).	-
803		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 1,03-1,12 (18H, m), 1,12-1,48 (13H, m), 1,50-1,82 (5H, m), 2,70 (1H, d, $J = 12,0\text{Hz}$), 2,99 (1H, d, $J = 12,0\text{Hz}$), 3,35-3,45 (1H, m), 3,55-3,65 (1H, m), 4,77 (2H, s), 6,47 (1H, dd, $J = 2,4, 14,0\text{Hz}$), 6,61 (1H, dd, $J = 2,4, 8,6\text{Hz}$), 7,32 (1H, dd, $J = 8,8, 8,8\text{Hz}$).	-
804		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 1,03 (18H, d, $J = 2,4\text{Hz}$), 1,13-1,27 (9H, m), 1,27-1,77 (6H, m), 2,67 (1H, d, $J = 11,6\text{Hz}$), 2,80 (1H, d, $J = 11,5\text{Hz}$), 3,4-3,55 (2H, m), 4,96 (2H, s), 6,42 (1H, d, $J = 2,9\text{Hz}$), 6,70 (1H, dd, $J = 2,9, 8,8\text{Hz}$), 6,80 (1H, d, $J = 8,8\text{Hz}$).	-

Bảng 89

Cấu hình tuyệt đối

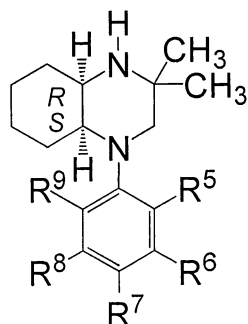


Ví dụ.	R^4	NMR	Muối
805		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 1,00-1,48 (11H, m), 1,54-1,87 (4H, m), 2,70 (1H, d, $J = 10,4\text{Hz}$), 2,81 (1H, d, $J = 11,5\text{Hz}$), 3,3-3,65 (2H, m), 6,75 (4H, bs).	-

806		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 1,14-1,49 (11H, m), 1,60-1,83 (4H, m), 2,71 (1H, d, $J = 12,1\text{Hz}$), 3,03 (1H, d, $J = 12,0\text{Hz}$), 3,37-3,44 (1H, m), 3,56-3,67 (1H, m), 6,16-6,23 (1H, m), 6,33 (1H, dd, $J = 2,3, 2,3\text{Hz}$), 6,43 (1H, dd, $J = 2,1, 8,4\text{Hz}$), 7,06 (1H, dd, $J = 8,1, 8,1\text{Hz}$).	-
807		$^1\text{H-NMR}$ (DMSO-d_6) δ ppm: 1,0-1,25 (2H, m), 1,25-1,4 (7H, m), 1,4-1,85 (5H, m), 2,78 (1H, d, $J = 12,3\text{Hz}$), 2,90 (1H, d, $J = 12,1\text{Hz}$), 2,95-4,1 (9H, m), 4,44 (2H, s), 6,50 (2H, s), 6,71 (1H, dd, $J = 2,8, 8,8\text{Hz}$), 6,79 (1H, d, $J = 8,9\text{Hz}$), 6,97 (1H, d, $J = 2,7\text{Hz}$).	Fumarat
808		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 1,10-1,27 (9H, m), 1,31-1,48 (1H, m), 1,49-2,01 (6H, m), 2,68 (1H, d, $J = 11,5\text{Hz}$), 2,78 (1H, d, $J = 11,5\text{Hz}$), 3,4-3,55 (2H, m), 6,73 (1H, dd, $J = 2,8, 8,9\text{Hz}$), 6,78 (1H, d, $J = 2,8\text{Hz}$), 6,89 (1H, d, $J = 8,9\text{Hz}$).	-
809		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 1,17-1,61 (12H, m), 1,62-1,83 (4H, m), 2,72 (1H, d, $J = 11,9\text{Hz}$), 3,03 (1H, d, $J = 11,9\text{Hz}$), 3,4-3,45 (1H, m), 3,6-3,7 (1H, m), 4,56 (2H, s), 6,80-6,86 (2H, m), 7,20-7,25 (2H, m).	-
810		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 0,91 (1H, br), 1,17-1,48 (10H, m), 1,56 (1H, br), 1,62-1,84 (4H, m), 2,71 (1H, d, $J = 12,1\text{Hz}$), 3,02 (1H, d, $J = 12,0\text{Hz}$), 3,35-3,45 (1H, m), 3,55-3,65 (1H, m), 4,62 (2H, d, $J = 3,2\text{Hz}$), 6,51 (1H, dd, $J = 2,5, 14,0\text{Hz}$), 6,59 (1H, dd, $J = 2,5, 8,5\text{Hz}$), 7,19 (1H, dd, $J = 8,8, 8,8\text{Hz}$).	-
811		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 0,92-1,02 (1H, m), 1,02-1,13 (4H, m), 1,15 (3H, s), 1,21-1,30 (1H, m), 1,35-1,65 (5H, m), 1,69-1,83 (1H, m), 2,60 (1H, d, $J = 11,3\text{Hz}$), 2,69 (1H, d, $J = 11,3\text{Hz}$), 3,32 (1H, br), 3,41-3,49 (1H, m), 4,43 (2H, d, $J = 4,6\text{Hz}$), 4,88 (1H, t, $J = 5,4\text{Hz}$), 6,55 (1H, dd, $J = 2,8, 8,7\text{Hz}$), 6,60 (1H, d, $J = 8,6\text{Hz}$), 6,83 (1H, d, $J = 2,7\text{Hz}$), 8,55 (1H, s).	-

Bảng 90

Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ.	R ⁵	R ⁶	R ⁷	R ⁸	R ⁹	NMR	Muối
812	-H	-H	-OCH ₃	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,1-1,3 (2H, m), 1,35-1,45 (4H, m), 1,52 (3H, s), 1,6-1,9 (4H, m), 1,95-2,1 (1H, m), 2,93 (1H, d, J = 13,1Hz), 3,11 (1H, d, J = 13,0Hz), 3,68 (3H, s), 3,7-3,9 (2H, m), 4,35-5,35 (1H, m), 6,75-6,85 (2H, m), 6,85-6,95 (2H, m), 8,09 (1H, br), 9,90 (1H, br).	2 Hydroclorua
813	-CH ₃	-Cl	-H	-H	-H	1H-NMR (CDCl₃) δppm: 0,93-1,09 (3H, m), 1,16 (3H, s), 1,23-1,34 (4H, m), 1,34-1,44 (2H, m), 1,44-1,75 (2H, m), 1,79-1,92 (1H, m), 2,37 (3H, s), 2,41 (1H, d, J = 11,0Hz), 2,83-2,91 (1H, m), 3,10 (1H, d, J = 11,1Hz), 3,51-3,57 (1H, m), 6,79 (1H, dd, J = 2,1, 7,1Hz), 6,99-7,08 (2H, m).	-
814	-CH ₃	-H	-H	-H	-H	1H-NMR (CDCl₃) δppm: 0,78-1,13 (3H, m), 1,16 (3H, s), 1,28-1,42 (5H, m), 1,54-1,76 (4H, m), 1,81-1,95 (1H,	Hydroclorua

						m), 2,34 (3H, s), 2,43 (1H, d, J = 11,1Hz), 2,87-2,96 (1H, m), 3,13 (1H, d, J = 11,1Hz), 3,47-3,58 (1H, m), 6,88 (1H, dd, J = 1,0, 7,9Hz), 6,91-6,97 (1H, m), 7,07-7,15 (1H, m), 7,17 (1H, dd, J = 0,7, 7,5Hz).	
815	-H	-H	-CH3	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 1,16-1,33 (2H, m), 1,34-1,48 (4H, m), 1,49-1,56 (3H, m), 1,61-1,93 (4H, m), 1,97-2,11 (1H, m), 2,19 (3H, s), 2,91 (1H, d, J = 13,2Hz), 3,19-3,32 (1H, m), 3,68-3,80 (1H, m), 3,87-3,99 (1H, m), 4,35-6,4 (1H, m), 6,83 (2H, d, J = 8,4Hz), 7,02 (2H, d, J = 8,1Hz), 8,0-8,35 (1H, m), 9,8-10,2 (1H, m).	2 Hydrochlorua
816	-CH3	-CH3	-H	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 0,96-1,18 (2H, m), 1,28-1,45 (1H, m), 1,49 (3H, s), 1,52 (3H, s), 1,56-1,67 (1H, m), 1,67-1,83 (2H, m), 1,83-2,10 (2H, m), 2,20 (3H, s), 2,22 (3H, s), 2,59 (1H, d, J = 12,6Hz), 3,0-3,15 (1H, m), 3,25-3,4 (1H, m), 3,8-3,95 (1H, m), 6,82 (1H, d, J = 7,8Hz), 6,90 (1H, d, J = 7,4Hz), 7,03 (1H, dd, J = 7,7, 7,7Hz), 8,02 (1H, br), 9,65-9,9 (1H, m).	Hydrochlorua
817	-H	-CH3	-Cl	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 1,21-1,49 (6H, m), 1,53 (3H, s), 1,63-1,96 (4H, m), 1,96-2,16 (1H, m), 2,26 (3H, s), 2,93 (1H, d, J = 13,5Hz), 3,36 (1H, d, J	Hydrochlorua

						= 13,4Hz), 3,65-3,8 (1H, m), 3,95-4,05 (1H, m), 4,43 (1H, br), 6,79 (1H, dd, J = 2,9, 8,8Hz), 6,93 (1H, d, J = 2,8Hz), 7,20 (1H, d, J = 8,8Hz), 8,1-8,4 (1H, m), 9,8-10,2 (1H, m).	
818	-H	-CH3	-F	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 1,16-1,35 (2H, m), 1,35-1,48 (4H, m), 1,52 (3H, s), 1,62-1,95 (4H, m), 1,95-2,14 (1H, m), 2,18 (3H, d, J = 1,6Hz), 2,93 (1H, d, J = 13,2Hz), 3,21 (1H, d, J = 13,1Hz), 3,7-3,8 (1H, m), 3,85-4,0 (1H, m), 4,05-5,8 (1H, m), 6,71-6,81 (1H, m), 6,85 (1H, dd, J = 2,9, 6,6Hz), 6,97 (1H, dd, J = 9,1, 9,1Hz), 8,05-8,3 (1H, m), 9,85-10,2 (1H, m).	Hydroclorua
819	-CH3	-F	-H	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 0,98-1,20 (2H, m), 1,3-1,43 (1H, m), 1,50 (3H, s), 1,51 (3H, s), 1,56-1,69 (1H, m), 1,69-1,87 (2H, m), 1,87-2,08 (2H, m), 2,20 (3H, d, J = 2,3Hz), 2,67 (1H, d, J = 12,6Hz), 3,15-3,25 (1H, m), 3,36 (1H, d, J = 12,8Hz), 3,8-4,0 (1H, m), 6,83 (1H, d, J = 8,0Hz), 6,89 (1H, dd, J = 8,8, 8,8Hz), 7,16 (1H, dd, J = 7,9, 15,2Hz), 8,08 (1H, br), 9,7-10,0 (1H, m).	Hydroclorua
820	-H	-F	-CH3	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 1,14-1,41 (9H, m), 1,50-1,90 (5H, m), 2,09 (3H, d, J = 0,8Hz), 2,78 (1H, d, J = 12,8Hz), 3,19 (1H, d, J = 12,8Hz), 3,5-3,6 (1H,	Fumarat

						m), 3,8-3,9 (1H, m), 6,52 (2H, s), 6,60-6,71 (2H, m), 7,05 (1H, dd, J = 8,9, 8,9Hz).	
821	-H	-Cl	-CH3	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 1,15-1,40 (9H, m), 1,5-1,9 (5H, m), 2,19 (3H, d, J = 0,8Hz), 2,78 (1H, d, J = 12,7Hz), 3,18 (1H, d, J = 12,7Hz), 3,5-3,6 (1H, m), 3,8-3,9 (1H, m), 6,54 (2H, s), 6,80 (1H, dd, J = 2,6, 8,5Hz), 6,90 (1H, d, J = 2,6Hz), 7,13 (1H, d, J = 8,5Hz).	Fumarat
822	-H	-Cl	-H	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 1,12-1,21 (4H, m), 1,22 (3H, s), 1,24- 1,37 (2H, m), 1,45-1,77 (4H, m), 1,77-1,92 (1H, m), 2,72 (1H, d, J = 12,5Hz), 3,18 (1H, d, J = 12,4Hz), 3,40 (1H, brs), 3,75-3,85 (1H, m), 6,50 (1H, s), 6,67 (1H, dd, J = 1,6, 7,7Hz), 6,8-6,9 (2H, m), 7,16 (1H, dd, J = 8,1, 8,1Hz).	1/2 Fumarat
823	-CH3	-OCH3	-H	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 1,0-1,17 (2H, m), 1,29-1,43 (1H, m), 1,48 (3H, s), 1,51 (3H, s), 1,56-2,05 (5H, m), 2,12 (3H, s), 2,62 (1H, d, J = 12,6Hz), 3,05-3,2 (1H, m), 3,3-3,4 (1H, m), 3,76 (3H, s), 3,85- 3,95 (1H, m), 6,61 (1H, d, J = 7,9Hz), 6,72 (1H, d, J = 8,2Hz), 7,10 (1H, dd, J = 8,1, 8,1Hz), 7,99 (1H, br), 9,5-9,8 (1H, m).	Hydroclorua
824	-H	-H	-OCHF2	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 1,21-1,36 (2H, m), 1,36-1,46 (4H, m),	2 Hydroclorua

						1,52 (3H, s), 1,63-1,92 (4H, m), 1,93-2,09 (1H, m), 2,94 (1H, d, J = 13,4Hz), 3,33 (1H, d, J = 13,3Hz), 3,5-4,4 (2H, m), 6,84-7,26 (5H, m), 8,13 (1H, br), 9,84 (1H, br).	
825	-H	-H	-OCF ₃	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,26-1,48 (6H, m), 1,50 (3H, s), 1,63-1,92 (4H, m), 1,92-2,06 (1H, m), 2,96 (1H, d, J = 13,6Hz), 3,44 (1H, d, J = 13,5Hz), 3,72-3,83 (1H, m), 3,98-4,09 (1H, m), 6,96-7,07 (2H, m), 7,15-7,27 (2H, m), 8,08 (1H, br), 9,67 (1H, br).	Hydrochlorua
826	-H	-Cl	-CN	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,10 (3H, s), 1,15-1,25 (4H, m), 1,25-1,45 (2H, m), 1,45-1,75 (4H, m), 1,85-2,0 (1H, m), 2,75 (1H, d, J = 13,0Hz), 2,9-3,85 (4H, m), 3,85-3,95 (1H, m), 6,56 (1H, s), 6,94 (1H, dd, J = 2,5, 9,1Hz), 7,09 (1H, d, J = 2,4Hz), 7,59 (1H, d, J = 9,0Hz).	1/2 Fumarat
827	-H	-F	-OCF ₃	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,28-1,46 (6H, m), 1,51 (3H, s), 1,63-2,10 (5H, m), 2,97 (1H, d, J = 13,8Hz), 3,54 (1H, d, J = 13,8Hz), 3,65-3,8 (1H, m), 4,0-4,15 (1H, m), 6,81 (1H, dd, J = 2,2, 9,2Hz), 7,05 (1H, dd, J = 2,9, 14,4Hz), 7,34 (1H, dd, J = 9,2, 9,2Hz), 8,22 (1H, br), 9,89 (1H, br).	Hydrochlorua
828	-H	-F	-OCHF ₂	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,09-1,37 (9H, m), 1,44-1,73 (4H, m),	1/2 Fumarat

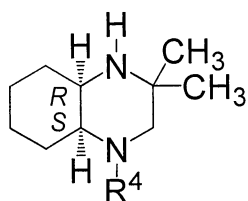
						1,75-1,90 (1H, m), 2,66 (1H, d, J = 12,1Hz), 3,0-3,7 (4H, m), 3,7-3,8 (1H, m), 6,52 (1H, m), 6,67 (1H, d, J = 2,1, 9,3Hz), 6,80-7,22 (3H, m)	
829	-H	-Cl	-OCHF2	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 1,08-1,37 (9H, m), 1,43-1,59 (1H, m), 1,59-1,74 (3H, m), 1,75-1,90 (1H, m), 2,69 (1H, d, J = 12,3Hz), 2,8-4,2 (5H, m), 6,52 (1H, s), 6,82-7,25 (4H, m).	1/2 Fumarat
830	-H	-OCHF2	-H	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 1,13-1,41 (9H, m), 1,46-1,93 (5H, m), 2,75 (1H, d, J = 12,5Hz), 2,8-4,4 (6H, m), 6,46 (1H, d, J = 8,1Hz), 6,54 (2H, s), 6,62 (1H, s), 6,76 (1H, dd, J = 8,4Hz), 7,0-7,4 (2H, m).	1/2 Fumarat
831	-H	-OCHF2	-F	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 1,02-1,36 (9H, m), 1,44-1,59 (1H, m), 1,59-1,74 (3H, m), 1,74-1,87 (1H, m), 2,65-4,5 (6H, m), 6,52 (1H, s), 6,7-6,8 (2H, m), 7,0-7,4 (2H, m).	1/2 Fumarat
832	-H	-OCHF2	-Cl	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 1,10-1,38 (9H, m), 1,44-1,74 (4H, m), 1,76-1,91 (1H, m), 2,69 (1H, d, J = 12,3Hz), 2,75-4,2 (5H, m), 6,53 (1H, s), 6,75-6,85 (2H, m), 7,05-7,45 (2H, m).	1/2 Fumarat
833	-H	-CN	-OCHF2	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 1,06-1,23 (7H, m), 1,23-1,37 (2H, m), 1,43-1,74 (4H, m), 1,75-1,89 (1H, m), 2,69	1/2 Fumarat

						(1H, d, J = 12,4Hz), 2,9-3,75 (4H, m), 3,75- 3,85 (1H, m), 6,53 (1H, s), 7,00-7,41 (4H, m).	
834	-H	- OCHF2	-OCHF2	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 1,1-1,4 (9H, m), 1,44-1,76 (4H, m), 1,76-1,90 (1H, m), 2,69 (1H, d, J = 12,2Hz), 2,8-4,25 (5H, m), 6,52 (1H, s), 6,71-7,36 (5H, m).	1/2 Fumarat
835	-H	-F	-OCHF2	-F	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 1,08-1,23 (7H, m), 1,24-1,40 (2H, m), 1,43-1,73 (4H, m), 1,76-1,91 (1H, m), 2,67 (1H, d, J = 12,5Hz), 2,8-4,2 (5H, m), 6,53 (1H, s), 6,67-6,77 (2H, m), 7,05 (1H, t, J = 72,9Hz).	1/2 Fumarat
836	-H	-H	- OCH2C HF2	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 1,13-1,31 (2H, m), 1,32-1,47 (4H, m), 1,53 (3H, s), 1,61-1,90 (4H m), 1,97-2,12 (1H, m), 2,93 (1H, d, J = 13,1Hz), 3,15 (1H, d, J = 13,1Hz), 3,69-3,81 (1H, m), 3,83-3,93 (1H, m), 4,10-4,46 (3H, m), 6,12-6,53 (1H, m), 6,90 (4H, s), 8,0-8,25 (1H, m), 9,9-10,1 (1H, m).	2 Hydroclorua
837	-H	-F	- OCH2C HF2	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 1,20-1,46 (6H, m), 1,51 (3H, s), 1,63- 1,91 (4H m), 1,93-2,10 (1H, m), 2,91 (1H, d, J = 13,4Hz), 3,29 (1H, d, J = 13,2Hz), 3,67-3,80 (1H, m), 3,89-4,01 (1H, m), 4,20-4,35 (2H, m), 6,18-6,51 (1H, m), 6,68 (1H, dd, J = 1,8, 9,1Hz), 6,91 (1H, dd, J = 2,9, 14,7Hz), 7,10	Hydroclorua

						(1H, dd, J = 9,5, 9,5Hz), 8,05-8,2 (1H, m), 9,75-9,95 (1H, m).	
838	-H	-CH3	-OCHF2	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 1,06-1,15 (1H, m), 1,15-1,38 (8H, m), 1,42-1,88 (5H, m), 2,17 (3H, s), 2,68 (1H, d, J = 11,9Hz), 3,04 (1H, d, J = 12,1Hz), 3,1-3,9 (4H, m), 6,50 (1H, s), 6,71 (1H, dd, J = 2,9, 8,9Hz), 6,75-7,16 (3H, m).	1/2 Fumarat
839	-H	-OCH3	-OCHF2	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 1,10-1,39 (9H, m), 1,45-1,90 (5H, m), 2,72 (1H, d, J = 12,2Hz), 2,95-4,1 (8H, m), 6,40 (1H, dd, J = 2,8, 8,9Hz), 6,50 (1H, s), 6,57 (1H, d, J = 2,7Hz), 6,63-7,03 (2H, m).	1/2 Fumarat
840	- OCHF2	-H	-H	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 0,94-1,14 (1H, m), 1,14-1,17 (1H, m), 1,18 (3H, s), 1,26 (3H, s), 1,29-1,55 (3H, m), 1,59-1,73 (3H, m), 1,76-1,90 (1H, m), 2,49 (1H, d, J = 11,2Hz), 3,04 (1H, d, J = 11,2Hz), 3,5-3,6 (2H, m), 6,55 (1H, dd, J = 70,2, 81,4Hz), 6,91 (1H, dd, J = 1,4, 8,0Hz), 6,93-6,99 (1H, m), 7,07-7,18 (2H, m)	-

Bảng 91

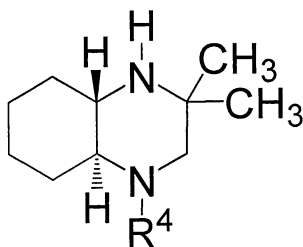
Cấu hình tuyệt đối



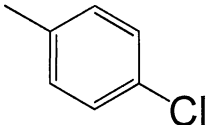
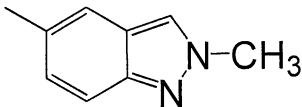
Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
841		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,95-1,15 (2H, m), 1,35-1,45 (1H, m), 1,51 (3H, s), 1,56 (3H, s), 1,6-2,05 (5H, m), 2,87 (1H, d, J = 12,8Hz), 3,3-3,4 (1H, m), 3,65-3,75 (1H, m), 4,1-4,2 (1H, m), 7,05 (1H, s), 7,35-7,45 (2H, m), 7,9-8,1 (3H, m), 9,5-9,7 (1H, m).	Hydroclorua
842		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,89-1,18 (5H, m), 1,25-1,74 (9H, m), 1,74-1,86 (1H, m), 2,19 (3H, d, J = 0,9Hz), 2,52 (1H, d, J = 11,2Hz), 2,93 (1H, d, J = 11,2Hz), 3,03-3,10 (1H, m), 3,47-3,52 (1H, m), 6,35 (1H, d, J = 3,3Hz), 6,84-6,88 (1H, m).	-

Bảng 92

Cấu hình tương đối

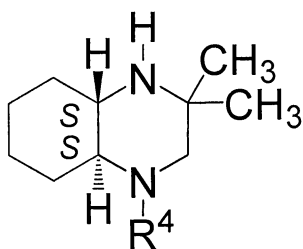


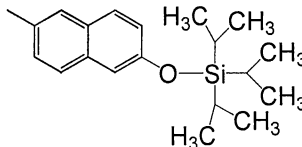
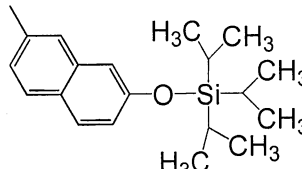
Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
-------	----------------	-----	------

843		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm 1,13-1,24 (1H, m), 1,25-1,36 (2H, m), 1,60-1,83 (3H, m), 1,64 (3H, s), 1,74 (3H, s), 1,89-2,02 (1H, m), 2,32-2,37 (1H, m), 2,80 (1H, d, $J = 12,5$ Hz), 3,12-3,16 (1H, m), 3,22-3,29 (1H, m), 3,36 (1H, d, $J = 12,5$ Hz), 7,19-7,22 (2H, m), 7,29-7,33 (2H, m), 9,52 (1H, brs), 9,81 (1H, brs)	Hydroclorua
844		$^1\text{H-NMR}$ (DMSO-d_6) δ ppm: 1,00-1,98 (13H, m), 1,98-2,28 (1H, br), 2,65-3,90 (4H, br), 4,18 (3H, s), 6,70-7,95 (3H, m), 8,22-8,60 (1H, br), 8,80-11,33 (3H, brm).	2 Hydroclorua

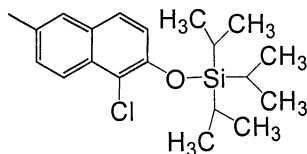
Bảng 93

Cấu hình tuyệt đối



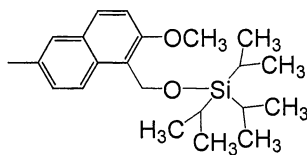
Ví dụ	R^4	NMR	Muối
845		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 1,03-1,17 (23H, m), 1,17-1,41 (6H, m), 1,43 (3H, s), 1,59-1,68 (1H, m), 1,68-1,80 (3H, m), 2,32-2,40 (1H, m), 2,68 (1H, d, $J = 11,3$ Hz), 2,78-2,85 (1H, m), 2,88 (1H, d, $J = 11,3$ Hz), 7,08 (1H, dd, $J = 2,4, 8,8$ Hz), 7,16 (1H, d, $J = 2,4$ Hz), 7,22 (1H, dd, $J = 2,1, 8,7$ Hz), 7,37 (1H, d, $J = 1,8$ Hz), 7,57-7,64 (2H, m).	-
846		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 0,82-1,17 (23H, m), 1,20-1,46 (9H, m), 1,60-1,70 (1H, m), 1,70-1,85 (3H, m), 2,35-2,45 (1H, m), 2,69 (1H, d, $J = 11,3$ Hz), 2,77-2,86 (1H, m), 2,91 (1H, d, $J = 11,3$ Hz), 7,02 (1H, dd, $J = 2,4, 8,8$ Hz), 7,09-7,15 (2H, m), 7,27 (1H, d, $J = 1,9$ Hz), 7,60-7,68 (2H, m).	-

847



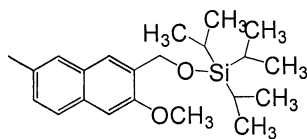
¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 0,97-1,41 (29H, m), 1,43 (3H, s), 1,60-1,70 (1H, m), 1,70-1,80 (3H, m), 2,35-2,43 (1H, m), 2,69 (1H, d, J = 11,3 Hz), 2,78-2,87 (1H, m), 2,89 (1H, d, J = 11,3 Hz), 7,11 (1H, d, J = 8,9 Hz), 7,34 (1H, dd, J = 2,1, 9,0 Hz), 7,37 (1H, d, J = 1,9 Hz), 7,53 (1H, d, J = 8,9 Hz), 8,10 (1H, d, J = 8,9 Hz).

848



¹H-NMR (CDCl₃) δppm :0,74-1,42 (29H, m), 1,44 (3H, s), 1,58-1,83 (4H, m), 2,35-2,43 (1H, m), 2,68 (1H, d, J = 11,3 Hz), 2,78-2,87 (1H, m), 2,91 (1H, d, J = 11,3 Hz), 3,91 (3H, s), 5,19-5,27 (2H, m), 7,21 (1H, d, J = 9,1 Hz), 7,29 (1H, d, J = 2,2, 9,1 Hz), 7,37 (1H, d, J = 2,1 Hz), 7,69 (1H, d, J = 9,0 Hz), 8,16 (1H, d, J = 9,1 Hz).

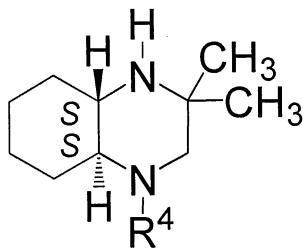
849



¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 0,96-1,19 (23H, m), 1,19-1,42 (6H, m), 1,44 (3H, s), 1,57-1,78 (4H, m), 2,32-2,41 (1H, m), 2,71 (1H, d, J = 11,3 Hz), 2,77-2,86 (1H, m), 2,87 (1H, d, J = 11,3 Hz), 3,89 (3H, s), 4,94 (2H, d, J = 1,1 Hz), 7,02 (1H, s), 7,22 (1H, dd, J = 2,0, 8,6 Hz), 7,44 (1H, d, J = 1,8 Hz), 7,64 (1H, d, J = 8,6 Hz), 7,88 (1H, s).

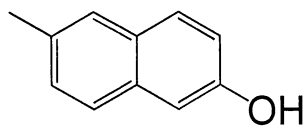
Bảng 94

Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
-------	----------------	-----	------

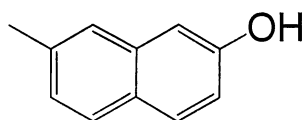
850



¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 0,88-1,03 (4H, m), 1,11-1,37 (6H, m), 1,45-1,68 (5H, m), 2,26-2,35 (1H, m), 2,58 (1H, d, J = 10,9 Hz), 2,62-2,70 (1H, m), 2,73 (1H, d, J = 10,9 Hz), 7,02 (1H, dd, J = 2,4, 8,7 Hz), 7,05 (1H, d, J = 2,4 Hz), 7,16 (1H, dd, J = 2,1, 8,7 Hz), 7,37 (1H, d, J = 1,8 Hz), 7,58 (1H, d, J = 8,8 Hz), 7,67 (1H, d, J = 8,9 Hz), 9,57 (1H, brs).

-

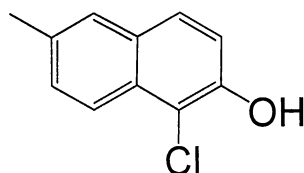
851



¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 0,88-1,02 (4H, m), 1,10-1,37 (6H, m), 1,44-1,74 (5H, m), 2,32-2,41 (1H, m), 2,60 (1H, d, J = 11,1 Hz), 2,63-2,72 (1H, m), 2,80 (1H, d, J = 11,1 Hz), 6,94 (1H, dd, J = 2,4, 8,8 Hz), 7,00 (1H, dd, J = 2,0, 8,8 Hz), 7,02 (1H, d, J = 2,4 Hz), 7,21 (1H, d, J = 1,8 Hz), 7,64 (2H, d, J = 8,7 Hz), 9,63 (1H, s).

-

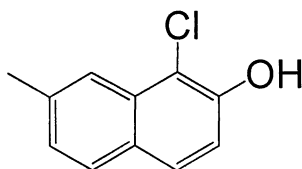
852



¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 0,90-1,08 (4H, m), 1,15-1,40 (6H, m), 1,51-1,73 (4H, m), 2,35-2,47 (1H, m), 2,65 (1H, d, J = 11,2 Hz), 2,70-2,85 (2H, m), 2,90-3,75 (1H, br), 7,23 (1H, d, J = 8,9 Hz), 7,34 (1H, dd, J = 2,1, 9,0 Hz), 7,46 (1H, d, J = 2,0 Hz), 7,70 (1H, d, J = 8,9 Hz), 7,92 (1H, d, J = 9,0 Hz), 9,05-11,25 (1H, br).

-

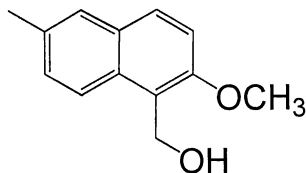
853



¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 0,95-1,10 (4H, m), 1,17-1,40 (6H, m), 1,56-1,80 (4H, m), 2,49-2,60 (1H, m), 2,73-2,87 (2H, m), 2,92 (1H, d, J = 11,5 Hz), 3,18-3,46 (1H, br), 7,10-7,18 (2H, m), 7,50 (1H, d, J = 2,0 Hz), 7,67 (1H, d, J = 8,8 Hz), 7,75 (1H, d, J = 8,7 Hz), 9,95-10,75 (1H, br).

-

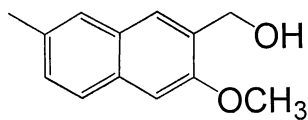
854



¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 0,90-1,07 (4H, m), 1,13-1,37 (6H, m), 1,47-1,70 (5H, m), 2,30-2,40 (1H, m), 2,61 (1H, d, J = 11,0 Hz), 2,65-2,74 (1H, m), 2,77 (1H, d, J = 11,0 Hz), 3,88 (3H, s), 4,82 (1H, t, J = 5,1 Hz), 4,89 (2H, d, J = 5,1 Hz), 7,27 (1H, dd, J = 2,1, 9,1 Hz), 7,35 (1H, d, J = 9,1 Hz), 7,42 (1H, d, J = 2,1 Hz), 7,80 (1H, d, J = 9,1 Hz), 8,03 (1H, d, J = 9,1 Hz).

-

855



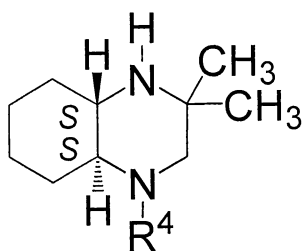
¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 0,95-1,10 (1H, m), 1,10-1,50 (9H, m), 1,53-1,73 (3H, m), 1,77-1,87 (1H, m), 2,58-2,70 (1H, m), 2,85 (2H, s), 2,89-3,00 (1H, m), 3,87 (3H, s), 4,61 (2H, s), 6,46 (1H, s).

1/2 Fumarat

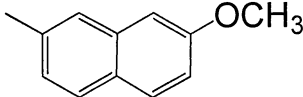
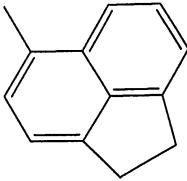
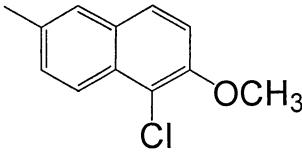
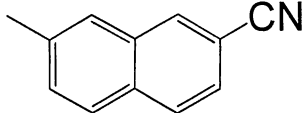
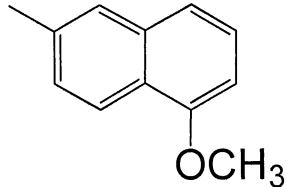
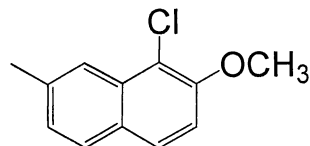
7,20 (1H, dd, $J = 2,0, 8,7$ Hz), 7,22 (1H, s), 7,46 (1H, d, $J = 1,6$ Hz), 7,73 (1H, d, $J = 8,7$ Hz), 7,79 (1H, s). (3H không được phát hiện)

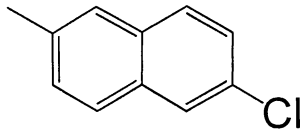
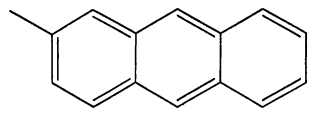
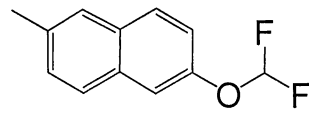
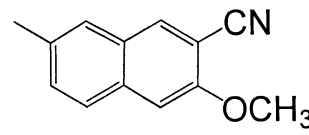
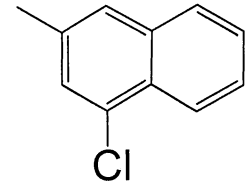
Bảng 95

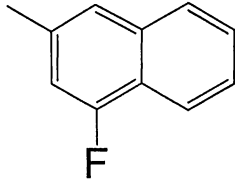
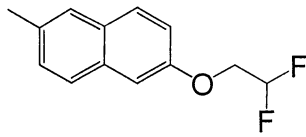
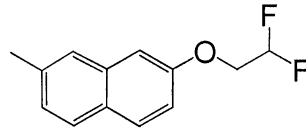
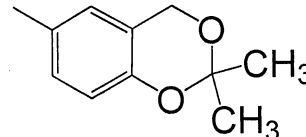
Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
856		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,91-1,05 (1H, m), 1,08 (3H, s), 1,12-1,62 (9H, m), 1,68-1,78 (2H, m), 2,42-2,50 (1H, m), 2,62 (1H, d, $J = 11,3$ Hz), 2,75 (1H, d, $J = 11,3$ Hz), 2,91-3,00 (1H, m), 3,98 (3H, s), 6,78 (1H, d, $J = 8,1$ Hz), 7,20 (1H, d, $J = 8,1$ Hz), 7,43-7,54 (2H, m), 8,21-8,26 (1H, m), 8,50-8,54 (1H, m).	-
857		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,93-1,22 (2H, m), 1,26-1,44 (5H, m), 1,44-1,54 (1H, m), 1,56-1,77 (5H, m), 1,99-2,08 (1H, m), 2,62 (3H, s), 2,76 (1H, d, $J = 12,4$ Hz), 2,98-3,08 (2H, m), 3,33-3,50 (1H, m), 7,28 (1H, d, $J = 7,5$ Hz), 7,38 (1H, d, $J = 7,5$ Hz), 7,54-7,61 (2H, m), 7,97-8,03 (1H, m), 8,43-8,52 (1H, m), 9,10-9,25 (1H, br), 9,62-9,77 (1H, br).	Hydrochlorua
858		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,00-1,30 (2H, m), 1,30-1,45 (4H, m), 1,45-1,62 (2H, m), 1,62-1,81 (5H, m), 2,00-2,13 (1H, m), 2,91 (1H, d, $J = 12,6$ Hz), 3,05-3,20 (2H, m), 3,41-3,57 (1H, m), 3,75-4,30 (1H, br), 7,61-7,77 (5H, m), 7,98-8,05 (1H, m), 8,54-8,61 (1H, m), 8,77-8,88 (2H, m), 9,19-9,35 (1H, m), 9,669,81	2 Hydrochlorua

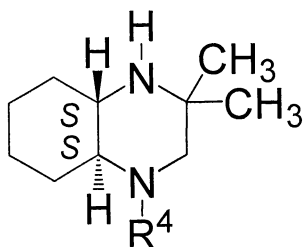
		(1H, m).	
859		¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 0,90-1,45 (6H, m), 1,53-1,80 (7H, m), 1,97-2,12 (1H, m), 2,83-3,40 (4H, m), 3,86 (3H, s), 7,05-7,25 (2H, m), 7,32 (1H, d, J = 2,4 Hz), 7,42-7,68 (1H, br), 7,75-7,87 (2H, m), 8,25-9,55 (2H, br), 9,55-10,02 (1H, br).	2 Hydrochlorua
860		¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 0,85-1,00 (1H, m), 1,10-1,70 (12H, m), 1,75-1,86 (1H, m), 2,65-2,80 (3H, m), 2,99-3,10 (1H, m), 3,25-3,43 (4H, m), 6,46 (1H, s), 7,20-7,34 (3H, m), 7,45 (1H, dd, J = 7,0, 8,2 Hz), 7,88 (1H, d, J = 8,2 Hz), 8,07-9,40 (1H, br).	1/2 Fumarat
861		¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,04-1,43 (6H, m), 1,54-1,80 (7H, m), 1,97-2,10 (1H, m), 2,86-3,07 (2H, m), 3,07-3,30 (2H, m), 3,98 (3H, s), 7,43 (1H, d, J = 9,1 Hz), 7,55 (1H, d, J = 9,2 Hz), 7,66 (1H, brs), 7,95 (1H, d, J = 9,1 Hz), 8,04 (1H, d, J = 9,1 Hz), 8,11-8,95 (1H, br), 9,08-9,35 (1H, m), 9,60-9,86 (1H, m).	2 Hydrochlorua
862		¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 0,84-0,97 (1H, br), 1,03-1,17 (4H, m), 1,22-1,46 (6H, m), 1,61-1,74 (1H, m), 1,74-1,88 (3H, m), 2,45-2,55 (1H, m), 2,76 (1H, d, J = 11,5 Hz), 2,82-2,90 (1H, m), 2,98 (1H, d, J = 11,5 Hz), 7,38-7,43 (2H, m), 7,50 (1H, dd, J = 1,6, 8,4 Hz), 7,77-7,86 (2H, m), 8,12 (1H, s).	-
863		¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,05-1,43 (6H, m), 1,54-1,80 (7H, m), 1,98-2,10 (1H, m), 2,90-3,32 (4H, m), 3,95 (3H, s), 6,91 (1H, d, J = 7,2 Hz), 7,24-7,36 (1H, br), 7,38-7,49 (2H, m), 7,50-7,68 (1H, br), 8,11 (1H, d, J = 8,9 Hz), 9,00-9,45 (1H, br), 9,55-9,98 (1H, br), 10,50-12,10 (1H, br).	2 Hydrochlorua
864		¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,10-1,47 (6H, m), 1,54-1,80 (7H, m), 2,01-2,14 (1H, m), 2,95-3,37 (4H, m), 4,00 (3H, s), 7,30 (1H, d, J = 8,3 Hz), 7,51 (1H, d, J = 9,1 Hz), 7,73 (1H, brs), 7,95 (2H, d, J = 9,1 Hz), 9,39 (1H, brs), 9,90 (1H, brs),	2 Hydrochlorua

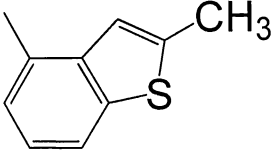
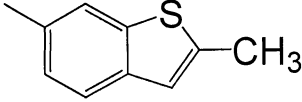
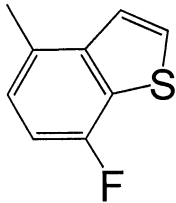
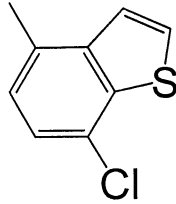
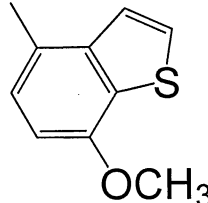
		11,80 (1H, brs).
865		1H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,03-1,44 (6H, m), 1,53-1,79 (7H, m), 1,97-2,09 (1H, m), 2,92-3,06 (2H, m), 3,06-3,16 (1H, m), 3,16-3,30 (1H, m), 6,24-7,14 (1H, m), 7,36 (1H, dd, J = 2,1, 8,8 Hz), 7,49 (1H, dd, J = 2,1, 8,8 Hz), 7,64 (1H, brs), 7,88 (1H, d, J = 8,8 Hz), 7,94 (1H, d, J = 8,8 Hz), 8,00 (1H, d, J = 2,1 Hz), 9,10-9,39 (1H, brs), 9,63-9,87 (1H, brs). 2 Hydrochlorua
866		1H-NMR (CDCl₃) δppm: 0,75-1,19 (5H, m), 1,24-1,43 (3H, m), 1,45 (3H, s), 1,64-1,73 (1H, m), 1,73-1,82 (2H, m), 1,90-2,00 (1H, m), 2,45-2,54 (1H, m), 2,72 (1H, d, J = 11,5 Hz), 2,83-2,92 (1H, m), 3,02 (1H, d, J = 11,5 Hz), 7,26 (1H, dd, J = 2,1, 9,0 Hz), 7,37-7,47 (2H, m), 7,50 (1H, brs), 7,91 (1H, d, J = 9,0 Hz), 7,94-7,99 (2H, m), 8,30 (1H, s), 8,34 (1H, s). -
867		1H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,15-1,45 (6H, m), 1,53-1,80 (7H, m), 1,97-2,10 (1H, m), 2,94-3,09 (2H, m), 3,09-3,18 (1H, m), 3,18-3,31 (1H, m), 4,00-4,62 (1H, br), 7,16 (0,25H, s), 7,32-7,40 (2,5H, m), 7,53 (0,25H, s), 7,61-7,72 (2H, m), 7,90 (1H, d, J = 8,8 Hz), 7,98 (1H, d, J = 9,0 Hz), 9,10-9,45 (1H, br), 9,61-9,90 (1H, br). 2 Hydrochlorua
868		1H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,05-1,47 (6H, m), 1,55-1,80 (7H, m), 1,99-2,10 (1H, m), 2,41-3,05 (2H, m), 3,05-3,16 (1H, m), 3,16-3,30 (1H, m), 3,75-4,60 (4H, m), 7,45 (1H, dd, J = 2,0, 8,8 Hz), 7,57 (1H, s), 7,67 (1H, s), 7,90 (1H, d, J = 8,9 Hz), 8,48 (1H, s), 9,10-9,40 (1H, br), 9,61-9,90 (1H, br). 3 Hydrochlorua
869		1H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,05-1,45 (6H, m), 1,54-1,80 (7H, m), 1,96-2,07 (1H, m), 2,93-3,04 (1H, m), 3,04-3,16 (2H, m), 3,18-3,32 (1H, m), 4,23-4,51 (1H, br), 7,46-7,50 (1H, m), 7,58-7,67 (3H, m), 7,97-8,04 (1H, m), 8,08-8,14 (1H, m), 9,03-9,25 (1H, br), 9,51-9,75 (1H, br). 2 Hydrochlorua

870		¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,08-1,45 (6H, m), 1,52-1,80 (7H, m), 1,99-2,10 (1H, m), 2,96-3,17 (3H, m), 3,17-3,30 (1H, m), 4,45-4,55 (1H, br), 7,16 (1H, dd, J = 1,7, 12,3 Hz), 7,48 (1H, s), 7,51-7,64 (2H, m), 7,98 (2H, d, J = 8,2 Hz), 9,15-9,36 (1H, br), 9,70-9,90 (1H, br).	2 Hydrochlorua
871		¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 1,00-1,15 (4H, m), 1,15-1,52 (7H, m), 1,57-1,68 (1H, m), 1,68-1,79 (3H, m), 2,34-2,42 (1H, m), 2,69 (1H, d, J = 11,3 Hz), 2,77-2,86 (1H, m), 2,88 (1H, d, J = 11,3 Hz), 4,28 (2H, dt, J = 4,1, 13,1 Hz), 6,15 (1H, tt, J = 4,1, 55,2 Hz), 7,10 (1H, d, J = 2,5 Hz), 7,14 (1H, dd, J = 2,6, 8,9 Hz), 7,27 (1H, dd, J = 2,1, 8,7 Hz), 7,41 (1H, d, J = 2,0 Hz), 7,63-7,72 (2H, m).	-
872		¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 1,00-1,15 (4H, m), 1,20-1,70 (8H, m), 1,70-1,88 (3H, m), 2,39-2,48 (1H, m), 2,70 (1H, d, J = 11,4 Hz), 2,80-2,89 (1H, m), 2,93 (1H, d, J = 11,4 Hz), 4,29 (2H, dt, J = 4,2, 13,1 Hz), 6,15 (1H, tt, J = 4,1, 55,2 Hz), 7,03-7,11 (2H, m), 7,16 (1H, dd, J = 2,1, 8,7 Hz), 7,33 (1H, d, J = 2,0 Hz), 7,65-7,74 (2H, m).	-
873		¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 0,90-1,06 (1H, m), 1,06-1,64 (17H, m), 1,64-1,74 (1H, m), 1,80-1,83 (1H, m), 2,50-2,62 (1H, m), 2,71 (1H, d, J = 11,9 Hz), 2,86 (1H, d, J = 11,9 Hz), 2,92-3,02 (1H, m), 4,78 (2H, s), 6,48 (2H, s), 6,73 (1H, d, J = 8,6 Hz), 6,83 (1H, d, J = 2,2 Hz), 6,91 (1H, dd, J = 2,3, 8,6 Hz), 9,37-11,61 (1H, br).	Fumarat

Bảng 96

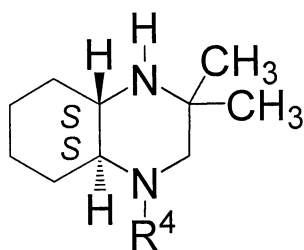
Cấu hình tuyệt đối



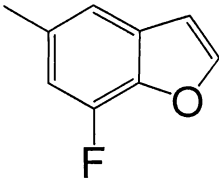
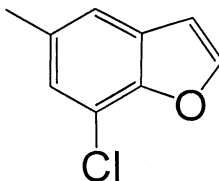
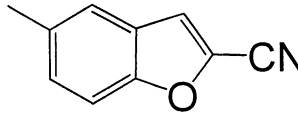
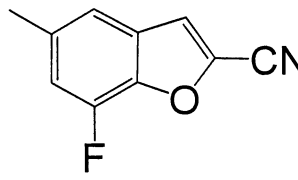
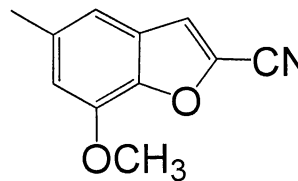
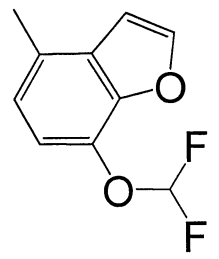
Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
874		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,96-1,10 (1H, m), 1,10-1,25 (1H, m), 1,26-1,41 (4H, m), 1,47-1,78 (7H, m), 1,94-2,05 (1H, m), 2,56 (3H, s), 2,84 (1H, d, J = 12,4 Hz), 2,90-3,02 (2H, m), 3,23-3,35 (1H, m), 7,15 (1H, d, J = 7,6 Hz), 7,22-7,33 (2H, m), 7,68 (1H, d, J = 7,9 Hz), 8,91-9,09 (1H, brm), 9,54-9,70 (1H, brm).	Hydroclorua
875		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm (80°C): 1,03-1,46 (6H, m), 1,51-1,78 (7H, m), 2,01-2,11 (1H, m), 2,53 (3H, s), 2,88 (1H, d, J = 12,4 Hz), 2,97-3,08 (1H, m), 3,10-3,25 (2H, m), 7,05 (1H, s), 7,13 (1H, d, J = 8,4 Hz), 7,60-7,68 (2H, m), 9,20 (1H, brs), 9,70 (1H, brs).	Hydroclorua
876		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,95-1,40 (6H, m), 1,40-1,78 (7H, m), 1,95-2,05 (1H, m), 2,85 (1H, d, J = 12,5 Hz), 2,90-3,00 (1H, m), 3,03 (1H, d, J = 12,5 Hz), 3,28-3,44 (1H, m), 7,26 (2H, d, J = 7,0 Hz), 7,64 (1H, dd, J = 4,0, 5,2 Hz), 7,86 (1H, d, J = 5,4 Hz), 9,07 (1H, brs), 9,64 (1H, brs).	Hydroclorua
877		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,97-1,45 (6H, m), 1,45-1,80 (7H, m), 1,94-2,09 (1H, m), 2,88 (1H, d, J = 12,5 Hz), 2,93-3,05 (2H, m), 3,26-3,45 (1H, m), 7,28 (1H, d, J = 8,2 Hz), 7,50 (1H, d, J = 8,2 Hz), 7,64 (1H, d, J = 5,4 Hz), 7,88 (1H, d, J = 5,4 Hz), 9,06 (1H, brs), 9,59 (1H, brs).	Hydroclorua
878		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,90-1,79 (13H, m), 1,35-2,06 (1H, m), 2,75-3,05 (4H, m), 3,94 (3H, s), 6,94 (1H, d, J = 7,9 Hz), 7,18 (1H, d, J = 7,9 Hz), 7,55 (1H, d, J = 5,4 Hz), 7,71 (1H, d, J = 5,4 Hz), 8,80 (1H, brs), 9,31 (1H, brs).	Hydroclorua

Bảng 97

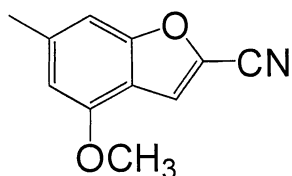
Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
879		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,97-1,10 (1H, m), 1,10-1,41 (5H, m), 1,50-1,78 (7H, m), 1,94-2,05 (1H, m), 2,44 (3H, s), 2,75-3,09 (3H, m), 3,09-3,30 (1H, m), 6,58 (1H, brs), 6,98 (1H, d, J = 7,2 Hz), 7,19 (1H, t, J = 7,8 Hz), 7,31 (1H, d, J = 7,8 Hz), 9,00 (1H, brs), 9,59 (1H, brs).	Hydroclorua
880		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,00-1,43 (6H, m), 1,44-1,78 (7H, m), 1,90-2,07 (1H, m), 2,42 (3H, d, J = 0,9 Hz), 2,75-3,30 (4H, m), 3,48-4,50 (1H, br), 6,54 (1H, s), 7,04 (1H, brs), 7,30 (1H, brs), 7,48 (1H, d, J = 8,6 Hz), 9,11 (1H, brs), 9,70 (1H, brs).	2 Hydroclorua
881		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,99-1,15 (1H, m), 1,15-1,42 (5H, m), 1,47-1,77 (7H, m), 1,93-2,05 (1H, m), 2,75-3,18 (3H, m), 3,27 (1H, brs), 7,08 (1H, brs), 7,22 (1H, brs), 8,14 (1H, s), 9,00 (1H, brs), 9,67 (1H, brs).	Hydroclorua
882		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,75-1,14 (5H, m), 1,14-1,40 (3H, m), 1,42 (3H, s), 1,56-1,68 (2H, m), 1,68-1,79 (2H, m), 2,20-2,30 (1H, m), 2,65 (1H, d, J = 11,1 Hz), 2,74-2,85 (2H, m), 3,99 (3H, s), 6,61 (1H, d, J = 1,7 Hz), 6,70 (1H, d, J = 2,1 Hz), 6,95 (1H, d, J = 1,7 Hz), 7,59 (1H, d, J = 2,1 Hz).	-

883		1H-NMR (DMSO-d6) δ ppm: 1,01-1,42 (6H, m), 1,49-1,68 (6H, m), 1,68-1,78 (1H, m), 1,95-2,05 (1H, m), 2,80-2,95 (2H, m), 3,01-3,10 (1H, m), 3,10-3,24 (1H, m), 6,50-7,80 (4H, m), 8,10 (1H, d, $J = 2,1$ Hz), 9,13 (1H, brs), 9,71 (1H, brs).	2 Hydrochlorua
884		1H-NMR (DMSO-d6) δ ppm: 1,00-1,41 (6H, m), 1,45-1,67 (6H, m), 1,67-1,77 (1H, m), 1,92-2,03 (1H, m), 2,80-2,94 (2H, m), 3,01-3,10 (1H, m), 3,10-3,25 (1H, m), 3,65-4,00 (1H, br), 7,05 (1H, d, $J = 2,1$ Hz), 7,18 (1H, d, $J = 1,7$ Hz), 7,43 (1H, d, $J = 1,7$ Hz), 8,12 (1H, d, $J = 2,1$ Hz), 9,10 (1H, brs), 9,60 (1H, brs).	2 Hydrochlorua
885		1H-NMR (DMSO-d6) δ ppm: 0,92-1,07 (1H, m), 1,07-1,88 (13H, m), 2,60-3,01 (4H, m), 3,10-4,92 (2H, br), 6,45 (3H, s), 7,35 (1H, dd, $J = 2,1, 8,9$ Hz), 7,54 (1H, d, $J = 2,0$ Hz), 7,68 (1H, d, $J = 8,9$ Hz), 8,04 (1H, d, $J = 0,8$ Hz).	Fumarat
886		1H-NMR (CDCl3) δ ppm: 0,96-1,12 (4H, m), 1,16-1,44 (6H, m), 1,55-1,80 (5H, m), 2,20-2,30 (1H, m), 2,62 (1H, d, $J = 11,2$ Hz), 2,75-2,85 (2H, m), 7,04 (1H, dd, $J = 1,8, 11,8$ Hz), 7,15 (1H, d, $J = 1,8$ Hz), 7,42 (1H, d, $J = 2,5$ Hz).	-
887		1H-NMR (CDCl3) δ ppm: 0,96-1,15 (4H, m), 1,15-1,39 (3H, m), 1,42 (3H, s), 1,55-1,69 (3H, m), 1,69-1,80 (2H, m), 2,23-2,34 (1H, m), 2,65 (1H, d, $J = 11,1$ Hz), 2,75-2,85 (2H, m), 4,01 (3H, s), 6,76 (1H, d, $J = 1,7$ Hz), 6,97 (1H, d, $J = 1,7$ Hz), 7,38 (1H, s).	-
888		1H-NMR (DMSO-d6) δ ppm: 0,99-1,42 (6H, m), 1,50-1,78 (7H, m), 1,72-2,05 (1H, m), 2,75-3,11 (3H, m), 3,16-3,40 (1H, br), 4,95-6,80 (1H, br), 6,95-7,11 (2H, m), 7,12-7,21 (1,25H, m), 7,33 (0,5H, s), 7,51 (0,25H, s), 8,08 (1H, brs), 9,05 (1H, brs), 9,64 (1H, brs).	2 Hydrochlorua

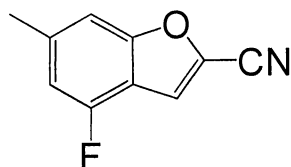
889



$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 0,99-1,12 (4H, m), 1,20-1,43 (7H, m), 1,62-1,83 (4H, m), 2,34-2,42 (1H, m), 2,70 (1H, d, $J = 11,5$ Hz), 2,76-2,85 (1H, m), 2,91 (1H, d, $J = 11,5$ Hz), 3,92 (3H, s), 6,45 (1H, d, $J = 1,4$ Hz), 6,80-6,83 (1H, m), 7,45 (1H, d, $J = 0,9$ Hz).

-

890

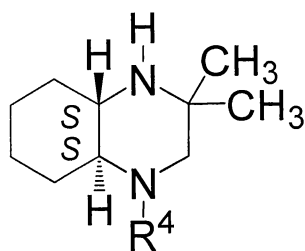


$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 1,01-1,15 (4H, m), 1,20-1,45 (7H, m), 1,67-1,90 (4H, m), 2,44-2,53 (1H, m), 2,77-2,87 (2H, m), 2,98 (1H, d, $J = 11,9$ Hz), 6,74 (1H, dd, $J = 1,6, 11,5$ Hz), 6,90-6,94 (1H, m), 7,43 (1H, d, $J = 0,9$ Hz).

-

Bảng 98

Cấu hình tuyệt đối



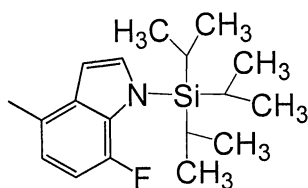
Ví dụ

 R^4

NMR

Muối

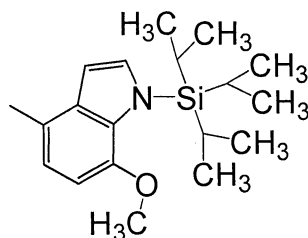
891



$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 0,83-1,43 (26H, m), 1,52 (3H, s), 1,55-1,91 (7H, m), 2,34-2,61 (2H, m), 2,80-3,00 (2H, m), 6,69-6,84 (3H, m), 7,24 (1H, d, $J = 3,2$ Hz).

-

892



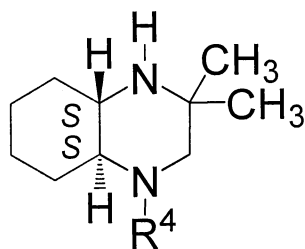
$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 0,76-1,40 (26H, m), 1,52 (3H, s), 1,56-1,95 (7H, m), 2,36-2,64 (2H, m), 2,80-3,01 (2H, m), 3,88 (3H, s), 6,54 (1H, d, $J = 8,1$ Hz), 6,69 (1H, d, $J = 3,1$ Hz), 6,73 (1H, d, $J = 8,1$ Hz), 7,24 (1H, d, $J = 3,1$ Hz).

-

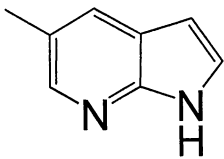
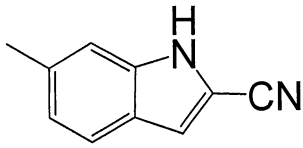
893		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,98-1,17 (23H, m), 1,17-1,40 (3H, m), 1,42 (3H, s), 1,55-1,66 (2H, m), 1,66-1,76 (2H, m), 1,84 (3H, quint, J = 7,5 Hz), 2,27-2,38 (1H, m), 2,72(1H, d, J = 11,2 Hz), 2,77-2,85 (2H, m), 6,47 (1H, d, J = 3,4 Hz), 7,27 (1H, d, J = 3,4 Hz), 7,61 (1H, d, J = 2,4 Hz), 8,06 (1H, d, J = 2,4 Hz).	-
894		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,90-1,40 (26H, m), 1,43 (3H, s), 1,59-1,80 (4H, m), 1,95-2,06 (3H, m), 2,30-2,39 (1H, m), 2,58 (1H, d, J = 11,3 Hz), 2,79-2,89 (2H, m), 6,98 (1H, d, J = 1,5, 8,5 Hz), 7,31 (1H, s), 7,34 (1H, d, J = 0,6 Hz), 7,52 (1H, d, J = 8,5 Hz).	-

Bảng 99

Cấu hình tuyệt đối

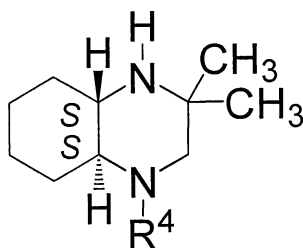


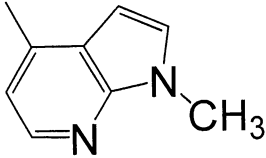
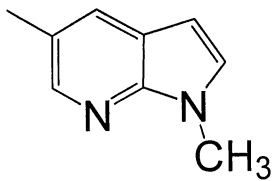
Ví dụ	R^4	NMR	Muối
895		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,77-0,92 (1H, m), 0,95 (3H, s), 1,08-1,35 (3H, m), 1,40 (3H, s), 1,47-1,58 (2H, m), 1,58-1,82 (3H, m), 2,27-2,48 (2H, m), 2,60-2,85 (2H, m), 6,47 (1H, brs), 6,58-6,65 (1H, m), 6,81 (1H, dd, J = 8,3, 10,9 Hz), 7,30 (1H, t, J = 2,6 Hz), 11,47 (1H, s).	-
896		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,77-0,99 (4H, m), 1,08-1,90 (11H, m), 2,21-2,46 (2H, m), 2,58-2,85 (2H, m), 3,86 (3H, s), 6,38 (1H, brs), 6,47-6,63 (2H, m), 7,13 (1H, t, J = 2,6 Hz), 11,07 (1H, s).	-

897		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,91-1,08 (1H,m), 1,08-1,60 (1H, m), 1,61-1,72(1H, m), 1,78-1,90 (1H, m), 2,60-2,71 (1H, m), 2,75 (1H, d, J = 11,7 Hz), 2,90-3,05 (2H, m), 6,39 (1H, dd, J = 1,8, 3,4 Hz), 6,47 (1H, s), 7,42-7,49 (1H,m), 7,73 (1H, d, J = 2,0 Hz), 7,98 (1H, d, J = 2,2 Hz), 8,18-10,97 (2H, br), 11,59 (1H, s).	1/2 Fumarat
898		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,81-1,02 (4H, m), 1,10-1,36 (6H, n), 1,36-2,05 (5H, m), 2,25-2,35 (1H, m), 2,57 (1H, d, J = 11,0 Hz), 2,62-2,70 (1H, m), 2,75 (1H, d, J = 11,0 Hz), 6,91 (1H, dd, J = 1,7, 8,6 Hz), 7,03 (1H, s), 7,27 (1H, d, J = 0,6 Hz), 7,55 (1H, d, J = 8,6 Hz) 11,93-12,33 (1H, br).	-

Bảng 100

Cấu hình tuyệt đối

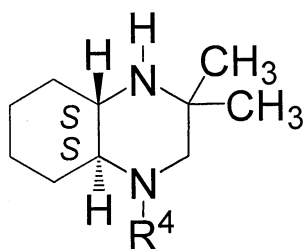


Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
899		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,75-1,13 (5H, m), 1,25-1,45 (3H, m), 1,48 (3H, s), 1,62-1,85 (3H, m), 2,08-2,19 (1H, m), 2,66-2,78 (2H, m), 2,85-2,94 (1H, m), 3,27 (1H, d, J = 11,9 Hz), 3,85 (3H, s), 6,46 (1H, d, J = 3,5 Hz), 6,63 (1H, d, J = 5,4 Hz), 7,06 (1H, d, J = 3,5 Hz), 8,20 (1H, d, J = 5,4 Hz).	-
900		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,91-1,62 (11H, m), 1,62-1,84 (2H, m), 1,82-1,95 (1H, m), 2,65-2,83 (2H, m), 2,99-3,10 (2H,m), 3,79 (3H, s), 6,41 (1H, d, J = 3,4 Hz), 6,48 (2H, s), 7,50 (1H, d, J = 3,4 Hz),	Fumarat

7,76 (1H, d, J = 2,2 Hz), 8,04 (1H, d, J = 2,2 Hz), 8,35-11,00 (2H, br)

Bảng 101

Cấu hình tuyệt đối

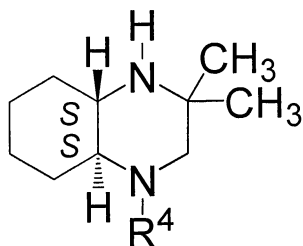


Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
901		1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,86-1,01 (1H, m), 1,12-1,40 (5H, m), 1,51-1,76 (7H,m), 1,72-2,10 (3H, m), 2,67-2,81 (2H, m), 2,81-3,00 (5H, m), 3,05-3,20 (1H, m), 6,65-7,10 (2H, m), 7,21 (1H, d, J = 8,4 Hz), 9,03-9,20 (1H, m), 9,59-9,77 (1H, m).	2 Hydroclorua
902		1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,88-1,04 (1H, m), 1,15-1,41 (5H, m), 1,48-1,80 (7H,m), 1,90-2,10 (3H, m), 2,65-3,05 (7H, m), 3,05-3,22 (1H, m), 4,90-6,25 (1H, br), 6,94 (1H, s), 7,11 (1H, s), 9,21 (1H, brs), 9,70 (1H, brs).	2 Hydroclorua
903		1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,93-1,22 (2H, m), 1,22-1,43 (4H, m), 1,43-1,79 (7H, m), 1,90-2,10 (1H, m), 2,58-3,40 (6H, m), 4,52 (2H, t, J = 8,6 Hz), 5,30-6,20 (1H, br), 6,50-7,45 (3H, m), 8,65-9,38 (1H, br), 9,38-9,92 (1H, br).	2 Hydroclorua
904		1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,96-1,13 (1H, m), 1,13-1,42 (5H, m), 1,49-1,66 (6H, m), 1,66-1,77 (1H, m), 1,93-2,05 (1H, m), 2,74-2,90 (2H, m), 2,98 (1H, d, J = 12,5 Hz), 3,08-3,20 (1H, m), 4,35-4,68 (1H, br), 6,95 (1H, dd, J = 2,0, 8,6 Hz), 7,26 (1H, d, J = 2,0 Hz), 7,36 (1H, d, J =	2 Hydroclorua

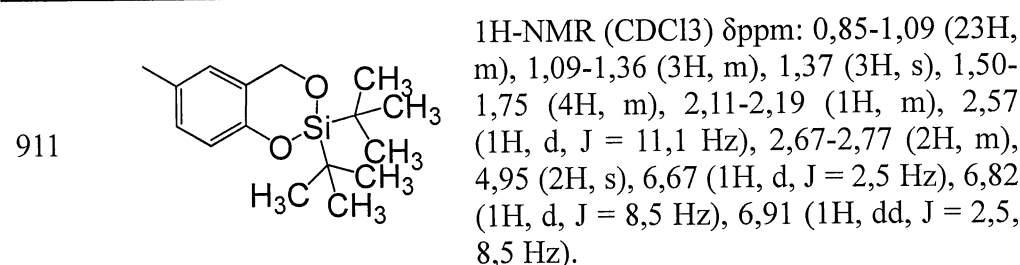
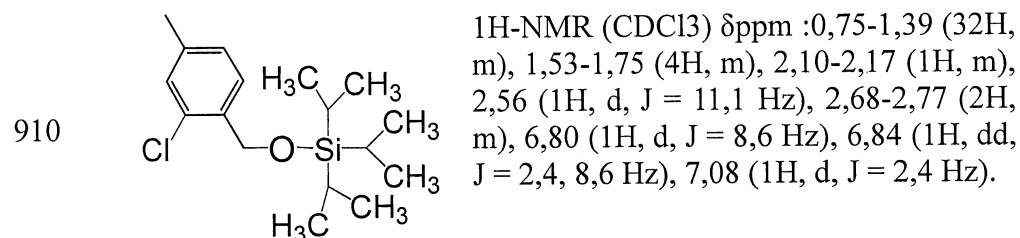
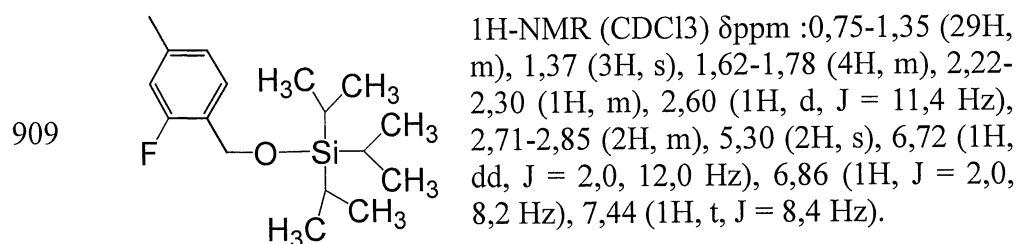
8,6 Hz), 8,98-9,20 (1H, br), 9,60-9,85 (1H, br).

Bảng 102

Cấu hình tuyệt đối

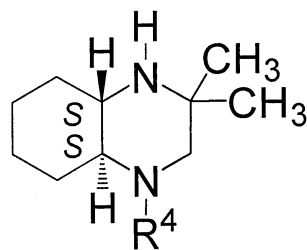


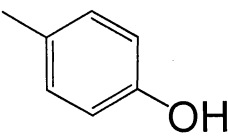
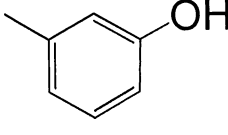
Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
905		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,75-1,04 (2H, m), 1,04-1,13 (21H, m), 1,15-1,37 (6H, m), 1,38 (3H, s), 1,52-1,75 (4H, m), 2,12-2,20 (1H, m), 2,58 (1H, d, J = 11,1 Hz), 2,69-2,78 (2H, m), 6,76-6,81 (2H, m), 6,92-6,97 (2H, m).	
906		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,88-1,14 (23H, m), 1,16-1,37 (6H, m), 1,38 (3H, s), 1,60-1,77 (4H, m), 2,20-2,29 (1H, m), 2,57 (1H, d, J = 11,3 Hz), 2,72-2,82 (2H, m), 6,60-6,65 (2H, m), 6,65-6,70 (1H, m), 7,07-7,14 (1H, m).	
907		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,75-1,15 (23H, m), 1,17-1,40 (9H, m), 1,52-1,75 (4H, m), 2,10-2,17 (1H, m), 2,55 (1H, d, J = 11,1 Hz), 2,70-2,77 (2H, m), 6,69-6,74 (1H, m), 6,78-6,87 (2H, m).	
908		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm :0,81-1,38 (29H, m), 1,39 (3H, s), 1,58-1,76 (4H, m), 2,23-2,32 (1H, m), 2,61 (1H, d, J = 11,2 Hz), 2,72-2,82 (2H, m), 4,79 (2H, s), 7,02-7,08 (2H, m), 7,24-7,30 (2H, m).	

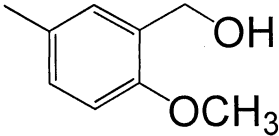
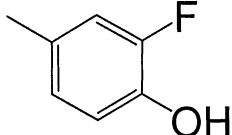
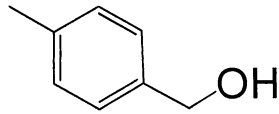
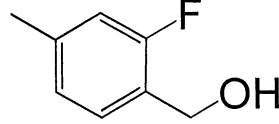
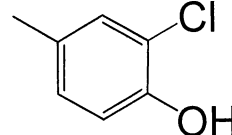
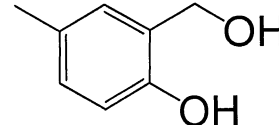


Bảng 103

Cấu hình tuyệt đối

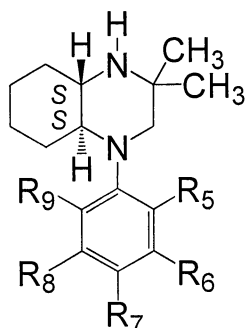


Ví dụ	R^4	NMR	Muối
912		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 0,92-1,06 (1H, m), 1,09 (3H, s), 1,12-1,37 (3H, m), 1,40 (3H, s), 1,55-1,66 (2H, m), 1,66-1,78 (2H, m), 2,15-2,25 (1H, m), 2,57-2,65 (1H, m), 2,69-2,83 (2H, m), 3,15-4,30 (2H, br), 6,72-6,79 (2H, m), 6,95-7,01 (2H, m).	-
913		$^1\text{H-NMR}$ (DMSO-d_6) δ ppm: 0,82-1,00 (4H, m), 1,09-1,35 (6H, m), 1,40-1,52 (1H, m), 1,52-1,70 (4H, m), 2,12-2,25 (1H, m), 2,45-2,55 (1H, m), 2,55-2,65	-

		(1H, m), 2,66 (1H, d, J = 11,0 Hz), 6,40-6,51 (3H, m), 7,00-7,10 (1H, m), 9,21 (1H, s).	
914		1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 0,90-1,05 (1H, m), 1,05-1,38 (5H, m), 1,38-1,62 (6H, m), 1,64-1,74 (1H, m), 1,82-1,94 (1H, m), 2,53-2,62 (1H, m), 2,70 (1H, d, J = 12,0 Hz), 2,86 (1H, d, J = 12,0 Hz), 2,95-3,06 (1H, m), 3,74 (3H, s), 4,45 (2H, s), 4,65-5,60 (1H, br), 6,46 (1H, s), 6,87 (1H, d, J = 8,6 Hz), 6,94 (1H, dd, J = 2,5, 8,6 Hz), 7,15 (1H, d, J = 2,2 Hz), 8,59-10,40 (1H, br).	1/2 Fumarat
915		1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 0,82-0,99 (4H, m), 1,05-1,32 (6H, m), 1,41-1,50 (1H, m), 1,50-1,65 (3H, m), 2,05-2,14 (1H, m), 2,47 (1H, d, J = 10,8 Hz), 2,53-2,62 (2H, m), 2,95-3,65 (1H, br), 6,67-6,72 (1H, m), 6,79-6,87 (2H, m), 8,65-10,50 (1H, m).	-
916		1H-NMR (CDCl3) δppm: 0,85-1,10 (5H, m), 1,15-1,42 (6H, m), 1,56-2,05 (5H, m), 2,25-2,15 (1H, m), 2,56-2,65 (1H, m), 2,72-2,84 (2H, m), 4,64 (2H, s), 7,04-7,10 (2H, m), 7,25-7,32 (2H, m).	-
917		1H-NMR (CDCl3) δppm: 0,95-1,44 (11H, m), 1,44-2,20 (5H, m), 2,25-2,35 (1H, m), 2,61 (1H, d, J = 11,4 Hz), 2,72-2,86 (2H, m), 4,69 (2H, s), 6,75 (1H, dd, J = 2,0, 12,1 Hz), 6,83 (1H, dd, J = 2,0, 8,1 Hz), 7,29 (1H, t, J = 8,4 Hz).	-
918		1H-NMR (CDCl3) δppm: 0,90-1,11 (4H, m), 1,14-1,42 (6H, m), 1,53-1,77 (4H, m), 2,12-2,21 (1H, m), 2,57 (1H, d, J = 11,2 Hz), 2,67-2,80 (2H, m), 2,81-3,38 (2H, br), 6,89-6,97 (2H, m), 7,07 (1H, dd, J = 0,5, 1,9 Hz).	-
919		1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 0,78-0,93 (1H, m), 0,95 (3H, s), 1,04-1,32 (6H, m), 1,37-1,66 (5H, m), 2,05-2,14 (1H, m), 2,45-2,62 (3H, m), 4,43 (2H, s), 4,65-5,20 (1H, br), 6,65 (1H, d, J = 8,4 Hz), 6,74 (1H, dd, J = 2,5, 8,4 Hz), 7,03 (1H, d, J = 2,5 Hz), 8,81-9,28 (1H, br).	-

Bảng 104

Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ	R ⁵	R ⁶	R ⁷	R ⁸	R ⁹	NMR	Muối
920	⁻ CH ₃	-H	-H	-H	-H	¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,88-1,03 (1H, m), 1,10-1,25 (1H, m), 1,25-1,40 (4H, m), 1,45-1,66 (6H, m), 1,67-1,89 (1H, m), 1,92-2,03 (1H, m), 2,26 (3H, m), 2,65 (1H, d, J = 12,5 Hz), 2,80 (1H, d, J = 12,5 Hz), 2,88-3,00 (1H, m), 3,15-3,28 (1H, m), 7,06-7,17 (2H, m), 7,19-7,26 (2H, m), 9,04 (1H, brs), 9,58 (1H, brs).	Hydroclorua
921	⁻ CH ₃	-CH ₃	-H	-H	-H	¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,87-1,02 (1H, m), 1,10-1,24 (1H, m), 1,24-1,40 (4H, m), 1,40-1,64 (6H, m), 1,67-1,77 (1H, m), 1,95-2,04 (1H, m), 2,21 (3H, s), 2,22 (3H, s), 2,59 (1H, d, J = 12,5 Hz), 2,82 (1H, d, J = 12,5 Hz), 2,86-2,95 (1H, m), 3,15-3,37 (1H, m), 6,97-7,03 (2H, m), 7,07-7,15 (1H, m), 9,11 (1H, brs), 9,65 (1H, brs).	Hydroclorua

						brs).	
922	-H	-F	-CN	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 1,22-1,65 (10H, m), 1,65-1,84 (2H, m), 1,90-2,00 (1H, m), 2,10-2,20 (1H, m), 3,38-3,61 (4H, m), 3,78 (1H, d, J = 14,5 Hz), 6,83 (1H, dd, J = 2,3, 8,9 Hz), 6,97 (1H, dd, J = 2,0, 13,7 Hz), 7,65 (1H, t, J = 8,5 Hz), 8,93-9,15 (1H, m), 9,51-9,71 (1H, m).	2 Hydroclorua
923	-H	-H	-OCF3	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 1,00-1,15 (1H, m), 1,15-1,41 (5H, m), 1,50-1,67 (6H, m), 1,67-1,77 (1H, m), 1,95-2,05 (1H, m), 2,81-2,95 (2H, m), 3,01 (1H, d, J = 12,5 Hz), 3,11-3,25 (1H, m), 5,42-6,30 (1H, br), 7,20-7,27 (2H, m), 7,31-7,37 (2H, m), 9,02-9,20 (1H, brm), 9,60-9,80 (1H, brm).	2 Hydroclorua
924	-H	-F	-OCF3	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 1,04-1,20 (1H, m), 1,20-1,41 (5H, m), 1,49-1,78 (7H, m), 1,96-2,06 (1H, m), 2,85-3,11 (3H, m), 3,15-3,28 (1H, m), 5,10-6,60 (1H, br), 7,00-7,15 (1H, m), 7,22-7,29 (1H, m), 7,47-7,54 (1H, m), 9,09 (1H, brs), 9,71 (1H, brs).	2 Hydroclorua
925	-H	-H	-OCHF2	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 0,98-1,11 (1H, m), 1,11-1,25 (1H, m), 1,25-1,40 (4H, m), 1,48-1,65 (6H, m),	2 Hydroclorua

						1,65-1,76 (1H, m), 1,92-2,03 (1H, m), 2,75-2,90 (2H, m), 2,99 (1H, d, J = 12,8 Hz), 3,10-3,23 (1H, m), 4,85-5,90 (1H, br), 7,01 (0,25H, s), 7,13-7,22 (4,5H, m), 7,38 (0,25H, s), 9,06 (1H, brs), 9,63 (1H, brs).	
926	-H	-Cl	-OCHF2	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 1,02-1,42 (6H, m), 1,50-1,66 (6H, m), 1,66-1,77 (1H, m), 1,95-2,05 (1H, m), 2,81-2,94 (2H, m), 3,02 (1H, d, J = 12,5 Hz), 3,10-3,23 (1H, m), 3,88-4,25 (1H, br), 7,15 (1H, dd, J = 2,6, 8,8 Hz), 7,24 (1H, t, J = 73,3 Hz), 7,32 (1H, d, J = 2,6 Hz), 7,34 (1H, d, J = 8,8 Hz), 9,05-9,22 (1H, m), 9,62-9,80 (1H, m).	2 Hydroclorua
927	-H	-OCHF2	-H	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 1,02-1,16 (1H, m), 1,16-1,41 (5H, m), 1,50-1,67 (6H, m), 1,67-1,78 (1H, m), 1,96-2,06 (1H, m), 2,84-2,97 (2H, m), 3,04 (1H, d, J = 12,5 Hz), 3,11-3,25 (1H, m), 6,89 (1H, s), 6,96 (1H, dd, J = 2,1, 8,1 Hz), 7,00 (1H, d, J = 8,1 Hz), 7,27 (1H, t, J = 74,1 Hz), 7,39 (1H, t, J = 8,1 Hz), 8,30-9,30 (2H, br), 9,69-9,89 (1H, br).	2 Hydroclorua
928	-H	-OCHF2	-Cl	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 1,04-1,40 (6H, m), 1,50-1,69 (6H, m), 1,69-1,79 (1H, m), 1,92-2,04 (1H,m), 2,78- 2,89 (1H, m), 2,89-3,06 (2H, m), 3,15-3,27 (1H,	Hydroclorua

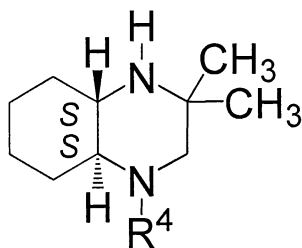
						m), 7,01-7,08 (2H, m), 7,32 (1H, t, J = 73,3 Hz), 7,54 (1H, d, J = 8,4 Hz), 8,81-9,11 (1H, m), 9,40-9,69 (1H, m).	
929	-H	-OCHF2	-F	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 1,00-1,40 (6H, m), 1,47-1,65 (6H, m), 1,67-1,77 (1H, m), 1,90-2,00 (1H, m), 2,70-2,80 (1H, m), 2,87 (1H, d, J = 12,5 Hz), 2,96 (1H, d, J = 12,5 Hz), 3,10-3,24 (1H, m), 7,02-7,11 (2,25H, m), 7,27 (0,5H, s), 7,37 (1H, dd, J = 8,8, 10,5 Hz), 7,46 (0,25H, s), 8,80-9,00 (1H, br), 9,39-9,58 (1H, br).	Hydroclorua
930	-H	-CN	-OCHF2	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 1,03-1,15 (1H, m), 1,17-1,41 (5H, m), 1,48-1,82 (7H, m), 1,93-2,05 (1H, m), 2,82-2,91 (1H, m), 2,94 (1H, d, J = 12,7 Hz), 3,01 (1H, d, J = 12,7 Hz), 3,08-3,25 (1H, m), 4,00-4,60 (1H, br), 7,39 (1H, t, J= 72,6 Hz), 7,42 (1H, d, J = 8,9 Hz), 7,51 (1H, dd, J = 2,7, 9,0 Hz), 7,69 (1H, d, J = 2,7 Hz), 8,90- 9,10 (1H, br), 9,40-9,65 (1H, br).	2 Hydroclorua
931	-H	-F	-OCHF2	-F	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 1,08-1,42 (6H, m), 1,42-1,80 (7H, m), 1,96-2,07 (1H, m), 2,90-3,00 (1H, m), 3,05 (1H, d, J = 13,0 Hz), 3,10 (1H, d, J = 13,0 Hz), 3,17-3,29 (1H, m), 3,55-3,85 (1H, br), 6,97-7,06 (2,25H, m), 7,19 (0,5H, s), 7,37 (0,25H, s), 8,90-9,07	2 Hydroclorua

						(1H, br), 9,51-9,70 (1H, br).
932	-H	-H	- OCH ₂ CHF 2	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,98-1,80 (13H, m), 1,91-2,14 (1H, m), 2,61-3,50 (4H, m), 4,20-4,40 (2H, m), 4,61-6,20 (1H, br), 6,39 (1H, tt, J = 3,4, 54,5 Hz), 6,85-7,65 (4H, br), 8,84-10,20 (2H, br). 2 Hydrochlorua
933	-H	-F	- OCH ₂ CHF 2	-H	-H	1H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,95-1,09 (4H, m), 1,15-1,44 (7H, m), 1,57-1,78 (4H, m), 2,13-2,22 (1H, m), 2,56 (1H, d, J = 11,1 Hz), 2,70-2,79 (2H, m), 4,21 (2H, dt, J = 4,2, 13,1 Hz), 6,08 (1H, tt, J = 4,2, 55,1 Hz), 6,77-6,83 (1H, m), 6,84-6,95 (2H, m). -
934	-H	-Cl	- OCH ₂ CHF 2	-H	-H	1H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,93-1,10 (4H, m), 1,15-1,41 (7H, m), 1,53-1,77 (4H, m), 2,14-2,23 (1H, m), 2,57 (1H, d, J = 11,0 Hz), 2,68-2,79 (2H, m), 4,20 (2H, dt, J = 4,2, 13,0 Hz), 6,12 (1H, tt, J = 4,2, 55,1 Hz), 6,87 (1H, d, J = 8,7 Hz), 6,96 (1H, dd, J = 2,5, 8,7 Hz), 7,13 (1H, d, J = 2,5 Hz). -
935	-H	-CH ₃	-OCHF ₂	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,96-1,10 (1H, m), 1,12-1,40 (5H, m), 1,47-1,63 (6H, m), 1,67-1,76 (1H, m), 1,90-2,01 (1H, m), 2,21 (3H, m), 2,70-2,87 (2H, m), 2,96 (1H, d, J = 12,1 Hz), 3,07-3,22 2 Hydrochlorua

						(1H, m), 4,40-6,50 (1H, br), 6,94 (0,25H, s), 6,97-7,03 (1H, m), 7,03-7,08 (1H, m), 7,09-7,15 (1,5H, m), 7,31 (0,25H, s), 9,01 (1H, brs), 9,56 (1H, brs).	
936	-H	-OCH ₃	-OCHF ₂	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,02-1,40 (6H, m), 1,50-1,79 (7H, m), 1,96-2,06 (1H, m), 2,78-2,95 (2H, m), 2,98-3,22 (2H,m), 3,82 (3H, s), 6,75 (1H, d, J = 7,8 Hz), 6,80-6,93 (1,25H, m), 7,01 (0,5H, s), 7,11-7,21 (1,25H, m), 7,21-7,75 (1H, br), 9,14 (1H, brs), 9,77 (1H, brs).	2 Hydroclorua

Bảng 105

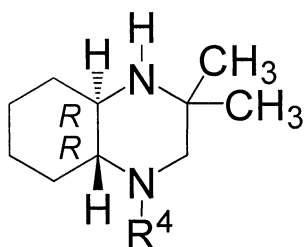
Cấu hình tuyệt đối



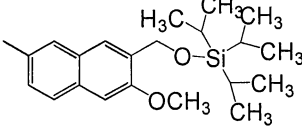
Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
937		1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,15-1,60 (10H, m), 1,60-1,86 (2H, m), 1,95-2,15 (2H, m), 2,47 (3H, s), 3,37 (1H, d, J = 14,2 Hz), 3,41-3,66 (2H, m), 3,88 (1H, d, J = 14,2 Hz), 5,32-7,05 (1,5H, br), 7,18 (1H, d, J = 9,2 Hz), 7,36 (1H, d, J = 9,2 Hz), 7,45-9,40 (1,5 H, br).	Oxalat

Bảng 106

Cấu hình tuyệt đối

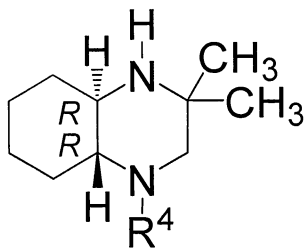


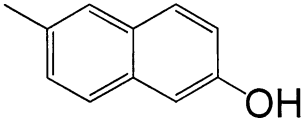
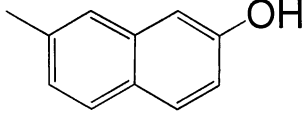
Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
938		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,98-1,17 (23H, m), 1,17-1,40 (6H, m), 1,43 (3H, s), 1,59-1,68 (1H, m), 1,68-1,80 (3H, m), 2,32-2,41 (1H, m), 2,68 (1H, d, J = 11,3 Hz), 2,77-2,85 (1H, m), 2,88 (1H, d, J = 11,3 Hz), 7,08 (1H, dd, J = 2,4, 8,8 Hz), 7,16 (1H, d, J = 2,4 Hz), 7,22 (1H, dd, J = 2,1, 8,7 Hz), 7,37 (1H, d, J = 1,8 Hz), 7,57-7,64 (2H, m).	-
939		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,82-1,18 (23H, m), 1,20-1,40 (6H, m), 1,43 (3H, s), 1,59-1,70 (1H, m), 1,70-1,85 (3H, m), 2,35-2,45 (1H, m), 2,69 (1H, d, J = 11,3 Hz), 2,77-2,86 (1H, m), 2,91 (1H, d, J = 11,3 Hz), 7,02 (1H, dd, J = 2,4, 8,8 Hz), 7,09-7,15 (2H, m), 7,27 (1H, d, J = 1,9 Hz), 7,61-7,68 (2H, m).	-
940		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,97-1,41 (29H, m), 1,43 (3H, s), 1,59-1,70 (1H, m), 1,70-1,80 (3H, m), 2,34-2,44 (1H, m), 2,69 (1H, d, J = 11,3 Hz), 2,78-2,87 (1H, m), 2,89 (1H, d, J = 11,3 Hz), 7,11 (1H, d, J = 8,9 Hz), 7,34 (1H, dd, J = 2,1, 9,0 Hz), 7,37 (1H, d, J = 1,9 Hz), 7,53 (1H, d, J = 8,9 Hz), 8,10 (1H, d, J = 8,9 Hz).	-
941		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,75-1,42 (29H, m), 1,44 (3H, s), 1,58-1,83 (4H, m), 2,34-2,42 (1H, m), 2,68 (1H, d, J = 11,3 Hz), 2,78-2,87 (1H, m), 2,91 (1H, d, J = 11,3 Hz), 3,91 (3H, s), 5,19-5,27 (2H, m), 7,21	-

		(1H, d, J = 9,1 Hz), 7,29 (1H, d, J = 2,2, 9,1 Hz), 7,37 (1H, d, J = 2,1 Hz), 7,69 (1H, d, J = 9,0 Hz), 8,16 (1H, d, J = 9,1 Hz).	
942		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,95-1,18 (23H, m), 1,18-1,40 (6H, m), 1,44 (3H, s), 1,57-1,77 (4H, m), 2,33-2,41 (1H, m), 2,71 (1H, d, J = 11,2 Hz), 2,77-2,85 (1H, m), 2,87 (1H, d, J = 11,2 Hz), 3,89 (3H, s), 4,94 (2H, d, J = 1,0 Hz), 7,02 (1H, s), 7,22 (1H, dd, J = 2,0, 8,6 Hz), 7,43 (1H, d, J = 1,8 Hz), 7,64 (1H, d, J = 8,6 Hz), 7,88 (1H, s).	-

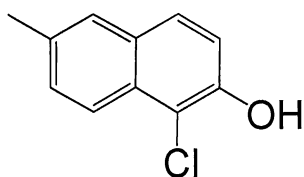
Bảng 107

Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
943		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,88-1,03 (4H, m), 1,10-1,37 (6H, m), 1,45-1,68 (5H, m), 2,25-2,36 (1H, m), 2,58 (1H, d, J = 10,9 Hz), 2,62-2,71 (1H, m), 2,73 (1H, d, J = 10,9 Hz), 7,02 (1H, dd, J = 2,4, 8,7 Hz), 7,05 (1H, d, J = 2,4 Hz), 7,16 (1H, dd, J = 2,1, 8,7 Hz), 7,37 (1H, d, J = 1,8 Hz), 7,58 (1H, d, J = 8,8 Hz), 7,67 (1H, d, J = 8,8 Hz), 9,57 (1H, brs).	-
944		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,88-1,04 (4H, m), 1,12-1,37 (6H, m), 1,45-1,74 (5H, m), 2,32-2,41 (1H, m), 2,60 (1H, d, J = 11,1 Hz), 2,63-2,72 (1H, m), 2,80 (1H, d, J = 11,1 Hz), 6,94 (1H, dd, J = 2,4, 8,8 Hz), 6,97-7,04 (2H, m), 7,21 (1H, d, J = 1,8 Hz), 7,64 (2H, d, J = 8,8 Hz), 9,62 (1H, s).	-

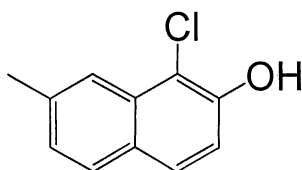
945



¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 0,90-1,10 (4H, m), 1,15-1,40 (6H, m), 1,51-1,75 (4H, m), 2,35-2,48 (1H, m), 2,60-2,88 (3H, m), 2,96-3,88 (1H, br), 7,23 (1H, d, J = 8,9 Hz), 7,34 (1H, dd, J = 2,1, 9,0 Hz), 7,47 (1H, d, J = 2,0 Hz), 7,70 (1H, d, J = 8,9 Hz), 7,92 (1H, d, J = 9,0 Hz), 8,92-11,38 (1H, br).

-

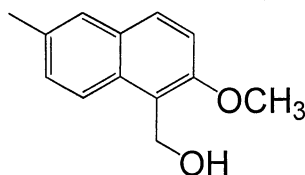
946



¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 0,93-1,12 (4H, m), 1,15-1,41 (6H, m), 1,54-1,80 (4H, m), 2,48-2,60 (1H, m), 2,70-2,87 (2H, m), 2,92 (1H, d, J = 11,5 Hz), 3,03-4,36 (1H, br), 7,08-7,18 (2H, m), 7,50 (1H, d, J = 2,0 Hz), 7,67 (1H, d, J = 8,8 Hz), 7,75 (1H, d, J = 8,7 Hz), 8,89-11,11 (1H, br).

-

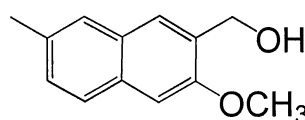
947



¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 0,90-1,05 (4H, m), 1,13-1,37 (6H, m), 1,47-1,70 (5H, m), 2,30-2,39 (1H, m), 2,61 (1H, d, J = 11,0 Hz), 2,64-2,73 (1H, m), 2,78 (1H, d, J = 11,0 Hz), 3,88 (3H, s), 4,81 (1H, t, J = 5,2 Hz), 4,88 (2H, d, J = 5,2 Hz), 7,27 (1H, dd, J = 2,2, 9,1 Hz), 7,35 (1H, d, J = 9,1 Hz), 7,42 (1H, d, J = 2,1 Hz), 7,80 (1H, d, J = 9,1 Hz), 8,03 (1H, d, J = 9,1 Hz).

-

948

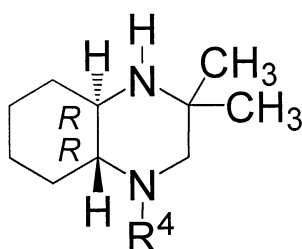


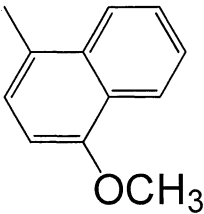
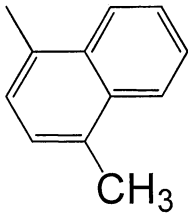
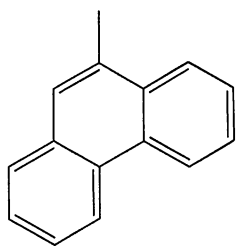
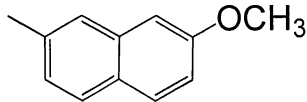
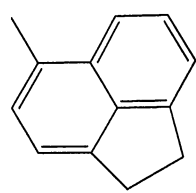
¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 0,95-1,10 (1H, m), 1,10-1,50 (9H, m), 1,53-1,73 (3H, m), 1,77-1,87 (1H, m), 2,58-2,70 (1H, m), 2,85 (2H, s), 2,89-3,00 (1H, m), 3,87 (3H, s), 4,61 (2H, s), 6,46 (1H, s), 7,20 (1H, dd, J = 2,0, 8,7 Hz), 7,22 (1H, s), 7,46 (1H, d, J = 1,6 Hz), 7,73 (1H, d, J = 8,7 Hz), 7,79 (1H, s).

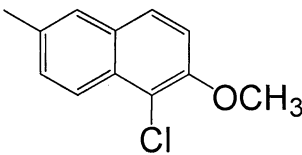
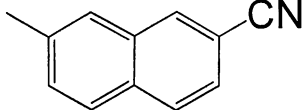
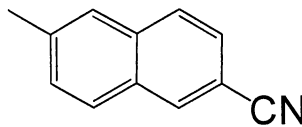
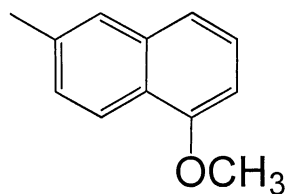
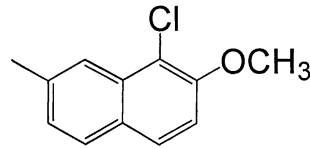
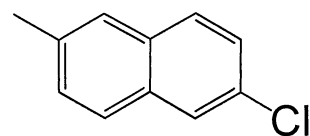
1/2 Fumarat

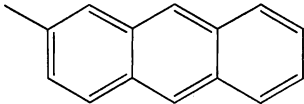
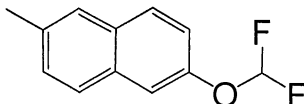
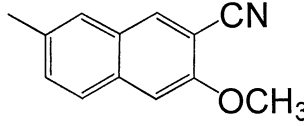
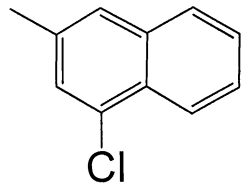
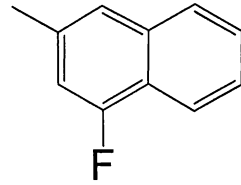
Bảng 108

Cấu hình tuyệt đối

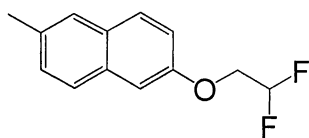


Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
949		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,91-1,05 (1H, m), 1,08 (3H, s), 1,12-1,62 (9H, m), 1,68-1,78 (2H, m), 2,42-2,50 (1H, m), 2,62 (1H, d, J = 11,3 Hz), 2,75 (1H, d, J = 11,3 Hz), 2,91-3,00 (1H, m), 3,98 (3H, s), 6,78 (1H, d, J = 8,1 Hz), 7,20 (1H, d, J = 8,1 Hz), 7,43-7,54 (2H, m), 8,21-8,26 (1H, m), 8,50-8,54 (1H, m).	-
950		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,93-1,22 (2H, m), 1,26-1,44 (5H, m), 1,44-1,54 (1H, m), 1,56-1,77 (5H, m), 1,99-2,08 (1H, m), 2,62 (3H, s), 2,76 (1H, d, J = 12,4 Hz), 2,98-3,08 (2H, m), 3,33-3,50 (1H, m), 7,28 (1H, d, J = 7,5 Hz), 7,38 (1H, d, J = 7,5 Hz), 7,54-7,61 (2H, m), 7,97-8,03 (1H, m), 8,43-8,52 (1H, m), 9,10-9,25 (1H, br), 9,62-9,77 (1H, br).	Hydroclorua
951		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,00-1,30 (2H, m), 1,30-1,45 (4H, m), 1,45-1,65 (2H, m), 1,65-1,85 (5H, m), 2,00-2,13 (1H, m), 2,91 (1H, d, J = 12,6 Hz), 3,05-3,20 (2H, m), 3,41-3,57 (1H, m), 3,93-4,29 (1H, br), 7,61-7,77 (5H, m), 7,98-8,05 (1H, m), 8,55-8,61 (1H, m), 8,77-8,88 (2H, m), 9,19-9,35 (1H, m), 9,669,81 (1H, m).	2 Hydroclorua
952		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,96-1,45 (6H, m), 1,55-1,80 (7H, m), 2,00-2,12 (1H, m), 2,85-3,40 (4H, m), 3,87 (3H, s), 7,05-7,26 (2H, m), 7,32 (1H, d, J = 2,5 Hz), 7,42-7,73 (1H, br), 7,73-7,90 (2H, m), 8,75-9,60 (2H, br), 9,60-10,15 (1H, br).	2 Hydroclorua
953		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,85-1,00 (1H, m), 1,10-1,70 (12H, m), 1,75-1,87 (1H, m), 2,62-2,81 (3H, m), 2,98-3,12 (1H, m), 3,20-3,45 (4H, m), 6,46 (1H, s), 7,15-7,35 (3H, m), 7,35-7,52 (1H, m), 7,88 (1H, d, J = 8,1 Hz), 8,05-9,35 (1H, br).	1/2 Fumarat

954		¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,05-1,45 (6H, m), 1,55-1,80 (7H, m), 1,99-2,10 (1H, m), 2,91-3,08 (2H, m), 3,08-3,30 (2H, m), 3,98 (3H, s), 7,44 (1H, d, J = 9,0 Hz), 7,56 (1H, d, J = 9,2 Hz), 7,67 (1H, brs), 7,96 (1H, d, J = 9,1 Hz), 8,05 (1H, d, J = 9,1 Hz), 8,15-9,10 (1H, br), 9,17-9,40 (1H, m), 9,69-9,89 (1H, m).	2 Hydrochlorua
955		¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 0,80-0,98 (1H, br), 1,03-1,17 (4H, m), 1,22-1,47 (6H, m), 1,63-1,74 (1H, m), 1,74-1,89 (3H, m), 2,45-2,55 (1H, m), 2,76 (1H, d, J = 11,5 Hz), 2,81-2,90 (1H, m), 2,98 (1H, d, J = 11,5 Hz), 7,38-7,44 (2H, m), 7,49 (1H, dd, J = 1,6, 8,4 Hz), 7,76-7,81 (1H, m), 7,83 (1H, d, J = 8,4 Hz), 8,12 (1H, s).	-
956		¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,12-1,45 (6H, m), 1,55-1,90 (7H, m), 2,00-2,14 (1H, m), 3,08-3,40 (4H, m), 4,52-5,08 (1H, br), 7,45 (1H, dd, J = 2,0, 8,9 Hz), 7,64 (1H, d, J = 1,7 Hz), 7,73 (1H, dd, J = 1,6, 8,5 Hz), 8,00 (1H, d, J = 8,9 Hz), 8,04 (1H, d, J = 8,6 Hz), 8,49 (1H, s), 9,10-9,25 (1H, br), 9,60-9,75 (1H, br).	2 Hydrochlorua
957		¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,03-1,45 (6H, m), 1,50-1,80 (7H, m), 1,98-2,10 (1H, m), 2,90-3,30 (4H, m), 3,95 (3H, s), 6,91 (1H, d, J = 7,1 Hz), 7,23-7,34 (1H, br), 7,38-7,49 (2H, m), 7,48-7,65 (1H, br), 8,10 (1H, d, J = 8,9 Hz), 9,10-9,36 (1H, br), 9,60-9,88 (1H, br), 10,00-11,50 (1H, br).	2 Hydrochlorua
958		¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,10-1,48 (6H, m), 1,55-1,80 (7H, m), 1,981-2,10 (1H, m), 2,95-3,10 (2H, m), 3,10-3,21 (1H, m), 3,21-3,85 (1H, m), 3,99 (3H, s), 7,26 (1H, dd, J = 1,5, 8,7 Hz), 7,50 (1H, d, J = 9,1 Hz), 7,66 (1H, brs), 7,93 (2H, d, J = 9,1 Hz), 9,20 (1H, brs), 9,72 (1H, brs), 9,89-10,70 (1H, brs).	2 Hydrochlorua
959		¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,10-1,43 (6H, m), 1,56-1,80 (7H, m), 1,99-2,09 (1H, m), 2,95-3,06 (2H, m), 3,11 (1H, d, J = 12,5 Hz), 3,17-3,30 (1H, m), 6,05-7,25 (1H, br), 7,36 (1H, dd, J = 1,9, 8,8 Hz), 7,49 (1H, dd, J = 2,1, 8,8 Hz), 7,64 (1H, brs), 7,88 (1H, d, J = 8,9 Hz), 7,94 (1H, d,	2 Hydrochlorua

		J = 8,9 Hz), 8,00 (1H, d, J = 1,8 Hz), 9,15-9,34 (1H, br), 9,69-9,85 (1H, br).
960		1H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,75-1,19 (5H, m), 1,24-1,44 (3H, m), 1,41 (3H, s), 1,59-1,73 (1H, m), 1,73-1,82 (2H, m), 1,90-2,00 (1H, m), 2,45-2,54 (1H, m), 2,73 (1H, d, J = 11,5 Hz), 2,81-2,92 (1H, m), 3,02 (1H, d, J = 11,5 Hz), 7,26 (1H, dd, J = 2,1, 9,0 Hz), 7,38-7,47 (2H, m), 7,51 (1H, d, J = 1,3 Hz), 7,91 (1H, d, J = 9,1 Hz), 7,94-7,99 (2H, m), 8,30 (1H, s), 8,34 (1H, s).
961		1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,15-1,48 (6H, m), 1,55-1,80 (7H, m), 1,95-2,09 (1H, m), 2,91-3,05 (2H, m), 3,05-3,16 (1H, m), 3,16-3,30 (1H, m), 3,70-4,4,10 (1H, br), 7,16 (0,25H, s), 7,32-7,40 (2,5H, m), 7,53 (0,25H, s), 7,62-7,70 (2H, m), 7,90 (1H, d, J = 8,8 Hz), 7,98 (1H, d, J = 9,0 Hz). 9,05-9,25 (1H, br), 9,54-9,78 (1H, br).
962		1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,05-1,50 (6H, m), 1,55-1,80 (7H, m), 1,97-2,10 (1H, m), 2,40-3,05 (2H, m), 3,05-3,16 (1H, m), 3,16-3,31 (1H, m), 3,65-4,25 (4H, m), 7,44 (1H, dd, J = 2,0, 8,8 Hz), 7,56 (1H, s), 7,65 (1H, s), 7,89 (1H, d, J = 8,8 Hz), 8,47 (1H, s), 9,05-9,35 (1H, br), 9,53-9,84 (1H, br).
963		1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,08-1,46 (6H, m), 1,54-1,80 (7H, m), 1,97-2,08 (1H, m), 2,95-3,17 (3H, m), 3,17-3,31 (1H, m), 4,65-4,45 (1H, br), 7,46-7,50 (1H, m), 7,57-7,67 (3H, m), 7,97-8,04 (1H, m), 8,07-8,15 (1H, m), 9,13-9,35 (1H, br), 9,62-9,80 (1H, br).
964		1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,08-1,47 (6H, m), 1,53-1,82 (7H, m), 1,98-2,09 (1H, m), 2,93-3,17 (3H, m), 3,17-3,30 (1H, m), 4,30-4,85 (1H, br), 7,15 (1H, dd, J = 1,6, 12,4 Hz), 7,47 (1H, d, J = 1,3 Hz), 7,51-7,64 (2H, m), 7,97 (2H, d, J = 8,2 Hz), 9,10-9,30 (1H, br), 9,67-9,85 (1H, br).

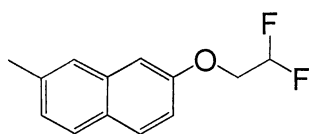
965



¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 1,00-1,15 (4H, m), 1,17-1,52 (7H, m), 1,58-1,68 (1H, m), 1,68-1,79 (3H, m), 2,34-2,42 (1H, m), 2,69 (1H, d, J = 11,3 Hz), 2,77-2,86 (1H, m), 2,88 (1H, d, J = 11,3 Hz), 4,28 (2H, dt, J = 4,1, 13,1 Hz), 6,15 (1H, tt, J = 4,1, 55,2 Hz), 7,10 (1H, d, J = 2,5 Hz), 7,14 (1H, dd, J = 2,6, 8,9 Hz), 7,27 (1H, dd, J = 2,1, 8,7 Hz), 7,41 (1H, d, J = 2,0 Hz), 7,63-7,72 (2H, m).

-

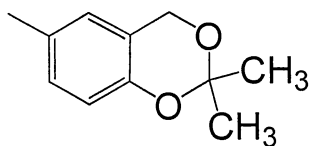
966



¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 1,00-1,15 (4H, m), 1,20-1,70 (8H, m), 1,70-1,88 (3H, m), 2,39-2,48 (1H, m), 2,70 (1H, d, J = 11,4 Hz), 2,79-2,88 (1H, m), 2,93 (1H, d, J = 11,4 Hz), 4,29 (2H, dt, J = 4,2, 13,1 Hz), 6,15 (1H, tt, J = 4,1, 55,2 Hz), 7,03-7,11 (2H, m), 7,16 (1H, dd, J = 2,1, 8,6 Hz), 7,33 (1H, d, J = 2,0 Hz), 7,65-7,74 (2H, m).

-

967

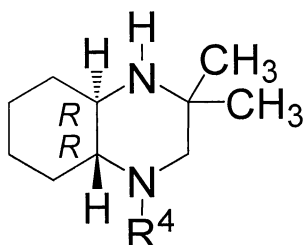


¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 0,91-1,05 (1H, m), 1,07-1,36 (5H, m), 1,36-1,63 (12H, m), 1,63-1,74 (1H, m), 1,80-1,83 (1H, m), 2,50-2,62 (1H, m), 2,71 (1H, d, J = 12,0 Hz), 2,86 (1H, d, J = 12,0 Hz), 2,92-3,02 (1H, m), 4,78 (2H, s), 6,48 (2H, s), 6,73 (1H, d, J = 8,6 Hz), 6,83 (1H, d, J = 2,3 Hz), 6,91 (1H, dd, J = 2,3, 8,6 Hz), 9,52-11,33 (1H, br).

Fumarat

Bảng 109

Cấu hình tuyệt đối

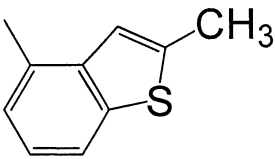
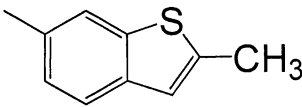
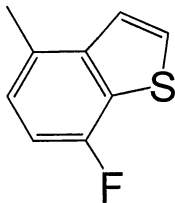
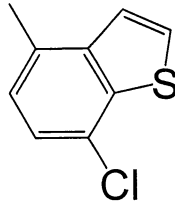
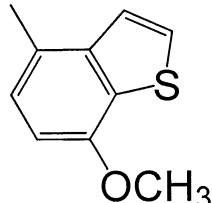
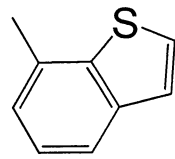


Ví dụ.

R⁴

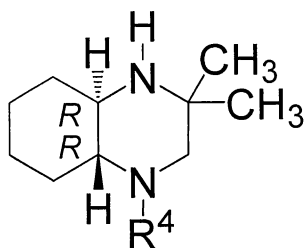
NMR

Muối

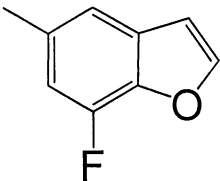
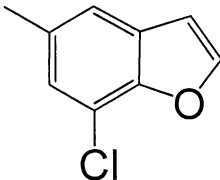
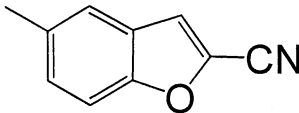
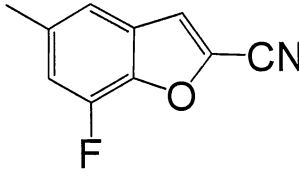
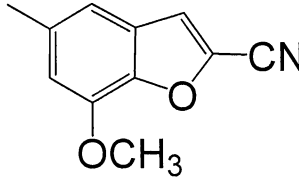
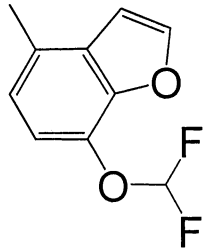
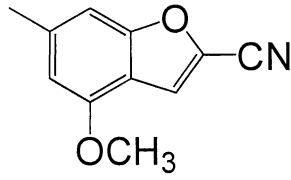
968		¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 0,96-1,10 (1H, m), 1,10-1,25 (1H, m), 1,26-1,41 (4H, m), 1,47-1,78 (7H, m), 1,94-2,05 (1H, m), 2,56 (3H, s), 2,84 (1H, d, J = 12,4 Hz), 2,90-3,02 (2H, m), 3,23-3,35 (1H, m), 7,15 (1H, d, J = 7,6 Hz), 7,22-7,33 (2H, m), 7,68 (1H, d, J = 7,9 Hz), 8,91-9,09 (1H, brm), 9,54-9,70 (1H, brm).	Hydrochlorua
969		¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm (80°C): 1,03-1,46 (6H, m), 1,50-1,79 (7H, m), 2,02-2,12 (1H, m), 2,53 (3H, s), 2,88 (1H, d, J = 12,4 Hz), 3,02-3,12 (1H, m), 3,12-3,27 (2H, m), 7,05 (1H, s), 7,13 (1H, d, J = 8,6 Hz), 7,62-7,68 (2H, m), 9,25 (1H, brs), 9,75 (1H, brs).	Hydrochlorua
970		¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 0,95-1,41 (6H, m), 1,40-1,76 (7H, m), 1,96-2,05 (1H, m), 2,84 (1H, d, J = 12,4 Hz), 2,93-3,01 (1H, m), 3,04 (1H, d, J = 12,4 Hz), 3,28-3,44 (1H, m), 7,25 (2H, d, J = 7,0 Hz), 7,64 (1H, dd, J = 4,0, 5,3 Hz), 7,86 (1H, d, J = 5,3 Hz), 9,04-9,19 (1H, brm), 9,63-9,75 (1H, brm).	Hydrochlorua
971		¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 0,97-1,43 (6H, m), 1,45-1,78 (7H, m), 1,96-2,06 (1H, m), 2,87 (1H, d, J = 12,4 Hz), 2,94-3,06 (2H, m), 3,26-3,43 (1H, m), 7,28 (1H, d, J = 8,1 Hz), 7,50 (1H, d, J = 8,1 Hz), 7,64 (1H, d, J = 5,4 Hz), 7,88 (1H, d, J = 5,4 Hz), 9,12 (1H, brs), 9,66 (1H, brs).	Hydrochlorua
972		¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 0,92-1,80 (13H, m), 1,36-2,05 (1H, m), 2,75-3,05 (4H, m), 3,94 (3H, s), 6,94 (1H, d, J = 7,9 Hz), 7,18 (1H, d, J = 7,9 Hz), 7,55 (1H, d, J = 5,4 Hz), 7,71 (1H, d, J = 5,4 Hz), 8,81 (1H, brs), 9,31 (1H, brs).	Hydrochlorua
973		¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 0,95-1,15 (1H, m), 1,15-1,3 (1H, m), 1,3-1,45 (5H, m), 1,5-1,7 (6H, m), 1,7, 1,8 (1H, m), 1,9-2,0 (1H, m), 2,85-3,1 (3H, m), 3,2-3,4 (1H, m), 7,24 (1H, d, J = 7,2 Hz), 7,42 (1H, dd, J = 7,7, 7,7 Hz), 7,70-7,77 (2H, m), 8,84 (1H, br), 9,28 (1H, br).	Hydrochlorua

Bảng 110

Cấu hình tuyệt đối

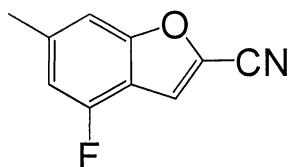


Ví dụ.	R ⁴	NMR	Muối
974		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,97-1,10 (1H, m), 1,10-1,41 (5H, m), 1,50-1,78 (7H, m), 1,94-2,05 (1H, m), 2,44 (3H, s), 2,75-3,09 (3H, m), 3,09-3,30 (1H, m), 6,58 (1H, brs), 6,98 (1H, d, J = 7,2 Hz), 7,19 (1H, t, J = 7,8 Hz), 7,31 (1H, d, J = 7,8 Hz), 9,00 (1H, brs), 9,59 (1H, brs).	Hydroclorua
975		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,00-1,44 (6H, m), 1,44-1,79 (7H, m), 1,95-2,08 (1H, m), 2,42 (3H, d, J = 0,9 Hz), 2,78-3,30 (4H, m), 3,78-4,64 (1H, br), 6,55 (1H, s), 7,04 (1H, brs), 7,32 (1H, brs), 7,48 (1H, d, J = 8,6 Hz), 8,91-9,35 (1H, br), 9,54-9,90 (1H, br).	2 Hydroclorua
976		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,00-1,14 (1H, m), 1,14-1,42 (5H, m), 1,43-1,77 (7H, m), 1,93-2,03 (1H, m), 2,72-3,12 (3H, m), 3,27 (1H, brs), 7,08 (1H, brs), 7,24 (1H, brs), 8,14 (1H, s), 8,95 (1H, brs), 9,57 (1H, brs).	Hydroclorua
977		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,86-1,13 (5H, m), 1,13-1,40 (3H, m), 1,42 (3H, s), 1,57-1,68 (2H, m), 1,68-1,79 (2H, m), 2,20-2,30 (1H, m), 2,65 (1H, d, J = 11,1 Hz), 2,74-2,85 (2H, m), 3,99 (3H, s), 6,61 (1H, d, J = 1,8 Hz), 6,70 (1H, d, J = 2,1 Hz), 6,95 (1H, d, J = 1,8 Hz), 7,59 (1H, d, J = 2,1 Hz).	-

978		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,02-1,42 (6H, m), 1,49-1,78 (7H, m), 1,96-2,06 (1H, m), 2,82-2,97 (2H, m), 3,04-3,25 (2H, m), 6,55-7,25 (3H, m), 7,30 (1H, s), 8,11 (1H, d, J = 2,1 Hz), 9,11-9,30 (1H, m), 9,70-9,88 (1H, m).	2 Hydrochlorua
979		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,00-1,40 (6H, m), 1,45-1,78 (7H, m), 1,95-2,05 (1H, m), 2,82-2,95 (2H, m), 3,02-3,24 (2H, m), 3,78-4,47 (1H, br), 7,05 (1H, d, J = 2,2 Hz), 7,19 (1H, d, J = 1,7 Hz), 7,44 (1H, d, J = 1,7 Hz), 8,12 (1H, d, J = 2,2 Hz), 9,15 (1H, brs), 9,66 (1H, brs).	2 Hydrochlorua
980		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,90-1,05 (1H, m), 1,12-1,84 (13H, m), 2,55-2,95 (4H, m), 3,10-4,75 (2H, br), 6,43 (3H, s), 7,34 (1H, dd, J = 2,1, 8,9 Hz), 7,53 (1H, d, J = 2,0 Hz), 7,68 (1H, d, J = 8,9 Hz), 8,03 (1H, d, J = 0,8 Hz).	Fumarat
981		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,96-1,15 (4H, m), 1,15-1,45 (6H, m), 1,48-1,80 (5H, m), 2,21-2,30 (1H, m), 2,62 (1H, d, J = 11,1 Hz), 2,75-2,85 (2H, m), 7,04 (1H, dd, J = 1,8, 11,8 Hz), 7,15 (1H, d, J = 1,8 Hz), 7,42 (1H, d, J = 2,5 Hz).	-
982		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,96-1,15 (4H, m), 1,15-1,40 (3H, m), 1,42 (3H, s), 1,55-1,70 (3H, m), 1,70-1,80 (2H, m), 2,23-2,35 (1H, m), 2,66 (1H, d, J = 11,1 Hz), 2,75-2,86 (2H, m), 4,01 (3H, s), 6,76 (1H, d, J = 1,7 Hz), 6,97 (1H, d, J = 1,7 Hz), 7,38 (1H, s).	-
983		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,99-1,42 (6H, m), 1,50-1,78 (7H, m), 1,72-2,05 (1H, m), 2,75-3,11 (3H, m), 3,16-3,40 (1H, br), 4,95-6,80 (1H, br), 6,95-7,11 (2H, m), 7,12-7,21 (1,25H, m), 7,33 (0,5H, s), 7,51 (0,25H, s), 8,08 (1H, brs), 9,05 (1H, brs), 9,64 (1H, brs).	2 Hydrochlorua
984		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,99-1,12 (4H, m), 1,20-1,43 (7H, m), 1,62-1,83 (4H, m), 2,34-2,42 (1H, m), 2,70 (1H, d, J = 11,5 Hz), 2,76-2,85 (1H, m), 2,91 (1H, d, J = 11,5 Hz), 3,92 (3H, s), 6,45 (1H, d, J = 1,4 Hz), 6,80-6,83 (1H, m), 7,45 (1H, d, J =	-

0,9 Hz).

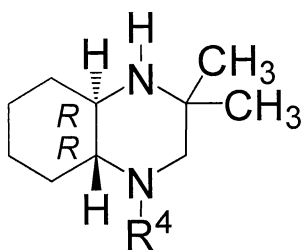
985



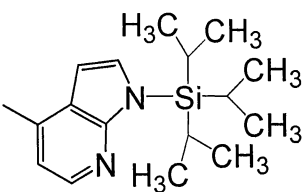
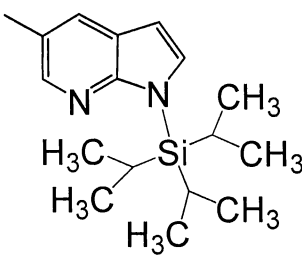
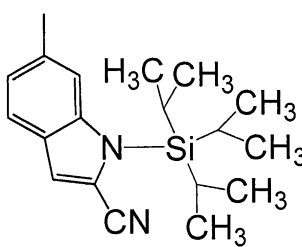
¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 1,01-1,15 (4H, m), 1,20-1,45 (7H, m), 1,67-1,90 (4H, m), 2,44-2,53 (1H, m), 2,77-2,87 (2H, m), 2,98 (1H, d, J = 11,9 Hz), 6,74 (1H, dd, J = 1,6, 11,5 Hz), 6,90-6,94 (1H, m), 7,43 (1H, d, J = 0,9 Hz).

Bảng 111

Cấu hình tuyệt đối



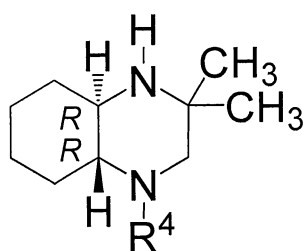
Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
986		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,83-1,44 (26H, m), 1,52 (3H, s), 1,55-1,90 (7H, m), 2,36-2,62 (2H, m), 2,80-3,00 (2H, m), 6,69-6,84 (3H, m), 7,24 (1H, d, J = 3,2 Hz).	-
987		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,80-1,38 (26H, m), 1,42 (3H, s), 1,58-1,77 (4H, m), 2,01 (3H, sextet, J = 7,5 Hz), 2,25-2,34 (1H, m), 2,65 (1H, d, J = 11,2 Hz), 2,75-2,85 (2H, m), 7,11 (1H, dd, J = 2,1, 9,1 Hz), 7,32 (1H, d, J = 2,1 Hz), 7,33 (1H, d, J = 0,5 Hz), 7,50 (1H, d, J = 9,1 Hz).	-
988		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,76-1,40 (26H, m), 1,52 (3H, s), 1,56-1,94 (7H, m), 2,35-2,64 (2H, m), 2,79-3,01 (2H, m), 3,88 (3H, s), 6,54 (1H, d, J = 8,1 Hz), 6,69 (1H, d, J = 3,1 Hz), 6,74 (1H, d, J = 8,1 Hz), 7,24 (1H, d, J = 3,2 Hz).	-

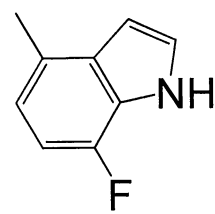
989		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 0,95-1,20 (22H, m), 1,20-1,45 (3H, m), 1,52 (3H, s), 1,62-1,90 (7H, m), 2,10-2,20 (1H, m), 2,57-2,68 (2H, m), 2,83-2,95 (1H, m), 3,26 (1H, d, $J = 11,7$ Hz), 6,55 (1H, d, $J = 3,5$ Hz), 6,63 (1H, d, $J = 5,2$ Hz), 7,18 (1H, d, $J = 3,5$ Hz), 8,12 (1H, d, $J = 5,2$ Hz).	-
990		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 0,96-1,17 (23H, m), 1,17-1,40 (3H, m), 1,42 (3H, s), 1,55-1,66 (2H, m), 1,66-1,76 (2H, m), 1,84 (3H, quint, $J = 7,5$ Hz), 2,28-2,37 (1H, m), 2,72 (1H, d, $J = 11,2$ Hz), 2,76-2,85 (2H, m), 6,47 (1H, d, $J = 3,4$ Hz), 7,27 (1H, d, $J = 3,4$ Hz), 7,61 (1H, d, $J = 2,4$ Hz), 8,06 (1H, d, $J = 2,4$ Hz).	-
991		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 0,89-1,40 (26H, m), 1,43 (3H, s), 1,60-1,80 (4H, m), 1,95-2,07 (3H, m), 2,30-2,40 (1H, m), 2,58 (1H, d, $J = 11,3$ Hz), 2,80-2,90 (2H, m), 6,98 (1H, d, $J = 1,6, 8,5$ Hz), 7,31 (1H, s), 7,34 (1H, d, $J = 0,6$ Hz), 7,52 (1H, d, $J = 8,5$ Hz).	-

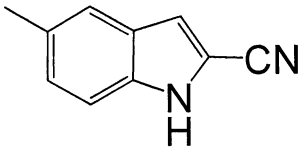
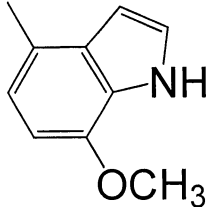
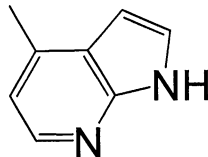
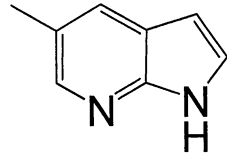
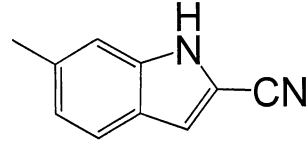
Bảng 112

Cấu hình tuyệt đối

I

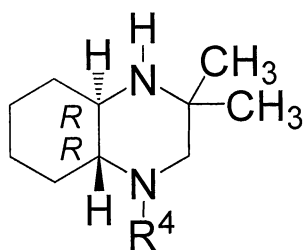


Ví dụ	R^4	NMR	Muối
992		$^1\text{H-NMR}$ (DMSO-d_6) δ ppm: 0,77-0,92 (1H, m), 0,95 (3H, s), 1,09-1,35 (3H, m), 1,40 (3H, s), 1,46-1,57 (2H, m), 1,58-1,83 (3H, m), 2,29-2,47 (2H, m), 2,60-2,85 (2H, m), 6,47 (1H, brs), 6,58-6,65 (1H, m), 6,81 (1H, dd, $J = 8,3, 11,0$ Hz), 7,30 (1H, t, $J = 2,7$ Hz), 11,47 (1H, s).	-

993		1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,83-1,00 (4H, m), 1,08-1,34 (6H, m), 1,41-1,67 (5H, m), 2,19-2,27 (1H, m), 2,55 (1H, d, J = 10,8 Hz), 2,59-2,69 (2H, m), 7,11 (1H, dd, J = 1,8, 8,8 Hz), 7,26 (1H, d, J = 0,8 Hz), 7,32 (1H, d, J = 1,8 Hz), 7,37 (1H, d, J = 8,8 Hz), 12,25 (1H, brs).	-
994		1H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,75-0,99 (4H, m), 1,08-1,90 (11H, m), 2,20-2,45 (2H, m), 2,58-2,86 (2H, m), 3,86 (3H, s), 6,38 (1H, brs), 6,47-6,66 (2H, m), 7,13 (1H, t, J = 2,5 Hz), 11,07 (1H, s).	-
995		1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,95-1,09 (1H, m), 1,21 (3H, s), 1,25-1,65 (7H, m), 1,69-1,79 (1H, m), 1,86-2,03 (2H, m), 2,88 (1H, d, J = 12,4 Hz), 2,96-3,21 (3H, m), 6,39 (1H, d, J = 2,6 Hz), 6,49 (2H, s), 6,72 (1H, d, J = 5,3 Hz), 7,33-7,38 (1H, m), 8,09 (1H, d, J = 5,3 Hz), 8,35-11,15 (1H, br), 11,58 (1H, s).	Fumarat
996		1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,95-1,10 (1H, m), 1,10-1,23 (1H, m), 1,23-1,38 (4H, m), 1,38-1,60 (6H, m), 1,63-1,75 (1H, m), 1,84-1,95 (1H, m), 2,72-2,85 (2H, m), 3,00-3,13 (2H, m), 6,38-6,43 (1H, m), 6,50 (1H, s), 7,43-7,48 (1H, m), 7,75 (1H, d, J = 1,9 Hz), 7,99 (1H, d, J = 2,2 Hz), 8,35-11,30 (2H, br), 11,61 (1H, s).	1/2 Fumarat
997		1H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,85-1,05 (4H, m), 1,10-1,36 (6H, m), 1,35-2,10 (5H, m), 2,25-2,35 (1H, m), 2,56 (1H, d, J = 11,0 Hz), 2,62-2,70 (1H, m), 2,75 (1H, d, J = 11,0 Hz), 6,91 (1H, dd, J = 1,2, 8,6 Hz), 7,02 (1H, s), 7,27 (1H, s), 7,55 (1H, d, J = 8,6 Hz), 11,93-12,33 (1H, br).	-

Bảng 113

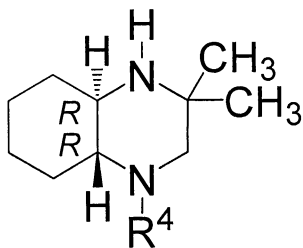
Cấu hình tuyệt đối



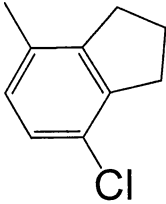
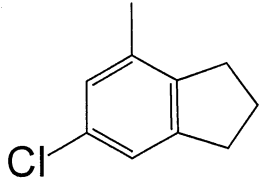
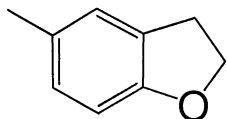
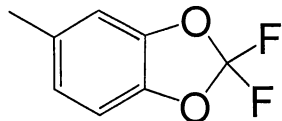
Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
998		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,72-1,19 (5H, m), 1,25-1,45 (3H, m), 1,48 (3H, s), 1,65-1,82 (3H, m), 2,08-2,20 (1H, m), 2,65-2,80 (2H, m), 2,80-2,95 (1H, m), 3,27 (1H, d, J = 11,9 Hz), 3,85 (3H, s), 6,45 (1H, d, J = 3,5 Hz), 6,63 (1H, d, J = 5,3 Hz), 7,06 (1H, d, J = 3,5 Hz), 8,20 (1H, d, J = 5,3 Hz).	-
999		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,95-1,60 (11H, m), 1,60-1,83 (2H, m), 1,83-1,95 (1H, m), 2,65-2,83 (2H, m), 3,00-3,10 (2H, m), 3,79 (3H, s), 6,41 (1H, d, J = 3,4 Hz), 6,48 (2H, s), 7,50 (1H, d, J = 3,4 Hz), 7,77 (1H, d, J = 2,2 Hz), 8,04 (1H, d, J = 2,2 Hz), 8,35-10,85 (2H, br).	Fumarat

Bảng 114

Cấu hình tuyệt đối

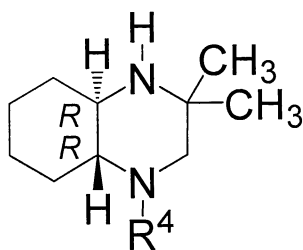


Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
-------	----------------	-----	------

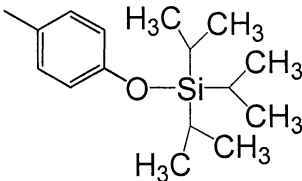
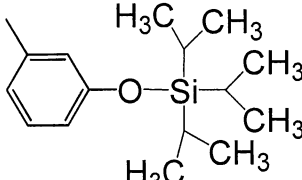
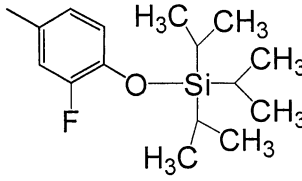
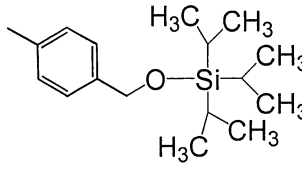
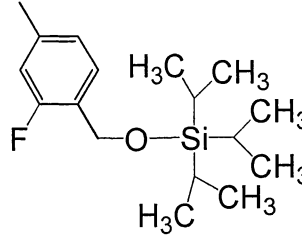
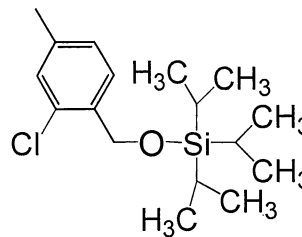
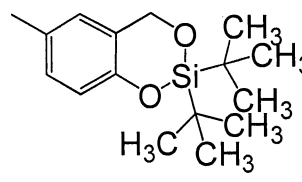
1000		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,87-1,00 (1H, m), 1,15-1,40 (5H, m), 1,50-1,78 (7H, m), 1,90-2,11 (3H, m), 2,65-2,80 (2H, m), 2,80-3,05 (5H, m), 3,09-3,25 (1H, m), 3,48 (1H, brs), 6,99 (1H, d, J = 8,3 Hz), 7,21 (1H, d, J = 8,3 Hz), 8,90-9,10 (1H, m), 9,40-9,64 (1H, m).	2 Hydroclorua
1001		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,89-1,04 (1H, m), 1,20-1,40 (5H, m), 1,46-1,78 (7H, m), 1,88-2,09 (3H, m), 2,64-3,00 (7H, m), 3,05-3,25 (1H, m), 3,25-3,50 (1H, br), 6,96 (1H, s), 7,12 (1H, s), 8,70-9,10 (1H, brs), 9,15-9,55 (1H, brs).	2 Hydroclorua
1002		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,90-1,21 (2H, m), 1,22-1,43 (4H, m), 1,43-1,80 (7H, m), 1,90-2,10 (1H, m), 2,58-3,40 (6H, m), 4,52 (2H, t, J = 8,6 Hz), 5,35-6,40 (1H, br), 6,55-7,60 (3H, m), 8,60-10,20 (2H, br).	2 Hydroclorua
1003		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,98-1,13 (1H, m), 1,13-1,40 (5H, m), 1,47-1,65 (6H, m), 1,65-1,77 (1H, m), 1,91-2,06 (1H, m), 2,74-2,90 (2H, m), 2,99 (1H, d, J = 12,5 Hz), 3,08-3,21 (1H, m), 4,05-5,00 (1H, br), 6,95 (1H, dd, J = 2,0, 8,6 Hz), 7,26 (1H, d, J = 2,0 Hz), 7,36 (1H, d, J = 8,6 Hz), 8,94-9,20 (1H, br), 9,55-9,85 (1H, br).	2 Hydroclorua

Bảng 115

Cấu hình tuyệt đối

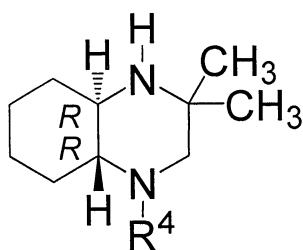


Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
-------	----------------	-----	------

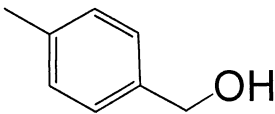
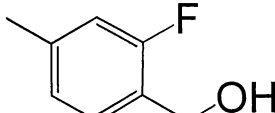
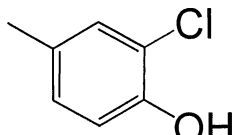
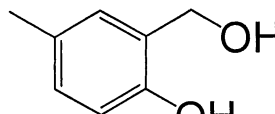
1004		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 0,78-1,04 (2H, m), 1,04-1,14 (21H, m), 1,15-1,35 (6H, m), 1,38 (3H, s), 1,51-1,75 (4H, m), 2,12-2,20 (1H, m), 2,58 (1H, d, $J = 11,1$ Hz), 2,69-2,78 (2H, m), 6,76-6,81 (2H, m), 6,92-6,97 (2H, m).	-
1005		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 0,85-1,15 (23H, m), 1,15-1,37 (6H, m), 1,38 (3H, s), 1,60-1,77 (4H, m), 2,20-2,29 (1H, m), 2,58 (1H, d, $J = 11,3$ Hz), 2,72-2,82 (2H, m), 6,60-6,65 (2H, m), 6,65-6,70 (1H, m), 7,07-7,13 (1H, m).	-
1006		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 0,75-1,13 (23H, m), 1,13-1,39 (9H, m), 1,50-1,75 (4H, m), 2,08-2,18 (1H, m), 2,55 (1H, d, $J = 11,2$ Hz), 2,69-2,78 (2H, m), 6,68-6,74 (1H, m), 6,77-6,86 (2H, m).	-
1007		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm :0,92-1,38 (29H, m), 1,39 (3H, s), 1,58-1,76 (4H, m), 2,23-2,31 (1H, m), 2,61 (1H, d, $J = 11,3$ Hz), 2,71-2,82 (2H, m), 4,79 (2H, s), 7,02-7,08 (2H, m), 7,22-7,31 (2H, m).	-
1008		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm :0,72-1,35 (29H, m), 1,36 (3H, s), 1,60-1,78 (4H, m), 2,21-2,30 (1H, m), 2,60 (1H, d, $J = 12,1$ Hz), 2,71-2,84 (2H, m), 5,30 (2H, s), 6,72 (1H, dd, $J = 2,0, 12,0$ Hz), 6,86 (1H, $J = 2,0, 8,2$ Hz), 7,44 (1H, t, $J = 8,4$ Hz).	-
1009		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm :0,72-1,39 (32H, m), 1,52-1,75 (4H, m), 2,08-2,18 (1H, m), 2,56 (1H, d, $J = 11,1$ Hz), 2,67-2,77 (2H, m), 6,80 (1H, d, $J = 8,6$ Hz), 6,84 (1H, dd, $J = 2,4, 8,6$ Hz), 7,08 (1H, d, $J = 2,4$ Hz).	-
1010		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 0,86-1,09 (23H, m), 1,09-1,36 (3H, m), 1,37 (3H, s), 1,50-1,75 (4H, m), 2,11-2,19 (1H, m), 2,57 (1H, d, $J = 11,1$ Hz), 2,67-2,77 (2H, m), 4,95 (2H, s), 6,67 (1H, d, $J = 2,5$ Hz), 6,82 (1H, d, $J = 8,5$ Hz), 6,91 (1H, dd, $J = 2,5, 8,5$ Hz).	-

Bảng 116

Cấu hình tuyệt đối

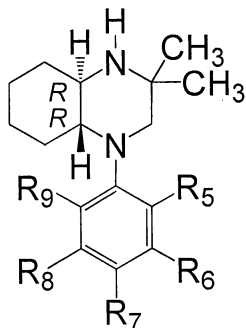


Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
1011		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,92-1,06 (1H, m), 1,09 (3H, s), 1,12-1,39 (3H, m), 1,41 (3H, s), 1,55-1,66 (2H, m), 1,66-1,79 (2H, m), 2,17-2,25 (1H, m), 2,61 (1H, d, J = 11,3 Hz), 2,70-2,83 (2H, m), 3,53-4,70 (2H, br), 6,73-6,79 (2H, m), 6,94-7,01 (2H, m).	-
1012		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,82-1,00 (4H, m), 1,09-1,35 (6H, m), 1,40-1,52 (1H, m), 1,52-1,70 (4H, m), 2,15-2,25 (1H, m), 2,44-2,55 (1H, m), 2,55-2,64 (1H, m), 2,66 (1H, d, J = 12,2 Hz), 6,39-6,51 (3H, m), 6,99-7,09 (1H, m), 9,21 (1H, s).	-
1013		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,90-1,03 (1H, m), 1,05-1,53 (10H, m), 1,53-1,62 (1H, m), 1,62-1,74 (1H, m), 1,80-1,90 (1H, m), 2,48-2,59 (1H, m), 2,68 (1H, J = 11,8 Hz), 2,84 (1H, d, J = 11,8 Hz), 2,90-3,01 (1H, m), 3,74 (3H, s), 4,45 (2H, s), 6,45 (1H, s), 6,86 (1H, d, J = 8,6 Hz), 6,94 (1H, dd, J = 2,5, 8,6 Hz), 7,15 (1H, d, J = 2,5 Hz), 8,10-10,15 (1H, br).	1/2 Fumarat
1014		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,83-1,00 (4H, m), 1,05-1,31 (6H, m), 1,40-1,51 (1H, m), 1,51-1,65 (3H, m), 2,05-2,14 (1H, m), 2,47 (1H, d, J = 10,8 Hz), 2,53-2,62 (2H, m), 3,10-3,60 (1H, br), 6,67-6,73 (1H, m), 6,79-6,87 (2H, m), 9,00-10,10 (1H, m).	-

1015		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 0,84-1,12 (5H, m), 1,16-1,45 (6H, m), 1,59-2,14 (5H, m), 2,25-2,35 (1H, m), 2,56-2,65 (1H, m), 2,72-2,85 (2H, m), 4,64 (2H, m), 7,07 (2H, dd, $J = 1,3, 8,1$ Hz), 7,29 (2H, d, $J = 8,1$ Hz).	-
1016		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 0,95-1,44 (11H, m), 1,44-2,22 (5H, m), 2,26-2,35 (1H, m), 2,62 (1H, d, $J = 11,4$ Hz), 2,72-2,87 (2H, m), 4,69 (2H, s), 6,75 (1H, dd, $J = 2,0, 12,0$ Hz), 6,81 (1H, dd, $J = 2,0, 8,1$ Hz), 7,29 (1H, t, $J = 8,4$ Hz).	-
1017		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 0,89-1,12 (4H, m), 1,14-1,43 (6H, m), 1,53-1,77 (4H, m), 2,12-2,21 (1H, m), 2,57 (1H, d, $J = 11,2$ Hz), 2,67-2,80 (2H, m), 2,80-3,30 (2H, br), 6,89-6,96 (2H, m), 7,05-7,09 (1H, m).	-
1018		$^1\text{H-NMR}$ (DMSO-d_6) δ ppm: 0,78-0,94 (1H, m), 0,95 (3H, s), 1,04-1,32 (6H, m), 1,39-1,66 (5H, m), 2,05-2,15 (1H, m), 2,45-2,62 (3H, m), 4,43 (2H, s), 4,70-5,15 (1H, br), 6,65 (1H, d, $J = 8,4$ Hz), 6,74 (1H, dd, $J = 2,5, 8,4$ Hz), 7,03 (1H, d, $J = 2,5$ Hz), 8,80-9,30 (1H, br).	-

Bảng 117

Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ	R^5	R^6	R^7	R^8	R^9	NMR	Muối
-------	--------------	--------------	--------------	--------------	--------------	-----	------

1019	-CH ₃	-H	-H	-H	-H	¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 0,88-1,03 (1H, m), 1,10-1,25 (1H, m), 1,25-1,40 (4H, m), 1,45-1,66 (6H, m), 1,67-1,89 (1H, m), 1,92-2,03 (1H, m), 2,26 (3H, m), 2,65 (1H, d, J = 12,5 Hz), 2,80 (1H, d, J = 12,5 Hz), 2,88-3,00 (1H, m), 3,15-3,28 (1H, m), 7,06-7,17 (2H, m), 7,19-7,26 (2H, m), 9,04 (1H, brs), 9,58 (1H, brs).	Hydroclorua
1020	-CH ₃	-CH ₃	-H	-H	-H	¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 0,89-1,02 (1H, m), 1,09-1,23 (1H, m), 1,24-1,40 (4H, m), 1,40-1,66 (6H, m), 1,67-1,76 (1H, m), 1,93-2,02 (1H, m), 2,21 (3H, s), 2,22 (3H, s), 2,60 (1H, d, J = 12,5 Hz), 2,76-2,95 (2H, m), 3,15-3,35 (1H, m), 6,97-7,03 (2H, m), 7,07-1,15 (1H, m), 9,07 (1H, brs), 9,61 (1H, brs).	Hydroclorua
1021	-H	-F	-CN	-H	-H	¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 1,21-1,65 (10H, m), 1,65-1,84 (2H, m), 1,90-2,00 (1H, m), 2,10-2,20 (1H, m), 3,38-3,61 (3H, m), 3,78 (1H, d, J = 14,5 Hz), 6,83 (1H, dd, J = 2,3, 8,9 Hz), 6,97 (1H, dd, J = 2,0, 13,7 Hz), 7,65 (1H, t, J = 8,5 Hz), 8,93-9,15 (1H, m),	Fumarat

						9,51-9,71 (1H, m).	
1022	-H	-H	-OCF3	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 1,00-1,15 (1H, m), 1,15-1,40 (5H, m), 1,50-1,67 (6H,m), 1,67-1,77 (1H, m), 1,95-2,05 (1H, m), 2,80-2,95 (2H, m), 3,01 (1H, d, J = 12,4 Hz), 3,11-3,25 (1H, m), 5,15-5,32 (1H, br), 7,20-7,27 (2H, m), 7,31-7,37 (2H, m), 9,10 (1H, brs), 9,68 (1H, brm).	2 Hydrochlorua
1023	-H	-F	-OCF3	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 1,04-1,20 (1H, m), 1,20-1,41 (5H, m), 1,479-1,78 (7H, m), 1,97-2,07 (1H, m), 2,86-3,11 (3H, m), 3,15-3,27 (1H, m), 4,45-6,85 (1H, br), 7,00-7,16 (1H, m), 7,22-7,29 (1H, m), 7,46-7,55 (1H, m), 9,12 (1H, brs), 9,77 (1H, brs).	2 Hydrochlorua
1024	-H	-H	-OCHF2	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 0,98-1,40 (6H, m), 1,49-1,77 (7H, m), 1,95-2,06 (1H, m), 2,76-2,95 (2H, m), 3,03 (1H, d, J = 12,3 Hz), 3,10-3,23 (1H, m), 6,20-6,90 (1H, br), 7,01 (0,25H, s), 7,13-7,23 (4,5H, m), 7,38 (0,25H, s), 9,17 (1H, brs), 9,74 (1H, brm).	2 Hydrochlorua

1025	-H	-F	-OCHF2	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δppm :1,03-1,40 (6H, m), 1,50-1,67 (6H, m), 1,67-1,77 (1H, m), 1,96-2,05 (1H, m), 2,81-2,95 (2H, m), 3,02 (1H, d, J = 12,5 Hz), 3,10-3,23 (1H, m), 3,88-4,20 (1H, br), 6,96-7,01 (1H, m), 7,02 (0,25H, s), 7,17 (1H, dd, J = 2,5, 12,1 Hz), 7,20 (0,5H, s), 7,33 (1H, t, J = 8,9 Hz), 7,39 (0,25H, s), 9,08-9,22 (1H, m), 9,70-9,88 (1H, m).	2 Hydrochlorua
1026	-H	-Cl	-OCHF2	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 1,02-1,15 (1H, m), 1,15-1,41 (5H, m), 1,50-1,67 (6H, m), 1,67-1,78 (1H, m), 1,93-2,04 (1H, m), 2,78-2,95 (2H, m), 2,95-3,06 (1H, m), 3,10-3,25 (1H, m), 3,50-4,05 (1H, br), 7,15 (1H, dd, J = 2,5, 8,8 Hz), 7,24 (1H, t, J = 73,3 Hz), 7,32 (1H, d, J = 2,5 Hz), 7,34 (1H, d, J = 8,8 Hz), 8,90-9,20 (1H, br), 9,44-9,75 (1H, br).	2 Hydrochlorua
1027	-H	-OCHF2	-H	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 1,01-1,15 (1H, m), 1,15-1,42 (5H, m), 1,50-1,68 (6H, m), 1,68-1,78 (1H, m), 1,96-2,06 (1H, m), 2,83-2,96 (2H, m), 3,03 (1H, d, J = 12,7 Hz), 3,10-	2 Hydrochlorua

						3,25 (1H, m), 6,89 (1H, s), 6,96 (1H, dd, J = 2,1, 8,1 Hz), 7,00 (1H, d, J = 8,1 Hz), 7,27 (1H, t, J = 74,1 Hz), 7,39 (1H, t, J = 8,1 Hz), 7,85-8,90 (1H, br), 9,00-9,25 (1H, br), 9,65-9,85 (1H, br).	
1028	-H	-OCHF2	-Cl	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δ ppm: 1,02-1,41 (6H, m), 1,49-1,80 (7H, m), 1,91-2,07 (1H, m), 2,78-2,90 (1H, m), 2,90-3,05 (2H, m), 3,10-3,27 (1H, m), 3,90-4,65 (1H, br), 7,01-7,08 (2H, m), 7,32 (1H, t, J = 73,3 Hz), 7,54 (1H, d, J = 8,4 Hz), 8,85-9,10 (1H, m), 9,39-9,70 (1H, m).	2 Hydrochlorua
1029	-H	-OCHF2	-F	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δ ppm: 1,00-1,40 (6H, m), 1,47-1,65 (6H, m), 1,67-1,77 (1H, m), 1,90-2,00 (1H, m), 2,70-2,80 (1H, m), 2,87 (1H, d, J = 12,5 Hz), 2,96 (1H, d, J = 12,5 Hz), 3,10-3,24 (1H, m), 7,02-7,11 (2,25H, m), 7,27 (0,5H, s), 7,37 (1H, dd, J = 8,8, 10,5 Hz), 7,46 (0,25H, s), 8,80-9,00 (1H, br), 9,39-9,58 (1H, br).	Hydrochlorua
1030	-H	-CN	-OCHF2	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d6) δ ppm: 1,02-1,15 (1H, m),	2 Hydrochlorua

						1,17-1,40 (5H, m), 1,48-1,81 (7H, m), 1,93-2,07 (1H, m), 2,82-2,91 (1H, m), 2,94 (1H, d, J = 12,6 Hz), 3,01 (1H, d, J = 12,6 Hz), 3,08-3,25 (1H, m), 3,70-4,20 (1H, br), 7,39 (1H, t, J= 72,6 Hz), 7,42 (1H, d, J = 8,9 Hz), 7,51 (1H, dd, J = 2,7, 9,0 Hz), 7,69 (1H, d, J = 2,7 Hz), 8,90- 9,10 (1H, br), 9,35-9,70 (1H, br).	
1031	-H	-F	-OCHF2	-F	-H	1H-NMR (DMSO- d6) δ ppm: 1,08- 1,40 (6H, m), 1,43-1,80 (7H, m), 1,95-2,07 (1H, m), 2,88-2,99 (1H, m), 3,05 (1H, d, J = 13,1 Hz), 3,09 (1H, d, J = 13,1 Hz), 3,17-3,30 (1H, m), 3,48-3,70 (1H, br), 6,97-7,06 (2,25H, m), 7,19 (0,5H, s), 7,37 (0,25H, s), 8,81- 9,04 (1H, br), 9,45-9,65 (1H, br).	2 Hydrochlorua
1032	-H	-H	- OCH2CHF2	-H	-H	1H-NMR (DMSO- d6) δ ppm: 0,98- 1,85 (13H, m), 1,90-2,20 (1H, m), 2,60-3,80 (4H, m), 4,20-4,40 (2H, m), 4,40-5,40 (1H, br), 6,38 (1H, tt, J = 3,4, 54,5 Hz), 6,85-7,70 (4H, brm), 8,84-10,40 (2H, br).	2 Hydrochlorua

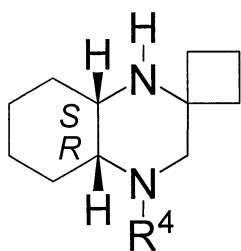
1033	-H	-F	OCH ₂ CHF ₂	-H	-H	1H-NMR (CDCl₃) δppm: 0,94-1,11 (4H, m), 1,14-1,41 (7H, m), 1,57-1,78 (4H, m), 2,13-2,22 (1H, m), 2,56 (1H, d, J = 11,1 Hz), 2,70-2,79 (2H, m), 4,21 (2H, dt, J = 4,2, 13,1 Hz), 6,08 (1H, tt, J = 4,2, 55,1 Hz), 6,77-6,83 (1H, m), 6,83-6,95 (2H, m).	-
1034	-H	Cl	OCH ₂ CHF ₂	-H	-H	1H-NMR (CDCl₃) δppm: 0,93-1,11 (4H, m), 1,15-1,41 (7H, m), 1,55-1,77 (4H, m), 2,14-2,23 (1H, m), 2,57 (1H, d, J = 11,0 Hz), 2,68-2,78 (2H, m), 4,20 (2H, dt, J = 4,2, 13,0 Hz), 6,12 (1H, tt, J = 4,2, 55,1 Hz), 6,87 (1H, d, J = 8,7 Hz), 6,96 (1H, dd, J = 2,5, 8,7 Hz), 7,13 (1H, d, J = 2,5 Hz).	
1035	-H	-CH ₃	-OCHF ₂	-H	-H	1H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 0,97-1,10 (1H, m), 1,12-1,40 (5H, m), 1,47-1,63 (6H, m), 1,67-1,76 (1H, m), 1,90-2,01 (1H, m), 2,20 (3H, m), 2,70-2,80 (1H, m), 2,83 (1H, d, J = 12,3 Hz), 2,95 (1H, d, J = 12,3 Hz), 3,08-3,22 (1H, m), 4,60-5,40 (1H, br), 6,94 (0,25H, s), 6,99 (1H, dd, J = 2,5, 8,5 Hz), 7,05 (1H, d, J = 2,5 Hz),	2 Hydroclorua

						7,09-7,15 (1,5H, m), 7,31 (0,25H, s), 8,85-9,01 (1H, m), 9,40-9,55 (1H, m).	
1036	-H	-OCH ₃	-OCHF ₂	-H	-H	¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,00-1,40 (6H, m), 1,50-1,80 (7H, m), 1,95-2,06 (1H, m), 2,75-2,94 (2H, m), 2,96-3,07 (1H, m), 3,09-3,22 (1H, m), 3,82 (3H, s), 6,08-6,65 (1H, br), 6,73 (1H, d, J = 8,2 Hz), 6,80-6,89 (1,25H, m), 7,01 (0,5H, s), 7,14 (1H, d, J = 8,4 Hz), 7,19 (0,25H, s), 9,09 (1H, brs), 9,72 (1H, brs).	2 Hydroclorua

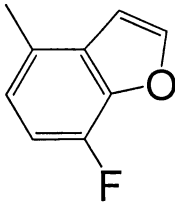
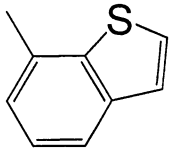
Bảng 118

Cấu hình tuyệt đối

1

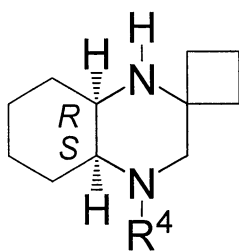


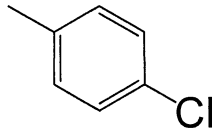
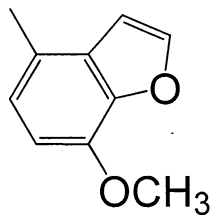
Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
1037		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,1-1,35 (3H, m), 1,4-1,55 (1H, m), 1,55-1,95 (8H, m), 1,95-2,05 (2H, m), 2,68 (1H, d, J = 11,9Hz), 2,8-4,0 (5H, m), 6,55 (1H, s), 6,85-6,95 (2H, m), 7,14-7,22 (2H, m).	1/2 Fumarat

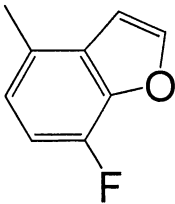
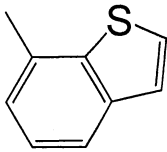
1038		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 0,95-1,15 (2H, m), 1,3-1,4 (1H, m), 1,4-2,1 (11H, m), 2,25-2,4 (1H, m), 3,04 (1H, d, $J = 11,1\text{Hz}$), 3,17 (1H, d, $J = 10,9\text{Hz}$), 3,41 (1H, br), 3,45-3,58 (1H, m), 6,54 (1H, dd, $J = 3,3, 8,4\text{Hz}$), 6,82 (1H, dd, $J = 2,5, 2,5\text{Hz}$), 6,91 (1H, dd, $J = 8,6, 10,4\text{Hz}$), 7,59 (1H, d, $J = 2,1\text{Hz}$).	-
1039		$^1\text{H-NMR}$ (DMSO-d_6) δ ppm: 0,95-1,5 (3H, m), 1,5-1,7 (2H, m), 1,7-2,3 (6H, m), 2,3-2,7 (3H, m), 3,0-3,4 (1H, m), 3,59 (2H, br), 3,73 (1H, br), 7,07 (1H, br), 7,3-7,45 (1H, m), 7,48 (1H, d, $J = 5,4\text{Hz}$), 7,64 (1H, br), 7,75 (1H, d, $J = 5,4\text{Hz}$), 8,75-10,3 (2H, m).	Hydroclorua

Bảng 119

Cấu hình tuyệt đối

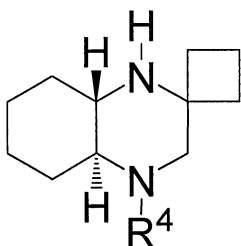


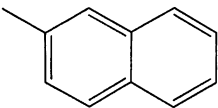
Ví dụ	R^4	NMR	Muối
1040		$^1\text{H-NMR}$ (DMSO-d_6) δ ppm: 1,1-1,35 (3H, m), 1,4-1,55 (1H, m), 1,55-1,95 (8H, m), 1,95-2,05 (2H, m), 2,68 (1H, d, $J = 11,9\text{Hz}$), 2,8-4,0 (5H, m), 6,55 (1H, s), 6,85-6,95 (2H, m), 7,14-7,22 (2H, m).	1/2 Fumarat
1041		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 0,95-1,1 (2H, m), 1,3-1,4 (1H, m), 1,4-2,1 (11H, m), 2,25-2,4 (1H, m), 3,01 (1H, d, $J = 11,0\text{Hz}$), 3,17 (1H, d, $J = 11,1\text{Hz}$), 3,40 (1H, br), 3,45-3,5 (1H, m), 3,97 (3H, s), 6,58 (1H, d, $J = 8,4\text{Hz}$), 6,70 (1H, d, $J = 8,4\text{Hz}$), 6,80 (1H, d, $J = 2,1\text{Hz}$), 7,58 (1H, d, $J = 2,1\text{Hz}$).	-

1042		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 0,95-1,15 (2H, m), 1,3-1,4 (1H, m), 1,4-2,1 (1H, m), 2,25-2,4 (1H, m), 3,04 (1H, d, $J = 11,1\text{Hz}$), 3,17 (1H, d, $J = 10,9\text{Hz}$), 3,41 (1H, br), 3,45-3,58 (1H, m), 6,54 (1H, dd, $J = 3,3, 8,4\text{Hz}$), 6,82 (1H, dd, $J = 2,5, 2,5\text{Hz}$), 6,91 (1H, dd, $J = 8,6, 10,4\text{Hz}$), 7,59 (1H, d, $J = 2,1\text{Hz}$).	-
1043		$^1\text{H-NMR}$ (DMSO-d_6) δ ppm: 0,95-1,5 (3H, m), 1,5-1,7 (2H, m), 1,7-2,3 (6H, m), 2,3-2,7 (3H, m), 3,0-3,4 (1H, m), 3,59 (2H, br), 3,73 (1H, br), 7,07 (1H, br), 7,3-7,45 (1H, m), 7,48 (1H, d, $J = 5,4\text{Hz}$), 7,64 (1H, br), 7,75 (1H, d, $J = 5,4\text{Hz}$), 8,75-10,3 (2H, m).	Hydroclorua

Bảng 120

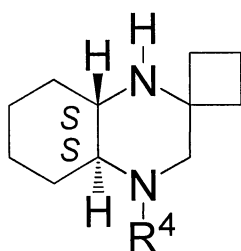
Cấu hình tương đối

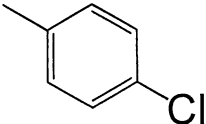
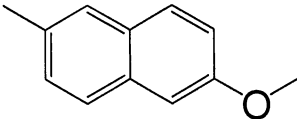
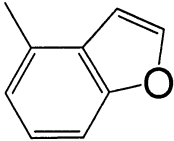
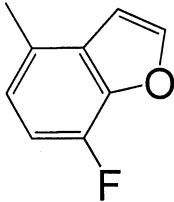


Ví dụ	R^4	NMR	Muối
1044		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 0,90-2,30 (10H, m), 2,36-3,40 (7H, m), 3,50-3,70 (1H, m), 7,30-7,55 (3H, m), 7,55-7,75 (1H, m), 7,75-7,90 (3H, m), 9,75-10,40 (2H, br).	2 Hydroclorua

Bảng 121

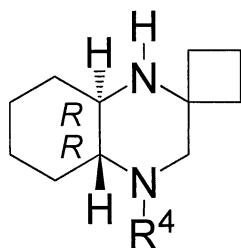
Cấu hình tuyệt đối

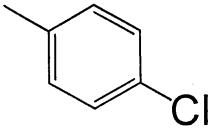
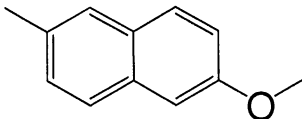
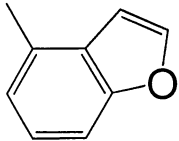
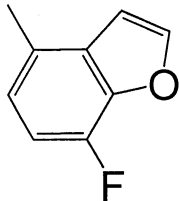


Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
1045		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,85-1,0 (1H, m), 1,12-1,40 (2H, m), 1,42-1,63 (3H, m), 1,65-1,78 (1H, m), 1,84-1,97 (3H, m), 1,97-2,06 (1H, m), 2,24-2,38 (2H, m), 2,39-2,49 (1H, m), 2,73-2,93 (2H, m), 3,03 (1H, d, J = 12,5Hz), 3,23 (1H, d, J = 12,5Hz), 3,6 (1H, br), 7,15-7,25 (2H, m), 7,37-7,46 (2H, m), 9,37 (1H, br), 9,87 (1H, br).	2 Hydroclorua
1046		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,95-1,1 (1H, m), 1,15-1,45 (3H, m), 1,45-1,95 (10H, m), 2,45-2,7 (3H, m), 2,80 (1H, dd, J = 1,7, 11,2Hz), 3,19 (1H, d, J = 11,1Hz), 3,91 (3H, s), 7,08-7,15 (2H, m), 7,29 (1H, dd, J = 2,1, 8,7Hz), 7,45 (1H, d, J = 2,0Hz), 7,63-7,71 (2H, m).	-
1047		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,85-1,1 (1H, m), 1,1-1,45 (2H, m), 1,45-1,65 (3H, m), 1,65-1,8 (1H, m), 1,8-2,0 (3H, m), 2,0-2,15 (1H, m), 2,25-2,65 (3H, m), 2,85-3,35 (2H, m), 3,6-4,35 (3H, m), 6,9-7,2 (2H, m), 7,31 (1H, dd, J = 8,0, 8,0Hz), 7,46 (1H, d, J = 8,2Hz), 8,00 (1H, d, J = 1,6Hz), 9,3-10,3 (2H, m).	2 Hydroclorua
1048		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,8-1,0 (1H, m), 1,1-1,6 (5H, m), 1,6-2,0 (5H, m), 2,1-2,5 (3H, m), 2,75-2,95 (2H, m), 2,95-3,13 (1H, m), 3,17 (1H, d, J = 12,6Hz), 6,56 (4H, s), 6,99-7,14 (2H, m), 7,20 (1H, dd, J = 8,6, 10,7Hz), 8,09 (1H, d, J = 2,0Hz), 11,4 (5H, br).	2 Fumarat

Bảng 122

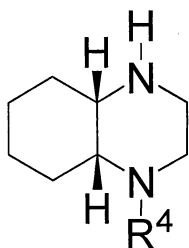
Cấu hình tuyệt đối

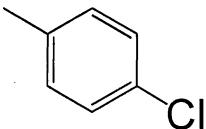
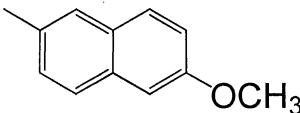
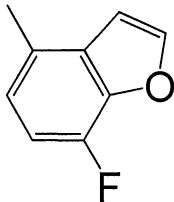
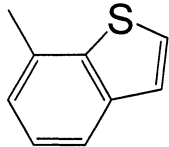
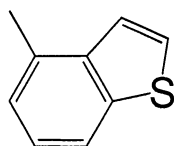
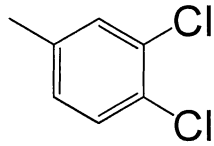


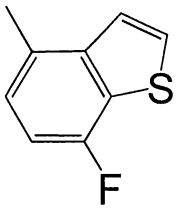
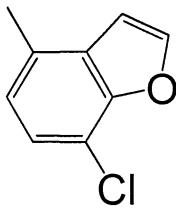
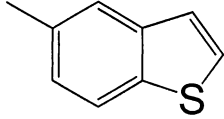
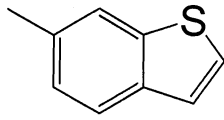
Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
1049		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,85-1,05 (1H, m), 1,1-1,4 (2H, m), 1,4-1,65 (3H, m), 1,65-1,8 (1H, m), 1,8-2,0 (3H, m), 2,0-2,1 (1H, m), 2,25-2,4 (2H, m), 2,4-2,6 (1H, m), 2,75-2,95 (2H, m), 3,0-3,1 (1H, m), 3,23 (1H, d, J = 12,6Hz), 3,5-4,0 (1H, m), 7,15-7,25 (2H, m), 7,35-7,45 (2H, m), 9,3-9,6 (1H, m), 9,85-10,1 (1H, m).	2 Hydroclorua
1050		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,95-1,1 (1H, m), 1,1-1,45 (3H, m), 1,45-1,95 (10H, m), 2,45-2,7 (3H, m), 2,80 (1H, dd, J = 1,7, 11,2Hz), 3,19 (1H, d, J = 11,2Hz), 3,91 (3H, s), 7,07-7,15 (2H, m), 7,29 (1H, dd, J = 2,1, 8,7Hz), 7,45 (1H, d, J = 2,0Hz), 7,63-7,71 (2H, m).	-
1051		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,85-1,1 (1H, m), 1,1-1,4 (2H, m), 1,4-1,65 (3H, m), 1,65-1,8 (1H, m), 1,8-2,0 (3H, m), 2,0-2,15 (1H, m), 2,25-2,65 (3H, m), 2,8-3,45 (2H, m), 3,5-4,25 (3H, m), 6,9-7,2 (2H, m), 7,31 (1H, dd, J = 8,0, 8,0Hz), 7,46 (1H, d, J = 8,2Hz), 8,00 (1H, d, J = 1,8Hz), 9,3-10,3 (2H, m).	2 Hydroclorua
1052		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,8-0,95 (1H, m), 1,1-1,4 (3H, m), 1,45-1,6 (2H, m), 1,6-1,7 (1H, m), 1,7-1,9 (4H, m), 2,0-2,15 (1H, m), 2,15-2,3 (1H, m), 2,35-2,5 (1H, m), 2,65-2,85 (2H, m), 2,85-3,0 (1H, m), 3,13 (1H, d, J = 11,7Hz), 6,53 (3H, s), 7,0-7,1 (2H, m), 7,18 (1H, dd, J = 8,6, 10,8Hz), 8,07 (1H, d, J = 2,1Hz), 10,3 (4H, br).	1,5 Fumarat

Bảng 123

Cấu hình tương đối

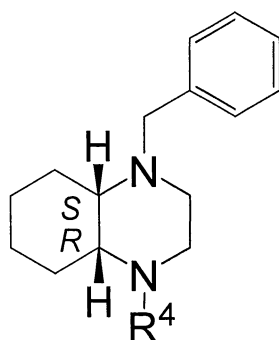


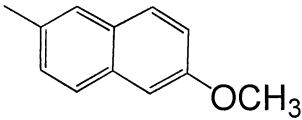
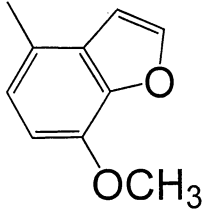
Ví dụ.	R ⁴	NMR	Muối
1053		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 1,14-1,29 (1H, m), 1,29-1,38 (1H, m), 1,38-1,58 (3H, m), 1,62-1,86 (4H, m), 2,95-3,05 (2H, m), 3,1-3,25 (3H, m), 3,6-3,7 (1H, m), 6,74-6,82 (2H, m), 7,14-7,21 (2H, m).	-
1054		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 1,14-1,36 (2H, m), 1,37-1,65 (3H, m), 1,65-1,77 (2H, m), 1,77-1,91 (2H, m), 3,01-3,17 (2H, m), 3,19-3,28 (3H, m), 3,75-3,83 (1H, m), 3,88 (3H, s), 6,97-7,11 (3H, m), 7,23-7,30 (1H, m), 7,57 (1H, d, J = 8,8Hz), 7,62 (1H, d, J = 9,0Hz).	-
1055		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,97-1,14 (2H, m), 1,32-1,43 (1H, m), 1,43-1,67 (2H, m), 1,68-2,03 (3H, m), 3,01-3,14 (2H, m), 3,25-3,43 (2H, m), 3,55-3,64 (1H, m), 3,66-3,77 (1H, m), 6,55 (4H, s), 6,68 (1H, br), 7,10 (1H, dd, J = 8,7, 10,7Hz), 7,22 (1H, br), 8,05 (1H, d, J = 2,2Hz), 11,27 (5H, br).	2 Fumarat
1056		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,95-1,15 (2H, m), 1,28-1,40 (1H, m), 1,43-1,72 (3H, m), 1,94 (2H, br), 2,90-3,12 (2H, m), 3,19-3,30 (1H, m), 3,34-3,57 (2H, m), 3,70-3,87 (1H, br), 6,53 (2H, s), 7,00 (1H, br), 7,34 (1H, dd, J = 7,7, 7,7Hz), 7,45 (1H, d, J = 5,4Hz), 7,5-7,65 (1H, m), 7,72 (1H, d, J = 5,4Hz), 10,5 (3H, br).	Fumarat
1057		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,96-1,18 (2H, m), 1,33-1,72 (5H, m), 1,72-1,91 (1H, m), 1,92-2,07 (1H, m), 2,82-2,92 (1H, m), 3,03-3,17 (1H, m), 3,17-3,27 (1H, m), 3,38 (1H, br), 3,42-3,52 (1H, m), 3,52-3,61 (1H, m), 6,85 (1H, d, J = 7,6Hz), 7,21-7,28 (1H, m), 7,37 (1H, d, J = 5,5Hz), 7,40-7,47 (1H, m), 7,52 (1H, d, J = 8,0Hz).	-
1058		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,26-1,42 (2H, m), 1,42-1,63 (2H, m), 1,63-1,91 (3H, m), 1,91-2,04 (1H, m), 3,01-3,18 (2H, m), 3,24-3,42 (1H, m), 3,47-3,55 (1H, m), 3,55-3,65 (1H, m), 4,06-4,19 (1H, m), 6,95 (1H, dd, J = 2,9, 9,0Hz), 7,18 (1H, d, J = 2,9Hz), 7,43 (1H, d, J = 9,0Hz), 9,00 (1H, br), 9,62 (1H, br).	Hydroclorua

1059		$^1\text{H-NMR}$ (DMSO- d_6) δ ppm: 0,9-1,15 (2H, m), 1,25-1,4 (1H, m), 1,4-1,7 (3H, m), 1,91 (2H, br), 2,82-2,92 (1H, m), 2,97-3,10 (1H, m), 3,15-3,60 (7H, m), 6,52 (2H, s), 6,94 (1H, br), 7,15 (1H, dd, $J = 8,9, 8,9\text{Hz}$), 7,59 (1H, br), 7,83 (1H, d, $J = 5,3\text{Hz}$).	Fumarat
1060		$^1\text{H-NMR}$ (DMSO- d_6) δ ppm: 1,0-1,15 (2H, m), 1,28-1,40 (1H, m), 1,4-1,65 (2H, m), 1,65-1,77 (1H, m), 1,78-1,98 (2H, m), 2,95-3,15 (2H, m), 3,15-3,25 (1H, m), 3,25-3,4 (1H, m), 3,43 (1H, br), 3,7-3,8 (1H, m), 6,53 (2H, s), 6,68 (1H, d, $J = 8,5\text{Hz}$), 7,19 (1H, bs), 7,26 (1H, d, $J = 8,4\text{Hz}$), 8,04 (1H, d, $J = 2,2\text{Hz}$).	Fumarat
1061		$^1\text{H-NMR}$ (DMSO- d_6) δ ppm: 1,17-1,32 (2H, m), 1,34-1,56 (2H, m), 1,59-1,85 (3H, m), 1,86-1,96 (1H, m), 2,95-3,14 (2H, m), 3,23-3,40 (3H, m), 3,90-3,99 (1H, m), 6,51 (2H, s), 7,13 (1H, dd, $J = 2,3, 8,9\text{Hz}$), 7,27-7,34 (2H, m), 7,66 (1H, d, $J = 5,4\text{Hz}$), 7,80 (1H, d, $J = 8,9\text{Hz}$).	Fumarat
1062		$^1\text{H-NMR}$ (DMSO- d_6) δ ppm: 1,16-1,40 (3H, m), 1,40-1,55 (1H, m), 1,57-1,73 (2H, m), 1,73-1,87 (2H, m), 2,85-3,03 (3H, m), 3,04-3,83 (4H, m), 3,85-3,93 (1H, m), 6,49 (1H, s), 7,09 (1H, dd, $J = 2,2, 8,9\text{Hz}$), 7,25 (1H, d, $J = 5,3\text{Hz}$), 7,35-7,41 (2H, m), 7,67 (1H, d, $J = 8,8\text{Hz}$).	1/2 Fumarat

Bảng 124

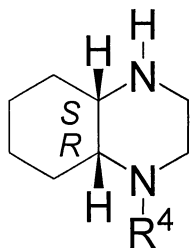
Cấu hình tuyệt đối

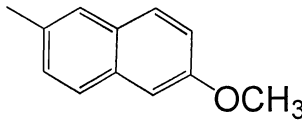


Ví dụ.	R ⁴	NMR	Muối
1063		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 1,23-1,43 (3H m), 1,44-1,57 (1H, m), 1,58-1,72 (1H, m), 1,74-1,84 (1H, m), 2,08-2,27 (2H, m), 2,33-2,42 (1H, m), 2,72-2,79 (1H, m), 2,86-2,93 (1H, m), 2,97 (1H, d, J = 13,2Hz), 3,14-3,25 (2H, m), 3,81-3,90 (4H, m), 4,22 (1H, d, J = 13,1Hz), 6,97 (1H, bs), 7,02-7,09 (2H, m), 7,22-7,30 (2H, m), 7,31-7,38 (2H, m), 7,38-7,43 (2H, m), 7,55 (1H, d, J = 8,7Hz), 7,61 (1H, d, J = 9,0Hz).	-
1064		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 1,0-1,2 (2H, m), 1,2-1,4 (1H, m), 1,4-1,9 (3H, m), 2,0-2,5 (3H, m), 2,75-3,2 (4H, m), 3,38 (1H, br), 3,60 (1H, br), 3,96 (3H, s), 4,19 (1H, br), 6,54 (1H, br), 6,68 (1H, d, J = 8,2Hz), 6,82 (1H, br), 7,22-7,29 (1H, m), 7,29-7,38 (2H, m), 7,38-7,44 (2H, m), 7,58 (1H, d, J = 2,2Hz).	-

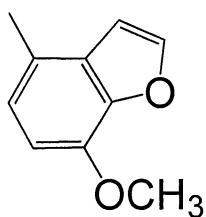
Bảng 125

Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ.	R ⁴	NMR	Muối
1065		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 1,15-1,56 (5H, m), 1,65-1,76 (2H, m), 1,76-1,90 (2H, m), 3,01-3,18 (2H, m), 3,20-3,28 (3H, m), 3,76-3,83 (1H, m), 3,88 (3H, s), 7,01 (1H, d, J = 2,4Hz), 7,04 (1H, d, J = 2,5Hz), 7,07 (1H, dd, J = 2,6, 8,8Hz), 7,25 (1H, dd, J = 2,5, 9,0Hz), 7,57 (1H, d, J = 8,8Hz), 7,62 (1H, d, J = 9,0Hz).	-

1066

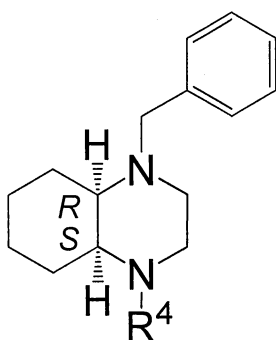


¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 0,93-1,22 (2H, m), 1,33-1,47 (1H, m), 1,47-1,70 (1H, m), 1,70-1,94 (2H, m), 1,94-2,19 (1H, m), 2,88-3,22 (2H, m), 3,27-3,48 (2H, m), 3,59-3,78 (2H, m), 3,88 (3H, s), 6,69 (1H, br), 6,82 (1H, d, J = 8,3Hz), 7,13 (1H, d, J = 1,9Hz), 7,95 (1H, d, J = 2,1Hz), 8,5 (1H, br), 9,00 (1H, br), 9,68 (1H, br).

2 Hydroclorua

Bảng 126

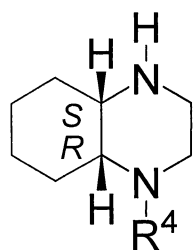
Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ.	R ⁴	NMR	Muối
1067		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 1,22-1,43 (3H m), 1,45-1,56 (1H, m), 1,58-1,72 (1H, m), 1,74-1,84 (1H, m), 2,08-2,27 (2H, m), 2,32-2,42 (1H, m), 2,73-2,79 (1H, m), 2,86-2,93 (1H, m), 2,97 (1H, d, J = 13,1Hz), 3,14-3,25 (2H, m), 3,8-3,9 (4H, m), 4,22 (1H, d, J = 13,2Hz), 6,97 (1H, bs), 7,02-7,09 (2H, m), 7,22-7,30 (2H, m), 7,31-7,37 (2H, m), 7,37-7,43 (2H, m), 7,55 (1H, d, J = 8,7Hz), 7,61 (1H, d, J = 9,0Hz).	-
1068		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 1,0-1,2 (2H, m), 1,2-1,4 (1H, m), 1,4-1,85 (3H, m), 2,05-2,5 (3H, m), 2,65-3,15 (4H, m), 3,2-3,5 (1H, m), 3,60 (1H, br), 3,96 (3H, s), 4,05-4,4 (1H, m), 6,54 (1H, br), 6,68 (1H, d, J = 8,2Hz), 6,82 (1H, br), 7,22-7,29 (1H, m), 7,29-7,38 (2H, m), 7,38-7,44 (2H, m), 7,58 (1H, d, J = 2,2Hz).	-

Bảng 127

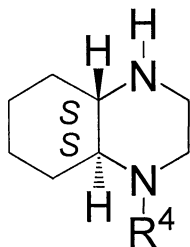
Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ.	R ⁴	NMR	Muối
1069		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 1,15-1,56 (5H, m), 1,65-1,76 (2H, m), 1,76-1,89 (2H, m), 3,00-3,20 (2H, m), 3,20-3,28 (3H, m), 3,76-3,83 (1H, m), 3,88 (3H, s), 7,01 (1H, d, J = 2,4Hz), 7,04 (1H, d, J = 2,4Hz), 7,07 (1H, dd, J = 2,6, 8,8Hz), 7,26 (1H, dd, J = 2,5, 9,0Hz), 7,57 (1H, d, J = 8,8Hz), 7,62 (1H, d, J = 9,0Hz).	-
1070		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,94-1,19 (2H, m), 1,35-1,47 (1H, m), 1,47-1,70 (1H, m), 1,70-1,91 (2H, m), 1,91-2,18 (1H, m), 3,0-3,25 (2H, m), 3,25-3,55 (2H, m), 3,6-3,8 (2H, m), 3,88 (3H, s), 6,69 (1H, br), 6,82 (1H, d, J = 8,4Hz), 7,13 (1H, d, J = 2,2Hz), 7,95 (1H, d, J = 2,1Hz), 8,90 (1H, br), 9,56 (1H, br).	Hydroclorua

Bảng 128

Cấu hình tuyệt đối

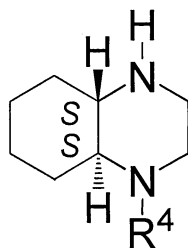


Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
-------	----------------	-----	------

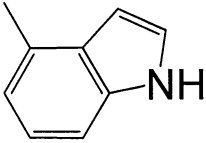
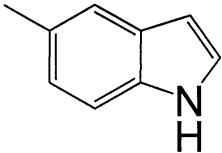
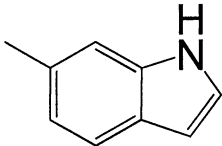
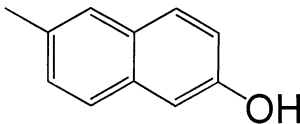
1071		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 0,96-1,19 (19H, m), 1,19-1,41 (6H, m), 1,50-1,67 (2H, m), 1,67-1,82 (3H, m), 2,48-2,65 (2H, m), 2,94-3,09 (2H, m), 3,09-3,25 (2H, m), 7,09 (1H, dd, $J = 2,4, 8,9$ Hz), 7,17 (1H, d, $J = 2,4$ Hz), 7,28 (1H, dd, $J = 2,1, 11,0$ Hz), 7,45 (1H, d, $J = 2,0$ Hz), 7,59-7,66 (2H, m).	-
1072		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 0,95-1,09 (1H, m), 1,14 (18H, d, $J = 7,5$ Hz), 1,20-1,45 (3H, m), 1,48-1,85 (8H, m), 2,58-2,74 (2H, m), 2,90-3,00 (1H, m), 3,00-3,08 (1H, m), 3,17-3,30 (2H, m), 6,74 (1H, dd, $J = 0,7, 3,2$ Hz), 6,85 (1H, d, $J = 7,3$ Hz), 7,03-7,10 (1H, m), 7,17 (1H, d, $J = 3,2$ Hz), 7,26 (1H, d, $J = 8,3$ Hz).	-
1073		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 0,95-1,09 (1H, m), 1,09-1,42 (21H, m), 1,53-1,80 (8H, m), 2,41-2,50 (1H, m), 2,54-2,64 (1H, m), 2,95-3,10 (3H, m), 3,13-3,23 (1H, m), 6,56 (1H, d, $J = 0,4, 3,1$ Hz), 6,97 (1H, dd, $J = 2,1, 8,8$ Hz), 7,23 (1H, d, $J = 3,1$ Hz), 7,37-7,44 (2H, m).	-
1074		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 0,94-1,06 (1H, m), 1,05-1,25 (19H, m), 1,25-1,45 (2H, m), 1,53-1,80 (8H, m), 2,42-2,50 (1H, m), 2,55-2,65 (1H, m), 2,90-3,00 (1H, m), 3,00-3,13 (2H, m), 3,16-3,25 (1H, m), 6,56 (1H, dd, $J = 0,7, 3,2$ Hz), 6,97 (1H, dd, $J = 1,7, 8,3$ Hz), 7,20 (1H, d, $J = 3,2$ Hz), 7,32 (1H, s), 7,52 (1H, d, $J = 8,3$ Hz).	-

Bảng 129

Cấu hình tuyệt đối

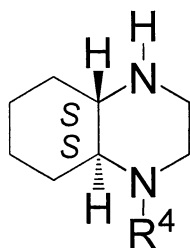


Ví dụ	R^4	NMR	Muối
-------	--------------	-----	------

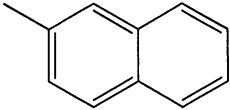
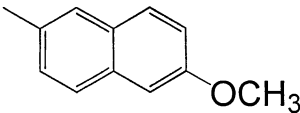
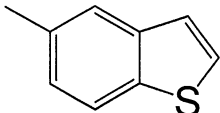
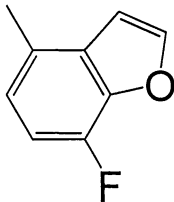
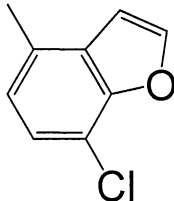
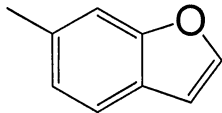
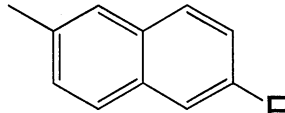
1075		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 0,95-1,09 (1H, m), 1,20-1,55 (4H, m), 1,55-1,63 (1H, m), 1,66-1,86 (3H, m), 2,59-2,77 (2H, m), 2,81-3,01 (1H, m), 3,01-3,09 (1H, m), 3,18-3,30 (2H, m), 6,66-6,71 (1H, m), 6,87 (1H, dd, $J = 1,1, 7,2$ Hz), 7,10-7,21 (3H, m), 8,25 (1H, brs).	-
1076		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 0,96-1,10 (1H, m), 1,10-1,43 (3H, m), 1,43-1,65 (3H, m), 1,65-1,84 (2H, m), 2,42-2,53 (1H, m), 2,53-2,66 (1H, m), 2,97-3,12 (3H, m), 3,15-3,26 (1H, m), 6,51 (1H, dd, $J = 1,0, 2,1$ Hz), 7,06 (1H, dd, $J = 2,0, 8,6$ Hz), 7,17-7,23 (1H, m), 7,32 (1H, d, $J = 8,6$ Hz), 7,44 (1H, d, $J = 2,0$ Hz), 8,36 (1H, brs).	-
1077		$^1\text{H-NMR}$ (DMSO-d_6) δ ppm: 0,81-0,96 (1H, m), 1,06-1,35 (3H, m), 1,43-1,57 (2H, m), 1,58-1,74 (2H, m), 2,01 (1H, brs), 2,30-2,41 (2H, m), 2,75-2,97 (4H, m), 6,31-6,37 (1H, m), 6,80 (1H, dd, $J = 1,8, 8,4$ Hz), 7,10 (1H, s), 7,25 (1H, t, $J = 2,7$ Hz), 7,41 (1H, d, $J = 8,4$ Hz), 10,89 (1H, s).	-
1078		$^1\text{H-NMR}$ (DMSO-d_6) δ ppm: 0,85-0,98 (1H, m), 1,12-1,35 (3H, m), 1,48-1,73 (4H, m), 2,17 (1H, brs), 2,32-2,50 (2H, m), 2,76-3,01 (4H, m), 6,99-7,08 (2H, m), 7,20 (1H, dd, $J = 2,1, 8,7$ Hz), 7,41 (1H, d, $J = 1,8$ Hz), 7,58 (1H, d, $J = 8,8$ Hz), 7,67 (1H, d, $J = 8,8$ Hz), 9,56 (1H, brs).	-

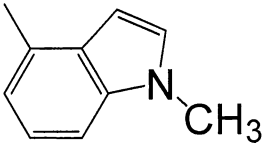
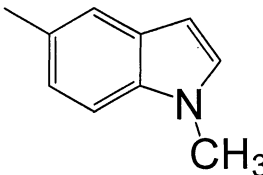
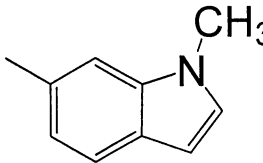
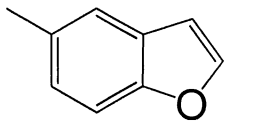
Bảng 130

Cấu hình tuyệt đối



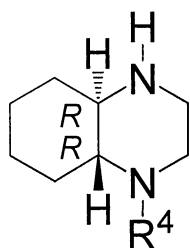
Ví dụ	R^4	NMR	Muối
-------	--------------	-----	------

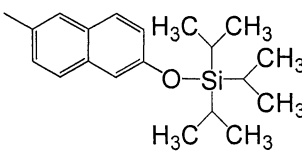
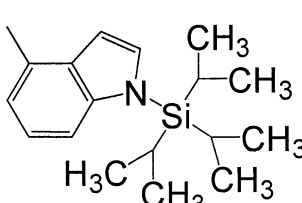
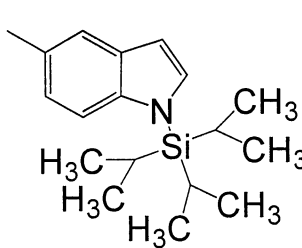
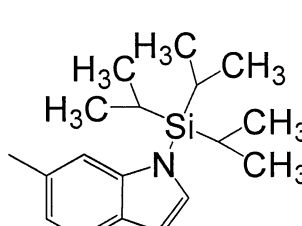
1079		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 1,00-1,14 (1H, m), 1,20-1,45 (3H, m), 1,45-1,60 (1H, m), 1,60-1,68 (1H, m), 1,68-1,85 (3H, m), 2,53-2,66 (2H, m), 2,95-3,10 (2H, m), 3,15-3,26 (2H, m), 7,33 (1H, dd, $J = 2,1, 8,8$ Hz), 7,37-7,47 (2H, m), 7,51 (1H, d, $J = 2,1$ Hz), 7,74-7,82 (3H, m).	-
1080		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 0,98-1,12 (1H, m), 1,17-1,82 (8H, m), 2,48-2,64 (2H, m), 2,95-3,25 (4H, m), 3,90 (3H, s), 7,08-7,14 (2H, m), 7,31 (1H, dd, $J = 2,1, 8,7$ Hz), 7,47 (1H, d, $J = 2,0$ Hz), 7,63-7,70 (2H, m).	-
1081		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 0,97-1,10 (1H, m), 1,15-1,69 (6H, m), 1,69-1,84 (2H, m), 2,45-2,54 (1H, m), 2,54-2,63 (1H, m), 2,93-3,13 (3H, m), 3,13-3,25 (1H, m), 7,19 (1H, dd, $J = 2,0, 8,6$ Hz), 5,27 (1H, d, $J = 5,4$ Hz), 7,42 (1H, d, $J = 5,4$ Hz), 7,59 (1H, d, $J = 2,0$ Hz), 7,79 (1H, d, $J = 8,6$ Hz).	-
1082		$^1\text{H-NMR}$ (DMSO-d_6) δ ppm: 0,95-1,22 (2H, m), 1,22-1,37 (1H, m), 1,39-1,51 (1H, m), 1,51-1,68 (2H, m), 1,68-1,78 (1H, m), 1,99-2,11 (1H, m), 2,92-3,75 (6H, brm), 4,30-5,75 (1H, br), 7,00-7,30 (2H, m), 7,30-7,52 (1H, m), 8,15 (1H, s), 9,45-10,15 (2H, brm).	2 Hydroclorua
1083		$^1\text{H-NMR}$ (DMSO-d_6) δ ppm: 0,90-1,05 (1H, m), 1,10-1,38 (2H, m), 1,49-1,66 (3H, m), 1,67-1,78 (1H, m), 1,96-2,08 (1H, m), 2,94-3,10 (1H, m), 3,10-3,42 (5H, m), 3,53-4,15 (1H, br), 7,08 (1H, d, $J = 8,3$ Hz), 7,21 (1H, brs), 7,40 (1H, d, $J = 8,3$ Hz), 8,12 (1H, d, $J = 2,1$ Hz), 9,51 (2H, brs).	2 Hydroclorua
1084		$^1\text{H-NMR}$ (DMSO-d_6) δ ppm: 1,10-1,52 (4H, m), 1,52-1,69 (2H, m), 1,69-1,81 (1H, m), 2,03-2,22 (1H, m), 3,20-4,30 (6H, m), 7,05 (1H, s), 7,25-7,70 (1H, m), 7,70-8,05 (2H, m), 8,14 (1H, s), 9,60-10,47 (2H, m). (1H không được phát hiện)	2 Hydroclorua
1085		$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ ppm: 1,00-1,13 (1H, m), 1,19-1,45 (3H, m), 1,58-1,90 (5H, m), 2,52-2,65 (2H, m), 2,95-3,25 (4H, m), 7,22 (1H, dt, $J = 2,5, 8,8$ Hz), 7,36 (1H, dd, $J = 2,0, 8,8$ Hz), 7,40 (1H, dd, $J = 2,5, 9,9$ Hz),	-

		7,51 (1H, d, J = 2,0 Hz), 7,69-7,78 (2H, m).	
1086		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,79-0,97 (1H, m), 1,05-1,56 (4H, m), 1,56-1,72 (2H, m), 1,77-1,90 (1H, m), 2,62-2,75 (1H, m), 2,79-3,19 (5H, m), 3,19-3,70 (1H, br), 3,75 (3H, s), 6,37-6,56 (2H, m), 6,78 (1H, d, J = 7,2 Hz), 7,30-7,14 (1H, m), 7,14-7,33 (2H, m).	Fumarat
1087		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,86-1,00 (1H, m), 1,04-1,47 (4H, m), 1,47-1,57 (1H, m), 1,61-1,71 (1H, m), 1,77-1,86 (1H, m), 2,55-2,72 (2H, m), 2,92-3,16 (4H, m), 3,75 (3H, s), 5,25-6,25 (1H, br), 6,35 (1H, dd, J = 0,4, 3,0 Hz), 6,96 (1H, dd, J = 1,9, 8,6 Hz), 7,25-7,33 (2H, m), 7,35 (1H, d, J = 8,6 Hz). (2H không được phát hiện)	Oxalat
1088		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,95-1,11 (1H, m), 1,11-1,42 (3H, m), 1,53-1,82 (5H, m), 2,45-2,55 (1H, m), 2,55-2,64 (1H, m), 2,98-3,12 (3H, m), 3,15-3,25 (1H, m), 3,75 (3H, s), 6,43 (1H, dd, J = 0,8, 3,1 Hz), 6,98-7,03 (2H, m), 7,12-7,15 (1H, m), 7,53 (1H, d, J = 8,4 Hz).	-
1089		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,87-1,02 (1H, m), 1,08-1,50 (4H, m), 1,50-1,60 (1H, m), 1,62-1,72 (1H, m), 1,75-1,86 (1H, m), 2,57-2,76 (2H, m), 2,92-3,16 (4H, m), 3,20-4,38 (1H, br), 6,91 (1H, s), 7,09 (1H, dd, J = 1,9, 8,5 Hz), 7,41 (1H, d, J = 1,9 Hz), 7,52 (1H, d, J = 8,5 Hz), 7,97 (1H, d, J = 1,8 Hz). (2H không được phát hiện)	Oxalat

Bảng 131

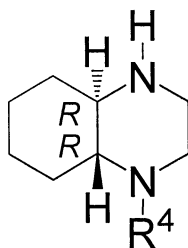
Cấu hình tuyệt đối

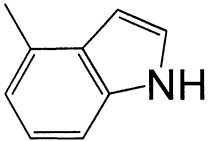
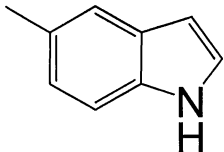
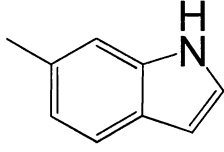
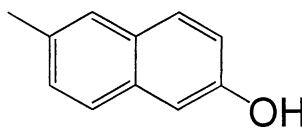


Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
1090		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,99-1,18 (19H, m), 1,20-1,41 (6H, m), 1,49-1,68 (2H, m), 1,68-1,82 (3H, m), 2,49-2,64 (2H, m), 2,94-3,10 (2H, m), 3,10-3,25 (2H, m), 7,09 (1H, dd, J = 2,4, 8,8 Hz), 7,17 (1H, d, J = 2,4 Hz), 7,28 (1H, dd, J = 2,1, 11,0 Hz), 7,45 (1H, d, J = 2,0 Hz), 7,59-7,66 (2H, m).	-
1091		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,93-1,10 (1H, m), 1,14 (18H, d, J = 7,5 Hz), 1,20-1,45 (3H, m), 1,49-1,85 (8H, m), 2,58-2,74 (2H, m), 2,90-3,00 (1H, m), 3,00-3,08 (1H, m), 3,17-3,30 (2H, m), 6,74 (1H, dd, J = 0,7, 3,2 Hz), 6,85 (1H, d, J = 7,3 Hz), 7,03-7,10 (1H, m), 7,17 (1H, d, J = 3,2 Hz), 7,26 (1H, d, J = 8,3 Hz).	-
1092		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,95-1,10 (1H, m), 1,10-1,41 (21H, m), 1,53-1,80 (8H, m), 2,41-2,50 (1H, m), 2,53-2,62 (1H, m), 2,95-3,10 (3H, m), 3,13-3,23 (1H, m), 6,56 (1H, d, J = 0,4, 3,1 Hz), 6,97 (1H, dd, J = 2,1, 8,8 Hz), 7,23 (1H, d, J = 3,1 Hz), 7,37-7,44 (2H, m).	-
1093		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,94-1,06 (1H, m), 1,05-1,25 (19H, m), 1,25-1,45 (2H, m), 1,53-1,80 (8H, m), 2,42-2,50 (1H, m), 2,55-2,65 (1H, m), 2,90-3,00 (1H, m), 3,00-3,13 (2H, m), 3,16-3,25 (1H, m), 6,56 (1H, dd, J = 0,7, 3,2 Hz), 6,97 (1H, dd, J = 1,7, 8,3 Hz), 7,20 (1H, d, J = 3,2 Hz), 7,32 (1H, s), 7,52 (1H, d, J = 8,3 Hz).	-

Bảng 132

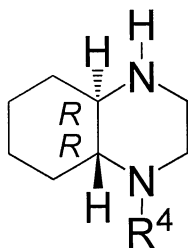
Cấu hình tuyệt đối

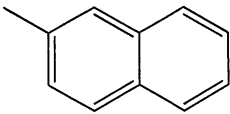
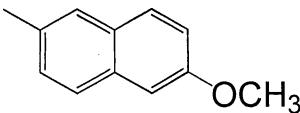
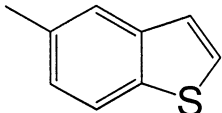
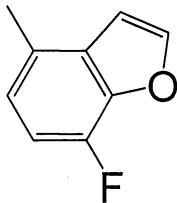
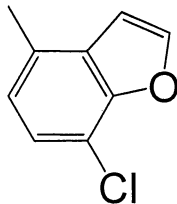
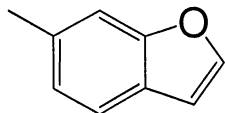
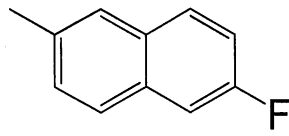


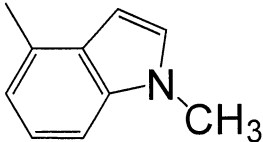
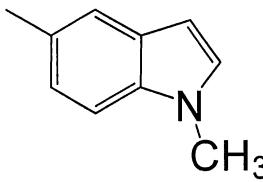
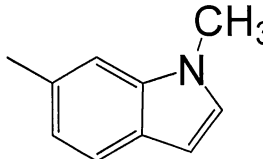
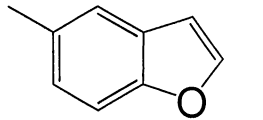
Ví dụ.	R ⁴	NMR	Muối
1094		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,95-1,09 (1H, m), 1,18-1,55 (4H, m), 1,55-1,63 (1H, m), 1,66-1,85 (3H, m), 2,59-2,77 (2H, m), 2,81-3,01 (1H, m), 3,01-3,09 (1H, m), 3,18-3,30 (2H, m), 6,67-6,71 (1H, m), 6,87 (1H, dd, J = 1,1, 7,2 Hz), 7,10-7,20 (3H, m), 8,15-8,47 (1H, br).	-
1095		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,96-1,10 (1H, m), 1,11-1,43 (3H, m), 1,52-1,84 (5H, m), 2,42-2,52 (1H, m), 2,54-2,64 (1H, m), 2,97-3,10 (3H, m), 3,14-3,25 (1H, m), 6,51 (1H, dd, J = 1,0, 2,1 Hz), 7,06 (1H, dd, J = 2,0, 8,6 Hz), 7,17-7,23 (1H, m), 7,32 (1H, d, J = 8,6 Hz), 7,44 (1H, d, J = 2,0 Hz), 8,20 (1H, brs).	-
1096		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,81-0,95 (1H, m), 1,05-1,35 (3H, m), 1,41-1,57 (2H, m), 1,58-1,74 (2H, m), 2,05 (1H, brs), 2,30-2,41 (2H, m), 2,75-2,97 (4H, m), 6,30-6,38 (1H, m), 6,80 (1H, dd, J = 1,8, 8,4 Hz), 7,10 (1H, s), 7,25 (1H, t, J = 2,7 Hz), 7,41 (1H, d, J = 8,4 Hz), 10,89 (1H, s).	-
1097		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,85-0,99 (1H, m), 1,12-1,36 (3H, m), 1,48-1,76 (4H, m), 2,17 (1H, brs), 2,31-2,50 (2H, m), 2,76-3,01 (4H, m), 6,99-7,08 (2H, m), 7,20 (1H, dd, J = 2,0, 8,7 Hz), 7,41 (1H, d, J = 1,6 Hz), 7,58 (1H, d, J = 8,8 Hz), 7,67 (1H, d, J = 8,8 Hz), 9,57 (1H, brs).	-

Bảng 133

Cấu hình tuyệt đối

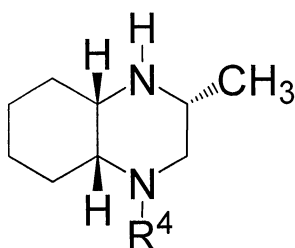


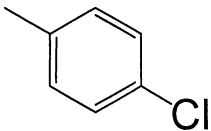
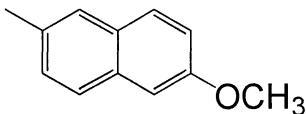
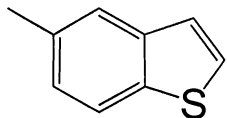
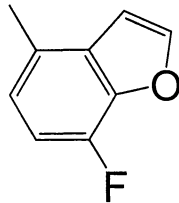
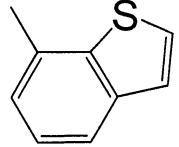
Ví dụ.	R ⁴	NMR	Muối
1098		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 1,00-1,14 (1H, m), 1,20-1,45 (3H, m), 1,45-1,68 (2H, m), 1,68-1,85 (3H, m), 2,53-2,66 (2H, m), 2,95-3,10 (2H, m), 3,15-3,26 (2H, m), 7,33 (1H, dd, J = 2,1, 8,8 Hz), 7,37-7,47 (2H, m), 7,51 (1H, d, J = 2,1 Hz), 7,74-7,82 (3H, m).	-
1099		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,98-1,12 (1H, m), 1,17-1,45 (3H, m), 1,45-1,85 (5H, m), 2,49-2,64 (2H, m), 2,95-3,25 (4H, m), 3,90 (3H, s), 7,08-7,14 (2H, m), 7,31 (1H, dd, J = 2,1, 8,7 Hz), 7,47 (1H, d, J = 2,0 Hz), 7,63-7,70 (2H, m).	-
1100		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,97-1,10 (1H, m), 1,15-1,69 (6H, m), 1,69-1,84 (2H, m), 2,45-2,54 (1H, m), 2,54-2,63 (1H, m), 2,93-3,13 (3H, m), 3,13-3,25 (1H, m), 7,19 (1H, dd, J = 2,0, 8,6 Hz), 5,27 (1H, d, J = 5,4 Hz), 7,42 (1H, d, J = 5,4 Hz), 7,59 (1H, d, J = 2,0 Hz), 7,79 (1H, d, J = 8,6 Hz).	-
1101		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,91-1,10 (1H, m), 1,10-1,37 (2H, m), 1,41-1,66 (3H, m), 1,66-1,79 (1H, m), 1,06-2,09 (1H, m), 2,95-3,55 (6H, m), 3,70-4,95 (1H, br), 7,00-7,17 (1H, m), 7,17-7,40 (2H, m), 8,08-8,19 (1H, m), 9,33-9,90 (2H, m).	2 Hydroclorua
1102		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,92-1,09 (1H, m), 1,10-1,39 (2H, m), 1,47-1,68 (3H, m), 1,68-1,78 (1H, m), 1,99-2,09 (1H, m), 2,94-3,14 (1H, br), 3,14-3,50 (5H, brm), 4,05-5,03 (1H, br), 7,08-7,19 (1H, m), 7,25-7,36 (1H, m), 7,41 (1H, d, J = 8,2 Hz), 8,14 (1H, d, J = 1,6 Hz), 9,70 (2H, brs).	2 Hydroclorua
1103		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,12-1,51 (4H, m), 1,53-1,68 (2H, m), 1,69-1,79 (1H, m), 2,07-2,19 (1H, m), 3,20-4,27 (6H, m), 7,04 (1H, s), 7,30-7,65 (1H, m), 7,65-8,05 (2H, m), 8,13 (1H, s), 9,65-10,40 (2H, m). (1H không được phát hiện)	2 Hydroclorua
1104		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 1,00-1,13 (1H, m), 1,18-1,45 (3H, m), 1,58-1,90 (5H, m), 2,52-2,65 (2H, m), 2,95-3,11 (2H, m), 3,11-3,25 (2H, m), 7,22 (1H, dt, J = 2,5,	-

		8,8 Hz), 7,36 (1H, dd, J = 2,0, 8,8 Hz), 7,40 (1H, dd, J = 2,5, 9,9 Hz), 7,51 (1H, d, J = 2,0 Hz), 7,69-7,78 (2H, m).	
1105		1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 0,80-0,96 (1H, m), 1,05-1,56 (4H, m), 1,56-1,72 (2H, m), 1,77-1,90 (1H, m), 2,62-2,75 (1H, m), 2,77-2,90 (1H, m), 2,90-3,19 (4H, m), 3,19-3,70 (1H, br), 3,75 (3H, s), 6,37-6,54 (2H, m), 6,78 (1H, d, J = 7,3 Hz), 7,30-7,14 (1H, m), 7,14-7,31 (2H, m).	Fumarat
1106		1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 0,86-1,00 (1H, m), 1,04-1,47 (4H, m), 1,47-1,57 (1H, m), 1,61-1,70 (1H, m), 1,77-1,87 (1H, m), 2,55-2,72 (2H, m), 2,90-3,16 (4H, m), 3,75 (3H, s), 5,25-6,25 (1H, br), 6,35 (1H, d, J = 2,9 Hz), 6,96 (1H, dd, J = 1,7, 8,6 Hz), 7,25-7,33 (2H, m), 7,35 (1H, d, J = 8,6 Hz). (2H không được phát hiện)	Oxalat
1107		1H-NMR (CDCl3) δppm: 0,96-1,10 (1H, m), 1,10-1,44 (3H, m), 1,48-1,82 (5H, m), 2,45-2,55 (1H, m), 2,55-2,64 (1H, m), 2,98-3,12 (3H, m), 3,15-3,25 (1H, m), 3,75 (3H, s), 6,43 (1H, dd, J = 0,8, 3,1 Hz), 6,98-7,03 (2H, m), 7,12-7,15 (1H, m), 7,53 (1H, d, J = 8,5 Hz).	-
1108		1H-NMR (DMSO-d6) δppm: 0,87-1,02 (1H, m), 1,08-1,50 (4H, m), 1,50-1,60 (1H, m), 1,62-1,72 (1H, m), 1,75-1,86 (1H, m), 2,54-2,76 (2H, m), 2,92-3,17 (4H, m), 3,20-5,40 (1H, br), 6,91 (1H, d, J = 1,2 Hz), 7,10 (1H, dd, J = 1,9, 8,6 Hz), 7,41 (1H, d, J = 1,9 Hz), 7,52 (1H, d, J = 8,6 Hz), 7,97 (1H, d, J = 2,0 Hz). (2H không được phát hiện)	Oxalat

Bảng 134

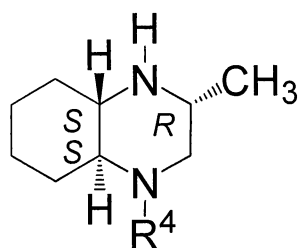
Cấu hình tương đối



Ví dụ.	R ⁴	NMR	Muối
1109		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,22-1,52 (6H, m), 1,56-1,97 (4H, m), 2,00-2,18 (1H, m), 2,75-2,95 (1H, m), 3,20-3,40 (1H, m), 3,40-3,60 (2H, m), 3,96-4,10 (1H, m), 4,20-4,57 (1H, br), 6,91-7,01 (2H, m), 7,19-7,31 (2H, m), 8,69 (1H, brs), 10,11 (1H, brs).	2 Hydroclorua
1110		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 1,15-1,33 (6H, m), 1,48-1,58 (2H, m), 1,66-1,85 (4H, m), 2,68 (1H, t, J = 11,8 Hz), 3,02-3,12 (1H, m), 3,23 (1H, dd, J = 3,3, 11,4 Hz), 3,29-3,24 (1H, m), 3,76 (1H, td, J = 3,3, 11,4 Hz), 3,88 (3H, s), 7,00 (1H, d, J = 2,3 Hz), 7,02-7,30 (2H, m), 7,22-7,29 (1H, m), 7,57 (1H, d, J = 8,8 Hz), 7,61 (1H, d, J = 9,0 Hz).	-
1111		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,17-1,36 (2H, m), 1,36-1,51 (4H, m), 1,62-2,00 (4H, m), 2,06-2,17 (1H, m), 2,94-3,05 (1H, m), 3,30-3,50 (1H, m), 3,50-3,64 (2H, m), 4,04-4,13 (1H, m), 4,59-5,50 (1H, br), 7,17 (1H, d, J = 8,9 Hz), 7,31 (1H, d, J = 5,4 Hz), 7,38 (1H, brs), 7,62 (1H, d, J = 5,4 Hz), 7,83 (1H, d, J = 8,9 Hz), 8,68 (1H, brs), 10,12 (1H, brs).	2 Hydroclorua
1112		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,99-1,17 (2H, m), 1,30-1,49 (4H, m), 1,55-1,75 (2H, m), 1,75-1,98 (2H, m), 1,98-2,13 (1H, m), 3,12-3,28 (2H, m), 3,28-3,50 (1H, m), 3,67-3,85 (2H, m), 6,67 (1H, dd, J = 3,4, 8,6Hz), 7,10 (1H, dd, J = 8,6, 10,7Hz), 7,28 (1H, dd, J = 2,6, 2,6Hz), 8,07 (1H, d, J = 2,2Hz), 8,43 (1H, br), 9,94 (1H, br).	Hydroclorua
1113		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,03-1,21 (2H, m), 1,37-1,48 (4H, m), 1,58-1,85 (3H, m), 1,95-2,14 (2H, m), 3,23 (1H, d, J = 10,6Hz), 3,36-3,55 (2H, m), 3,64-3,76 (1H, m), 3,85-3,96 (1H, m), 7,01 (1H, d, J = 7,6Hz), 7,34 (1H, dd, J = 7,7, 7,7Hz), 7,46 (1H, d, J = 5,4Hz), 7,57-7,62 (1H, m), 7,75 (1H, d, J = 5,4Hz), 8,35-8,6 (1H, m), 9,82 (1H, br).	Hydroclorua

Bảng 134

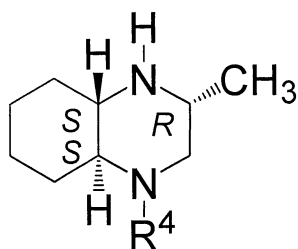
Cấu hình tuyệt đối

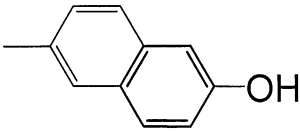
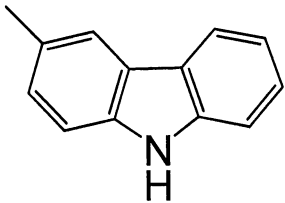


Ví dụ.	R ⁴	NMR	Muối
1114		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,95-1,10 (4H, m), 1,13 (18H, d, J = 7,3 Hz), 1,19-1,47 (7H, m), 1,59-1,67 (1H, m), 1,70-1,84 (3H, m), 2,45-2,53 (1H, m), 2,57 (1H, dd, J = 10,3, 11,0 Hz), 2,62-2,70 (1H, m), 3,12 (1H, dd, J = 2,7, 11,2 Hz), 3,16-3,24 (1H, m), 7,09 (1H, dd, J = 2,4, 8,9 Hz), 7,17 (1H, d, J = 2,4 Hz), 7,27 (1H, dd, J = 2,1, 8,7 Hz), 7,44 (1H, d, J = 2,0 Hz), 7,59-7,65 (2H, m).	-
1115		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,94-1,12 (4H, m), 1,15-1,46 (4H, m), 1,57-1,68 (2H, m), 1,68-1,85 (11H, m), 2,42-2,51 (1H, m), 2,59-2,70 (2H, m), 3,10 (1H, dd, J = 2,7, 11,2 Hz), 3,15-3,25 (1H, m), 7,29 (1H, dd, J = 2,2, 8,6 Hz), 7,30-7,37 (1H, m), 7,42-7,49 (1H, m), 7,76 (1H, d, J = 2,1 Hz), 7,93 (1H, d, J = 7,2 Hz), 8,21 (1H, d, J = 8,8 Hz), 8,29 (1H, d, J = 8,3 Hz).	-

Bảng 135

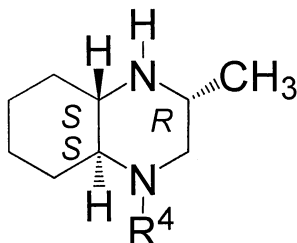
Cấu hình tuyệt đối

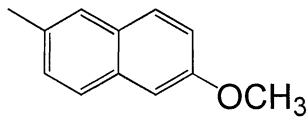
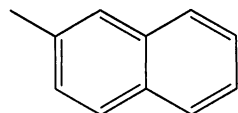


Ví dụ.	R ⁴	NMR	Muối
1116		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,85-0,99 (4H, m), 1,13-1,35 (3H, m), 1,49-1,75 (4H, m), 1,99 (1H, brs), 2,32-2,50 (3H, m), 2,92-3,02 (2H, m), 7,00-7,09 (2H, m), 7,19 (1H, dd, J = 2,1, 8,7 Hz), 7,41 (1H, d, J = 1,8 Hz), 7,58 (1H, d, J = 8,8 Hz), 7,66 (1H, d, J = 8,8 Hz), 9,56 (1H, brs).	-
1117		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,10-1,57 (7H, m), 1,57-1,71 (2H, m), 1,71-1,82 (1H, m), 2,11-2,22 (1H, m), 3,00-3,40 (6H, m), 7,22 (1H, t, J = 7,4 Hz), 7,35-7,85 (4H, m), 8,09 (1H, d, J = 7,8 Hz), 8,37 (1H, brs), 9,96 (2H, brs), 11,61 (1H, brs).	2 Hydroclorua

Bảng 136

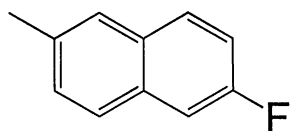
Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ.	R ⁴	NMR	Muối
1118		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,98-1,11 (4H, m), 1,17-1,58 (4H, m), 1,58-1,85 (4H, m), 2,44-2,53 (1H, m), 2,56-2,70 (2H, m), 3,12 (1H, dd, J = 2,8, 11,2 Hz), 3,15-3,25 (1H, m), 3,90 (3H, s), 7,08-7,16 (2H, m), 7,30 (1H, dd, J = 2,0, 8,7 Hz), 7,46 (1H, d, J = 2,0 Hz), 7,65 (1H, d, J = 4,8 Hz), 7,67 (1H, d, J = 4,9 Hz).	-
1119		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,95-1,05 (1H, m), 1,11 (3H, d, J = 6,3Hz), 1,15-1,5 (3H, m), 1,5-1,6 (1H, m), 1,65-1,75 (2H, m), 1,85-1,95 (1H, m), 2,65-2,85 (3H, m), 2,85-4,35 (4H, m), 6,50 (1H, s), 7,33 (1H, dd, J = 2,1, 8,7Hz), 7,4-7,5 (2H, m), 7,57 (1H, d, J = 1,8Hz), 7,8-	1/2 Fumarat

7,9 (3H, m).

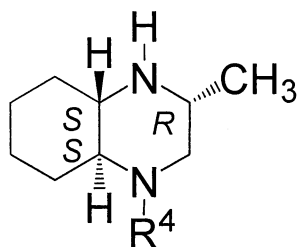
1120



¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 0,98-1,12 (4H, m), 1,18-1,48 (4H, m), 1,58-1,69 (1H, m), 1,69-1,85 (3H, m), 2,46-2,54 (1H, m), 2,57 (1H, dd, J = 10,2, 11,0 Hz), 2,62-2,70 (1H, m), 3,10-3,25 (2H, m), 7,22 (1H, dt, J = 2,6, 8,8 Hz), 7,35 (1H, dd, J = 1,8, 8,7 Hz), 7,40 (1H, dd, J = 2,5, 9,9 Hz), 7,50 (1H, d, J = 1,9 Hz), 7,68-7,77 (2H, m).

Bảng 137

Cấu hình tuyệt đối



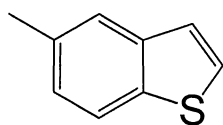
Ví dụ.

R⁴

NMR

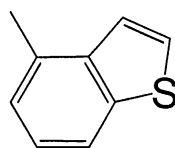
Muối

1121



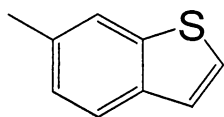
¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 0,97-1,17 (4H, m), 1,17-1,49 (4H, m), 1,53-1,89 (4H, m), 2,42-2,55 (1H, m), 2,55-2,71 (2H, m), 3,08 (1H, dd, J = 2,8, 11,3 Hz), 3,13-3,26 (1H, m), 7,19 (1H, dd, J = 2,0, 8,6 Hz), 7,27 (1H, d, J = 5,4 Hz), 7,42 (1H, d, J = 5,4 Hz), 7,58 (1H, d, J = 2,0 Hz), 7,78 (1H, d, J = 8,6 Hz).

1122



¹H-NMR (CDCl₃) δppm: 0,85-1,02 (1H, m), 1,05 (3H, d, J = 6,4 Hz), 1,17-1,54 (4H, m), 1,54-1,63 (1H, m), 1,63-1,83 (3H, m), 2,40-2,55 (1H, m), 2,55-2,65 (1H, m), 2,65-2,74 (1H, m), 3,10 (1H, dd, J = 2,8, 11,4 Hz), 3,15-3,26 (1H, m), 7,12 (1H, dd, J = 0,7, 7,6 Hz), 7,30 (1H, t, J = 7,8 Hz), 7,35 (1H, d, J = 5,5 Hz), 7,57 (1H, d, J = 5,5 Hz), 7,64 (1H, d, J = 8,0 Hz).

1123

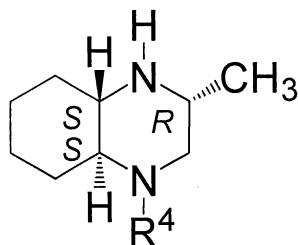


¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 0,90-1,04 (1H, m), 1,12 (3H, d, J = 6,4 Hz), 1,17-1,35 (2H, m), 1,35-1,49 (1H, m), 1,50-1,62 (2H, m), 1,64-1,74 (1H, m), 1,84-1,94 (1H, m), 2,65-2,84 (3H, m), 3,10 (1H, dd, J = 2,9, 11,7 Hz), 3,21-3,34 (1H, m), 4,30-6,30 (1H, br), 6,49 (2H, s), 7,18 (1H, dd, J = 1,7, 8,4 Hz), 7,39 (1H, d, J = 5,4 Hz), 7,67 (1H, d, J = 5,4 Hz), 7,75 (1H, d, J = 1,7 Hz), 7,81 (1H, d, J = 8,4 Hz).

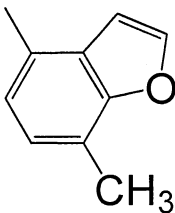
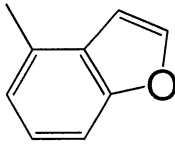
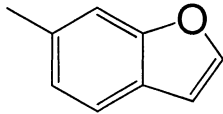
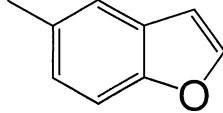
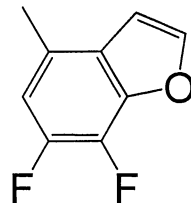
Fumarat

Bảng 138

Cấu hình tuyệt đối

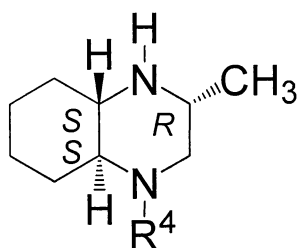


Ví dụ.	R ⁴	NMR	Muối
1124		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm ở 80°C: 0,96-1,38 (6H, m), 1,40-1,50 (1H, m), 1,50-1,80 (3H, m), 2,06-2,17 (1H, m), 3,01-3,20 (2H, m), 3,27-3,40 (2H, m), 3,50-3,65 (1H, m), 5,90-6,39 (1H, br), 7,05-7,22 (2H, m), 7,32 (1H, brs), 8,03 (1H, d, J = 2,0 Hz), 9,64 (1H, brs), 9,81 (1H, brs).	2 Hydroclorua
1125		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,85-1,00 (1H, m), 1,05-1,38 (5H, m), 1,38-1,75 (4H, m), 1,87-2,00 (1H, m), 2,65-3,00 (3H, m), 3,12 (1H, dd, J = 2,8, 11,9 Hz), 3,30-3,47 (1H, m), 6,53 (2H, s), 7,04 (1H, d, J = 8,3 Hz), 7,14 (1H, brs), 7,37 (1H, d, J = 8,3 Hz), 8,08 (1H, d, J = 2,2 Hz). (3H, không được phát hiện)	Fumarat
1126		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm tại 80°C: 1,02-1,38 (6H, m), 1,38-1,50 (1H, m), 1,50-1,79 (3H, m), 2,05-2,16 (2H, m), 3,10-3,29 (2H, m), 3,29-3,57 (2H, br), 3,57-3,73 (1H, br), 3,94 (3H, s), 4,30-4,25 (1H, br), 6,91 (1H, d, J = 8,4 Hz), 7,16	2 Hydroclorua

		(1H, brs), 7,31 (1H, brs), 7,93 (1H, s), 9,72 (1H, brs).	
1127		$^1\text{H-NMR}$ (DMSO- d_6) δ ppm ở 80°C : 1,03-1,38 (6H, m), 1,40-1,79 (4H, m), 2,06-2,18 (1H, m), 2,45 (3H, s), 3,12-3,31 (2H, m), 3,31-3,56 (2H, m), 3,56-3,77 (1H, m), 5,39-6,13 (1H, br), 7,08-7,21 (2H, m), 7,21-7,40 (1H, m), 7,95 (1H, d, $J = 2,0$ Hz), 9,79 (2H, brs).	2 Hydroclorua
1128		$^1\text{H-NMR}$ (DMSO- d_6) δ ppm ở 80°C : 1,02-1,39 (6H, m), 1,45-1,80 (4H, m), 2,08-2,18 (1H, m), 3,10-3,30 (2H, m), 3,32-3,55 (2H, m), 3,55-3,74 (1H, m), 5,50-6,15 (1H, br), 7,16-7,25 (1H, m), 7,25-7,36 (2H, m), 7,47 (1H, d, $J = 8,2$ Hz), 7,94 (1H, d, $J = 2,0$ Hz), 9,55-10,05 (2H, brm).	2 Hydroclorua
1129		$^1\text{H-NMR}$ (DMSO- d_6) δ ppm: 0,89-1,03 (1H, m), 1,08-1,35 (5H, m), 1,35-1,60 (3H, m), 1,63-1,73 (1H, m), 1,84-1,96 (1H, m), 2,62-2,85 (3H, m), 3,08 (1H, dd, $J = 2,8, 11,8$ Hz), 3,22-3,35 (1H, m), 6,50 (2H, s), 6,91 (1H, dd, $J = 0,9, 2,1$ Hz), 7,07 (1H, dd, $J = 1,7, 8,3$ Hz), 7,36 (1H, s), 7,58 (1H, d, $J = 8,2$ Hz), 7,95 (1H, d, $J = 2,2$ Hz). (3H không được phát hiện)	Fumarat
1130		$^1\text{H-NMR}$ (DMSO- d_6) δ ppm: 1,09-1,55 (7H, m), 1,55-1,80 (3H, m), 2,10-2,22 (1H, m), 3,35-4,13 (5H, m), 4,13-5,22 (1H, br), 7,12 (1H, s), 7,60 (1H, brs), 7,81 (1H, s), 7,98 (1H, brs), 8,15 (1H, s), 10,09 (2H, brs).	2 Hydroclorua
1131		$^1\text{H-NMR}$ (DMSO- d_6) δ ppm: 0,90-1,06 (1H, m), 1,15-1,38 (5H, m), 1,47-1,67 (3H, m), 1,67-1,80 (1H, m), 1,99-2,11 (1H, m), 2,80-3,30 (4H, m), 3,40-3,60 (1H, m), 4,40-5,10 (1H, br), 7,13-7,38 (2H, m), 8,15 (1H, d, $J = 2,0$ Hz), 9,05-9,58 (1H, br), 9,70-9,95 (1H, br).	2 Hydroclorua

Bảng 139

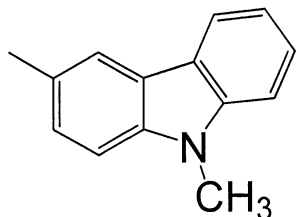
Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ.	R ⁴	NMR	Muối
1132		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,94-1,10 (4H, m), 1,13-1,65 (6H, m), 1,65-1,83 (2H, m), 2,37-2,47 (1H, m), 2,55-2,69 (2H, m), 3,05 (1H, dd, J = 2,8, 11,2 Hz), 3,12-3,23 (1H, m), 3,77 (3H, s), 6,42 (1H, d, J = 0,7, 3,1 Hz), 7,03 (1H, d, J = 3,1 Hz), 7,08 (1H, d, J = 2,0, 8,6 Hz), 7,22-7,30 (1H, m), 7,41 (1H, d, J = 1,8 Hz).	-
1133		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,90-1,05 (1H, m), 1,09-1,35 (5H, m), 1,39-1,60 (3H, m), 1,64-1,76 (1H, m), 1,88-2,00 (1H, m), 2,68-2,79 (1H, m), 2,79-2,94 (2H, m), 3,01-3,11 (1H, m), 3,28-3,40 (1H, m), 3,75 (3H, s), 6,36 (1H, d, J = 0,6, 3,1 Hz), 6,51 (2H, s), 6,87 (1H, d, J = 1,7, 8,4 Hz), 7,18 (1H, s), 7,27 (1H, d, J = 3,1 Hz), 7,47 (1H, d, J = 8,3 Hz). (3H không được phát hiện)	Fumarat
1134		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,82-0,92 (1H, m), 0,94 (3H, d, J = 6,3 Hz), 1,06-1,34 (4H, m), 1,38-1,58 (2H, m), 1,59-1,75 (2H, m), 2,28-2,37 (1H, m), 2,37-2,49 (2H, m), 2,89 (1H, dd, J = 2,6, 10,8 Hz), 2,94-3,04 (1H, m), 3,86 (3H, s), 7,21 (1H, dd, J = 1,9, 8,9 Hz), 7,31 (1H, s), 7,36 (1H, d, J = 1,7 Hz), 7,51 (1H, d, J = 8,9 Hz).	-
1135		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,82-0,96 (1H, m), 1,01-1,35 (5H, m), 1,35-1,85 (4H, m), 1,85-1,96 (1H, m), 2,53-3,05 (3H, m), 3,05-3,23 (1H, m), 3,23-3,40 (1H, m), 3,76 (3H, s), 6,39-6,57 (3H, m), 6,79 (1H, d, J = 8,0 Hz), 7,09 (1H, t, J = 7,8 Hz), 7,17-7,28 (2H,	Fumarat

m). (3H không được phát hiện)

1136

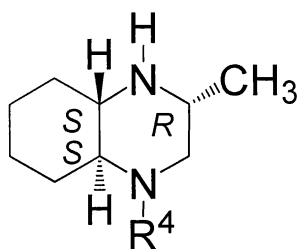


¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 0,93-1,10 (1H, m), 1,10-1,35 (5H, m), 1,41-1,59 (3H, m), 1,64-1,78 (1H, m), 1,91-2,04 (1H, m), 2,75-3,04 (3H, m), 3,11 (1H, dd, J = 2,0, 12,0 Hz), 3,32-3,46 (1H, m), 3,85 (3H, s), 6,53 (2H, s), 7,15-7,23 (1H, m), 7,29 (1H, dd, J = 1,9, 8,6 Hz), 7,42-7,49 (1H, m), 7,53 (1H, d, J = 8,6 Hz), 7,56 (1H, d, J = 8,3 Hz), 7,94 (1H, d, J = 1,8 Hz), 8,15 (1H, d, J = 7,7 Hz). (3H, không được phát hiện)

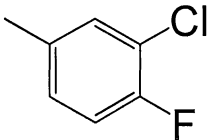
Fumarat

Bảng 140

Cấu hình tuyệt đối

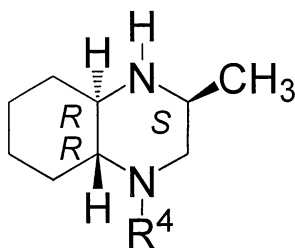


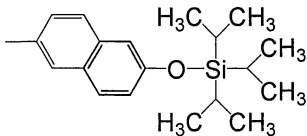
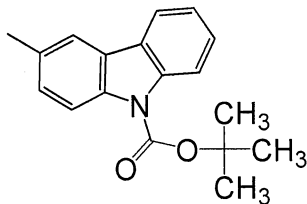
Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
1137		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,88-1,08 (4H, m), 1,15-1,57 (4H, m), 1,60-1,68 (2H, m), 1,68-1,80 (2H, m), 2,31-2,39 (1H, m), 2,46 (1H, dd, J = 10,4, 11,0 Hz), 2,55-2,63 (1H, m), 3,00 (1H, dd, J = 2,8, 11,2 Hz), 3,07-3,18 (1H, m), 7,03-7,09 (2H, m), 7,23-7,29 (2H, m).	-
1138		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,98-1,10 (4H, m), 1,20-1,46 (4H, m), 1,65-1,90 (4H, m), 2,46-2,67 (3H, m), 3,10-3,25 (2H, m), 6,98 (1H, dd, J = 2,1, 8,5 Hz), 7,12 (1H, d, J = 2,1 Hz), 7,54 (1H, d, J = 8,5 Hz)	-
1139		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,89-1,03 (1H, m), 1,11 (3H, d, J = 6,4 Hz), 1,17-1,34 (2H, m), 1,34-1,47 (1H, m), 1,51-1,74 (3H, m), 1,82-1,94 (1H, m), 2,64-2,74 (2H, m), 2,74-2,84 (1H, m), 3,14 (1H, dd, J = 3,0, 11,9 Hz),	Fumarat

		3,20-3,33 (1H, m), 6,51 (2H, s), 6,97-7,04 (1H, m), 7,19 (1H, dd, J = 2,4, 11,3 Hz), 7,50 (1H, t, J = 8,7 Hz), 8,90-11,40 (2H, br). (1H không được phát hiện)	
1140		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,89-1,03 (1H, m), 1,10 (3H, d, J = 6,4 Hz), 1,14-1,45 (3H, m), 1,48-1,62 (2H, m), 1,65-1,73 (1H, m), 1,82-1,92 (1H, m), 2,58-2,81 (3H, m), 3,05 (1H, dd, J = 3,0, 11,7 Hz), 3,19-3,30 (1H, m), 6,51 (2H, s), 7,11-7,18 (1H, m), 7,31-7,41 (2H, m), 9,00-11,60 (2H, br). (1H không được phát hiện)	Fumarat

Bảng 141

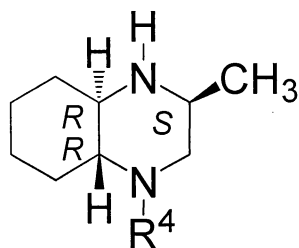
Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
1141		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,96-1,10 (4H, m), 1,13 (18H, d, J = 7,3 Hz), 1,19-1,50 (7H, m), 1,58-1,67 (1H, m), 1,68-1,84 (3H, m), 2,45-2,53 (1H, m), 2,57 (1H, dd, J = 10,3, 11,0 Hz), 2,62-2,70 (1H, m), 3,12 (1H, dd, J = 2,7, 11,2 Hz), 3,15-3,24 (1H, m), 7,09 (1H, dd, J = 2,4, 8,9 Hz), 7,17 (1H, d, J = 2,4 Hz), 7,27 (1H, dd, J = 2,1, 8,7 Hz), 7,44 (1H, d, J = 2,0 Hz), 7,59-7,65 (2H, m).	-
1142		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,94-1,12 (4H, m), 1,15-1,46 (4H, m), 1,57-1,68 (2H, m), 1,68-1,85 (11H, m), 2,42-2,51 (1H, m), 2,59-2,70 (2H, m), 3,10 (1H, dd, J = 2,7, 11,2 Hz), 3,15-3,25 (1H, m), 7,29 (1H, dd, J = 2,2, 8,6 Hz), 7,30-7,37 (1H, m), 7,42-7,49 (1H, m), 7,76 (1H, d, J = 2,1 Hz), 7,93 (1H, d, J = 7,2 Hz), 8,21 (1H, d, J = 8,8 Hz), 8,29 (1H, d, J = 8,3 Hz).	-

Bảng 142

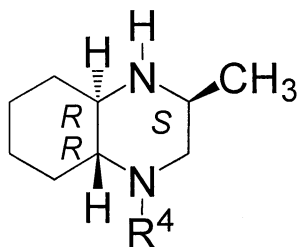
Cấu hình tuyệt đối



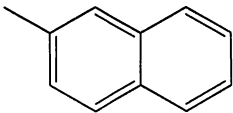
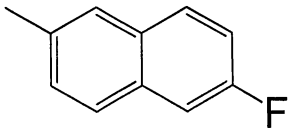
Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
1143		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,83-1,00 (4H, m), 1,12-1,35 (3H, m), 1,48-1,75 (4H, m), 1,99 (1H, brs), 2,31-2,50 (3H, m), 2,92-3,03 (2H, m), 6,99-7,09 (2H, m), 7,19 (1H, dd, J = 2,0, 8,7 Hz), 7,41 (1H, d, J = 1,7 Hz), 7,58 (1H, d, J = 8,8 Hz), 7,66 (1H, d, J = 8,8 Hz), 9,57 (1H, brs).	-
1144		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,10-1,57 (7H, m), 1,57-1,71 (2H, m), 1,71-1,82 (1H, m), 2,11-2,22 (1H, m), 3,00-3,40 (6H, m), 7,22 (1H, t, J = 7,4 Hz), 7,35-7,85 (4H, m), 8,09 (1H, d, J = 7,8 Hz), 8,37 (1H, brs), 9,96 (2H, brs), 11,61 (1H, brs).	2 Hydroclorua

Bảng 143

Cấu hình tuyệt đối

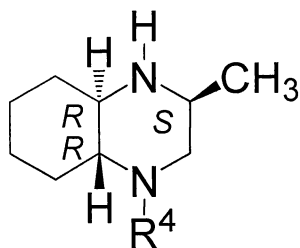


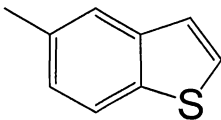
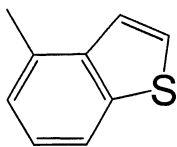
Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
1145		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,98-1,12 (4H, m), 1,18-1,58 (4H, m), 1,58-1,85 (4H, m), 2,45-2,53 (1H, m), 2,56-2,70 (2H, m), 3,12 (1H, dd, J = 2,8, 11,2 Hz), 3,16-3,25 (1H,	-

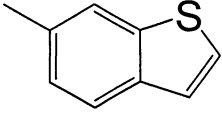
		m), 3,90 (3H, s), 7,08-7,16 (2H, m), 7,30 (1H, dd, J = 2,01, 8,7 Hz), 7,46 (1H, d, J = 2,0 Hz), 7,65 (1H, d, J = 4,9 Hz), 7,67 (1H, d, J = 4,9 Hz).	
1146		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,92-1,06 (1H, m), 1,11 (3H, d, J = 6,4Hz), 1,16-1,51 (3H, m), 1,52-1,64 (1H, m), 1,64-1,78 (2H, m), 1,82-1,94 (1H, m), 2,65-2,85 (3H, m), 2,85-4,2 (4H, m), 6,50 (1H, s), 7,33 (1H, dd, J = 2,1, 8,7Hz), 7,39-7,51 (2H, m), 7,56 (1H, d, J = 1,9Hz), 7,80-7,89 (3H, m).	1/2 Fumarat
1147		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,98-1,12 (4H, m), 1,18-1,48 (4H, m), 1,60-1,69 (1H, m), 1,69-1,85 (3H, m), 2,46-2,54 (1H, m), 2,57 (1H, dd, J = 10,2, 11,0 Hz), 2,62-2,71 (1H, m), 3,10-3,25 (2H, m), 7,22 (1H, dt, J = 2,6, 8,8 Hz), 7,35 (1H, dd, J = 1,8, 8,7 Hz), 7,40 (1H, dd, J = 2,5, 9,9 Hz), 7,50 (1H, d, J = 1,9 Hz), 7,68-7,77 (2H, m).	-

Bảng 144

Cấu hình tuyệt đối

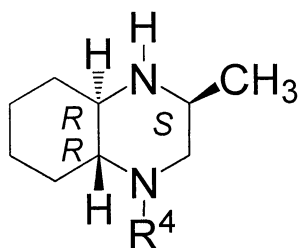


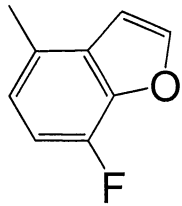
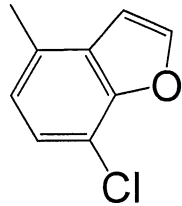
Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
1148		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,97-1,17 (4H, m), 1,17-1,89 (8H, m), 2,41-2,50 (1H, m), 2,53-2,69 (2H, m), 3,08 (1H, dd, J = 2,8, 11,2 Hz), 3,13-3,22 (1H, m), 7,18 (1H, dd, J = 2,0, 8,5 Hz), 7,27 (1H, d, J = 5,4 Hz), 7,42 (1H, d, J = 5,4 Hz), 7,58 (1H, d, J = 2,0 Hz), 7,78 (1H, d, J = 8,5 Hz).	-
1149		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,86-1,02 (1H, m), 1,05 (3H, d, J = 6,4 Hz), 1,17-1,54 (4H, m), 1,54-1,63 (1H, m), 1,63-1,83 (3H, m), 2,39-2,55 (1H, m), 2,55-2,65 (1H, m), 2,65-2,74 (1H, m), 3,10 (1H, dd, J = 2,8,	-

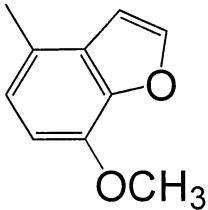
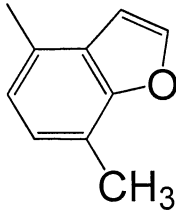
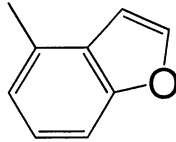
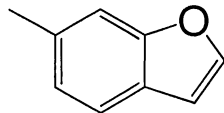
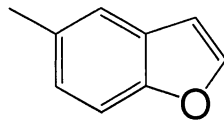
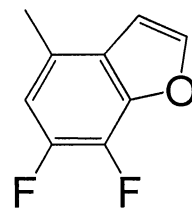
		11,4 Hz), 3,15-3,26 (1H, m), 7,12 (1H, dd, J = 0,7, 7,6 Hz), 7,30 (1H, t, J = 7,8 Hz), 7,35 (1H, d, J = 5,5 Hz), 7,57 (1H, d, J = 5,5 Hz), 7,64 (1H, d, J = 8,0 Hz).	
1150		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,90-1,04 (1H, m), 1,10-1,35 (5H, m), 1,35-1,62 (3H, m), 1,64-1,74 (1H, m), 1,84-1,95 (1H, m), 2,65-2,84 (3H, m), 3,11 (1H, dd, J = 2,8, 11,8 Hz), 3,21-3,35 (1H, m), 6,49 (2H, s), 7,19 (1H, dd, J = 1,8, 8,5 Hz), 7,39 (1H, d, J = 5,4 Hz), 7,68 (1H, d, J = 5,4 Hz), 7,75 (1H, d, J = 1,8 Hz), 7,81 (1H, d, J = 8,5 Hz), 7,50-9,40 (1H, br).	Fumarat

Bảng 145

Cấu hình tuyệt đối

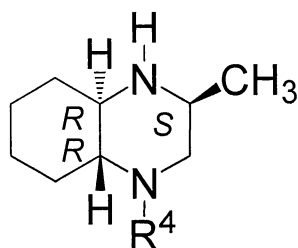


Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
1151		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm ở 80°C: 0,96-1,39 (6H, m), 1,40-1,50 (1H, m), 1,50-1,80 (3H, m), 2,05-2,15 (1H, m), 2,98-3,20 (2H, m), 3,20-3,40 (2H, m), 3,42-3,64 (1H, m), 5,23-6,05 (1H, br), 7,05-7,21 (2H, m), 7,30 (1H, brs), 8,03 (1H, s), 9,56 (1H, brs), 9,77 (1H, brs).	2 Hydroclorua
1152		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,85-1,00 (1H, m), 1,05-1,38 (5H, m), 1,38-1,75 (4H, m), 1,87-2,00 (1H, m), 2,65-3,00 (3H, m), 3,12 (1H, dd, J = 2,8, 11,9 Hz), 3,30-3,47 (1H, m), 6,53 (2H, s), 7,04 (1H, d, J = 8,3 Hz), 7,14 (1H, brs), 7,37 (1H, d, J = 8,3 Hz), 8,08 (1H, d, J = 2,2 Hz). (3H, không được phát hiện)	Fumarat

1153		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm ở 80°C: 1,00-1,38 (6H, m), 1,38-1,50 (1H, m), 1,50-1,79 (3H, m), 2,05-2,14 (2H, m), 3,09-3,25 (2H, m), 3,25-3,50 (2H, br), 3,54-3,70 (1H, br), 3,94 (3H, s), 4,35-5,05 (1H, br), 6,90 (1H, d, J = 8,4 Hz), 7,07-7,20 (1H, m), 7,27 (1H, brs), 7,92 (1H, d, J = 1,8 Hz), 9,68 (1H, brs).	2 Hydroclorua
1154		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm ở 80°C: 1,05-1,38 (6H, m), 1,38-1,52 (1H, m), 1,52-1,62 (1H, m), 1,62-1,79 (2H, m), 2,09-2,18 (1H, m), 2,46 (3H, s), 3,17-3,37 (2H, m), 3,37-3,66 (2H, m), 3,66-3,75 (1H, m), 6,25-7,10 (1H, br), 7,14 (1H, d, J = 7,8 Hz), 7,19-7,30 (1H, m), 7,40 (1H, brs), 7,97 (1H, d, J = 2,1 Hz), 9,88 (2H, brs).	2 Hydroclorua
1155		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm ở 80°C: 1,00-1,38 (6H, m), 1,45-1,80 (4H, m), 2,08-2,18 (1H, m), 3,06-3,27 (2H, m), 3,27-3,49 (2H, m), 3,53-3,70 (1H, m), 4,94-5,68 (1H, br), 7,13-7,22 (1H, m), 7,25-7,35 (2H, m), 7,45 (1H, d, J = 8,2 Hz), 7,93 (1H, d, J = 1,5 Hz), 9,45-10,00 (2H, brm).	2 Hydroclorua
1156		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,89-1,03 (1H, m), 1,05-1,35 (5H, m), 1,35-1,61 (3H, m), 1,61-1,75 (1H, m), 1,82-1,96 (1H, m), 2,62-2,86 (3H, m), 3,08 (1H, d, J = 11,6 Hz), 3,21-3,36 (1H, m), 6,50 (2H, s), 6,91 (1H, d, J = 2,0 Hz), 7,07 (1H, dd, J = 1,3, 8,3 Hz), 7,36 (1H, s), 7,58 (1H, d, J = 8,2 Hz), 7,95 (1H, d, J = 2,2 Hz). (3H không được phát hiện)	Fumarat
1157		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 1,09-1,55 (7H, m), 1,55-1,80 (3H, m), 2,10-2,22 (1H, m), 3,30-4,10 (5H, m), 4,10-5,20 (1H, br), 7,11 (1H, s), 7,58 (1H, brs), 7,80 (1H, s), 7,97 (1H, brs), 8,15 (1H, s), 10,06 (2H, brs).	2 Hydroclorua
1158		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,90-1,10 (1H, m), 1,15-1,38 (5H, m), 1,47-1,69 (3H, m), 1,69-1,80 (1H, m), 2,00-2,11 (1H, m), 2,80-3,40 (4H, m), 3,40-3,60 (1H, m), 5,35-6,36 (1H, br), 7,13-7,44 (2H, m), 8,15 (1H, d, J = 2,0 Hz), 9,08-9,66 (1H, br), 9,66-10,08 (1H, br).	2 Hydroclorua

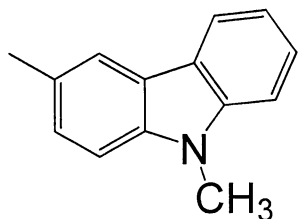
Bảng 146

Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
1159		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,95-1,10 (4H, m), 1,10-1,54 (4H, m), 1,54-1,65 (2H, m), 1,65-1,83 (2H, m), 2,37-2,47 (1H, m), 2,55-2,69 (2H, m), 3,05 (1H, dd, J = 2,8, 11,2 Hz), 3,12-3,23 (1H, m), 3,77 (3H, s), 6,42 (1H, d, J = 0,7, 3,1 Hz), 7,03 (1H, d, J = 3,1 Hz), 7,08 (1H, d, J = 2,0, 8,6 Hz), 7,22-7,30 (1H, m), 7,41 (1H, d, J = 1,8 Hz).	-
1160		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,90-1,05 (1H, m), 1,09-1,35 (5H, m), 1,39-1,60 (3H, m), 1,64-1,75 (1H, m), 1,88-2,00 (1H, m), 2,67-2,95 (3H, m), 3,07 (1H, dd, J = 2,8, 12,0 Hz), 3,28-3,40 (1H, m), 3,75 (3H, s), 6,36 (1H, d, J = 0,6, 3,0 Hz), 6,51 (2H, s), 6,87 (1H, d, J = 1,6, 8,4 Hz), 7,18 (1H, s), 7,27 (1H, d, J = 3,0 Hz), 7,47 (1H, d, J = 8,3 Hz). (3H không được phát hiện)	Fumarat
1161		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,82-0,92 (1H, m), 0,94 (3H, d, J = 6,3 Hz), 1,06-1,34 (4H, m), 1,38-1,58 (2H, m), 1,59-1,75 (2H, m), 2,28-2,37 (1H, m), 2,37-2,49 (2H, m), 2,89 (1H, dd, J = 2,6, 10,8 Hz), 2,94-3,04 (1H, m), 3,86 (3H, s), 7,21 (1H, dd, J = 1,9, 8,9 Hz), 7,31 (1H, s), 7,36 (1H, d, J = 1,7 Hz), 7,51 (1H, d, J = 8,9 Hz).	-
1162		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,80-0,99 (1H, m), 1,00-1,35 (5H, m), 1,35-1,98 (5H, m), 2,53-3,25 (4H, m), 3,23-3,40 (1H, m), 3,76 (3H, s), 6,40-6,58 (3H, m), 6,79 (1H, d, J = 8,0 Hz), 7,09 (1H, t, J = 7,8 Hz), 7,17-7,28 (2H, m). (3H không được phát hiện)	Fumarat

1163

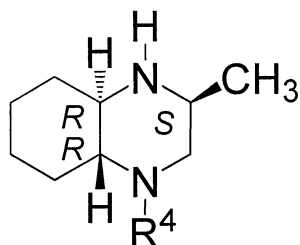


¹H-NMR (DMSO-d₆) δppm: 0,93-1,08 (1H, m), 1,10-1,35 (5H, m), 1,401-1,60 (3H, m), 1,64-1,75 (1H, m), 1,90-2,03 (1H, m), 2,72-3,00 (3H, m), 3,11 (1H, dd, J = 2,0, 12,0 Hz), 3,32-3,43 (1H, m), 3,85 (3H, s), 6,52 (2H, s), 7,15-7,23 (1H, m), 7,29 (1H, dd, J = 1,9, 8,6 Hz), 7,43-7,49 (1H, m), 7,53 (1H, d, J = 8,6 Hz), 7,56 (1H, d, J = 8,2 Hz), 7,94 (1H, d, J = 1,8 Hz), 8,14 (1H, d, J = 7,7 Hz). (3H, không được phát hiện)

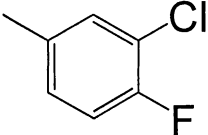
Fumarat

Bảng 147

Cấu hình tuyệt đối

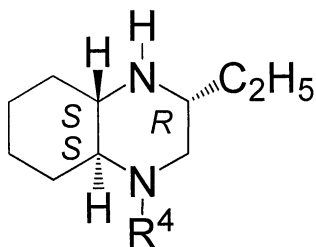


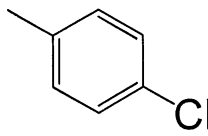
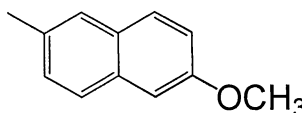
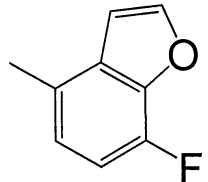
Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
1164		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,88-1,08 (4H, m), 1,15-1,42 (3H, m), 1,42-1,60 (1H, br), 1,60-1,69 (2H, m), 1,69-1,82 (2H, m), 2,31-2,39 (1H, m), 2,46 (1H, dd, J = 10,4, 11,0 Hz), 2,55-2,63 (1H, m), 3,00 (1H, dd, J = 2,8, 11,2 Hz), 3,07-3,18 (1H, m), 7,02-7,09 (2H, m), 7,23-7,29 (2H, m).	-
1165		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,98-1,10 (4H, m), 1,22-1,46 (4H, m), 1,65-1,90 (4H, m), 2,46-2,67 (3H, m), 3,10-3,25 (2H, m), 6,98 (1H, dd, J = 2,1, 8,6 Hz), 7,12 (1H, d, J = 2,1 Hz), 7,54 (1H, d, J = 8,6 Hz)	-
1166		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,90-1,03 (1H, m), 1,12 (3H, d, J = 6,4 Hz), 1,17-1,34 (2H, m), 1,34-1,48 (1H, m), 1,52-1,74 (3H, m), 1,84-1,94 (1H, m), 2,65-2,75 (2H, m), 2,74-2,84 (1H, m), 3,14 (1H, dd, J = 3,0, 11,9 Hz), 3,22-3,34 (1H, m), 6,51 (2H, s), 6,97-7,04 (1H, m), 7,19 (1H, dd, J = 2,4,	Fumarat

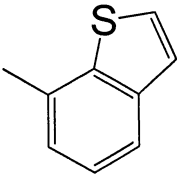
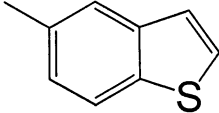
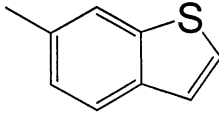
		11,3 Hz), 7,51 (1H, t, J = 8,6 Hz), 8,60-11,75 (2H, br). (1H không được phát hiện)	
1167		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,88-1,02 (1H, m), 1,11 (3H, d, J = 6,4 Hz), 1,14-1,45 (3H, m), 1,48-1,62 (2H, m), 1,65-1,73 (1H, m), 1,82-1,92 (1H, m), 2,60-2,81 (3H, m), 3,05 (1H, dd, J = 3,0, 11,8 Hz), 3,19-3,30 (1H, m), 6,51 (2H, s), 7,11-7,18 (1H, m), 7,30-7,41 (2H, m), 8,85-11,65 (2H, br). (1H không được phát hiện)	Fumarat

Bảng 148

Cấu hình tuyệt đối

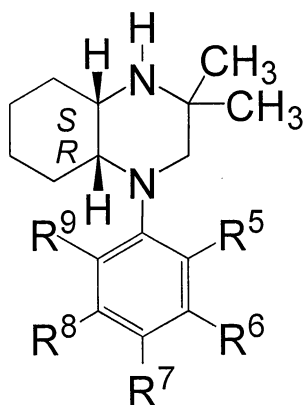


Ví dụ	R ⁴	NMR	Muối
1168		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,8-1,0 (4H, m), 1,1-1,6 (7H, m), 1,6-1,7 (1H, m), 1,8-1,9 (1H, m), 2,5-2,75 (3H, m), 2,85-3,9 (5H, m), 6,5-6,55 (2H, m), 7,1-7,2 (2H, m), 7,3-7,4 (2H, m).	Fumarat
1169		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,94 (3H, t, J = 7,5Hz), 0,95-1,1 (1H, m), 1,15-1,5 (5H, m), 1,5-1,85 (5H, m), 2,46-2,69 (3H, m), 2,91-3,01 (1H, m), 3,18 (1H, dd, J = 2,7, 11,2Hz), 3,91 (3H, s), 7,08-7,14 (2H, m), 7,31 (1H, dd, J = 2,1, 8,7Hz), 7,47 (1H, d, J = 2,0Hz), 7,64-7,71 (2H, m).	-
1170		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,82-1,03 (4H, m), 1,09-1,36 (2H, m), 1,41-1,59 (4H, m), 1,59-1,75 (2H, m), 1,92-2,06 (1H, m), 2,71-3,07 (3H, m), 3,10-3,20 (1H, m), 3,20-3,32 (1H, m), 6,56 (4H, s), 6,97-7,26 (3H, m), 11,5 (5H, m).	2 Fumarat

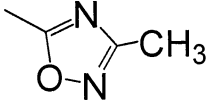
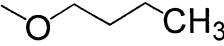
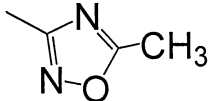
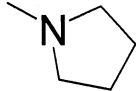
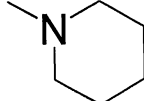
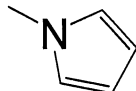
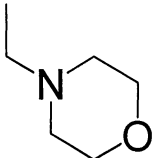
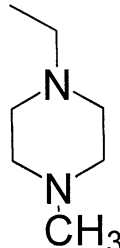
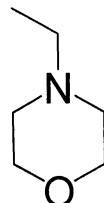
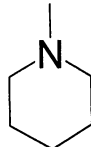
1171		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,85-1,05 (4H, m), 1,1-1,4 (2H, m), 1,45-1,65 (4H, m), 1,65-1,85 (2H, m), 2,05-2,15 (1H, m), 2,85-3,22 (3H, m), 3,22-3,38 (2H, m), 4,09 (1H, br), 7,24 (1H, d, J = 7,5Hz), 7,35-7,5 (2H, m), 7,7-7,8 (2H, m), 9,15-9,35 (1H, m), 9,35-9,55 (1H, m).	2 Hydroclorua
1172		¹ H-NMR (CDCl ₃) δppm: 0,93 (3H, t, J = 7,5Hz), 0,98-1,09 (1H, m), 1,14-1,50 (5H, m), 1,55-1,85 (5H, m), 2,44-2,53 (1H, m), 2,55-2,68 (2H, m), 2,91-3,00 (1H, m), 3,15 (1H, dd, J = 2,7, 11,1Hz), 7,20 (1H, dd, J = 2,0, 8,6Hz), 7,27 (1H, dd, J = 0,5, 5,4Hz), 7,43 (1H, d, J = 5,4Hz), 7,59 (1H, d, J = 2,0Hz), 7,79 (1H, d, J = 8,6Hz).	-
1173		¹ H-NMR (DMSO-d ₆) δppm: 0,85-1,05 (4H, m), 1,15-1,35 (2H, m), 1,35-1,5 (2H, m), 1,5-1,6 (3H, m), 1,65-1,75 (1H, m), 1,85-1,95 (1H, m), 2,65-2,85 (3H, m), 3,05-3,2 (2H, m), 3,6 (3H, br), 6,51 (2H, s), 7,19 (1H, dd, J = 1,9, 8,5Hz), 7,39 (1H, dd, J = 0,5, 5,4Hz), 7,68 (1H, d, J = 5,4Hz), 7,76 (1H, d, J = 1,8Hz), 7,81 (1H, d, J = 8,5Hz).	Fumarat

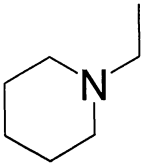
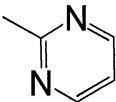
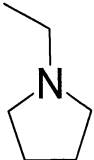
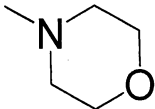
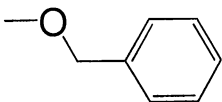
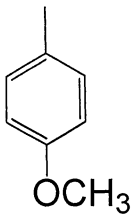
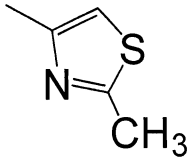
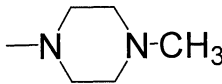
Bảng 149

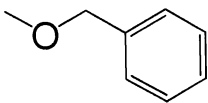
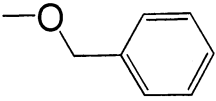
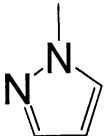
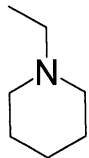
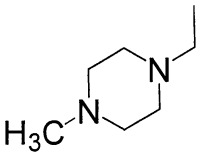
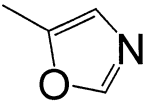
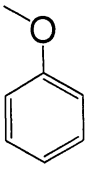
Cấu hình tuyệt đối



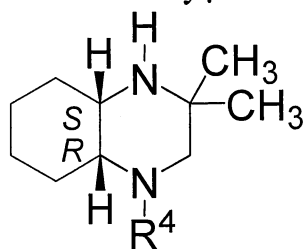
Ví dụ	R ⁵	R ⁶	R ⁷	R ⁸	R ⁹	MS(M+1)
-------	----------------	----------------	----------------	----------------	----------------	---------

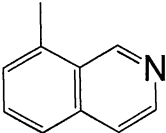
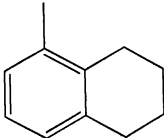
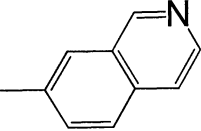
1174	-H		-H	-H	-H	327
1175	-H	-H		-H	-H	317
1176	-H		-H	-H	-H	327
1177	-H		-H	-H	-H	314
1178	-H		-H	-H	-H	328
1179	-H		-H	-H	-H	310
1180	-H	-H		-H	-H	344
1181	-H		-H	-H	-H	357
1182	-H		-H	-H	-H	344
1183	-H	-H		-H	-H	328

1184	-H	-H		-H	-H	342
1185	-H		-H	-H	-H	323
1186	-H		-H	-H	-H	328
1187	-H		-H	-H	-H	330
1188	-H	-Cl		-H	-H	385
1189	-H	-H		-H	-H	351
1190	-H		-H	-H	-H	342
1191	-OCH ₃	-OCH ₃	-H	-H	-H	305
1192	-H	-H	-O(CH ₂) ₂ CH ₃	-H	-H	303
1193	-H	-H		-H	-H	343
1194	-F	-H	-OCH ₃	-H	-H	293
1195	-Cl	-H	-H	-CF ₃	-H	347

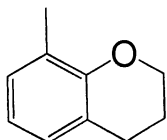
1196	-Cl	-H	-H	-H	-H	297
1197	-H		-OCH ₃	-H	-H	381
1198	-OCH ₃	-H	-Cl	-H	-H	309
1199	-F	-Cl	-H	-H	-H	297
1200	-CH ₃	-H	-OCH ₃	-Cl	-H	323
1201	-H	-OCH ₃		-H	-H	381
1202	-H	-H		-H	-H	311
1203	-H		-H	-H	-H	342
1204	-H	-H		-H	-H	357
1205	-H	-H	-OCH(CH ₃) ₂	-H	-H	303
1206	-H		-H	-H	-H	312
1207	- OCH ₂ CH 3	-H	-H	-H	-H	289
1208	-H		-H	-H	-H	337

Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ	R ⁴	MS(M+1)
1214		296
1215		299
1216		296

1217



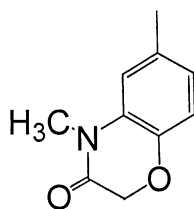
301

1218



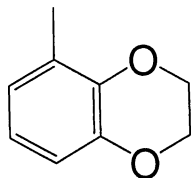
338

1219



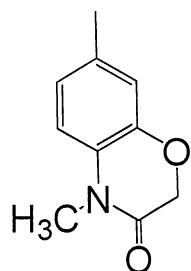
330

1220



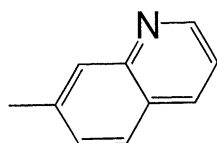
303

1221



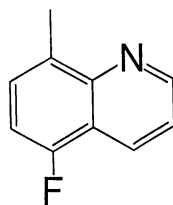
330

1222



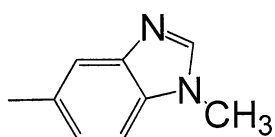
296

1223

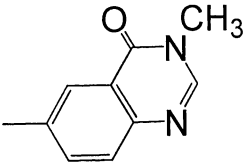
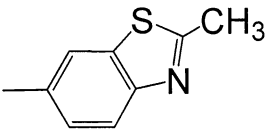
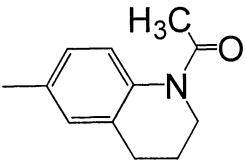
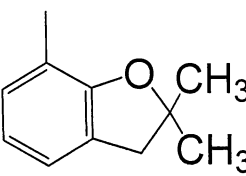
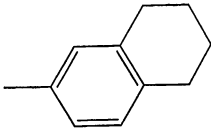
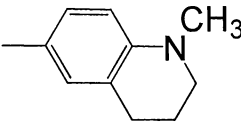
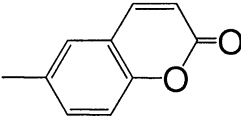


314

1224

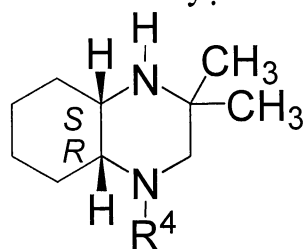


299

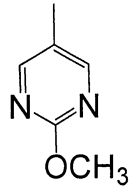
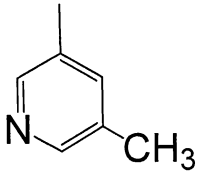
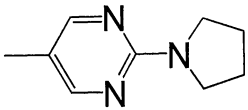
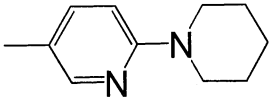
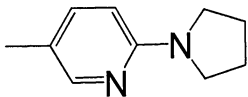
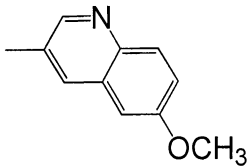
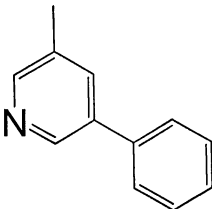
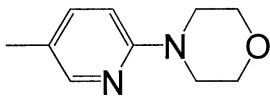
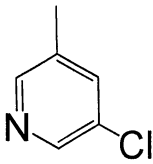
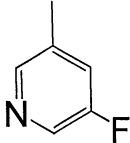
1225		327
1226		316
1227		342
1228		315
1229		299
1230		314
1231		313

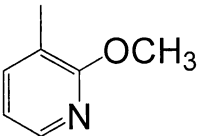
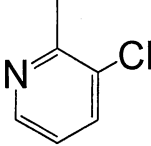
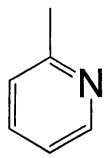
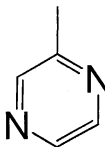
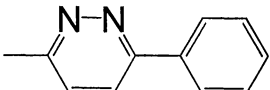
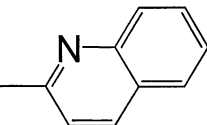
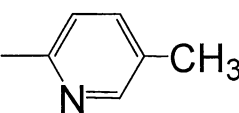
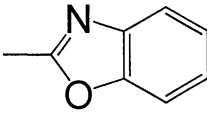
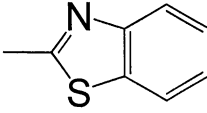
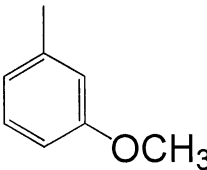
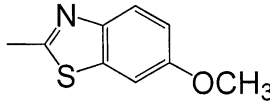
Bảng 151

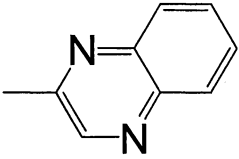
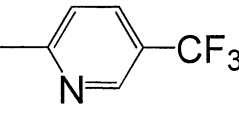
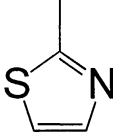
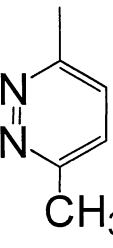
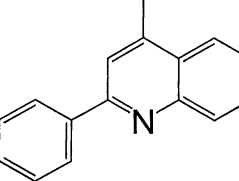
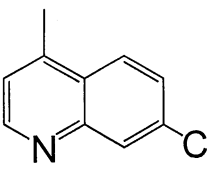
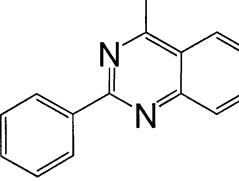
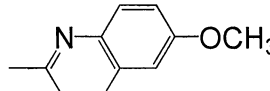
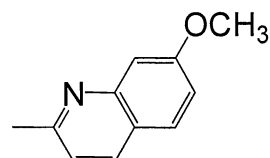
Cấu hình tuyệt đối

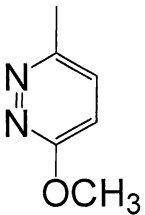
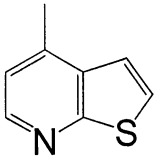
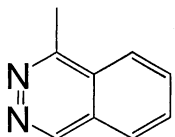
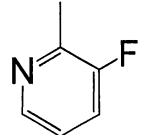
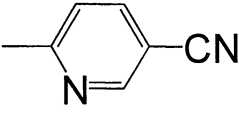
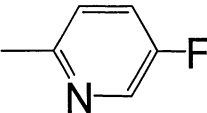
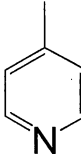
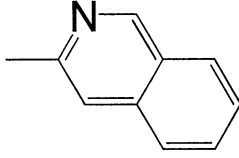
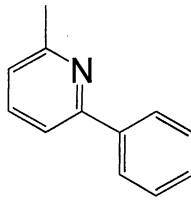


Ví dụ.	R ⁴	MS(M+1)
--------	----------------	---------

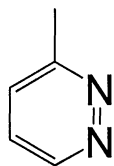
1232		277
1233		260
1234		316
1235		329
1236		315
1237		326
1238		322
1239		331
1240		280
1241		264

1242		276
1243		280
1244		246
1245		247
1246		323
1247		296
1248		260
1249		286
1250		302
1251		276
1252		332

1253		297
1254		314
1255		252
1256		261
1257		372
1258		330
1259		373
1260		326
1261		326

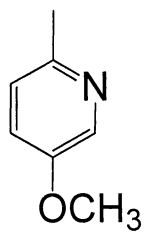
1262		277
1263		302
1264		297
1265		264
1266		271
1267		264
1268		246
1269		296
1270		322

1271



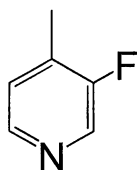
247

1272



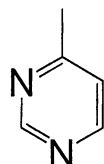
276

1273



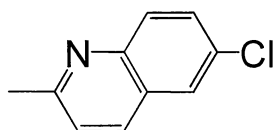
264

1274



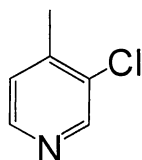
247

1275



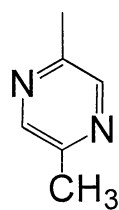
330

1276



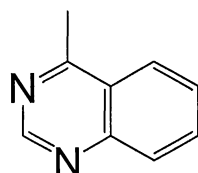
280

1277



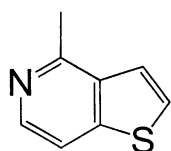
261

1278

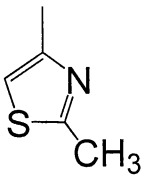
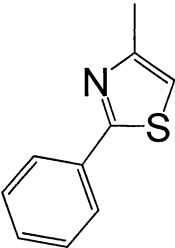
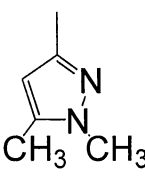
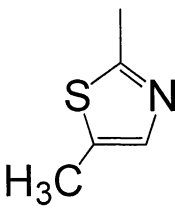


297

1279

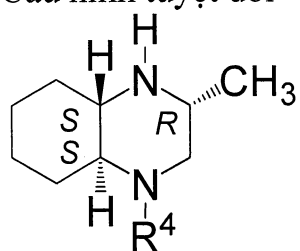


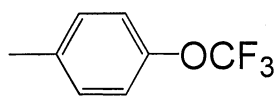
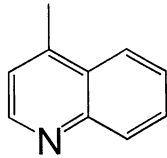
302

1280		266
1281		328
1282		263
1283		266

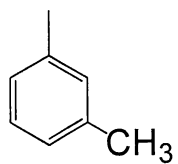
Bảng 152

Cấu hình tuyệt đối



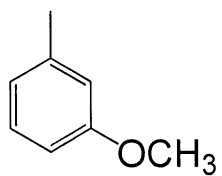
Ví dụ.	R ⁴	MS(M+1)
1284		315
1285		282

1286



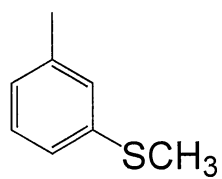
245

1287



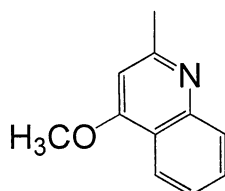
261

1288



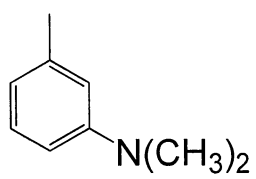
277

1289



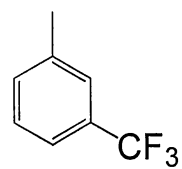
312

1290



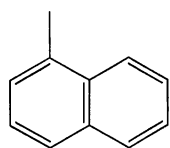
274

1291



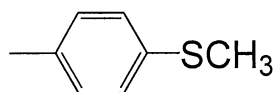
299

1292



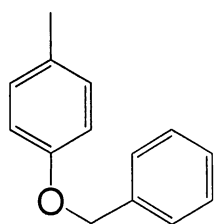
281

1293



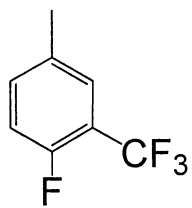
277

1294



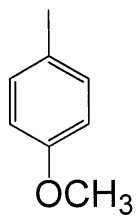
337

1295



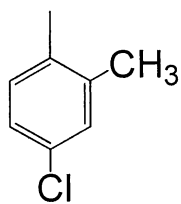
317

1296



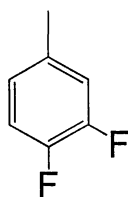
261

1297



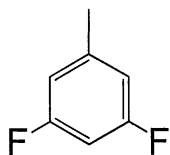
279

1298



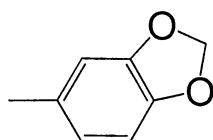
267

1299



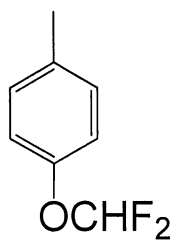
267

1300



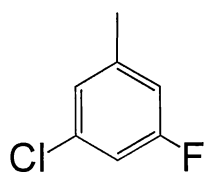
275

1301



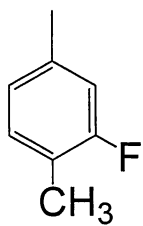
297

1302



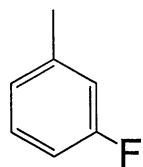
283

1303



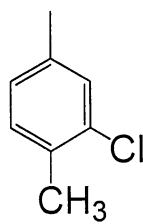
263

1304



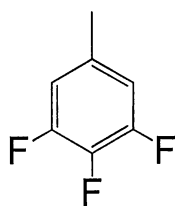
249

1305



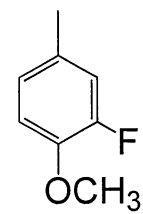
279

1306



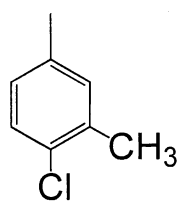
285

1307



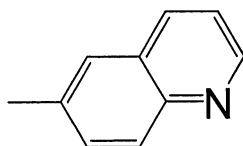
279

1308



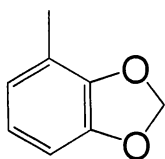
279

1309

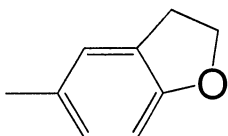
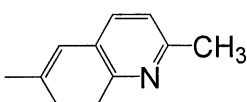
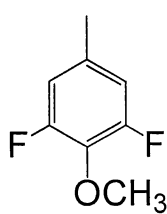
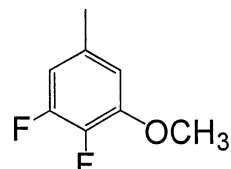
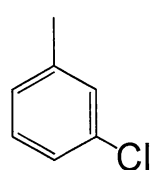
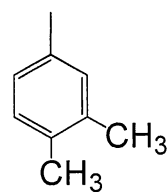
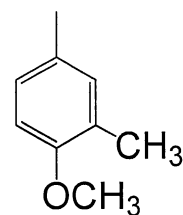
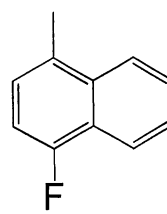


282

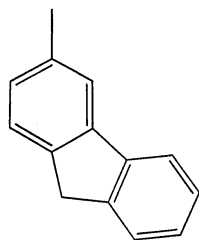
1310



275

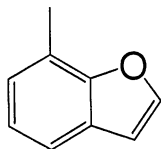
1311		273
1312		296
1313		297
1314		297
1315		265
1316		259
1317		275
1318		299

1319



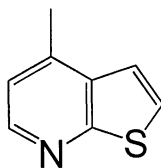
319

1320



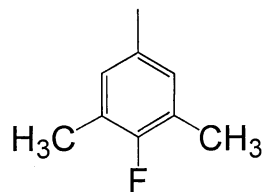
271

1321



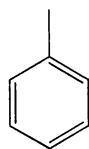
288

1322



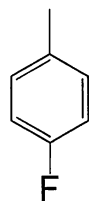
277

1323



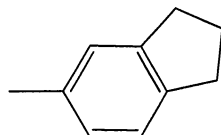
231

1324



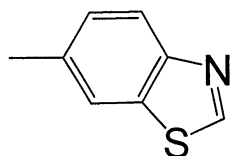
249

1325



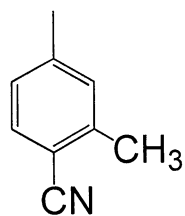
271

1326



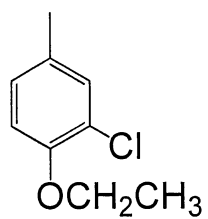
288

1327



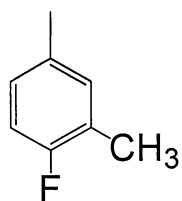
270

1328



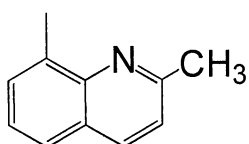
309

1329



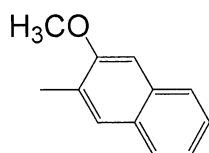
263

1330



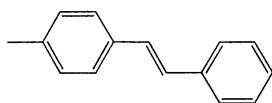
296

1331



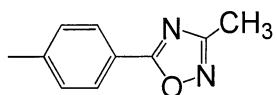
311

1332



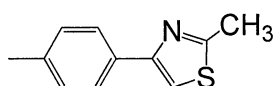
333

1333



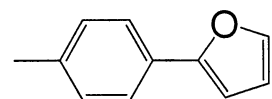
313

1334



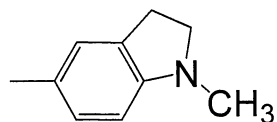
328

1335



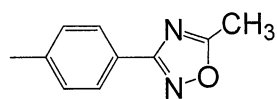
297

1336



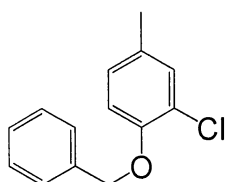
286

1337

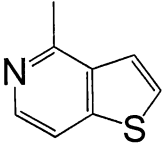
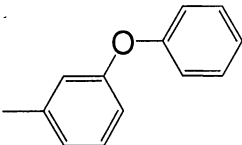
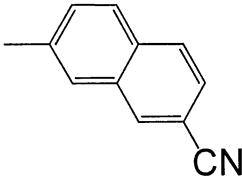


313

1338

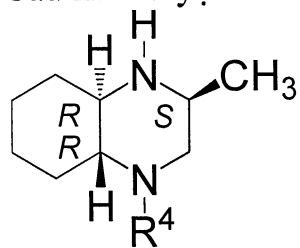


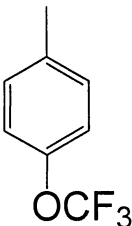
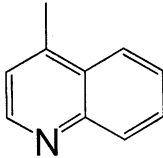
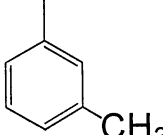
371

1339		288
1340		323
1341		306

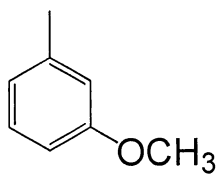
Bảng 153

Cấu hình tuyệt đối



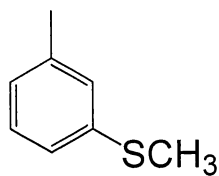
Ví dụ.	R ⁴	MS(M+1)
1342		315
1343		282
1344		245

1345



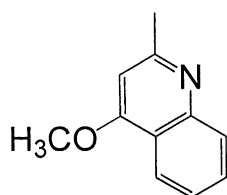
261

1346



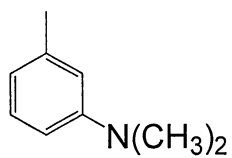
277

1347



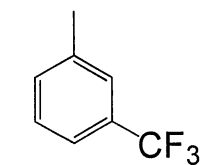
312

1348



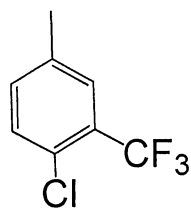
274

1349



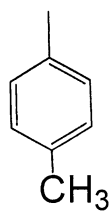
299

1350



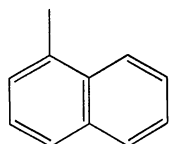
333

1351



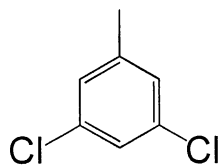
245

1352



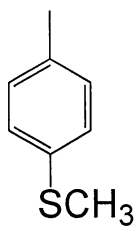
281

1353



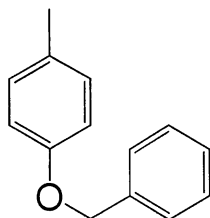
299

1354



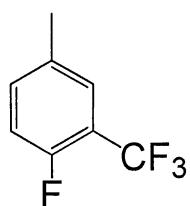
277

1355



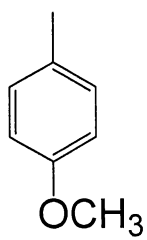
337

1356



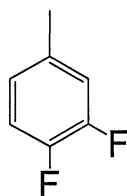
317

1357



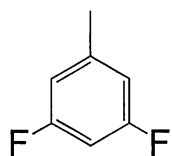
261

1358



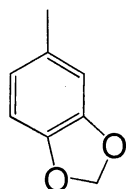
267

1359



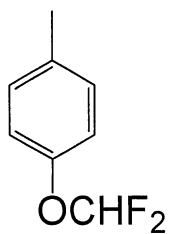
267

1360



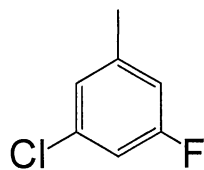
275

1361



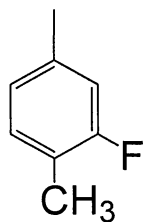
297

1362



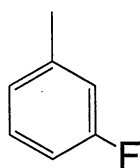
283

1363



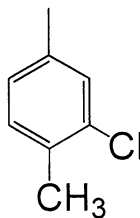
263

1364



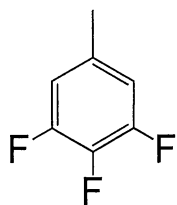
249

1365



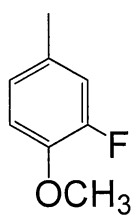
279

1366



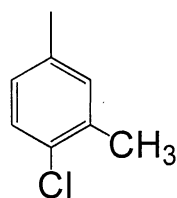
285

1367



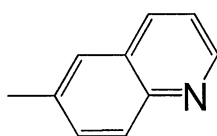
279

1368



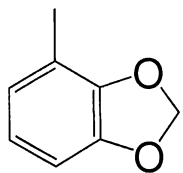
279

1369



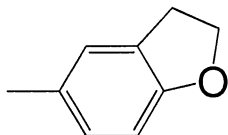
282

1370



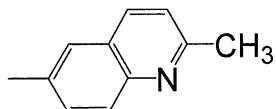
275

1371



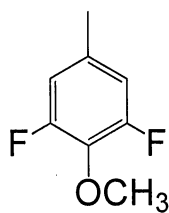
273

1372



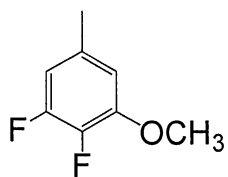
296

1373



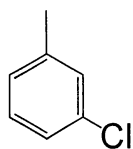
297

1374



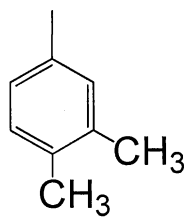
297

1375



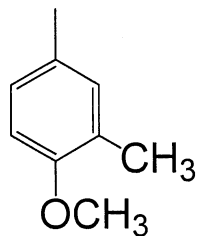
265

1376



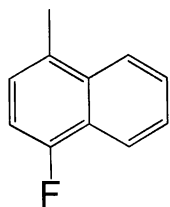
259

1377



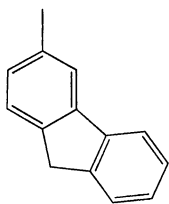
275

1378



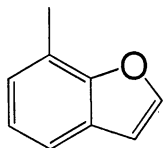
299

1379



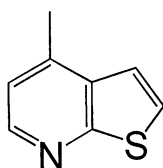
319

1380



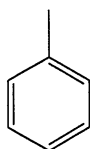
271

1381



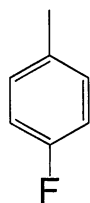
288

1382



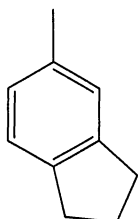
231

1383



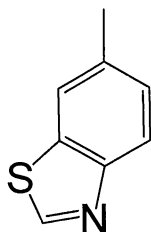
249

1384



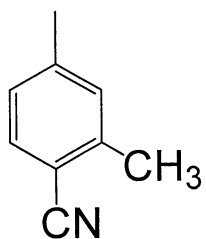
271

1385

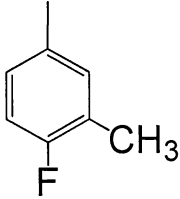
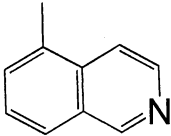
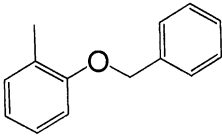
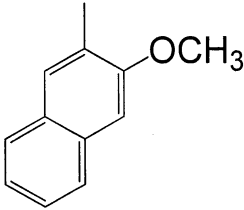
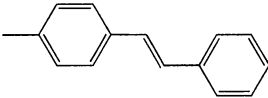
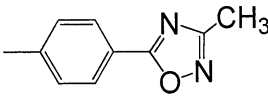
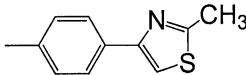
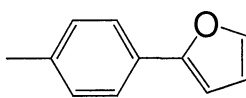
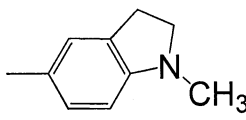
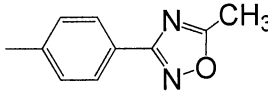
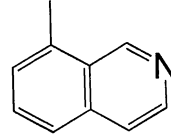


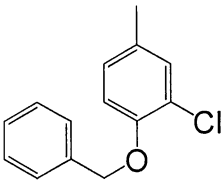
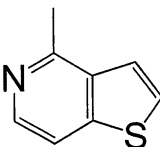
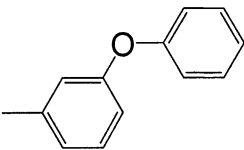
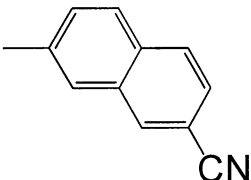
288

1386



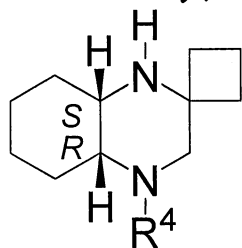
270

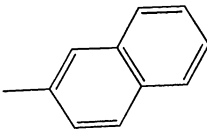
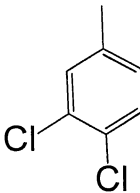
1387		263
1388		282
1389		337
1390		311
1391		333
1392		313
1393		328
1394		297
1395		286
1396		313
1397		282

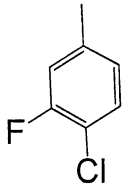
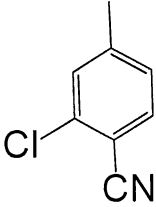
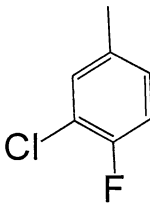
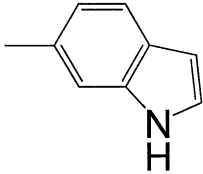
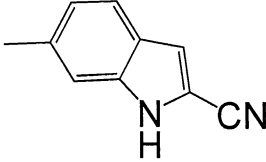
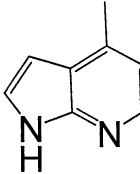
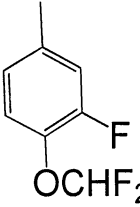
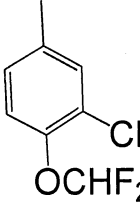
1398		371
1399		288
1400		323
1401		306

Bảng 154

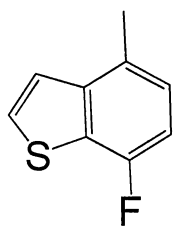
Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ.	R ⁴	MS(M+1)
1402		307
1403		325

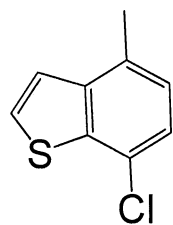
1404	 <chem>CC1=CC=C(C=C1)C(F)=CC=C1Cl</chem>	309
1405	 <chem>CC1=CC=C(C=C1)C(Cl)=CC=C1C#N</chem>	316
1406	 <chem>CC1=CC=C(C=C1)C(F)=CC=C1Cl</chem>	309
1407	 <chem>CC1=CC=C2C(=C1)C=CC=C2N</chem>	296
1408	 <chem>CC1=CC=C2C(=C1)C=CC=C2N</chem>	321
1409	 <chem>CC1=CC=C2C(=C1)C=CC=C2N</chem>	297
1410	 <chem>CC1=CC=C(C=C1)C(F)=CC=C1OC(F)F</chem>	341
1411	 <chem>CC1=CC=C(C=C1)C(Cl)=CC=C1OC(F)F</chem>	357

1412



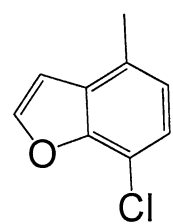
331

1413



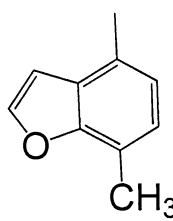
347

1414



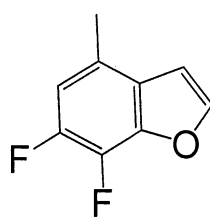
331

1415



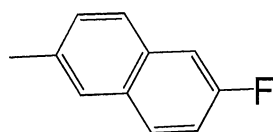
311

1416



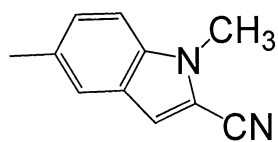
333

1417



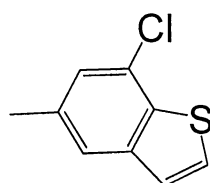
325

1418

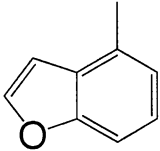
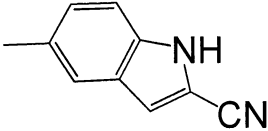
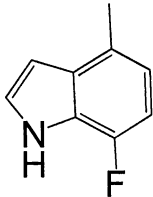
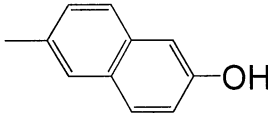
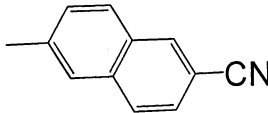
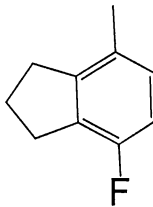
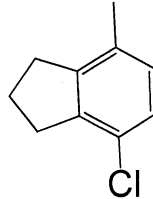


335

1419

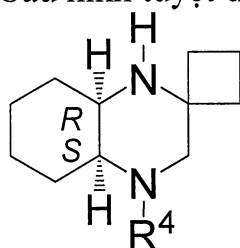


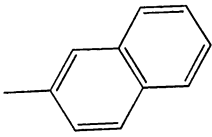
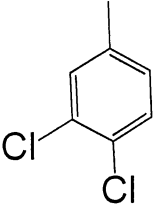
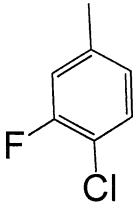
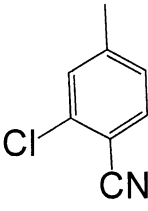
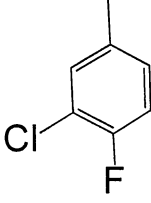
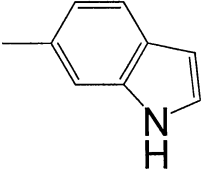
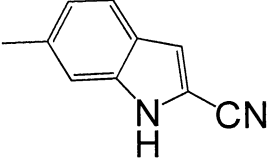
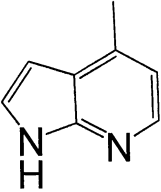
347

1420		297
1421		321
1422		314
1423		323
1424		332
1425		315
1426		331

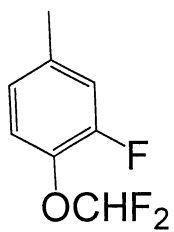
Bảng 155

Cấu hình tuyệt đối



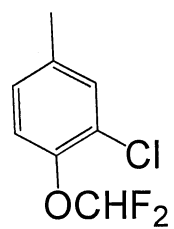
Ví dụ.	R ⁴	MS(M+1)
1427		307
1428		325
1429		309
1430		316
1431		309
1432		296
1433		321
1434		297

1435



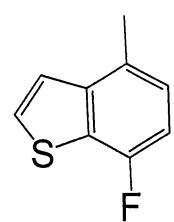
341

1436



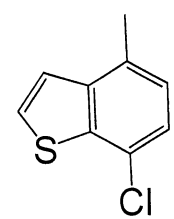
357

1437



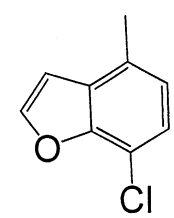
331

1438



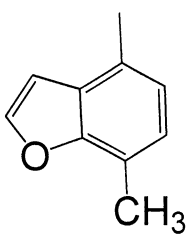
347

1439



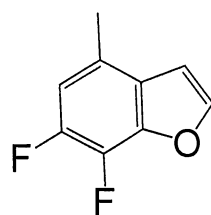
331

1440



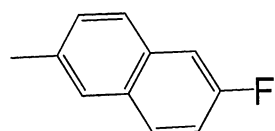
311

1441

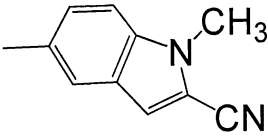
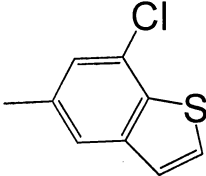
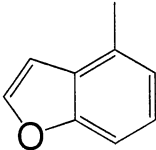
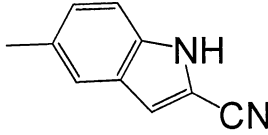
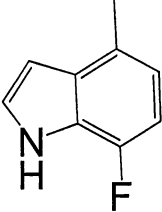
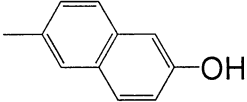
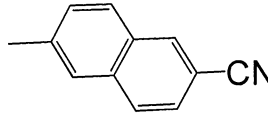
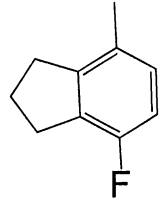
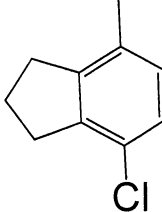


333

1442

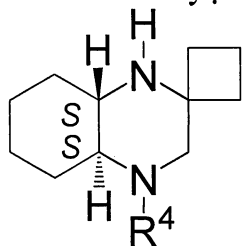


325

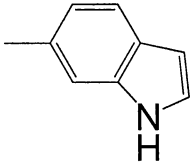
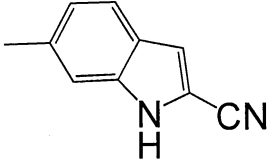
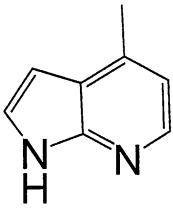
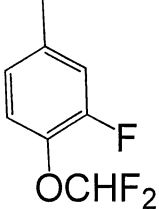
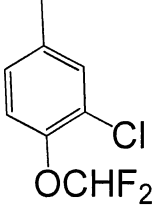
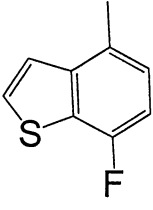
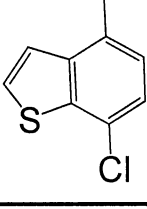
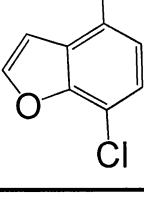
1443	 <chem>Cc1ccc2c(c1)c(c[nH]2)C#N</chem>	335
1444	 <chem>Cc1ccc2c(c1)c(c[nH]2)Cl</chem>	347
1445	 <chem>Cc1ccc2c(c1)c(c[nH]2)C</chem>	297
1446	 <chem>Cc1ccc2c(c1)c(c[nH]2)C#N</chem>	321
1447	 <chem>Cc1ccc2c(c1)c(c[nH]2)F</chem>	314
1448	 <chem>Cc1ccc2c(c1)c(c[nH]2)O</chem>	323
1449	 <chem>Cc1ccc2c(c1)c(c[nH]2)C#N</chem>	332
1450	 <chem>Cc1ccc2c(c1)c(c[nH]2)F</chem>	315
1451	 <chem>Cc1ccc2c(c1)c(c[nH]2)Cl</chem>	331

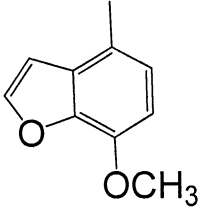
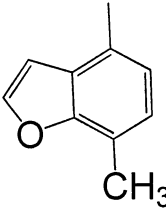
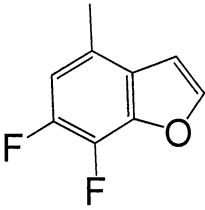
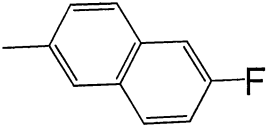
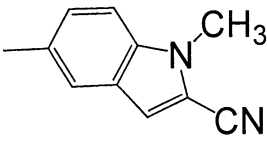
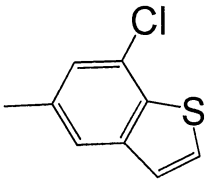
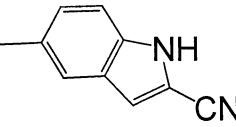
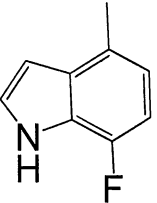
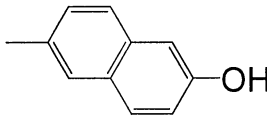
Bảng 156

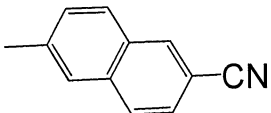
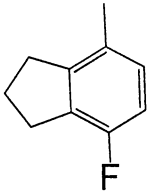
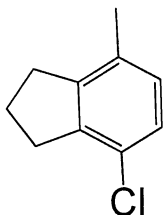
Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ.	R ⁴	MS(M+1)
1452		307
1453		325
1454		309
1455		316
1456		313
1457		309

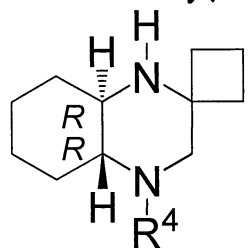
1458		296
1459		321
1460		297
1461		341
1462		357
1463		331
1464		347
1465		331

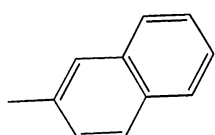
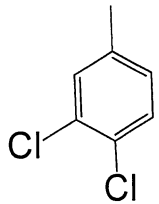
1466		327
1467		311
1468		333
1469		325
1470		335
1471		347
1472		321
1473		314
1474		323

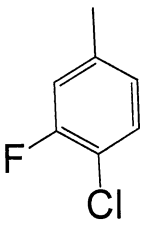
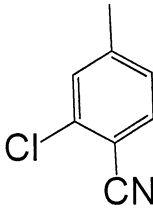
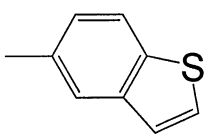
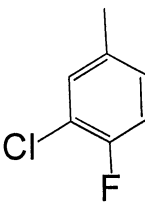
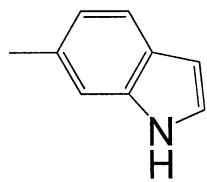
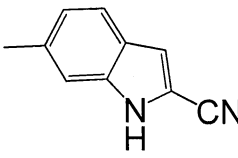
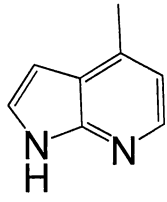
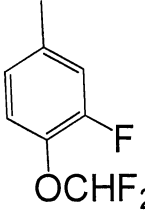
1475		332
1476		315
1477		331

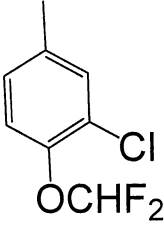
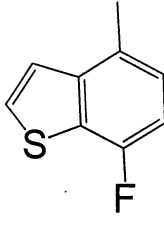
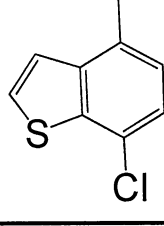
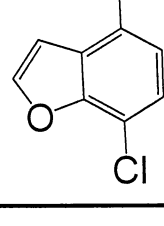
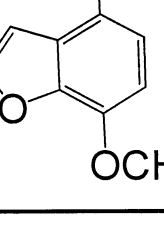
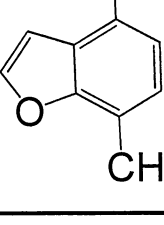
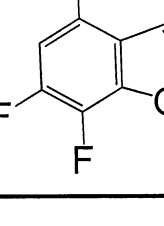
Bảng 157

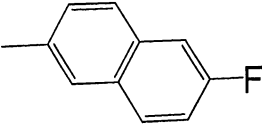
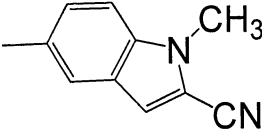
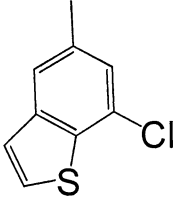
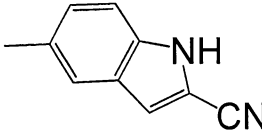
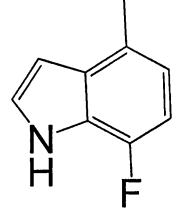
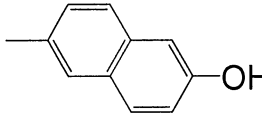
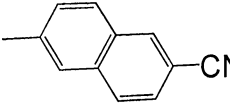
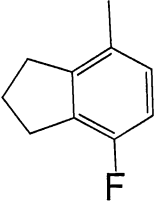
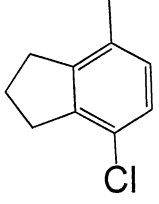
Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ.	R ⁴	MS(M+1)
1478		307
1479		325

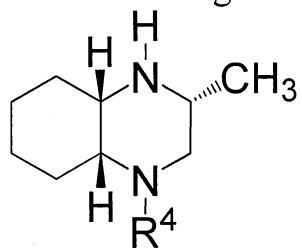
1480		309
1481		316
1482		313
1483		309
1484		296
1485		321
1486		297
1487		341

1488		357
1489		331
1490		347
1491		331
1492		327
1493		311
1494		333

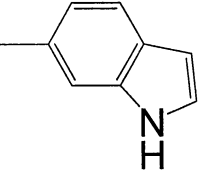
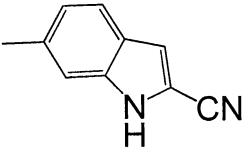
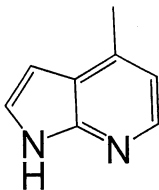
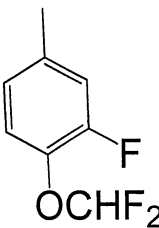
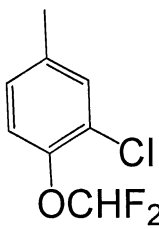
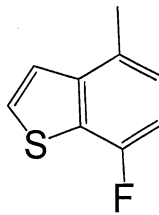
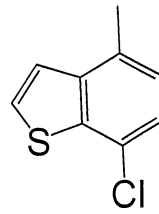
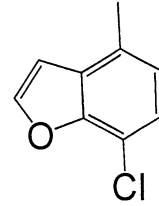
1495		325
1496		335
1497		347
1498		321
1499		314
1500		323
1501		332
1502		315
1503		331

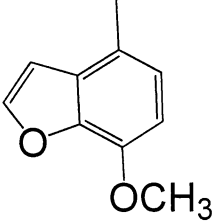
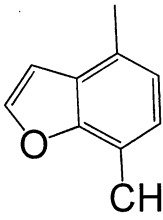
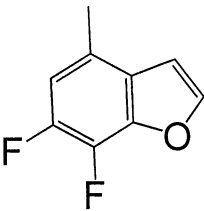
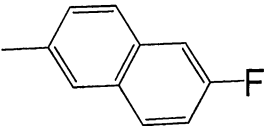
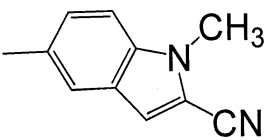
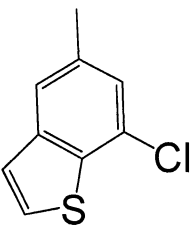
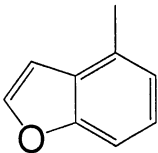
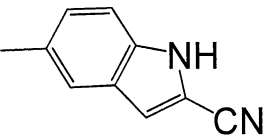
Bảng 158

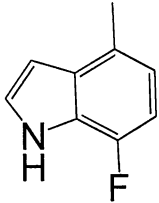
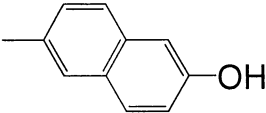
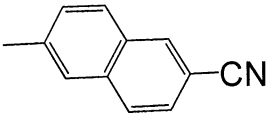
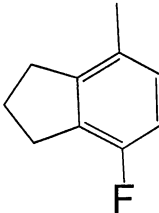
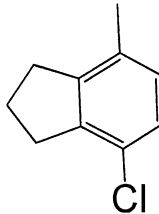
Cấu hình tương đối



Ví dụ.	R ⁴	MS(M+1)
1504		281
1505		299
1506		283
1507		290
1508		283

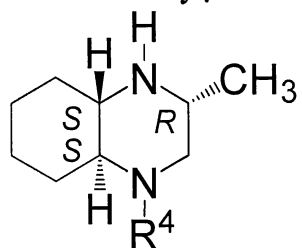
1509		270
1510		295
1511		271
1512		315
1513		331
1514		305
1515		321
1516		305

1517		301
1518		285
1519		307
1520		299
1521		309
1522		321
1523		271
1524		295

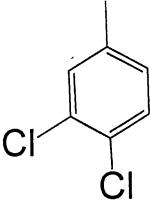
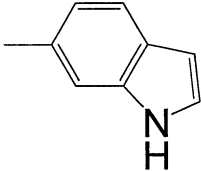
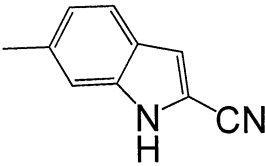
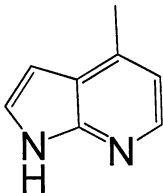
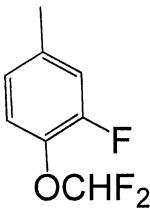
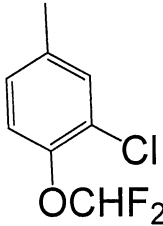
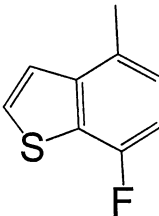
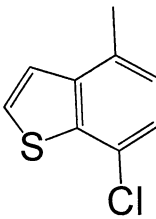
1525		288
1526		297
1527		306
1528		289
1529		305

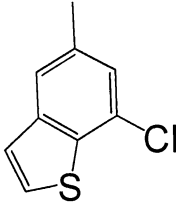
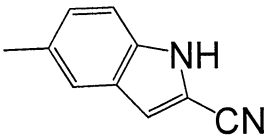
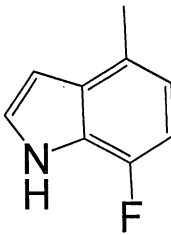
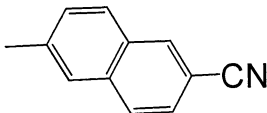
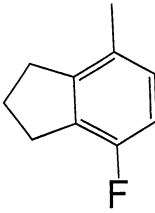
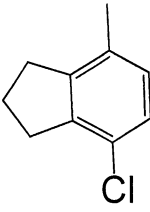
Bảng 159

Cấu hình tuyệt đối



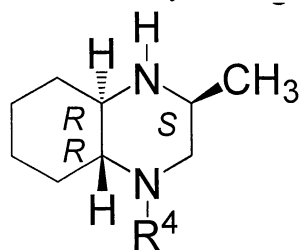
Ví dụ.	R ⁴	MS(M+1)
--------	----------------	---------

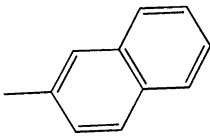
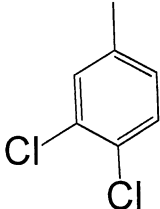
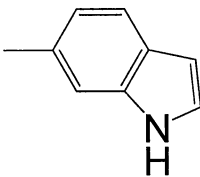
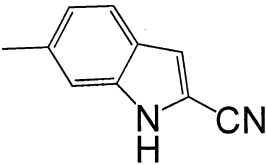
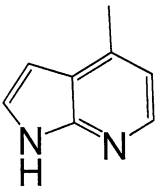
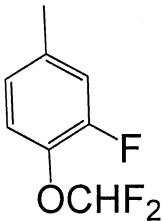
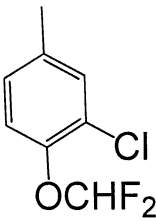
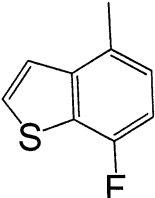
1530		299
1531		270
1532		295
1533		271
1534		315
1535		331
1536		305
1537		321

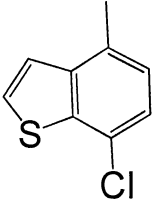
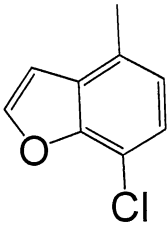
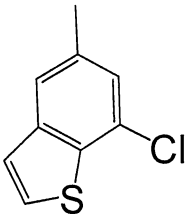
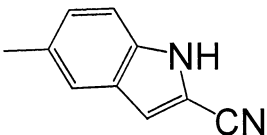
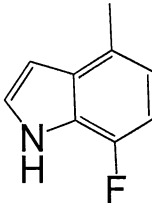
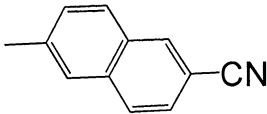
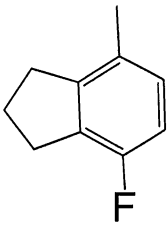
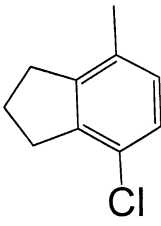
1538		321
1539		295
1540		288
1541		306
1542		289
1543		305

Bảng 160

Cấu hình tuyệt đối

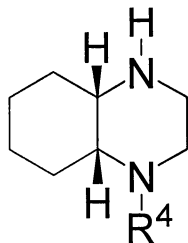


Ví dụ.	R ⁴	MS(M+1)
1544		281
1545		299
1546		270
1547		295
1548		271
1549		315
1550		331
1551		305

1552		321
1553		305
1554		321
1555		295
1556		288
1557		306
1558		289
1559		305

Bảng 161

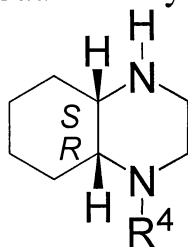
Cấu hình tương đối



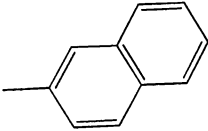
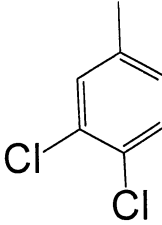
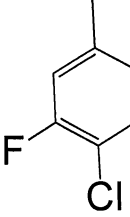
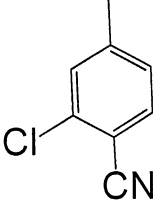
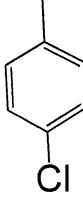
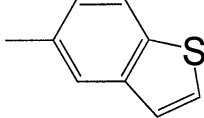
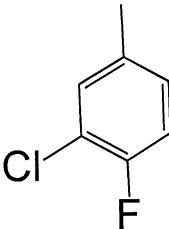
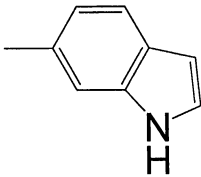
Ví dụ.	R ⁴	MS(M+1)
1560		275
1561		291

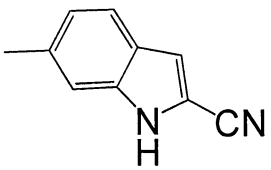
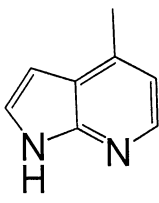
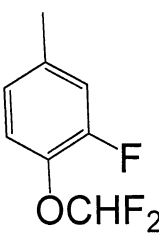
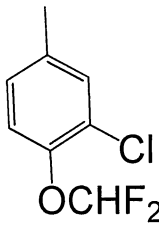
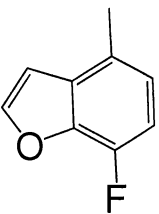
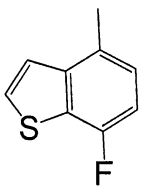
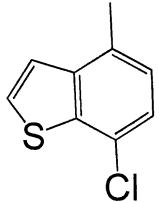
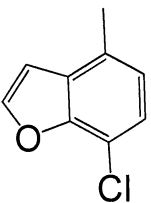
Bảng 162

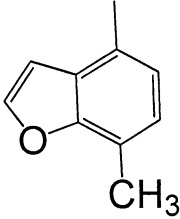
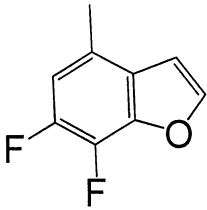
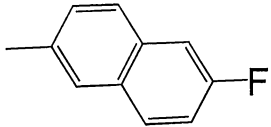
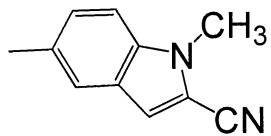
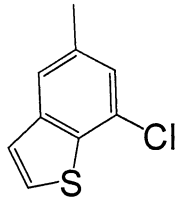
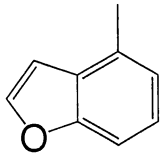
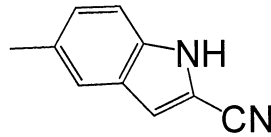
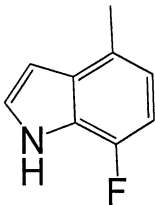
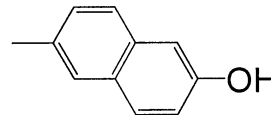
Cấu hình tuyệt đối

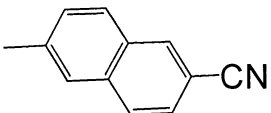


Ví dụ.	R ⁴	MS(M+1)
--------	----------------	---------

1562		267
1563		285
1564		269
1565		276
1566		251
1567		273
1568		269
1569		256

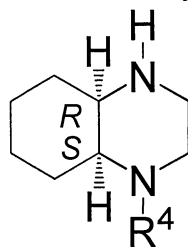
1570		281
1571		257
1572		301
1573		317
1574		275
1575		291
1576		307
1577		291

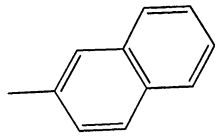
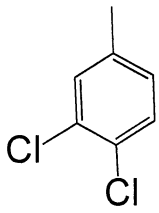
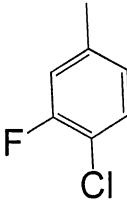
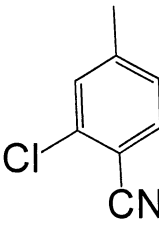
1578	 <chem>CC1=C(C)OC2=CC=CC=C12</chem>	271
1579	 <chem>CC1=CC=C2C(=C1)OC=C2C(F)=C(F)</chem>	293
1580	 <chem>CC1=CC=C2C=CC(=C1)C=C2F</chem>	285
1581	 <chem>CC1=CC=C2C(=C1)C(C#N)=CN2</chem>	295
1582	 <chem>CC1=CC=C2C(=C1)SC=C2Cl</chem>	307
1583	 <chem>CC1=CC=C2C=CC1OC2</chem>	257
1584	 <chem>CC1=CC=C2C(=C1)C(C#N)=CN2</chem>	281
1585	 <chem>CC1=CC=C2C(=C1)C(=CN2)F</chem>	274
1586	 <chem>CC1=CC=C2C=CC(=C1)C=C2O</chem>	283

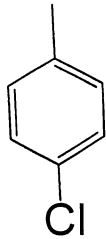
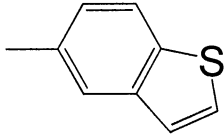
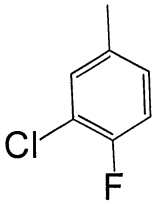
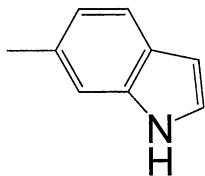
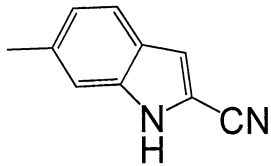
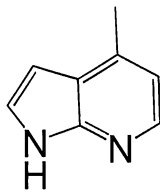
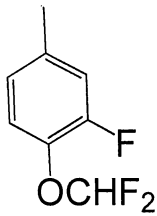
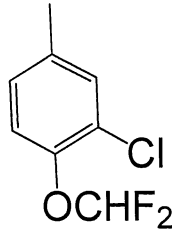
1587		292
------	---	-----

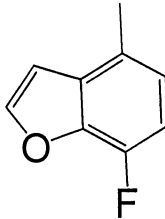
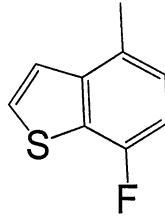
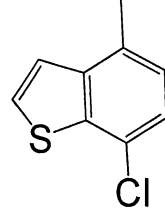
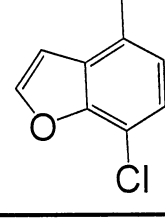
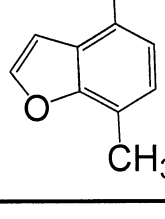
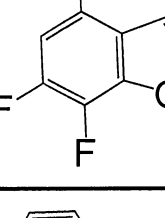
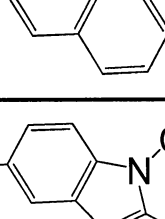
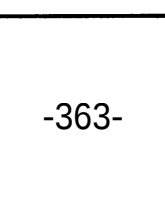
Bảng 163

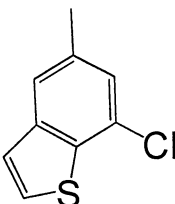
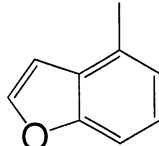
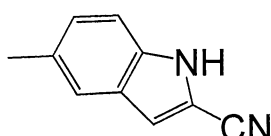
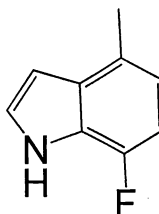
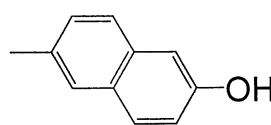
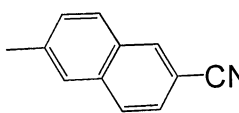
Cấu hình tuyệt đối



Ví dụ.	R ⁴	MS(M+1)
1588		267
1589		285
1590		269
1591		276

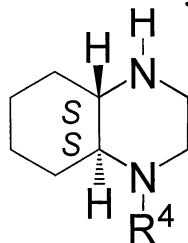
1592		251
1593		273
1594		269
1595		256
1596		281
1597		257
1598		301
1599		317

1600	 <chem>Cc1ccc2c(c1)occc2F</chem>	275
1601	 <chem>Cc1ccc2c(c1)scsc2F</chem>	291
1602	 <chem>Cc1ccc2c(c1)scsc2Cl</chem>	307
1603	 <chem>Cc1ccc2c(c1)occc2Cl</chem>	291
1604	 <chem>Cc1ccc2c(c1)occc2C</chem>	271
1605	 <chem>Cc1cc2c(c1)c3ccccc3oc2F</chem>	293
1606	 <chem>Cc1ccc2cc3ccccc3cc2c1F</chem>	285
1607	 <chem>Cc1ccc2cc3ccccc3cc2c1C#N</chem>	295

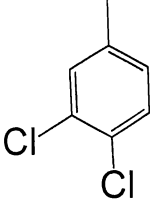
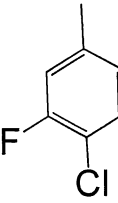
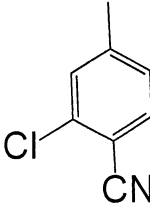
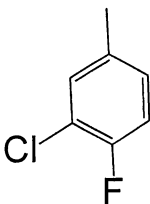
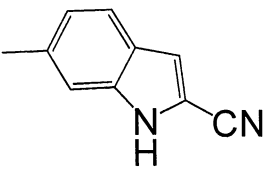
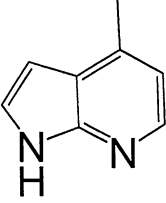
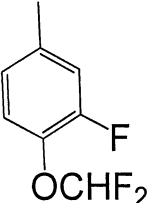
1608		307
1609		257
1610		281
1611		274
1612		283
1613		292

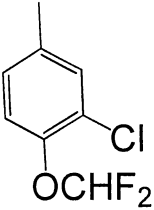
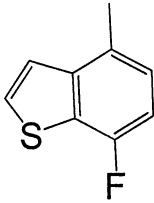
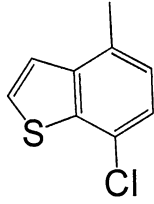
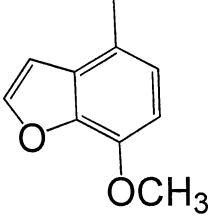
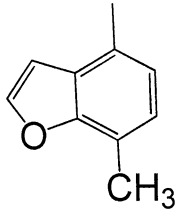
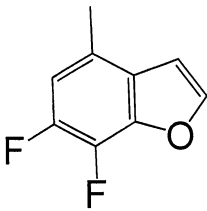
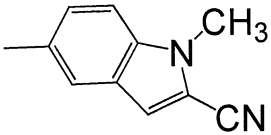
Bảng 164

Cấu hình tuyệt đối

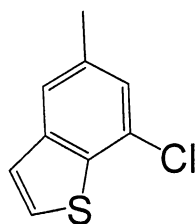


Ví dụ.	R ⁴	MS(M+1)
--------	----------------	---------

1614	 <chem>CC1=CC=C(C=C1Cl)Cl</chem>	285
1615	 <chem>CC1=CC=C(C=C1Cl)F</chem>	269
1616	 <chem>CC1=CC=C(C=C1Cl)C#N</chem>	276
1617	 <chem>CC1=CC=C(C=C1Cl)F</chem>	269
1618	 <chem>CC1=CC=C2C(=C1)C(=CN2)C#N</chem>	281
1619	 <chem>CC1=CC2=C(N1)C=CC=N2</chem>	257
1620	 <chem>CC1=CC=C(C=C1OC(F)F)F</chem>	301

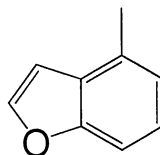
1621	 <chem>CC1=CC=C(C=C1Cl)OCC</chem>	317
1622	 <chem>CC1=CC=C(C=C1S)F</chem>	291
1623	 <chem>CC1=CC=C(C=C1S)Cl</chem>	307
1624	 <chem>CC1=CC=C(C=C1OC)C2=CC=CC=C2O</chem>	287
1625	 <chem>CC1=CC=C(C=C1OC)C2=CC=CC=C2O</chem>	271
1626	 <chem>CC1=CC=C(C=C1OC)C2=CC=CC=C2O</chem>	293
1627	 <chem>CC1=CC=C(C=C1N(C)C#N)C2=CC=CC=C2</chem>	295

1628



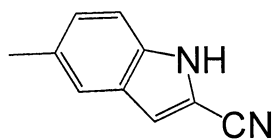
307

1629



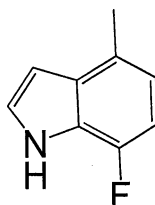
257

1630



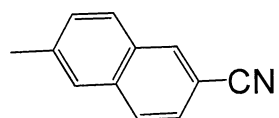
281

1631



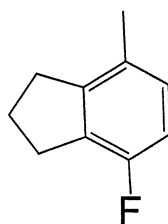
274

1632



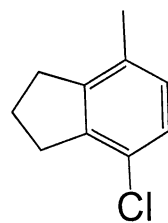
292

1633



275

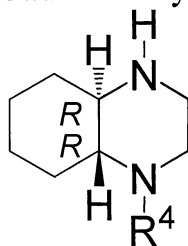
1634



291

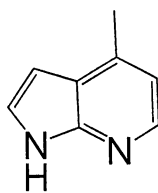
Bảng 165

Cấu hình tuyệt đối 1



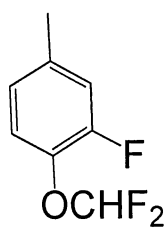
Ví dụ.	R ⁴	MS(M+1)
1635		285
1636		269
1637		276
1638		269
1639		281

1640



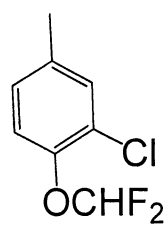
257

1641



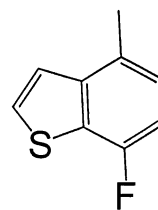
301

1642



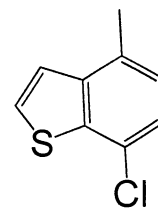
317

1643



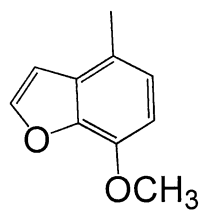
291

1644



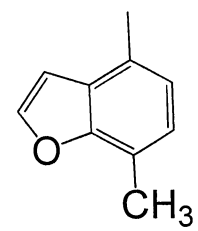
307

1645



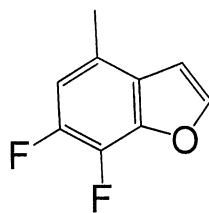
287

1646



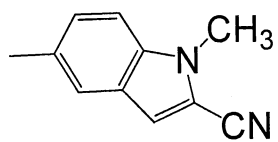
271

1647



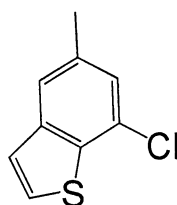
293

1648



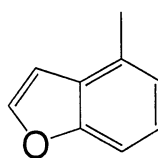
295

1649



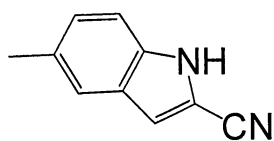
307

1650



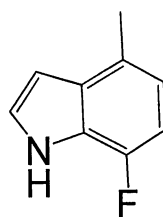
257

1651



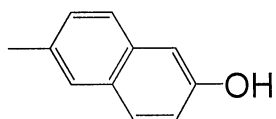
281

1652



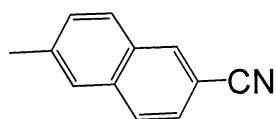
274

1653

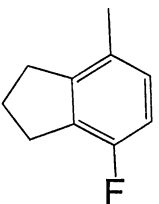
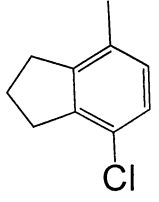


283

1654



292

1655		275
1656		291

Nghiên cứu dược lý 1

Xác định hoạt tính ức chế hấp thu serotonin (5-HT) của hợp chất thử nghiệm nhờ sử dụng synaptosome của não chuột

Chuột đực Wistar được chắt đầu, và não của chúng được lấy ra và được phẫu tích để lấy vỏ não vùng trán. Vỏ não vùng trán tách ra được đặt vào trong dung dịch sucroza 0,32 mol (M) với trọng lượng gấp 20 lần và được đồng hóa bằng thiết bị đồng hóa bằng gôm. Dịch đồng hóa được ly tâm với tốc độ 1000g ở nhiệt độ 4°C trong thời gian 10 phút, và lớp nổi trên bề mặt được ly tâm thêm với tốc độ 20000g ở nhiệt độ 4°C trong thời gian 20 phút. Phần viên kết sau ly tâm được tạo huyền phù trong hệ đệm u (hệ đệm HEPES 20mM (pH = 7,4) chứa glucoza 10mM, natri clorua 145mM, kali clorua 4,5mM, magie clorua 1,2mM, và canxi clorua 1,5mM). Huyền phù được sử dụng làm phần synaptosome thô.

Phản ứng hấp thu được thực hiện nhờ sử dụng mỗi lỗ của đĩa đáy tròn 96 lỗ và tổng cộng thể tích 200µl dung dịch chứa pargylin (nồng độ cuối: 10µM) và axit ascorbic (nồng độ cuối: 0,2mg/ml).

Cụ thể, dung môi, 5-HT không đánh dấu, và các hợp chất thử nghiệm pha loãng hàng loạt được bổ sung một cách riêng biệt vào các lỗ, và phần synaptosome được bổ sung với lượng 1/10 của thể tích cuối cùng vào mỗi lỗ và được ủ sơ bộ ở nhiệt độ 37°C trong thời gian 10 phút. Sau đó, dung dịch 5-HT đánh dấu bằng triti (nồng độ cuối: 8nM) được bổ sung vào đó để khởi đầu phản

ứng hấp thu ở nhiệt độ 37°C. 10 phút sau, phản ứng hấp thu được kết thúc bằng cách lọc hút qua đĩa lọc bằng sợi thủy tinh 96 lỗ. Ngoài ra, dụng cụ lọc được rửa bằng nước muối lạnh và sau đó được làm khô hoàn toàn. MicroScint-O (PerkinElmer Co., Ltd.) được bổ sung vào đó, và độ phóng xạ dư trên dụng cụ lọc được xác định.

Giá trị hấp thu thu được bằng cách bổ sung duy nhất dung môi được xác định là 100%, và giá trị hấp thu (giá trị hấp thu không đặc hiệu) thu được bằng cách bổ sung 5-HT không đánh dấu (nồng độ cuối: 10µM) được xác định là 0%. Nồng độ ức chế 50% được tính toán từ các nồng độ hợp chất thử nghiệm và các hoạt tính ức chế tại các nồng độ đó. Các kết quả được thể hiện trong Bảng 60.

Bảng 60

Hợp chất thử nghiệm	Nồng độ ức chế 50% (nM)
Hợp chất của ví dụ 2	7,1
Hợp chất của ví dụ 7 *	1,0
Hợp chất của ví dụ 8 *	2,4
Hợp chất của ví dụ 10 *	6,2
Hợp chất của ví dụ 13 *	5,1
Hợp chất của ví dụ 15 *	12,5
Hợp chất của ví dụ 27	5,8
Hợp chất của ví dụ 33	2,6
Hợp chất của ví dụ 72	2,6
Hợp chất của ví dụ 77	0,8
Hợp chất của ví dụ 85	7,2
Hợp chất của ví dụ 106	9,7
Hợp chất của ví dụ 112	7,1
Hợp chất của ví dụ 118	13,7

Hợp chất của ví dụ 120	9,2
Hợp chất của ví dụ 124	8,5
Hợp chất của ví dụ 125	4,7
Hợp chất của ví dụ 130	5,3
Hợp chất của ví dụ 131	6,1
Hợp chất của ví dụ 132	8,8
Hợp chất của ví dụ 136	1,3
Hợp chất của ví dụ 150	5,4
Hợp chất của ví dụ 165	12,0
Hợp chất của ví dụ 186	5,2
Hợp chất của ví dụ 187	5,8
Hợp chất của ví dụ 188	6,0
Hợp chất của ví dụ 191	3,2
Hợp chất của ví dụ 192	2,9
Hợp chất của ví dụ 193	3,4
Hợp chất của ví dụ 196	4,4
Hợp chất của ví dụ 233	7,4
Hợp chất của ví dụ 246	6,8
Hợp chất của ví dụ 247	42,8
Hợp chất của ví dụ 273	44,0
Hợp chất của ví dụ 276	7,2
Hợp chất của ví dụ 281	5,8
Hợp chất của ví dụ 285	19,7
Hợp chất của ví dụ 288	56,1
Hợp chất của ví dụ 300	89,1

Hợp chất của ví dụ 307	19,3
Hợp chất của ví dụ 322*	9,6
Hợp chất của ví dụ 344*	6,8
Hợp chất của ví dụ 346*	10,0
Hợp chất của ví dụ 348*	6,4
Hợp chất của ví dụ 405	6,4
Hợp chất của ví dụ 409	35,6
Hợp chất của ví dụ 468	3,8
Hợp chất của ví dụ 577	5,2
Hợp chất của ví dụ 579	4,5
Hợp chất của ví dụ 580	2,5
Hợp chất của ví dụ 582	4,1
Hợp chất của ví dụ 586	5,2
Hợp chất của ví dụ 587	0,9
Hợp chất của ví dụ 593	4,9
Hợp chất của ví dụ 610	4,6
Hợp chất của ví dụ 621	7,0
Hợp chất của ví dụ 641	2,2
Hợp chất của ví dụ 654	1,5
Hợp chất của ví dụ 717	4,2
Hợp chất của ví dụ 778	87,5
Hợp chất của ví dụ 780	6,5
Hợp chất của ví dụ 781	6,2
Hợp chất của ví dụ 791	1,4
Hợp chất của ví dụ 805	42,6

Hợp chất của ví dụ 841	28,1
Hợp chất của ví dụ 850	7,3
Hợp chất của ví dụ 867	4,7
Hợp chất của ví dụ 884	7,3
Hợp chất của ví dụ 895	5,4
Hợp chất của ví dụ 918	10,0
Hợp chất của ví dụ 962	18,7
Hợp chất của ví dụ 983	6,5
Hợp chất của ví dụ 993	4,8
Hợp chất của ví dụ 1026	2,4
Hợp chất của ví dụ 1047	0,7
Hợp chất của ví dụ 1083	5,1
Hợp chất của ví dụ 1113	5,4
Hợp chất của ví dụ 1121	8,5
Hợp chất của ví dụ 1124	7,1
Hợp chất của ví dụ 1318	40,7
Hợp chất của ví dụ 1326	37,8
Hợp chất của ví dụ 1333	84,2
Hợp chất của ví dụ 1341	6,8
Hợp chất của ví dụ 1534	38,1

* Các ví dụ tham khảo không phải của sáng chế

Nghiên cứu được lý 2

Xác định hoạt tính ức chế hấp thu norepinephrin (NE) của hợp chất thử nghiệm nhờ sử dụng synaptosome của não chuột

Chuột đực Wistar được chắt đầu, và não của chúng được lấy ra và được phẫu tích để lấy ra hồi hải mã. Hồi hải mã tách ra được đặt vào trong dung dịch

sucroza 0,32mol (M) với trọng lượng gấp 20 lần và được đồng hóa bằng thiết bị đồng hóa bằng gốm. Dịch đồng hóa được ly tâm với tốc độ 1000g ở nhiệt độ 4°C trong thời gian 10 phút, và lớp nổi trên bề mặt được ly tâm thêm với tốc độ 20000g ở nhiệt độ 4°C trong thời gian 20 phút. Phần viên kết sau ly tâm được tạo huyền phù trong hệ đệm ủ (hệ đệm HEPES 20mM (pH = 7,4) chứa glucoza 10mM, natri clorua 145mM, kali clorua 4,5mM, magie clorua 1,2mM, và canxi clorua 1,5mM). Huyền phù được sử dụng làm phần synaptosome thô.

Phản ứng hấp thu được thực hiện nhờ sử dụng mỗi lỗ của đĩa đáy tròn 96 lỗ và thể tích tổng cộng 200 μ l dung dịch chứa pargylin (nồng độ cuối: 10 μ M) và axit ascorbic (nồng độ cuối: 0,2mg/ml).

Cụ thể, dung môi, NE không đánh dấu, và các hợp chất thử nghiệm pha loãng hàng loạt được bổ sung một cách riêng biệt vào các lỗ, và phần synaptosome được bổ sung với lượng 1/10 của thể tích cuối cùng vào mỗi lỗ và được ủ sơ bộ ở nhiệt độ 37°C trong thời gian 10 phút. Sau đó, dung dịch NE đánh dấu bằng triti (nồng độ cuối: 12nM) được bổ sung vào đó để khởi đầu phản ứng hấp thu ở nhiệt độ 37°C. 10 phút sau, phản ứng hấp thu được kết thúc bằng cách lọc hút qua đĩa lọc bằng sợi thủy tinh 96 lỗ. Ngoài ra, dụng cụ lọc được rửa bằng nước muối lạnh và sau đó được làm khô hoàn toàn. MicroScint-O (PerkinElmer Co., Ltd.) được bổ sung vào đó, và độ phóng xạ dư trên dụng cụ lọc được xác định.

Giá trị hấp thu thu được bằng cách bổ sung duy nhất dung môi được xác định là 100%, và giá trị hấp thu (giá trị hấp thu không đặc hiệu) thu được bằng cách bổ sung NE không đánh dấu (nồng độ cuối: 10 μ M) được xác định là 0%. Nồng độ ức chế 50% được tính toán từ các nồng độ hợp chất thử nghiệm và các hoạt tính ức chế tại các nồng độ đó. Các kết quả được thể hiện trong Bảng 61.

Bảng 61

Hợp chất thử nghiệm	Nồng độ ức chế 50% (nM)
Hợp chất của ví dụ 2	4,6

Hợp chất của ví dụ 7*	9,5
Hợp chất của ví dụ 8*	60,9
Hợp chất của ví dụ 10*	8,8
Hợp chất của ví dụ 13*	14,3
Hợp chất của ví dụ 15*	11,0
Hợp chất của ví dụ 27	0,9
Hợp chất của ví dụ 33	0,7
Hợp chất của ví dụ 72	1,0
Hợp chất của ví dụ 77	3,9
Hợp chất của ví dụ 85	4,9
Hợp chất của ví dụ 106	37,2
Hợp chất của ví dụ 112	87,3
Hợp chất của ví dụ 118	3,7
Hợp chất của ví dụ 120	9,2
Hợp chất của ví dụ 124	0,8
Hợp chất của ví dụ 125	1,9
Hợp chất của ví dụ 130	0,5
Hợp chất của ví dụ 131	0,7
Hợp chất của ví dụ 132	3,1
Hợp chất của ví dụ 136	0,5
Hợp chất của ví dụ 150	23,6
Hợp chất của ví dụ 165	2,4
Hợp chất của ví dụ 186	3,8
Hợp chất của ví dụ 187	6,0
Hợp chất của ví dụ 188	0,8

Hợp chất của ví dụ 191	2,1
Hợp chất của ví dụ 192	3,6
Hợp chất của ví dụ 193	4,4
Hợp chất của ví dụ 196	1,7
Hợp chất của ví dụ 233	3,2
Hợp chất của ví dụ 246	3,8
Hợp chất của ví dụ 247	6,6
Hợp chất của ví dụ 273	6,8
Hợp chất của ví dụ 276	4,5
Hợp chất của ví dụ 281	2,0
Hợp chất của ví dụ 285	1,4
Hợp chất của ví dụ 288	22,0
Hợp chất của ví dụ 300	9,9
Hợp chất của ví dụ 307	40,4
Hợp chất của ví dụ 322*	40,1
Hợp chất của ví dụ 344*	7,5
Hợp chất của ví dụ 346*	8,8
Hợp chất của ví dụ 348*	4,6
Hợp chất của ví dụ 405	4,4
Hợp chất của ví dụ 409	9,1
Hợp chất của ví dụ 468	7,5
Hợp chất của ví dụ 577	5,9
Hợp chất của ví dụ 579	5,1
Hợp chất của ví dụ 580	5,4
Hợp chất của ví dụ 582	6,0

Hợp chất của ví dụ 586	4,0
Hợp chất của ví dụ 587	1,9
Hợp chất của ví dụ 593	3,3
Hợp chất của ví dụ 610	5,9
Hợp chất của ví dụ 621	0,7
Hợp chất của ví dụ 641	76,0
Hợp chất của ví dụ 654	1,0
Hợp chất của ví dụ 717	4,8
Hợp chất của ví dụ 778	4,2
Hợp chất của ví dụ 780	0,6
Hợp chất của ví dụ 781	3,0
Hợp chất của ví dụ 791	0,7
Hợp chất của ví dụ 805	30,4
Hợp chất của ví dụ 841	0,9
Hợp chất của ví dụ 850	1,0
Hợp chất của ví dụ 867	11,7
Hợp chất của ví dụ 884	4,8
Hợp chất của ví dụ 895	3,0
Hợp chất của ví dụ 918	0,8
Hợp chất của ví dụ 962	31,9
Hợp chất của ví dụ 983	47,6
Hợp chất của ví dụ 993	8,7
Hợp chất của ví dụ 1026	4,2
Hợp chất của ví dụ 1047	0,7
Hợp chất của ví dụ 1083	2,5

Hợp chất của ví dụ 1113	1,7
Hợp chất của ví dụ 1121	0,7
Hợp chất của ví dụ 1124	0,8
Hợp chất của ví dụ 1318	6,6
Hợp chất của ví dụ 1326	1,8
Hợp chất của ví dụ 1333	39,6
Hợp chất của ví dụ 1341	42,7
Hợp chất của ví dụ 1534	4,0

* Các ví dụ tham khảo không phải của sáng chế

Nghiên cứu được lý 3

Xác định hoạt tính ức chế hấp thu dopamin (DA) của hợp chất thử nghiệm nhờ sử dụng synaptosome của não chuột

Chuột đực Wistar được chắt đầu, và não của chúng được lấy ra và được phẫu tích để lấy ra phần thể vân. Phần thể vân tách ra được đặt vào trong dung dịch sucroza 0,32mol (M) với trọng lượng gấp 20 lần và được đồng hóa bằng thiết bị đồng hóa bằng gôm. Dịch đồng hóa được ly tâm với tốc độ 1000g ở nhiệt độ 4°C trong thời gian 10 phút, và lớp nổi trên bề mặt được ly tâm thêm với tốc độ 20000g ở nhiệt độ 4°C trong thời gian 20 phút. Phần viên kết sau ly tâm được tạo huyền phù trong hệ đệm u (hệ đệm HEPES 20mM (pH = 7,4) chứa glucoza 10mM, natri clorua 145mM, kali clorua 4,5mM, magie clorua 1,2mM, và canxi clorua 1,5mM). Huyền phù được sử dụng làm phần synaptosome thô.

Phản ứng hấp thu được thực hiện nhờ sử dụng mỗi lỗ của đĩa đáy tròn 96 lỗ và tổng cộng thể tích 200µl dung dịch chứa pargylin (nồng độ cuối: 10µM) và axit ascorbic (nồng độ cuối: 0,2mg/ml).

Cụ thể, dung môi, DA không đánh dấu, và các hợp chất thử nghiệm pha loãng hàng loạt được bổ sung một cách riêng biệt vào các lỗ, và phần synaptosome được bổ sung với lượng 1/10 của thể tích cuối cùng vào mỗi lỗ và

được ủ sơ bộ ở nhiệt độ 37°C trong thời gian 10 phút. Sau đó, dung dịch DA đánh dấu bằng triti (nồng độ cuối: 2nM) được bổ sung vào đó để khởi đầu phản ứng hấp thu ở nhiệt độ 37°C. 10 phút sau, phản ứng hấp thu được kết thúc bằng cách lọc hút qua đĩa lọc bằng sợi thủy tinh 96 lỗ. Ngoài ra, dụng cụ lọc được rửa bằng nước muối lạnh và sau đó được làm khô hoàn toàn. MicroScint-O (PerkinElmer Co., Ltd.) được bổ sung vào đó, và độ phóng xạ dư trên dụng cụ lọc được xác định.

Giá trị hấp thu thu được bằng cách bổ sung duy nhất dung môi được xác định là 100%, và giá trị hấp thu (giá trị hấp thu không đặc hiệu) thu được bằng cách bổ sung DA không đánh dấu (nồng độ cuối: 10 μ M) được xác định là 0%. Nồng độ ức chế 50% được tính toán từ các nồng độ hợp chất thử nghiệm và các hoạt tính ức chế tại các nồng độ đó. Các kết quả được thể hiện trong Bảng 62.

Bảng 62

Hợp chất thử nghiệm	Nồng độ ức chế 50% (nM)
Hợp chất của ví dụ 2	85,9
Hợp chất của ví dụ 7*	78,9
Hợp chất của ví dụ 8*	377,8
Hợp chất của ví dụ 10*	64,8
Hợp chất của ví dụ 13*	85,4
Hợp chất của ví dụ 15*	68,4
Hợp chất của ví dụ 27	31,9
Hợp chất của ví dụ 33	15,1
Hợp chất của ví dụ 72	47,9
Hợp chất của ví dụ 77	41,2
Hợp chất của ví dụ 85	95,7
Hợp chất của ví dụ 106	336,8

Hợp chất của ví dụ 112	263,7
Hợp chất của ví dụ 118	8,3
Hợp chất của ví dụ 120	187,2
Hợp chất của ví dụ 124	9,1
Hợp chất của ví dụ 125	5,2
Hợp chất của ví dụ 130	3,9
Hợp chất của ví dụ 131	8,3
Hợp chất của ví dụ 132	3,9
Hợp chất của ví dụ 136	7,7
Hợp chất của ví dụ 150	200,5
Hợp chất của ví dụ 165	6,8
Hợp chất của ví dụ 186	29,8
Hợp chất của ví dụ 187	12,1
Hợp chất của ví dụ 188	7,9
Hợp chất của ví dụ 191	13,5
Hợp chất của ví dụ 192	8,6
Hợp chất của ví dụ 193	5,7
Hợp chất của ví dụ 196	18,3
Hợp chất của ví dụ 233	38,8
Hợp chất của ví dụ 246	8,8
Hợp chất của ví dụ 247	8,7
Hợp chất của ví dụ 273	8,7
Hợp chất của ví dụ 276	10,9
Hợp chất của ví dụ 281	6,6
Hợp chất của ví dụ 285	43,9

Hợp chất của ví dụ 288	74,7
Hợp chất của ví dụ 300	81,3
Hợp chất của ví dụ 307	68,2
Hợp chất của ví dụ 322*	67,7
Hợp chất của ví dụ 344*	9,8
Hợp chất của ví dụ 346*	7,8
Hợp chất của ví dụ 348*	27,3
Hợp chất của ví dụ 405	74,8
Hợp chất của ví dụ 409	165,3
Hợp chất của ví dụ 468	54,0
Hợp chất của ví dụ 577	47,9
Hợp chất của ví dụ 579	46,5
Hợp chất của ví dụ 580	202,0
Hợp chất của ví dụ 582	68,8
Hợp chất của ví dụ 586	93,0
Hợp chất của ví dụ 587	76,1
Hợp chất của ví dụ 593	9,7
Hợp chất của ví dụ 610	13,2
Hợp chất của ví dụ 621	128,5
Hợp chất của ví dụ 641	9,7
Hợp chất của ví dụ 654	9,0
Hợp chất của ví dụ 717	60,1
Hợp chất của ví dụ 778	4,9
Hợp chất của ví dụ 780	4,3
Hợp chất của ví dụ 781	5,2

Hợp chất của ví dụ 791	160,9
Hợp chất của ví dụ 805	83,8
Hợp chất của ví dụ 841	5,1
Hợp chất của ví dụ 850	7,0
Hợp chất của ví dụ 867	85,7
Hợp chất của ví dụ 884	52,8
Hợp chất của ví dụ 895	19,9
Hợp chất của ví dụ 918	42,0
Hợp chất của ví dụ 962	69,5
Hợp chất của ví dụ 983	172,6
Hợp chất của ví dụ 993	38,6
Hợp chất của ví dụ 1026	12,3
Hợp chất của ví dụ 1047	1,1
Hợp chất của ví dụ 1083	53,7
Hợp chất của ví dụ 1113	26,0
Hợp chất của ví dụ 1121	29,9
Hợp chất của ví dụ 1124	49,3
Hợp chất của ví dụ 1318	83,5
Hợp chất của ví dụ 1326	91,8
Hợp chất của ví dụ 1333	73,0
Hợp chất của ví dụ 1341	113,3
Hợp chất của ví dụ 1534	214,8

* Các ví dụ tham khảo không phải của sáng chế

Nghiên cứu được lý 4

Thử nghiệm bơi cường bức

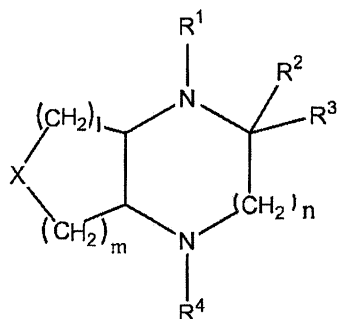
Thử nghiệm này được tiến hành thực hiện theo phương pháp của Porsolt và cộng sự (Porsolt, R.D., et al., Behavioural despair in mice: A primary screening test for antidepressants. Arch. int. Pharmacodyn. Ther., 229, pp 327-336 (1977)).

Hợp chất thử nghiệm được tạo huyền phù trong gồm arabic 5%/nước muối (trọng lượng/thể tích), và huyền phù này được sử dụng theo đường miệng cho chuột đực ICR (CLEA Japan, Inc. (JCL), 5 đến 6 tuần tuổi). 1 giờ sau, chuột được đặt vào trong chậu nước có độ sâu của nước 9,5cm và nhiệt độ của nước nằm trong khoảng từ 21 đến 25°C và ngay sau đó được cho chuột cố gắng bơi trong thời gian 6 phút. Sau đó, thời gian mà chuột không bơi (thời gian bất động) được xác định trong 4 phút cuối cùng. Hệ thống SCANET MV-20 AQ do Melquest Ltd sản xuất được sử dụng để đánh giá và phân tích thời gian bất động.

Trong thử nghiệm này, các động vật điều trị bằng các hợp chất thử nghiệm thể hiện thời gian bất động giảm. Điều này chứng minh rằng, các hợp chất thử nghiệm hữu dụng làm các thuốc chống trầm cảm.

YÊU CẦU BẢO HỘ

1. Hợp chất dị vòng có công thức (1) hoặc muối của hợp chất này:



(1)

trong đó $m = 2$, $l = 1$, và $n = 1$; X là $-\text{CH}_2-$;

R^1 là hydro, nhóm C1-C6 alkyl, nhóm hydroxy-C1-C6 alkyl, nhóm bảo vệ được chọn từ các nhóm C1-C6 alkanoyl được thế hoặc không được thế, phthaloyl, C1-C6 alkoxyacarbonyl, aralkyloxyacarbonyl được thế hoặc không được thế, 9-florenylmetoxyacarbonyl, nitrophenylsulfenyl, aralkyl và C1-C6 alkylsilyl, hoặc nhóm tri-C1-C6 alkylsilyloxy-C1-C6 alkyl;

R^2 và R^3 là các gốc giống nhau hoặc khác nhau, mỗi gốc này độc lập là hydro hoặc nhóm C1-C6 alkyl; hoặc R^2 và R^3 được liên kết để tạo ra nhóm xyclo-C3-C8 alkyl; và

R^4 là nhóm bất kỳ trong số:

- (1) nhóm phenyl,
- (2) nhóm indolyl,
- (3) nhóm benzothienyl,
- (4) nhóm naphtyl,
- (5) nhóm benzofuryl,
- (6) nhóm quinolyl,
- (7) nhóm isoquinolyl,

- (8) nhóm pyridyl,
- (9) nhóm thienyl,
- (10) nhóm dihydrobenzoxaziny,
- (11) nhóm dihydrobenzodioxiny,
- (12) nhóm dihydroquinoly,
- (13) nhóm cromanyl,
- (14) nhóm quinoxaliny,
- (15) nhóm dihydroindenyl,
- (16) nhóm dihydrobenzofuryl,
- (17) nhóm benzodioxoly,
- (18) nhóm indazoly,
- (19) nhóm benzothiazoly,
- (20) nhóm indoliny,
- (21) nhóm thienopyridyl,
- (22) nhóm tetrahydrobenzazepiny,
- (23) nhóm tetrahydrobenzodiazepiny,
- (24) nhóm dihydrobenzodioxepiny,
- (25) nhóm florenyl,
- (26) nhóm pyridaziny,
- (27) nhóm tetrahydroquinoly,
- (28) nhóm carbazoly,
- (29) nhóm phenantryl,
- (30) nhóm dihydroaxenaphtylenyl,
- (31) nhóm pyrolopyridyl,

- (32) nhóm antryl,
- (33) nhóm benzodioxinyl,
- (34) nhóm pyrrolidinyl,
- (35) nhóm pyrazolyl,
- (36) nhóm oxadiazolyl,
- (37) nhóm pyrimidinyl,
- (38) nhóm tetrahydronaphtyl,
- (39) nhóm dihydroquinazolinyl,
- (40) nhóm benzoxazolyl,
- (41) nhóm thiazolyl,
- (42) nhóm quinazolinyl,
- (43) nhóm phtalazinyl,
- (44) nhóm pyrazinyl, và
- (45) nhóm cromenyl, trong đó:

các nhóm thơm hoặc dị vòng này có thể có một hoặc nhiều phần tử thế được chọn từ:

- (1-1) nguyên tử halogen,
- (1-2) nhóm C1-C6 alkyl,
- (1-3) nhóm C1-C6 alkanoyl,
- (1-4) nhóm halogen-C1-C6 alkyl được thế,
- (1-5) nhóm halogen-C1-C6 alkoxy được thế,
- (1-6) nhóm xyano,
- (1-7) nhóm C1-C6 alkoxy,
- (1-8) nhóm C1-C6 alkylthio,

- (1-9) nhóm imidazolyl,
- (1-10) nhóm tri-C1-C6 alkylsilyl,
- (1-11) nhóm oxadiazolyl mà nhóm này có thể có (các) nhóm C1-C6 alkyl,
- (1-12) nhóm pyrrolidinyl mà có thể có (các) nhóm oxo,
- (1-13) nhóm phenyl mà có thể có (các) nhóm C1-C6 alkoxy,
- (1-14) nhóm C1-C6 alkylamino-C1-C6 alkyl,
- (1-15) nhóm oxo,
- (1-16) nhóm pyrazolyl mà có thể có (các) nhóm C1-C6 alkyl,
- (1-17) nhóm thienyl,
- (1-18) nhóm furyl,
- (1-19) nhóm thiazolyl mà có thể có (các) nhóm C1-C6 alkyl,
- (1-20) nhóm C1-C6 alkylamino,
- (1-21) nhóm pyrimidyl mà có thể có (các) nhóm C1-C6 alkyl,
- (1-22) nhóm phenyl-C2-C6 alkenyl,
- (1-23) nhóm phenoxy mà có thể có (các) nguyên tử halogen,
- (1-24) nhóm phenoxy-C1-C6 alkyl,
- (1-25) nhóm pyrrolidinyl-C1-C6 alkoxy,
- (1-26) nhóm C1-C6 alkylsulfamoyl,
- (1-27) nhóm pyridazinylloxy mà có thể có (các) nhóm C1-C6 alkyl,
- (1-28) nhóm phenyl-C1-C6 alkyl,
- (1-29) nhóm C1-C6 alkylamino-C1-C6 alkoxy,
- (1-30) nhóm imidazolyl-C1-C6 alkyl,
- (1-31) nhóm phenyl-C1-C6 alkoxy,
- (1-32) nhóm hydroxy,

- (1-33) nhóm C1-C6 alkoxyacetyl,
- (1-34) nhóm hydroxy-C1-C6 alkyl,
- (1-35) nhóm oxazolyl,
- (1-36) nhóm piperidyl,
- (1-37) nhóm pyrrolyl,
- (1-38) nhóm morpholinyl-C1-C6 alkyl,
- (1-39) nhóm piperazinyl-C1-C6 alkyl mà có thể có (các) nhóm C1-C6 alkyl,
- (1-40) nhóm piperidyl-C1-C6 alkyl,
- (1-41) nhóm pyrrolidinyl-C1-C6 alkyl,
- (1-42) nhóm morpholinyl, và
- (1-43) nhóm piperazinyl mà có thể có (các) nhóm C1-C6 alkyl.

2. Hợp chất có công thức (1) hoặc muối được dụng của nó theo điểm 1, trong đó:

R^4 là nhóm bất kỳ trong số:

- (1) nhóm phenyl,
- (2) nhóm indolyl,
- (3) nhóm benzothienyl,
- (4) nhóm naphthyl,
- (5) nhóm benzofuryl,
- (6) nhóm quinolyl,
- (7) nhóm isoquinolyl,
- (8) nhóm pyridyl,
- (9) nhóm thienyl,
- (10) nhóm dihydrobenzoxazinyl,

- (11) nhóm dihydrobenzodioxinyl,
- (12) nhóm dihydroquinolyl,
- (13) nhóm chromanyl,
- (14) nhóm quinoxalinyl,
- (15) nhóm dihydroindenyl,
- (16) nhóm dihydrobenzofuryl,
- (17) nhóm benzodioxolyl,
- (18) nhóm indazolyl,
- (19) nhóm benzothiazolyl,
- (20) nhóm indolinyl,
- (21) nhóm thienopyridyl,
- (22) nhóm tetrahydrobenzazepinyl,
- (23) nhóm tetrahydrobenzodiazepinyl,
- (24) nhóm dihydrobenzodioxepinyl,
- (25) nhóm florenyl,
- (26) nhóm pyridazinyl,
- (27) nhóm tetrahydroquinolyl,
- (28) nhóm carbazolyl,
- (29) nhóm phenanthryl,
- (30) nhóm dihydroacenaphtylenyl,
- (31) nhóm pyrolopyridyl,
- (32) nhóm ananthryl,
- (33) nhóm benzodioxinyl,
- (34) nhóm pyrrolidinyl,

- (35) nhóm pyrazolyl,
- (36) nhóm oxadiazolyl,
- (37) nhóm pyrimidinyl,
- (38) nhóm tetrahydronaphtyl,
- (39) nhóm dihydroquinazolinyl,
- (40) nhóm benzoxazolyl,
- (41) nhóm thiazolyl,
- (42) nhóm quinazolinyl,
- (43) nhóm phtalazinyl,
- (44) nhóm pyrazinyl, và
- (45) nhóm chromenyl, trong đó:

các nhóm thơm hoặc dị vòng này có thể có từ 1 đến 4 phần tử thế được chọn từ:

- (1-1) nguyên tử halogen,
- (1-2) nhóm C1-C6 alkyl,
- (1-3) nhóm C1-C6 alkanoyl,
- (1-4) nhóm halogen-được thế C1-C6 alkyl,
- (1-5) nhóm halogen-được thế C1-C6 alkoxy,
- (1-6) nhóm xyano,
- (1-7) nhóm C1-C6 alkoxy,
- (1-8) nhóm C1-C6 alkylthio,
- (1-9) nhóm imidazolyl,
- (1-10) nhóm tri-C1-C6alkylsilyl,
- (1-11) nhóm oxadiazolyl mà có thể có 1 nhóm C1-C6 alkyl,
- (1-12) nhóm pyrrolidinyl mà có thể có 1 nhóm oxo,

- (1-13) nhóm phenyl mà có thể có 1 nhóm C1-C6 alkoxy,
- (1-14) nhóm C1-C6 alkylamino-C1-C6 alkyl,
- (1-15) nhóm oxo,
- (1-16) nhóm pyrazolyl mà có thể có 1 nhóm C1-C6 alkyl,
- (1-17) nhóm thienyl,
- (1-18) nhóm furyl,
- (1-19) nhóm thiazolyl mà có thể có 1 nhóm C1-C6 alkyl,
- (1-20) nhóm C1-C6 alkylamino,
- (1-21) nhóm pyrimidyl mà có thể có 1 nhóm C1-C6 alkyl,
- (1-22) nhóm phenyl-C2-C6 alkenyl,
- (1-23) nhóm phenoxy mà có thể có 1 nguyên tử halogen,
- (1-24) nhóm phenoxy-C1-C6 alkyl,
- (1-25) nhóm pyrrolidinyl-C1-C6 alkoxy,
- (1-26) nhóm C1-C6 alkylsulfamoyl,
- (1-27) nhóm pyridazinyloxy mà có thể có 1 nhóm C1-C6 alkyl,
- (1-28) nhóm phenyl-C1-C6 alkyl,
- (1-29) nhóm C1-C6 alkylamino-C1-C6 alkoxy,
- (1-30) nhóm imidazolyl-C1-C6 alkyl,
- (1-31) nhóm phenyl-C1-C6 alkoxy,
- (1-32) nhóm hydroxy,
- (1-33) nhóm C1-C6 alkoxycarbonyl,
- (1-34) nhóm hydroxy-C1-C6 alkyl,
- (1-35) nhóm oxazolyl,
- (1-36) nhóm piperidyl,

(1-37) nhóm pyrolyl,

(1-38) nhóm morpholiny-C1-C6 alkyl,

(1-39) nhóm piperaziny-C1-C6 alkyl mà có thể có 1 nhóm C1-C6 alkyl,

(1-40) nhóm piperidyl-C1-C6 alkyl,

(1-41) nhóm pyrrolidiny-C1-C6 alkyl,

(1-42) nhóm morpholiny, và

(1-43) nhóm piperaziny mà có thể có 1 nhóm C1-C6 alkyl.

3. Hợp chất có công thức (1) hoặc muối được dụng của nó theo điểm 2, trong đó:

R^1 là hydro, nhóm C1-C6 alkyl, nhóm hydroxy-C1-C6 alkyl, nhóm benzyl, hoặc nhóm tri-C1-C6 alkylsilyloxy-C1-C6 alkyl; và

R^4 là nhóm bất kỳ trong số:

(1) nhóm phenyl,

(2) nhóm indolyl,

(4) nhóm naphtyl,

(5) nhóm benzofuryl, và

(31) nhóm pyrolopyridyl, trong đó:

các nhóm thơm hoặc dị vòng này có thể có từ 1 đến 4 phần tử thể được chọn từ:

(1-1) nguyên tử halogen,

(1-2) nhóm C1-C6 alkyl,

(1-3) nhóm C1-C6 alkanoyl,

(1-4) nhóm halogen-C1-C6 alkyl được thế,

(1-5) nhóm halogen-C1-C6 alkoxy được thế,

(1-6) nhóm xyano,

(1-7) nhóm C1-C6 alkoxy,

- (1-8) nhóm C1-C6 alkylthio,
- (1-9) nhóm imidazolyl,
- (1-10) nhóm tri-C1-C6 alkylsilyl,
- (1-11) nhóm oxadiazolyl mà có thể có 1 nhóm C1-C6 alkyl,
- (1-12) nhóm pyrrolidinyll mà có thể có 1 nhóm oxo,
- (1-13) nhóm phenyl mà có thể có 1 nhóm C1-C6 alkoxy,
- (1-14) nhóm C1-C6 alkylamino-C1-C6 alkyl,
- (1-15) nhóm oxo,
- (1-16) nhóm pyrazolyl mà có thể có 1 nhóm C1-C6 alkyl,
- (1-17) nhóm thienyl,
- (1-18) nhóm furyl,
- (1-19) nhóm thiazolyl mà có thể có 1 nhóm C1-C6 alkyl,
- (1-20) nhóm C1-C6 alkylamino,
- (1-21) nhóm pyrimidyl mà có thể có 1 nhóm C1-C6 alkyl,
- (1-22) nhóm phenyl-C1-C6 alkenyl,
- (1-23) nhóm phenoxy mà có thể có 1 nguyên tử halogen,
- (1-24) nhóm phenoxy-C1-C6 alkyl,
- (1-25) nhóm pyrrolidinyll-C1-C6 alkoxy,
- (1-26) nhóm C1-C6 alkylsulfamoyl,
- (1-27) nhóm pyridazinyloxy mà có thể có 1 nhóm C1-C6 alkyl,
- (1-28) nhóm phenyl-C1-C6 alkyl,
- (1-29) nhóm C1-C6 alkylamino-C1-C6 alkoxy,
- (1-30) nhóm imidazolyl-C1-C6 alkyl,
- (1-31) nhóm phenyl-C1-C6 alkoxy,

- (1-32) nhóm hydroxy,
- (1-34) nhóm hydroxy-C1-C6 alkyl,
- (1-35) nhóm oxazolyl,
- (1-36) nhóm piperidyl,
- (1-37) nhóm pyrolyl,
- (1-38) nhóm morpholiny-C1-C6 alkyl,
- (1-39) nhóm piperaziny-C1-C6 alkyl mà có thể có (các) nhóm C1-C6 alkyl,
- (1-40) nhóm piperidyl-C1-C6 alkyl,
- (1-41) nhóm pyrrolidiny-C1-C6 alkyl,
- (1-42) nhóm morpholiny, và
- (1-43) nhóm piperaziny mà có thể có 1 nhóm C1-C6 alkyl.

4. Hợp chất có công thức (1) hoặc muối được dụng của nó theo điểm 3, trong đó R^1 là hydro;

R^2 và R^3 là giống hoặc khác nhau, mỗi gốc độc lập là nhóm C1-C6 alkyl; hoặc R^2 và R^3 được liên kết để tạo ra nhóm xyclo-C3-C8 alkyl; và

R^4 là nhóm bất kỳ trong số:

- (1) nhóm phenyl,
- (2) nhóm indolyl,
- (4) nhóm naphthyl,
- (5) nhóm benzofuryl, và
- (31) nhóm pyrolopyridyl, trong đó:

các nhóm thơm hoặc dị vòng này có thể có từ 1 đến 2 phần tử thể được chọn từ:

- (1-1) nguyên tử halogen,
- (1-2) nhóm C1-C6 alkyl,

(1-5) nhóm halogen-C1-C6 alkoxy được thế,

(1-6) nhóm xyano, và

(1-7) nhóm C1-C6 alkoxy.

5. Hợp chất dị vòng có công thức chung (1) hoặc muối của nó theo điểm 4, trong đó hợp chất này được chọn từ:

(4aS,8aR)-1-(4-clophenyl)-3,3-dimetyldecahydroquinoxalin,

2-clo-4-((4aS,8aS)-3,3-dimetyloctahydroquinoxalin-1(2H)-yl)benzonitril,

(4aS,8aR)-1-(3-clo-4-flophenyl)-3,3-dimetyldecahydroquinoxalin,

(4aS,8aR)-1-(7-flobenzofuran-4-yl)-3,3-dimetyldecahydroquinoxalin,

5-((4aR,8aS)-3,3-dimetyloctahydroquinoxalin-1(2H)-yl)-1-metyl-1H-indol-2-cacbonitril,

(4a'R,8a'S)-4'-(7-metoxibenzofuran-4-yl)octahydro-1'H-spiro[xcyclobutan- 1,2'-quinoxalin],

(4aS,8aR)-1-(6,7-diflobenzofuran-4-yl)-3,3-dimetyldecahydroquinoxalin,

5-((4aS,8aS)-3,3-dimetyloctahydroquinoxalin-1(2H)-yl)-1H-indol-2-cacbonitril,

6-((4aS,8aS)-3,3-dimetyloctahydroquinoxalin-1(2H)-yl)-2-naphtonitril,

(4aS,8aS)-3,3-dimetyl-1-(1H-pyrol[2,3-b]pyridin-4-yl)decahydroquinoxalin,

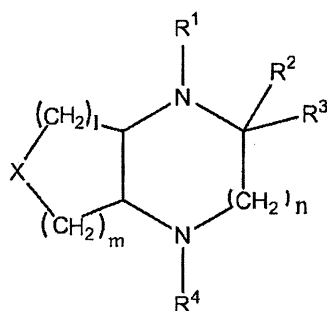
(4aS,8aS)-1-(4-(diflometoxy)-3-flophenyl)-3,3-dimetyldecahydroquinoxalin,

(4aS,8aS)-1-(4-(diflometoxy)phenyl)-3,3-dimetyldecahydroquinoxalin, và

(4aR,8aR)-1-(4-(diflometoxy)-3-flophenyl)-3,3-dimetyldecahydroquinoxalin.

6. Dược phẩm chứa hợp chất có công thức (1) hoặc muối dược dụng của hợp chất này theo điểm 1 làm hoạt chất và chất mang dược dụng.

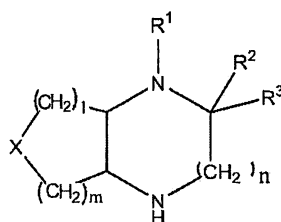
7. Quy trình sản xuất hợp chất có công thức chung (1):



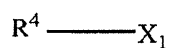
(1)

hoặc muối được dụng của hợp chất này, trong đó m , l , n , X , R^1 , R^2 , và R^3 được xác định trong điểm 1 nêu trên,

quy trình này bao gồm bước tiến hành phản ứng giữa hợp chất có công thức chung:



trong đó m , l , n , X , R^1 , R^2 , và R^3 được xác định trong điểm 1 nêu trên và hợp chất có công thức chung:



trong đó R^4 và X_1 được xác định trong điểm 1 nêu trên.