



(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

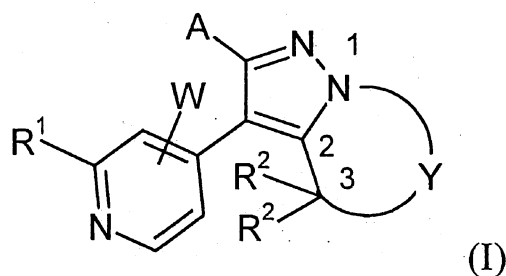
(11) 
1-0020321

(51)⁷ **C07D 471/04, 487/04, 498/04, 513/04, A01N 43/56** (13) **B**

-
- (21) 1-2012-03266 (22) 04.04.2011
(86) PCT/EP2011/055153 04.04.2011 (87) WO2011/124539 13.10.2011
(30) 10159210.3 07.04.2010 EP
61/321,704 07.04.2010 US
(45) 25.01.2019 370 (43) 25.04.2013 301
(73) BAYER INTELLECTUAL PROPERTY GMBH (DE)
Alfred-Nobel-Str. 10, 40789 Monheim, Germany
(72) MATTES, Amos (DE), HELMKE, Hendrik (DE), HILLEBRAND, Stefan (DE),
PERIS, Gorka (ES), SUDAU, Alexander (DE), RODEFELD, Lars (DE), GAUGER,
Stefan (DE), BENTING, Jurgen (DE), DAHMEN, Peter (DE), MEISSNER, Ruth
(DE), WACHENDORFF-NEUMANN, Ulrike (DE), HADANO, Hiroyuki (JP)
(74) Công ty Luật TNHH T&G (TGVN)
-

(54) **HỢP CHẤT PYRIDINYLPYRAZOL HAI VÒNG, CHẾ PHẨM VÀ PHƯƠNG PHÁP PHI ĐIỀU TRỊ ĐỂ KIỂM SOÁT NẤM GÂY BỆNH Ở CÂY VÀ NẤM SINH ĐỘC TỔ**

(57) **Sáng chế đề cập đến pyridinylpyrazol hai vòng có công thức (I)**



trong đó các ký hiệu được định nghĩa như trong bản mô tả và các muối nông dụng của chúng. Ngoài ra, sáng chế cũng đề cập đến chế phẩm và phương pháp phi điều trị để kiểm soát nấm gây bệnh ở cây và nấm sinh độc tố bằng cách sử dụng các hợp chất này để kiểm soát các vi sinh vật không mong muốn trong việc bảo vệ cây trồng và bảo vệ các vật liệu và để giảm các độc tố trong cây và các bộ phận của cây. Sáng chế cũng đề cập đến quy trình điều chế chế phẩm để kiểm soát nấm có hại gây bệnh ở cây chứa hợp chất có công thức (I).

Lĩnh vực kỹ thuật được đề cập

Sáng chế đề cập đến các hợp chất pyridinylpyrazol hai vòng, quy trình điều chế chúng và sử dụng chúng để kiểm soát các vi sinh vật không mong muốn trong việc bảo vệ cây trồng và bảo vệ các vật liệu, cũng như để giảm các độc tố nấm trên cây và các bộ phận của cây. Sáng chế còn đề cập đến quy trình kiểm soát nấm gây bệnh và để giảm độc tố nấm trên các cây và các bộ phận của cây để bảo vệ cây trồng cũng như đến các chế phẩm bảo vệ cây trồng chứa các pyridinylpyrazol hai vòng.

Bản chất kỹ thuật của sáng chế

Các arylpyrazol được biết là có các tính chất diệt nấm (ví dụ, xem, WO 2009/076440, WO 2003/049542 và WO 2001/03015). Hoạt tính của các chất được mô tả trong các công bố này là tốt; tuy nhiên, trong một số trường hợp là không thỏa mãn.

WO 2002/094833 mô tả các pyrazol được thế heteroaryl nhất định thích hợp cho việc dùng chữa bệnh, ở đây là làm các chất ức chế sự truyền tín hiệu TGF-beta. Các hợp chất tương tự cũng được mô tả trong WO 1998/052937, WO 2002/094833, EP-A 1 553 096, WO 2004/029043, WO 1998/052940, WO 2000/031063, WO 1995/031451, WO 2002/057265 và WO 2000/039116, Tuy nhiên, tác dụng lên các mầm bệnh do nấm chưa được mô tả.

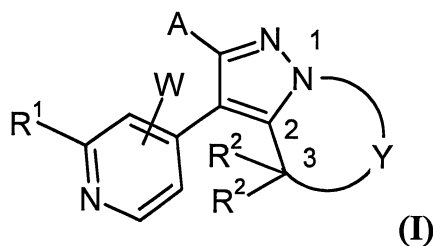
WO 2007/105058 mô tả các pyrazol được thế heteroaryl nhất định có thể được sử dụng làm các chất điều biến hoặc các chất ức chế enzym Raf của người. Tuy nhiên, tác dụng lên các mầm bệnh do nấm chưa được mô tả.

Do các yêu cầu về mặt sinh thái và kinh tế được đặt ra cho các tác nhân bảo vệ cây trồng tăng lên không ngừng, ví dụ, về phổ hoạt tính, độ độc hại, tính chọn lọc, tỷ lệ áp dụng, sự tạo thành bã và sự sản xuất thuận lợi, và có thể còn có các vấn đề khác, ví dụ, về sức chống chịu, có một nhu cầu bất biến để phát triển các tác nhân bảo vệ cây trồng mới, đặc biệt là thuốc diệt nấm mà ít nhất trong một số lĩnh vực, chúng có những thuận lợi so với những loại đã biết.

Ngạc nhiên là, hiện nhận thấy rằng pyridinylpyrazol hai vòng theo sáng chế đạt được ít nhất một số khía cạnh của các mục đích đã đề cập và là thích hợp để sử dụng làm tác nhân bảo vệ cây trồng, đặc biệt là làm các thuốc diệt nấm.

Bản chất kỹ thuật của sáng chế

Sáng chế đề cập tới các hợp chất có công thức (I)



trong đó, các ký hiệu được định nghĩa như sau:

Y cùng với nguyên tử nitơ liên kế “1” và hai nguyên tử cacbon “2” và “3” tạo thành nhân dị vòng không thơm có 5 đến 7 phần tử mà các phần tử của vòng được chọn từ nhóm bao gồm $C(R^2)_2$, O, S, NR^3 , $C(R^2)=C(R^2)$, $C(R^2)=N$, $N=N$, $C(=O)$, $C(=S)$, $C(=NR^4)$, $S(=O)_p(=NR^4)_q$ và $SiR^{5a}R^{5b}$;

R^2 độc lập là một trong số H, halogen, xyano, hydroxyl, -CHO, -NHCHO, -N₃, -N=C=O, -N=C=S, -SH, -C(=O)NH₂, -C(=O)NHCN, -C(=O)OR⁶, -C(=O)NHOR^{6a}, C₁-C₅-alkyl, C₂-C₅-alkenyl, C₂-C₅-alkynyl, C₃-C₆-xycloalkyl, C₃-C₆-haloxycloalkyl, C₃-C₆-xycloalkenyl, C₁-C₅-haloalkyl, C₁-C₅-alkoxy, C₁-C₅-haloalkoxy, C₃-C₆-xycloalkoxy, C₂-C₅-alkenyloxy, C₃-C₅-haloalkenyloxy, C₂-C₅-alkynyloxy, C₂-C₅-alkylcarbonyl, C₂-C₅-alkylcarbonyloxy, C₂-C₅-haloalkyl carbonyloxy, C₃-C₅-alkoxycarbonylalkoxy, C₁-C₅-alkylthio, C₁-C₅-haloalkylthio, C₃-C₆-xycloalkylthio, C₂-C₅-alkyl(thiocarbonyl), C₂-C₅-alkylthio(thiocarbonyl), C₁-C₅-alkylsulphinyl, C₁-C₅-haloalkylsulphinyl, C₃-C₆-xycloalkylsulphinyl, C₁-C₅-alkylsulphonyl, C₁-C₅-haloalkylsulphonyl, C₃-C₆-xycloalkylsulphonyl, C₃-C₅-trialkylsilyl, C₃-C₅-halotrialkylsilyl, C₁-C₅-alkylamino, C₂-C₅-haloalkylamino, C₃-C₆-xycloalkylamino, C₂-C₅-dialkylamino hoặc C₃-C₅-halodialkylamino;

R^3 là H, -CN, -C(=O)NH₂, -C(=O)NHCN, -CHO, -NHCHO, -C(=O)OR⁶, -C(=O)NHOR^{6a}, hydroxyl, C₁-C₅-alkyl, C₂-C₅-alkenyl, C₂-C₅-alkynyl, C₃-C₆-xycloalkyl, C₃-C₆-haloxycloalkyl, C₃-C₆-xycloalkenyl, C₄-C₁₀-xycloalkylalkyl, C₄-C₇-alkylxycloalkyl, C₅-C₇-alkylxycloalkylalkyl, C₂-C₅-haloalkyl, C₁-C₄-alkylcarbonyl, C₁-

C₄-haloalkylcarbonyl, C₃-C₇-xycloalkylcarbonyl, C₁-C₆-alkoxycarbonyl, C₁-C₄-haloalkoxycarbonyl, C₃-C₆-xycloalkoxycarbonyl, C₂-C₆-alkoxyalkylcarbonyl, C₂-C₆-alkoxyalkoxycarbonyl, C₁-C₆-(alkylthio)carbonyl, C₁-C₆-alkoxy(thiocarbonyl), C₁-C₆-alkyl(thiocarbonyl), C₁-C₆-alkylthio(thiocarbonyl), C₁-C₆-alkylaminocarbonyl, C₃-C₆-xycloalkylaminocarbonyl, C₂-C₆-dialkylaminocarbonyl, C₁-C₆-alkylamino(thiocarbonyl), C₂-C₆-dialkylamino(thiocarbonyl), C₂-C₆-alkoxy(alkyl)amino carbonyl, C₁-C₅-alkoxy, C₁-C₅-haloalkoxy, C₁-C₅-alkylthio, C₁-C₅-haloalkylthio, C₃-C₆-xycloalkylthio, C₁-C₅-alkylaminosulphonyl, C₃-C₅-trialkylsilyl hoặc C₃-C₅-halotrialkylsilyl;

R⁴ là một trong số H, xyano, amino, hydroxyl, C₁-C₆-alkyl, C₃-C₆-xycloalkyl, C₁-C₄-alkylcarbonyl, C₁-C₄-haloalkylcarbonyl, C₁-C₄-alkoxy, phenyl hoặc benzoyl;

R^{5a}, R^{5b} độc lập với nhau là C₁-C₄-alkyl, C₂-C₅-alkenyl, C₂-C₅-alkynyl, C₃-C₅-xycloalkyl, C₃-C₆-haloxycloalkyl, C₄-C₇-xycloalkylalkyl, C₄-C₇-alkylxycloalkyl, C₅-C₇-alkylxycloalkylalkyl, C₁-C₅-haloalkyl, C₁-C₅-alkoxy hoặc C₁-C₅-haloalkoxy;

R⁶ là một trong số H, C₁-C₆-alkyl, C₁-C₆-haloalkyl, C₃-C₆-xycloalkyl, C₄-C₇-xycloalkylalkyl, C₄-C₇-alkylxycloalkyl hoặc benzyl;

R^{6a} là một trong số C₁-C₆-alkyl, C₁-C₆-haloalkyl, C₃-C₆-xycloalkyl, C₄-C₇-xycloalkylalkyl hoặc C₄-C₇-alkylxycloalkyl;

A là vòng phenyl có thể tùy ý được thế một hoặc nhiều lần bởi R⁷ hoặc là vòng thiophenyl có thể tùy ý được thế một hoặc nhiều lần bởi R⁸;

R⁷ độc lập với nhau là halogen, C₁-C₆-alkyl, C₂-C₆-alkenyl, C₂-C₆-alkynyl, C₃-C₆-xycloalkyl, C₃-C₆-haloxycloalkyl, C₄-C₇-alkylxycloalkyl, C₁-C₆-haloalkyl, C₂-C₆-haloalkenyl, xyano, nitro, C₁-C₆-alkoxy, C₁-C₆-haloalkoxy, C₁-C₆-alkylthio, C₁-C₆-alkylsulphinyl, C₁-C₆-alkylsulphonyl, C₁-C₆-haloalkylthio, C₁-C₆-haloalkylsulphinyl, C₁-C₆-haloalkylsulphonyl, C₁-C₆-alkylamino, C₂-C₆-dialkylamino, C₁-C₆-alkylcarbonyl, C₁-C₆-alkoxycarbonyl, C₁-C₆-alkylaminocarbonyl, C₂-C₆-dialkylaminocarbonyl hoặc C₃-C₆-trialkylsilyl;

R⁸ độc lập với nhau là halogen, xyano, C₁-C₃-alkyl, C₁-C₃-alkoxy, C₁-C₃-haloalkyl, C₁-C₃-haloalkoxy,

R^1 là H, halogen, xyano, hydroxyl, C_1 - C_4 -alkyl, $CONR^{9a}R^{9b}$, $COOH$, $COOR^{12}$, $-NR^{9a}R^{9b}$, $-N(R^{9b})COR^{9a}$, $-N(R^{9b})CSR^{9a}$, $-N(R^{9b})COOR^{12}$, $-N(R^{9b})SO_2R^{12}$, $-NR^{10}-NR^{11a}R^{11b}$, $-S(O)_mR^{12}$, $-OR^{12}$, $-N=CR^{13a}R^{13b}$ hoặc $-NR^{10}N=CR^{14a}R^{14b}$;

R^{9a} và R^{11a} độc lập với nhau là H, C_1 - C_6 -alkyl, C_2 - C_6 -alkenyl, C_2 - C_6 -alkynyl, C_1 - C_6 -haloalkyl, C_2 - C_6 -haloalkenyl, C_2 - C_6 -haloalkynyl, C_2 - C_6 -alkoxyalkyl, C_3 - C_6 -alkoxyalkoxyalkyl, C_3 - C_6 -alkoxyalkenyl, C_3 - C_6 -alkoxyalkynyl, C_3 - C_6 -dialkoxyalkyl, C_4 - C_{10} -trialkoxyalkyl, C_2 - C_6 -haloalkoxyalkyl, C_2 - C_6 -alkoxyhaloalkyl, C_2 - C_6 -haloalkoxyhaloalkyl, C_1 - C_6 -hydroxyalkyl, C_1 - C_{10} -xyanoalkyl, C_2 - C_6 -alkylthioalkyl, C_2 - C_6 -alkylsulphinyllalkyl, C_3 - C_6 -alkylaminoalkyl, C_3 - C_6 -haloalkylaminoalkyl, C_5 - C_{10} -xycloalkylaminoalkyl, C_4 - C_{10} -dialkylaminoalkyl, C_4 - C_{10} -halodialkylaminoalkyl, C_5 - C_{10} -xycloalkyl(alkyl)aminoalkyl hoặc $-(CR^{15a}R^{15b})_mR^{16}$;

R^{9b} và R^{11b} độc lập với nhau là H, C_1 - C_6 -alkyl, C_2 - C_6 -alkenyl, C_2 - C_6 -alkynyl, C_1 - C_6 -haloalkyl, C_2 - C_6 -haloalkenyl, C_2 - C_6 -haloalkynyl, C_2 - C_6 -alkoxyalkyl, C_3 - C_6 -alkoxyalkoxyalkyl, C_3 - C_6 -alkoxyalkenyl, C_3 - C_6 -alkoxyalkynyl, C_3 - C_6 -dialkoxyalkyl, C_4 - C_{10} -trialkoxyalkyl, C_2 - C_6 -haloalkoxyalkyl, C_2 - C_6 -alkoxyhaloalkyl, C_2 - C_6 -haloalkoxyhaloalkyl, C_1 - C_6 -hydroxyalkyl, C_1 - C_{10} -xyanoalkyl, C_2 - C_6 -alkylthioalkyl, C_2 - C_6 -alkylsulphinyllalkyl, C_3 - C_6 -alkylaminoalkyl, C_3 - C_6 -haloalkylaminoalkyl, C_5 - C_{10} -xycloalkylaminoalkyl, C_4 - C_{10} -dialkylaminoalkyl, C_4 - C_{10} -halodialkylaminoalkyl, C_5 - C_{10} -xycloalkyl(alkyl)aminoalkyl hoặc $-(CR^{15a}R^{15b})_mR^{16}$;

hoặc

mỗi gốc R^{9a} và R^{9b} hoặc R^{11a} và R^{11b} liên kết với nguyên tử nitơ hoặc với nhóm (NCO) hoặc nhóm (NCS) mà chúng được gắn với để tạo thành vòng có 3 tới 6 phần tử, mà tùy ý còn chứa các phần tử vòng khác được chọn từ nhóm bao gồm O, NR^3 , $C(=O)$, $C(=S)$, $C(=NR^4)$, $SiR^{5a}R^{5b}$ và $S(=O)_p(=NR^4)_q$ và vòng này có thể tùy ý được thế ở các nguyên tử cacbon bởi 1 đến 4 phần tử thế được chọn từ nhóm bao gồm halogen, $-CN$, C_1 - C_2 -alkyl và C_1 - C_2 -alkoxy;

R^{12} là một trong số C_1 - C_{10} -alkyl, C_2 - C_{10} -alkenyl, C_2 - C_{10} -alkynyl, C_1 - C_{10} -haloalkyl, C_2 - C_{10} -haloalkenyl, C_2 - C_{10} -haloalkynyl, C_2 - C_{10} -alkoxyalkyl, C_3 - C_{10} -alkoxyalkoxyalkyl, C_3 - C_{10} -alkoxyalkenyl, C_3 - C_{10} -alkoxyalkynyl, C_3 - C_{10} -dialkoxyalkyl, C_4 - C_{10} -trialkoxyalkyl, C_2 - C_{10} -haloalkoxyalkyl, C_2 - C_{10} -alkoxyhaloalkyl, C_2 - C_{10} -haloalkoxyhaloalkyl, C_2 - C_{10} -hydroxyalkyl, C_2 - C_{10} -xyanoalkyl, C_2 - C_{10} -alkylthioalkyl, C_2 -

C₁₀-alkylsulphinylalkyl, C₃-C₁₀-alkylaminoalkyl, C₃-C₁₀-haloalkylaminoalkyl, C₅-C₁₀-xycloalkylaminoalkyl, C₄-C₁₀-dialkylaminoalkyl, C₄-C₁₀-halodialkylaminoalkyl, C₆-C₁₀-xycloalkyl(alkyl)-aminoalkyl hoặc $-(CR^{15a}R^{15b})_mR^{16}$;

R^{15a}, R^{15b} độc lập với nhau là H, halogen, C₁-C₅-alkyl, C₁-C₅-haloalkyl hoặc C₁-C₅-alkoxy;

hoặc

cặp gốc đôi R^{15a} và R^{15b} cùng với nguyên tử cacbon mà cặp này gắn vào tạo thành C(=O) hoặc vòng C₃-C₆-xycloalkyl hoặc vòng C₃-C₆-haloxycloalkyl;

R¹⁶ là phenyl, C₃-C₈-xycloalkyl, C₃-C₈-xycloalkenyl, nhân dị vòng thơm có 5 hoặc 6 phần tử hoặc naphtalenyl hoặc hệ nhân dị vòng thơm hai vòng có 8, 9 hoặc 10 phần tử; hoặc nhân dị vòng không thơm có 5 hoặc 6 phần tử tùy ý chứa các phần tử của vòng được chọn từ nhóm bao gồm C(=O), C(=S), C(=NR⁴), SiR^{5a}R^{5b} và S(=O)_p(=NR⁴)_q; trong đó mỗi vòng hoặc mỗi hệ vòng có thể tùy ý được thế ở các nguyên tử cacbon của vòng bởi 5 phần tử thế độc lập với nhau được chọn từ R¹⁷;

R¹⁷ độc lập là một trong số halogen, C₁-C₆-alkyl, C₂-C₆-alkenyl, C₂-C₆-alkynyl, C₃-C₆-xycloalkyl, C₄-C₁₀-alkylxycloalkyl, C₃-C₆-haloxycloalkyl, C₁-C₆-haloalkyl, C₂-C₆-haloalkenyl, xyano, nitro, C₁-C₆-alkoxy, C₃-C₈-xycloalkoxy, C₃-C₈-haloxycloalkoxy, C₁-C₆-haloalkoxy, C₁-C₆-alkylthio, C₁-C₆-alkylsulphinyl, C₁-C₆-alkylsulphonyl, C₁-C₆-haloalkylthio, C₁-C₆-haloalkyl sulphinyl, C₁-C₆-haloalkylsulphonyl, C₁-C₆-alkylamino, C₁-C₆-dialkylamino, C₁-C₆-alkylcarbonyl, C₁-C₆-alkoxycarbonyl, C₁-C₆-alkylaminocarbonyl, C₃-C₆-dialkyl aminocarbonyl, C₃-C₆-trialkylsilyl, phenyl, naphtalenyl hoặc nhân dị vòng thơm có 5 hoặc 6 phần tử;

m là 0, 1 hoặc 2;

R¹⁰ là một trong số H, C₁-C₅-alkyl, C₂-C₅-alkenyl, C₂-C₅-alkynyl, C₃-C₆-xycloalkyl, C₃-C₆-haloxycloalkyl, C₁-C₅-haloalkyl, C₂-C₅-haloalkenyl, C₂-C₅-haloalkynyl, C₂-C₅-alkoxyalkyl, C₂-C₅-alkylcarbonyl hoặc C₁-C₅-alkoxy;

R^{13a}, R^{13b} độc lập với nhau là H, -CN, -C(=O)OR¹⁸, C₁-C₆-alkyl, C₂-C₆-alkenyl, C₂-C₆-alkynyl, C₃-C₈-xycloalkyl, C₃-C₈-haloxycloalkyl, C₃-C₈-xycloalkenyl, C₄-C₁₀-xycloalkylalkyl, C₄-C₁₀-alkylxycloalkyl, C₅-C₁₀-alkylxycloalkylalkyl, C₁-C₆-alkylamino, C₂-C₆-dialkylamino, C₂-C₆-alkylaminoalkyl, C₂-C₆-haloalkylaminoalkyl, C₄-C₆-

xycloalkylaminoalkyl, C₃-C₆-dialkylaminoalkyl, C₃-C₆-halodialkylaminoalkyl, C₅-C₁₀-xycloalkyl(alkyl)aminoalkyl, C₁-C₆-alkoxy, C₁-C₆-haloalkoxy, C₃-C₁₀-xycloalkoxy, C₁-C₁₀-alkylthio, C₁-C₁₀-haloalkylthio, C₃-C₁₀-xycloalkylthio, C₃-C₁₀-trialkylsilyl hoặc C₃-C₁₀-halotrialkylsilyl, hoặc phenyl hoặc nhân dị vòng thơm có 5 hoặc 6 phần tử, hệ nhân dị vòng thơm hai vòng có 8, 9, hoặc 10 phần tử, hoặc nhân dị vòng không thơm có 5 hoặc 6 phần tử tùy ý chứa các phần tử vòng được chọn từ nhóm bao gồm NR³, C(=O), C(=S), C(=NR⁴), SiR^{5a}R^{5b} và S(=O)_p(=NR⁴)_q; trong đó mỗi vòng hoặc mỗi hệ vòng có thể tùy ý được thế ở các nguyên tử cacbon của vòng bởi 1 đến 5 phần tử thế được chọn từ nhóm bao gồm C₁-C₃-alkyl, halogen, -CN và C₁-C₃-alkoxy;

hoặc

R^{13a} và R^{13b} cùng với nguyên tử cacbon mà chúng gắn vào để tạo thành vòng có 3 đến 6 phần tử, trong đó vòng đã nêu có thể tùy ý chứa các phần tử của vòng được chọn từ nhóm bao gồm NR³, C(=O), C(=S), C(=NR⁴), SiR^{5a}R^{5b} và S(=O)_p(=NR⁴)_q và có thể tùy ý được thế ở các nguyên tử cacbon bởi 1 đến 4 phần tử thế được chọn từ nhóm bao gồm C₁-C₂-alkyl, halogen, -CN và C₁-C₂-alkoxy;

R^{14a}, R^{14b} độc lập với nhau là H, -CN, -C(=O)OR¹⁸, C₁-C₆-alkyl, C₂-C₆-alkenyl, C₂-C₆-alkynyl, C₃-C₈-xycloalkyl, C₃-C₈-haloxycloalkyl, C₃-C₈-xycloalkenyl, C₄-C₁₀-xycloalkylalkyl, C₄-C₁₀-alkylxycloalkyl, C₅-C₁₀-alkylxycloalkylalkyl, C₁-C₆-alkylamino, C₂-C₆-dialkylamino, C₂-C₆-alkylaminoalkyl, C₂-C₆-haloalkylaminoalkyl, C₄-C₆-xycloalkylaminoalkyl, C₃-C₆-dialkylaminoalkyl, C₃-C₆-halodialkylaminoalkyl, C₅-C₁₀-xycloalkyl(alkyl)aminoalkyl, C₁-C₆-alkoxy, C₁-C₆-haloalkoxy, C₃-C₁₀-xycloalkoxy, C₁-C₁₀-alkylthio, C₁-C₁₀-haloalkylthio, C₃-C₁₀-xycloalkylthio, C₃-C₁₀-trialkylsilyl hoặc C₃-C₁₀-halotrialkylsilyl; hoặc phenyl hoặc nhân dị vòng thơm có 5 hoặc 6 phần tử, hệ nhân dị vòng thơm hai vòng có 8, 9, 10 phần tử vòng, hoặc nhân dị vòng không thơm có 5 hoặc 6 phần tử có thể tùy ý chứa các phần tử của vòng được chọn từ nhóm bao gồm NR³, C(=O), C(=S), C(=NR⁴), SiR^{5a}R^{5b} và S(=O)_p(=NR⁴)_q; trong đó mỗi vòng hoặc mỗi hệ vòng có thể tùy ý được thế ở các nguyên tử cacbon của vòng bởi 1 đến 5 phần tử thế được chọn từ nhóm bao gồm C₁-C₃-alkyl, halogen, -CN và C₁-C₃-alkoxy;

hoặc

R^{14a}, R^{14b} cùng với nguyên tử cacbon mà chúng gắn vào để tạo thành vòng có 3 đến 6 phần tử, trong đó vòng đã nêu có thể tùy ý chứa các phần tử của vòng được chọn từ

nhóm bao gồm NR^3 , C(=O) , C(=S) , $\text{C(=NR}^4\text{)}$, $\text{SiR}^{5a}\text{R}^{5b}$ và $\text{S(=O)p(=NR}^4\text{)}_q$ và có thể tùy ý được thế ở các nguyên tử cacbon bởi 1 đến 4 phần tử thế được chọn từ nhóm bao gồm $\text{C}_1\text{-C}_2\text{-alkyl}$, halogen, -CN và $\text{C}_1\text{-C}_2\text{-alkoxy}$;

p, q độc lập với nhau là 0, 1 hoặc 2, miễn là tổng của p và q là 1 hoặc 2;

R^{18} là $\text{C}_1\text{-C}_6\text{-alkyl}$, $\text{C}_1\text{-C}_6\text{-haloalkyl}$, $\text{C}_3\text{-C}_6\text{-xycloalkyl}$, $\text{C}_4\text{-C}_7\text{-xycloalkylalkyl}$ hoặc $\text{C}_4\text{-C}_7\text{-alkylxycloalkyl}$;

W là H

hoặc

W là halogen, CN , $\text{C}_1\text{-C}_4\text{-haloalkyl}$, $\text{C}_1\text{-C}_4\text{-alkyl}$, $\text{C}_1\text{-C}_4\text{-alkoxy}$;

và muối nông dụng của hợp chất này.

Mô tả chi tiết sáng chế

Các hợp chất có công thức (I) là rất thích hợp để kiểm soát các vi sinh vật không mong muốn. Cụ thể, chúng có hoạt tính diệt nấm mạnh và có thể được sử dụng trong cả việc bảo vệ cây trồng và trong việc bảo vệ các vật liệu cũng như làm giảm các nấm gây độc trên cây và các bộ phận của cây.

Hợp chất có công thức (I) có thể tồn tại ở cả hai dạng nguyên chất và là hỗn hợp của nhiều dạng đồng phân có thể khác nhau, đặc biệt là các chất đồng phân lập thể, chẳng hạn như E và Z, threo và erythro, cũng như các chất đồng phân quang học, chẳng hạn như các chất đồng phân R và S hoặc các chất đồng phân phi đối hình, và, nếu thích hợp, còn các chất hỗn biến. Yêu cầu bảo hộ cả các chất đồng phân E và Z, cũng như threo và erythro, cũng như các chất đồng phân quang học, các hỗn hợp bất kỳ của các chất đồng phân này, cũng như các dạng chất hỗn biến có thể.

Hợp chất theo sáng chế được thể hiện bằng công thức chung (I).

Các hợp chất được ưu tiên là các hợp chất có công thức (I), trong đó một hoặc nhiều ký hiệu có một trong các ý nghĩa sau đây:

Y cùng với nguyên tử nitơ liền kề “1” và hai nguyên tử cacbon “2” và “3” tạo thành nhân dị vòng không thơm có 5 đến 7 phần tử mà các phần tử của vòng được chọn từ nhóm bao gồm $\text{C(R}^2\text{)}_2$, O, S, SO_2 , NR^3 , $\text{-C(R}^2\text{)=C(R}^2\text{)-}$, C(=O) và C(=S) ;

R^2 độc lập là một trong số H, halogen, xyano, hydroxyl, $-CHO$, $-C(=O)OR^6$, $-C(=O)NHOR^{6a}$, C_1-C_5 -alkyl, C_2-C_5 -alkenyl, C_2-C_5 -alkynyl, C_3-C_6 -xycloalkyl, C_3-C_6 -haloxycloalkyl, C_3-C_6 -xycloalkenyl, C_1-C_5 -haloalkyl, C_1-C_5 -alkoxy, C_1-C_5 -haloalkoxy, C_3-C_6 -xycloalkoxy, C_2-C_5 -alkenyloxy, C_3-C_5 -haloalkenyloxy, C_2-C_5 -alkynyloxy, C_2-C_5 -alkylcarbonyl, C_1-C_5 -alkylthio, C_1-C_5 -haloalkylthio hoặc C_3-C_6 -xycloalkylthio;

R^3 là H, $-CN$, $-C(=O)NH_2$, $-C(=O)NHCN$, $-CHO$, $-C(=O)OR^6$, $-C(=O)NHOR^{6a}$, C_1-C_5 -alkyl, C_2-C_5 -haloalkyl, C_1-C_4 -alkylcarbonyl, C_1-C_4 -haloalkylcarbonyl, C_3-C_6 -xycloalkylcarbonyl, C_1-C_4 -alkoxycarbonyl, C_1-C_4 -haloalkoxycarbonyl, C_3-C_6 -xycloalkoxycarbonyl, C_3-C_6 -alkoxyalkylcarbonyl, C_3-C_6 -alkoxyalkoxycarbonyl, C_1-C_4 -(alkylthio)carbonyl, C_1-C_4 -alkoxy(thiocarbonyl), C_1-C_4 -alkyl(thiocarbonyl), C_1-C_4 -alkylthio(thiocarbonyl), C_1-C_4 -alkylaminocarbonyl, C_3-C_6 -xycloalkylaminocarbonyl, C_2-C_6 -dialkylaminocarbonyl, C_2-C_6 -alkylamino(thiocarbonyl), C_2-C_6 -dialkylamino(thiocarbonyl) hoặc C_3-C_6 -alkoxy(alkyl)aminocarbonyl;

R^6 là một trong số H hoặc C_1-C_4 -alkyl;

R^{6a} là một trong số C_1-C_4 -alkyl;

A là vòng phenyl có thể tùy ý được thế một hoặc nhiều lần bởi R^7 hoặc là vòng thiophenyl có thể tùy ý được thế một hoặc nhiều lần bởi R^8 ;

R^7 độc lập với nhau là halogen, C_1-C_4 -alkyl, C_1-C_4 -haloalkyl, xyano, C_1-C_4 -alkoxy, C_1-C_4 -haloalkoxy, C_1-C_4 -alkylthio, C_1-C_4 -alkylsulphinyl, C_1-C_4 -alkylsulphonyl hoặc C_1-C_4 -haloalkylthio;

R^8 độc lập với nhau là halogen, xyano, C_1-C_3 -alkyl, C_1-C_3 -alkoxy, C_1-C_3 -haloalkyl;

R^1 là H, halogen, C_1-C_3 -alkyl, xyano, $-NR^{9a}R^{9b}$, $-N(R^{9b})COR^{9a}$, $-N(R^{9b})CSR^{9a}$, $-N(R^{9b})COOR^{12}$, $-OR^{12}$, $-S(O)mR^{6a}$, $COOR^{12}$ hoặc $-CONR^{9a}R^{9b}$;

R^{9a} là một trong số H, C_1-C_6 -alkyl, C_2-C_6 -alkenyl, C_2-C_6 -alkynyl, C_1-C_6 -haloalkyl, C_2-C_6 -haloalkenyl, C_2-C_6 -haloalkynyl, C_2-C_6 -alkoxyalkyl, C_3-C_6 -alkoxyalkoxyalkyl, C_3-C_6 -alkoxyalkenyl, C_3-C_6 -alkoxyalkynyl, C_3-C_6 -dialkoxylalkyl, C_2-C_6 -haloalkoxyalkyl, C_2-C_6 -alkoxyhaloalkyl, C_2-C_6 -haloalkoxyhaloalkyl, C_1-C_6 -hydroxyalkyl, C_1-C_6 -xyanoalkyl, C_2-C_6 -alkylthioalkyl, C_2-C_6 -alkylsulphinylalkyl, C_3-C_6 -alkylaminoalkyl, C_3-C_6 -

haloalkylaminoalkyl, C₅-C₁₀-xycloalkylaminoalkyl, C₄-C₁₀-dialkylaminoalkyl, C₄-C₁₀-halodialkylaminoalkyl hoặc $-(CR^{15a}R^{15b})_mR^{16}$;

R^{9b} là một trong số H, C₁-C₆-alkyl, C₂-C₆-alkenyl, C₂-C₆-alkynyl, C₁-C₆-haloalkyl hoặc $-(CR^{15a}R^{15b})_mR^{16}$;

hoặc

mỗi gốc R^{9a}, R^{9b} liên kết với nguyên tử nitơ hoặc với nhóm (NCO) hoặc nhóm (NCS) mà chúng được gắn với để tạo thành vòng có 3 đến 6 phần tử mà vòng này có thể tùy ý còn gồm có các phần tử vòng được chọn từ nhóm bao gồm NR³, C(=O), C(=S), O và vòng này có thể tùy ý được thế ở các nguyên tử cacbon của vòng bằng 1 đến 4 phần tử thế được chọn từ nhóm bao gồm halogen, -CN, C₁-C₂-alkyl và C₁-C₂-alkoxy;

R¹² là một trong số C₁-C₆-alkyl, C₂-C₆-alkenyl, C₂-C₆-alkynyl, C₁-C₆-haloalkyl, C₂-C₆-haloalkenyl hoặc $-(CR^{15a}R^{15b})_mR^{16}$;

R^{15a}, R¹⁵ độc lập với nhau là H, halogen hoặc C₁-C₄-alkyl;

R¹⁶ là phenyl, C₃-C₈-xycloalkyl, C₃-C₈-xycloalkenyl, vòng heteroaromatic có 5 hoặc 6 phần tử hoặc naphtalenyl hoặc hệ nhân dị vòng thơm hai vòng có 8, 9 hoặc 10 phần tử; hoặc nhân dị vòng không thơm có 5 hoặc 6 phần tử tùy ý chứa các phần tử của vòng được chọn từ nhóm bao gồm C(=O), C(=S), C(=NR⁴); trong đó mỗi vòng hoặc mỗi hệ vòng có thể tùy ý được thế ở các nguyên tử cacbon của vòng bởi 3 phần tử thế độc lập với nhau được chọn từ R¹⁷;

R¹⁷ độc lập là một trong số halogen, xyano, C₁-C₆-alkyl, C₂-C₆-alkenyl, C₂-C₆-alkynyl, C₃-C₆-xycloalkyl, C₁-C₆-haloalkyl, C₁-C₆-alkoxy;

m là 0, 1 hoặc 2,

W là H

hoặc

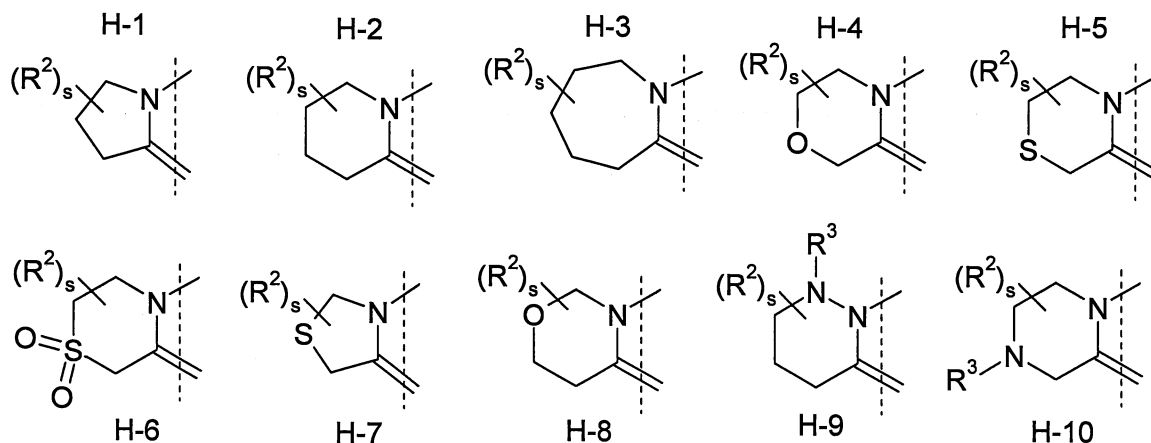
W là , clo, CN, CF₃, metyl, etyl, metoxy.

Các hợp chất được ưu tiên đặc biệt là các hợp chất có công thức (I), trong đó một hoặc nhiều ký hiệu có một trong các nghĩa bên dưới:

Y cùng với nguyên tử nitơ liên kế “1” và hai nguyên tử cacbon “2” và “3” tạo thành vòng heteroxylic không thơm có 5 đến 7 phần tử được chọn từ nhóm bao gồm:

H-1, H-2, H-3, H-4, H-5, H-6, H-7, H-8, H-9 và H-10 được thể hiện trong Sơ đồ 1, trong đó s là số có giá trị từ 0 tới 4;

Sơ đồ 1



R^2 độc lập là một trong số H, F, Cl, Br, I, xyano, hydroxyl, $-\text{CHO}$, $-\text{C}(=\text{O})\text{OR}^6$, metyl, etyl, isopropyl, n-propyl, triflometyl, diflometyl, diclometyl, pentaflöetyl, metoxy, etoxy, n-propoxy, isopropoxy, triflometoxy, diflometoxy hoặc axetyl, propionyl, isobutyryl, 2,2-dimetylpropanoyl;

R^3 là H, $-\text{CHO}$, metyl, etyl, isopropyl, n-propyl, axetyl, propionyl, isobutyryl, 2,2-dimetylpropanoyl, trifloaxetyl, difloaxetyl, $\text{CH}_3\text{OC}(\text{O})$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{C}(\text{O})$, $(\text{CH}_3)_2\text{CHC}(\text{O})$ hoặc $\text{CF}_3\text{OC}(\text{O})$, $\text{CF}_2\text{HOC}(\text{O})$;

R^6 là một trong số H, metyl, etyl, isopropyl, n-propyl;

A là phenyl hoặc vòng thiophen tùy ý được thể bởi các gốc được chọn từ nhóm bao gồm F, Cl, Br, I, xyano, metyl, etyl, isopropyl, n-propyl, triflometyl, diflometyl, diclometyl, pentaflöetyl hoặc metoxy, etoxy, n-propoxy, isopropoxy;

R^1 là H, F, Cl, Br, I, CH_3 , $\text{S}(\text{O})_m\text{Me}$, $-\text{NR}^{9a}\text{R}^{9b}$, $\text{N}(\text{R}^{9b})\text{COR}^{9a}$, $\text{N}(\text{R}^{9b})\text{COOR}^{12}$;

R^{9a} là một trong số H, metyl, etyl, isopropyl, n-propyl, n-butyl, sec-butyl, tert-butyl, isobutyl, n-pentyl, n-hexyl, $-\text{CH}=\text{CH}_2$, $-\text{CH}_2\text{CH}=\text{CH}_2$, $-\text{CH}=\text{CHCH}_3$, $-\text{CH}_2\text{C}\equiv\text{CH}$, $-\text{C}\equiv\text{CH}$, triflometyl, diflometyl, diclometyl, pentaflöetyl, metoxymetyl, etoxymetyl, metoxyetyl, tert-butoxymetyl, hydroxymetyl, 1-hydroxyetyl, 2-hydroxypropan-2-yl hoặc $-(\text{CH}_2)_m\text{R}^{16}$;

R^{9b} là một trong số H, metyl, etyl, isopropyl, n-propyl, n-butyl, sec-butyl, tert-butyl, isobutyl, n-pentyl, n-hexyl, $-\text{CH}_2\text{CH}=\text{CH}_2$, $-\text{CH}=\text{CHCH}_3$, $-\text{CH}_2\text{C}\equiv\text{CH}$, $-\text{C}\equiv\text{CH}$;

mỗi gốc R^{9a} , R^{9b} cùng với nitơ mà chúng gắn vào để tạo thành vòng có 5 hoặc 6 phần tử tùy ý được thể ở các nguyên tử cacbon của vòng bởi 1 hoặc 2 phần tử thể được chọn từ nhóm bao gồm F, Cl, Br, I, $-\text{CN}$ và metyl, etyl;

R^{12} là metyl, etyl, isopropyl, n-propyl, n-butyl, sec-butyl, tert-butyl, isobutyl, $-\text{CH}_2\text{CH}=\text{CH}_2$, $-\text{CH}=\text{CHCH}_3$, $\text{CH}_2\text{C}\equiv\text{CH}$, $-\text{C}\equiv\text{CH}$, triflometyl, diflometyl, diclometyl hoặc $-(\text{CH}_2)_mR^{16}$;

R^{16} là xyclopropyl, xyclobutyl, xyclopentyl, xyclohexyl, xyclopentenyl, xyclohexenyl, phenyl hoặc thienyl, mỗi chúng có thể tùy ý được thể bởi 2 gốc được chọn từ nhóm R^{17} ;

R^{17} độc lập là một trong số F, Cl, Br, I, metyl, etyl, isopropyl, n-propyl, n-butyl, sec-butyl, tert-butyl, isobutyl, triflometyl, diflometyl, diclometyl, metoxy, etoxy hoặc xyano;

m là 0, 1 và 2,

W là H

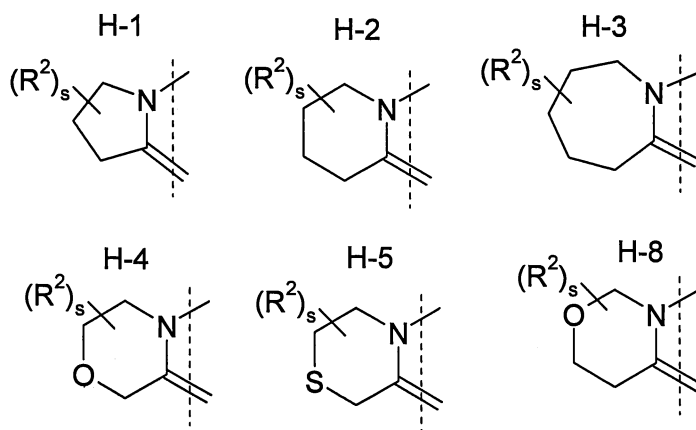
hoặc

W là flo, clo, CN, CF_3 , metyl, etyl.

Các hợp chất được ưu tiên rất đặc biệt là các hợp chất có công thức (I), trong đó một hoặc nhiều ký hiệu có một trong các nghĩa dưới đây:

Y cùng với nguyên tử nitơ liền kề “1” và hai nguyên tử cacbon “2” và “3” tạo thành nhân dị vòng không thơm có 5 đến 7 phần tử được chọn từ nhóm bao gồm: H-1, H-2, H-3, H-4, H-5 và H-8 được thể hiện trong Sơ đồ 2, trong đó s là số có giá trị từ 0 tới 4;

Sơ đồ 2



R^2 độc lập là một trong số H, flo, clo, xyano, CF_3 , metyl hoặc metoxy;

A là phenyl hoặc vòng thiophen tùy ý được thế bởi các gốc được chọn từ nhóm bao gồm F, Cl, xyano, CH_3 , CF_3 ;

R^1 là H, flo, clo, $S(O)_mMe$, $NR^{9a}R^{9b}$, $N(R^{9b})COR^{9a}$, $N(R^{9b})COOR^{12}$;

R^{9a} là một trong số H, metyl, etyl, n-propyl, isopropyl, n-butyl, isobutyl, sec-butyl, tert-butyl, n-pentyl, n-hexyl, metoxymetyl, etoxymetyl, etoxyetyl, metoxyetyl, metoxypropyl, hydroxymetyl, 1-hydroxyetyl, 2-hydroxyetyl, hydroxypropyl hoặc $-(CH_2)_mR^{16}$;

R^{9b} là một trong số H, metyl, etyl, n-propyl, isopropyl, n-butyl, allyl hoặc propargyl;

R^{12} là metyl, etyl, n-propyl, isopropyl, t-butyl, allyl, propargyl hoặc $-(CH_2)_mR^{16}$;

R^{16} là xyclopropyl, xyclopentyl, xyclobutyl, xyclohexyl, thienyl hoặc phenyl, mỗi gốc này có thể tùy ý được thế bởi gốc được chọn từ nhóm R^{17} ;

m là 0, 1 hoặc 2;

R^{17} là metyl, etyl, flo, clo, CF_3 , OMe, xyano

W là H

hoặc

W là flo, clo, xyano

và các muối nông dụng của chúng để làm thuốc diệt nấm.

Tuy nhiên, các định nghĩa chung hoặc được ưu tiên và các minh họa được đưa ra trên đây cũng có thể được kết hợp với nhau theo mong muốn, tức là bao gồm các sự kết hợp giữa các nhóm chung và các nhóm ưu tiên. Điều này áp dụng cả cho các sản phẩm cuối và, tương ứng, cho các tiền chất và các chất trung gian. Hơn nữa, các định nghĩa riêng không thể áp dụng.

Các hợp chất ưu tiên là các hợp chất có công thức (I) mà trong đó tất cả các gốc thuộc các định nghĩa được ưu tiên được đề cập trên đây.

Các hợp chất đặc biệt ưu tiên là các hợp chất có công thức (I) mà trong đó tất cả các gốc thuộc các định nghĩa được ưu tiên đặc biệt được đề cập bên trên.

Các hợp chất đặc biệt ưu tiên hơn nữa là các hợp chất có công thức (I) mà trong đó tất cả các gốc thuộc các định nghĩa đặc biệt ưu tiên hơn nữa được đề cập trên đây.

Các hợp chất đặc biệt ưu tiên hơn nữa là các hợp chất có công thức (I) mà trong đó:

R^1 là hydro,

trong đó, các phần tử thể khác thuộc một hoặc nhiều định nghĩa được đề cập bên trên, và các muối nông dụng của chúng.

Các hợp chất đặc biệt ưu tiên hơn nữa là các hợp chất có công thức (I) mà trong đó:

R^1 là $NR^{9a}R^{9b}$,

trong đó, các phần tử thể khác thuộc một hoặc nhiều định nghĩa được đề cập bên trên, và các muối nông dụng của chúng.

Các hợp chất đặc biệt ưu tiên hơn nữa là các hợp chất có công thức (I) mà trong đó:

R^1 là $N(R^{9b})COR^{9a}$,

trong đó, các phần tử thể khác thuộc một hoặc nhiều định nghĩa được đề cập bên trên, và các muối nông dụng của chúng.

Các hợp chất đặc biệt ưu tiên hơn nữa là các hợp chất có công thức (I) mà trong đó:

W là H,

trong đó, các phần tử thể khác thuộc một hoặc nhiều định nghĩa được đề cập bên trên, và các muối nông dụng của chúng.

Các hợp chất đặc biệt ưu tiên hơn nữa là các hợp chất có công thức (I) mà trong đó:

A là phenyl hoặc vòng thiophen được thế tùy ý bằng các gốc được chọn từ nhóm bao gồm F, Cl, xyano, CH₃, CF₃,

trong đó, các phần tử thế khác thuộc một hoặc nhiều định nghĩa được đề cập bên trên, và các muối nông dụng của chúng.

Các hợp chất đặc biệt ưu tiên hơn nữa là các hợp chất có công thức (I) mà trong đó:

Y cùng với nguyên tử nitơ liên kề "1" và hai nguyên tử cacbon "2" và "3" tạo thành nhân dị vòng không thơm có 5 đến 7 phần tử được chọn từ nhóm bao gồm H-1, H-2, H-3, H-4, H-5 và H-8 (xem trên trong sơ đồ 2) trong đó s là số nguyên có giá trị từ 0 tới 4 và các phần tử thế R² độc lập với nhau là H, flo, clo, xyano, CF₃, metyl hoặc metoxy,

trong đó, các phần tử thế khác thuộc một hoặc nhiều định nghĩa được đề cập bên trên, và các muối nông dụng của chúng.

Trong các định nghĩa của các ký hiệu được nêu trong các công thức ở trên, các thuật ngữ chung được sử dụng thường biểu diễn cho các nhóm thế sau đây:

halogen: flo, clo, brom và iot;

alkyl: các gốc hydrocacbon mạch thẳng hoặc mạch nhánh, no, có 1 đến 8 nguyên tử cacbon, ví dụ, C₁-C₆-alkyl, như metyl, etyl, propyl, 1-metyletyl, butyl, 1-metylpropyl, 2-metylpropyl, 1,1-dimetyletyl, pentyl, 1-metylbutyl, 2-metylbutyl, 3-metylbutyl, 2,2-dimetylpropyl, 1-etylpropyl, hexyl, 1,1-dimetylpropyl, 1,2-dimetylpropyl, 1-metylpentyl, 2-metylpentyl, 3-metylpentyl, 4-metylpentyl, 1,1-dimetylbutyl, 1,2-dimetylbutyl, 1,3-dimetylbutyl, 2,2-dimetylbutyl, 2,3-dimetylbutyl, 3,3-dimetylbutyl, 1-etylbutyl, 2-etylbutyl, 1,1,2-trimetylpropyl, 1,2,2-trimetylpropyl, 1-etyl-1-metylpropyl và 1-etyl-2-metylpropyl;

chuỗi thẳng hoặc các nhóm alkyl nhánh có từ 1 tới 8 nguyên tử cacbon (như được nói đến ở trên), ở đó, trong các nhóm này một số hoặc tất cả các nguyên tử hydro có thể được thay bằng các nguyên tử halogen như đã nói đến ở trên, ví dụ, C₁-C₃-haloalkyl, như clometyl, bromometyl, diclometyl, triclometyl, flometyl, diflometyl,

triflometyl, cloflometyl, dicloflometyl, clodiflometyl, 1-cloetyl, 1-bromoetyl, 1-floetyl, 2-floetyl, 2,2-difloetyl, 2,2,2-trifloetyl, 2-clo-2-floetyl, 2-clo-2,2-difloetyl, 2,2-diclo-2-floetyl, 2,2,2-tricloetyl, pentaflloetyl và 1,1,1-triloprop-2-yl;

thioalkyl: các gốc alkylthio mạch nhánh hoặc mạch thẳng, no, có 1 đến 6 nguyên tử cacbon, ví dụ, (nhưng không bị giới hạn) C₁-C₆-alkylthio, như metylthio, etylthio, propylthio, 1-metyletylthio, butylthio, 1-metylpropylthio, 2-metylpropylthio, 1,1-dimetyletylthio, pentylthio, 1-metylbutylthio, 2-metylbutylthio, 3-metylbutylthio, 2,2-dimetylpropylthio, 1-etylpropylthio, hexylthio, 1,1-dimetylpropylthio, 1,2-dimetylpropylthio, 1-metylpentylthio, 2-metylpentylthio, 3-metylpentylthio, 4-metylpentylthio, 1,1-dimetylbutylthio, 1,2-dimetylbutylthio, 1,3-dimetylbutylthio, 2,2-dimetylbutylthio, 2,3-dimetylbutylthio, 3,3-dimetylbutylthio, 1-etylbutylthio, 2-etylbutylthio, 1,1,2-trimetylpropylthio, 1,2,2-trimetylpropylthio, 1-etyl-1-metylpropylthio và 1-etyl-2-metylpropylthio;

thiohaloalkyl: các nhóm alkylthio mạch thẳng hoặc nhánh có 1 đến 6 nguyên tử cacbon (như đề cập bên trên), trong đó trong các nhóm này một số hoặc tất cả các nguyên tử hydro có thể được thế bằng các nguyên tử halogen như được đề cập bên trên, ví dụ, (nhưng không bị giới hạn) C₁-C₂-haloalkylthio, như clometylthio, bromometylthio, diclometylthio, triclometylthio, flometylthio, diflometylthio, triflometylthio, cloflometylthio, dicloflometylthio, clodiflometylthio, 1-cloetylthio, 1-bromoetylthio, 1-floetylthio, 2-floetylthio, 2,2-difloetylthio, 2,2,2-trifloetylthio, 2-clo-2-floetylthio, 2-clo-2,2-difloetylthio, 2,2-diclo-2-floetylthio, 2,2,2-tricloetylthio, pentaflloetylthio và 1,1,1-trifloprop-2-ylthio;

alkenyl: các gốc hydrocacbon mạch thẳng hoặc mạch nhánh, không no, có 2 đến 8 nguyên tử cacbon và liên kết đôi ở vị trí bất kỳ, ví dụ, C₂-C₆-alkenyl, như ethenyl, 1-propenyl, 2-propenyl, 1-metyletenyl, 1-butenyl, 2-butenyl, 3-butenyl, 1-metyl-1-propenyl, 2-metyl-1-propenyl, 1-metyl-2-propenyl, 2-metyl-2-propenyl, 1-pentenyl, 2-pentenyl, 3-pentenyl, 4-pentenyl, 1-metyl-1-butenyl, 2-metyl-1-butenyl, 3-metyl-1-butenyl, 1-metyl-2-butenyl, 2-metyl-2-butenyl, 3-metyl-2-butenyl, 1-metyl-3-butenyl, 2-metyl-3-butenyl, 3-metyl-3-butenyl, 1,1-dimetyl-2-propenyl, 1,2-dimetyl-1-propenyl, 1,2-dimetyl-2-propenyl, 1-etyl-1-propenyl, 1-etyl-2-propenyl, 1-hexenyl, 2-hexenyl, 3-hexenyl, 4-hexenyl, 5-hexenyl, 1-metyl-1-pentenyl, 2-metyl-1-pentenyl, 3-

metyl-1-pentenyl, 4-metyl-1-pentenyl, 1-metyl-2-pentenyl, 2-metyl-2-pentenyl, 3-metyl-2-pentenyl, 4-metyl-2-pentenyl, 1-metyl-3-pentenyl, 2-metyl-3-pentenyl, 3-metyl-3-pentenyl, 4-metyl-3-pentenyl, 1-metyl-4-pentenyl, 2-metyl-4-pentenyl, 3-metyl-4-pentenyl, 4-metyl-4-pentenyl, 1,1-dimetyl-2-butenyl, 1,1-dimetyl-3-butenyl, 1,2-dimetyl-1-butenyl, 1,2-dimetyl-2-butenyl, 1,2-dimetyl-3-butenyl, 1,3-dimetyl-1-butenyl, 1,3-dimetyl-2-butenyl, 1,3-dimetyl-3-butenyl, 2,2-dimetyl-3-butenyl, 2,3-dimetyl-1-butenyl, 2,3-dimetyl-2-butenyl, 2,3-dimetyl-3-butenyl, 3,3-dimetyl-1-butenyl, 3,3-dimetyl-2-butenyl, 1-etyl-1-butenyl, 1-etyl-2-butenyl, 1-etyl-3-butenyl, 2-etyl-1-butenyl, 2-etyl-2-butenyl, 2-etyl-3-butenyl, 1,1,2-trimetyl-2-propenyl, 1-etyl-1-metyl-2-propenyl, 1-etyl-2-metyl-1-propenyl và 1-etyl-2-metyl-2-propenyl;

alkynyl: các nhóm hydrocacbon mạch thẳng hoặc mạch nhánh có 2 tới 8 nguyên tử cacbon và một liên kết ba ở vị trí bất kỳ, ví dụ, C₂-C₆-alkynyl, như ethynyl, 1-propynyl, 2-propynyl, 1-butylnyl, 2-butylnyl, 3-butylnyl, 1-metyl-2-propynyl, 1-pentynyl, 2-pentynyl, 3-pentynyl, 4-pentynyl, 1-metyl-2-butylnyl, 1-metyl-3-butylnyl, 2-metyl-3-butylnyl, 3-metyl-1-butylnyl, 1,1-dimetyl-2-propynyl, 1-etyl-2-propynyl, 1-hexynyl, 2-hexynyl, 3-hexynyl, 4-hexynyl, 5-hexynyl, 1-metyl-2-pentynyl, 1-metyl-3-pentynyl, 1-metyl-4-pentynyl, 2-metyl-3-pentynyl, 2-metyl-4-pentynyl, 3-metyl-1-pentynyl, 3-metyl-4-pentynyl, 4-metyl-1-pentynyl, 4-metyl-2-pentynyl, 1,1-dimetyl-2-butylnyl, 1,1-dimetyl-3-butylnyl, 1,2-dimetyl-3-butylnyl, 2,2-dimetyl-3-butylnyl, 3,3-dimetyl-1-butylnyl, 1-etyl-2-butylnyl, 1-etyl-3-butylnyl, 2-etyl-3-butylnyl và 1-etyl-1-metyl-2-propynyl;

xycloalkyl: nhóm hydrocacbon no đơn vòng có 3 đến 8 phần tử trong vòng cacbon, như xyclopropyl, xyclobutyl, xyclopentyl và xyclohexyl;

xycloalkenyl: các nhóm hydrocacbon không thơm đơn vòng có 3 đến 8 phần tử trong vòng cacbon có ít nhất một liên kết đôi, như xyclopenten-1-yl, xyclohexen-1-yl, xyclohepta-1,3-dien-1-yl;

alkoxycarbonyl: nhóm alkoxy có 1 đến 6 nguyên tử cacbon (như đề cập bên trên) nó được gắn với khung thông qua nhóm carbonyl (-CO-);

haloxycloalkyl: các nhóm hydrocacbon no đơn vòng có 3 đến 8 phần tử trong vòng cacbon (như đề cập bên trên), trong đó trong các nhóm này một số hoặc tất cả các nguyên tử hydro có thể được thế bằng các nguyên tử halogen như đề cập bên trên,

ví dụ, (nhưng không bị giới hạn) 2-floxyclopropyl, 2,2-difloxyclopropyl, 3,3-difloxyclobutyl, 2-floxyclopentyl, 3-floxyclopentyl;

heteroxycyl: dị vòng không no một phần hoặc no có 3 tới 15 phần tử chứa 1 đến 4 dị nguyên tử được chọn từ nhóm bao gồm oxy, nitơ và lưu huỳnh: mono-, bi- hoặc các dị vòng trixyclic chứa, ngoài các phần tử của vòng cacbon, 1 tới 3 nguyên tử nitơ và/hoặc một nguyên tử oxy hoặc lưu huỳnh hoặc một hoặc hai nguyên tử oxy và/hoặc lưu huỳnh; nếu vòng chứa nhiều nguyên tử oxy, chúng không liên kế trực tiếp; như, ví dụ, (nhưng không bị giới hạn), oxiranyl, aziridinyl, 2-tetrahydrofuranyl, 3-tetrahydrofuranyl, 2-tetrahydrothienyl, 3-tetrahydrothienyl, 2-pyrrolidinyl, 3-pyrrolidinyl, 3-isoxazolidinyl, 4-isoxazolidinyl, 5-isoxazolidinyl, 3-isothiazolidinyl, 4-isothiazolidinyl, 5-isothiazolidinyl, 3-pyrazolidinyl, 4-pyrazolidinyl, 5-pyrazolidinyl, 2-oxazolidinyl, 4-oxazolidinyl, 5-oxazolidinyl, 2-thiazolidinyl, 4-thiazolidinyl, 5-thiazolidinyl, 2-imidazolidinyl, 4-imidazolidinyl, 1,2,4-oxadiazolidin-3-yl, 1,2,4-oxadiazolidin-5-yl, 1,2,4-thiadiazolidin-3-yl, 1,2,4-thiadiazolidin-5-yl, 1,2,4-triazolidin-3-yl, 1,3,4-oxadiazolidin-2-yl, 1,3,4-thiadiazolidin-2-yl, 1,3,4-triazolidin-2-yl, 2,3-dihydrofur-2-yl, 2,3-dihydrofur-3-yl, 2,4-dihydrofur-2-yl, 2,4-dihydrofur-3-yl, 2,3-dihydrothien-2-yl, 2,3-dihydrothien-3-yl, 2,4-dihydrothien-2-yl, 2,4-dihydrothien-3-yl, 2-pyrrolin-2-yl, 2-pyrrolin-3-yl, 3-pyrrolin-2-yl, 3-pyrrolin-3-yl, 2-isoxazolin-3-yl, 3-isoxazolin-3-yl, 4-isoxazolin-3-yl, 2-isoxazolin-4-yl, 3-isoxazolin-4-yl, 4-isoxazolin-4-yl, 2-isoxazolin-5-yl, 3-isoxazolin-5-yl, 4-isoxazolin-5-yl, 2-isothiazolin-3-yl, 3-isothiazolin-3-yl, 4-isothiazolin-3-yl, 2-isothiazolin-4-yl, 3-isothiazolin-4-yl, 4-isothiazolin-4-yl, 2-isothiazolin-5-yl, 3-isothiazolin-5-yl, 4-isothiazolin-5-yl, 2,3-dihydropyrazol-1-yl, 2,3-dihydropyrazol-2-yl, 2,3-dihydropyrazol-3-yl, 2,3-dihydropyrazol-4-yl, 2,3-dihydropyrazol-5-yl, 3,4-dihydropyrazol-1-yl, 3,4-dihydropyrazol-3-yl, 3,4-dihydropyrazol-4-yl, 3,4-dihydropyrazol-5-yl, 4,5-dihydropyrazol-1-yl, 4,5-dihydropyrazol-3-yl, 4,5-dihydropyrazol-4-yl, 4,5-dihydropyrazol-5-yl, 2,3-dihydrooxazol-2-yl, 2,3-dihydrooxazol-3-yl, 2,3-dihydrooxazol-4-yl, 2,3-dihydrooxazol-5-yl, 3,4-dihydrooxazol-2-yl, 3,4-dihydrooxazol-3-yl, 3,4-dihydrooxazol-4-yl, 3,4-dihydrooxazol-5-yl, 3,4-dihydrooxazol-2-yl, 3,4-dihydrooxazol-3-yl, 3,4-dihydrooxazol-4-yl, 2-piperidinyl, 3-piperidinyl, 4-piperidinyl, 1,3-dioxan-5-yl, 2-tetrahydropyranyl, 4-tetrahydropyranyl, 2-tetrahydrothienyl, 3-hexahydropyridazinyl, 4-hexahydropyridazinyl, 2-

hexahydropyrimidinyl, 4-hexahydropyrimidinyl, 5-hexahydropyrimidinyl, 2-piperazinyl, 1,3,5-hexahydrotriazin-2-yl và 1,2,4-hexahydrotriazin-3-yl;

aryl: hệ vòng carboxylic hoàn toàn không no có 6 đến 14 phần tử, ví dụ, (nhưng không bị giới hạn) phenyl, 1-naphthyl, 2-naphthyl, 2-anthryl, 1-anthryl;

heteroaryl: hệ vòng đơn vòng hoàn toàn không no có 5 hoặc 6 phần tử gồm có 1 đến 4 dị nguyên tử từ nhóm bao gồm oxy, nitơ và lưu huỳnh; nếu vòng chứa nhiều nguyên tử oxy, chúng không liền kề nhau;

alkoxy: gốc alkoxy mạch thẳng hoặc mạch nhánh, ví dụ, (nhưng không bị giới hạn), metoxy, etoxy, n-propoxy, 1-metyloxy, n-butoxy, 1-metylpropoxy, 2-metylpropoxy hoặc 1,1-dimetyloxy, cụ thể metoxy hoặc etoxy;

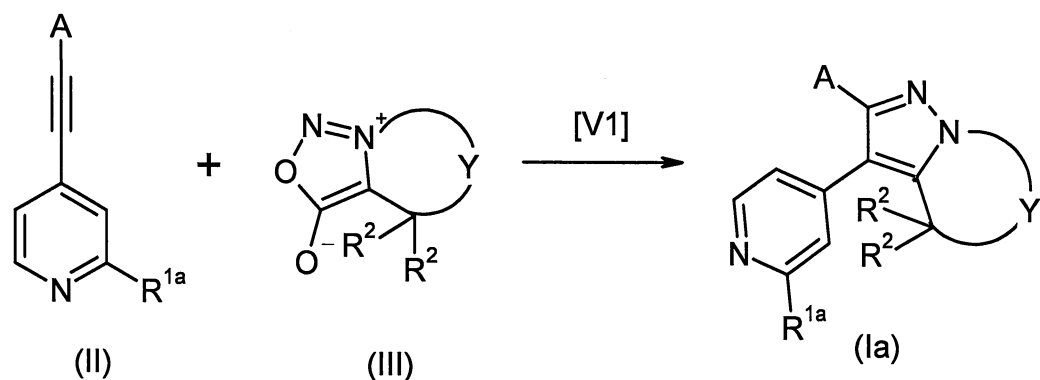
alkylthio: là alkylthio mạch thẳng hoặc mạch nhánh, ví dụ, (nhưng không bị giới hạn) metylthio, etylthio, n- và isopropylthio, n-, i-, sec- và tert-butylthio, n-pentylthio và các chất đồng phân của nó, như 1-, 2- và 3-metylbutylthio. Các nhóm alkylthio có thể được thế bởi 1 đến 3 nguyên tử halogen (tốt hơn là clo và/hoặc flo), ví dụ, (nhưng không bị giới hạn) di- và triflometylthio và diflometylthio.

Haloalkoxy: là gốc alkoxy mạch thẳng hoặc mạch nhánh trong đó một hoặc nhiều nguyên tử hydro được thế bằng flo, clo hoặc brom, ví dụ, (nhưng không bị giới hạn) -OCF₃, -OCHF₂,

Axyloxy: là axyloxy no hoặc không no mạch vòng, thẳng hoặc nhánh được kết nối qua nguyên tử oxy, ví dụ, (nhưng không bị giới hạn) axetyloxy, propionyloxy, isobutyryloxy.

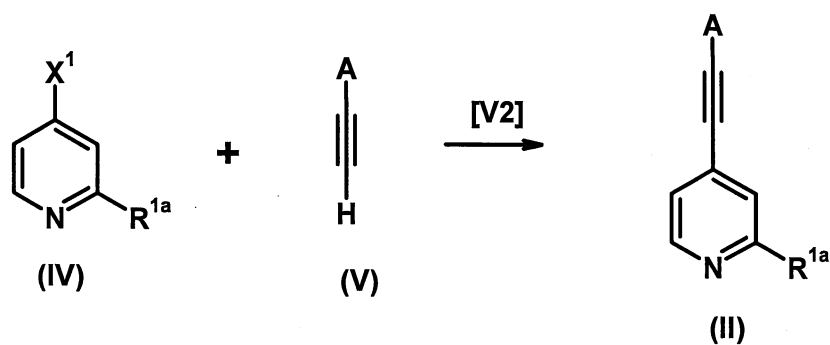
Sáng chế còn đề cập đến quy trình điều chế thienylaminopyrimidin có công thức (I) theo sáng chế, bao gồm ít nhất một trong các bước (a) đến (e) sau đây:

a) cho pyridinylalkyn có công thức chung (II) phản ứng với hợp chất hai vòng có công thức chung (III) để tạo ra pyrazol hai vòng có công thức chung (Ia), nếu thích hợp, khi có mặt của dung môi, theo sơ đồ phản ứng bên dưới (Sơ đồ 3).



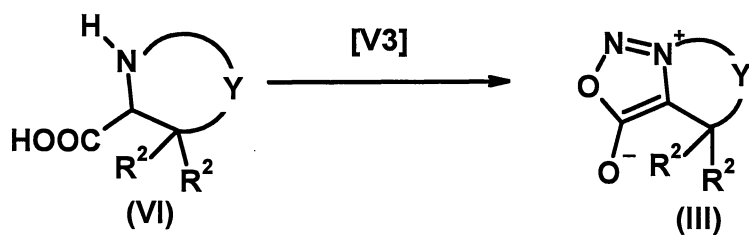
Sơ đồ 3: $R^{1a} = \text{H, halogen, S(O)}_m\text{Me, CN, C}_1\text{-C}_4\text{-alkyl}$

b) cho 4-halopyridin có công thức chung (IV) phản ứng với (het)arylalkyn có công thức chung (V) để tạo ra pyridinylalkyn có công thức chung (II), nếu thích hợp, khi có mặt chất xúc tác thích hợp và khi có mặt dung môi, theo sơ đồ phản ứng bên dưới (Sơ đồ 4):



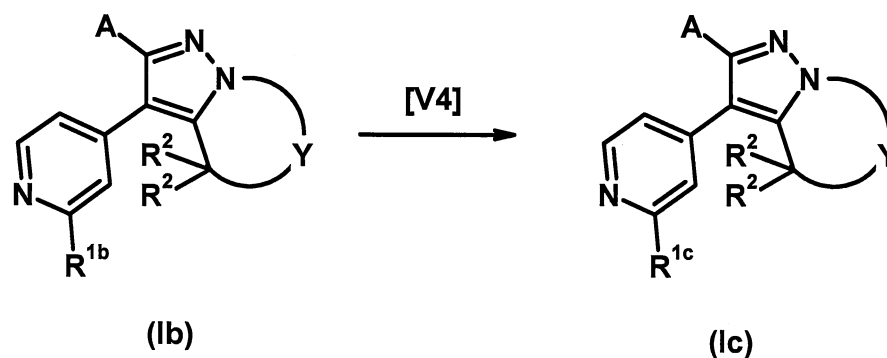
Sơ đồ 4: $X^1 = \text{Cl, brom, iot}$ $R^{1a} = \text{H, halogen, S(O)}_m\text{Me, CN, C}_1\text{-C}_4\text{-alkyl}$

c) cho axit amino có công thức chung (VI) phản ứng tạo ra hợp chất có công thức chung (III) theo sơ đồ phản ứng bên dưới (Sơ đồ 5):



Sơ đồ 5

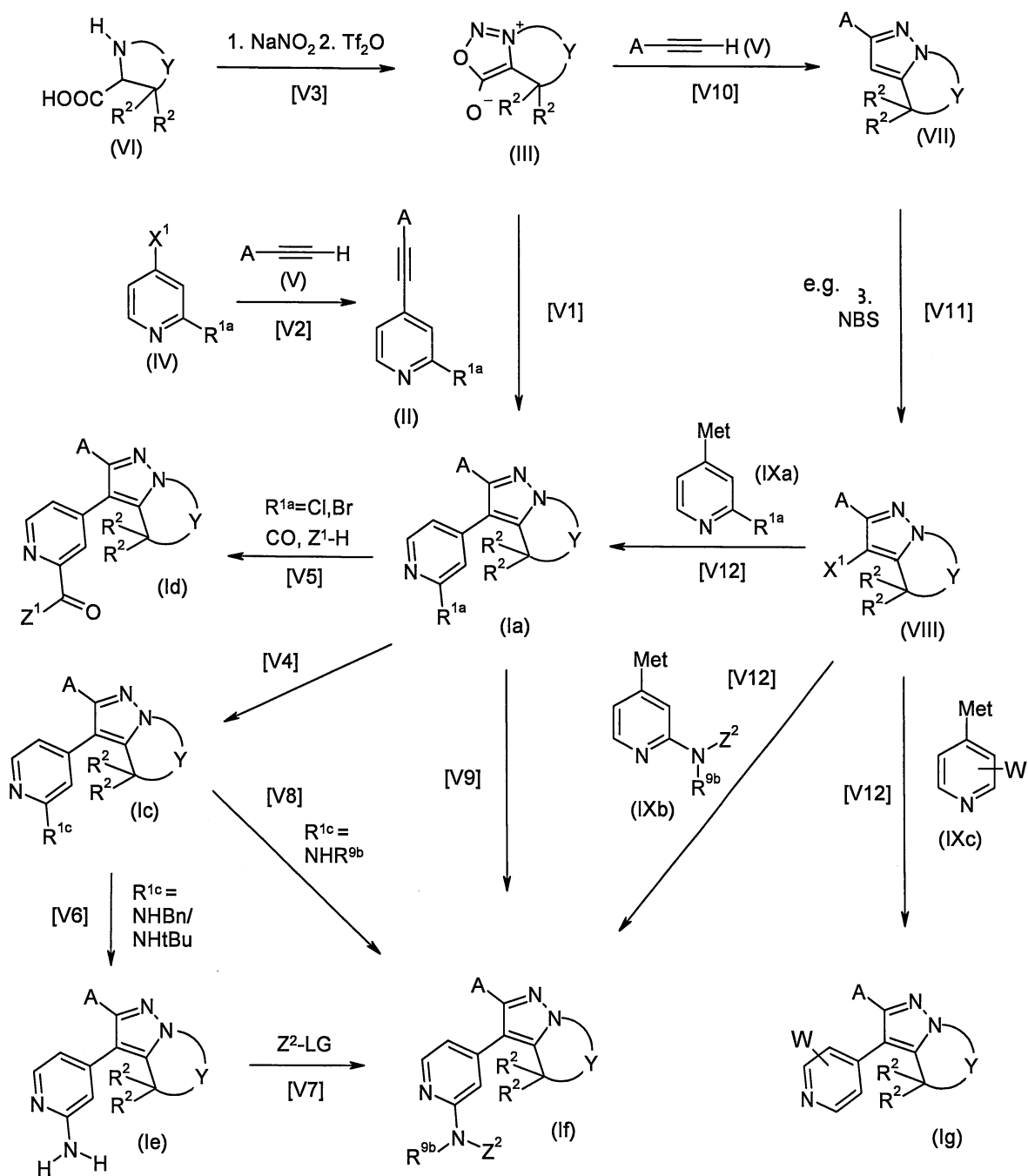
d) cho hợp chất có công thức chung (Ib) phản ứng để tạo ra hợp chất có công thức chung (Ic), nếu thích hợp, khi có mặt bazơ, nếu thích hợp, khi có mặt dung môi, theo sơ đồ bên dưới (Sơ đồ 6):



Sơ đồ 6: $R^{1b} = \text{halogen, } S(O)_m\text{Me}$ $R^{1c} = NR^{9a}R^{9b}, NR^{10}-NR^{11a}R^{11b}, CN, N=CR^{13a}R^{13b}, OR^{12}, SR^{12}$

Các pyridinylpyrazol hai vòng có công thức (I) theo sáng chế có thể được điều chế bởi các phương thức khác nhau. Dưới đây là các phương thức có thể sử dụng được trình bày dưới dạng sơ đồ. Trừ khi được định nghĩa khác, các gốc là như được định nghĩa trên đây.

Con đường tổng hợp tổng quát được đưa ra trong Sơ đồ 7:



Sơ đồ 7: X₁ là clo, brom hoặc iot, Z¹ là OR¹², NR^{9a}R^{9b}, Z² là R^{9a}CO, R¹²COO hoặc R¹²SO₂, LG là halogen, hydroxyl hoặc OZ²; Met là Sn(Bu)₃, B(OH)₂ hoặc 4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl, R^{1a} là H, halogen, S(O)_mMe, CN, C₁-C₄-alkyl

Bước quy trình [V1]:

Cho pyridinylalkyn có công thức chung (II) phản ứng với hợp chất hai vòng có công thức chung (III), nếu thích hợp, khi có mặt dung môi, để tạo ra pyrazol hai vòng có công thức chung (Ia).

Các dung môi thích hợp để thực hiện bước quy trình theo sáng chế là tất cả các dung môi trơ dưới các điều kiện phản ứng, và các hỗn hợp của chúng. Ưu tiên là các hydrocacbon thơm (ví dụ, benzen, toluen, xylen hoặc mesitylen).

Nhiệt độ phản ứng để thực hiện bước quy trình [V1] theo sáng chế là nằm trong khoảng từ 80°C tới 250°C, tốt hơn là nằm trong khoảng từ 120°C tới nhiệt độ sôi của dung môi được dùng. Thời gian phản ứng để thực hiện bước quy trình [V1] theo sáng chế là, phụ thuộc vào mức độ phản ứng, thường nằm trong khoảng từ 12 tới 96 giờ, ưu tiên là trong khoảng từ 16 tới 24 giờ.

Bước quy trình [V2]:

Cho 4-halopyridin có công thức chung (IV) ($X^1 = \text{clo, brom, iot}$) phản ứng với (het)arylalkyn có công thức chung (V) tạo ra, theo phản ứng Sonogashira, pyridinylalkyn có công thức chung (II). Các chất xúc tác thích hợp và các điều kiện phản ứng cho phản ứng Sonogashira có thể được thấy trong A. de Meijere/F. Diederich, (eds.) *Metal-Catalyzed Cross-Coupling Reactions*, Wiley-VCh, Weinheim, 2004, các 4-halopyridin (IV) cần cho mục đích này là đã có trên thị trường, hoặc bằng các phương pháp đã được biết đến từ tài liệu, có thể thu được các hợp chất này từ N-oxit (*Bioorg. Med. Chem. Lett.* 2009, 19, 2244-2248), 4-nitropyridin (*Chem. Pharm. Bull.* 1990, 38, 2446-58) hoặc 4-aminopyridin (*J. Prakt. Chem.*, 1959, 9, 164-72). Các (Het-)arylalkyn (V) là đã có trên thị trường hoặc có thể được thu từ (het-)aryl bromua hoặc iot tương ứng bởi phản ứng với, ví dụ, trimetylsilylaxetylen thông qua phản ứng Sonogashira được mô tả, ví dụ, trong *Org. Lett.* 2003, 42, 1842.

Bước quy trình [V3]:

Các axit amino có công thức chung (VI) có thể được nitrosat hóa bằng natri nitrit trong môi trường axit loãng (ví dụ, axit clohydric hoặc axit axetic) và sau đó có thể được phản ứng với tác nhân khử nước để tạo ra hợp chất có công thức chung (III), như được mô tả, ví dụ, trong *Heterocycles* 1990, 31, 481 hoặc *J. Med. Chem.* 2006, 49, 4623, Các tác nhân khử nước thích hợp là các este cloformic (ví dụ, ClCOOMe) hoặc các anhydrua (ví dụ, Tf_2O). Các axit amino vòng (VI) là đã có trên thị trường hoặc có

thể được điều chế bằng các phương pháp đã được biết đến từ tài liệu (ví dụ, *Tetrahedron* 2006, 62, 8687 hoặc *J. Med. Chem.* 2006, 49, 4623).

Bước quy trình [V4]:

Một cách thức điều chế các hợp chất có công thức chung (Ic, trong đó $R^{1c} = NR^{9a}R^{9b}$, $NR^{10}-NR^{11a}R^{11b}$, CN, $N=CR^{13a}R^{13b}$, OR^{12} , SR^{12}) được mô tả bởi bước quy trình [V4]. Để đạt được điều này, nhóm rời chuyển thích hợp trong (Ia), ví dụ, $R^{1a} =$ halogen, SMe, SOME hoặc SO_2 me được thế bởi các amin tương ứng $HNR^{9a}R^{9b}$, hydrazin $HNR^{10}-NR^{11a}R^{11b}$, imin $HN=CR^{13a}R^{13b}$, các rượu HOR^{10} hoặc các xyanua, nếu thích hợp, khi có mặt bazơ và nếu thích hợp, khi có mặt dung môi.

Các dung môi có thể được sử dụng để thực hiện bước quy trình [V4] theo sáng chế từ sơ đồ 7 là các amin $HNR^{9a}R^{9b}$ hoặc các rượu OR^{10} hoặc tất cả các dung môi thông thường khác là trợ dưới các điều kiện phản ứng, như ete vòng hoặc không vòng (dimetoxymetan, tetrahydrofuran, dioxan), hydrocacbon thơm (ví dụ, toluen), nitril (ví dụ, axetonitril, propionitril) và các amit (ví dụ, dimetylformamit, dimetylaxetamit, N-metylpyrrolidon), hoặc phản ứng có thể được tiến hành trong các hỗn hợp của hai hoặc nhiều dung môi này. Dung môi được ưu tiên là dimetylformamit hoặc axetonitril.

Các bazơ thích hợp là các hydroxit kim loại kiềm, các hydrua của kim loại kiềm, cacbonat kim loại kiềm, axetat kim loại kiềm, alkoxit kim loại kiềm, cũng như các amin bậc ba. Các bazơ được ưu tiên là natri hydrua, natri cacbonat, kali cacbonat và xezi cacbonat.

Nhiệt độ phản ứng để tiến hành bước quy trình [V4] theo sáng chế là nằm trong khoảng từ 0° tới 180°C , đặc biệt ưu tiên là ở nhiệt độ phòng đến 100°C . Phản ứng có thể được tiến hành dưới áp suất khí quyển hoặc dưới áp suất cao. Thời gian phản ứng, phụ thuộc vào mức độ phản ứng, thường nằm trong khoảng từ 5 phút tới 24 giờ, ưu tiên là trong khoảng từ 30 phút tới 6 giờ.

Bước quy trình [V5]:

Một cách để biến đổi halopyridin có công thức chung (Ia) ($R^{1a} = \text{Cl}, \text{Br}$) thành các este và các amit tương ứng được cung cấp bởi bước quy trình [V5]. Carbonyl hóa được xúc tác bằng Pd (Ia) với sự có mặt của rượu cho các este tương ứng có công thức chung (Id), trong đó $Z^1 = OR^{12}$, xem *J. Med. Chem.* 2006, 49, 3563-3580, ngược lại với

sự có mặt của các amin là các amit tương ứng (Id), trong đó $Z^1=NR^{9a}R^{9b}$ như được mô tả, ví dụ, trong *Chemistry Euro. J.* 2004, 10, 746-757, được tạo ra. Bản thân cacbon monoxit hoặc carbonyl kim loại (ví dụ, $Mo(CO)_6$) có thể làm thành nguồn CO.

Các dung môi có thể được sử dụng để thực hiện bước quy trình [V5] theo sáng chế từ sơ đồ 7 là các rượu hoặc các amin và thêm vào đó tất cả các dung môi thông thường khác là trợ trong các điều kiện phản ứng, như ete vòng hoặc không vòng (ví dụ, dioxan), hydrocacbon thơm (ví dụ, toluen), sulphoxit (ví dụ, DMSO) và các amit (ví dụ, dimetylformamit, dimetylaxetamit, N-metylpyrrolidon), hoặc phản ứng có thể được tiến hành trong các hỗn hợp của hai hoặc nhiều dung môi này. Các dung môi được ưu tiên là các rượu hoặc các amin, và ngoài ra có dimetylformamit.

Các bazơ thích hợp để tiến hành bước quy trình [V5] theo sáng chế từ sơ đồ 7 là cacbonat của kim loại kiềm (ví dụ, kali cacbonat), các amidin vòng (ví dụ, DBU) và các amin bậc ba (ví dụ, trietylamin).

Được ưu tiên để tiến hành bước quy trình [V5] theo sáng chế là các chất xúc tác paladi trong đó paladi có mặt với số oxy hóa là (0) hoặc (II), như, ví dụ, tetrakis(triphenylphosphin)paladi, bis(triphenylphosphin)paladi diclorua, bis(di-phenylphosphino)ferocenepaladi diclorua và paladi (II) axetat. Chất xúc tác có thể gồm có các phối tử chứa phospho, hoặc các phối tử chứa phospho có thể được thêm riêng biệt vào hỗn hợp phản ứng. Các phối tử chứa phospho được ưu tiên là tri-n-alkylphosphan, triarylphosphan, dialkylarylphosphan, alkyl diarylphosphan, trong đó ba phần tử thế ở phospho có thể là giống hoặc khác nhau và trong đó một hoặc nhiều phần tử thế có thể liên kết các nhóm phospho của nhiều phosphan, trong đó nguyên tử kim loại cũng có thể là một phần của sự gắn. Sự ưu tiên đặc biệt được đưa ra đối với phosphan như triphenylphosphan và 1,4-bis(diphenyl phosphino)propan và 1,1'-bis(diphenylphosphino)ferocen.

Phản ứng để tiến hành bước quy trình [V5] theo sáng chế được tiến hành ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ 25° tới 150°C, đặc biệt ưu tiên là ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ 80° tới 120°C. Phản ứng có thể được tiến hành dưới áp suất khí quyển hoặc áp suất cao. Thời gian phản ứng thay đổi phụ thuộc vào mức độ phản ứng và nhiệt độ phản ứng, nhưng thường thời gian phản ứng diễn ra trong vòng vài phút tới 20 giờ.

Bước quy trình [V6]:

Một cách thức để điều chế các hợp chất có công thức chung (Ie) được mô tả trong bước quy trình [V6]. Các amin không bền với axit thích hợp (ví dụ, $R^{1c}=NHBn$ (xem WO 2008/132434) hoặc $NHtBu$ (xem *Tetrahedron Lett.* 2005, 46, 3883-3887)) có thể được tách ra trong môi trường axit để cho (2-aminopyridin-4-yl)pyrazol (Ie). Các axit thích hợp cho mục đích này là các axit khoáng (ví dụ, H_2SO_4 , HCl), axit Lewis (ví dụ, BBr_3 , $AlCl_3$) hoặc các axit hữu cơ (ví dụ, F_3COOH , CF_3SO_3H). Các dung môi thích hợp là các axit hoặc các dung môi thông thường bất kỳ có tính trơ trong các điều kiện phản ứng, như các hydrocacbon được halogen hóa (ví dụ, diclometan) hoặc các hydrocacbon thơm (ví dụ, toluen). Nhiệt độ phản ứng nằm trong khoảng từ $0^\circ C$ đến $100^\circ C$. Thời gian phản ứng, phụ thuộc vào mức độ phản ứng, thường nằm trong khoảng từ 5 phút tới 24 giờ, ưu tiên là trong khoảng từ 30 phút tới 12 giờ.

Các bước quy trình [V7] và [V8]:

Thông qua các bước quy trình [V7] và [V8], bắt đầu với các amin (Ie) và (Ic cho R^{1c} = amin bậc một) và sử dụng carbonyl clorua hoặc carboxylic anhydrua, các amit tương ứng (nếu, trong đó $Z^2=R^{9a}CO$) có thể thu được, các carbamat tương ứng (nếu, trong đó $Z^2=R^{12}COO$) có thể thu được sử dụng cloformic este và các sulphonamit tương ứng (nếu, trong đó $Z^2=R^{12}SO_2$) có thể thu được sử dụng sulphonyl clorua hoặc sulphonic anhydrua. Các hợp chất có công thức chung Z^2-LG là đã có trên thị trường hoặc có thể được điều chế bằng cách sử dụng các phương pháp tổng hợp hữu cơ đã được biết đến từ tài liệu (R. C. Larock, *Comprehensive Organic Transformations*, ấn bản lần thứ 2, 1999, Wiley-VCH, trang 1929 ff. và tài liệu được trích dẫn ở đây).

Các dung môi thích hợp để tiến hành các bước quy trình [V7] và [V8] theo sáng chế là tất cả các dung môi thông thường là trơ trong các điều kiện phản ứng, ví dụ như ete vòng hoặc không vòng (ví dụ, tetrahydrofuran, dioxan), các hydrocacbon thơm (ví dụ, toluen), hydrocacbon được halogen hóa (ví dụ, diclometan), các xeton (ví dụ, axeton), amit (ví dụ, dimetylformamit) và các nitril (ví dụ, axetonitril), hoặc phản ứng có thể được thực hiện trong các hỗn hợp của hai hoặc nhiều dung môi này. Các dung môi được ưu tiên là tetrahydrofuran, diclometan và axetonitril.

Các chất chống muối axit có thể được sử dụng để tiến hành các bước quy trình [V7] và [V8] là các bazơ thích hợp. Sự ưu tiên được đưa ra đối với các amin bậc ba (ví dụ, triethylamin, etyldiisopropylamin), cacbonat kim loại kiềm (ví dụ, natri cacbonat) hoặc các hydroxit của kim loại kiềm (natri hydroxit).

Phản ứng để thực hiện các bước quy trình [V7] và [V8] thường được thực hiện ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ 0°C tới 100°C và ưu tiên ở nhiệt độ phòng, nhưng cũng có thể được thực hiện ở nhiệt độ hồi lưu của hỗn hợp phản ứng. Thời gian phản ứng thay đổi phụ thuộc vào mức độ phản ứng và nhiệt độ phản ứng, nhưng thường thời gian phản ứng diễn ra trong vòng vài phút tới 48 giờ.

Hoặc, carboxamit và sulphonamit có công thức chung (If) trong đó $Z^2=R^{9a}CO$, $R^{12}SO_2$ cũng có thể được tổng hợp từ các axit tương ứng Z^2-OH khi có mặt chất kết hợp, tương tự với các phương pháp được mô tả trong tài liệu (ví dụ, *Tetrahedron* 2005, 61, 10827-10852, và các tài liệu tham khảo được trích dẫn ở đây).

Các chất kết hợp thích hợp để thực hiện các bước quy trình [V7] và [V8] là, ví dụ, carbodiimit (ví dụ, N-(3-dimethylaminopropyl)-N'-ethylcarbodiimit, tùy ý với 4-dimethylaminopyridin hoặc 1-hydroxybenzotriazol), các ion phosphoni (ví dụ, bromotripyrolidinophosphoni hexaflophosphat) hoặc các ion uroni (ví dụ, O-(7-azabenzotriazol-1-yl)-N,N,N',N'-tetrametyluroni hexaflophosphat).

Nếu thích hợp, bazơ, như ví dụ, triethylamin hoặc etyldiisopropylamin, có thể được sử dụng trong phản ứng để tiến hành các bước quy trình [V7] và [V8]. Các dung môi có thể được sử dụng để tiến hành các bước quy trình [V7] và [V8] là tất cả các dung môi thông thường là trơ trong các điều kiện phản ứng, như được mô tả cho phản ứng với các clorua axit.

Bước quy trình [V9]:

Như được mô tả, ví dụ, trong DE-A 1 037 399, cũng có thể thực hiện đưa gốc amit trực tiếp khi có chất xúc tác Pd ban đầu với 2-halopyridin (Ia, trong đó $R^{1a} = \text{clo, brom, iot}$).

Bước quy trình [V10]:

Tương tự với các điều kiện phản ứng được mô tả trong bước quy trình [V1], các hai vòng có công thức chung (III) cũng có thể được phản ứng với (het)arylalkyn có công thức chung (V) để tạo ra pyrazol hai vòng có công thức chung (VII).

Bước quy trình [V11]:

4H-Pyrazol có công thức chung (VII) có thể được biến đổi với các chất halogen hóa thích hợp bởi các quy trình được biết đến từ tài liệu (ví dụ, *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 2008, 18, 509-512) thành 4-halopyrazol tương ứng ($X^1 = \text{Cl, Br, I}$) có công thức chung (VIII). Thích hợp để sử dụng làm các chất halogen hóa là, ví dụ, clo, brom, iot hoặc *N*-halosuxinimit (NCS, NBS, NIS) hoặc lưu huỳnhyl clorua và pyridini tribromua.

Sự halogen hóa để tiến hành bước quy trình [V11] có thể được tiến hành khi có mặt dung môi trợ trong các điều kiện phản ứng. Được ưu tiên là rượu (ví dụ, metanol, etanol), ete vòng hoặc không vòng (ví dụ, dietyl ete, tetrahydrofuran, dioxan), các amit (ví dụ, dimetylformamit, dimetylaxetamit), sulphoxit (ví dụ, dimetyl sulphoxit), hydrocacbon thơm (ví dụ, benzen, toluen), hydrocacbon được halogen hóa (ví dụ, diclometan, cloroform) và các axit carboxylic (ví dụ, axit axetic).

Nhiệt độ phản ứng nằm trong khoảng từ 0°C đến điểm sôi của dung môi, ưu tiên là ở nhiệt độ phòng đến 80°C. Thời gian phản ứng, phụ thuộc vào mức độ phản ứng, thường nằm trong khoảng từ 5 phút tới 24 giờ, ưu tiên là trong khoảng từ 30 phút tới 6 giờ.

Bước quy trình [V12]:

Cách nữa để tổng hợp pyridinylpyrazol (Ia), (If) và (Ig) theo sáng chế được cung cấp bởi bước quy trình [V12]. Trong phản ứng Suzuki (ví dụ, tương tự với *Organic Lett.* 2005, 7, 4753-4756), 4-halopyrazol (VIII) thu được trong bước quy trình [V11] được phản ứng với các pyridin có công thức chung (IXa/b/c). Các axit 4-pyridinylboronic và các este (IXa/b/c, $\text{Met}=\text{B}(\text{OH})_2$ hoặc 4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl) được dùng cho phản ứng Suzuki đã có trên thị trường hoặc có thể được điều chế từ 4-bromopyridin tương ứng bởi phản ứng được xúc tác Pd với bispinacolatodiboran (ví dụ, *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 2006, 16, 1277-1281) hoặc bằng phản ứng kim loại hóa/bo hóa (ví dụ, *Synthesis*, 2003, 469-483).

Các dung môi thích hợp cho phản ứng Suzuki là tất cả các dung môi thông thường trở dưới các điều kiện phản ứng, như rượu (ví dụ, etanol, etylen glycol), ete vòng hoặc không vòng (dimetoxymetan, tetrahydrofuran, dioxan), hydrocacbon thơm (ví dụ, toluen), xeton (ví dụ, axeton, etyl metyl xeton), các nitril (ví dụ, axetonitril, propionitril) và các amit (ví dụ, dimetylformamit, dimetylaxetamit, N-metylpyrrolidon) và nước, hoặc phản ứng có thể được tiến hành trong các hỗn hợp của hai hoặc nhiều dung môi này. Các dung môi được ưu tiên là dioxan và tetrahydrofuran.

Các bazơ thích hợp là các hydroxit kim loại kiềm, cacbonat kim loại kiềm, bicarbonat kim loại kiềm, axetat kim loại kiềm, alkoxit kim loại kiềm, cũng như các amin bậc ba. Các bazơ được ưu tiên là xezi cacbonat, natri cacbonat, kali cacbonat và kali axetat.

Được ưu tiên để tiến hành bước quy trình [V2] là các chất xúc tác paladi trong đó paladi có mặt có số oxy hóa là (0) hoặc (II), như, ví dụ, tetrakis(triphenylphosphin)paladi, bis(triphenylphosphin)paladi diclorua, và bis(diphenylphosphino)ferocenepaladi diclorua, hoặc và paladi(II) axetat và paladi (II) clorua.

Chất xúc tác có thể gồm có các phối tử chứa phospho, hoặc các phối tử chứa phospho có thể được thêm riêng biệt vào hỗn hợp phản ứng. Các phối tử chứa phospho được ưu tiên là tri-n-alkylphosphan, triarylphosphan, dialkylarylphosphan, alkyl diarylphosphan và/hoặc heteroarylphosphan như tripyridylphosphan và trifurylphosphan, trong đó ba phần tử thế ở phospho có thể là giống hoặc khác nhau và trong đó một hoặc nhiều phần tử thế có thể liên kết các nhóm phospho của nhiều phosphan, trong đó nguyên tử kim loại cũng có thể là một phần của sự gắn. Sự ưu tiên đặc biệt được đưa ra đối với các phosphan như triphenylphosphan, tri-tert-butylphosphan, trixyclohexylphosphan.

Phản ứng ghép Suzuki được tiến hành ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ 25° tới 200°C, đặc biệt ưu tiên là ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ 80° tới 150°C. Thời gian phản ứng thay đổi phụ thuộc vào mức độ phản ứng và nhiệt độ phản ứng, nhưng thường kéo dài từ vài phút tới 48 giờ.

Trong phản ứng ghép C-C cho bước quy trình [V12], 4-halopyrazol (VIII) cũng có thể được phản ứng trong phản ứng Stille (ví dụ, tương tự với *Med. Chem. Lett.*

2006, 16, 3550) với pyridinylstannan (IXa/b/c, Met = Sn(alkyl)₃) để cho pyridinylpyrazol (Ia), (If) hoặc (Ig). Sự điều chế 4-pyridinylstannan (IX) cũng được biết đến từ tài liệu (ví dụ, *J. Med. Chem.* 2003, 46, 284-302; *Tetrahedron* 2004, 60, 6113-6120). Đối với phản ứng ghép Stille, lựa chọn chất xúc tác, nếu thích hợp là các muối halogenua vô cơ hoặc hữu cơ, nếu thích hợp là phối tử hoặc dung môi thích hợp ở các nhiệt độ thích hợp có thể thay đổi phụ thuộc vào chất alkyltin được dùng.

Các dung môi thích hợp cho phản ứng ghép Stille là tất cả các dung môi thông thường trừ dưới các điều kiện phản ứng, ete vòng hoặc không vòng (dimetoxymetan, tetrahydrofuran, dioxan), hydrocacbon thơm (ví dụ, toluen), các amit (ví dụ, dimetylformamit, dimetylaxetamit, N--metylpyrrolidon) và các sulphoxit (ví dụ, dimetyl sulphoxit), hoặc phản ứng có thể được tiến hành trong các hỗn hợp của hai hoặc nhiều dung môi này.

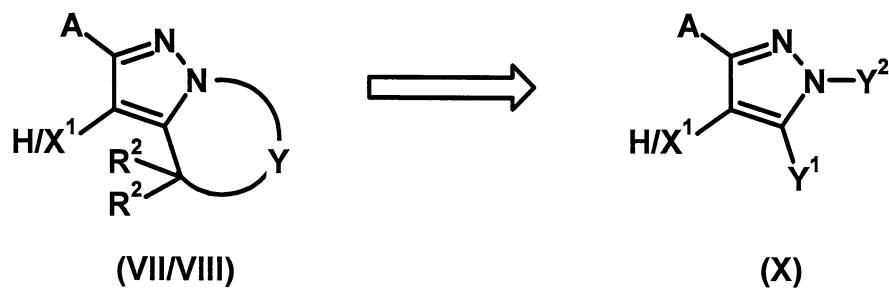
Các muối halogenua ưu tiên được sử dụng là, ví dụ, đồng halogenua (ví dụ, CuBr hoặc CuI), xezi halogenua (ví dụ, CsF) và tetraalkylamoni halogenua (ví dụ, TBAF).

Được ưu tiên là các chất xúc tác paladi trong đó paladi có mặt có số oxy hóa là (0) hoặc (II), như, ví dụ, tetrakis(triphenylphosphin)paladi, bis(triphenylphosphin)paladi diclorua, và bis(diphenylphosphino)ferocenepaladi diclorua, hoặc và paladi(II) axetat và paladi (II) clorua.

Chất xúc tác có thể gồm có các phối tử chứa phospho, hoặc các phối tử chứa phospho có thể được thêm riêng biệt vào hỗn hợp phản ứng. Các phối tử chứa phospho được ưu tiên là tri-n-alkylphosphan, triarylphosphan, dialkylarylphosphan, alkyl diarylphosphan và/hoặc heteroarylphosphan như tripyridylphosphan và trifurylphosphan, trong đó ba phần tử thế ở phospho có thể là giống hoặc khác nhau và trong đó một hoặc nhiều phần tử thế có thể liên kết các nhóm phospho của nhiều phosphan, trong đó nguyên tử kim loại cũng có thể là một phần của sự gắn. Sự ưu tiên đặc biệt được đưa ra đối với các phosphan như triphenylphosphan, tri-tert-butylphosphan, trixyclohexylphosphan.

Phản ứng ghép Stille được tiến hành ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ 25° tới 200°C, đặc biệt ưu tiên là ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ 60° tới 150°C. Thời gian phản ứng thay đổi phụ thuộc vào mức độ phản ứng và nhiệt độ phản ứng, nhưng thường kéo dài từ vài phút tới 48 giờ.

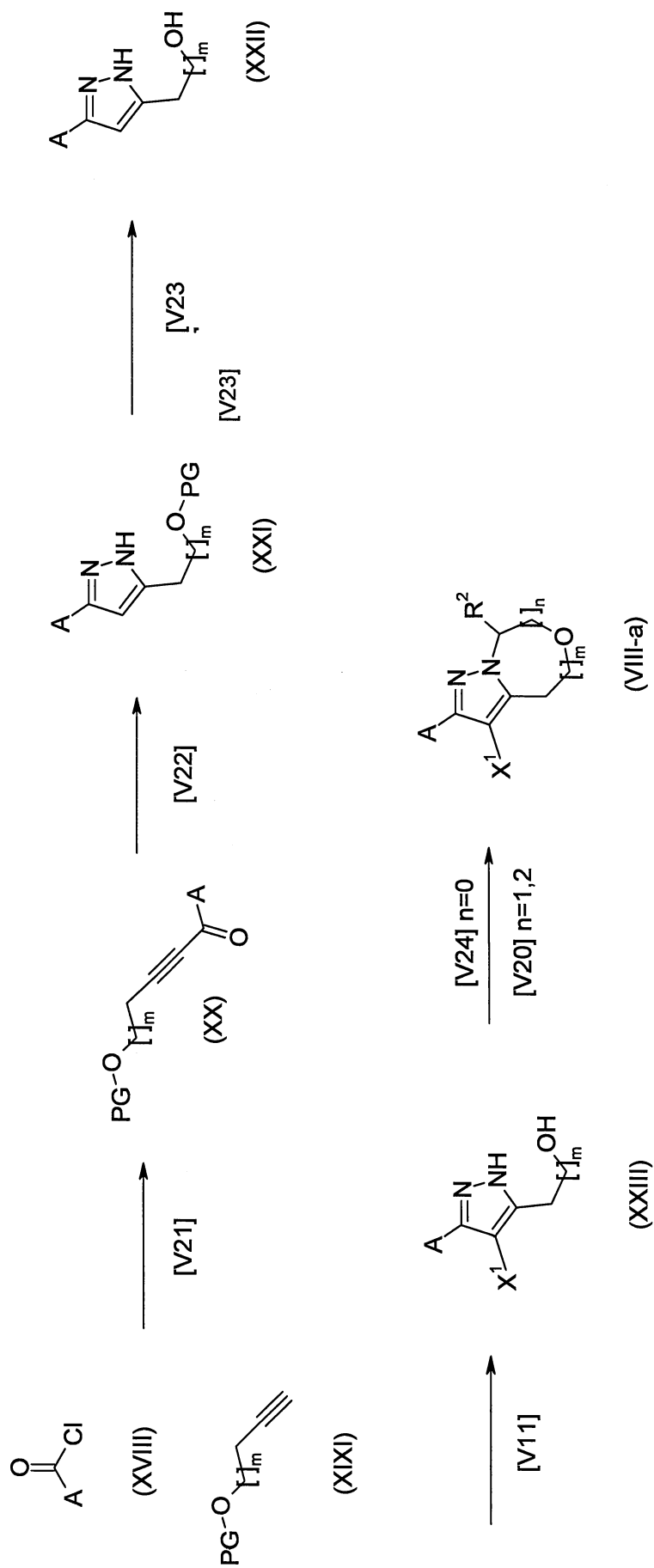
Hoặc đối với quy trình được mô tả trong sơ đồ 7, các chất trung gian pyrazol hai vòng (VII) và (VIII) cũng có thể được điều chế theo sơ đồ chung sau đây từ pyrazol vòng đơn (X) được cung cấp với các phần tử thích hợp Y^1 và Y^2 (Sơ đồ 8):



Sơ đồ 8: X^1 là clo, brom và iot; Y^1 và Y^2 là các nhóm chức thích hợp có thể được biến đổi thành $-C(R^2)_2-Y-$.

Các quy trình sau đây được chỉ ra ở đây là một cách thức ví dụ, để tổng hợp ngược được mô tả trong sơ đồ 8 (sơ đồ 9 và sơ đồ 10):

[illegible]



Sơ đồ 10: X¹ là clo, brom, và iot; m và n độc lập với nhau là 0, 1, 2; PG: nhóm bảo vệ, ví dụ, Bn hoặc THP

Bước quy trình [V14]:

Các este pyrazol có công thức chung (XI) có thể được biến đổi bằng các halogenua bisalkyliden thích hợp (ví dụ 1-bromo-2-cloetan), nếu thích hợp có mặt bazơ và nếu thích hợp có mặt dung môi, theo các quy trình đã được biết đến từ tài liệu (ví dụ, *Bioorg. Med. Chem.* 2008, 16, 10165-10171) thành N-haloalkylpyrazol este tương ứng ($X^1 = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) có công thức chung (XII). Các este pyrazol (XI) là đã có trên thị trường hoặc có thể được điều chế bằng các quy trình đã được biết đến từ tài liệu, ví dụ, Zhejiang Daxue Xuebao, Lixueban (2008), 35(6), 641-643, từ axetophenon sẵn có với chi phí thấp.

Các bazơ thích hợp là các hydroxit kim loại kiềm, hydrua kim loại kiềm, cacbonat kim loại kiềm, cũng như các amin bậc ba. Các bazơ được ưu tiên là natri hydrua, natri cacbonat, kali cacbonat hoặc xezi cacbonat. Thích hợp để sử dụng làm dung môi là tất cả các dung môi thông thường trở dưới các điều kiện phản ứng, ete vòng hoặc không vòng (dimetoxymetan, tetrahydrofuran, dioxan), hydrocacbon thơm (ví dụ, toluen), các nitril (ví dụ, axetonitril, propionitril), xeton (ví dụ, axeton) và các amit (ví dụ, dimetylformamit, dimetylaxetamit, N-metylpyrrolidon), hoặc phản ứng có thể được tiến hành trong các hỗn hợp của hai hoặc nhiều dung môi này. Các dung môi được ưu tiên là dimetylformamit, axeton hoặc axetonitril.

Các nhiệt độ phản ứng thường nằm trong khoảng từ 0°C đến 180°C, tốt hơn là ở nhiệt độ phòng đến 100°C.

Bước quy trình [V15]:

Theo các quy trình đã được biết đến từ tài liệu (ví dụ, WO 2007/018314), các este pyrazol có công thức chung (XI) hoặc (XII) có thể được chuyển hóa với các chất khử thích hợp thành các rượu tương ứng có công thức chung (XIII) hoặc (XIV).

Các chất khử thích hợp cho mục đích này là các alanat hoặc boronat (ví dụ, LiAlH_4 , DIBAL-H, LiBH_4 , cho $\text{R}^2 = \text{H}$) hoặc các hợp chất Grignard (ví dụ, MeMgCl for $\text{R}^2 = \text{Me}$).

Thích hợp để sử dụng làm dung môi là tất cả các dung môi thông thường trở trong các điều kiện phản ứng, như ete vòng hoặc không vòng (dimetoxymetan,

tetrahydrofuran, dioxan) hoặc các hydrocacbon (ví dụ, toluen, hexan) hoặc các hỗn hợp.

Bước quy trình [V16]:

Hydroxymethylpyrazol có công thức chung (XIII) có thể, nếu thích hợp, có thể được tạo vòng với sự có mặt của bazơ và, nếu thích hợp, với sự có mặt của dung môi để tạo ra pyrazol hai vòng tương ứng có công thức chung (VIIa). Các bazơ thích hợp là các hydroxit kim loại kiềm, các hydrua của kim loại kiềm, cacbonat kim loại kiềm, axetat kim loại kiềm, alkoxit kim loại kiềm, cũng như các amin bậc ba. Các bazơ được ưu tiên là natri hydrua, natri cacbonat, kali cacbonat hoặc xezi cacbonat.

Thích hợp để sử dụng làm dung môi là tất cả các dung môi thông thường trơ dưới các điều kiện phản ứng, ete vòng hoặc không vòng (dimetoxymetan, tetrahydrofuran, dioxan), hydrocacbon thơm (ví dụ, toluen), các nitril (ví dụ, axetonitril, propionitril), xeton (ví dụ, axeton) và các amit (ví dụ, dimetylformamit, dimetylaxetamit, N-methylpyrrolidon), hoặc phản ứng có thể được tiến hành trong các hỗn hợp của hai hoặc nhiều dung môi này. Các dung môi được ưu tiên là dimetylformamit, axeton hoặc axetonitril.

Các nhiệt độ phản ứng thường nằm trong khoảng từ 0°C đến 180°C, tốt hơn là ở nhiệt độ phòng đến 100°C.

Bước quy trình [V17]:

Theo các quy trình đã được biết đến từ tài liệu (ví dụ, *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 2007, 17, 5199-5203), hydroxymethylpyrazol có công thức chung (XIV) có thể được chuyển hóa với các chất halogen hóa thích hợp thành các halomethylpyrazol tương ứng ($X^1 = \text{Cl, Br, I}$) có công thức chung (XV). Thích hợp để sử dụng làm các chất halogen hóa là, ví dụ, thionyl clorua, pyridini tribromua, Br_2/PPh_3 hoặc I_2/PPh_3 . Nếu thích hợp, sự halogen hóa có thể được tiến hành khi có mặt dung môi trơ trong các điều kiện phản ứng. Sự ưu tiên được đưa ra đối với ete vòng hoặc không vòng (ví dụ, dietyl ete, tetrahydrofuran, dimetoxymetan), các amit (ví dụ, dimetylformamit, dimetylaxetamit), sulphoxit (ví dụ, dimetyl sulphoxit), hydrocacbon thơm (ví dụ, toluen), hydrocacbon được halogen hóa (ví dụ, diclometan, cloroform). Các nhiệt độ phản ứng thường nằm trong khoảng từ 0°C đến điểm sôi của dung môi, tốt hơn là ở nhiệt độ phòng đến 80°C.

Bước quy trình [V18]:

Halomethylpyrazol có công thức chung (XV) có thể được chuyển hóa thành các sulphonylmethylpyrazol tương ứng có công thức chung (XVI). Thích hợp để dùng làm các chất sulphua hóa là, ví dụ, hydro sulphit, natri sulphit, thioure hoặc kali thioaxetat.

Các dung môi thích hợp là tất cả các dung môi trơ dưới các điều kiện phản ứng và các hỗn hợp của chúng. Sự ưu tiên được đưa ra đối với các rượu (ví dụ, metanol, etanol), nước, ete vòng hoặc không vòng (ví dụ, dioxan, dimetoxietan), các amit (ví dụ, dimethylformamit, dimethylaxetamit), xeton (ví dụ, axeton) và nitril (ví dụ, axetonitril). Nếu thích hợp, các bazơ hỗ trợ, ví dụ, như, cacbonat kim loại kiềm (natri cacbonat, kali cacbonat, natri bicacbonat), các hydroxit kim loại kiềm (ví dụ, natri hydroxit, kali hydroxit), amin thơm (ví dụ, pyridin) hoặc amin bậc ba (triethylamin, etyldiisopropylamin) có thể được thêm vào hỗn hợp phản ứng.

Các nhiệt độ phản ứng thường nằm trong khoảng từ 0°C đến điểm sôi của dung môi, tốt hơn là ở nhiệt độ phòng đến 80°C.

Bước quy trình [V19]:

Theo các quy trình đã được biết đến từ tài liệu (ví dụ, Journal Medicinal Chemistry 2010, 53, 1473-1482), halomethylpyrazol có công thức chung (XV) có thể được chuyển hóa với các amin thích hợp H_2NR^3 thành aminomethylpyrazol có công thức chung (XVII).

Các dung môi thích hợp là tất cả các dung môi trơ dưới các điều kiện phản ứng và các hỗn hợp của chúng. Sự ưu tiên được đưa ra đối với các rượu (ví dụ, metanol, etanol), nước, ete vòng hoặc không vòng (ví dụ, dioxan, tetrahydrofuran), các amit (ví dụ, dimethylformamit, dimethylaxetamit), và nitril (ví dụ, axetonitril). Nếu thích hợp, các bazơ hỗ trợ, như, cacbonat kim loại kiềm (ví dụ, natri cacbonat, kali cacbonat, natri bicacbonat), amin thơm (ví dụ, pyridin) hoặc amin bậc ba (triethylamin, etyldiisopropylamin) có thể được thêm vào hỗn hợp phản ứng.

Các nhiệt độ phản ứng thường nằm trong khoảng từ 0°C đến điểm sôi của dung môi, tốt hơn là ở nhiệt độ phòng đến 80°C.

Bước quy trình [V20]:

Sử dụng các halogenua bisalkylen thích hợp (ví dụ 1,2-dibromoetan) hoặc

bisalkyliden mesylat hoặc các tosylat (ví dụ, etylen dimesylat), 5-sulphanylmetyl- hoặc 5-aminometylpyrazol có công thức chung (XVI) và (XVII) có thể được tạo vòng để tạo ra pyrazol hai vòng (VIIb) và (VIIc). Thích hợp để sử dụng làm dung môi là tất cả các dung môi thông thường trơ dưới các điều kiện phản ứng, ete vòng hoặc không vòng (dimetoxymetan, tetrahydrofuran, dioxan), hydrocacbon thơm (ví dụ, toluen), các nitril (ví dụ, axetonitril, propionitril), xeton (ví dụ, axeton) và các amit (ví dụ, dimetylformamit, dimetylaxetamit, N-metylpyrrolidon), hoặc phản ứng có thể được tiến hành trong các hỗn hợp của hai hoặc nhiều dung môi này. Các dung môi được ưu tiên là dimetylformamit, axeton hoặc axetonitril.

Nếu thích hợp, cũng có thể bổ sung các bazơ thích hợp, như cacbonat kim loại kiềm hoặc các amin bậc ba, vào hỗn hợp phản ứng. Các bazơ được ưu tiên là natri cacbonat hoặc kali cacbonat, cũng như trietylamin. Các nhiệt độ phản ứng thường nằm trong khoảng từ 0°C đến 180°C, tốt hơn là ở nhiệt độ phòng đến 100°C.

Bước quy trình [V21]:

Bắt đầu với benzoyl clorua đã có trên thị trường thích hợp và các alkyn đầu cuối có công thức chung (XVIII và XIX), theo các quy trình đã được biết đến từ tài liệu (ví dụ, Organic Letters 2008, 10, 2629-2632), có thể điều chế, trong phản ứng Sonogashira tương tự với bước quy trình [V2] hoặc dưới các điều kiện cơ bản (ví dụ, Organic Letters 2010, 12, 1952-1955), alkynyl aryl xeton có công thức chung (XX). Các bazơ thích hợp cho mục đích này ưu tiên là butyllithi và các hợp chất Grignard. Thích hợp để sử dụng làm dung môi là tất cả các dung môi thông thường trơ dưới các điều kiện phản ứng, ete vòng hoặc không vòng (dimetoxymetan, tetrahydrofuran, dietyl ete) hoặc các hydrocacbon (ví dụ, toluen, hexan), hoặc phản ứng có thể được tiến hành trong các hỗn hợp của hai hoặc nhiều dung môi này. Các nhiệt độ phản ứng thường nằm trong khoảng từ 78°C đến điểm sôi của dung môi, tốt hơn là ở nhiệt độ phòng đến 70°C.

Bước quy trình [V22]:

Theo các quy trình đã được biết đến từ tài liệu (ví dụ, Tetrahedron Letters 1989, 30, 2049-52), alkynyl aryl xeton có công thức chung (XX) có thể được chuyển hóa với hydrazin thành các pyrazol tương ứng (XXI). Các dung môi thích hợp cho phản ứng là

ruợu, như metanol và etanol, nước và axit axetic, cũng như các hỗn hợp của chúng. Các nhiệt độ phản ứng thường nằm trong khoảng từ 0°C đến điểm sôi của dung môi, tốt hơn là ở nhiệt độ phòng đến 80°C.

Bước quy trình [V23]:

Trong bước quy trình [V23], các ruợu pyrazol được che bằng nhóm bảo vệ thích hợp có thể được chuyển hóa bởi các quy trình đã được biết đến từ tài liệu (xem Greene/Wuts Protective Groups trong Organic Synthesis, Wiley, 1999 hoặc Kocienski, Protecting Groups, Thieme, 2005) thành các ruợu không có pyrazol. Do đó, ví dụ, nhóm bảo vệ benzyl có thể được loại bỏ bằng cách thủy phân hoặc sử dụng FeCl_3 , và nhóm bảo vệ THP không bền axit có thể được loại bỏ bằng cách sử dụng axit toluensulphonic.

Bước quy trình [V24]:

Theo các quy trình được biết đến từ tài liệu (xem Synthesis 1979, 440-1), 5-sulphanylalkyl-, 5-aminoalkyl- và 5-hydroxyalkylpyrazol có công thức chung (XVI), (XVII) và (XIII) có thể được tạo vòng cho các pyrazol hai vòng có công thức chung (VIIb), (VIIc) và (VIIIa). Để đạt được điều này, các aldehyt tương ứng (ví dụ, formaldehyt, axetaldehyt) hoặc các xeton (ví dụ, axeton) được sử dụng làm các chất phản ứng. Nếu thích hợp, axit, ví dụ, axit p-toluensulphonic, có thể được bổ sung vào hỗn hợp phản ứng làm chất xúc tác. Thích hợp để sử dụng làm dung môi là chính các chất phản ứng (ví dụ, axeton) hoặc các dung môi khác bất kỳ là trơ dưới các điều kiện phản ứng, như các ete xyclic và axyclic (dimetoxymetan, tetrahydrofuran, dioxan), hydrocacbon thơm (ví dụ, toluen), nitril (ví dụ, axetonitril, propionitril), các amit (ví dụ, dimetylformamit, dimetylaxetamit, N-metylpyrrolidon). Các nhiệt độ phản ứng thường nằm trong khoảng từ 0°C đến điểm sôi của dung môi, tốt hơn là ở nhiệt độ phòng đến 100°C.

Con đường tổng hợp khác thành các hợp chất VII và VIII được thấy trong sơ đồ 11:

Bước quy trình [V25]:

Theo các quy trình đã được biết đến từ tài liệu (ví dụ, *J. Am. Chem. Soc.* 1981, 103, 7743-7752), sự phản ứng của các hợp chất có công thức chung (XXIV) với benzophenon hydrazon, nếu thích hợp khi có mặt dung môi và bazơ, tạo ra các hợp chất có công thức chung (XXV). Các hợp chất (XXIV) được yêu cầu cho mục đích này là đã có trên thị trường hoặc có thể thu được, ví dụ, bằng các phương pháp được biết đến từ tài liệu từ lacton (*Synthesis* 2008, 20, 3229-3236).

Thích hợp để sử dụng làm các dung môi để thực hiện bước quy trình [V25] là tất cả các dung môi là trơ dưới các điều kiện phản ứng, và các hỗn hợp của chúng. Sự ưu tiên được đưa ra đối với diclometan. Các bazơ thích hợp là pyridin và các amin bậc ba. Sự ưu tiên được đưa ra đối với pyridin. Nhiệt độ phản ứng nằm trong khoảng từ 0°C đến 100°C. Thời gian để thực hiện phản ứng, phụ thuộc vào mức độ phản ứng, thường nằm trong khoảng từ 12 tới 96 giờ, ưu tiên là trong khoảng từ 16 tới 24 giờ.

Bước quy trình [V26]:

Theo các quy trình đã được biết đến từ tài liệu (ví dụ, *J. Am. Chem. Soc.* 1981, 103, 7743-7752), sự phản ứng của các hợp chất có công thức chung (XXV), nếu thích hợp khi có mặt dung môi và bazơ, tạo ra các hợp chất có công thức chung (XXVI).

Các dung môi thích hợp là tất cả các dung môi trơ dưới các điều kiện phản ứng và các hỗn hợp của chúng. Sự ưu tiên được đưa ra đối với tetrahydrofuran. Các bazơ thích hợp là các hydrua của kim loại kiềm. Sự ưu tiên được đưa ra đối với natri hydrua. Nhiệt độ phản ứng nằm trong khoảng từ 0°C đến 50°C. Thời gian phản ứng, phụ thuộc vào mức độ phản ứng, thường nằm trong khoảng từ 12 tới 96 giờ, ưu tiên là trong khoảng từ 16 tới 24 giờ.

Bước quy trình [V27]:

Theo các phương pháp đã được biết đến từ tài liệu (ví dụ, WO2007018818), sự phản ứng của các hợp chất có công thức chung (XXVI), nếu thích hợp khi có mặt dung môi và axit, cho N-aminolactam có công thức chung (XXVII).

Các dung môi thích hợp để thực hiện bước quy trình [V27] là tất cả các dung môi là trơ dưới các điều kiện phản ứng, và các hỗn hợp của chúng. Sự ưu tiên được đưa ra

đối với tetrahydrofuran. Các axit thích hợp là các axit vô cơ, cũng như các axit hữu cơ. Sự ưu tiên được đưa ra đối với axit clohydric. Nhiệt độ phản ứng để thực hiện bước quy trình [V27] nằm trong khoảng từ 0°C đến 50°C. Thời gian phản ứng, phụ thuộc vào mức độ phản ứng, thường nằm trong khoảng từ 5 phút tới 2 giờ, ưu tiên là 30 phút.

Bước quy trình [V28]:

Theo các phương pháp đã được biết đến từ tài liệu (ví dụ, *Tetrahedron* 2007, 63, 11763-11770), sự phản ứng của N-aminolactam có công thức chung (XXVII) với các ketoeste (XXIX) để tạo ra hợp chất có công thức chung (XXIX). Các ketoeste (XXVIII) được yêu cầu cho mục đích này là đã có trên thị trường, hoặc chúng có thể thu được, ví dụ, bằng các phương pháp đã được biết đến từ tài liệu (*Helv. Chim. Acta* 2010, 93, 1261-1273).

Các dung môi thích hợp là tất cả các dung môi trơ dưới các điều kiện phản ứng và các hỗn hợp của chúng. Sự ưu tiên được đưa ra đối với pyridin. Nhiệt độ phản ứng nằm trong khoảng từ 0°C đến 50°C. Thời gian để thực hiện bước quy trình [V28], phụ thuộc vào mức độ phản ứng, thường nằm trong khoảng từ 24 tới 72 giờ, ưu tiên là 48 giờ.

Bước quy trình [V29]:

Như được mô tả, ví dụ, trong *Eur. J. Med. Chem* 1984, 19, 215-218, các hợp chất có công thức chung (XXIX) có thể được tạo vòng dưới các điều kiện cơ bản để tạo ra pyrazol este có công thức chung (XXX).

Các dung môi thích hợp là tất cả các dung môi trơ dưới các điều kiện phản ứng và các hỗn hợp của chúng. Sự ưu tiên được đưa ra đối với dimetylformamit. Các bazơ thích hợp là các hydrua của kim loại kiềm và cacbonat kim loại kiềm. Sự ưu tiên được đưa ra đối với xezi cacbonat. Nhiệt độ phản ứng nằm trong khoảng từ 0°C đến 150°C. Nhiệt độ phản ứng, phụ thuộc vào mức độ phản ứng, thường nằm trong khoảng từ 2 tới 8 giờ, ưu tiên là trong khoảng từ 4 tới 6 giờ.

Bước quy trình [V30]:

Sự thủy phân các pyrazol este có công thức chung (XXX) theo các phương pháp đã được biết đến từ tài liệu (ví dụ, *Org. Lett.* **2005**, 7, 4753-4756) cho các axit pyrazolcarboxylic có công thức chung (XXXI).

Các dung môi thích hợp là tất cả các dung môi trơ dưới các điều kiện phản ứng và các hỗn hợp của chúng. Sự ưu tiên được đưa ra đối với metanol. Các bazơ thích hợp là các hydroxit của kim loại kiềm. Sự ưu tiên được đưa ra đối với natri hydroxit. Nhiệt độ phản ứng nằm trong khoảng từ 0°C đến 100°C. Thời gian phản ứng, phụ thuộc vào mức độ phản ứng, thường nằm trong khoảng từ 1 tới 8 giờ, ưu tiên là trong khoảng từ 3 tới 6 giờ.

Bước quy trình [V31]:

Sự phản ứng của các lacton có công thức chung (XXXII) với benzophenon hydrazon khi có mặt axit Lewis để tạo ra hợp chất có công thức chung (XXXIII).

Các dung môi thích hợp là tất cả các dung môi trơ dưới các điều kiện phản ứng và các hỗn hợp của chúng. Sự ưu tiên được đưa ra đối với diclometan. Các axit Lewis thích hợp là các dẫn xuất trialkylalumin. Sự ưu tiên được đưa ra đối với trietylalumin. Nhiệt độ phản ứng nằm trong khoảng từ 0°C đến 100°C. Thời gian phản ứng, phụ thuộc vào mức độ phản ứng, thường nằm trong khoảng từ 1 tới 8 giờ, ưu tiên là trong khoảng từ 3 tới 6 giờ.

Bước quy trình [V32]:

Sự phản ứng của các rượu có công thức chung (XXXIII) với chất halogen hóa thích hợp theo các phương pháp đã được biết đến từ tài liệu (ví dụ, bài báo "Triphenylphosphine-Carbon Tetrabromide" trong *Encyclopaedia Reagents for Organic Synthesis*, Wiley, 1995) cho các hợp chất có công thức chung (XXV).

Các dung môi thích hợp là tất cả các dung môi trơ dưới các điều kiện phản ứng và các hỗn hợp của chúng. Sự ưu tiên được đưa ra đối với diclometan. Các tác nhân halogen hóa thích hợp là, ví dụ, các tổ hợp của triphenylphosphan/hydrocacbon được halogen hóa, và các hợp chất halogen-lưu huỳnh (ví dụ, thionyl clorua). Sự ưu tiên được đưa ra đối với tổ hợp của triphenylphosphan/cacbon tetrabromua. Nhiệt độ phản ứng nằm trong khoảng từ 0°C đến 100°C. Thời gian phản ứng, phụ thuộc vào mức độ phản ứng, thường nằm trong khoảng từ 30 phút tới 8 giờ, ưu tiên là 1 giờ.

Bước quy trình [V33]:

Sự phản ứng của các hợp chất có công thức chung (XXXIII) với axit halosulponic và, nếu thích hợp, có bazơ cho các hợp chất có công thức chung (XXVI).

Các dung môi thích hợp là tất cả các dung môi trơ dưới các điều kiện phản ứng và các hỗn hợp của chúng. Sự ưu tiên được đưa ra đối với diclometan và tetrahydrofuran. Các axit halosulphonic thích hợp là, ví dụ, metylsulphonyl clorua và tolylsulphonyl clorua. Sự ưu tiên được đưa ra đối với metylsulphonyl clorua. Các bazơ thích hợp là các dẫn xuất của pyridin và các hydrua kim loại kiềm. Sự ưu tiên được đưa ra đối với pyridin và natri hydrua. Nhiệt độ phản ứng nằm trong khoảng từ 0°C đến 100°C. Thời gian phản ứng, phụ thuộc vào mức độ phản ứng, thường nằm trong khoảng từ 6 tới 48 giờ, ưu tiên là trong khoảng từ 12 tới 24 giờ.

Bước quy trình [V34]:

Theo các quy trình đã được biết đến từ tài liệu (ví dụ, *Eur. J. Med. Chem* 2010, 45, 3384-3388), sự phản ứng của các N-aminolactam có công thức chung (XXVII) với axetophenon có công thức chung (XXXIV), nếu thích hợp khi có mặt dung môi, để tạo ra hợp chất có công thức chung (XXXV). Các axetophenon (XXXIV) được yêu cầu cho mục đích này là đã có trên thị trường.

Các dung môi thích hợp là tất cả các dung môi trơ dưới các điều kiện phản ứng và các hỗn hợp của chúng. Sự ưu tiên được đưa ra đối với etanol. Nhiệt độ phản ứng nằm trong khoảng từ 0°C đến 100°C. Thời gian phản ứng, phụ thuộc vào mức độ phản ứng, thường nằm trong khoảng từ 6 giờ tới 12 giờ, ưu tiên là 12 giờ.

Bước quy trình [V35]:

Theo các phương pháp đã được biết đến từ tài liệu (ví dụ, *Zeitschrift für Naturforschung-B* 2003, 58, 678-685), sự phản ứng của các hợp chất có công thức chung (XXXV) với axetic anhydrua, nếu thích hợp khi có mặt dung môi, tạo ra các pyrazol có công thức chung (VII).

Các dung môi thích hợp là tất cả các dung môi trơ dưới các điều kiện phản ứng và các hỗn hợp của chúng. Sự ưu tiên được đưa ra đối với axetic hydrua. Nhiệt độ phản ứng nằm trong khoảng từ 0°C đến 150°C. Thời gian phản ứng, phụ thuộc vào

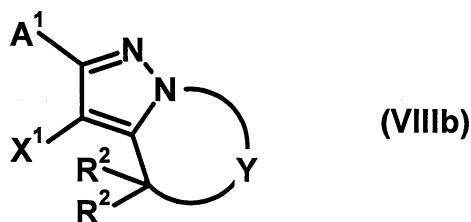
mức độ phản ứng, thường nằm trong khoảng từ 2 tới 8 giờ, ưu tiên là trong khoảng từ 4 tới 6 giờ.

Bước quy trình [V36]:

Sự phản ứng của các axit pyrazolcarboxylic có công thức chung (XXXI) với bazơ và tác nhân halogen hóa theo các phương pháp đã biết đến từ tài liệu (ví dụ, *Org. Lett.* 2005, 7, 4753-4756) cho các 5-halopyrazol có công thức chung (VIII).

Các dung môi thích hợp là tất cả các dung môi trơ dưới các điều kiện phản ứng và các hỗn hợp của chúng. Sự ưu tiên được đưa ra đối với dimetylformamit. Các tác nhân halogen hóa thích hợp là các chất phản ứng halosuxinimit. Sự ưu tiên được đưa ra đối với N-iodosuxinimit. Các bazơ thích hợp là các cacbonat của kim loại kiềm. Sự ưu tiên được đưa ra đối với natri bicacbonat. Nhiệt độ phản ứng nằm trong khoảng từ 0°C đến 100°C. Thời gian phản ứng, phụ thuộc vào mức độ phản ứng, thường nằm trong khoảng từ 1 giờ tới 48 giờ, ưu tiên là 12 giờ.

Mới và cũng là một phần của sáng chế là các hợp chất có công thức chung (VIIIb)



trong đó các ký hiệu có các nghĩa bên dưới:

A¹ là vòng phenyl có thể tùy ý được thế một hoặc nhiều lần ở vị trí 3, 4 hoặc 5 bởi R⁷, hoặc là vòng thiophenyl có thể tùy ý được thế một hoặc nhiều lần bởi R⁸,

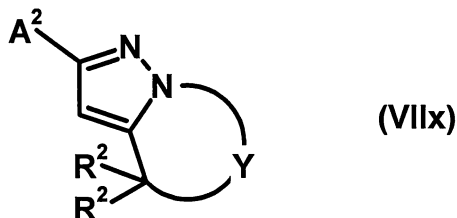
R², R⁷, R⁸ và Y có các nghĩa chung, được ưu tiên, đặc biệt ưu tiên hoặc ưu tiên đặc biệt hơn nữa được đưa ra ở trên và

X¹ là clo, brom, iot;

miễn là

3-bromo-5,6-dihydro-2-phenyl-4H-pyrazolo[1,2-b]pyrazol, 3-iodo-2-phenylpyrazolo[1,5-c]pyrimidin-7(6H)-thion và 3-bromo-2-phenylpyrazolo[1,5-c]pyrimidin-7(6H)-thion được loại trừ.

Mới và cũng là một phần của sáng chế là các hợp chất có công thức chung (VIIx)



trong đó các ký hiệu có các nghĩa sau đây:

A² là vòng thiophenyl tùy ý được thế một hoặc nhiều lần hoặc là vòng phenyl tùy ý được thế một hoặc nhiều lần ở vị trí 3, 4 hoặc 5, trong đó, các phần tử thế được chọn từ nhóm bao gồm F, Cl, Br, I, xyano, metyl, etyl, isopropyl, n-propyl, triflometyl, diflometyl, diclometyl, pentaflöetyl, metoxy, etoxy, n-propoxy, isopropoxy;

Y cùng với nguyên tử nitơ liên kề “1” và hai nguyên tử cacbon “2” và “3” tạo thành vòng heteroxylic không thơm có 5 đến 7 phần tử được chọn từ nhóm bao gồm H-2, H-3, H-4, H-5, H-6, H-7, H-8 và H-9 được thể hiện trong Sơ đồ 1, trong đó s là số có giá trị từ 0 tới 4;

R² có các nghĩa đặc biệt ưu tiên hoặc ưu tiên đặc biệt hơn nữa được đưa ra bên trên.

Sáng chế còn đề cập đến chế phẩm bảo vệ cây trồng để kiểm soát nấm không mong muốn và để giảm độc tố mycotoxin trong các cây và các bộ phận cây trồng, chế phẩm gồm có ít nhất một trong các dẫn xuất của pyridinylpyrazol hai vòng có công thức (I). Đây là các chế phẩm diệt nấm ưu tiên, các chế phẩm này gồm có các chất bổ trợ thích hợp về mặt nông nghiệp, các dung môi, các chất mang, các chất có hoạt tính bề mặt hoặc các chất cô đặc.

Hơn nữa, sáng chế đề cập đến phương pháp để kiểm soát các vi sinh vật không mong muốn và để làm giảm các độc tố mycotoxin trong các cây và bộ phận của cây, khác biệt ở chỗ các dẫn xuất pyridinylpyrazol hai vòng có công thức (I) theo sáng chế được áp dụng cho nấm gây bệnh ở cây và/hoặc môi trường sống của chúng.

Theo sáng chế, chất mang là chất hữu cơ hoặc vô cơ, tự nhiên hoặc tổng hợp mà được trộn lẫn hoặc được liên kết với các hoạt chất để cho khả năng áp dụng tốt hơn, đặc biệt là để áp dụng cho cây hoặc phần của cây hoặc hạt giống. Chất mang, có thể là chất rắn hoặc chất lỏng, thường tro và sẽ thích hợp để sử dụng trong nông nghiệp.

Các chất rắn hoặc lỏng thích hợp là: ví dụ, các muối amoni và các chất khoáng tự nhiên, như cao lanh, đá tan, đất sét, đá phấn, thạch anh, atapungit, monmorilonit hoặc diatomit, và các chất khoáng tổng hợp từ đất như silic dioxit nghiền mịn, nhôm oxit và các silicat tự nhiên hoặc tổng hợp, nhựa, sáp, phân rắn, nước, rượu, đặc biệt là butanol, các dung môi hữu cơ, chất khoáng và các dầu thực vật và các dẫn xuất của chúng. Hỗn hợp của các chất mang này cũng có thể được sử dụng. Các chất mang rắn thích hợp cho các hạt nhỏ là: ví dụ, các đá tự nhiên được nghiền và được phân hạt như là canxit, đá bột, đá hoa, sepiolit, dolomit, và các hạt nhân tạo của các bột hữu cơ và vô cơ, cũng như các hạt của vật liệu hữu cơ như mùn cưa, vỏ dừa, các lõi ngô và các thân cây thuốc lá.

Chất độn khí hóa lỏng hoặc các chất mang thích hợp là các chất lỏng mà ở dạng khí tại nhiệt độ môi trường xung quanh và dưới áp suất khí quyển, ví dụ, nhiên liệu sol khí, chẳng hạn như các hydrocacbon được halogen hóa, và còn butan, propan, nitơ và cacbon dioxit.

Các chất dính như cacboxymetylxeluloza và các polyme tự nhiên và tổng hợp dưới dạng bột, dạng hạt nhỏ hoặc dạng nhựa như gôm arabic, rượu polyvinyl và polyvinyl axetat, hoặc ngoài ra còn có các phospholipit tự nhiên như các cephalin và các lecithin và các phospholipit tổng hợp có thể được sử dụng trong các công thức. Các chất phụ gia có thể khác là các dầu khoáng và dầu thực vật.

Nếu các chất độn được sử dụng là nước, cũng có thể sử dụng các dung môi hữu cơ, ví dụ, các dung môi phụ trợ. Các dung môi lỏng phù hợp về cơ bản có tính thơm như xylen, toluen, hoặc các ankylnaptalen, các hydrocacbon béo được clo hóa hoặc thơm được clo hóa, như clobenzen, cloetylen hoặc metylen clorua, các hydrocacbon béo, như xyclohexan hoặc các parafin, ví dụ, về các phần cắt dầu mỏ, dầu khoáng và dầu thực vật, rượu, như butanol hoặc glycol, và ngoài ra còn các este và các ete của chúng như axeton, xeton metyl etyl, xeton metyl isobutyl hoặc xyclohexanon, các dung môi phân cực mạnh như dimetylformamit và dimetyl sulphoxit và cả nước.

Các chế phẩm theo sáng chế có thể gồm thêm các thành phần khác, chẳng hạn như, ví dụ, chất có hoạt tính bề mặt. Các chất có hoạt tính bề mặt thích hợp là chất nhũ hóa và/hoặc chất tạo bọt, chất phân tán hoặc chất thấm ướt có tính chất ion hoặc không ion, hoặc hỗn hợp của các chất có hoạt tính bề mặt này. Ví dụ, về các chất có hoạt tính bề mặt này là muối của polyacrylic axit, muối của axit lignosulphonic, muối của axit phenolsulphonic hoặc axit naptalensulphonic, sản phẩm trùng ngưng của etylen oxit với rượu béo hoặc với axit béo hoặc với amin béo, phenol được thế (ưu tiên là alkylphenol hoặc arylphenol), muối của este của axit sulphosuccinic, các dẫn xuất của taurin (ưu tiên là alkyl taurat), các este của axit phosphoric và ancol hoặc phenol đã etoxy hóa nhiều lần, các este béo của polyol, và dẫn xuất của các hợp chất chứa sulphat, sulphonat và phosphat, ví dụ, ete alkylaryl polyglycol, alkylsulphonat, alkyl sulphat, arylsulphonat, các sản phẩm thủy phân protein, dung dịch thải lignosulphit và metylxenlulo. Chất có hoạt tính bề mặt được yêu cầu có mặt nếu một trong các hoạt chất và/hoặc một trong các chất mang trợ không tan trong nước và khi sự áp dụng thực hiện trong nước. Tỷ lệ của chất có hoạt tính bề mặt nằm trong khoảng từ 5 tới 40 phần trăm trọng lượng của chế phẩm theo sáng chế.

Có thể sử dụng các thuốc nhuộm màu như các chất nhuộm màu vô cơ, ví dụ, sắt oxit, titan oxit và Prussian Blue, và các thuốc nhuộm màu hữu cơ như thuốc nhuộm màu alizarin, thuốc nhuộm màu azo và thuốc nhuộm màu phtaloxyanin kim loại, và dưỡng chất vi lượng như muối của sắt, mangan, bo, đồng, coban, molybden và kẽm.

Nếu thích hợp, các thành phần bổ sung khác cũng có thể có mặt, ví dụ, các keo bảo vệ, các chất gắn, các chất dính, các chất cô đặc, các chất thixotropic, các chất thấm, các chất ổn định, các tác nhân cation hóa, các chất tạo phức. Nói chung, các hoạt chất có thể được kết hợp với chất phụ gia dạng rắn hoặc dạng lỏng bất kỳ thông thường được sử dụng cho mục đích chế phẩm.

Các chế phẩm thường bao gồm hoạt chất có lượng nằm trong khoảng từ 0,05 tới 99% theo trọng lượng, có lượng nằm trong khoảng từ 0,01 và 98% theo trọng lượng, ưu tiên có lượng nằm trong khoảng từ 0,1 đến 95% theo trọng lượng, đặc biệt ưu tiên là có lượng nằm trong khoảng từ 0,5 tới 90% theo trọng lượng, ưu tiên đặc biệt hơn nữa là có lượng nằm trong khoảng từ 10 tới 70 phần trăm trọng lượng.

Các hoạt chất hoặc các chế phẩm theo sáng chế có thể được sử dụng như hoặc, phụ thuộc vào các tính chất vật lý và/hoặc hóa học của chúng, dưới dạng các chế phẩm hoặc dưới các dạng sử dụng được điều chế từ chúng, như sol khí, huyền phù trong viên nang, thuốc phun mù (sương) lạnh đậm đặc, thuốc phun mù (sương) nóng đậm đặc, viên nang, các hạt mịn, huyền phù đậm đặc để xử lý hạt giống, các dung dịch sử dụng sẵn, thuốc bột, thuốc sữa đậm đặc, các nhũ tương dầu trong nước, các nhũ tương nước trong dầu, hạt lớn, vi hạt, bột phân tán trong dầu, huyền phù đậm đặc có thể trộn lẫn với dầu, các chất lỏng có thể trộn lẫn với dầu, bột, bột nhão, hạt được phủ thuốc trừ sâu, huyền phù đậm đặc, nhũ tương-huyền phù đậm đặc, các chất đặc tan, huyền phù, bột ẩm, bột tan, các bụi và các hạt, hạt hoặc viên tan trong nước, bột tan trong nước để xử lý hạt giống, bột ẩm, các sản phẩm tự nhiên và các chất tổng hợp được tẩm hoạt chất, và còn có các vi bao trong các chất polyme và trong các nguyên liệu phủ cho hạt giống, cũng như các chế phẩm phun mù (sương) nóng và lạnh ULV.

Các chế phẩm đã đề cập có thể được bào chế theo phương pháp đã biết cho riêng chế phẩm đó, ví dụ, bằng cách trộn các hoạt chất với ít nhất một chất độn, dung môi hoặc chất pha loãng, chất nhũ hóa, chất phân tán và/hoặc chất liên kết hoặc chất cố định, chất thấm ướt, chất chịu nước thông thường, nếu thích hợp chất làm khô và chất ổn định tia UV và nếu thích hợp, phẩm màu và bột màu, chất phá bọt, chất bảo quản, chất làm đặc thứ cấp, chất kết dính, gibberellin và các chất trợ chế biến khác.

Các chế phẩm theo sáng chế không chỉ gồm những chế phẩm sẵn có để dùng và có thể được áp dụng cho cây hoặc hạt giống với thiết bị thích hợp, mà còn các chất cô đặc thương mại phải được pha loãng với nước trước khi sử dụng.

Các hoạt chất theo sáng chế có thể có mặt ở các dạng đó hoặc trong các chế phẩm (thương mại) của chúng và còn trong các dạng sử dụng được bào chế từ các chế phẩm này như hỗn hợp với các hoạt chất (đã biết) khác, chẳng hạn như thuốc trừ sâu, chất hóa học thu hút côn trùng, chất diệt trùng, thuốc diệt vi khuẩn, thuốc diệt ve, thuốc diệt giun tròn, thuốc diệt nấm, chất điều tiết sinh trưởng, thuốc diệt cỏ, phân bón, chất an toàn và/hoặc chất bán hóa học.

Sự xử lý theo sáng chế cây và phần của cây với các hoạt chất hoặc các chế phẩm được thực hiện trực tiếp hoặc bằng tác động lên môi trường xung quanh, môi trường

sống của chúng hoặc không gian dự trữ sử dụng các phương pháp xử lý thông thường, ví dụ, bằng cách nhúng, xịt, phun dạng sương, tưới phun, làm bốc hơi, rải, tạo mù, rải rắc, tạo bột, sơn phủ, trát, tưới nước (thấm ướt), tưới nhỏ giọt và, trong trường hợp của vật liệu lai, cụ thể là trong trường hợp của hạt giống, ngoài ra dùng dạng bột để xử lý hạt giống khô, dung dịch để xử lý hạt giống ướt, bột tan trong nước để xử lý dạng bùn quánh, bằng cách phủ lớp vỏ ngoài, bằng cách phủ với một hoặc nhiều lớp phủ, v.v. Sự xử lý ngoài ra có thể để áp dụng các hoạt chất bằng phương pháp phun không gian hóa dưới dạng thể tích hạt cực nhỏ hoặc phun chế phẩm của hoạt chất hoặc chính hoạt chất vào đất trồng.

Sáng chế còn bao gồm phương pháp xử lý hạt.

Sáng chế còn đề cập đến hạt được xử lý theo một trong các phương pháp đã được mô tả trong đoạn trước đó. Các hạt theo sáng chế được sử dụng trong các phương pháp để bảo vệ hạt khỏi các nấm không mong muốn. Trong các phương pháp này, hạt được xử lý bằng ít nhất một hoạt chất theo sáng chế được sử dụng.

Các hoạt chất hoặc chế phẩm theo sáng chế là phù hợp để xử lý hạt. Một phần lớn của sự phá hoại đối với các cây trồng bị gây ra bởi các sinh vật có hại được bắt đầu bởi sự nhiễm vào hạt trong quá trình cất trữ hoặc sau khi gieo hạt và trong và sau quá trình nảy mầm của cây. Giai đoạn này đặc biệt quan trọng vì rễ và chồi của cây đang phát triển đặc biệt nhạy cảm và thậm chí một sự phá hoại nhỏ nhất cũng có thể dẫn đến làm cây chết. Do đó, sử dụng các chế phẩm thích hợp trong việc bảo vệ hạt và cây nảy mầm là mối quan tâm lớn.

Việc kiểm soát nấm gây bệnh ở cây bằng cách xử lý hạt đã được biết đến trong một thời gian dài và là vấn đề cần cải tiến liên tục. Tuy nhiên, việc xử lý hạt gây ra một loạt vấn đề không phải lúc nào cũng được giải quyết một cách thỏa đáng. Do đó, vẫn cần phát triển các phương pháp bảo vệ hạt giống và cây trồng đang nảy mầm mà không cần phải sử dụng, hoặc ít nhất là làm giảm đáng kể, sự sử dụng bổ sung các chất bảo vệ cây trồng sau khi gieo hạt hoặc sau khi cây nhú. Hơn nữa mong muốn tối ưu lượng hoạt chất được sử dụng theo một cách thức đã nói để cung cấp một sự bảo vệ tối ưu cho hạt và cây nảy mầm khỏi sự tấn công của nấm gây bệnh ở cây, mà không phá hủy chính cây bằng hoạt chất được dùng. Cụ thể, các phương pháp để xử lý hạt cũng quan tâm tới các tính diệt nấm bên

trong của các cây chuyển gen để đạt được sự bảo vệ tối ưu hạt và cây nảy mầm cùng với các chất bảo vệ cây trồng được sử dụng là nhỏ nhất.

Sáng chế do đó cũng đề cập đến phương pháp bảo vệ hạt và các cây nảy mầm khỏi sự tấn công bởi các nấm gây bệnh ở cây, bằng cách xử lý hạt với chế phẩm của sáng chế. Sáng chế cũng đề cập đến sự sử dụng các chế phẩm theo sáng chế để xử lý hạt để bảo vệ hạt và cây trồng nảy mầm chống lại các nấm gây bệnh ở cây. Hơn nữa, sáng chế đề cập đến hạt được xử lý bằng chế phẩm theo sáng chế để bảo vệ chống lại nấm gây bệnh ở cây.

Việc kiểm soát nấm gây bệnh ở cây mà nấm này làm phá hủy cây sau khi nhú lên được thực hiện trước bằng cách xử lý đất và các phần trên mặt đất của cây bởi các tác nhân bảo vệ cây trồng. Vì các quan ngại về sự tác động có thể xảy ra của các tác nhân bảo vệ cây trồng đến môi trường và sức khỏe của con người và động vật, vì thế có sự nỗ lực lớn để làm giảm lượng hoạt chất được dùng.

Một trong các thuận lợi của sáng chế đó là các tính chất Sơ đồ đặc biệt của các chế phẩm và các hoạt chất theo sáng chế nghĩa là sự xử lý hạt với các chế phẩm và các hoạt chất này không chỉ bảo vệ bản thân các hạt, mà còn đối với các cây thu được sau khi nảy mầm, khỏi bị nấm gây bệnh ở cây. Theo cách này, có thể bỏ được việc xử lý ngay lập tức cây trồng ở thời điểm gieo hạt hoặc ngay sau đó.

Cũng được xem là thuận lợi khi các hoạt chất hoặc các chế phẩm theo sáng chế có thể được sử dụng cụ thể cho hạt chuyển gen trong đó cây trồng mọc ra từ hạt này có khả năng biểu hiện protein chống lại các loài gây hại. Bằng cách xử lý hạt này bằng các hoạt chất hoặc chế phẩm theo sáng chế, thậm chí bằng cách biểu hiện, ví dụ, protein diệt côn trùng, mà các loài gây hại nhất định có thể được kiểm soát. Đáng ngạc nhiên, một hiệu quả đồng vận thêm nữa có thể được quan sát thấy ở đây, hiệu quả đồng vận này làm tăng thêm tác dụng bảo vệ chống lại các loài gây hại.

Các chế phẩm theo sáng chế thích hợp để bảo vệ hạt của bất cứ biến thể cây trồng nào mà nó được sử dụng trong nông nghiệp, trong nhà kính, trong rừng hoặc trong nghề làm vườn và trồng nho. Cụ thể, chế phẩm dùng cho dạng hạt của cây ngũ cốc (như lúa mì, lúa mạch, lúa mạch đen, cây kê và yến mạch), ngô, cây bông, cây đậu tương, gạo, các cây cà chua, hoa hướng dương, các cây đậu, cây cà phê, cây củ cải đường (ví dụ, củ cải đường và củ cải đường cho chăn nuôi), cây lạc, các cây rau (như khoai tây, cây dưa chuột, cây

hành và cây dau riếp), bãi cỏ và các cây cảnh. Đặc biệt quan trọng là xử lý hạt của cây ngũ cốc (như lúa mì, lúa mạch, lúa mạch đen và yến mạch), ngô và gạo.

Như đã được đề cập ở trên, việc xử lý hạt cây ghép gen bằng hỗn hợp theo sáng chế cũng đặc biệt quan trọng. Điều này có liên quan đến hạt giống của cây thường chứa ít nhất một gen khác loại kiểm soát sự biểu hiện polypeptid với các đặc tính trừ sâu đặc trưng. Gen khác loại trong hạt giống chuyển gen có thể có nguồn gốc từ các vi sinh vật như *Bacillus*, *Rhizobium*, *Pseudomonas*, *Serratia*, *Trichoderma*, *Clavibacter*, *Glomus* hoặc *Gliocladium*. Tốt hơn là, gen khác loại này là từ *Bacillus* sp., sản phẩm gen có hoạt tính chống lại sâu đục thân bắp Châu Âu và/hoặc côn trùng đục rễ (Western corn rootworm). Ưu tiên đặc biệt là gen khác loại có nguồn gốc từ *Bacillus thuringiensis*.

Trong nội dung của sáng chế, chế phẩm theo sáng chế được áp dụng cho hạt hoặc là riêng lẻ hoặc là trong một công thức thích hợp. Tốt hơn là, hạt được xử lý trong trạng thái đủ ổn định để tránh bị hư hại trong quá trình xử lý. Nói chung, hạt có thể được xử lý ở bất kỳ thời điểm nào từ lúc thu hoạch đến lúc gieo trồng. Hạt thường sử dụng đã được tách từ cây và được tách khỏi lõi, vỏ, cuống, lớp phủ, lông hoặc cùi của quả. Do đó, ví dụ, có thể sử dụng hạt đã được thu hoạch, được làm sạch và được làm khô tới lượng ẩm dưới 15% khối lượng. Hoặc cũng có thể sử dụng hạt, sau khi làm khô, ví dụ, được xử lý với nước và sau đó được làm khô lại.

Khi xử lý hạt, nói chung phải thận trọng với lượng hỗn hợp theo sáng chế được sử dụng đối với hạt và/hoặc lượng phụ gia khác được lựa chọn theo cách mà sự phát triển của hạt không bị ảnh hưởng bất lợi, hoặc cây tạo ra không bị hư hỏng. Điều này phải được ghi nhớ đặc biệt trong trường hợp các hoạt chất có thể có ảnh hưởng có hại ở tỷ lệ sử dụng nhất định.

Các chế phẩm theo sáng chế có thể được áp dụng trực tiếp, tức là không bao gồm thêm các thành phần khác và không được làm loãng. Nói chung, tốt hơn là áp dụng chế phẩm cho hạt dưới dạng có công thức thích hợp. Các chế phẩm và các phương pháp thích hợp để xử lý hạt giống đã được biết bởi người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực kỹ thuật này và được mô tả, ví dụ, trong các tài liệu dưới đây: US 4,272,417 A, US 4,245,432 A, US 4,808,430 A, US 5,876,739 A, US 2003/0176428 A1, WO 2002/080675 A1, WO 2002/028186 A2,

Các hoạt chất mà có thể được sử dụng theo sáng chế có thể được biến đổi thành các chế phẩm phủ ngoài hạt như dung dịch, nhũ tương, huyền phù, bột, bột, chất sệt và các chế phẩm phủ ngoài khác cho hạt giống, và chế phẩm ULV.

Các chế phẩm này được điều chế theo cách thức đã biết bằng cách trộn các hoạt chất hoặc các tổ hợp hoạt chất với các phụ gia thông thường, như, ví dụ, các chất độn cũng như các dung môi hoặc các chất pha loãng, các chất tạo màu, các chất làm ẩm, các chất nhũ hóa, các chất khử bọt, các chất bảo quản, các chất làm đặc thứ hai, các chất kết dính, các gibberellin cũng như nước.

Các chất nhuộm màu có trong các chế phẩm phủ ngoài hạt mà có thể được sử dụng theo sáng chế là tất cả các chất nhuộm màu thông thường cho mục đích này. Cả chất nhuộm, có thể hòa tan trong nước và chất màu, có thể hòa tan trong nước, có thể được sử dụng. Các ví dụ, có thể được đề cập đến làm các thuốc nhuộm màu được biết đến dưới các tên Rhodamin B, C.I. Pigment Red 112 và C.I. Solvent Red 1,

Các chất phân tán và/hoặc chất nhũ hóa phù hợp có thể có trong các chế phẩm phủ ngoài hạt mà có thể được sử dụng theo sáng chế là tất cả các chất phân tán không ở dạng ion, ở dạng anion và ở dạng cation mà thường được sử dụng cho chế phẩm chứa các hoạt chất hóa nông. Sự ưu tiên được đưa ra đối với việc sử dụng alkylnaphtalensulphonat, như diisopropyl- hoặc diisobutylnaphtalensulphonat.

Các chất phân tán và/hoặc chất nhũ hóa phù hợp có thể có trong các chế phẩm phủ ngoài hạt mà có thể được sử dụng theo sáng chế là tất cả các chất phân tán không ở dạng ion, ở dạng anion và ở dạng cation mà thường được sử dụng cho chế phẩm chứa các hoạt chất hóa nông. Ưu tiên, có thể sử dụng các chất phân tán anion hoặc không phải ion hoặc hỗn hợp gồm các chất phân tán anion hoặc không phải ion. Các chất phân tán không ở dạng ion phù hợp mà có thể được đề cập là, cụ thể, etylen oxit/propylen oxit block polymers, alkylphenol polyglycol ete và tristyrylphenol polyglycol ete, và các dẫn xuất phosphat hóa hoặc sulphat hóa của chúng. Các chất phân tán anion phù hợp là, cụ thể, lignosulphonat, các muối của axit polyacrylic và chất ngưng tụ arylsulphonat/formaldehyt.

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

Các chất bảo quản có chế phẩm phủ ngoài hạt được sử dụng theo sáng chế là tất cả các chất được sử dụng trong các chế phẩm hóa nông cho mục đích này. Diclophen và rượu benzyl hemiformal có thể được đề cập làm ví dụ.

Các chất cô đặc thứ cấp mà có thể có được sử dụng trong các chế phẩm phủ ngoài hạt được sử dụng theo sáng chế là tất cả các chất có thể được sử dụng trong các chế phẩm hóa nông cho mục đích này. Được ưu tiên là các dẫn xuất xenlulo, axit acrylic, xanthan, đất sét biến đổi hoặc silica mịn.

Các chất dính kết mà có thể có trong các chế phẩm phủ ngoài hạt được sử dụng theo sáng chế là tất cả các chất kết dính thông thường được sử dụng trong các sản phẩm phủ ngoài hạt. Được ưu tiên là polyvinylpyrrolidon, polyvinyl axetat, polyvinyl alcohol và tyloza.

Giberellin mà có thể có trong các chế phẩm phủ ngoài hạt được sử dụng theo sáng chế ưu tiên là các giberellin A1, A3 (= axit giberelic), A4 và A7, với axit giberelic được đặc biệt ưu tiên sử dụng. Các giberellin đã được biết đến (tham khảo R. Wegler "Chemie der Pflanzenschutz- und Schädlingsbekämpfungsmittel" [Chemistry Plant Protectants và Pesticides], Vol. 2, Springer Verlag, 1970, pp. 401-412).

Các chế phẩm phủ hạt có thể được sử dụng theo sáng chế để xử lý nhiều loại hạt, gồm hạt của các cây chuyển gen, có thể được dùng trực tiếp hoặc sau khi được pha loãng với nước trước đó. Trong bài, các hiệu quả đồng vận cũng có thể sinh ra do sự tương tác lẫn nhau giữa các chất đã tạo ra.

Tất cả các thiết bị trộn có thể được sử dụng để phủ ngoài hạt giống đều thích hợp để xử lý hạt giống bằng các chế phẩm phủ ngoài hạt mà có thể được sử dụng theo sáng chế hoặc bằng các chế phẩm được điều chế từ đó bằng cách cho thêm nước. Đặc biệt, quy trình phủ ngoài hạt giống được thực hiện trong đó hạt giống được đưa vào trong máy trộn, lượng chế phẩm phủ ngoài hạt mong muốn trong từng trường hợp được cho vào, hoặc là ở dạng chế phẩm gốc hoặc là sau khi đã làm loãng trước với nước, và hỗn hợp trong máy trộn được trộn cho đến khi chế phẩm được phân bố đồng đều trên hạt giống. Nếu phù hợp, quy trình làm khô được thực hiện sau đó.

Hoạt chất trong chế phẩm theo sáng chế có hoạt tính khử trùng hiệu quả và có thể sử dụng trong việc kiểm soát nấm gây bệnh ở cây và/hoặc vi sinh vật và/hoặc loài gây hại không mong muốn, trong việc bảo vệ cây trồng hoặc trong bảo vệ vật liệu.

Các thuốc diệt nấm có thể được dùng trong việc bảo vệ cây để kiểm soát *Plasmodiophoromycetes*, *Oomycetes*, *Chytridiomycetes*, *Zygomycetes*, *Ascomycetes*, *Basidiomycetes* và *Deuteromycetes*.

Các chế phẩm diệt nấm theo sáng chế có thể được sử dụng để kiểm soát, xử lý hoặc bảo vệ nấm gây bệnh ở cây. Do đó, sáng chế đề cập đến phương pháp xử lý và phương pháp bảo vệ để kiểm soát nấm có hại gây bệnh ở cây sử dụng hoạt chất hoặc chế phẩm theo sáng chế, mà được áp dụng đối với hạt giống, cây hoặc các phần của cây, quả hoặc đất trồng nơi mà cây sinh trưởng.

Các chế phẩm theo sáng chế để kiểm soát nấm gây bệnh ở cây trong việc bảo vệ cây trồng bao gồm một lượng hữu hiệu, nhưng không độc hại cho cây của các hoạt chất theo sáng chế. “Lượng hữu hiệu, nhưng không độc hại cho cây” nghĩa là lượng của chế phẩm theo sáng chế đủ để kiểm soát bệnh nấm ở cây một cách thỏa đáng hoặc để diệt trừ bệnh nấm hoàn toàn, và, đồng thời, không gây ra bất kỳ triệu chứng đáng kể nào về tính độc hại cho cây. Nói chung, tỷ lệ áp dụng này có thể thay đổi trong phạm vi tương đối rộng. Nó phụ thuộc vào nhiều nhân tố, ví dụ, loại nấm cần được kiểm soát, cây, các điều kiện khí hậu và thành phần của các chế phẩm theo sáng chế.

Thực tế là các hoạt chất được các cây trồng chịu đựng tốt ở các nồng độ được yêu cầu để kiểm soát các bệnh của cây cho phép xử lý các bộ phận của cây nằm trên mặt đất, xử lý nhân giống thân chính và hạt, và xử lý đất.

Theo sáng chế này, tất cả các cây và các phần của cây có thể được xử lý. Trong bản mô tả này, cây được hiểu với nghĩa là tất cả các loại thực vật và quần thể thực vật như các loại cây đại mong muốn và không mong muốn hoặc các loại cây trồng (gồm các loại cây trồng mọc tự nhiên). Cây trồng có thể là cây mà có thể nhận được bằng các phương pháp gây giống và tối ưu hóa thông thường hoặc bằng các phương pháp công nghệ sinh học và kỹ thuật di truyền hoặc sự kết hợp của các phương pháp này, gồm cả cây chuyển gen và gồm cả các giống cây mà có thể hoặc không thể được bảo vệ bởi bản quyền sở hữu giống tốt. Các phần của cây cũng có thể được hiểu theo nghĩa là tất cả các phần, bộ phận của cây

ở trên và dưới mặt đất, như chồi non, lá, hoa và rễ, ví dụ, các phần có thể được đề cập là lá, lá kim, thân, hoa, cành quả, quả, hạt, rễ, củ và thân rễ. Các phần của cây cũng gồm các cây được thu hoạch và vật liệu nhân giống sinh dưỡng và sinh sản, ví dụ, cây giống con, thân củ, thân rễ, cành giâm và hạt giống.

Các hoạt chất theo sáng chế là thích hợp để bảo vệ các cây và các bộ phận của cây, để làm tăng năng suất thu hoạch, để nâng cao chất lượng của cây thu hoạch, trong khi các cây vẫn dung nạp tốt. Tốt hơn là chúng được sử dụng làm tác nhân bảo vệ cây trồng. Chúng có hoạt tính chống lại các loài nhậy cảm và có tính kháng thông thường và chống lại tất cả hoặc một số giai đoạn phát triển.

Các cây sau đây có thể được đề cập là các cây có thể được xử lý theo sáng chế: bông, lanh, nho, trái cây, rau quả, chẳng hạn như *Rosaceae* sp. (ví dụ, các quả dạng táo như táo và lê, mà còn các loại quả có hạt như mơ, anh đào, hạnh nhân và đào, và các loại trái cây mềm như dâu tây), *Ribesioideae* sp., *Juglandaceae* sp., *Betulaceae* sp., *Anacardiaceae* sp., *Fagaceae* sp., *Moraceae* sp., *Oleaceae* sp., *Actinidaceae* sp., *Lauraceae* sp., *Musaceae* sp. (ví dụ như các cây chuối và các đồn điền chuối), *Rubiaceae* sp. (ví dụ, cây cà phê), *Theaceae* sp., *Sterculiaceae* sp., *Rutaceae* sp. (ví dụ, chanh, cam và bưởi); *Solanaceae* sp. (ví dụ như cà chua), *Liliaceae* sp., *Asteraceae* sp. (ví dụ như rau diếp), *Umbelliferae* sp., *Cruciferae* sp., *Chenopodiaceae* sp., *Cucurbitaceae* sp. (ví dụ như dưa chuột), *Alliaceae* sp. (ví dụ như tỏi tây, hành tây), *Papilionaceae* sp. (ví dụ, đậu Hà Lan); các cây trồng chính như *Graminae* sp. (cho ví dụ, ngô, cỏ nhân tạo, ngũ cốc như lúa mạch đen, lúa mì, gạo, lúa mạch, yến mạch, kê và lúa mì lai lúa mạch đen), *Poaceae* sp. (ví dụ như mía), *Asteraceae* sp. (ví dụ như cây hoa hướng dương), *Brassicaceae* sp. (ví dụ như bắp cải trắng, bắp cải đỏ, bông cải xanh, súp lơ, cải brussels, cải Pak Choi, su hào, củ cải nhỏ, và hạt cải dầu, mù tạt, cải ngựa và cải xoong), *Fabaceae* sp. (ví dụ như các loại đậu, đậu phộng), *Papilionaceae* sp. (ví dụ như cây đậu tương), *Solanaceae* sp. (ví dụ như cây cà chua), *Chenopodiaceae* sp. (ví dụ như cây củ cải đường, củ cải đường cho chăn nuôi, rau cải Thụy Sĩ, củ cải đường); các cây hữu dụng và các cây cảnh trong vườn và rừng; và trong mỗi trường hợp các loại biến đổi gen của các cây này.

Như đã đề cập ở trên, cũng có thể xử lý tất cả các cây trồng và bộ phận của chúng theo sáng chế. Theo một phương án ưu tiên, các loài cây dại và các cây trồng, hoặc những cây thu nhận bằng các phương pháp gây giống sinh học thông thường, như lai giống hoặc

dung hợp thể nguyên sinh, và các phần của nó, được xử lý. Theo một phương án ưu tiên khác, các cây chuyển gen và cây trồng thu nhận được bằng kỹ thuật gen, nếu thích hợp kết hợp với các phương pháp thông thường (sinh vật biến đổi gen), và các phần của chúng được xử lý. Thuật ngữ “các bộ phận” hoặc “các bộ phận của cây” hoặc “các bộ phận cây” được giải thích ở trên. Đặc biệt ưu tiên, các cây gồm các cây trồng là một trong số có sẵn thương mại hoặc đang được sử dụng được xử lý theo sáng chế. Các cây trồng được hiểu theo nghĩa là các cây trồng có các tính chất mới (“các tính trạng”) mà chúng được thu được bằng sự gây giống thông thường, bằng sự tổng hợp đột biến hoặc bằng các kỹ thuật tái tổ hợp ADN. Các cây này có thể là các cây trồng, các kiểu sinh học hoặc kiểu gen.

Phương pháp xử lý theo sáng chế có thể được sử dụng trong việc xử lý các sinh vật biến đổi gen (genetically modified organism - GMO), ví dụ như các loài cây và các hạt giống. Cây biến đổi gen (hay cây chuyển gen) là các cây trong đó một gen khác loại được tích hợp ổn định vào bộ gen. Sự biểu hiện "gen khác loại" về cơ bản có nghĩa là gen được tạo ra hoặc được ghép bên ngoài cây và khi được đưa vào trong hệ gen có nhân, lục lạp hoặc ty thể tạo ra cây được biến nạp mới hoặc các đặc tính nông học được cải thiện hoặc các đặc tính khác nhờ biểu hiện protein hoặc polypeptid được quan tâm hoặc bằng cách điều chỉnh xuống hoặc bất hoạt (các) gen khác có mặt trong cây (sử dụng ví dụ, kỹ thuật đối nghĩa, kỹ thuật đồng ức chế hoặc kỹ thuật can thiệp của ARN – ARNi). Gen khác loại được định vị trong hệ gen cũng được gọi là gen chuyển. Gen chuyển được định nghĩa bởi vị trí đặc biệt của nó trong hệ gen của cây được gọi là trường hợp chuyển gen hoặc biến nạp.

Tùy thuộc vào loài cây hoặc cây trồng, vị trí và các điều kiện sinh trưởng của chúng (đất trồng, khí hậu, thời kỳ sinh dưỡng, chế độ chăm sóc), việc xử lý theo sáng chế cũng có thể tạo ra các hiệu quả siêu cộng tính (“đồng vận”). Do đó, ví dụ, tỷ lệ áp dụng giảm và/hoặc mở rộng phổ hoạt tính và/hoặc làm tăng hoạt tính của các hoạt chất và chế phẩm có thể được sử dụng theo sáng chế, sinh trưởng của cây tốt hơn, tăng tính chống chịu với nhiệt độ cao hoặc thấp, tăng tính chống chịu hạn hán hoặc nước hoặc hàm lượng muối trong đất, năng suất ra hoa tăng, thu hoạch dễ dàng hơn, chín nhanh hơn, hiệu suất thu hoạch cao hơn, quả to hơn, trọng lượng của cây lớn hơn, màu lá xanh hơn, ra hoa sớm hơn, chất lượng cao hơn và/hoặc giá trị dinh dưỡng của các sản phẩm thu hoạch cao hơn,

nhồng độ đường trong quả cao hơn, độ ổn định bảo quản tốt hơn và/hoặc có thể xử lý hợp lý các sản phẩm thu hoạch, vượt quá hiệu quả thực sự được mong đợi.

Tại các tỷ lệ áp dụng nhất định, các tổ hợp hoạt chất theo sáng chế cũng có thể có hiệu quả tăng bền trong cây. Do đó, chúng cũng thích hợp để huy động Sơ đồ bảo vệ của thực vật chống lại sự tấn công bởi nấm và/hoặc vi sinh vật và/hoặc vi rút gây bệnh ở cây không mong muốn. Điều này có thể, nếu thích hợp, là một trong nhiều nguyên nhân đối với các hoạt tính được nâng cao của các tổ hợp theo sáng chế, ví dụ, chống lại nấm. Các chất tăng bền cây (gây ra tính kháng) được hiểu, trong ngữ cảnh của sáng chế, là các hợp chất hoặc các tổ hợp trên có khả năng kích thích Sơ đồ phòng thủ của cây theo cách để, khi được tiêm bởi các vi sinh vật không mong muốn, các cây được xử lý biểu lộ mức độ đáng kể tính kháng của các vi sinh vật này. Do đó, các chất theo sáng chế có thể được sử dụng để bảo vệ cây chống lại sự tấn công bởi các thể sinh bệnh được nói đến ở trên trong khoảng thời gian nhất định sau khi xử lý. Khoảng thời gian trong đó sự bảo vệ được tác dụng thường kéo dài từ 1 đến 10 ngày, ưu tiên từ 1 đến 7 ngày, sau đó xử lý cây với các hoạt chất.

Cây và các loài cây ưu tiên được xử lý theo sáng chế gồm tất cả các cây có vật chất di truyền mà truyền lại những đặc điểm hữu ích, đặc biệt có lợi cho các cây đó (cho dù thu được nhờ các biện pháp công nghệ sinh học hoặc gây giống).

Cây và giống cây mà cũng ưu tiên được xử lý theo sáng chế có sức kháng đối với một hoặc nhiều yếu tố gây áp lực sinh học, có nghĩa là những cây đó có sự tự bảo vệ chống lại động vật và vi khuẩn gây hại tốt hơn, chẳng hạn như chống lại giun tròn, sâu bọ, bét, nấm, vi khuẩn, vi rút và/hoặc các dạng vi rút gây bệnh ở cây.

Cây và các loài cây cũng có thể được xử lý theo sáng chế là các cây có tính kháng lại một hay nhiều yếu tố bất lợi phi sinh học. Các điều kiện áp lực phi sinh học có thể bao gồm, ví dụ, hạn hán, sự phơi ở nhiệt độ lạnh, sự phơi nhiệt, áp lực thẩm thấu, ngập, độ mặn của đất tăng, sự phơi khoáng tăng lên, phơi ngoài ozon, phơi dưới ánh sáng mạnh, nguồn chất dinh dưỡng nitro có sẵn bị hạn chế, nguồn chất dinh dưỡng chứa phospho có sẵn bị hạn chế hoặc tránh bóng tối.

Cây và cây trồng mà cũng có thể được xử lý theo sáng chế là các cây có đặc điểm là cho sản lượng tăng. Sản lượng tăng trong các cây nói trên có thể là kết quả của, ví dụ, sinh

lý học thực vật, sự sinh trưởng và phát triển được cải thiện, như hiệu quả sử dụng nước, hiệu quả giữ nước, sự hấp thu nitơ được cải thiện, sự đồng hóa cacbon tăng, sự quang hợp được cải thiện, hiệu quả nảy mầm tăng và chín nhanh hơn. Ngoài ra năng suất có thể được tác động bởi cấu trúc cây được cải thiện (dưới các điều kiện áp lực và không áp lực), bao gồm sự nở hoa sớm, kiểm soát sự nở hoa để sản xuất hạt lai, sức sống của cây giống con, kích thích cây, số lượng và khoảng cách lông, sự phát triển rễ, kích cỡ hạt, kích cỡ quả, kích cỡ hạt trong quả, số lượng quả hoặc bông, số lượng hạt trên quả hoặc bông, khối lượng hạt, sự điền đầy hạt được nâng cao, sự phân tán hạt giảm, sự nứt vỏ và sự chống chịu cư trú giảm. Hơn nữa tính trạng về sản lượng gồm chế phẩm hạt giống, như hàm lượng hydrat cacbon, hàm lượng protein, hàm lượng dầu và chế phẩm, giá trị dinh dưỡng, sự giảm các hợp chất chống dinh dưỡng, tình trạng có thể xử lý được cải thiện và độ ổn định bảo quản tốt hơn.

Các cây có thể được xử lý theo sáng chế là các cây lai mà đã biểu hiện các đặc tính của ưu thế giống lai hay các đặc tính trội của cây lai dẫn đến nói chung năng suất, sức sống, thể chất và sức đề kháng với các yếu tố gây áp lực sinh học và phi sinh học cao hơn. Các cây này thường được tạo ra bằng cách lai giữa dòng bố mẹ bất dục đực lai cùng dòng (mẹ) với dòng bố mẹ bất dục đực lai cùng dòng (bố) khác. Hạt lai thường được thu hoạch từ các cây bất dục đực và bán cho những người trồng cây. Các cây bất dục đực (ví dụ: ở ngô) đôi khi có thể được sản xuất bằng cách bẻ cờ ngô (ví dụ, loại bỏ cơ học các bộ phận sinh sản đực hay hoa đực), nhưng, điển hình hơn, sự bất dục đực là kết quả của các yếu tố quyết định di truyền trong bộ di truyền của cây. Trong trường hợp đó, và đặc biệt khi hạt giống là sản phẩm mong muốn được thu hoạch từ các cây lai, nó thường có ích để đảm bảo sự sinh sản mạnh trong các cây lai, mà có chứa các yếu tố quyết định di truyền là nguyên nhân gây ra sự bất dục đực, được hồi phục hoàn toàn. Điều này có thể được thực hiện bằng cách đảm bảo rằng các bố mẹ tốt có những gen bảo toàn sự sinh sản phù hợp mà có khả năng bảo toàn sự hữu dục đực trong cây lai chứa các yếu tố quyết định di truyền chịu trách nhiệm cho sự bất dục đực. Các yếu tố quyết định di truyền cho sự bất dục đực mạnh mẽ có thể được định vị trong tế bào chất. Các ví dụ, về sự bất dục đực trong tế bào chất (CMS) được mô tả ví dụ, trong các loài *Brassica*. Tuy nhiên, các yếu tố quyết định di truyền cho sự bất dục đực cũng có thể được định vị trong hệ gen của nhân. Các cây bất dục đực cũng có thể có được nhờ các phương pháp công nghệ sinh học trên

cây như kỹ thuật di truyền. Một cách đặc biệt hữu ích để thu được các cây bất dục được miêu tả trong WO 89/10396, ví dụ, một enzym ribonucleaza như barnaza được biểu hiện một cách có chọn lọc trong các tế bào tapetum trong nhị hoa. Sau đó khả năng sinh sản có thể được phục hồi nhờ sự biểu hiện trong các tế bào tapetum của chất ức chế ribonucleaza như barstar.

Cây và cây trồng (thu được bằng các phương pháp công nghệ sinh học thực vật như kỹ thuật di truyền) có thể được xử lý theo sáng chế là những cây được tạo sức dung nạp đối với thuốc diệt cỏ, tức là các cây được tạo sức dung nạp đối với một hay nhiều thuốc diệt cỏ đưa vào. Các cây này có thể thu được nhờ biến nạp gen, hoặc bằng cách chọn lọc các cây chứa gen đột biến truyền tính dung nạp thuốc diệt cỏ.

Các cây dung nạp thuốc diệt cỏ ví dụ, các cây dung nạp glyphosat, tức là các cây được tạo sức dung nạp đối với thuốc diệt cỏ glyphosat hay các muối của nó. Ví dụ, cây dung nạp glyphosat có thể thu được bằng cách biến nạp cây với gen ghi mã enzym 5-enolpyruvylshikimat-3-phosphat synthaza (EPSPS). Ví dụ, về các gen EPSPS như vậy là gen AroA (đột biến CT7) của vi khuẩn *Salmonella typhimurium*, gen CP4 của vi khuẩn loài *Agrobacterium*, những gen mã hóa EPSPS của dã yên thảo, EPSPS của cà chua, hoặc EPSPS của Eleusine. Cũng có thể là EPSPS đột biến. Cây dung nạp glyphosat cũng có thể nhận được bằng cách biểu diễn gen mã hóa enzym glyphosat axetyl transferaza. Các cây chịu được glyphosat cũng có thể thu được bằng cách biểu hiện gen mã hóa enzym oxido-reductaza. Cây chịu glyphosat cũng có thể nhận được bằng cách chọn lọc các cây chứa các đột biến diễn ra tự nhiên của các gen được đề cập ở trên.

Các cây kháng thuốc diệt cỏ khác là ví dụ, cây được tạo sức dung nạp đối với thuốc diệt cỏ ức chế enzym tổng hợp glutamin, như bialaphos, photphinothricin hoặc glufosinat. Các cây này có thể thu được bằng cách biểu hiện một enzym giải độc thuốc diệt cỏ hoặc enzym glutamin synthaza đột biến có tính kháng sự ức chế. Một enzym giải độc hữu hiệu như thế là, ví dụ, enzym mã hóa photphinothricin axetyltransferaza (như protein dạng thanh hoặc protein dạng dẹt từ các loài *Streptomyces*). Các cây biểu hiện photphinothricin axetyltransferaza ngoại sinh đã được mô tả.

Hơn nữa các cây kháng thuốc diệt cỏ cũng là các cây được tạo sức dung nạp đối với thuốc diệt cỏ ức chế enzym hydroxyphenylpyruvatdioxyaza (HPPD).

Hydroxyphenylpyruvate dioxygenase là các enzym xúc tác phản ứng trong đó para-hydroxyphenylpyruvate (HPP) được biến đổi thành homogentisate. Các cây chịu được các chất ức chế HPPD có thể được biến nạp bởi một gen mã hóa enzym kháng HPPD xuất hiện tự nhiên, hoặc gen mã hóa enzym HPPD đột biến. Tính chống chịu các chất ức chế HPPD cũng có thể thu được bằng cách biến nạp các cây nhờ gen mã hóa các enzym nhất định có khả năng tạo thành homogentisate cho dù ức chế HPPD tự nhiên bởi chất ức chế HPPD. Tính chống chịu của cây với các chất ức chế HPPD cũng có thể được cải thiện bằng cách biến nạp các cây chứa gen mã hóa enzym prephenate dehydrogenase để thêm vào một gen mã hóa enzym chịu được HPPD.

Cây chịu thuốc diệt cỏ khác nữa là các cây được tạo sức dung nạp đối với chất ức chế acetolactate synthase (ALS). Ví dụ về các chất ức chế ALS đã được biết gồm sulfonylurea, imidazolinon, triazolopyrimidin, pyrimidinyoxy(thio)benzoate, và/hoặc các thuốc diệt cỏ sulfonylaminocarbonyltriazolinon. Sự đột biến khác nhau trong các enzym ALS (cũng được biết đến như axit acetohydroxy synthase, AHAS) được biết đến có tính dung nạp đối với các thuốc diệt cỏ và các nhóm thuốc diệt cỏ khác nhau. Sự tạo ra các cây trồng dung nạp sulfonylurea và các cây trồng dung nạp imidazolinon được mô tả trong đơn công bố quốc tế WO 1996/033270, Hơn nữa các cây dung nạp sulfonylurea và imidazolinon cũng được mô tả trong ví dụ, WO 2007/024782,

Các cây khác dung nạp đối với imidazolinon và/hoặc sulfonylurea có thể thu được bằng cách gây đột biến cảm ứng, bằng cách chọn lọc trong các môi trường nuôi cấy trường tế bào khi có mặt thuốc diệt cỏ hoặc bằng cách gây giống đột biến.

Cây hoặc cây trồng (thu được bởi các phương pháp công nghệ sinh học thực vật như kỹ thuật di truyền) cũng có thể được xử lý theo sáng chế là các cây chuyển gen kháng sâu bọ, tức là các cây được tạo tính kháng chống lại sự tấn công của một số loại sâu bọ đích nhất định. Các cây này có thể thu được nhờ biến nạp gen, hoặc nhờ chọn lọc các cây chứa đột biến truyền tính kháng sâu bọ.

Trong ngữ cảnh này, thuật ngữ “cây chuyển gen kháng sâu bọ” gồm cây bất kỳ chứa ít nhất một gen chuyển chứa một mã hóa chuỗi mã hóa:

1) protein tinh thể kháng sâu bọ từ *Bacillus thuringiensis* hoặc một phần kháng sâu bọ của chúng, như các protein tinh thể kháng sâu bọ được liệt kê trực tuyến tại:

http://www.lifesci.sussex.ac.uk/Home/Neil_Crickmore/Bt/, hoặc các phần kháng sâu bọ của nó, ví dụ, các protein thuộc lớp protein Cry Cry1Ab, Cry1Ac, Cry1F, Cry2Ab, Cry3Ae hoặc Cry3Bb hoặc các phần kháng sâu bọ của chúng; hoặc

2) protein tinh thể từ *Bacillus thuringiensis* hoặc một phần của nó là thuốc trừ sâu khi có mặt protein tinh thể khác thứ hai từ *Bacillus thuringiensis* hoặc một phần của nó, chẳng hạn như độc tố nhị phân được tạo nên từ các protein tinh thể Cy34 và Cy35; hoặc

3) protein tinh thể lai bao gồm các phần của hai protein tinh thể kháng sâu bọ khác nhau từ *Bacillus thuringiensis*, như một dạng lai của protein theo 1) ở trên hoặc dạng lai của protein theo 2) ở trên, ví dụ, protein Cry1A.105 được sản xuất từ trường sự kiện ngô MON98034 (WO 2007/027777); hoặc

4) protein theo bất kỳ 1) hoặc 3) ở trên trong đó một số amino axit, đặc biệt là 1 đến 10, được thay thế bởi amino axit khác để nhận được hoạt tính diệt sâu bọ cao hơn đối với các loài sâu bọ đối tượng, và/hoặc để mở rộng phạm vi các loài sâu bọ đối tượng được tác động, và/hoặc do sự thay đổi gây ra trong ADN mã hóa trong suốt sự sinh sản vô tính hoặc biến nạp, như protein Cry3A trong các sự kiện ngô MON863 hoặc MON88017, hoặc protein Cry3A trong sự kiện ngô MIR604;

5) protein kháng sâu bọ được tiết ra từ *Bacillus thuringiensis* hoặc *Bacillus cereus*, hoặc một phần kháng sâu bọ của chúng, như các protein kháng sâu bọ ở thực vật (VIP) được liệt kê tại:

6) protein được tiết ra từ *Bacillus thuringiensis* hoặc *Bacillus cereus* mà kháng sâu bọ khi có mặt protein thứ hai được tiết ra từ *Bacillus thuringiensis* hoặc *B. cereus*, như độc tố nhị phân được tạo thành từ các protein VIP1a và VIP2A;

7) protein trừ sâu lai bao gồm các phần từ các protein khác nhau tiết ra từ *Bacillus thuringiensis* hoặc *Bacillus cereus*, như lai từ protein trong protein tinh thể 1) trên hoặc lai từ protein trong protein tinh thể 2) trên; hoặc

8) protein theo bất kỳ trong số 1) đến 3) ở trên trong đó một số, đặc biệt là 1 đến 10, các amino axit được thay thế bởi amino axit khác để nhận được hoạt tính trừ sâu cao hơn đối với các loài sâu bọ đối tượng, và/hoặc để mở rộng phạm vi các loài sâu bọ đối tượng được tác động, và/hoặc bởi các thay đổi gây ra trong ADN mã hóa trong suốt sự sinh sản

vô tính hoặc sự biến đổi (trong khi đó vẫn mã hóa một protein kháng sâu bọ), như protein VIP3Aa trong sự kiện bông COT102,

Tất nhiên, các cây chuyển gen kháng sâu bọ, như được sử dụng ở đây, cũng bao gồm cây bất kỳ chứa một tổ hợp gồm các gen mã hóa protein thuộc lớp bất kỳ trong số các lớp 1 đến 8 ở trên. Trong một phương án, cây kháng sâu bọ chứa nhiều hơn một gen chuyển mã hóa protein thuộc lớp bất kỳ trong số các lớp từ 1 đến 8, để mở rộng phạm vi các loài sâu bọ đối tượng được tác động hoặc để ngăn cản sự phát triển sức đề kháng với sâu bọ cho cây, bằng cách sử dụng các protein khác nhau kháng sâu bọ với cùng các loài sâu bọ đối tượng nhưng có cách thức hoạt động khác nhau, như liên kết các vùng liên kết thụ quan khác nhau trong sâu bọ.

Cây hoặc các giống cây (nhận được bằng các phương pháp công nghệ sinh học trên cây như kỹ thuật di truyền) có thể cũng được xử lý theo sáng chế có sức chịu với các yếu tố gây áp lực phi sinh học. Các cây này có thể thu được bằng biến nạp gen, hoặc bằng cách chọn lọc các cây chứa đột biến truyền tính chống chịu bất lợi. Các cây dung nạp áp lực đặc biệt hữu dụng gồm có những cây sau đây:

a. những cây chứa một gen chuyển có khả năng làm giảm biểu hiện và/hoặc hoạt tính của gen poly(ADP-riboza)polymeraza (PARP) trong các tế bào của cây hoặc trong các cây;

b. những cây chứa một gen chuyển nâng cao sự dung nạp áp lực có khả năng làm giảm biểu hiện và/hoặc sự hoạt động của các gen mã hóa PARP của cây hoặc các tế bào của cây;

c. những cây chứa một gen chuyển nâng cao sự dung nạp áp lực mã hóa cho enzym chức năng thực vật của quá trình sinh tổng hợp tái sử dụng nicotinamid adenin dinucleotit, bao gồm nicotinamidaza, nicotinat phosphoribosyltransferaza, nicotinic axit mononucleotit adenyltransferaza, nicotinamid adenin dinucleotit synthetaza hoặc nicotinamid phosphoribosyltransferaza.

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

chẳng hạn như, ví dụ:

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

2) cây chuyển gen tổng hợp các polyme cacbohydrat phi tinh bột hoặc tổng hợp các polyme cacbohydrat phi tinh bột có tính chất bị biến đổi so với cây hoang dã mà không có sự biến đổi di truyền. Ví dụ, các cây sản xuất polyfructoza, đặc biệt là dạng inulin và levan, cây sản xuất anpha-1,4-glucan, cây sản xuất anpha-1,4-glucan có nhánh anpha-1,6, và cây sản xuất alternan.

3) cây chuyển gen sản xuất hyaluronan.

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

a) các cây, như cây bông, mà chứa một dạng được biến đổi của các gen xenlulo synthaza,

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

c) các cây, như cây bông, với sự biểu hiện được tăng của enzyme tổng hợp sucroza photphat;

d) các cây, như cây bông, với sự biểu hiện được tăng của enzyme tổng hợp sucroza;

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

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

Cây hoặc cây trồng (có thể thu được bằng các phương pháp công nghệ sinh học thực vật như kỹ thuật di truyền) cũng có thể được xử lý theo sáng chế là các cây, như cải dầu hoặc các cây Brassica có liên quan, với các đặc tính dầu đặc trưng biến đổi. Những cây đó có thể nhận được bằng sự biến nạp di truyền hoặc bằng cách chọn lọc các cây chứa sự truyền đột biến như các đặc tính đặc trưng cho dầu được biến đổi và gồm:

- a) các cây, như cây cải dầu, mà sản xuất dầu có hàm lượng axit oleic cao;
- b) các cây, như cây cải dầu, mà sản xuất dầu có hàm lượng axit linolenic thấp;
- c) các cây, như cây cải dầu, mà sản xuất dầu có các axit béo không no ở mức thấp.

Các cây chuyển gen đặc biệt hữu dụng có thể được xử lý theo sáng chế là các cây gồm có một hoặc nhiều gen mã hóa một hoặc nhiều chất độc và là các cây chuyển gen có sẵn dưới các tên thương mại sau đây: YIELD GARD® (ví dụ như ngô, bông, đậu tương), KnockOut® (ví dụ như ngô), BiteGard® (ví dụ như ngô), BT-Xtra® (ví dụ như ngô), StarLink® (ví dụ như ngô), Bollgard® (bông), Nucotn® (bông), Nucotn 33B® (bông), NatureGard® (ví dụ như ngô), Protecta® và NewLeaf® (khoai tây). Các Ví dụ về các cây dung nạp thuốc diệt cỏ có thể được đề cập đến là các biến thể của ngô, các biến thể của bông và các biến thể của đậu tương có sẵn dưới các tên thương mại sau đây: Roundup Ready® (dung nạp với glyphosat, ví dụ như ngô, bông, đậu tương), Liberty Link® (dung nạp với phosphinothrixin, ví dụ, cây cải dầu), IMI® (dung nạp với imidazolinon) và SCS® (dung nạp với sulphonylure, ví dụ như ngô). Các cây kháng thuốc diệt cỏ (cây được gây giống theo cách truyền thống để dung nạp thuốc diệt cỏ) mà có thể được đề cập bao gồm các loài cây được bán dưới tên thương mại Clearfield® (ví dụ như ngô).

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

Trong bảo vệ vật liệu, các chế phẩm hoặc các hoạt chất theo sáng chế ngoài ra có thể được sử dụng để bảo vệ vật liệu công nghiệp chống lại sự tấn công và sự phá hủy bởi các vi sinh vật không mong muốn, chẳng hạn như, ví dụ, nấm.

Trong ngữ cảnh này, vật liệu công nghiệp được hiểu theo nghĩa là các vật liệu không sống mà được tạo ra để sử dụng trong kỹ thuật. Ví dụ, vật liệu công nghiệp mà có thể cần được bảo vệ bởi các hoạt chất theo sáng chế khỏi sự biến đổi hoặc sự phá hoại của vi khuẩn có thể là chất kết dính, keo dán, giấy và bìa cứng, vải dệt, da thuộc, gỗ, sơn và các vật phẩm bằng chất dẻo, các chất bôi trơn nguội và các vật liệu khác mà có thể bị tấn công hoặc bị phá hủy bởi vi sinh vật. Các nhà máy sản xuất các bộ phận và các công trình, ví dụ, các mạch nước làm mát, các Sơ đồ làm mát và đun nóng và Sơ đồ làm thông gió và các khối điều hòa không khí, chúng có thể bị hư hại bởi sự tăng sinh của các vi sinh vật cũng có thể được đề cập đến trong phạm vi các vật liệu được bảo vệ. Các vật liệu công nghiệp có thể được đề cập với sự tham chiếu cho các mục đích theo sáng chế là chất kết dính, keo dán, giấy và bìa cứng, da thuộc, gỗ, sơn, các chất bôi trơn nguội và các chất lỏng truyền nhiệt, đặc biệt ưu tiên là gỗ. Các tổ hợp hoạt chất theo sáng chế có thể cản trở những ảnh hưởng bất lợi, chẳng hạn như, thối rữa, mục nát, phai màu, khử màu hoặc tạo thành mốc. Các hợp chất theo sáng chế có thể được sử dụng tương tự để bảo vệ các vật thể tiếp xúc với nước biển hoặc nước lợ, cụ thể là các thân tàu thủy, các màng chắn, các lưới, các tòa nhà, các dây chèo và các Sơ đồ phát tín hiệu, chống bắn.

Phương pháp theo sáng chế để kiểm soát các loại nấm không mong muốn có thể cũng được sử dụng để bảo vệ hàng dự trữ. Ở đây, hàng dự trữ được hiểu theo nghĩa là các chất tự nhiên có nguồn gốc thực vật hoặc động vật hoặc các sản phẩm chế biến của chúng có nguồn gốc tự nhiên, muốn bảo vệ lâu dài. Hàng dự trữ có nguồn gốc thực vật, chẳng hạn như, ví dụ, cây hoặc các phần của cây, chẳng hạn như cuống, lá, thân củ, hạt, quả, hạt ngũ cốc, có thể được bảo vệ ngay lúc mới thu hoạch hoặc sau khi chế biến bằng cách sấy khô (trước), làm ẩm, tán nhỏ, nghiền, ép hoặc rang. Hàng dự trữ cũng bao gồm gỗ, cả chưa được chế biến, chẳng hạn như gỗ xây dựng, các cột đèn điện và vật cách điện, hoặc ở dạng các sản phẩm hoàn thiện, chẳng hạn như dụng cụ. Hàng dự trữ có nguồn gốc động vật là, ví dụ, da sống, da thuộc, bộ da lông và lông. Các tổ hợp hoạt chất theo sáng chế có

thể cản trở những ảnh hưởng bất lợi, chẳng hạn như, thối rữa, mục nát, phai màu, khử màu hoặc tạo thành mốc.

Một số thể sinh bệnh của các bệnh do nấm mà có thể được xử lý theo sáng chế có thể được đề cập bằng cách ví dụ, nhưng không bằng cách giới hạn:

các bệnh bị gây ra bởi các mầm bệnh phân trắng, như ví dụ, loài *Blumeria* như, ví dụ, *Blumeria graminis*; loài *Podosphaera* như, ví dụ, *Podosphaera leucotricha*; loài *Sphaerotheca* như, ví dụ, *Sphaerotheca fuliginea*; loài *Uncinula* như, ví dụ, *Uncinula necator*;

các bệnh bị gây ra bởi các thể sinh bệnh gỉ sắt, chẳng hạn như, ví dụ, loài *Gymnosporangium*, chẳng hạn như, ví dụ, *Gymnosporangium sabinae*; loài *Hemileia*, chẳng hạn như, ví dụ, *Hemileia vastatrix*; loài *Phakopsora*, chẳng hạn như, ví dụ, *Phakopsora pachyrhizi* và *Phakopsora meibomia*; loài *Puccinia*, chẳng hạn như, ví dụ, *Puccinia recondita* hoặc *Puccinia triticea*; loài *Uromyces*, chẳng hạn như, ví dụ, *Uromyces appendiculatus*;

các bệnh bị gây ra bởi các thể sinh bệnh thuộc nhóm *Oomycetes*, chẳng hạn như, ví dụ, loài *Bremia*, chẳng hạn như, ví dụ, *Bremia lactucae*; loài *Peronospora*, chẳng hạn như, ví dụ, *Peronospora pisi* hoặc *P. brassicae*; loài *Phytophthora*, chẳng hạn như, ví dụ, *Phytophthora infestans*; loài *Plasmopara*, chẳng hạn như, ví dụ, *Plasmopara viticola*; loài *Pseudoperonospora*, chẳng hạn như, ví dụ, *Pseudoperonospora humuli* hoặc *Pseudoperonospora cubensis*; loài *Pythium*, chẳng hạn như, ví dụ, *Pythium ultimum*;

các bệnh đốm lá và bệnh héo lá bị gây ra, ví dụ, bởi loài *Alternaria*, chẳng hạn như, ví dụ, *Alternaria solani*; loài *Cercospora*, chẳng hạn như, ví dụ, *Cercospora beticola*; loài *Cladosporium*, chẳng hạn như, ví dụ, *Cladosporium cucumerinum*; loài *Cochliobolus*, chẳng hạn như, ví dụ, *Cochliobolus sativus* (dạng bào tử đỉnh: *Drechslera*, syn: *Helminthosporium*); loài *Colletotrichum*, chẳng hạn như, ví dụ, *Colletotrichum lindemuthianum*; loài *Xyloconium*, chẳng hạn như, ví dụ, *Xyloconium oleaginum*; loài *Diaporthe*, chẳng hạn như, ví dụ, *Diaporthe citri*; loài *Elsinoe*, chẳng hạn như, ví dụ, *Elsinoe fawcettii*; loài *Gloeosporium*, chẳng hạn như, ví dụ, *Gloeosporium laeticolor*; loài *Glomerella*, chẳng hạn như, ví dụ, *Glomerella*

cingulata; loài *Guignardia*, chẳng hạn như, ví dụ, *Guignardia bidwelli*; loài *Leptosphaeria*, chẳng hạn như, ví dụ, *Leptosphaeria maculans*; loài *Magnaporthe*, chẳng hạn như, ví dụ, *Magnaporthe grisea*; loài *Microdochium*, chẳng hạn như, ví dụ, *Microdochium nivale*; loài *Mycosphaerella*, chẳng hạn như, ví dụ, *Mycosphaerella graminicola* và *M. fijiensis*; loài *Phaeosphaeria*, chẳng hạn như, ví dụ, *Phaeosphaeria nodorum*; loài *Pyrenophora*, chẳng hạn như, ví dụ, *Pyrenophora teres*; loài *Ramularia*, chẳng hạn như, ví dụ, *Ramularia collo-cygni*; loài *Rhynchosporium*, chẳng hạn như, ví dụ, *Rhynchosporium secalis*; loài *Septoria*, chẳng hạn như, ví dụ, *Septoria apii*; loài *Typhula*, chẳng hạn như, ví dụ, *Typhula incarnata*; loài *Venturia*, chẳng hạn như, ví dụ, *Venturia inaequalis*;

bệnh ở rễ và cuống bị gây ra, ví dụ, bởi loài *Corticium*, chẳng hạn như, ví dụ, *Corticium graminarum*; loài *Fusarium*, chẳng hạn như, ví dụ, *Fusarium oxysporum*; loài *Gaeumannomyces*, chẳng hạn như, ví dụ, *Gaeumannomyces graminis*; loài *Rhizoctonia*, chẳng hạn như, ví dụ, *Rhizoctonia solani*; loài *Tapesia*, chẳng hạn như, ví dụ, *Tapesia aciformis*; loài *Thielaviopsis*, chẳng hạn như, ví dụ, *Thielaviopsis basicola*;

bệnh ở bông và bệnh ở chùy (kể cả ở lõi ngô) bị gây ra, ví dụ, bởi loài *Alternaria*, chẳng hạn như, ví dụ, *Alternaria* spp.; loài *Aspergillus*, chẳng hạn như, ví dụ, *Aspergillus flavus*; loài *Cladosporium*, chẳng hạn như, ví dụ, *Cladosporium cladosporioides*; loài *Claviceps*, chẳng hạn như, ví dụ, *Claviceps purpurea*; loài *Fusarium*, chẳng hạn như, ví dụ, *Fusarium culmorum*; loài *Gibberella*, chẳng hạn như, ví dụ, *Gibberella zeae*; loài *Monographella*, chẳng hạn như, ví dụ, *Monographella nivalis*; loài *Septoria*, chẳng hạn như, ví dụ, *Septoria nodorum*;

các bệnh bị gây ra bởi nấm than, chẳng hạn như, ví dụ, loài *Sphacelotheca*, chẳng hạn như, ví dụ, *Sphacelotheca reiliana*; loài *Tilletia*, chẳng hạn như, ví dụ, *Tilletia caries*, *T. controversa*; loài *Urocystis*, chẳng hạn như, ví dụ, *Urocystis occulta*; loài *Ustilago*, chẳng hạn như, ví dụ, *Ustilago nuda*, *U. nuda tritici*;

bệnh thối quả bị gây ra, ví dụ, bởi loài *Aspergillus*, chẳng hạn như, ví dụ, *Aspergillus flavus*; loài *Botrytis*, chẳng hạn như, ví dụ, *Botrytis cinerea*; loài *Penicillium*, chẳng hạn như, ví dụ, *Penicillium expansum* và *P. purpurogenum*; loài *Sclerotinia*, chẳng hạn như, ví dụ, *Sclerotinia sclerotiorum*;

Verticilium, như, ví dụ, *Verticilium alboatrum*;

bệnh thối trong hạt và thối trong đất và bệnh héo, và còn các bệnh của cây giống con bị gây ra, ví dụ, bởi loài *Fusarium*, chẳng hạn như, ví dụ, *Fusarium culmorum*; loài *Phytophthora*, chẳng hạn như, ví dụ, *Phytophthora cactorum*; loài *Pythium*, chẳng hạn như, ví dụ, *Pythium ultimum*; loài *Rhizoctonia*, chẳng hạn như, ví dụ, *Rhizoctonia solani*; loài *Sclerotium*, chẳng hạn như, ví dụ, *Sclerotium rolfsii*;

bệnh ung thư, bệnh sùi và bệnh chổi rồng bị gây ra, ví dụ, bởi loài *Nectria*, chẳng hạn như, ví dụ, *Nectria galligena*;

bệnh héo bị gây ra, ví dụ, bởi loài *Monilinia*, chẳng hạn như, ví dụ, *Monilinia laxa*;

các biến dạng của lá, hoa và quả bị gây ra, ví dụ, bởi loài *Taphrina*, chẳng hạn như, ví dụ, *Taphrina deformans*;

bệnh thoái hóa ở các cây lấy gỗ bị gây ra bởi, ví dụ, bởi loài *Esca*, chẳng hạn như, ví dụ, *Phaeomoniella chlamydospora* và *Phaeoacremonium aleophilum* và *Fomitiporia mediterranea*;

các bệnh ở hoa và hạt bị gây ra, ví dụ, bởi loài *Botrytis*, chẳng hạn như chẳng hạn như, ví dụ, *Botrytis cinerea*;

các bệnh ở thân củ của cây bị gây ra, ví dụ, bởi loài *Rhizoctonia*, chẳng hạn như chẳng hạn như, ví dụ, *Rhizoctonia solani*; loài *Helminthosporium*, chẳng hạn như chẳng hạn như, ví dụ, *Helminthosporium solani*;

các bệnh bị gây ra bởi các mầm bệnh do vi khuẩn, như, ví dụ, loài *Xanthomonas* như, ví dụ, *Xanthomonas campestris* pv. *oryzae*; loài *Pseudomonas* như, ví dụ, *Pseudomonas syringae* pv. *lachrymans*; loài *Erwinia* như, ví dụ, *Erwinia amylovora*;

Sự ưu tiên được đưa ra để kiểm soát các bệnh của các cây đậu tương dưới đây:

Bệnh nấm trên lá, cuống, vỏ quả và hạt bị gây ra, ví dụ, bệnh đốm lá do nấm *Alternaria* (*Alternaria spec. atrans tenuissima*), bệnh loét (*Colletotrichum gloeosporoides dematium* var. *truncatum*), bệnh đốm nâu (*Septoria glycines*), bệnh đốm lá do nấm *Cercospora* và bệnh tàn rụi (*Cercospora kikuchii*), bệnh tàn rụi lá do nấm *Choanephora* (*Choanephora infundibulifera trispora* (cộng sinh)), bệnh đốm lá

do nấm *Dactuliophora* (*Dactuliophora glycines*), bệnh sương mai (*Peronospora manshurica*), bệnh tàn rụi do nấm *Drechslera* (*Drechslera glycini*), bệnh đốm lá mắt ếch (*Cercospora sojina*), bệnh đốm lá do nấm *Leptosphaerulina* (*Leptosphaerulina trifolii*), bệnh đốm lá do nấm *Phyllosticta* (*Phyllosticta sojaecola*), bệnh tàn rụi vỏ quả và cuống lá (*Phomopsis sojae*), bệnh sương mai (*Microsphaera diffusa*), bệnh đốm lá do nấm *Pyrenochaeta* (*Pyrenochaeta glycines*), bệnh cháy nhũn lá (*Rhizoctonia solani*), bệnh gỉ sắt (*Phakopsora pachyrhizi* *Phakopsora meibomia*), bệnh nấm vảy (*Sphaceloma glycines*), bệnh tàn rụi lá *Stemphylium* (*Stemphylium botryosum*), bệnh đốm vòng nâu đỏ (*Corynespora cassiicola*).

Các bệnh nấm trên rễ cây và gốc thân bị gây ra bởi, ví dụ, bệnh thối rễ màu đen (*Calonectria crotalariae*), bệnh thối đen (*Macrophomina phaseolina*), bệnh tàn rụi *Fusarium* hoặc bệnh héo lá, bệnh thối rễ, và vỏ quả và bệnh lở cổ rễ (*Fusarium oxysporum*, *Fusarium orthoceras*, *Fusarium semitectum*, *Fusarium equiseti*), bệnh thối rễ *Mycoleptodiscus* (*Mycoleptodiscus terrestris*), bệnh neocosmospora (*Neocosmopora vasinfecta*), bệnh tàn rụi vỏ quả và thân (*Diaporthe phaseolorum*), bệnh loét thân (*Diaporthe phaseolorum* var. *caulivora*), bệnh thối rữa *Phytophthora* (*Phytophthora megasperma*), bệnh thối nâu thân (*Phialophora gregata*), bệnh thối *Pythium* (*Pythium aphanidermatum*, *Pythium irregulare*, *Pythium debaryanum*, *Pythium myriotylum*, *Pythium ultimum*), bệnh thối rễ *Rhizoctonia*, mục thân, và chết cây non (*Rhizoctonia solani*), bệnh mục thân *Sclerotinia* (*Sclerotinia sclerotiorum*), bệnh thối nâu có hạch (*Sclerotinia rolfsii*), bệnh thối rễ *Thielaviopsis* (*Thielaviopsis basicola*).

Các sinh vật có thể làm giảm phẩm chất hoặc biến đổi các vật liệu công nghiệp và có thể được đề cập đến là nấm. Các hoạt chất theo sáng chế ưu tiên tác dụng đối với nấm, cụ thể là các loại mốc, nấm làm phai màu và phá hủy gỗ (*Basidiomycetes*), và đối với các sinh vật tạo ra chất nhớt và tảo. Các vi sinh vật thuộc giống sau đây có thể được đề cập làm ví dụ: *Alternaria*, chẳng hạn như *Alternaria tenuis*; *Aspergillus*, chẳng hạn như *Aspergillus niger*; *Chaetomium*, chẳng hạn như *Chaetomium globosum*; *Coniophora*, chẳng hạn như *Coniophora puetana*; *Lentinus*, chẳng hạn như *Lentinus tigrinus*; *Penicillium*, chẳng hạn như *Penicillium glaucum*; *Polyporus*, chẳng hạn như *Polyporus*

versicolor; *Aureobasidium*, chẳng hạn như *Aureobasidium pullulans*; *Sclerophoma*, chẳng hạn như *Sclerophoma pityophila*; *Trichoderma*, chẳng hạn như *Trichoderma viride*;

Ngoài ra, các hoạt chất theo sáng chế cũng có hoạt tính chống nấm rất tốt. Chúng có phổ hoạt tính chống nấm rất rộng, cụ thể chống lại các nấm ngoài da và các men, nấm mốc và nấm hai pha (ví dụ, chống lại loại nấm *Candida* như là *Candida albicans*, *Candida glabrata*) và *Epidermophyton floccosum*, loại nấm cúc *Aspergillus* như *Aspergillus niger* và *Aspergillus fumigatus*, loại nấm chốc đầu *Trichophyton* như *Trichophyton mentagrophytes*, loại tiêu bào từ *Microsporon* như *Microsporon canis* và *audouinii*. Danh sách các nấm này không có nghĩa là giới hạn phổ

Khi sử dụng các hoạt chất theo sáng chế làm thuốc diệt nấm, tỷ lệ áp dụng có thể được thay đổi trong phạm vi tương đối rộng, phụ thuộc vào loại áp dụng. Tỷ lệ áp dụng của các hoạt chất theo sáng chế là

khi xử lý các bộ phận của cây, ví dụ, các lá: từ 0,1 đến 10 000 g/ha, ưu tiên từ 10 đến 1000 g/ha, đặc biệt ưu tiên từ 50 đến 300 g/ha (khi sự áp dụng được thực hiện bằng cách tưới hoặc nhỏ giọt, thậm chí có thể giảm tỷ lệ áp dụng nhiều hơn, đặc biệt khi các chất nền tro như len đá hoặc đá trân châu được sử dụng);

khi xử lý hạt: từ 2 đến 200 g trên 100 kg hạt giống, ưu tiên từ 3 đến 150 g trên 100 kg hạt giống, đặc biệt ưu tiên từ 2,5 đến 25 g trên 100 kg hạt giống, ưu tiên rất đặc biệt từ 2,5 đến 12,5 g trên 100 kg hạt giống;

khi xử lý đất: từ 0,1 đến 10 000 g/ha, ưu tiên từ 1 đến 5000 g/ha.

Các tỷ lệ áp dụng này được đề cập chỉ bằng ví dụ, và không giới hạn ý tưởng của sáng chế.

Các hoạt chất hoặc các chế phẩm theo sáng chế cũng có thể được sử dụng để bảo vệ các cây trồng trong một khoảng thời gian nhất định sau khi xử lý để chống lại sự tấn công của các mầm bệnh đã được đề cập. Khoảng thời gian bảo vệ được cung cấp thường kéo dài trong khoảng thời gian từ 1 đến 28 ngày, ưu tiên trong khoảng thời gian từ 1 đến 14 ngày, ưu tiên đặc biệt trong khoảng thời gian từ 1 đến 10 ngày, ưu tiên rất đặc biệt là trong khoảng thời gian từ 1 đến 7 ngày, sau khi xử lý cây bằng các hoạt chất, hoặc tới 200 ngày sau khi xử lý hạt giống.

Hơn nữa, bằng cách xử lý theo sáng chế có thể làm giảm hàm lượng độc tố nấm trong vật liệu thu hoạch và thực phẩm và thức ăn gia súc được chế biến từ đó. Đặc biệt, không loại trừ, các độc tố sau đây có thể được đề cập đến: deoxynivalenol (DON), nivalenol, 15-Ac-DON, 3-Ac-DON, T2- và HT2-toxin, fumonisin, zearalenon, moniliformin, fusarin, diacetoxyscirpenol (DAS), beauverixin, enniatin, fusaroproliferin, fusarenol, ochratoxins, patulin, các ergot alkaloid và các aflatoxin được tạo ra, ví dụ, bởi nấm sau đây: *Fusarium spec.*, như là *Fusarium acuminatum*, *F. avenaceum*, *F. crookwellense*, *F. culmorum*, *F. graminearum* (*Gibberella zeae*), *F. equiseti*, *F. fujikoroii*, *F. musarum*, *F. oxysporum*, *F. proliferatum*, *F. poae*, *F. Pseudograminarum*, *F. sambucinum*, *F. scirpi*, *F. semitectum*, *F. solani*, *F. sporotrichoides*, *F. langsethiae*, *F. subglutinans*, *F. tricinctum*, *F. verticillioides*, không kể vào những cái khác, còn có *Aspergillus spec.*, *Penicillium spec.*, *Claviceps purpurea*, *Stachybotrys spec.* không kể vào những cái khác.

Các cây đã liệt kê có thể được xử lý theo sáng chế theo một phương thức đặc biệt thuận lợi bằng các dẫn xuất pyridinylpyrazol hai vòng có công thức (I) hoặc các chế phẩm theo sáng chế. Các gốc được ưu tiên bên trên cho các hoạt chất hoặc các chế phẩm cũng áp dụng để xử lý các cây này. Sự nhấn mạnh đặc biệt được đưa ra với việc xử lý các cây bằng các hợp chất hoặc chế phẩm được đề cập cụ thể trong sáng chế.

Ví dụ thực hiện sáng chế

Việc điều chế và dụng các hoạt chất có công thức (I) theo sáng chế được minh họa bởi các ví dụ, sau đây. Tuy nhiên, sáng chế không bị giới hạn đối với các ví dụ, này.

Ví dụ về bước quy trình [V1] từ các sơ đồ 3 và 7:

Ví dụ 2: 2-(4-Flophenyl)-3-(pyridin-4-yl)-4,5,6,7-tetrahydropyrazolo[1,5-a]pyridin

Hỗn hợp của 1,64 g (11,1 mmol) 4,5,6,7-tetrahydro[1,2,3]oxadiazolo[3,4-a]pyridin-8-ium 3-olat và 2,19 g (11,1 mmol) 4-{[4-flophenyl]ethynyl}pyridin trong 40 ml mesitylen được khuấy trong khí argon ở nhiệt độ 165°C trong thời gian 16 giờ. Sau khi làm mát, hỗn hợp phản ứng được cô đặc dưới áp suất quy đổi. Sự tinh chế bằng sắc ký cột (xyclohexan/etyl axetat 1:1) cho 888 mg (27%) sản phẩm mong muốn

(logP (pH=2,3): 1,03; $^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3\text{-d}1)$: $^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3), δ 8,52 (d, 2H), 7,38 (m, 1H), 7,08 (m, 2H), 7,00 (t, 1H), 4,25 (dd, 2H), 2,85 (dd, 2H), 2,12 (m, 2H), 1,92 (t, 3H).

Ví dụ về bước quy trình [V2] từ các sơ đồ 4 và 7:

4- $\{[4\text{-(Triflometyl)phenyl}]\text{ethynyl}\}$ pyridin (II-1)

Trong khí argon, hỗn hợp của 1,20 g (6,17 mmol) 4-bromopyridin clohydric, 1,57 g (9,26 mmol) 1-ethynyl-4-(triflometyl)benzen, 88 mg (0,46 mmol) đồng(I) iod và 251 mg (0,31 mmol) Pd(dppf)Cl_2 trong 10 ml trietylamin được đun nóng ở nhiệt độ 90°C trong thời gian 3 giờ. Sau khi cô đặc, hỗn hợp phản ứng được hấp thụ trong 100 ml etyl axetat và được rửa với 2x 100 ml HCl 1 M. Pha nước được điều chỉnh tới pH=10 sử dụng dung dịch nước natri hydroxit và được chiết bằng 3x 100 ml cloform. Các pha hữu cơ đã kết hợp được rửa với 50 ml dung dịch nước NaHCO_3 bão hòa và được làm khô qua Na_2SO_4 , được lọc và được giải phóng khỏi dung môi dưới áp suất giảm. Cho 380 mg (24%) sản phẩm mong muốn; logP(HCOOH): 2,86; $^1\text{H-NMR}(\text{DMSO-d}6)$ δ : 8,66 (d, 2H), 7,84 (s, 4H), 7,58 (d, 2H)

Các hợp chất sau đây có thể được điều chế tương tự:

4- $\{[3\text{-(Triflometyl)phenyl}]\text{ethynyl}\}$ pyridin (II-2); logP(pH7): 3,50 với MS (ESI): 248,1 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

4- $\{[4\text{-(Metoxy)phenyl}]\text{ethynyl}\}$ pyridin (II-3); logP(pH7): 2,68; $^1\text{H-NMR}(\text{DMSO-d}6)$ δ : 8,60 (d, 2H), 7,55 (d, 2H), 7,48 (d, 2H), 7,02 (d, 2H).

4- $\{[4\text{-Flophenyl}]\text{ethynyl}\}$ pyridin (II-4); logP(pH7): 2,81; $^1\text{H-NMR}(\text{DMSO-d}6)$ δ : 8,63 (d, 2H), 7,68 (dd, 2H), 7,52 (d, 2H), 7,32 (dd, 2H).

4- $\{[4\text{-Clophenyl}]\text{ethynyl}\}$ pyridin (II-5); logP(HCOOH): 2,43; với MS (ESI): 214,0/216,0 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

2-Clo-4- $\{[4\text{-flophenyl}]\text{ethynyl}\}$ pyridin (II-6); logP(HCOOH): 3,80 với MS (ESI): 232,1/234,1 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

Ví dụ về bước quy trình [V1] từ các sơ đồ 5 và 7:

5,6,7,8-Tetrahydro-4H-[1,2,3]oxadiazolo[3,4-a]azepin-9-ium 3-olat (III-1)

Ở nhiệt độ 0°C, dung dịch của 7,80 g (43,4 mmol) axit azepan-2-carboxylic và 4,10 g (59,5 mmol) natri nitrit trong 50 ml nước được axit hóa tới độ pH=3 sử dụng HCl (đặc) và tiếp đó được khuấy trong thời gian 1 giờ. 50 ml etyl axetat được bổ sung vào hỗn hợp phản ứng, pha hữu cơ được tách ra và pha nước được chiết với 2 x 50 ml etyl axetat. Pha hữu cơ kết hợp được làm khô qua MgSO₄ và dung môi được lấy ra dưới áp suất quy đổi. Axit 1-nitrosoazepan-2-carboxylic thu được (6,80 g, 67%) được hấp thụ trong 15 ml axetonitril mà không cần tinh chế thêm, và 12,4 g (59,2 mmol) trifloaxetic anhydrua được bổ sung từng giọt ở nhiệt độ 0°C. Sau 2 giờ khuấy ở nhiệt độ phòng, 8,19 g (59,2 mmol) kali cacbonat được bổ sung, và khuấy tiếp tục thêm 20 phút nữa. 40 ml etyl axetat và 20 ml nước được bổ sung vào hỗn hợp phản ứng, và pha nước được chiết với 3 x 40 ml etyl axetat. Pha hữu cơ kết hợp được làm khô qua MgSO₄ và dung môi được lấy ra dưới áp suất quy đổi. Tinh chế bằng sắc ký cột trên silica gel (xyclohexan/etyl axetat) cho 5,50 g (90%) sản phẩm mong muốn; logP(HCOOH): 0,6; ¹H-NMR (DMSO-d₆): 4,45 (m, 2H), 2,56 (m, 2H), 1,83 (m, 4H), 1,57 (m, 2H)

Các hợp chất sau đây có thể được điều chế tương tự:

4,5,6,7-Tetrahydro[1,2,3]oxadiazolo[3,4-a]pyridin-8-ium 3-olat (III-2); logP(HCOOH): 0,59; ¹H-NMR(MeCN-d₃) δ: 4,22 (dd, 2H), 2,50 (dd, 2H), 2,02 (m, 2H), 1,87 (m, 2H).

5,6-Dihydro-4H-pyrol[1,2-c][1,2,3]oxadiazol-7-ium 3-olat (III-3); ¹H-NMR(DMSO-d₆) δ: 4,47 (dd, 2H), 2,73 (m, 2H), 2,67 (m, 2H).

5-tert-Butoxy-5,6-dihydro-4H-pyrol[1,2-c][1,2,3]oxadiazol-7-ium 3-olat (III-4); logP(HCOOH): 1,34; ¹H-NMR(DMSO-d₆) δ: 5,03 (m, 1H), 4,74 (dd, 1H), 4,27 (dd, 1H), 3,11 (dd, 1H), 1,18 (s, 9H).

Ví dụ về bước quy trình [V4] từ sơ đồ 7:

Ví dụ 70: 4-[2-(Phenyl)-5,6-dihydro-4H-pyrol[1,2-b]pyrazol-3-yl]-N-isopropyl pyridin-2-amin (Ic)

Trong nồi hấp, hỗn hợp của 1,10 g (0,39 mmol) 3-(2-flopyridin-4-yl)-2-phenyl-5,6-dihydro-4H-pyrol[1,2-b]pyrazol và 1,5 ml isopropylamin được đun nóng ở nhiệt độ 140°C. Sau khoảng thời gian 16 giờ, hỗn hợp phản ứng được cô đặc dưới áp suất

quy đổi. Sau khi tinh chế bằng sắc ký cột trên silica gel (xyclohexan/etyl axetat), thu được 50 mg (35%) sản phẩm mong muốn; logP(HCOOH): 1,21; $^1\text{H-NMR(DMSO-d}_6\text{)}$: 7,81 (d, 1H), 7,36 (m, 5H), 6,28 (s, 1H), 6,21 (m, 2H), 4,15 (dd, 2H), 3,84 (m, 1H), 2,98 (dd, 2H), 2,59 (m, 2H), 1,08 (d, 6H).

Ví dụ về bước quy trình [V6] từ sơ đồ 7:

Ví dụ 3: 4-[2-(4-Flophenyl)-4,5,6,7-tetrahydropyrazolo[1,5-a]pyridin-3-yl]pyridin-2-amin (Ie)

Với làm lạnh bằng đá, 10 ml axit sulfuric đặc được bổ sung vào 1,29 g (1,29 mmol) N-benzyl-4-[2-(4-flophenyl)-4,5,6,7-tetrahydropyrazolo[1,5-a]pyridin-3-yl]pyridin-2-amin, và hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ phòng trong thời gian 1 giờ. Hỗn hợp phản ứng được khuấy trong nước đá, được điều chỉnh tới pH=10 sử dụng NaOH đặc và được chiết với 3 x 50 ml diclometan. Các pha hữu cơ kết hợp được rửa với nước, được làm khô qua MgSO_4 và dung môi được lấy ra dưới áp suất quy đổi. Cho 239 mg (35%) sản phẩm mong muốn; logP(HCOOH): 1,21; $^1\text{H-NMR(DMSO-d}_6\text{)}$: 7,81 (d, 1H), 7,416 (dd, 2H), 7,15 (dd, 2H), 6,28 (s, 1H), 6,24 (d, 1H), 5,83 (br.s, 2H), 4,15 (dd, 2H), 2,73 (dd, 2H), 2,02 (m, 2H), 1,80 (m, 2H).

Ví dụ về bước quy trình [V7] từ sơ đồ 7:

Ví dụ 26: Metyl {4-[2-(4-flophenyl)-4,5,6,7-tetrahydropyrazolo[1,5-a]pyridin-3-yl]pyridin-2-yl}carbamate (If)

125 mg (1,29 mmol) metyl cloformat được bổ sung từng giọt vào dung dịch của 200 mg (0,51 mmol) 4-[2-(4-flophenyl)-4,5,6,7-tetrahydropyrazolo[1,5-a]pyridin-3-yl]pyridin-2-amin và 167 mg (1,29 mmol) diisopropyletylamin trong 20 ml THF. Sau khoảng thời gian 16 giờ, 10 ml nước được bổ sung, và hỗn hợp phản ứng được chiết với 3 x 50 ml etyl axetat. Các pha hữu cơ kết hợp được rửa với nước, được làm khô qua MgSO_4 và dung môi được lấy ra dưới áp suất quy đổi. Phần còn lại được hấp thụ lại trong 10 ml dung dịch metanolic amoni 6N và được khuấy trong thời gian 12 giờ. Hỗn hợp phản ứng được cô đặc và phần còn lại thu được được tinh chế bởi sắc ký cột trên silica gel (xyclohexan/etyl axetat). Cho 167 mg (87%) sản phẩm mong muốn; logP(HCOOH): 2,11; $^1\text{H-NMR(MeCN-d}_3\text{)}$: 8,13 (br.s, 1H), 8,10 (d, 1H), 7,76 (s, 1H),

7,42 (dd, 2H), 7,05 (dd, 2H), 6,76 (d, 1H), 4,16 (dd, 2H), 3,69 (s, 3H), 2,82 (dd, 2H), 2,09 (m, 2H), 1,88 (m, 2H).

Ví dụ về bước quy trình [V10] từ sơ đồ 7:

2-(4-Flophenyl)-4,5,6,7-tetrahydropyrazolo[1,5-a]pyridin (VII-1)

Hỗn hợp của 2,44 g (16,5 mmol) 4,5,6,7-tetrahydro[1,2,3]oxadiazolo[3,4-a]pyridin-8-ium 3-olat và 2,15 g (16,5 mmol) 4-flophenylaxetylen trong 80 ml mesitylen được khuấy trong argon ở nhiệt độ 165°C trong thời gian 16 giờ. Sau khi làm mát, hỗn hợp phản ứng được cô đặc dưới áp suất quy đổi. Tinh chế bằng sắc ký cột trên silica gel (xyclohexan/etyl axetat) cho 888 mg (27%) sản phẩm mong muốn; logP(HCOOH): 2,76; ¹H-NMR(MeCN-d₃): 7,76 (dd, 2H), 7,11 (dd, 2H), 6,29 (s, 1H), 4,09 (dd, 2H), 2,79 (dd, 2H), 2,02 (m, 2H), 1,84 (m, 2H).

Các hợp chất sau đây có thể được điều chế tương tự:

2-(Phenyl)-5,6-dihydro-4H-pyrol[1,2-b]pyrazol (VII-2); logP(HCOOH): 2,19; ¹H-NMR(DMSO-d₆): 7,75 (d, 2H), 7,38 (dd, 2H), 7,25 (dd, 1H), 6,43 (s, 1H), 4,09 (dd, 2H), 2,86 (dd, 2H), 2,55 (m, 2H).

2-(4-Flophenyl)-5,6-dihydro-4H-pyrol[1,2-b]pyrazol (VII-3); logP(HCOOH): 2,42; ¹H-NMR(DMSO-d₆): 7,78 (dd, 2H), 7,19 (dd, 2H), 6,42 (s, 1H), 4,07 (dd, 2H), 2,85 (dd, 2H), 2,54 (m, 2H).

2-(4-Flophenyl)-5,6,7,8-tetrahydro-4H-pyrazolo[1,5-a]azepin (VII-3); logP(HCOOH): 3,27; ¹H-NMR(DMSO-d₆): 7,74 (dd, 2H), 7,19 (dd, 2H), 6,45 (s, 1H), 4,24 (m, 2H), 2,76 (m, 2H), 1,79 (m, 2H), 1,68 (m, 2H), 1,58 (m, 2H).

2-(4-Clophenyl)-5,6-dihydro-4H-pyrol[1,2-b]pyrazol (VII-4); logP(HCOOH): 2,86; ¹H-NMR(DMSO-d₆): 7,76 (d, 2H), 7,42 (d, 2H), 6,46 (s, 1H), 4,09 (dd, 2H), 2,86 (dd, 2H), 2,54 (m, 2H).

2-(Phenyl)-4,5,6,7-tetrahydropyrazolo[1,5-a]pyridin (VII-5); (logP(HCOOH): 2,57; ¹H-NMR(MeCN-d₃): 7,75 (dd, 2H), 7,36 (dd, 2H), 7,27 (dd, 1H), 6,33 (s, 1H), 4,10 (dd, 2H), 2,80 (dd, 2H), 2,05 (m, 2H), 1,84 (m, 2H).

2-[3-(Triflometyl)phenyl]-5,6-dihydro-4H-pyrolo[1,2-b]pyrazol (VII-6);
logP(HCOOH): 3,25; ¹H-NMR(DMSO-d₆): 8,05 (m, 2H), 7,62 (m, 2H), 6,60 (s, 1H), 4,12 (dd, 2H), 2,88 (dd, 2H), 2,56 (m, 2H).

2-[4-(Metoxy)phenyl]-5,6-dihydro-4H-pyrolo[1,2-b]pyrazol (VII-7);
logP(HCOOH): 2,17; ¹H-NMR(DMSO-d₆): 7,66 (d, 2H), 6,93 (d, 2H), 6,34 (s, 1H), 4,06 (dd, 2H), 3,76 (s, 3H), 2,84 (dd, 2H), 2,54 (m, 2H).

2-[4-Metylphenyl]-5,6-dihydro-4H-pyrolo[1,2-b]pyrazol (VII-8);
logP(HCOOH): 2,64; ¹H-NMR(DMSO-d₆): 7,63 (d, 2H), 7,17 (d, 2H), 6,37 (s, 1H), 4,08 (dd, 2H), 2,85 (dd, 2H), 2,54 (m, 2H), 2,30 (s, 3H).

2-[4-(Triflometyl)phenyl]-5,6-dihydro-4H-pyrolo[1,2-b]pyrazol (VII-9);
logP(HCOOH): 3,20; ¹H-NMR(DMSO-d₆): 7,66 (d, 2H), 7,71 (d, 2H), 6,57 (s, 1H), 4,13 (dd, 2H), 2,89 (dd, 2H), 2,57 (m, 2H).

2-[3-Flophenyl]-5,6-dihydro-4H-pyrolo[1,2-b]pyrazol (VII-10);
logP(HCOOH): 2,46; ¹H-NMR(DMSO-d₆): 7,60 (d, 1H), 7,52 (d, 1H), 7,42 (dd, 1H), 7,09 (dd, 1H), 6,51 (s, 1H), 4,10 (dd, 2H), 2,86 (dd, 2H), 2,55 (m, 2H).

2-(2-Thienyl)-4,5,6,7-tetrahydropyrazolo[1,5-a]pyridin (VII-11);
logP(HCOOH): 2,42; ¹H-NMR(MeCN-d₃): 7,26 (m, 2H), 7,03 (dd, 1H), 6,23 (s, 1H), 4,06 (dd, 2H), 2,78 (dd, 2H), 2,02 (m, 2H), 1,86 (m 2H).

2-(3-Thienyl)-4,5,6,7-tetrahydropyrazolo[1,5-a]pyridin (VII-12);
logP(HCOOH): 2,25; ¹H-NMR(MeCN-d₃): 7,53 (s, 1H), 7,42 (m, 2H), 6,22 (s, 1H), 4,07 (dd, 2H), 2,78 (dd, 2H), 2,02 (m, 2H), 1,86 (m 2H).

2-[3-Thienyl]-5,6-dihydro-4H-pyrolo[1,2-b]pyrazol (VII-13); logP(HCOOH): 2,01; ¹H-NMR(DMSO-d₆): 7,66 (d, 1H), 7,53 (m, 1H), 7,42 (d, 1H), 6,30 (s, 1H), 4,05 (dd, 2H), 2,84 (dd, 2H), 2,55 (m, 2H).

Ví dụ về bước quy trình [V11] từ sơ đồ 7:

2-(4-Flophenyl)-3-iodo-4,5,6,7-tetrahydropyrazolo[1,5-a]pyridin (VIII-1)

Dung dịch của 2,20 g (13,5 mmol) iot monoclorua trong 5 ml diclometan được bổ sung từng giọt vào dung dịch của 2,66 g (12,3 mmol) 2-(4-flophenyl)-4,5,6,7-tetrahydropyrazolo[1,5-a]pyridin trong 50 ml diclometan, và hỗn hợp được khuấy

trong thời gian 12 giờ. 100 ml nước được bổ sung, và hỗn hợp phản ứng được chiết với 3 x 50 ml diclometan. Pha hữu cơ kết hợp được làm khô qua MgSO_4 và dung môi được lấy ra dưới áp suất quy đổi. Cho 4,40 g (98%) sản phẩm mong muốn; $\log P(\text{HCOOH})$: 3,79; $^1\text{H-NMR}(\text{MeCN-d}_3)$: 7,82 (dd, 2H), 7,18 (dd, 2H), 4,11 (dd, 2H), 2,67 (dd, 2H), 2,06 (m, 2H), 1,94 (m, 2H).

Các hợp chất sau đây có thể được điều chế tương tự:

2-(4-Flophenyl)-3-iodo-5,6,7,8-tetrahydro-4H-pyrazolo[1,5-a]azepin (VIII-2); $\log P(\text{HCOOH})$: 4,35 $^1\text{H-NMR}(\text{DMSO-d}_6)$: 7,77 (d, 2H), 7,28 (dd, 2H), 7,25 (dd, 1H), 4,33 (m, 2H), 2,84 (m, 2H), 1,82 (m, 2H), 1,72 (m, 2H), 1,61 (m, 2H).

2-[3-(Triflometyl)phenyl]-3-iodo-5,6-dihydro-4H-pyrololo[1,2-b]pyrazol (VIII-3); $\log P(\text{HCOOH})$: 4,11 $^1\text{H-NMR}(\text{DMSO-d}_6)$: 8,10 (m, 2H), 7,72 (m, 2H), 4,24 (dd, 2H), 2,88 (dd, 2H), 2,56 (m, 2H).

2-(4-Clophenyl)-3-iodo-5,6-dihydro-4H-pyrololo[1,2-b]pyrazol (VIII-4); $\log P(\text{HCOOH})$: 3,88 $^1\text{H-NMR}(\text{DMSO-d}_6)$: 7,80 (d, 2H), 7,50 (d, 2H), 4,21 (dd, 2H), 2,83 (dd, 2H), 2,58 (m, 2H).

2-(Phenyl)-3-iodo-5,6-dihydro-4H-pyrololo[1,2-b]pyrazol (VIII-5); $\log P(\text{HCOOH})$: 3,09 $^1\text{H-NMR}(\text{DMSO-d}_6)$: 7,77 (d, 2H), 7,45 (dd, 2H), 7,34 (dd, 1H), 4,21 (dd, 2H), 2,82 (dd, 2H), 2,58 (m, 2H).

2-(4-Flophenyl)-3-iodo-5,6-dihydro-4H-pyrololo[1,2-b]pyrazol (VIII-6); $\log P(\text{HCOOH})$: 3,30 $^1\text{H-NMR}(\text{DMSO-d}_6)$: 7,78 (dd, 2H), 7,28 (dd, 2H), 4,20 (dd, 2H), 2,85 (dd, 2H), 2,52 (m, 2H).

2-[4-Metylphenyl]-3-iodo-5,6-dihydro-4H-pyrololo[1,2-b]pyrazol (VIII-7); $\log P(\text{HCOOH})$: 3,54 $^1\text{H-NMR}(\text{DMSO-d}_6)$: 7,64 (d, 2H), 7,23 (d, 2H), 4,20 (dd, 2H), 2,83 (dd, 2H), 2,55 (m, 2H), 2,33 (s, 3H).

2-[3-Thienyl]-3-iodo-5,6-dihydro-4H-pyrololo[1,2-b]pyrazol (VIII-8); $\log P(\text{HCOOH})$: 2,97 $^1\text{H-NMR}(\text{DMSO-d}_6)$: 7,93 (d, 1H), 7,59 (dd, 1H), 7,53 (d, 1H), 4,19 (dd, 2H), 2,81 (dd, 2H), 2,55 (m, 2H).

2-[4-(Metoxy)phenyl]-3-iodo-5,6-dihydro-4H-pyrolo[1,2-b]pyrazol (VIII-9);
logP(HCOOH): 3,01 ¹H-NMR(DMSO-d₆): 7,68 (d, 2H), 6,99 (d, 2H), 4,19 (dd, 2H),
3,79 (s, 3H), 2,82 (dd, 2H), 2,54 (m, 2H).

2-[4-(Triflometyl)phenyl]-3-iodo-5,6-dihydro-4H-pyrolo[1,2-b]pyrazol (VIII-10); logP(HCOOH): 4,13 ¹H-NMR(DMSO-d₆): 8,01 (d, 2H), 7,81 (d, 2H), 4,25 (dd, 2H), 2,88 (dd, 2H), 2,57 (m, 2H).

2-[3-Flophenyl]-3-iodo-5,6-dihydro-4H-pyrolo[1,2-b]pyrazol (VIII-11);
logP(HCOOH): 3,32 ¹H-NMR(DMSO-d₆): 7,65 (d, 1H), 7,52 (m, 2H), 7,20 (dd, 1H),
4,22 (dd, 2H), 2,81 (dd, 2H), 2,58 (m, 2H).

2-(Phenyl)-3-iodo-4,5,6,7-tetrahydropyrazolo[1,5-a]pyridin (VIII-12);
(logP(HCOOH): 3,55; ¹H-NMR(MeCN-d₃): 7,80 (d, 2H), 7,39 (m, 3H), 4,12 (dd, 2H),
2,68 (dd, 2H), 2,05 (m, 2H), 1,84 (m, 2H).

2-(2-Thienyl)-3-iodo-4,5,6,7-tetrahydropyrazolo[1,5-a]pyridin (VIII-13);
logP(HCOOH): 3,45 ¹H-NMR(MeCN-d₃): 7,74 (d, 1H), 7,37 (d, 1H), 7,11 (dd, 1H),
4,09 (dd, 2H), 2,66 (dd, 2H), 2,02 (m, 2H), 1,86 (m 2H).

2-(3-Thienyl)-3-iodo-4,5,6,7-tetrahydropyrazolo[1,5-a]pyridin (VIII-14);
logP(HCOOH): 3,40 ¹H-NMR(MeCN-d₃): 7,95 (s, 1H), 7,57 (d, 1H), 7,44 (dd, 1H),
4,08 (dd, 2H), 2,66 (dd, 2H), 2,11 (m, 2H), 1,91 (m 2H).

3-Iodo-2-phenyl-6,7-dihydro-4H-pyrazolo[5,1-c][1,4]oxazin (VIII-15);
logP(HCOOH): 2,82 ¹H-NMR(DMSO-d₆): 7,77 (d, 2H), 7,47 (dd, 2H), 7,39 (dd, 1H),
4,70 (s, 2H), 4,16 (m, 2H), 4,09 (m, 2H).

2-(4-Flophenyl)-3-iodo-7,7-dimetyl-4,5-dihydropyrazolo[1,5-c][1,3]oxazin
(VIII-16); logP(HCOOH): 4,28 ¹H-NMR(DMSO-d₆): 7,81 (dd, 2H), 7,29 (dd, 2H),
4,09 (t, 2H), 2,76 (t, 2H), 1,68 (s, 6H).

3-Bromo-2-(4-flophenyl)-6,7-dihydro-4H-pyrazolo[5,1-c][1,4]oxazin (VIII-17);
tương tự với 2 eq. NBS logP(HCOOH): 2,90 ¹H-NMR(MeCN-d₃): δ = 7,90-7,86 (m,
2H), 7,21-7,17 (m, 2H), 4,75 (s, 2H), 4,14-4,09 (m, 4H)

3-Bromo-2-phenyl-6,7-dihydro-4H-pyrazolo[5,1-c][1,4]thiazine (VIII-18); tương tự với 2 đương lượng NBS logP(HCOOH): 3,42 mit MS (ESI): 296/298 [M+H]⁺.

Ví dụ về bước quy trình [V12] từ sơ đồ 7:

Ví dụ 61: 3-(2-Flopyridin-4-yl)-2-phenyl-5,6-dihydro-4H-pyrol[1,2-b]pyrazol (Ia)

Hỗn hợp của 1,00 g (3,22 mmol) 2-(phenyl)-3-iodo-5,6-dihydro-4H-pyrol[1,2-b]pyrazol, 1,80 g (8,06 mmol) 2-flo-4-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyridin, 2,63 g (8,06 mmol) Cs₂CO₃ và 526 mg (0,65 mmol) Pd(dppf)Cl₂ trong 8 ml THF được đun nóng trong argon ở nhiệt độ 60°C trong thời gian 16 giờ. 20 ml nước được bổ sung, và hỗn hợp phản ứng được chiết với 3 x 50 ml etyl axetat. Pha hữu cơ kết hợp được làm khô qua MgSO₄ và dung môi được lấy ra dưới áp suất quy đổi. Tinh chế bằng sắc ký cột trên silica gel (xyclohexan/etyl axetat) cho 507 mg (57%) sản phẩm mong muốn; logP(HCOOH): 2,53; ¹H-NMR(DMSO-d₆): 8,10 (d, 1H), 7,40 (m, 5H), 7,07 (d, 1H), 6,85 (s, 1H), 4,19 (dd, 2H), 3,11 (dd, 2H), 2,62 (m, 2H).

Ví dụ 5: N-{4-[2-(4-Flophenyl)-4,5,6,7-tetrahydropyrazolo[1,5-a]pyridin-3-yl]pyridin-2-yl}propanamit (If)

Trong argon, 1,39 ml dung dịch nước Na₂CO₃ 2 m được bổ sung từng giọt vào dung dịch của 200 mg (0,55 mmol) 2-(4-flophenyl)-3-iodo-4,5,6,7-tetrahydropyrazolo[1,5-a]pyridin, 168 g (0,61 mmol) N-[4-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyridin-2-yl]propanamit trong 2 ml dioxan, và 32 mg (0,04 mmol) Pd(PCy₃)₂Cl₂ được bổ sung. Trong bình phản ứng vi sóng, hỗn hợp phản ứng được đun nóng ở nhiệt độ 120°C trong thời gian 15 phút. Sau khi làm mát, 50 ml etyl axetat được bổ sung, hỗn hợp phản ứng được lọc qua đất tảo cát và phần lọc được chiết với etyl axetat. Các pha hữu cơ kết hợp được rửa với nước, được làm khô qua MgSO₄ và dung môi được lấy ra dưới áp suất quy đổi. Tinh chế bằng sắc ký cột trên silica gel (xyclohexan/etyl axetat) cho 159 mg (78%) sản phẩm mong muốn; logP(HCOOH): 1,97; ¹H-NMR(MeCN-d₃): 8,54 (br.s, 1H), 8,11 (d, 1H), 8,02 (s, 1H), 7,42 (dd, 2H), 7,04 (dd, 2H), 6,77 (d, 1H), 4,16 (dd, 2H), 2,81 (dd, 2H), 2,40 (q, 2H), 1,77 (m, 2H), 1,11 (t, 3H).

Ví dụ về bước quy trình [V14] từ sơ đồ 9:

Metyl 1-(2-cloetyl)-3-(4-flophenyl)-1H-pyrazol-5-carboxylat (XI-1)

4,15 g (30 mmol) kali cacbonat được bổ sung to dung dịch của 2,20 g (10 mmol) metyl 3-(4-flophenyl)-1H-pyrazol-5-carboxylat (được mô tả trong Zhejiang Daxue Xuebao, Lixueban 2008, 35, 641-643) trong 30 ml axeton. Qua khoảng thời gian 5 phút, 7,17 g (50 mmol) 1-bromo-2-cloetan được bổ sung vào huyền phù này. Hỗn hợp phản ứng tiếp đó được khuấy ở nhiệt độ 70°C trong thời gian 19 giờ. Các thành phần không tan kể đó được lọc, và dung môi được cô đặc. Dầu thô thu được được tinh chế bằng sắc ký cột trên silica gel (pha di động xyclohexan/etyl axetat). Cho 2,5 g (80%) sản phẩm mong muốn; logP(HCOOH): 3,58; ¹H-NMR (MeCN-d₃): δ = 7,86-7,84 (m, 2H), 7,20 (s, 1H), 7,19-7,16 (m, 2H), 6,53 (s, 1H), 4,89 (t, 2H), 4,00 (t, 2H), 3,88 (s, 3H).

Ví dụ về bước quy trình [V15] từ sơ đồ 9:

[1-(2-Cloetyl)-3-(4-flophenyl)-1H-pyrazol-5-yl]metanol (XIII-1)

Trong argon và ở nhiệt độ 0°C, 4 ml dung dịch lithi nhôm hydrua (1 m trong dietyl ete, 4,00 mmol) được bổ sung vào dung dịch của 1,1 g (4,00 mmol) metyl 1-(2-cloetyl)-3-(4-flophenyl)-1H-pyrazol-5-carboxylat trong 20 ml tetrahydrofuran. Hỗn hợp kể đó được khuấy ở nhiệt độ 0°C trong thời gian 2 giờ. Ở nhiệt độ 0°C, 5 m dung dịch nước NaOH kể đó được bổ sung cẩn thận từng giọt vào hỗn hợp phản ứng cho tới khi sự bay hơi hydro dừng lại. Huyền phù tạo ra được gạn và dung môi được loại bỏ. Sản phẩm thô thu được được tinh chế bằng sắc ký cột trên silica gel (xyclohexan/etyl axetat). Cho 900 mg (86%) sản phẩm mong muốn; logP(HCOOH): 1,84; ¹H-NMR (MeCN-d₃): δ = 7,81-7,77 (m, 2H), 7,16-7,12 (m, 2H), 6,53 (s, 1H), 4,64 (d, 2H), 4,45 (t, 2H), 4,00 (t, 2H).

Hợp chất sau đây có thể được điều chế tương tự:

(3-Phenyl-1H-pyrazol-5-yl)metanol (XIV-1); logP(HCOOH): 1,14; LC-MS: m/z = 175 [M+H]⁺.

Ví dụ về bước quy trình [V16] từ sơ đồ 9:

2-(4-Flophenyl)-6,7-dihydro-4H-pyrazolo[5,1-c][1,4]oxazin (VIIa-1)

Trong bình đáy tròn 100 ml, 780 mg (3,00 mmol) [1-(2-cloetyl)-3-(4-flophenyl)-1H-pyrazol-5-yl]metanol được hòa tan trong 20 ml N,N-dimetylformamit. Trong argon và ở nhiệt độ 0°C, 120 mg natri hydrua (3,00 mmol) tiếp đó được bổ sung thành huyền phù 60% trong dầu. Hỗn hợp tiếp đó được khuấy ở 25°C trong thời gian 18 giờ. Hỗn hợp phản ứng tiếp đó được rót cẩn thận vào nước và được chiết nhiều lần bằng etyl axetat. Các pha hữu cơ kết hợp then được làm khô qua Na₂SO₄ và được cô đặc. Sự tinh chế được thực hiện bằng sắc ký silica gel chromatography (xyclohexan/etyl axetat). Cho 480 mg (49%) sản phẩm mong muốn; logP(HCOOH): 2,01; ¹H-NMR (MeCN-d₃): δ = 7,81-7,77 (m, 2H), 7,15-7,11 (m, 2H), 6,36 (s, 1H), 4,81 (s, 2H), 4,14-4,12 (m, 2H), 4,10-4,08 (m, 2H).

Ví dụ về bước quy trình [V17] từ sơ đồ 9:

5-(Clometyl)-3-phenyl-1H-pyrazol (XV-1)

Ở nhiệt độ 20°C, 6,1 ml thionyl clorua và 10 giọt dimetylformamit được bổ sung vào dung dịch của 7,3 g (42,0 mmol) (3-phenyl-1H-pyrazol-5-yl)metanol trong 220 ml diclometan. Hỗn hợp kế đó được đun sôi dưới hồi lưu trong thời gian 12 giờ. Dung môi kế đó được loại bỏ khỏi hỗn hợp phản ứng. Phần còn lại được hấp thụ trong 100 ml diclometan, và dung dịch natri bicacbonat bão hòa được bổ sung vào hỗn hợp cho tới khi tạo ra pH=6-7. Hỗn hợp then dung môi được lấy ra dưới áp suất quy đổi và được làm khô. Cho 5,65 g sản phẩm mong muốn được tiếp tục phản ứng mà không cần tinh chế thêm; logP(HCOOH): 2,05 với MS (ESI): 193,1/195,1 ([M+H]⁺).

Ví dụ về các bước quy trình [V18] và [V20] từ sơ đồ 9:

2-Phenyl-6,7-dihydro-4H-pyrazolo[5,1-c][1,4]thiazine (VIIb-1)

4,42 g (58 mmol) thiourea được bổ sung vào dung dịch của 5,59 g (29 mmol) 5-(clometyl)-3-phenyl-1H-pyrazol trong 200 ml etanol. Hỗn hợp khuấy ở nhiệt độ 20°C trong thời gian 2 ngày. Hầu hết dung môi tiếp đó được loại bỏ khỏi hỗn hợp, và 10-20 ml diclometan được bổ sung. Sau khi khuấy một thời gian ngắn, kết tủa được lọc bằng cách hút và được làm khô. Cho 6,3 g hỗn hợp sản phẩm được sử dụng tiếp mà không cần tinh chế thêm. 4,19 g hỗn hợp lại được hấp thụ trong 140 ml N,N-dimetylformamit. 4,55 g kali cacbonat khô và 4,74 ml 1,2-dibromoetan được bổ sung vào hỗn hợp này. Hỗn hợp tiếp đó được khuấy ở 60°C trong thời gian 18 giờ.

Hỗn hợp phản ứng tiếp đó được khuấy cẩn thận trong nước. Pha nước tiếp đó được gạn, và etyl axetat được bổ sung vào phần dầu còn lại. Pha hữu cơ được làm khô qua Na_2SO_4 và được cô đặc. Tinh chế được thực hiện bằng sắc ký silica gel (xyclohexan/etyl axetat). Cho 620 mg sản phẩm mong muốn; $\log P(\text{HCOOH})$: 2,46; $^1\text{H-NMR}$ (ppm): δ (DMSO-d_6) = 3,20 (t, 2H), 3,94 (s, 2H), 4,32 (t, 2H), 6,54 (s, 1H), 7,31 (t, 1H), 7,40 (t, 2H), 7,65 (d, 2H).

Ví dụ về bước quy trình [V21] từ sơ đồ 10:

5-(Benzyloxy)-1-(4-flophenyl)pent-2-yn-1-one (XX-1)

Ở nhiệt độ -70°C , 2,56 ml dung dịch butyllithi 1,6 M được bổ sung từng giọt vào dung dịch của 505 mg (3,15 mmol) benzyl but-3-yn-1-yl ete trong 10 ml THF, và hỗn hợp khuấy trong thời gian 30 phút. 500 mg (5,15 mmol) 4-flobenzoyl clorua được bổ sung từng giọt vào dung dịch này, và nhiệt độ được cho tăng tới 0°C . Sau khoảng thời gian 1 giờ, 10 ml dung dịch amoni clorua bão hòa được bổ sung, và hỗn hợp phản ứng được chiết với 3 x 50 ml etyl axetat. Các pha hữu cơ kết hợp được rửa với nước, được làm khô qua MgSO_4 và dung môi được lấy ra dưới áp suất quy đổi. Tinh chế bằng sắc ký cột trên silica gel (xyclohexan/etyl axetat) gives 430 mg (45%) sản phẩm mong muốn; $\log P(\text{HCOOH})$: 3,89; $^1\text{H-NMR}(\text{DMSO-d}_6)$: 8,15 (dd, 2H), 7,34 (m, 7H), 4,57 (s, 2H), 3,70 (t, 2H), 2,90 (t, 2H).

Ví dụ về bước quy trình [V22] từ sơ đồ 10:

5-[2-(Benzyloxy)etyl]-3-(4-flophenyl)-1H-pyrazol (XXI)

Ở nhiệt độ phòng, 0,17 ml (3,54 mmol) hydrazin hydrat được bổ sung từng giọt vào dung dịch của 500 mg (1,77 mmol) 5-(benzyloxy)-1-(4-flophenyl)pent-2-yn-1-on trong 5 ml etanol, và hỗn hợp khuấy dưới hồi lưu trong thời gian 2 giờ. Sau khi làm mát, hỗn hợp phản ứng được cô đặc dưới áp suất quy đổi và phần còn lại được tinh chế bằng sắc ký cột trên silica gel (xyclohexan/etyl axetat). Cho 470 mg (87%) sản phẩm mong muốn; $\log P(\text{HCOOH})$: 3,09; $^1\text{H-NMR}(\text{DMSO-d}_6)$: 7,77 (dd, 2H), 7,34 (m, 8H), 6,49 (s, 1H), 4,51 (s, 2H), 3,70 (t, 2H), 2,89 (t, 2H).

Ví dụ về bước quy trình [V23] từ sơ đồ 10:

2-[3-(4-Flophenyl)-1H-pyrazol-5-yl]etanol (XXII)

39,4 g (242 mmol) sắt(III) clorua ban đầu được nạp trong 200 ml diclometan. Ở nhiệt độ phòng, dung dịch của 7,20 g (24,2 mmol) 5-[2-(benzyloxy)etyl]-3-(4-flophenyl)-1H-pyrazol trong 90 ml diclometan được bổ sung từng giọt. Sau khoảng 20 phút, hỗn hợp phản ứng được rửa với 2 x 100 ml nước. Các pha nước hữu cơ kết hợp được điều chỉnh tới pH=5-6 sử dụng natri bicacbonat và được chiết với 2 x 100 ml etyl axetat. Các pha hữu cơ kết hợp được rửa với nước, được làm khô qua $MgSO_4$ và dung môi được lấy ra dưới áp suất quy đổi. Tinh chế bằng sắc ký cột trên silica gel (xyclohexan/etyl axetat) cho 3,40 g (67%) sản phẩm mong muốn; $\log P(HCOOH)$: 1,39; 1H -NMR(DMSO- d_6): 7,79 (dd, 2H), 7,19 (dd, 2H), 6,47 (s, 1H), 4,79 (t, 1H), 3,65 (m, 2H), 2,76 (t, 2H).

Ví dụ về bước quy trình [V11] từ sơ đồ 10:

2-[3-(4-Flophenyl)-4-iodo-1H-pyrazol-5-yl]etanol (XXII)

Tương tự với bước quy trình [11], 2-[3-(4-flophenyl)-1H-pyrazol-5-yl]etanol có thể được phản ứng với 1,1 đương lượng NIS trong DMF. Hiệu suất 89%, sản phẩm mong muốn thu được là hỗn hợp của các chất đồng phân: $\log P(HCOOH)$: 1,99; 1H -NMR(DMSO- d_6): 13,29 và 13,19 (s, 1H) 7,78 và 7,69 (dd, 2H), 7,38 và 7,28 (dd, 2H), 4,92 và 4,72 (t, 1H), 3,62 (m, 2H), 2,79 và 2,73 (t, 2H).

Ví dụ về bước quy trình [V24] từ sơ đồ 10:

2-(4-Flophenyl)-3-iodo-4,5-dihydropyrazolo[1,5-c][1,3]oxazin (VIIIa-1)

Hỗn hợp của 200 mg (0,60 mmol) 2-[3-(4-flophenyl)-4-iodo-1H-pyrazol-5-yl]etanol, 36 mg (1,20 mmol) paraformaldehyt và 10 mg (0,06 mmol) axit 4-toluenesulphonic trong 1 ml dioxan được đun nóng trong lò phản ứng vi sóng ở nhiệt độ 130°C trong thời gian 1 giờ. Sau khi làm mát, hỗn hợp phản ứng được cô đặc dưới áp suất quy đổi và phần còn lại được tinh chế bằng sắc ký cột trên silica gel (xyclohexan/etyl axetat). Cho 120 mg (57%) sản phẩm mong muốn; $\log P(HCOOH)$: 3,23; 1H -NMR(DMSO- d_6): 7,81 (dd, 2H), 7,31 (dd, 2H), 5,54 (s, 2H), 4,12 (dd, 2H), 2,80 (dd, 2H).

Ví dụ về bước quy trình [V25] từ sơ đồ 11:

4-Clo-N'-(diphenylmetylen)pentan hydrazit (XXV-1)

Ở nhiệt độ 0°C, dung dịch của 0,16 g (1,0 mmol) 4-clopentanoyl clorua trong 15 ml diclometan được bổ sung vào dung dịch của 0,20 g (1,0 mmol) diphenylmetanon hydrazon và 0,08 ml pyridin trong 15 ml diclometan. Hỗn hợp phản ứng được khuấy ở nhiệt độ phòng trong thời gian 16 giờ. Etyl axetat/dung dịch nước NH₄Cl bão hòa được bổ sung vào hỗn hợp phản ứng, pha hữu cơ được tách ra và pha nước được chiết với 3 x 100 ml etyl axetat. Pha hữu cơ kết hợp được làm khô qua Na₂SO₄ và dung môi được lấy ra dưới áp suất quy đổi. Tinh chế bằng sắc ký cột trên silica gel (xyclohexan/etyl axetat) cho 0,32 g (100%) sản phẩm mong muốn; logP(HCOOH): 3,76; ¹H-NMR (ppm): δ (DMSO-d₆) = 1,45 (d, 0,9 H), 1,52 (d, 2,1H), 1,81-2,12 (m, 1H), 2,30-2,42 (m, 1H), 2,88-3,00 (m, 2H), 4,13-4,20 (m, 0,3H), 4,28-4,34 (m, 0,7H), 7,26-7,61 (m, 10H), 9,19 (s, 1H); LC-MS: m/z = 315 [M+H]⁺

Ví dụ về bước quy trình [V26] từ sơ đồ 11:

1-[(Diphenylmetylen)amino]-5-metylpyrolidin-2-on (XXVI-1)

Ở nhiệt độ 0°C, 2,7 g (68,0 mmol) natri hydrua được bổ sung nhanh vào dung dịch của 33,0 g (68,0 mmol) 4-bromo-N'-(diphenylmetylen)pentan hydrazit trong 200 ml tetrahydrofuran. Hỗn hợp phản ứng được khuấy ở nhiệt độ phòng trong thời gian 16 giờ, và etyl axetat/dung dịch nước NH₄Cl bão hòa tiếp đó được bổ sung. Pha hữu cơ được tách ra và pha nước được chiết với 3 x 250 ml etyl axetat. Pha hữu cơ kết hợp được làm khô qua Na₂SO₄ và dung môi được lấy ra dưới áp suất quy đổi. Tinh chế bằng sắc ký cột trên silica gel (xyclohexan/etyl axetat) cho 17,8 g (89%) sản phẩm mong muốn; logP(HCOOH): 2,73; ¹H-NMR (ppm): δ (DMSO-d₆) = 1,22 (d, 3 H), 2,05-2,15 (m, 4H), 3,86 (m, 1H), 7,24-7,26 (m, 2H), 7,40-7,43 (m, 4H), 7,48-7,53 (m, 4H); LC-MS: m/z = 279 [M+H]⁺

Các hợp chất sau đây có thể được điều chế tương tự:

1-[(Diphenylmetylen)amino]pyrolidin-2-on (XXVI-2); logP(HCOOH): 2,23; ¹H-NMR (ppm): δ (DMSO-d₆) = 1,83 (m, 2H), 2,15 (t, 2H), 3,31 (t, 2H), 7,25-7,28 (m, 2H), 7,37-7,50 (m, 8H); LC-MS: m/z = 265 [M+H]⁺

1-[(Diphenylmetylen)amino]-3-metylpyrolidin-2-on (XXVI-3); logP(HCOOH): 2,62; ¹H-NMR (ppm): δ (DMSO-d₆) = 0,91 (d, 3 H), 1,36-1,46 (m, 1H), 2,07-2,14 (m, 1H), 2,24-2,32 (m, 1H), 3,21-3,30 (m, 2H), 7,24-7,29 (m, 2H), 7,40-7,51 (m, 8H); LC-

MS: $m/z = 279 [M+H]^+$.

Ví dụ về bước quy trình [V27] từ sơ đồ 11:

2-Metyl-5-oxopyrrolidin-1-amoni clorua (XXVII-1)

Ở nhiệt độ phòng 50 ml 37% axit clohydric mạnh được bổ sung vào dung dịch của 17,8 g (63,9 mmol) 1-[(diphenylmetylen)amino]-5-metylpyrrolidin-2-on trong 100 ml tetrahydrofuran, và hỗn hợp khuấy trong thời gian 1 giờ. Etyl axetat tiếp đó được bổ sung vào hỗn hợp phản ứng, và pha hữu cơ được tách ra. Etanol/toluen (1:1) được bổ sung nhiều lần vào pha axit clohydric và hỗn hợp được cô đặc dưới áp suất quy đổi. Sản phẩm thô thu được được phản ứng thêm mà không cần tinh chế thêm. $^1\text{H-NMR}$ (ppm): $\delta(\text{DMSO-d}_6) = 1,24$ (d, 3 H), 1,60-1,65 (m, 1H), 2,20-2,42 (m, 3H), 3,88 (m, 1H).

Các hợp chất sau đây có thể được điều chế tương tự:

3-Metyl-2-oxopyrrolidin-1-amoni clorua (XXVII-2); $^1\text{H-NMR}$ (ppm): δ (DMSO- d_6) = 1,08 (d, 3 H), 1,64-1,70 (m, 1H), 2,27-2,34 (m, 1H), 2,46-2,51 (m, 1H), 3,48 (dd, 1H), 3,48 (dd, 1H).

2-Oxopyrrolidin-1-amoni clorua (XXVII-2); $^1\text{H-NMR}$ (ppm): δ (DMSO- d_6) = 1,97-2,07 (m, 2H), 2,22-2,36 (m, 2H), 3,59 (t, 2H).

Ví dụ về bước quy trình [V28] từ sơ đồ 11:

Metyl 3-(4-flophenyl)-3-[(2-metyl-5-oxopyrrolidin-1-yl)imino]propanoat (XXVIII-1)

Hỗn hợp của 7,50 g (38,2 mmol) metyl 3-(4-flophenyl)-3-oxopropanoat và 11,5 g (76,5 mmol) 2-metyl-5-oxopyrrolidin-1-amoni clorua trong 50 ml pyridin được khuấy ở nhiệt độ phòng trong thời gian 72 giờ. Hỗn hợp phản ứng được cô đặc dưới áp suất quy đổi. Tinh chế bằng sắc ký cột trên silica gel (xyclohexan/etyl axetat) cho 10,4 g (93%) sản phẩm mong muốn là hỗn hợp của các chất đồng phân; $\log P(\text{HCOOH})$: 2,13 và 2,45; $^1\text{H-NMR}$ (ppm): δ (DMSO- d_6) = 1,16-1,19 (m, 3 H), 1,58-1,62 (m, 2H), 2,20-2,22 (m, 1H), 2,36-2,41 (m, 1H), 3,54 (s, 2,25H), 3,64 (s, 0,75H), 3,80 (d, 1H), 3,90 (d, 1H), 3,80 (q, 1H), 7,24 (t, 0,6H), 7,29 (t, 1,4H), 7,44-7,47 (m, 0,6H), 7,89-7,92 (m, 1,4H); LC-MS: $m/z = 293 [M+H]^+$.

Các hợp chất sau đây có thể được điều chế tương tự:

Metyl3-(4-flophenyl)-3-[(2-metyl-5-oxopyrolidin-1-yl)imino]propanoat
(XXVIII-2); logP(HCOOH): 2,09 và 2,47; $^1\text{H-NMR}$ (ppm): δ (DMSO- d_6) = 1,12 (d, 3 H), 1,58-1,64 (m, 1H), 1,91-2,00 (m, 1H), 2,10-2,30 (m, 2H), 3,15 (td, 0,17H), 3,29 (td, 0,17H), 3,49 (td, 0,33H), 3,57 (s, 2H), 3,62 (td, 0,33H), 3,64 (s, 1H), 3,80 (d, 1H), 3,89 (d, 1H), 7,21-7,31 (m, 2H), 7,41-7,44 (m, 0,66H), 7,89-7,92 (m, 1,34H); LC-MS: $m/z = 293$ $[\text{M}+\text{H}]^+$.

Etyl3-(2-flophenyl)-3-[(2-metyl-5-oxopyrolidin-1-yl)imino]propanoat
(XXVIII-3); logP(HCOOH): 2,34 và 2,74; $^1\text{H-NMR}$ (ppm): δ (DMSO- d_6) = 0,99-1,06 (m, 3 H), 1,15-1,24 (m, 3H), 1,58-1,64 (m, 1H), 1,81-2,45 (m, 3H), 3,64 (dd, 0,5H), 3,78-4,14 (m, 4,5H), 7,15-7,38 (m, 2H), 7,46-7,55 (m, 1H), 7,64-7,69 (m, 1H); LC-MS: $m/z = 307$ $[\text{M}+\text{H}]^+$.

Etyl3-(2-flophenyl)-3-[(2-oxopyrolidin-1-yl)imino]propanoat (XXVIII-4);
logP(HCOOH): 1,97 và 2,39; $^1\text{H-NMR}$ (ppm): δ (DMSO- d_6) = 0,99-1,22 (m, 3 H), 1,59-1,66 (m, 1H), 1,95-2,09 (m, 2H), 2,30-2,41 (m, 1H), 3,39-3,49 (m, 2H), 3,62-4,01 (m, 4H), 7,19-7,79 (m, 4H); LC-MS: $m/z = 293$ $[\text{M}+\text{H}]^+$.

Ví dụ về bước quy trình [V29] từ sơ đồ 11:

Metyl2-(4-flophenyl)-6-metyl-5,6-dihydro-4H-pyrol[1,2-b]pyrazol-3-carboxylat
(XXX-1)

23,2 g (71,2 mmol) xezi cacbonat được bổ sung vào dung dịch của 10,4 g (35,6 mmol) metyl 3-(4-flophenyl)-3-[(2-metyl-5-oxopyrolidin-1-yl)imino]propanoat trong 100 ml dimetylformamit. Hỗn hợp phản ứng được khuấy ở nhiệt độ phòng trong thời gian 30 phút và ở nhiệt độ 100°C trong thời gian 4 giờ. Etyl axetat/nước kể đó được bổ sung, pha hữu cơ được tách ra và pha nước được chiết với 3 x 100 ml etyl axetat. Pha hữu cơ kết hợp được làm khô qua Na_2SO_4 và dung môi được lấy ra dưới áp suất quy đổi. Tinh chế bằng sắc ký cột trên silica gel (xyclohexan/etyl axetat) cho 6,6 g (64%) sản phẩm mong muốn; logP(HCOOH): 2,84; $^1\text{H-NMR}$ (ppm): δ (DMSO- d_6) = 1,44 (d, 3 H), 2,14-2,17 (m, 1H), 2,76-2,78 (m, 1H), 2,98-3,08 (m, 2H), 3,68 (s, 3H), 4,46 (m, 1H), 7,21-7,24 (m, 2H), 7,73-7,76 (m, 2H); LC-MS: $m/z = 275$ $[\text{M}+\text{H}]^+$.

Các hợp chất sau đây có thể được điều chế tương tự:

Metyl 2-(4-flophenyl)-4-metyl-5,6-dihydro-4H-pyrolo[1,2-b]pyrazol-3-carboxylat (XXX-2); logP(HCOOH): 2,71; $^1\text{H-NMR}$ (ppm): δ (DMSO- d_6) = 1,34 (d, 3 H), 2,16-2,21 (m, 1H), 2,81-2,86 (m, 1H), 3,45-3,52 (m, 1H), 3,70 (s, 3H), 4,11-4,29 (m, 2H), 7,20-7,25 (m, 2H), 7,69-7,72 (m, 2H); LC-MS: m/z = 275 $[\text{M}+\text{H}]^+$.

Etyl 2-(2-flophenyl)-5,6-dihydro-4H-pyrolo[1,2-b]pyrazol-3-carboxylat (XXX-3); logP(HCOOH): 2,49; $^1\text{H-NMR}$ (ppm): δ (DMSO- d_6) = 1,12 (t, 3 H), 2,60 (quintet, 2H), 3,06 (ABq, 2H), 4,06 (q, 2H), 4,19 (ABq, 2H), 7,22-7,25 (m, 2H), 7,41-7,49 (m, 2H); LC-MS: m/z = 275 $[\text{M}+\text{H}]^+$.

Ví dụ về bước quy trình [V30] từ sơ đồ 11:

2-(4-Flophenyl)-6-metyl-5,6-dihydro-4H-pyrolo[1,2-b]pyrazol-3-carboxylic acid (XXXI-1)

36,8 ml (73,6 mmol) dung dịch nước NaOH 2 m được bổ sung vào dung dịch của 7,0 g (25,5 mmol) metyl 2-(4-flophenyl)-6-metyl-5,6-dihydro-4H-pyrolo[1,2-b]pyrazol-3-carboxylat trong 50 ml metanol, và hỗn hợp khuấy trong thời gian 3 giờ. Hỗn hợp phản ứng được cô đặc dưới áp suất quy đổi, etyl axetat/axit clohydric 1 m được bổ sung, pha hữu cơ được tách ra và pha nước được chiết với 3 x 100 ml etyl axetat. Pha hữu cơ kết hợp được làm khô qua Na_2SO_4 và dung môi được lấy ra dưới áp suất quy đổi. Axit 2-(4-flophenyl)-6-metyl-5,6-dihydro-4H-pyrolo[1,2-b]pyrazol-3-carboxylic thu được (5,9 g) được phản ứng tiếp mà không cần tinh chế thêm.

Các hợp chất sau đây có thể được điều chế tương tự:

2-(4-Flophenyl)-4-metyl-5,6-dihydro-4H-pyrolo[1,2-b]pyrazol-3-carboxylic acid (XXXI-2); logP(HCOOH): 1,84; $^1\text{H-NMR}$ (ppm): δ (DMSO- d_6) = 1,33 (d, 3 H), 2,12-2,19 (m, 1H), 2,76-2,86 (m, 1H), 3,40-3,49 (m, 1H), 4,08-4,26 (m, 2H), 7,17-7,23 (m, 2H), 7,69-7,74 (m, 2H); LC-MS: m/z = 261 $[\text{M}+\text{H}]^+$.

axit 2-(2-Flophenyl)-6-metyl-5,6-dihydro-4H-pyrolo[1,2-b]pyrazol-3-carboxylic (XXXI-3); logP(HCOOH): 1,64; m/z = 261 $[\text{M}+\text{H}]^+$.

axit 2-(2-Flophenyl)-5,6-dihydro-4H-pyrolo[1,2-b]pyrazol-3-carboxylic (XXXI-4); logP(HCOOH): 1,35; $^1\text{H-NMR}$ (ppm): δ (DMSO- d_6) = 2,58 (quintet, 2H),

3,04 (ABq, 2H), 4,16 (ABq, 2H), 7,20-7,23 (m, 2H), 7,40-7,45 (m, 2H); LC-MS: m/z = 247 $[M+H]^+$.

Ví dụ về bước quy trình [V31] từ sơ đồ 11:

N'-(Diphenylmetylen)-4-hydroxypentan hydrazit (XXXIII-1)

Ở nhiệt độ phòng, 6,0 ml (12,0 mmol) dung dịch 2,0 M trimethylaluminium trong heptan được bổ sung từng giọt vào dung dịch của 0,78 g (4,0 mmol) benzophenon hydrazon trong 10 ml diclometan, và hỗn hợp khuấy trong thời gian là 30 phút. Dung dịch của 0,40 g (4,0 mmol) γ -valerolacton trong 5 ml diclometan tiếp đó được bổ sung từng giọt vào hỗn hợp phản ứng. Hỗn hợp phản ứng được khuấy trong hồi lưu trong thời gian 2 giờ. Thêm 0,12 g (1,20 mmol) γ -valerolacton được bổ sung, và hỗn hợp phản ứng được khuấy cùng hồi lưu trong thời gian 1 giờ. Sau khi làm mát, diclometan/nước được bổ sung vào hỗn hợp phản ứng. Pha hữu cơ được tách ra và pha nước được chiết với diclometan. Pha hữu cơ kết hợp được làm khô qua Na_2SO_4 và dung môi được lấy ra dưới áp suất quy đổi. Tinh chế bằng sắc ký cột trên silica gel (xyclohexan/etyl axetat) cho 0,9 g (76%) sản phẩm mong muốn; ($\log P(HCOOH)$: 2,25); 1H -NMR (ppm): δ (DMSO- d_6) = 1,01 (d, 1H), 1,10 (d, 2H), 1,45-1,72 (m, 2H), 2,16-2,26 (m, 1H), 2,75-2,86 (m, 1H), 3,51-3,57 (m, 0,3H), 3,65-3,71 (m, 0,7H), 4,43 (d, 0,3H), 4,52 (d, 0,7H), 7,25-7,62 (m, 10H), 8,99 (s, 1H); LC-MS: m/z = 297 $[M+H]^+$

Các hợp chất sau đây có thể được điều chế tương tự:

N'-(Diphenylmetylen)-4-hydroxy-4-phenylbutan hydrazit (XXXIII-2); $\log P(HCOOH)$: 3,07; 1H -NMR (ppm): δ (DMSO- D_6) = 1,79-1,86 (m, 1H), 1,90-1,98 (m, 1H), 2,19-2,23 (m, 1H), 2,76-2,80 (m, 1H), 4,48-4,52 (m, 0,3H), 4,63-4,67 (m, 0,7H), 5,23 (d, 0,3H), 5,31 (d, 0,7H), 7,19-7,60 (m, 15H), 9,00 (s, 1H); LC-MS: m/z = 359 $[M+H]^+$.

N'-(Diphenylmetylen)-4-hydroxy-2-metylbutan hydrazit (XXXIII-3); $\log P(HCOOH)$: 2,24; 1H -NMR (ppm): δ (DMSO- d_6) = 0,98 (d, 1,5H), 1,14 (d, 1,5H), 1,39-1,46 (m, 0,5H), 1,49-1,57 (m, 0,5H), 1,65-1,71 (m, 0,5H), 1,85-1,91 (m, 0,5H), 2,50-2,54 (m, 1H), 3,29-3,39 (m, 1H), 3,41-3,51 (m, 1H), 4,41 (dd, 0,5H), 4,51 (dd, 0,5H), 7,27-7,63 (m, 10H), 8,94 (s, 1H); LC-MS: m/z = 297 $[M+H]^+$.

Ví dụ về bước quy trình [V32] từ sơ đồ 11:

4-Bromo-N'-(diphenylmetylen)-2-metylbutan hydrazit (XXV-2)

Ở nhiệt độ 0°C, 8,1 g (24,3 mmol) cacbon tetrabromua được bổ sung vào dung dịch của 6,0 g (20,2 mmol) N'-(diphenylmetylen)-4-hydroxy-2-metylbutan hydrazit và 6,3 g (24,3 mmol) triphenylphosphan trong 150 ml diclometan. Hỗn hợp phản ứng được khuấy ở nhiệt độ 0°C trong thời gian 1 giờ và kế đó được cô đặc và được tinh chế bằng sắc ký cột trên silica gel (xyclohexan/etyl axetat). Cho 2,7 g (37%) sản phẩm mong muốn; (logP(HCOOH): 3,76); ¹H-NMR (ppm): δ (DMSO-d₆) = 1,12 (d, 3H), 1,79-1,86 (m, 1H), 2,33-2,38 (m, 1H), 2,62-2,67 (m, 1H), 4,10-4,14 (m, 1H), 4,25-4,29 (m, 1H), 7,29-7,65 (m, 10H); LC-MS: m/z = 359 [M+H]⁺.

Ví dụ về bước quy trình [V33] từ sơ đồ 11:

1-[(Diphenylmetylen)amino]-5-metylpyrolidin-2-on (XXVI-4)

Ở nhiệt độ 0°C, 0,25 ml (3,2 mmol) metansulphonyl clorua được bổ sung từng giọt vào dung dịch của 0,64 g (2,2 mmol) N'-(diphenylmetylen)-4-hydroxypentan hydrazit, 0,19 ml (2,4 mmol) pyridin và 0,01 mg *N,N*-dimetylaminopyridin trong 5 ml diclometan. Hỗn hợp phản ứng được khuấy ở nhiệt độ phòng trong thời gian 2 giờ, và etyl axetat/nước kế đó được bổ sung. Pha hữu cơ được tách ra và pha nước được chiết với 3 x 100 ml etyl axetat. Pha hữu cơ kết hợp được làm khô qua Na₂SO₄ và dung môi được lấy ra dưới áp suất quy đổi. Tinh chế bằng sắc ký cột trên silica gel (xyclohexan/etyl axetat) cho 0,38 g (44% tinh khiết) 5-[2-(diphenylmetylen)hydrazino]-5-oxopentan-2-yl metansulphonat; (logP(HCOOH): 2,82 với LC-MS: m/z = 375 [M+H]⁺). Sản phẩm được hấp thụ lại trong 2 ml tetrahydrofuran, và 0,04 g (1,0 mmol) natri hydrua được bổ sung ở nhiệt độ 0°C. Sau khoảng thời gian 16 giờ khuấy ở nhiệt độ phòng, etyl axetat/dung dịch nước NH₄Cl bão hòa được bổ sung, pha hữu cơ được tách ra và pha nước được chiết với 3 x 100 ml etyl axetat. Pha hữu cơ kết hợp được làm khô qua Na₂SO₄ và dung môi được lấy ra dưới áp suất quy đổi. Cho 0,21 g (61%) sản phẩm mong muốn; (logP(HCOOH): 2,73); ¹H-NMR (ppm): δ (DMSO-d₆) = 1,22 (d, 3 H), 2,05-2,15 (m, 4H), 3,86 (sextet, 1H), 7,24-7,26 (m, 2H), 7,40-7,43 (m, 4H), 7,48-7,53 (m, 4H); LC-MS: m/z = 279 [M+H]⁺.

Ví dụ về bước quy trình [V36] từ sơ đồ 11:

2-(4-Flophenyl)-3-iodo-6-metyl-5,6-dihydro-4H-pyrolo[1,2-b]pyrazol (VIII-19)

3,1 g (36,9 mmol) NaHCO₃ và 2,8 g (12,3 mmol) *N*-iodosuxinimit được bổ sung vào dung dịch của 3,2 g (12,3 mmol) axit 2-(4-flophenyl)-6-metyl-5,6-dihydro-4H-pyrolo[1,2-b]pyrazol-3-carboxylic trong 25 ml dimetylformamit. Hỗn hợp phản ứng được khuấy ở nhiệt độ phòng trong thời gian 16 giờ, nước được bổ sung và chất rắn kết tủa được lọc và được làm khô. Cho 3,30 g sản phẩm mong muốn có độ tinh khiết 77% được phản ứng tiếp tục mà không cần tinh chế thêm: (logP(HCOOH): 3,82); ¹H-NMR (ppm): δ (DMSO-d₆) = 1,42 (d, 3 H), 2,11-2,18 (m, 1H), 2,72-2,82 (m, 3H), 4,49 (m, 1H), 7,28 (dd, 2H), 7,79 (dd, 2H); LC-MS: m/z = 343 [M+H]⁺.

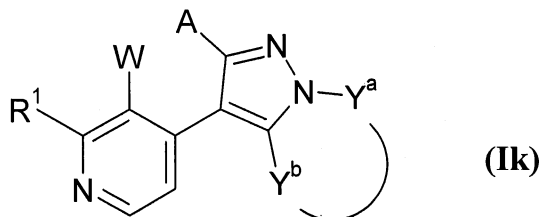
Các hợp chất sau đây có thể được điều chế tương tự:

2-(4-Flophenyl)-3-bromo-6-metyl-5,6-dihydro-4H-pyrolo[1,2-b]pyrazol (VIII-20); Tương tự với *N*-bromosuxinimit; logP(HCOOH): 3,77; ¹H-NMR (ppm): δ (DMSO-d₆) = 1,43 (d, 3 H), 2,12-2,18 (m, 1H), 2,73-2,89 (m, 3H), 4,47 (m, 1H), 7,29 (dd, 2H), 7,82 (dd, 2H); LC-MS: m/z = 295 [M+H]⁺

2-(4-Flophenyl)-3-iodo-4-metyl-5,6-dihydro-4H-pyrolo[1,2-b]pyrazol (VIII-21); logP(HCOOH): 3,67; ¹H-NMR (ppm): δ (DMSO-d₆) = 1,40 (d, 3 H), 2,09-2,19 (m, 1H), 2,74-2,83 (m, 1H), 3,24-3,32 (m, 1H), 4,07-4,13 (m, 1H), 4,20-4,26 (m, 1H), 7,28 (dd, 2H), 7,77 (dd, 2H); LC-MS: m/z = 343 [M+H]⁺.

3-Bromo-2-(2-flophenyl)-5,6-dihydro-4H-pyrolo[1,2-b]pyrazol (VIII-22); tương tự với *N*-bromosuxinimit; logP(HCOOH): 2,81; ¹H-NMR (ppm): δ (DMSO-d₆) = 2,58 (quintet, 2H), 2,87 (ABq, 2H), 4,19 (ABq, 2H), 7,28-7,32 (m, 2H), 7,46-7,51 (m, 2H); LC-MS: m/z = 281 [M+H]⁺.

Tương tự với các phương pháp đã mô tả bên trên, có thể điều chế các hợp chất có công thức chung (Ik) được liệt kê trong bảng 1 bên dưới.



Trong bảng bên dưới, R¹ là, ví dụ, R^{1a}, NH-R^{1a} hoặc NHCOR^{1a}.

Bảng 1

Ví dụ	R ¹	R ^{1a}	W	A	-Y ^a -Y ^b -	log P
1	R ^{1a}	clo	H	4-flophenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	3,26 ^[a]
2	R ^{1a}	H	H	4-flophenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,03 ^[a] ; 2,43 ^[b]
3	NH-R ^{1a}	H	H	4-flophenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,21 ^[a] ; 2,05 ^[b]
4	NH-R ^{1a}	benzyl	H	4-flophenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,79 ^[a]
5	NH-CO-R ^{1a}	ethyl	H	4-flophenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,97 ^[a] ; 2,58 ^[b]
6	R ^{1a}	CH ₃	H	4-flophenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,22 ^[a] ; 2,67 ^[b]
7	R ^{1a}	H	H	4-flophenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,08 ^[b]
8	NH-CO-R ^{1a}	ethyl	H	phenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,77 ^[a] ; 2,46 ^[b]
9	R ^{1a}	H	H	phenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,06 ^[a] ; 2,32 ^[b]
10	R ^{1a}	H	H	phenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,96 ^[b]
11	R ^{1a}	H	H	4-clophenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,46 ^[b]
12	R ^{1a}	H	H	4-metoxypheyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	0,72 ^[a]
13	R ^{1a}	flo	H	4-clophenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	3,12 ^[b]
14	NH-R ^{1a}	H	H	phenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,12 ^[a] ; 1,89 ^[b]
15	NH-CO-R ^{1a}	CH ₃	H	4-flophenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,66 ^[a] ; 2,14 ^[b]
16	NH-CO-R ^{1a}	tert-butoxy	H	4-flophenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,73 ^[a] ; 3,04 ^[b]
17	R ^{1a}	H	H	4-(triflometyl)phenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,75 ^[b]
18	NH-CO-R ^{1a}	tert-butoxy	H	4-flophenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,5 ^[a]
19	NH-CO-R ^{1a}	CH ₃	H	phenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,57 ^[a] ; 2,03 ^[b]
20	NH-CO-R ^{1a}	xyclopropyl	H	4-flophenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,04 ^[a] ; 2,67 ^[b]
21	NH-CO-R ^{1a}	xyclopropyl	H	Phenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,85 ^[a] ; 2,52 ^[b]
22	NH-CO-R ^{1a}	metoxymetyl	H	4-flophenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,3 ^[a] ; 2,54 ^[b]

Vi dù	R ¹	R ^{1a}	W	A	-Y ^a -Y ^b -	log P
23	NH-CO- R ^{1a}	metoxymetyl	H	phenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,12 ^[a] ; 2,39 ^[b]
24	NH-CO- R ^{1a}	(1S)-1- hydroxyetyl	H	4-flophenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,91 ^[a] ; 2,14 ^[b]
25	NH-CO- R ^{1a}	(1S)-1- hydroxyetyl	H	Phenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,74 ^[a] ; 2,01 ^[b]
26	NH-CO- R ^{1a}	metoxy	H	4-flophenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,11 ^[a] ; 2,56 ^[b]
27	NH-CO- R ^{1a}	metoxy	H	phenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,92 ^[a] ; 2,4 ^[b]
28	NH-CO- R ^{1a}	propan-2-yl	H	4-flophenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,33 ^[a] ; 2,87 ^[b]
29	NH-CO- R ^{1a}	propan-2-yl	H	phenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,13 ^[a] ; 2,72 ^[b]
30	NH-CO- R ^{1a}	2-metylpropyl	H	4-flophenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,68 ^[a] ; 3,18 ^[b]
31	NH-CO- R ^{1a}	2-metylpropyl	H	phenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,47 ^[a] ; 3,04 ^[b]
32	NH-CO- R ^{1a}	phenyl	H	4-flophenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	3 ^[a] ; 3,34 ^[b]
33	NH-CO- R ^{1a}	phenyl	H	phenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,78 ^[a] ; 3,2 ^[b]
34	NH-CO- R ^{1a}	benzyl	H	4-flophenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,9 ^[a] ; 3,26 ^[b]
35	NH-CO- R ^{1a}	benzyl	H	phenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,7 ^[a] ; 3,12 ^[b]
36	NH-CO- R ^{1a}	H	H	4-flophenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,28 ^[a] ; 2,12 ^[b]
37	NH-CO- R ^{1a}	H	H	phenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,87 ^[a] ; 1,98 ^[b]
38	R ^{1a}	[(dimetylamino)m etyliden]amino	H	phenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,28 ^[a] ; 2,28 ^[b]
39	R ^{1a}	[(dimetylamino)m etyliden]amino	H	4-flophenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,44 ^[a] ; 2,47 ^[b]
40	NH-CO- R ^{1a}	etyl	H	4-flophenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,64 ^[a]
41	R ^{1a}	H	H	4-metylphenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,34 ^[b]
42	R ^{1a}	H	H	3- (triflometyl)phen yl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,42 ^[a]
43	R ^{1a}	H	H	4-flophenyl	- CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ C H ₂ -	1,4 ^[a]

Vi dụ	R ¹	R ^{1a}	W	A	-Y ^a -Y ^b -	log P
44	R ^{1a}	H	H	3-flophenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,12 ^[b]
45	R ^{1a}	flo	H	4-flophenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,69 ^[a]
46	R ^{1a}	H	H	thiophen-3-yl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	0,72 ^[a]
47	NH-CO- R ^{1a}	thiophen-3-yl	H	4-flophenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,75 ^[a] ; 3,24 ^[b]
48	NH-R ^{1a}	propan-2-yl	H	4-clophenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	3,25 ^[b]
49	NH-CO- R ^{1a}	tert-butoxy	H	thiophen-3-yl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,76 ^[a]
50	NH-CO- R ^{1a}	2-hydroxypropan- 2-yl	H	phenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2 ^[a] ; 2,29 ^[b]
51	NH-CO- R ^{1a}	thiophen-3-yl	H	phenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,49 ^[a] ; 3,09 ^[b]
52	NH-R ^{1a}	propan-2-yl	H	4-flophenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,4 ^[a]
53	NH-R ^{1a}	H	H	thiophen-3-yl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	0,82 ^[a] ; 1,8 ^[b]
54	R ^{1a}	flo	H	3-flophenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,66 ^[b]
55	NH-CO- R ^{1a}	2-hydroxypropan- 2-yl	H	4-flophenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,16 ^[a] ; 2,41 ^[b]
56	NH-R ^{1a}	propan-2-yl	H	3-flophenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,86 ^[b]
57	R ^{1a}	H	H	5-clothiophen-2- yl	- CH ₂ CH ₂ C(Cl ₂)CH(Cl)-	3,23 ^[a]
58	NH-CO- R ^{1a}	CH ₃	H	thiophen-3-yl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,47 ^[a] ; 1,92 ^[b]
59	NH-CO- R ^{1a}	etyl	H	thiophen-3-yl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,73 ^[a] ; 2,25 ^[b]
60	NH-CO- R ^{1a}	metoxymetyl	H	thiophen-3-yl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,06 ^[a] ; 2,27 ^[b]
61	R ^{1a}	flo	H	phenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,53 ^[b]
62	R ^{1a}	H	H	thiophen-2-yl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,05 ^[a] ; 2,2 ^[b]
63	NH-CO- R ^{1a}	propan-2-yl	H	thiophen-3-yl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,03 ^[a] ; 2,6 ^[b]
64	NH-CO- R ^{1a}	2-metylpropyl	H	thiophen-3-yl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,37 ^[a] ; 2,91 ^[b]
65	NH-CO- R ^{1a}	xyclopropyl	H	thiophen-3-yl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,87 ^[a] ; 2,44 ^[b]
66	NH-CO- R ^{1a}	(1R)-1- hydroxyetyl	H	thiophen-3-yl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,73 ^[a] ; 1,95 ^[b]
67	NH-CO- R ^{1a}	metoxy	H	thiophen-3-yl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,92 ^[a] ; 2,32 ^[b]

Vĩ độ	R ¹	R ^{1a}	W	A	-Y ^a -Y ^b -	log P
68	NH-CO-R ^{1a}	2-hydroxypropan-2-yl	H	thiophen-3-yl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,89 ^[a] ; 2,16 ^[b]
69	NH-R ^{1a}	H	H	4-flophenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,8 ^[b]
70	NH-R ^{1a}	propan-2-yl	H	phenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,69 ^[b]
71	NH-R ^{1a}	2-metylpropyl	H	4-flophenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	3,18 ^[b]
72	NH-R ^{1a}	2-metylpropyl	H	phenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	3,06 ^[b]
73	NH-R ^{1a}	2-metylpropyl	H	3-flophenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,54 ^[a]
74	R ^{1a}	H	H	4-flophenyl	-CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ -	1,13 ^[a]
75	NH-CO-R ^{1a}	etyl	H	thiophen-2-yl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,89 ^[a] ; 2,35 ^[b]
76	NH-CO-R ^{1a}	etyl	H	4-flophenyl	-CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ -	1,92 ^[a]
77	NH-CO-R ^{1a}	propan-2-yl	H	4-flophenyl	-CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ -	2,3 ^[a]
78	NH-CO-R ^{1a}	xyclopropyl	H	4-flophenyl	-CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ -	2,07 ^[a]
79	NH-CO-R ^{1a}	xyclopropylmetyl	H	4-flophenyl	- C(CH ₃) ₂ OCH ₂ CH ₂ -	2,97 ^[a]
80	R ^{1a}	H	H	5-clothiophen-2-yl	- CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(Cl)-	2,21 ^[a]
81	NH-R ^{1a}	H	H	thiophen-2-yl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,04 ^[a] ; 1,89 ^[b]
82	NH-CO-R ^{1a}	metoxymetyl	H	4-flophenyl	- C(CH ₃) ₂ OCH ₂ CH ₂ -	2,92 ^[a]
83	NH-CO-R ^{1a}	propan-2-yl	H	4-flophenyl	- C(CH ₃) ₂ OCH ₂ CH ₂ -	2,81 ^[a]
84	NH-CO-R ^{1a}	xyclopropyl	H	4-flophenyl	- C(CH ₃) ₂ OCH ₂ CH ₂ -	2,67 ^[a]
85	R ^{1a}	H	H	4-flophenyl	- CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(OCH ₃)-	1,23 ^[a] ; 2,27 ^[b]
86	NH-CO-R ^{1a}	etyl	H	4-flophenyl	- C(CH ₃) ₂ OCH ₂ CH ₂ -	2,44 ^[a]
87	NH-CO-R ^{1a}	CH ₃	H	thiophen-2-yl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,54 ^[a] ; 2 ^[b]
88	NH-CO-R ^{1a}	propan-2-yl	H	thiophen-2-yl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,12 ^[a] ; 2,7 ^[b]
89	NH-CO-R ^{1a}	xyclopropyl	H	thiophen-2-yl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,9 ^[a] ; 2,51 ^[b]
90	NH-CO-R ^{1a}	CH ₃	H	4-flophenyl	- C(CH ₃) ₂ OCH ₂ CH ₂ -	2,17 ^[a]

Vi dù	R ¹	R ^{1a}	W	A	-Y ^a -Y ^b -	log P
91	NH-CO- R ^{1a}	propan-2-yl	H	4-flophenyl	-CH ₂ OCH ₂ CH ₂ -	2,21 ^[a]
92	NH-CO- R ^{1a}	propan-2-yl	H	4-flophenyl	-CH ₂ CH ₂ OCH ₂ -	2 ^[a]
93	NH-CO- R ^{1a}	xyclopropyl	H	4-flophenyl	-CH ₂ CH ₂ OCH ₂ -	1,8 ^[a]
94	NH-CO- R ^{1a}	metoxymetyl	H	4-flophenyl	-CH ₂ OCH ₂ CH ₂ -	2,14 ^[a]
95	NH-CO- R ^{1a}	etyl	H	4-flophenyl	-CH ₂ OCH ₂ CH ₂ -	1,87 ^[a]
96	NH-CO- R ^{1a}	etyl	H	4-flophenyl	- CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ C H ₂ -	2,44 ^[a]
97	NH-CO- R ^{1a}	propan-2-yl	H	4-flophenyl	- CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ C H ₂ -	2,91 ^[a]
98	NH-CO- R ^{1a}	benzyl	H	4-flophenyl	- CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ C H ₂ -	3,52 ^[a]
99	NH-CO- R ^{1a}	CH ₃	H	4-flophenyl	- CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ C H ₂ -	2,2 ^[a]
100	NH-CO- R ^{1a}	etyl	H	phenyl	-CH ₂ CH ₂ OCH ₂ -	1,57 ^[a]
101	NH-CO- R ^{1a}	2- metylxcyclopropyl	H	4-flophenyl	- C(CH ₃) ₂ OCH ₂ CH ₂ -	2,83 ^[a]
102	NH-CO- R ^{1a}	xyclobutyl	H	4-flophenyl	- C(CH ₃) ₂ OCH ₂ CH ₂ -	2,93 ^[a]
103	NH-R ^{1a}	H	H	4-flophenyl	-CH ₂ OCH ₂ CH ₂ -	0,99 ^[a]
104	NH-CO- R ^{1a}	etyl	H	4-flophenyl	-CH ₂ CH ₂ OCH ₂ -	1,71 ^[a]
105	NH-CO- R ^{1a}	2-metylpropyl	H	4-flophenyl	- C(CH ₃) ₂ OCH ₂ CH ₂ -	3,26 ^[a]
106	NH-CO- R ^{1a}	CH ₃	H	4-flophenyl	-CH ₂ OCH ₂ CH ₂ -	1,6 ^[a]
107	NH-CO- R ^{1a}	xyclopropyl	H	4-flophenyl	-CH ₂ OCH ₂ CH ₂ -	1,97 ^[a]
108	NH-CO- R ^{1a}	2- metylxcyclopropyl	H	4-flophenyl	-CH ₂ OCH ₂ CH ₂ -	2,19 ^[a]
109	NH-CO- R ^{1a}	xyclobutyl	H	4-flophenyl	-CH ₂ OCH ₂ CH ₂ -	2,26 ^[a]
110	NH-CO- R ^{1a}	etyl	H	4-flophenyl	-CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)-	2,02 ^[a]

Ví dụ	R ¹	R ^{1a}	W	A	-Y ^a -Y ^b -	log P
111	NH-CO-R ^{1a}	propan-2-yl	H	4-flophenyl	-CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)-	2,34 ^[a]
112	NH-CO-R ^{1a}	2-metylpropyl	H	4-flophenyl	-CH ₂ OCH ₂ CH ₂ -	2,51 ^[a]
113	NH-CO-R ^{1a}	xyclopropylmetyl	H	4-flophenyl	-CH ₂ CH ₂ OCH ₂ -	2,22 ^[a]
114	R ^{1a}	H	H	5-clothiophen-2-yl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(OCH ₃)-	1,59 ^[a] ; 2,88 ^[b]
115	NH-CO-R ^{1a}	etyl	H	phenyl	-CH ₂ CH ₂ SCH ₂ -	1,98 ^[a]
116	NH-CO-R ^{1a}	propan-2-yl	H	4-flophenyl	-CH(CH ₃)OCH ₂ CH ₂ -	2,59 ^[a]
117	R ^{1a}	H	F	4-flophenyl	-CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ -	2,66 ^[a]
118	R ^{1a}	H	F	4-flophenyl	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	3,08 ^[a]

Sự xác định các giá trị logP được thực hiện theo hướng dẫn EEC 79/831 Annex V.A8 bởi HPLC (High Performance Liquid Chromatography – Sắc ký chất lỏng hiệu năng cao) trên các cột pha đảo (C 18), sử dụng các phương pháp sau đây:

^[a] Sự xác định LC-MS trong khoảng axit được tiến hành ở độ pH=2,7 sử dụng nước axit formic 0,1% và axetonitril (chứa axit formic 0,1%) làm các pha di động; gradien tuyến tính từ 10% axetonitril tới 95% axetonitril.

^[b] Sự xác định LC-MS trong khoảng trung hòa được tiến hành ở độ pH=7,8 sử dụng 0,001 mol dung dịch bicarbonat amoni nước và axetonitril làm các pha di động; gradien tuyến tính từ 10% axetonitril tới 95% axetonitril.

^[c] Sự xác định được tiến hành trong khoảng axit ở độ pH=2,3 sử dụng nước axit phosphoric 0,1% và axetonitril làm các pha di động; gradien tuyến tính từ 10% axetonitril tới 95% axetonitril.

Sự hiệu chuẩn được thực hiện nhờ sử dụng các alkan-2-on không phân nhánh (có 3 đến 16 nguyên tử cacbon) với các giá trị logP đã biết (sự xác định các giá trị logP bởi thời gian lưu sử dụng phép nội suy tuyến tính giữa các alkanon liên tiếp).

Các giá trị lambda max được xác định trong các giá trị tín hiệu sắc ký lớn nhất sử dụng phổ UV từ 200nm tới 400nm.

¹H-NMR của các ví dụ, được chọn được liệt kê dưới dạng các danh sách đỉnh ¹H-NMR. Đối với mỗi đỉnh tín hiệu, thứ nhất giá trị δ tính bằng ppm và sau đó, được tách ra bởi một khoảng không, cường độ tín hiệu được đưa ra. Các cặp số giá trị δ /cường độ tín hiệu của các đỉnh tín hiệu khác nhau được liệt kê được rách ra bởi các dấu chấm phẩy.

Do đó, danh sách đỉnh của ví dụ, dưới dạng:

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

Dung môi trong đó phổ NMR được ghi lại được đưa ra trong các dấu ngoặc vuông sau các ví dụ, số và trước danh sách đỉnh.

Ví dụ số 2	[CD ₃ CN]	11,99	0,40;8,47	12,97;8,47	7,86;8,46	7,66;8,45	13,47;8,22	0,39;7,67	0,81;7,66	1,21;7,66	0,75;7,65	1,49;7,64	1,55;7,64	1,17;7,62	0,61;7,62	1,58;7,61	1,85;7,61	1,01;7,60	0,94;7,59	0,87;7,59	0,98;7,58	0,43;7,54	1,08;7,54	0,85;7,53	1,20;7,52	1,57;7,51	1,43;7,49	0,70;7,41	0,73;7,41	7,03;7,40	2,74;7,39	7,75;7,38	8,88;7,38	2,97;7,37	8,40;7,36	1,09;7,36	0,52;7,12	15,59;7,12	9,55;7,11	9,27;7,11	15,62;7,08	0,87;7,07	8,56;7,07	2,55;7,06	2,53;7,05	16,00;7,04	2,83;7,03	2,53;7,03	7,69;7,02	0,70;5,73	0,39;5,45	0,48;4,18	5,93;4,16	10,77;4,15	6,32;3,55	0,40;3,27	0,46;3,14	0,37;2,83	5,42;2,81	10,85;2,79	6,16;2,76	0,40;2,62	0,44;2,18	0,54;2,15	551,68;2,13	4,84;2,12	1,12;2,11	1,33;2,11	2,84;2,10	2,13;2,09	3,50;2,08	3,26;2,08	5,42;2,07	3,21;2,06	4,10;2,05	1,23;2,05	2,24;2,00	0,44;1,98	3,51;1,96	557,98;1,96	13,95;1,95	92,46;1,95	172,38;1,94	247,36;1,93	168,83;1,93	85,79;1,90	0,61;1,89	2,35;1,89	1,48;1,88	5,48;1,87	2,91;1,86	4,97;1,86	2,75;1,85	4,23;1,84	1,23;1,83	1,44;1,79	3,22;1,78	0,53;1,77	1,31;1,77	1,53;1,76	0,96;1,76	0,59;1,38	0,40;1,27	0,68;1,20	0,78;1,14	12,44;1,11	1,17;1,10	0,55;0,97	0,41;0,00	6,71;-0,56	0,38;-0,91	0,38
Ví dụ số 3	[CD ₃ CN]	7,87	7,80;7,86	6,71;7,78	1,44;7,77	1,50;7,76	1,16;7,75	1,04;7,44	9,44;7,44	4,07;7,43	9,65;7,43	8,10;7,42	2,95;7,42	7,08;7,13	1,74;7,11	2,77;7,10	1,52;7,07	9,74;7,06	3,13;7,06	4,53;7,05	16,00;7,05	2,20;7,04	2,43;7,04																																																																																									

6,56;6,37 7,59;6,36 7,23;6,36 6,66;6,35 6,10;6,32 10,23;6,32 10,42;6,30 1,41;4,82
 5,76;4,16 8,39;4,15 14,05;4,14 7,58;4,10 1,14;4,09 2,01;4,08 1,12;4,07 0,54;4,05
 0,56;3,68 0,43;3,60 2,65;3,53 0,62;3,52 0,49;2,81 1,58;2,80 2,56;2,79 8,07;2,78
 14,32;2,77 7,81;2,28 2,05;2,19 1484,50;2,08 2,72;2,07 5,29;2,07 4,98;2,06 8,04;2,06
 5,25;2,05 6,72;2,05 4,22;2,04 3,86;2,03 1,81;2,02 1,52;1,97 5,85;1,97 111,79;1,96
 16,95;1,95 18,95;1,95 136,97;1,95 254,23;1,94 364,32;1,94 249,63;1,93 135,01;1,87
 3,21;1,87 2,52;1,86 7,43;1,86 5,06;1,85 8,47;1,85 5,29;1,84 7,14;1,84 3,12;1,83
 4,76;1,83 3,15;1,82 2,23;1,45 5,08;1,27 4,10;1,22 1,13;1,20 2,13;1,20 2,53;1,19
 1,09;1,13 7,78;1,11 0,95;0,91 1,33;0,88 0,75;0,00 3,34

Ví dụ số 5 [CD₃CN] 8,56 0,33;8,53 1,20;8,12 3,16;8,12 3,17;8,11 3,14;8,11
 3,19;8,02 3,46;7,44 0,52;7,43 3,23;7,43 1,41;7,42 3,61;7,41 3,85;7,40 1,60;7,40
 3,57;7,07 0,61;7,07 3,81;7,06 1,27;7,05 1,73;7,04 6,89;7,04 1,51;7,03 1,20;7,02
 3,20;6,78 3,10;6,78 3,06;6,77 2,97;6,77 2,94;5,45 3,87;4,18 3,04;4,16 5,56;4,14
 3,17;4,07 0,41;4,05 0,45;3,60 0,62;2,83 2,87;2,82 5,71;2,80 3,12;2,58 0,32;2,47
 0,39;2,42 2,28;2,40 7,10;2,38 7,25;2,36 2,60;2,32 0,39;2,30 0,47;2,16 3440,79;2,13
 13,90;2,12 7,86;2,11 7,71;2,11 7,72;2,10 6,49;2,09 5,91;2,09 4,54;2,08 5,30;2,07
 3,92;2,07 4,12;2,05 2,75;1,96 348,62;1,96 48,76;1,95 229,54;1,95 416,81;1,94
 574,60;1,93 393,69;1,93 202,54;1,90 4,69;1,88 4,85;1,88 3,70;1,87 4,13;1,86 3,41;1,84
 1,76;1,79 2,58;1,78 1,98;1,77 2,97;1,77 3,77;1,76 2,92;1,76 1,71;1,73 0,70;1,71
 0,63;1,70 0,58;1,65 0,50;1,62 0,44;1,60 0,41;1,59 0,44;1,58 0,48;1,55 0,42;1,50
 0,39;1,46 0,34;1,44 0,38;1,41 0,35;1,40 0,34;1,39 0,38;1,33 0,34;1,33 0,33;1,27
 1,81;1,25 0,38;1,23 0,40;1,22 0,85;1,20 1,36;1,19 0,75;1,14 1,26;1,13 7,97;1,11
 16,00;1,09 7,52;0,91 1,43;0,90 0,33;0,15 1,39;0,05 0,43;0,01 17,04;0,00 336,21;-0,01
 14,03;-0,15 1,41

Ví dụ số 6 [CD₃CN] 8,34 1,99;8,33 2,00;7,40 2,57;7,40 0,94;7,39 2,72;7,39
 2,84;7,38 1,00;7,38 2,70;7,06 2,91;7,06 0,85;7,05 0,93;7,05 5,48;7,04 0,92;7,04
 0,83;7,03 2,62;7,01 2,33;6,91 1,32;6,90 1,27;6,90 1,29;6,90 1,23;5,45 1,02;4,17
 2,21;4,16 3,92;4,15 2,28;2,81 2,08;2,80 4,07;2,79 2,26;2,42 16,00;2,16 311,44;2,09
 0,67;2,09 0,47;2,08 1,29;2,08 1,40;2,07 2,04;2,07 1,13;2,06 1,50;2,06 0,96;2,05
 1,58;2,05 0,73;2,04 0,36;1,97 0,69;1,97 86,82;1,96 2,30;1,95 3,09;1,95 63,52;1,95
 122,98;1,94 177,45;1,94 117,58;1,93 60,40;1,93 1,80;1,92 0,85;1,88 0,77;1,87

0,45;1,87	1,85;1,86	1,06;1,86	1,70;1,85	1,03;1,85	0,96;1,85	1,64;1,84	0,43;1,84	0,61;1,84	0,43;1,83	0,71;1,83	1,04;1,82	0,71;1,82	0,36;1,27	0,37;1,13	2,93;0,91	0,69;0,01	0,95;0,00	35,06;-0,01	1,01
Ví dụ số 7 [DMSO-D ₆] 8,45 14,21;8,45 9,47;8,44 9,73;8,44 14,23;7,95 1,10;7,44 1,27;7,43 7,47;7,42 3,71;7,41 8,66;7,41 9,90;7,40 4,10;7,39 8,79;7,39 1,33;7,24 1,58;7,24 9,24;7,23 3,34;7,22 4,25;7,21 15,98;7,21 3,93;7,20 3,19;7,19 7,37;7,18 1,16;7,15 16,00;7,14 10,41;7,14 10,38;7,13 15,31;4,19 6,64;4,17 10,29;4,15 6,85;4,10 0,38;3,91 0,56;3,48 0,35;3,47 0,35;3,32 762,33;3,08 6,00;3,06 9,64;3,04 6,98;2,89 8,51;2,73 6,85;2,68 0,65;2,67 0,83;2,67 0,74;2,66 0,58;2,65 2,17;2,63 5,71;2,61 7,80;2,59 4,97;2,58 1,94;2,56 0,69;2,54 1,36;2,51 39,75;2,51 71,47;2,50 91,33;2,50 64,50;2,49 32,07;2,33 0,46;2,33 0,60;2,32 0,50;2,07 1,53;1,99 1,14;1,19 0,33;1,18 0,65;1,16 1,37;1,07 3,83;0,01 0,66;0,00 11,20;-0,01 0,56																			
Ví dụ số 8 [CD ₃ CN] 8,53 1,12;8,11 3,09;8,11 3,15;8,10 3,15;8,10 3,18;8,03 3,46;7,42 2,54;7,41 1,89;7,41 1,96;7,41 3,74;7,40 2,68;7,40 3,90;7,39 4,04;7,33 0,32;7,33 0,34;7,31 2,13;7,31 5,95;7,30 3,89;7,30 6,48;7,29 6,44;7,28 0,74;6,78 3,01;6,77 2,95;6,77 2,96;6,76 2,81;5,45 0,50;4,18 3,17;4,17 5,71;4,15 3,27;2,83 3,01;2,82 5,88;2,80 3,25;2,42 2,29;2,40 7,11;2,38 7,35;2,36 2,55;2,15 675,49;2,12 3,68;2,11 3,82;2,11 3,64;2,10 3,87;2,09 2,99;2,08 3,90;2,08 2,67;2,07 2,97;2,06 1,44;2,05 1,66;2,03 0,64;1,97 4,46;1,96 34,85;1,96 16,18;1,95 78,40;1,95 145,50;1,94 202,52;1,93 139,85;1,93 71,95;1,90 2,62;1,90 2,01;1,89 3,55;1,88 2,55;1,87 3,23;1,87 2,22;1,86 2,62;1,84 1,11;1,81 0,33;1,79 0,43;1,78 0,62;1,77 1,02;1,77 1,30;1,76 0,96;1,76 0,59;1,27 0,63;1,22 0,44;1,20 0,80;1,19 0,44;1,14 0,77;1,13 7,90;1,11 1,86;1,11 16,00;1,10 1,03;1,09 7,46;0,91 0,59;0,01 4,13;0,00 79,89;-0,01 3,62																			
Ví dụ số 9 [CD ₃ CN] 8,46 12,86;8,46 7,80;8,45 7,80;8,45 13,17;7,39 0,50;7,39 0,79;7,39 5,54;7,38 5,31;7,38 4,64;7,38 5,42;7,38 6,38;7,37 4,19;7,37 8,36;7,36 1,28;7,32 2,03;7,32 5,24;7,32 16,00;7,31 7,73;7,31 14,42;7,31 7,23;7,30 13,01;7,30 2,39;7,30 0,96;7,12 15,56;7,12 9,27;7,11 9,12;7,11 15,39;5,45 0,33;4,18 6,91;4,17 12,35;4,16 7,20;4,05 0,33;2,83 6,58;2,82 12,77;2,81 7,06;2,17 1619,57;2,10 2,17;2,10 1,46;2,09 4,14;2,09 3,59;2,08 6,62;2,08 5,09;2,07 4,82;2,07 1,47;2,06 2,53;2,06 1,93;2,05 2,74;2,05 1,86;2,04 0,98;1,97 2,98;1,97 279,75;1,96 6,42;1,95 8,89;1,95 167,54;1,95 322,73;1,94 461,38;1,94 316,75;1,93 161,66;1,93 5,13;1,92 2,45;1,89																			

2,50;1,88	1,49;1,88	6,01;1,87	3,41;1,87	5,52;1,86	3,27;1,86	5,30;1,85	1,40;1,85
2,11;1,85	2,01;1,84	1,01;1,83	1,90;1,83	2,76;1,82	1,89;1,82	0,96;1,28	0,43;1,27
1,33;1,22	0,44;1,20	0,85;1,20	1,84;1,19	0,43;1,13	2,71;1,13	0,55;1,11	1,07;1,10
0,56;0,91	3,98;0,89	0,34;0,88	0,34;0,00	3,57			
Ví dụ số 10	[DMSO-D ₆]	8,44	5,14;8,43	3,87;8,42	4,95;8,13	1,10;7,39	4,34;7,38
16,00;7,37	3,75;7,36	3,33;7,35	1,23;7,35	1,19;7,15	6,72;7,14	4,32;7,14	4,38;7,13
6,19;6,49	5,26;5,75	0,40;4,20	3,14;4,18	4,79;4,16	3,14;4,02	0,35;3,71	0,42;3,69
0,44;3,67	0,43;3,65	0,41;3,62	0,47;3,60	0,47;3,56	0,53;3,53	0,59;3,51	0,72;3,49
0,78;3,48	0,80;3,47	0,90;3,31	912,25;3,08	2,62;3,07	4,22;3,05	3,01;2,69	0,46;2,67
1,30;2,67	1,62;2,67	1,29;2,65	1,31;2,63	2,95;2,62	3,96;2,60	2,80;2,58	1,47;2,54
6,96;2,51	88,21;2,50	153,79;2,50	192,19;2,50	132,85;2,33	0,89;2,33	1,19;2,32	
0,89;2,30	0,89;2,07	1,54;1,24	0,76;0,00	20,61			
Ví dụ số 11	[DMSO-D ₆]	8,47	10,09;8,46	6,48;8,46	6,68;8,45	10,02;7,45	5,95;7,45
2,75;7,44	4,42;7,43	16,00;7,43	3,64;7,41	4,20;7,41	15,79;7,40	3,94;7,39	2,73;7,39
5,59;7,16	10,84;7,16	6,93;7,15	6,97;7,15	10,30;4,20	4,19;4,18	6,43;4,16	4,24;4,06
0,59;4,04	1,68;4,02	1,69;4,00	0,58;3,90	0,40;3,31	291,79;3,28	4,09;3,07	3,76;3,06
6,02;3,04	4,32;2,67	0,50;2,67	0,63;2,66	0,53;2,66	0,41;2,65	1,38;2,63	3,57;2,61
4,91;2,59	3,09;2,58	1,21;2,54	1,07;2,51	32,86;2,51	58,60;2,50	74,75;2,50	52,07;2,49
25,07;2,33	0,37;2,33	0,47;2,32	0,34;2,07	0,67;1,99	7,32;1,47	0,42;1,31	0,45;1,19
2,10;1,18	4,13;1,16	2,08;1,07	2,72;0,01	0,60;0,00	10,19;-0,01	0,41	
Ví dụ số 12	[DMSO-D ₆]	8,73	0,63;8,73	0,44;8,72	0,45;8,72	0,67;8,44	3,45;8,43
2,24;8,42	2,28;8,42	3,53;7,83	0,76;7,83	0,50;7,82	0,49;7,82	0,73;7,32	0,50;7,31
3,47;7,31	1,27;7,30	1,39;7,29	3,92;7,28	0,52;7,15	3,71;7,15	2,38;7,14	2,37;7,14
3,56;6,96	0,58;6,95	3,90;6,95	1,36;6,93	1,29;6,93	3,42;6,92	0,47;4,17	1,42;4,15
2,23;4,14	1,48;3,78	16,00;3,31	295,82;3,07	1,33;3,05	2,10;3,03	1,54;2,67	0,40;2,67
0,52;2,66	0,40;2,64	0,49;2,62	1,27;2,60	1,75;2,58	1,16;2,57	0,54;2,54	1,05;2,51
29,97;2,50	54,32;2,50	69,80;2,50	49,02;2,49	24,18;2,33	0,40;2,33	0,49;2,32	0,37;2,07
0,44;1,99	0,83;1,17	0,46;0,00	3,60				
Ví dụ số 13	[DMSO-D ₆]	8,13	0,67;8,12	0,68;7,47	0,74;7,47	0,34;7,46	0,52;7,45
1,81;7,45	0,41;7,43	0,45;7,42	1,82;7,42	0,50;7,41	0,35;7,40	0,73;7,08	0,40;7,07
0,32;7,07	0,39;6,89	0,87;4,21	0,50;4,19	0,78;4,17	0,51;3,91	2,62;3,32	17,61;3,11

0,45;3,09 0,74;3,08 0,52;2,64 0,43;2,62 0,59;2,60 0,37;2,51 1,32;2,51 2,34;2,50 2,98;2,50 2,11;1,99 0,80;1,18 0,44;1,07 16,00								
Ví dụ số 14	[CD ₃ CN]	7,78	0,55;7,77	0,57;7,44	0,48;7,43	0,37;7,43	0,65;7,42	0,80;7,41
		0,74;7,40	0,38;7,34	0,33;7,33	0,91;7,33	0,96;7,32	1,37;7,31	1,18;6,44
		0,86;6,42	0,63;6,42	0,46;6,40	0,55;6,40	0,46;4,18	0,60;4,16	1,06;4,15
		0,62;3,77	0,88;3,67	1,75;2,82	0,57;2,80	1,10;2,79	0,62;2,35	1,03;2,17
		15,08;2,11	1,47;2,11	1,47;2,10	1,17;2,09	1,08;2,08	0,95;2,08	1,09;2,07
		0,80;2,06	0,84;2,05	0,53;1,96	18,43;1,96	4,21;1,95	20,77;1,95	37,93;1,94
		52,45;1,93	36,36;1,93	18,80;1,90	0,50;1,89	0,40;1,88	0,69;1,88	0,51;1,87
		0,63;1,86	0,45;1,85	0,53;1,77	0,37;1,20	1,20;1,14	16,00;0,01	0,40;0,00
		7,38;-0,01	0,33					
Ví dụ số 15	[CD ₃ CN]	8,64	1,88;8,13	7,15;8,13	6,86;8,12	7,11;8,12	7,02;7,99	3,30;7,97
		0,38;7,43	0,74;7,42	7,82;7,42	2,89;7,41	8,21;7,41	8,52;7,40	3,04;7,40
		8,16;7,39	0,86;7,07	0,87;7,06	8,62;7,06	2,57;7,05	2,79;7,05	16,00;7,04
		2,85;7,03	2,47;7,03	7,75;7,03	0,78;6,80	6,93;6,80	6,87;6,79	6,72;6,79
		6,75;5,45	1,03;4,17	6,62;4,16	11,98;4,15	6,87;4,08	0,41;4,07	1,17;4,05
		1,19;4,04	0,40;3,55	0,33;3,54	0,35;3,53	0,35;3,53	0,34;2,82	6,30;2,81
		12,42;2,80	6,75;2,54	0,36;2,20	3758,35;2,10	2,22;2,09	67,52;2,08	4,51;2,08
		6,46;2,07	3,66;2,07	4,64;2,06	2,54;2,06	3,55;2,05	3,65;2,05	2,41;2,05
		1,23;1,98	0,64;1,97	6,08;1,97	102,59;1,96	15,98;1,95	19,90;1,95	220,52;1,95
		409,99;1,94	602,47;1,94	409,64;1,93	205,63;1,93	6,76;1,93	3,04;1,89	2,11;1,88
		1,35;1,87	5,38;1,87	3,28;1,86	5,16;1,86	3,13;1,86	4,74;1,85	1,26;1,84
		1,73;1,84	1,28;1,83	2,32;1,83	3,36;1,82	2,31;1,82	1,21;1,27	1,52;1,22
		1,53;1,20	3,03;1,19	1,51;1,13	1,41;1,11	2,77;1,10	1,45;0,91	2,34;0,00
		5,81						
Ví dụ số 16	[CD ₃ CN]	8,09	0,54;8,09	0,59;7,72	0,69;7,43	0,64;7,42	0,73;7,41	0,79;7,41
		0,35;7,40	0,76;7,06	0,69;7,05	1,37;7,03	0,70;6,75	0,50;6,74	0,53;6,74
		0,54;6,74	0,56;4,17	0,66;4,16	1,21;4,15	0,69;2,82	0,68;2,81	1,17;2,80
		0,63;2,25	0,43;2,24	0,60;2,21	281,02;2,09	0,60;2,08	0,67;2,08	0,44;2,07
		0,51;2,05	0,35;1,97	3,93;1,96	1,61;1,96	2,05;1,95	19,68;1,95	36,83;1,94
		52,56;1,94	34,71;1,93	17,69;1,88	0,55;1,88	0,40;1,87	0,58;1,86	0,48;1,83
		0,32;1,45	16,00;1,31	0,38;1,27	1,83;0,93	0,34;0,88	0,37	
Ví dụ số 17	[DMSO-D ₆]	8,49	7,10;8,49	4,64;8,48	4,71;8,47	7,19;7,83	0,32;7,75	4,48;7,73
		6,06;7,63	5,84;7,61	4,30;7,19	7,71;7,18	5,00;7,18	4,93;7,17	7,46;5,75

0,36;4,23	2,98;4,21	4,57;4,19	3,07;4,06	1,23;4,04	3,65;4,02	3,68;4,00	1,25;3,78		
0,61;3,31	319,54;3,29	2,38;3,08	2,68;3,06	4,34;3,05	3,16;2,67	0,37;2,67	0,54;2,66		
1,06;2,64	2,53;2,63	3,49;2,61	2,21;2,59	0,83;2,54	0,88;2,52	1,90;2,51	21,87;2,51		
39,93;2,50	51,66;2,50	36,22;2,49	17,70;2,33	0,36;1,99	16,00;1,91	1,60;1,19	4,47;1,18		
8,89;1,16	4,40;1,07	1,32;0,00	0,54						
Ví dụ số 18 [DMSO-D ₆]									
9,57	1,03;8,09	0,83;8,08	0,89;7,69	1,06;7,43	0,76;7,43				
0,38;7,42	0,90;7,41	0,98;7,40	0,44;7,40	0,86;7,22	0,91;7,21	0,34;7,19	1,56;7,18		
0,34;7,17	0,74;6,74	0,72;6,73	0,69;6,72	0,70;6,72	0,67;4,19	0,60;4,17	0,93;4,15		
0,61;3,30	299,11;3,28	3,24;3,05	0,53;3,03	0,86;3,01	0,59;2,67	0,38;2,67	0,50;2,66		
0,42;2,66	0,38;2,64	0,58;2,62	0,75;2,60	0,55;2,59	0,33;2,54	1,28;2,51	26,66;2,50		
47,67;2,50	60,62;2,50	41,83;2,49	20,06;2,33	0,38;2,07	1,33;1,47	1,00;1,42	16,00;1,31		
0,45;1,21	0,44;1,20	0,45;1,18	1,06;1,16	1,02;0,00	3,28				
Ví dụ số 19 [CD ₃ CN]									
8,63	1,93;8,12	7,24;8,12	7,35;8,11	7,63;8,11	7,35;8,00				
3,39;7,42	0,50;7,41	0,52;7,41	2,30;7,41	6,15;7,41	3,47;7,40	3,65;7,40	8,80;7,40		
5,33;7,40	8,74;7,39	9,03;7,39	0,97;7,39	0,95;7,39	1,00;7,38	0,52;7,32	0,44;7,32		
0,37;7,31	1,39;7,31	3,34;7,31	2,63;7,30	11,84;7,30	9,56;7,30	6,66;7,30	14,41;7,29		
16,00;7,29	1,52;6,79	6,84;6,79	6,87;6,78	7,01;6,78	6,88;4,18	6,83;4,17	12,43;4,16		
7,13;4,08	0,97;4,06	2,83;4,05	2,84;4,04	0,95;2,82	6,50;2,81	12,83;2,80	7,00;2,29		
0,40;2,28	0,49;2,27	0,45;2,26	0,47;2,21	1,58;2,19	3,13;2,16	5,28;2,11	2,10;2,10		
2,67;2,09	2,30;2,08	69,67;2,08	8,12;2,07	4,29;2,07	5,19;2,06	1,89;2,06	2,63;2,06		
1,23;2,05	1,23;2,05	0,90;2,04	0,60;2,01	0,43;1,99	0,44;1,99	0,40;1,98	0,35;1,98		
0,68;1,97	12,82;1,97	8,69;1,96	8,56;1,96	4,73;1,95	5,10;1,95	52,78;1,95	101,61;1,94		
147,51;1,94	96,93;1,93	48,66;1,92	0,88;1,89	2,29;1,88	1,51;1,88	5,68;1,87	3,50;1,87		
5,52;1,86	3,36;1,86	4,94;1,85	1,40;1,85	1,80;1,83	0,40;1,83	0,65;1,83	0,94;1,82		
0,68;1,82	0,38;1,27	1,25;1,22	3,81;1,20	7,66;1,19	3,62;1,16	0,44;1,15	0,51;1,13		
1,08;1,11	0,56;1,10	0,36;1,10	0,34;1,06	0,50;0,92	0,32;0,88	0,36;0,01	1,35;0,00	47,40;-	
0,01	1,39								
Ví dụ số 20 [CD ₃ CN]									
8,86	2,00;8,13	6,39;8,13	6,65;8,12	6,76;8,12	6,49;8,00				
5,69;7,43	0,71;7,42	7,59;7,42	2,70;7,41	7,94;7,41	8,15;7,40	2,80;7,40	7,87;7,39		
0,80;7,06	0,87;7,05	8,49;7,05	2,45;7,04	2,65;7,04	16,00;7,04	2,63;7,03	2,38;7,02		
7,62;7,02	0,74;6,77	6,95;6,77	6,87;6,77	6,64;6,76	6,59;5,45	1,47;4,16	5,76;4,15		

10,28;4,14 5,91;2,80 5,43;2,79 10,67;2,78 5,81;2,16 685,93;2,09 1,70;2,09 1,24;2,08
 3,34;2,08 3,58;2,08 3,08;2,07 5,24;2,06 3,12;2,06 4,74;2,06 2,59;2,05 3,17;2,05
 2,05;2,05 2,21;2,04 1,00;1,97 2,65;1,97 353,50;1,96 13,17;1,95 15,55;1,95 169,29;1,95
 311,80;1,94 474,83;1,94 324,65;1,93 157,51;1,93 4,26;1,92 1,93;1,92 0,44;1,88
 1,84;1,87 1,18;1,87 4,60;1,86 2,85;1,86 4,35;1,85 2,83;1,85 3,48;1,85 4,10;1,84
 1,10;1,84 1,49;1,84 1,32;1,83 1,87;1,83 2,56;1,82 1,81;1,82 0,95;1,80 0,92;1,79
 1,94;1,78 2,07;1,78 3,38;1,77 1,37;1,77 2,17;1,76 2,12;1,76 1,05;1,45 0,33;1,28
 0,42;1,27 1,43;1,13 1,16;1,11 2,38;1,10 1,20;0,91 1,52;0,88 0,36;0,88 2,12;0,87
 5,56;0,86 8,14;0,86 5,13;0,86 4,88;0,86 7,78;0,85 3,11;0,85 1,58;0,84 4,26;0,83
 7,98;0,83 4,80;0,82 3,83;0,82 8,93;0,82 4,13;0,81 1,41;0,81 1,57;0,01 1,27;0,00 46,54;-
 0,01 1,28

Ví dụ số 21 [CD 3CN] 8,87 2,15;8,12 6,63;8,12 6,93;8,11 6,97;8,11 6,79;8,01
 6,02;7,41 0,53;7,41 0,60;7,41 2,20;7,40 5,95;7,40 3,38;7,40 3,53;7,40 8,34;7,40
 5,18;7,39 8,48;7,39 8,64;7,39 0,96;7,38 1,02;7,38 0,49;7,32 0,46;7,32 0,41;7,31
 1,52;7,31 3,04;7,31 2,73;7,30 10,96;7,30 9,17;7,30 6,52;7,30 13,60;7,29 16,00;7,28
 1,55;6,77 6,75;6,77 6,72;6,76 6,84;6,76 6,62;5,45 2,85;4,17 6,19;4,16 11,15;4,15
 6,46;3,54 0,41;3,53 0,41;2,81 5,81;2,80 11,47;2,79 6,30;2,17 121,73;2,09 2,36;2,09
 1,92;2,08 4,14;2,08 3,88;2,08 3,85;2,07 6,16;2,07 3,86;2,06 4,57;2,06 2,02;2,06
 1,84;2,06 2,37;2,05 2,49;2,05 2,80;2,05 1,73;2,04 0,95;1,97 3,34;1,97 257,13;1,96
 11,13;1,95 15,26;1,95 129,36;1,95 246,94;1,94 355,17;1,94 233,11;1,93 114,36;1,93
 4,21;1,92 2,10;1,88 2,11;1,88 1,49;1,87 5,18;1,87 3,30;1,86 4,96;1,86 3,17;1,85
 5,85;1,85 1,34;1,84 1,70;1,84 0,95;1,83 1,50;1,83 2,13;1,82 1,49;1,82 0,80;1,80
 1,09;1,79 2,23;1,78 2,36;1,78 3,76;1,77 1,70;1,77 2,45;1,76 2,37;1,75 1,22;1,51
 0,57;1,50 1,09;1,49 1,16;1,49 0,68;1,49 1,86;1,48 0,73;1,48 1,19;1,47 1,17;1,47
 0,61;1,27 1,12;1,22 0,47;1,20 0,90;1,19 0,45;1,13 0,60;1,13 1,11;1,11 2,15;1,10
 1,04;0,91 1,01;0,88 0,34;0,87 2,22;0,87 6,00;0,86 8,75;0,86 5,69;0,86 5,37;0,85
 8,51;0,85 3,90;0,84 1,78;0,84 1,22;0,84 1,23;0,84 4,36;0,83 8,44;0,83 5,12;0,82
 4,24;0,82 9,09;0,81 4,27;0,81 1,54;0,80 1,65;0,75 0,81;0,74 0,85;0,74 2,83;0,74
 4,26;0,73 2,38;0,73 2,14;0,73 3,86;0,72 1,08;0,72 1,51;0,71 0,64;0,71 0,84;0,70
 1,65;0,70 4,33;0,69 2,37;0,69 1,80;0,69 1,23;0,68 4,04;0,68 2,05;0,68 1,01;0,67
 0,82;0,01 0,72;0,00 21,79;-0,01 0,67

Ví dụ số 22	[CD ₃ CN]	8,73	0,33;8,17	1,22;8,16	1,30;8,16	1,32;8,16	1,32;8,02	1,10;8,02	1,12;7,43	1,48;7,42	0,51;7,42	1,57;7,42	0,60;7,41	0,60;7,41	1,56;7,41	0,52;7,40	1,52;7,06	1,55;7,06	0,46;7,05	0,50;7,05	3,02;7,04	0,49;7,04	0,46;7,03	1,50;6,85	1,40;6,85	1,36;6,84	1,30;6,84	1,35;5,45	4,31;4,17	1,04;4,16	1,88;4,15	1,09;3,97	7,87;3,45	16,00;2,84	0,99;2,82	1,95;2,81	1,07;2,17	25,36;2,09	0,59;2,08	0,54;2,08	0,95;2,07	0,55;2,07	0,69;2,06	0,36;1,97	1,99;1,96	0,47;1,95	0,57;1,95	6,22;1,95	11,65;1,94	18,33;1,94	12,52;1,93	5,86;1,89	0,33;1,88	0,85;1,87	0,52;1,87	0,79;1,86	0,50;1,86	0,75;0,00	0,88																																									
Ví dụ số 23	[CD ₃ CN]	8,72	0,43;8,15	1,44;8,15	1,40;8,15	1,45;8,14	1,45;8,03	1,48;7,41	1,13;7,41	0,66;7,41	0,68;7,41	1,69;7,40	1,06;7,40	1,65;7,40	1,70;7,31	0,62;7,31	2,30;7,31	1,84;7,31	1,28;7,30	2,79;7,30	3,09;6,84	1,33;6,84	1,34;6,84	1,32;6,83	1,31;4,18	1,34;4,17	2,44;4,16	1,40;3,97	8,57;3,45	16,00;3,36	0,42;2,84	1,27;2,83	2,53;2,82	1,37;2,16	56,22;2,10	0,38;2,09	0,79;2,09	0,71;2,08	1,27;2,08	0,75;2,07	0,93;2,06	0,45;1,97	0,63;1,97	10,22;1,96	1,18;1,95	1,42;1,95	14,78;1,95	28,14;1,94	41,34;1,94	27,46;1,93	13,53;1,89	0,43;1,88	1,10;1,88	0,68;1,87	1,07;1,87	0,65;1,86	0,97;1,85	0,35;0,00	3,68																																									
Ví dụ số 24	[CD ₃ CN]	9,00	0,94;8,16	3,12;8,16	3,14;8,15	3,18;8,15	3,20;8,04	2,84;7,43	0,37;7,43	3,55;7,43	1,35;7,42	3,77;7,41	3,86;7,41	1,38;7,41	3,68;7,40	0,40;7,07	0,40;7,06	3,90;7,06	1,15;7,05	1,26;7,05	7,37;7,05	1,26;7,04	1,12;7,03	3,56;7,03	0,36;6,83	3,22;6,83	3,18;6,82	3,13;6,82	3,14;4,25	0,42;4,24	1,26;4,23	1,29;4,22	0,44;4,17	2,68;4,16	4,74;4,15	2,84;4,06	0,61;4,05	0,63;4,05	0,63;4,00	0,39;3,78	1,62;3,49	1,12;3,36	2,74;2,84	2,14;2,83	4,25;2,82	2,45;2,17	153,67;2,10	0,87;2,10	0,63;2,09	1,70;2,09	1,70;2,08	2,87;2,08	1,66;2,07	1,97;2,07	0,66;2,06	1,06;2,06	0,71;2,05	0,93;2,05	0,66;2,04	0,34;1,97	2,84;1,97	0,47;1,97	53,39;1,96	4,42;1,95	4,98;1,95	56,63;1,95	105,31;1,94	154,76;1,94	105,89;1,93	52,70;1,93	1,80;1,92	0,82;1,92	0,35;1,89	0,90;1,89	0,60;1,88	2,23;1,88	1,39;1,87	2,22;1,87	1,38;1,86	1,73;1,86	0,61;1,85	0,89;1,84	0,37;1,83	0,64;1,83	0,92;1,82	0,63;1,82	0,34;1,37	16,00;1,36	15,93;1,27	0,47;1,22	0,86;1,20	1,58;1,19	0,80;1,13	0,53;1,11	1,07;1,10	0,55;0,91	0,55;0,01	0,36;0,00	14,03;-0,01	0,42
Ví dụ số 25	[CD ₃ CN]	9,00	1,02;8,15	2,86;8,14	2,91;8,06	3,11;7,42	0,97;7,41	2,70;7,41	1,61;7,41	1,66;7,41	3,85;7,41	2,52;7,40	4,01;7,40	4,04;7,39	0,54;7,32																																																																																					

0,65;7,32	1,39;7,31	1,22;7,31	5,11;7,31	4,58;7,31	3,15;7,30	6,65;7,30	7,97;7,29
0,81;6,82	3,13;6,82	3,20;6,82	3,16;6,81	3,14;5,45	1,47;4,25	0,42;4,24	1,27;4,23
1,29;4,22	0,45;4,18	2,92;4,17	5,19;4,16	3,06;4,00	0,54;2,84	2,47;2,83	4,88;2,82
2,77;2,16	349,12;2,11	0,94;2,10	0,72;2,10	1,86;2,09	1,75;2,09	3,12;2,08	1,80;2,08
2,52;2,07	0,75;2,07	1,05;2,06	0,48;2,06	0,75;2,05	1,10;2,05	0,76;2,04	0,39;1,97
1,32;1,97	135,15;1,96	5,99;1,95	6,98;1,95	67,53;1,95	129,20;1,94	187,18;1,94	
124,02;1,93	62,30;1,92	1,31;1,90	1,06;1,89	0,73;1,89	2,51;1,88	1,57;1,88	2,50;1,87
1,53;1,87	1,97;1,85	0,68;1,85	0,91;1,84	0,43;1,83	0,75;1,83	1,09;1,82	0,78;1,82
0,41;1,37	15,89;1,36	16,00;1,27	0,40;1,13	0,47;1,11	0,90;1,10	0,43;0,91	0,61;0,01
0,56;0,00	17,88;-0,01	0,57					
Ví dụ số 26 [CD 3CN] 8,13 0,49;8,11 1,39;8,11 1,42;8,10 1,39;8,10 1,37;7,76							
1,50;7,43	1,49;7,43	0,59;7,42	1,60;7,42	1,66;7,41	0,60;7,41	1,58;7,07	1,71;7,06
0,56;7,05	0,55;7,05	3,17;7,05	0,59;7,04	0,46;7,04	1,51;6,77	1,33;6,77	1,33;6,76
1,34;6,76	1,33;5,45	0,72;4,17	1,26;4,16	2,30;4,15	1,32;3,69	16,00;2,83	1,22;2,82
2,38;2,81	1,28;2,16	220,97;2,10	0,39;2,09	0,76;2,09	0,71;2,08	1,21;2,08	0,72;2,07
0,88;2,06	0,49;2,06	0,41;2,05	0,59;2,05	0,40;1,97	0,39;1,97	12,90;1,96	2,70;1,95
3,15;1,95	36,26;1,95	69,14;1,94	99,80;1,94	65,90;1,93	33,48;1,93	1,12;1,92	0,51;1,89
0,43;1,88	1,06;1,88	0,68;1,87	1,03;1,87	0,64;1,86	0,93;1,85	0,38;1,83	0,40;1,83
0,59;1,82	0,40;1,27	0,37;1,13	0,33;1,11	0,62;0,00	8,16		
Ví dụ số 27 [CD 3CN] 8,10 1,34;8,09 1,28;8,09 1,34;8,09 1,32;8,06 0,39;7,78							
1,16;7,77	1,33;7,77	1,32;7,42	1,30;7,41	0,75;7,41	0,73;7,41	1,36;7,41	1,00;7,40
1,68;7,40	1,69;7,32	0,45;7,32	0,77;7,32	0,66;7,31	1,97;7,31	1,93;7,31	1,30;7,30
2,71;7,30	3,57;7,30	0,40;6,76	1,32;6,76	1,30;6,75	1,33;6,75	1,31;5,45	0,51;4,18
1,20;4,17	2,12;4,16	1,24;3,77	0,32;3,72	0,68;3,68	16,00;3,68	0,42;3,55	0,77;2,83
1,16;2,82	2,19;2,81	1,22;2,19	0,59;2,16	494,63;2,13	0,37;2,11	0,43;2,10	0,32;2,10
0,75;2,09	0,71;2,09	1,19;2,08	0,71;2,08	2,88;2,07	0,34;2,07	0,44;2,06	0,64;2,06
1,10;2,05	1,56;2,05	1,11;2,04	0,55;1,97	2,91;1,97	395,06;1,96	8,76;1,95	9,24;1,95
102,32;1,95	189,07;1,94	284,13;1,94	194,04;1,93	96,18;1,93	3,13;1,92	1,46;1,92	
0,61;1,92	0,40;1,92	0,35;1,89	0,51;1,89	0,39;1,88	1,07;1,88	0,71;1,87	1,04;1,87
0,69;1,86	0,95;1,86	0,34;1,85	0,41;1,85	2,24;1,84	0,40;1,84	0,62;1,83	1,13;1,83
1,60;1,82	1,12;1,82	0,60;1,29	0,34;1,27	1,09;1,13	0,73;1,11	1,45;1,10	0,74;0,91

1,06;0,01 0,68;0,00 27,09;-0,01 0,83									
Ví dụ số 28	[CD ₃ CN]	8,53	0,63;8,13	1,51;8,12	1,58;8,11	1,62;8,11	1,70;8,04	1,90;7,43	1,65;7,43
			0,78;7,42	1,88;7,41	2,03;7,40	0,86;7,40	1,89;7,07	1,88;7,06	0,69;7,05
			0,85;7,04	3,43;7,04	0,81;7,03	0,66;7,02	1,63;6,78	1,47;6,77	1,51;6,77
			1,48;6,76	1,43;4,17	1,63;4,16	2,91;4,14	1,65;2,83	1,54;2,82	3,05;2,80
			1,72;2,66	0,38;2,64	0,96;2,63	1,31;2,61	1,01;2,59	0,42;2,15	400,60;2,12
			1,80;2,11	1,81;2,11	1,68;2,10	1,58;2,09	1,71;2,09	1,53;2,08	2,02;2,07
			1,43;2,07	1,54;2,06	0,76;2,05	0,86;2,03	0,35;1,97	2,43;1,96	24,07;1,96
			7,56;1,95	38,73;1,95	71,16;1,94	98,81;1,93	68,31;1,93	35,30;1,90	1,33;1,90
			1,06;1,89	1,84;1,88	1,36;1,87	1,73;1,86	1,22;1,86	1,37;1,84	0,60;1,78
			0,34;1,77	0,52;1,77	0,68;1,76	0,49;1,45	1,04;1,27	0,65;1,20	0,45;1,15
			16,00;1,13	15,73;1,11	0,60;1,07	1,04;1,05	1,01;0,01	2,02;0,00	37,39;-0,01
			1,74						
Ví dụ số 29	[CD ₃ CN]	8,53	0,63;8,11	1,70;8,10	1,67;8,10	1,70;8,05	2,05;7,42	1,35;7,41	1,00;7,41
			1,06;7,41	2,01;7,40	1,44;7,40	2,05;7,39	2,11;7,39	0,47;7,31	1,12;7,31
			3,10;7,30	2,08;7,30	3,46;7,29	3,34;7,28	0,41;6,77	1,55;6,77	1,54;6,76
			1,54;6,75	1,47;4,18	1,72;4,17	3,08;4,15	1,75;2,84	1,66;2,82	3,20;2,80
			1,76;2,66	0,43;2,64	1,02;2,63	1,37;2,61	1,07;2,59	0,46;2,15	356,74;2,12
			1,56;2,11	1,60;2,11	1,60;2,11	1,61;2,10	1,93;2,09	1,50;2,09	1,99;2,08
			1,34;2,07	1,54;2,06	0,70;2,06	0,85;1,97	2,60;1,96	18,27;1,96	7,76;1,95
			37,89;1,95	68,94;1,94	95,23;1,93	65,84;1,93	33,89;1,91	1,17;1,90	0,86;1,89
			1,71;1,88	1,20;1,88	1,57;1,87	1,04;1,86	1,23;1,85	0,46;1,85	0,46;1,77
			0,39;1,77	0,54;1,76	0,39;1,27	0,37;1,21	1,01;1,19	0,93;1,15	16,00;1,13
			15,71;1,12	1,88;1,11	0,55;1,11	0,95;0,01	2,16;0,00	36,54;-0,01	1,73
Ví dụ số 30	[CD ₃ CN]	8,54	0,65;8,13	1,64;8,12	1,66;8,01	1,64;7,43	1,85;7,42	1,94;7,41	2,01;7,40
			1,02;7,39	1,86;7,06	1,85;7,04	3,52;7,02	1,57;6,80	1,34;6,80	1,59;6,79
			1,44;6,79	1,11;6,04	0,33;6,03	0,38;6,02	0,35;6,01	0,35;5,99	0,40;5,52
			0,37;5,48	0,40;4,17	1,85;4,16	3,14;4,14	1,63;4,07	0,65;4,05	0,57;3,57
			0,38;3,55	0,61;3,54	0,75;3,54	0,66;3,52	0,60;3,50	0,33;3,27	0,33;2,96
			0,48;2,84	1,86;2,82	3,29;2,81	1,88;2,71	0,36;2,66	0,35;2,61	0,37;2,57
			0,36;2,49	0,59;2,46	1,44;2,39	0,87;2,37	0,88;2,35	0,93;2,34	1,04;2,32
			1,12;2,30	1,25;2,28	1,49;2,24	5,60;2,22	7,93;2,15	3170,97;2,12	12,27;2,11
			11,19;2,11	10,36;2,10	7,82;2,09	6,11;2,09	4,76;2,08	4,49;2,07	3,79;2,05
			2,81;2,00	8,49;1,99	11,64;1,99	10,01;1,96	131,70;1,96	60,56;1,95	

308,30;1,95 561,87;1,94 776,89;1,93 536,23;1,93 275,81;1,89 3,51;1,88 2,84;1,87
 2,84;1,86 2,03;1,80 0,73;1,79 1,05;1,78 1,92;1,77 3,39;1,77 4,67;1,76 3,38;1,76
 1,63;1,65 0,33;1,45 1,22;1,44 0,42;1,27 2,35;1,22 0,70;1,20 1,46;1,19 0,66;1,13
 1,58;1,11 2,80;1,10 1,35;1,07 5,03;1,05 4,94;0,96 15,92;0,94 16,00;0,93 15,83;0,92
 7,02;0,92 6,89;0,91 15,68;0,89 0,92;0,15 1,21;0,01 15,64;0,00 294,13;-0,01 14,71;-0,15
 1,27

Ví dụ số 31 [CD₃CN] 8,54 0,64;8,12 1,65;8,10 1,68;8,03 1,86;7,41 1,29;7,41
 0,98;7,41 1,02;7,41 1,94;7,40 1,45;7,40 2,10;7,39 2,11;7,30 2,92;7,30 2,65;7,30
 2,07;7,29 3,54;7,29 3,52;6,79 1,51;6,79 1,53;6,78 1,50;6,77 1,47;4,18 1,68;4,17
 3,05;4,15 1,72;2,84 1,62;2,82 3,12;2,81 1,70;2,24 3,77;2,23 5,35;2,15 417,05;2,11
 2,57;2,11 2,84;2,10 2,55;2,09 2,32;2,09 2,60;2,07 2,30;2,05 1,29;2,04 0,53;2,02
 0,48;1,97 2,43;1,96 8,32;1,96 8,85;1,95 47,32;1,95 86,75;1,94 120,02;1,93 82,95;1,93
 42,90;1,90 1,60;1,89 2,01;1,88 1,48;1,87 1,82;1,87 1,30;1,86 1,44;1,84 0,67;1,78
 0,42;1,77 0,63;1,77 0,82;1,76 0,61;1,76 0,36;1,27 0,46;1,20 0,55;1,11 0,47;1,00
 0,76;0,99 0,81;0,96 16,00;0,95 3,04;0,94 15,57;0,93 1,49;0,91 0,52;0,01 2,62;0,00
 45,26;-0,01 2,08

Ví dụ số 32 [CD₃CN] 9,03 3,06;8,21 7,74;8,20 7,84;8,18 9,33;7,94 8,49;7,94
 10,32;7,93 2,84;7,93 11,48;7,93 9,55;7,83 1,14;7,83 8,01;7,82 10,18;7,82 2,89;7,81
 11,51;7,81 9,74;7,62 1,27;7,62 2,47;7,62 1,54;7,61 1,72;7,61 6,32;7,59 2,50;7,59
 4,51;7,59 2,56;7,56 1,25;7,56 2,48;7,55 1,51;7,55 1,71;7,54 6,27;7,54 2,37;7,53
 9,89;7,53 8,22;7,53 3,32;7,52 12,14;7,51 2,13;7,51 5,56;7,48 8,32;7,47 3,78;7,46
 13,24;7,46 3,71;7,45 10,30;7,45 9,09;7,44 3,17;7,44 8,17;7,43 0,92;7,08 0,86;7,08
 8,35;7,08 2,69;7,07 2,92;7,06 16,00;7,06 3,21;7,05 2,49;7,05 7,88;7,04 0,98;6,87
 6,69;6,86 6,94;6,86 6,62;6,86 6,82;6,74 0,50;5,98 0,45;4,19 6,53;4,18 11,96;4,17
 6,82;4,08 0,72;4,06 2,14;4,05 2,13;4,04 0,71;3,61 0,36;3,54 0,44;3,53 0,44;2,88
 6,17;2,87 12,30;2,86 6,61;2,17 354,13;2,12 3,04;2,11 2,50;2,11 4,76;2,10 4,39;2,10
 6,77;2,09 4,24;2,09 5,06;2,08 1,99;2,08 2,60;2,06 1,38;2,06 2,22;2,05 3,14;2,05
 2,17;2,04 1,24;1,97 9,88;1,97 12,68;1,96 14,29;1,95 15,61;1,95 183,09;1,95
 345,53;1,94 504,89;1,94 352,39;1,93 178,21;1,92 2,73;1,91 2,30;1,91 1,62;1,90
 5,34;1,90 3,49;1,89 5,41;1,89 3,41;1,88 4,67;1,87 1,70;1,84 1,05;1,83 1,97;1,83
 2,89;1,82 1,96;1,82 1,01;1,45 2,51;1,44 0,42;1,27 1,82;1,22 2,61;1,20 5,23;1,19

2,51;1,13	0,35;1,13	1,99;1,11	3,88;1,10	1,90;0,91	1,88;0,88	0,33;0,10	0,60;0,01
4,27;0,00	149,10;-0,01	5,07;-0,10	0,60				
Ví dụ số 33	[CD ₃ CN]	9,03	2,43;8,74	0,34;8,19	16,00;8,19	7,83;8,19	6,92;8,02
0,41;8,01	0,96;8,00	0,71;8,00	0,64;7,94	8,46;7,93	2,60;7,93	9,41;7,93	7,71;7,83
4,74;7,82	5,99;7,82	1,85;7,81	6,90;7,81	5,69;7,62	1,32;7,62	2,14;7,61	1,33;7,60
5,26;7,60	1,96;7,59	2,31;7,59	3,80;7,59	2,12;7,57	0,36;7,56	0,86;7,55	1,68;7,55
1,32;7,55	1,11;7,54	3,72;7,54	1,57;7,53	8,21;7,53	4,41;7,52	9,79;7,51	1,87;7,51
4,48;7,50	0,77;7,49	0,55;7,48	0,92;7,48	1,21;7,48	4,93;7,47	2,29;7,46	6,93;7,45
1,53;7,45	3,60;7,45	3,15;7,45	2,13;7,45	6,32;7,44	4,79;7,44	3,57;7,44	3,59;7,44
3,41;7,43	8,45;7,43	7,43;7,42	0,96;7,42	0,35;7,34	1,02;7,33	0,80;7,33	2,39;7,33
2,06;7,32	7,53;7,32	4,97;7,32	5,02;7,31	12,81;7,31	13,01;7,31	2,75;7,30	1,48;7,29
0,44;7,29	0,42;6,86	5,49;6,86	4,25;6,85	4,34;6,85	5,58;4,20	5,27;4,19	9,71;4,18
5,53;4,06	0,65;4,05	0,63;3,54	0,81;3,53	0,81;2,89	5,00;2,88	9,93;2,87	5,40;2,17
62,37;2,12	3,51;2,12	2,94;2,11	4,68;2,11	4,26;2,10	6,14;2,10	4,02;2,09	4,61;2,09
2,06;2,08	2,39;2,06	1,00;2,06	1,49;2,05	1,92;2,05	1,41;2,04	0,86;1,97	3,10;1,97
7,03;1,96	7,15;1,95	9,61;1,95	97,58;1,95	187,06;1,94	266,43;1,94	180,73;1,93	
95,01;1,92	2,43;1,91	1,80;1,91	4,72;1,90	3,22;1,89	4,75;1,89	3,08;1,89	4,00;1,88
1,56;1,83	0,65;1,83	1,14;1,83	1,65;1,82	1,18;1,82	0,65;1,27	0,65;1,22	0,82;1,20
1,62;1,19	0,82;1,13	1,63;1,11	3,31;1,10	1,67;0,91	1,01;0,01	2,68;0,00	80,69;-0,01
3,13							
Ví dụ số 34	[CD ₃ CN]	8,69	1,30;8,17	0,45;8,16	0,47;8,15	0,48;8,15	0,47;8,12
3,61;8,12	3,71;8,11	3,65;8,11	3,76;7,98	3,81;7,48	0,41;7,47	0,51;7,46	0,66;7,45
0,64;7,42	0,61;7,41	4,11;7,41	1,96;7,40	4,66;7,40	3,21;7,39	2,80;7,39	5,25;7,38
2,22;7,38	5,01;7,37	2,16;7,37	1,89;7,37	1,06;7,36	2,20;7,35	4,50;7,35	4,42;7,34
1,60;7,33	11,56;7,33	11,26;7,33	9,87;7,32	1,61;7,32	1,78;7,31	3,19;7,30	1,82;7,30
1,64;7,29	1,43;7,28	2,98;7,28	2,70;7,27	1,21;7,27	1,48;7,26	0,68;7,25	0,32;7,06
0,65;7,05	4,63;7,05	1,95;7,04	0,67;7,03	1,84;7,03	8,62;7,02	2,52;7,01	1,51;7,01
4,20;7,00	0,92;7,00	0,60;6,83	0,47;6,83	0,48;6,82	0,48;6,82	0,48;6,79	3,70;6,79
3,70;6,78	3,61;6,77	3,58;5,45	2,16;5,16	0,51;4,16	3,88;4,14	6,94;4,13	3,95;3,70
16,00;3,61	3,16;2,81	3,48;2,79	6,94;2,78	3,76;2,29	0,35;2,27	0,47;2,16	45,32;2,11
2,47;2,11	2,20;2,10	1,79;2,09	1,57;2,09	2,03;2,08	1,79;2,07	2,94;2,07	2,82;2,06
4,09;2,05	2,72;2,04	3,13;2,04	1,35;2,03	1,66;1,99	0,51;1,97	1,52;1,97	2,82;1,96

74,42;1,96	5,26;1,95	30,94;1,95	58,82;1,94	84,49;1,93	58,28;1,93	29,86;1,88	1,56;1,87		
1,23;1,86	3,34;1,85	2,36;1,85	3,27;1,84	2,21;1,83	2,67;1,82	1,00;1,82	1,06;1,79		
0,60;1,78	0,37;1,77	0,50;1,77	0,63;1,76	0,57;1,45	0,87;1,28	0,44;1,27	1,35;1,22		
0,43;1,20	0,73;1,19	0,40;1,14	0,33;0,91	0,48;0,01	1,02;0,00	26,47;-0,01	1,01		
Ví dụ số 35 [CD ₃ CN]									
8,84	0,42;8,66	1,38;8,46	0,84;8,36	0,79;8,34	0,73;8,15				
0,57;8,14	0,56;8,11	3,83;8,10	3,74;8,10	3,70;7,99	3,95;7,81	0,42;7,57	0,32;7,54		
0,37;7,52	0,39;7,50	0,50;7,48	1,10;7,46	1,16;7,43	0,77;7,40	3,91;7,39	4,30;7,39		
4,34;7,38	4,93;7,38	5,93;7,38	4,56;7,37	6,73;7,37	6,83;7,36	4,22;7,36	5,13;7,35		
6,55;7,35	6,07;7,34	12,99;7,33	12,57;7,32	3,25;7,31	7,48;7,30	4,40;7,30	6,31;7,30		
11,28;7,29	8,22;7,29	12,07;7,28	14,06;7,28	14,65;7,27	5,41;7,25	1,54;7,22	0,83;7,21		
1,27;7,20	1,00;7,19	1,02;7,17	0,67;7,16	0,86;7,15	0,77;7,14	1,19;7,12	0,87;7,11		
0,62;7,09	0,59;7,09	0,65;7,07	0,59;7,06	0,40;7,02	0,70;7,00	0,50;6,83	0,60;6,82		
0,52;6,81	0,58;6,81	0,65;6,78	3,48;6,78	3,43;6,77	3,36;6,77	3,46;5,45	3,76;5,41		
0,41;5,16	0,41;4,41	0,49;4,20	0,39;4,19	0,42;4,17	4,24;4,15	7,40;4,14	4,79;4,12		
0,58;4,11	0,41;4,08	0,44;4,07	0,67;4,05	0,84;3,80	0,36;3,78	0,40;3,76	3,63;3,70		
16,00;3,62	1,09;3,61	2,52;3,60	14,42;3,53	0,40;3,52	0,35;3,52	0,41;3,50	0,37;3,49		
0,40;3,48	0,35;3,35	0,76;2,81	3,72;2,80	7,21;2,78	3,82;2,47	0,43;2,47	0,57;2,46		
0,44;2,36	0,47;2,34	0,79;2,33	0,72;2,31	0,64;2,30	0,86;2,29	0,93;2,28	1,02;2,15		
1291,20;2,11	14,42;2,11	13,14;2,10	10,32;2,09	8,15;2,08	6,61;2,07	5,87;2,07	6,83;2,06		
4,98;2,05	5,34;2,04	3,33;2,01	2,18;1,97	10,97;1,96	534,49;1,96	47,42;1,95	285,56;1,95		
539,00;1,94	772,69;1,93	533,69;1,93	274,84;1,88	4,03;1,87	5,27;1,86	4,07;1,85			
4,82;1,85	3,54;1,84	3,89;1,82	2,12;1,80	1,32;1,79	4,02;1,78	2,61;1,77	4,01;1,77		
5,27;1,76	4,18;1,76	2,29;1,75	1,25;1,73	1,07;1,72	1,11;1,69	1,12;1,66	0,84;1,62		
0,60;1,61	0,62;1,60	0,68;1,59	0,65;1,57	0,62;1,55	0,74;1,53	0,77;1,51	0,74;1,50		
0,81;1,49	0,70;1,48	0,69;1,46	0,50;1,44	0,64;1,43	0,51;1,41	0,57;1,41	0,60;1,39		
1,11;1,38	0,61;1,36	0,71;1,34	1,17;1,32	0,94;1,31	0,93;1,29	2,24;1,27	7,40;1,24		
1,06;1,24	0,91;1,23	1,11;1,22	1,56;1,22	1,01;1,20	2,69;1,19	1,34;1,18	0,67;1,17		
0,70;1,16	0,56;1,15	0,53;1,14	1,30;1,12	0,54;1,10	0,57;1,09	0,47;1,08	0,79;1,06		
0,81;1,04	0,48;1,00	0,34;1,00	0,32;0,99	0,38;0,97	0,53;0,95	0,54;0,93	0,44;0,91		
3,89;0,89	0,87;0,88	1,31;0,86	0,75;0,84	0,52;0,82	0,39;0,82	0,33;0,79	0,32;0,57		
0,32;0,15	1,03;0,01	9,80;0,00	232,46;-0,01	9,70;-0,05	0,33;-0,06	0,33;-0,15	1,01		

Ví dụ số 36	[CD ₃ CN]	19,94	0,65;9,24	1,88;9,22	1,96;8,68	1,19;8,46	1,03;8,32	3,19;8,16	2,28;8,15	2,62;8,14	2,64;8,13	3,02;8,12	1,13;7,98	3,50;7,43	9,12;7,42	9,99;7,41	10,29;7,40	9,29;7,09	2,01;7,07	4,09;7,06	4,23;7,05	4,33;7,04	3,59;7,04	2,02;6,85	5,66;6,84	5,65;6,80	0,77;6,79	0,75;6,67	3,50;6,38	0,58;4,17	8,76;4,16	16,00;4,15	9,11;4,13	0,68;4,13	0,66;4,06	1,22;4,05	1,40;4,04	0,63;3,55	0,62;3,53	0,60;3,52	0,52;2,83	7,78;2,82	15,96;2,81	9,19;2,80	0,96;2,78	0,63;2,74	0,71;2,47	0,58;2,15	1619,61;2,10	3,30;2,09	6,91;2,09	12,26;2,08	10,47;2,08	6,56;2,07	7,89;2,07	3,38;2,06	6,46;2,06	6,45;2,05	8,27;2,05	5,80;2,04	3,05;1,97	7,23;1,97	84,42;1,96	46,87;1,95	58,29;1,95	539,35;1,95	972,69;1,94	1413,07;1,94	974,09;1,93	494,81;1,92	6,87;1,89	3,43;1,89	2,52;1,88	8,56;1,88	5,52;1,87	8,87;1,87	5,57;1,86	7,71;1,85	2,81;1,85	3,39;1,83	3,27;1,83	5,72;1,83	8,02;1,82	5,44;1,82	2,80;1,27	3,78;1,22	1,70;1,20	3,25;1,19	1,65;1,13	1,55;1,11	3,17;1,10	1,61;0,88	0,77;0,87	0,67;0,10	1,64;0,01	12,44;0,00	406,61;-0,01	12,14;-0,10	1,66																																		
Ví dụ số 37	[CD ₃ CN]	9,22	1,12;9,20	1,14;8,70	0,82;8,54	2,28;8,48	0,72;8,32	1,93;8,13	3,54;8,11	2,20;8,09	1,91;8,07	0,47;8,05	0,51;7,99	2,00;7,84	0,53;7,60	0,75;7,58	0,82;7,44	2,13;7,43	1,98;7,42	2,99;7,42	8,16;7,41	5,64;7,41	5,88;7,41	10,34;7,40	7,94;7,40	10,61;7,40	8,08;7,39	11,23;7,39	2,55;7,38	1,90;7,31	8,44;7,14	0,75;7,12	0,74;7,08	2,41;7,08	1,00;7,07	1,65;7,06	4,42;7,05	1,31;7,04	1,81;7,04	2,28;7,02	0,60;6,85	5,39;6,84	5,68;6,83	5,47;6,83	5,25;6,79	2,24;6,78	1,75;6,77	1,48;6,76	1,18;6,69	2,22;6,68	0,97;6,67	0,88;5,45	10,12;4,19	8,35;4,17	16,00;4,16	6,70;4,16	10,13;4,15	3,31;3,68	0,88;3,29	1,63;3,17	7,82;3,06	7,96;2,96	8,28;2,89	0,74;2,84	7,25;2,82	14,80;2,81	8,89;2,80	2,28;2,77	0,72;2,67	0,55;2,47	0,40;2,46	0,32;2,32	3,06;2,16	501,04;2,11	9,58;2,11	9,73;2,10	11,02;2,09	9,42;2,08	12,19;2,08	9,37;2,07	9,56;2,06	5,49;2,05	5,26;2,02	1,40;1,96	90,22;1,96	17,48;1,95	147,07;1,95	278,25;1,94	400,28;1,93	276,42;1,93	142,35;1,90	5,44;1,90	4,39;1,89	9,51;1,88	7,12;1,87	9,50;1,87	7,02;1,86	8,19;1,84	3,43;1,79	1,13;1,78	1,40;1,77	2,09;1,77	2,80;1,76	2,03;1,76	1,33;1,72	0,56;1,62	0,39;1,60	0,60;1,56	0,43;1,49	0,45;1,49	0,37;1,39	0,40;1,34	0,52;1,27	4,21;1,22	0,52;1,20	0,79;1,19	0,46;1,16	0,41;1,14	1,01;1,06	1,12;1,04	2,04;1,02	1,06;0,91	2,16;0,90	0,48;0,89	0,45;0,88	0,67;0,86	0,45;0,15	0,50;0,01	5,19;0,00	127,20;-0,01	4,91;-0,02	0,64;-0,15	0,52
Ví dụ số 38	[CD ₃ CN]	8,43	5,82;8,43	4,66;8,09	3,36;8,09	3,45;8,09	3,00;8,09																																																																																																																														

2,73;8,08	3,45;8,08	3,42;8,07	2,89;8,07	2,57;7,86	0,53;7,85	0,56;7,45	0,50;7,44
3,29;7,43	2,06;7,42	4,25;7,42	3,09;7,42	4,02;7,42	5,23;7,41	4,19;7,40	5,47;7,39
3,65;7,39	0,61;7,33	0,43;7,33	0,45;7,31	1,56;7,31	4,38;7,30	4,18;7,30	2,88;7,29
6,18;7,29	5,81;7,28	0,64;7,07	0,56;7,06	3,68;7,06	1,20;7,05	1,48;7,04	6,62;7,04
1,30;7,02	1,13;7,02	3,05;7,01	0,33;6,67	2,18;6,66	2,39;6,65	4,25;6,65	4,85;6,64
2,38;6,64	2,95;6,62	3,88;6,62	4,25;6,61	3,66;6,61	3,23;6,61	3,23;6,61	3,31;6,60
2,87;6,36	0,48;6,36	0,54;6,35	0,45;6,35	0,55;6,33	0,78;5,45	2,73;4,78	0,38;4,18
2,76;4,17	4,19;4,16	5,20;4,15	6,54;4,15	3,47;4,14	3,50;4,07	0,51;4,05	0,54;3,06
16,00;3,05	14,00;2,97	13,85;2,97	11,10;2,96	1,38;2,89	0,35;2,84	0,36;2,81	2,43;2,81
3,59;2,80	5,03;2,79	5,97;2,78	3,16;2,77	3,43;2,76	0,73;2,16	496,75;2,13	3,97;2,12
2,23;2,11	2,30;2,11	2,49;2,10	2,59;2,10	2,28;2,09	2,34;2,08	3,59;2,07	4,48;2,06
3,86;2,04	1,81;2,04	1,54;1,99	0,78;1,97	5,39;1,96	104,98;1,96	9,99;1,95	72,03;1,95
135,24;1,94	193,59;1,93	132,82;1,93	67,88;1,89	1,67;1,89	2,27;1,88	3,21;1,87	
4,48;1,85	4,09;1,85	3,03;1,84	2,96;1,83	1,25;1,83	1,08;1,79	0,75;1,78	0,56;1,77
0,90;1,77	1,23;1,76	0,89;1,76	0,52;1,27	1,10;1,22	0,72;1,20	1,38;1,19	0,73;0,91
1,02;0,01	2,42;0,00	61,98;-0,01	2,38				
Ví dụ số 39 [CD ₃ CN]							
8,43	5,24;8,09	3,23;8,09	3,08;8,08	3,22;8,08	3,19;7,77		
0,33;7,76	0,35;7,44	0,38;7,43	3,36;7,43	1,23;7,42	3,69;7,42	1,57;7,42	1,56;7,42
3,76;7,41	1,32;7,41	3,55;7,40	0,41;7,13	0,35;7,11	0,65;7,10	0,34;7,06	0,45;7,06
3,80;7,06	1,15;7,05	1,26;7,04	6,98;7,04	1,20;7,03	1,12;7,03	3,43;7,02	0,35;6,65
2,80;6,64	3,20;6,64	2,77;6,63	3,12;6,61	3,28;6,61	3,80;6,60	3,33;6,60	2,96;6,30
0,48;4,16	2,66;4,15	4,67;4,14	2,67;4,09	0,44;3,06	16,00;2,97	15,08;2,96	0,39;2,80
2,45;2,79	4,77;2,78	2,61;2,17	1355,00;2,14	0,68;2,09	0,83;2,08	0,66;2,08	1,57;2,07
1,42;2,07	2,38;2,06	2,22;2,06	3,39;2,05	3,14;2,05	2,28;2,04	1,13;1,97	13,95;1,96
12,79;1,95	15,39;1,95	165,58;1,95	329,59;1,94	489,99;1,94	325,35;1,93	155,14;1,93	
4,91;1,92	2,32;1,88	1,00;1,87	0,70;1,87	2,23;1,86	1,48;1,86	2,07;1,85	1,53;1,85
1,99;1,84	0,74;1,84	1,68;1,83	1,96;1,83	2,79;1,82	1,99;1,82	1,02;1,44	5,93;1,27
1,08;1,11	0,55;0,91	1,77;0,01	1,11;0,00	43,04;-0,01	1,34		
Ví dụ số 40 [DMSO-D ₆]							
10,36	4,02;8,15	4,48;8,13	4,63;8,09	4,10;7,46	0,33;7,46		
3,35;7,45	1,36;7,44	3,80;7,43	4,54;7,43	1,68;7,42	4,10;7,41	0,53;7,24	0,47;7,24
4,14;7,23	1,29;7,22	1,46;7,21	7,43;7,21	1,47;7,20	1,15;7,19	3,52;7,18	0,34;6,76

3,13;6,76 3,12;6,75 3,10;6,74 3,15;4,20 2,51;4,18 4,06;4,16 2,62;3,36 405,89;3,34 0,50;3,06 2,19;3,04 3,78;3,02 2,66;2,67 0,72;2,65 2,08;2,63 2,82;2,61 1,78;2,59 0,58;2,52 17,00;2,52 23,32;2,51 16,38;2,40 1,88;2,39 6,33;2,37 6,52;2,35 2,11;2,00 0,40;1,10 0,39;1,07 7,47;1,05 16,00;1,03 7,16	
Ví dụ số 41 [DMSO-D ₆] 8,44 5,92;8,43 3,68;8,43 3,83;8,42 6,02;7,28 4,34;7,27 2,33;7,26 6,88;7,19 5,40;7,17 3,72;7,15 6,23;7,15 3,84;7,14 3,89;7,14 5,91;4,18 2,47;4,16 3,77;4,14 2,52;4,10 0,66;4,06 0,64;4,04 1,87;4,02 1,90;4,00 0,65;3,31 284,17;3,07 2,21;3,06 3,49;3,04 2,58;2,89 0,82;2,73 0,65;2,67 0,36;2,67 0,46;2,67 0,34;2,64 0,79;2,62 2,05;2,61 2,87;2,59 1,80;2,57 0,72;2,54 0,64;2,51 24,14;2,50 45,26;2,50 59,28;2,50 40,96;2,49 19,54;2,33 16,00;1,99 8,22;1,91 0,81;1,19 2,27;1,17 4,49;1,16 2,23;1,07 0,48;0,92 0,40;0,01 0,62;0,00 13,23;-0,01 0,53	
Ví dụ số 42 [DMSO-D ₆] 8,73 10,76;8,73 7,01;8,72 7,15;8,72 11,09;8,48 14,87;8,48 9,20;8,47 9,36;8,47 15,18;8,43 0,36;8,42 0,35;7,83 12,62;7,83 8,14;7,82 7,99;7,82 12,12;7,72 3,32;7,70 12,43;7,67 2,99;7,65 6,03;7,63 4,72;7,61 4,80;7,59 1,74;7,56 0,33;7,26 0,45;7,18 16,00;7,18 9,84;7,17 9,90;7,17 15,59;7,15 0,51;7,15 0,33;7,13 0,42;4,22 5,88;4,21 8,79;4,19 6,03;4,16 0,35;4,10 0,74;4,04 0,45;4,02 0,46;3,91 0,50;3,61 0,33;3,60 0,34;3,59 0,37;3,56 0,39;3,54 0,47;3,53 0,47;3,51 0,57;3,48 0,62;3,47 0,70;3,31 2137,05;3,29 34,04;3,08 5,11;3,07 8,13;3,05 6,08;2,89 0,32;2,73 0,39;2,68 0,95;2,67 1,72;2,67 2,34;2,67 2,74;2,64 4,95;2,63 6,91;2,61 4,43;2,59 1,89;2,54 3,03;2,52 8,68;2,51 111,92;2,51 208,40;2,50 272,43;2,50 187,67;2,49 89,14;2,34 0,67;2,33 1,40;2,33 2,48;2,18 0,46;2,07 1,06;1,99 1,30;1,91 1,87;1,24 0,78;1,19 0,39;1,18 0,79;1,16 0,49;1,07 2,34;0,89 0,33;0,00 1,84	
Ví dụ số 43 [DMSO-D ₆] 8,55 3,50;8,54 2,14;8,54 2,20;8,53 3,62;7,95 1,92;7,32 1,62;7,31 0,73;7,30 1,85;7,30 2,22;7,29 0,85;7,28 2,01;7,15 2,10;7,14 0,72;7,13 0,95;7,13 4,57;7,12 4,66;7,12 2,89;7,11 2,49;7,11 4,14;7,10 1,97;4,35 1,40;4,34 1,24;4,33 1,32;3,33 69,85;2,89 16,00;2,73 13,14;2,73 12,88;2,72 1,37;2,70 1,46;2,51 4,08;2,51 7,74;2,50 10,22;2,50 7,17;2,49 3,53;1,91 2,30;1,85 1,02;1,84 0,96;1,77 0,92;1,76 1,09;1,65 0,89;1,63 1,10	
Ví dụ số 44 [DMSO-D ₆] 8,73 2,30;8,73 1,57;8,72 1,56;8,72 2,40;8,47 11,10;8,47 7,35;8,46 7,60;8,46 11,41;8,44 0,39;8,33 0,70;8,31 0,73;7,95 0,47;7,91 0,45;7,83 2,92;7,83 1,97;7,82 1,85;7,82 2,75;7,60 0,35;7,59 0,34;7,58 0,34;7,56 0,33;7,55	

0,40;7,54	0,40;7,53	0,42;7,53	0,43;7,51	0,37;7,49	0,40;7,47	0,36;7,44	1,68;7,43	2,92;7,42	3,90;7,41	4,18;7,39	2,91;7,38	1,26;7,36	0,53;7,35	0,99;7,33	0,52;7,32	0,43;7,31	0,42;7,25	0,38;7,24	0,48;7,21	6,27;7,21	7,51;7,19	10,12;7,18	6,82;7,18	15,23;7,17	9,62;7,16	10,33;7,16	16,00;7,15	2,33;7,14	1,12;7,12	0,61;7,12	0,85;4,22	0,38;4,21	5,27;4,19	8,07;4,17	5,51;4,10	1,27;4,04	0,44;4,02	0,49;4,00	0,33;3,91	2,04;3,62	0,32;3,58	0,38;3,58	0,38;3,57	0,41;3,56	0,47;3,54	0,55;3,52	0,62;3,51	0,74;3,44	1,00;3,32	2064,37;3,22	0,68;3,15	0,35;3,07	4,82;3,06	7,57;3,04	5,62;2,89	2,26;2,73	1,91;2,67	1,46;2,67	1,20;2,66	0,89;2,65	1,78;2,63	4,63;2,62	6,32;2,60	4,05;2,58	1,71;2,56	0,76;2,54	1,97;2,51	82,20;2,51	153,58;2,50	201,23;2,50	140,41;2,49	68,02;2,33	0,90;2,33	1,28;2,32	0,88;2,28	0,42;2,07	0,72;1,99	1,57;1,91	14,77;1,66	0,51;1,61	0,45;1,40	5,58;1,37	0,36;1,30	0,41;1,28	0,34;1,26	0,37;1,24	1,07;1,19	0,65;1,18	1,13;1,16	5,74;1,12	0,42;1,09	0,77;1,07	15,92;1,06	0,96;1,04	0,62;0,91	0,32;0,89	0,42;0,85	0,42;0,83	0,37;0,01	0,36;0,00	6,83
Ví dụ số 45	[DMSO-D ₆]	8,12	0,72;8,10	0,72;7,45	0,62;7,43	0,71;7,42	0,80;7,42	0,32;7,41	0,71;7,26	0,77;7,24	0,32;7,24	1,31;7,22	0,58;7,07	0,42;7,06	0,33;7,06	0,32;7,05	0,40;6,85	0,92;4,20	0,54;4,18	0,82;4,17	0,54;3,32	27,82;3,12	0,48;3,10	0,77;3,08	0,56;2,64	0,45;2,62	0,62;2,60	0,39;2,51	2,57;2,51	4,72;2,50	6,09;2,50	4,24;2,49	2,06;1,99	0,58;1,18	0,33;1,16	0,93;1,07	16,00;0,00	0,34																																																															
Ví dụ số 46	[DMSO-D ₆]	8,48	4,80;8,47	3,50;8,46	3,35;8,46	4,96;7,83	0,35;7,82	0,35;7,58	2,60;7,57	3,11;7,57	2,95;7,56	3,23;7,55	0,43;7,47	2,82;7,47	3,29;7,46	2,90;7,46	2,71;7,45	0,41;7,22	6,37;7,21	4,15;7,21	4,08;7,20	6,43;7,16	0,33;7,12	3,22;7,12	3,27;7,11	3,16;7,10	3,15;7,07	0,34;4,19	0,38;4,17	2,83;4,15	4,15;4,14	2,89;4,10	0,51;4,06	1,24;4,04	3,65;4,02	3,67;4,00	1,27;3,31	237,31;3,06	2,38;3,04	3,72;3,02	2,85;2,67	0,41;2,66	0,33;2,65	0,36;2,64	1,07;2,62	2,39;2,60	3,18;2,58	2,01;2,57	0,84;2,54	0,51;2,51	16,14;2,50	30,00;2,50	39,24;2,50	27,23;2,49	13,12;1,99	16,00;1,91	5,55;1,24	0,51;1,19	4,51;1,17	8,85;1,16	4,44;1,07	0,50;0,06	0,61;0,01	0,39;0,00	7,70																																				
Ví dụ số 47	[CD ₃ CN]	8,89	2,33;8,86	0,35;8,20	5,77;8,19	9,08;8,18	6,36;8,18	6,14;8,18	5,51;8,14	7,12;8,06	0,35;7,58	4,64;7,58	4,85;7,57	6,50;7,57	6,22;7,50	5,90;7,49	5,94;7,49	4,73;7,48	4,25;7,47	1,28;7,46	6,10;7,46	2,97;7,45	6,65;7,44	6,96;7,43	2,86;7,43	6,45;7,42	1,11;7,40	0,39;7,30	0,33;7,08	6,81;7,07	2,15;7,06																																																																						

2,74;7,06	12,48;7,05	2,65;7,04	2,15;7,03	5,97;7,03	0,82;6,85	5,42;6,85	5,42;6,84
5,34;6,84	5,28;5,45	16,00;4,19	5,51;4,17	9,99;4,16	5,76;4,09	0,35;4,07	1,06;4,05
1,10;4,03	0,36;3,61	0,33;2,88	5,15;2,86	10,23;2,85	5,40;2,47	0,38;2,46	0,36;2,40
0,38;2,35	0,42;2,28	0,60;2,27	0,68;2,25	0,83;2,15	1423,35;2,11	8,07;2,11	8,55;2,10
7,55;2,09	8,22;2,09	5,22;2,08	5,66;2,06	3,05;2,04	1,40;2,03	1,38;2,00	2,03;1,97
11,74;1,96	113,50;1,96	35,82;1,95	189,71;1,95	349,30;1,94	485,27;1,93	334,49;1,93	
171,63;1,90	7,16;1,90	5,07;1,89	5,99;1,87	4,65;1,86	1,99;1,82	0,69;1,79	0,92;1,78
1,43;1,77	2,41;1,77	2,96;1,76	2,33;1,76	1,31;1,72	0,66;1,69	0,94;1,67	0,68;1,65
0,63;1,62	0,57;1,59	0,41;1,57	0,35;1,55	0,33;1,51	0,41;1,50	1,20;1,49	0,67;1,47
0,35;1,45	0,73;1,45	0,39;1,44	0,42;1,42	0,35;1,40	0,34;1,39	0,32;1,36	0,32;1,35
0,34;1,34	0,40;1,32	0,33;1,32	1,24;1,27	2,73;1,23	0,42;1,22	1,69;1,20	3,29;1,19
1,80;1,17	0,58;1,13	0,48;1,11	0,63;1,10	0,46;1,07	0,37;1,03	0,36;1,02	0,35;0,98
0,47;0,95	0,49;0,91	1,72;0,88	0,60;0,86	0,57;0,80	29,99		
Ví dụ số 48 [DMSO-D ₆]							
7,85	2,31;7,83	2,30;7,44	0,61;7,42	16,00;7,41	0,46;7,40		
0,41;7,40	0,42;6,27	2,89;6,23	1,95;6,22	1,68;6,21	2,13;6,21	2,14;6,21	1,50;6,19
1,33;4,17	1,59;4,15	2,49;4,13	1,60;4,04	0,56;4,02	0,55;3,89	0,54;3,87	0,84;3,86
0,81;3,84	0,52;3,57	0,37;3,41	0,33;3,39	0,47;3,38	0,63;3,31	414,21;3,29	3,89;2,99
5,49;2,98	2,28;2,96	1,59;2,67	0,37;2,63	0,53;2,61	1,35;2,59	1,82;2,57	1,22;2,55
0,58;2,54	0,53;2,51	20,36;2,50	37,33;2,50	48,05;2,50	33,38;2,49	16,08;2,07	0,51;1,99
2,34;1,24	0,36;1,19	0,72;1,17	1,41;1,16	0,79;1,10	15,32;1,08	15,16;1,04	0,40;1,01
0,60;0,99	0,55;0,00	2,20					
Ví dụ số 50 [CD ₃ CN]							
9,19	0,34;8,14	1,01;8,13	1,01;8,07	1,21;7,41	0,71;7,41		
0,47;7,41	1,01;7,40	1,11;7,40	1,05;7,32	0,37;7,32	0,37;7,31	1,42;7,30	2,07;7,30
2,07;6,81	0,79;6,80	0,79;6,80	0,78;6,80	0,77;4,18	0,91;4,17	1,68;4,16	0,96;4,02
0,46;2,84	0,86;2,83	1,73;2,82	0,94;2,21	0,34;2,21	0,36;2,19	434,90;2,16	0,56;2,10
0,58;2,09	0,52;2,09	1,02;2,08	0,56;2,08	1,60;2,07	0,33;2,06	0,43;2,05	0,63;2,05
0,43;1,97	1,35;1,97	168,54;1,96	5,33;1,95	5,13;1,95	41,91;1,95	76,84;1,94	112,13;1,94
75,93;1,93	38,25;1,93	0,78;1,90	0,36;1,89	0,81;1,88	0,53;1,88	0,85;1,87	0,52;1,87
0,72;1,85	0,99;1,83	0,46;1,83	0,67;1,82	0,46;1,41	16,00;1,27	0,48;0,00	5,09
Ví dụ số 51 [CD ₃ CN]							
8,91	2,39;8,19	12,95;8,19	8,38;8,18	7,52;8,18	9,08;8,18		
7,33;8,16	6,98;8,15	7,62;8,15	7,95;7,58	6,53;7,58	6,42;7,57	8,01;7,57	7,72;7,50

7,61;7,49	7,68;7,49	6,31;7,49	6,13;7,47	0,34;7,46	0,33;7,44	1,08;7,44	7,16;7,43
4,64;7,43	4,96;7,43	2,36;7,43	9,55;7,42	8,66;7,42	0,90;7,41	0,36;7,34	1,01;7,33
0,69;7,33	2,74;7,32	1,71;7,32	8,28;7,32	6,68;7,31	15,75;7,31	16,00;7,30	2,36;7,30
2,28;7,30	1,39;7,29	0,41;7,29	0,37;6,85	6,79;6,84	6,68;6,84	6,81;6,83	6,76;5,45
0,63;4,19	5,98;4,18	10,88;4,17	6,24;4,06	0,69;4,05	0,72;3,27	0,53;2,88	5,68;2,87
11,22;2,86	6,08;2,19	573,93;2,12	2,37;2,11	1,86;2,11	3,96;2,10	3,63;2,10	5,91;2,09
3,61;2,09	4,37;2,08	1,60;2,08	5,98;2,06	1,13;2,06	1,91;2,05	2,65;2,05	1,83;2,04
1,02;1,99	0,35;1,97	7,01;1,97	691,81;1,96	14,81;1,95	15,36;1,95	162,44;1,95	
294,97;1,94	434,82;1,94	299,80;1,93	150,79;1,93	4,41;1,93	2,05;1,91	2,19;1,91	
1,50;1,90	5,02;1,90	3,20;1,89	4,84;1,89	3,04;1,88	4,39;1,88	1,30;1,87	1,63;1,85
3,96;1,84	0,96;1,83	1,78;1,83	2,54;1,82	1,74;1,82	0,93;1,38	0,72;1,34	0,34;1,28
0,72;1,27	2,14;1,22	1,05;1,20	1,81;1,19	0,98;1,11	0,48;0,91	1,94;0,88	0,47;0,00
7,31							
Ví dụ số 52	[DMSO-D ₆]	7,83	2,30;7,82	2,30;7,45	2,09;7,45	0,96;7,44	2,42;7,43
2,61;7,42	1,06;7,42	2,30;7,22	0,43;7,21	2,47;7,21	0,87;7,19	1,08;7,19	4,29;7,18
1,00;7,17	0,78;7,17	1,98;6,26	2,96;6,22	2,03;6,21	1,78;6,20	2,00;6,20	1,79;6,18
1,36;6,16	1,36;4,16	1,59;4,14	2,51;4,13	1,61;3,88	0,54;3,86	0,83;3,84	0,82;3,83
0,54;3,31	221,49;3,29	1,63;3,00	1,39;2,98	2,33;2,96	1,66;2,63	0,51;2,61	1,36;2,59
1,83;2,57	1,18;2,55	0,48;2,51	9,30;2,50	17,10;2,50	22,16;2,50	15,45;2,49	7,50;2,08
11,04;1,99	1,28;1,19	0,41;1,18	0,74;1,16	0,39;1,10	16,00;1,08	15,81;1,01	0,43;0,99
0,41;0,00	1,00						
Ví dụ số 53	[DMSO-D ₆]	7,86	8,61;7,85	8,75;7,66	0,52;7,66	0,52;7,66	0,61;7,65
0,54;7,54	0,61;7,53	0,52;7,53	0,75;7,52	0,74;7,50	8,18;7,49	9,36;7,48	8,86;7,48
9,40;7,42	0,67;7,42	0,63;7,41	0,58;7,41	0,61;7,36	8,91;7,35	9,69;7,35	8,61;7,35
7,93;7,14	10,18;7,13	9,95;7,12	9,72;7,12	9,31;6,33	16,00;6,33	13,52;6,32	6,73;6,31
9,35;6,31	7,01;6,30	1,55;5,88	0,56;5,84	13,46;4,17	0,38;4,12	7,18;4,11	13,20;4,09
7,17;4,06	0,97;4,05	1,37;4,04	0,78;4,03	0,88;4,02	0,61;4,02	0,34;4,01	0,39;4,00
0,42;3,99	0,37;3,96	0,34;3,93	0,41;3,92	0,41;3,91	0,40;3,90	0,47;3,88	0,42;3,87
0,41;3,86	0,38;3,82	0,45;3,82	0,51;3,81	0,49;3,80	0,45;3,78	0,48;3,75	0,59;3,69
0,67;3,68	0,63;3,63	0,81;3,61	0,89;3,59	0,96;3,57	3,27;3,55	1,27;3,51	1,52;3,33
3424,42;3,20	0,61;3,19	0,55;3,18	0,67;3,16	0,36;2,77	0,66;2,75	1,03;2,74	0,84;2,71
6,56;2,69	13,04;2,68	7,88;2,61	0,48;2,61	0,51;2,54	2,77;2,51	94,24;2,51	172,97;2,50

224,40;2,50	156,69;2,49	76,49;2,44	0,38;2,33	1,07;2,33	1,44;2,32	1,04;2,09	0,40;2,07	3,85;2,06	0,39;2,04	1,93;2,02	4,58;2,01	5,21;2,01	6,80;2,00	5,50;1,99	5,59;1,99	4,48;1,98	2,41;1,96	0,60;1,91	0,51;1,81	6,10;1,80	5,44;1,80	6,62;1,78	5,12;1,40	0,32;1,24	0,47;1,19	0,47;1,18	0,79;1,16	0,52;0,00	3,11																																													
Ví dụ số 54 [DMSO-D ₆]																																																																										
8,13	8,66;8,12	8,74;8,10	0,33;7,92	0,41;7,90	0,41;7,75	0,34;7,47	2,03;7,45	4,39;7,43	4,74;7,43	3,40;7,41	2,68;7,40	0,68;7,36	0,35;7,26	0,41;7,24	1,76;7,24	2,49;7,23	3,23;7,22	16,00;7,21	14,95;7,20	7,22;7,19	10,48;7,19	5,28;7,12	0,63;7,10	4,07;7,09	5,29;7,09	4,31;7,08	4,10;7,08	4,89;7,07	3,60;6,89	11,11;6,39	0,42;6,39	0,46;4,21	6,84;4,20	10,38;4,18	6,91;3,90	0,73;3,51	0,37;3,46	0,40;3,44	0,39;3,43	0,51;3,42	0,53;3,30	747,94;3,28	10,29;3,17	0,35;3,12	6,19;3,10	9,77;3,08	7,05;2,91	0,42;2,67	1,55;2,66	1,55;2,66	2,44;2,64	5,91;2,62	8,16;2,60	5,39;2,58	2,32;2,51	81,79;2,50	146,04;2,50	185,15;2,50	128,60;2,33	0,97;2,33	1,28;2,29	0,38;2,27	0,34;2,07	1,84;1,99	0,44;1,40	1,95;1,35	0,33;1,30	1,39;1,26	0,42;1,24	1,25;1,16	0,97;1,07	4,07;0,00	32,19;-0,01	1,43
Ví dụ số 55 [CD ₃ CN]																																																																										
9,18	0,36;8,16	0,92;8,15	0,94;8,06	1,15;7,44	0,99;7,43	0,45;7,42	1,08;7,41	1,07;7,41	0,47;7,40	0,97;7,07	1,12;7,05	1,92;7,03	0,35;7,02	0,89;6,82	0,87;6,82	0,79;6,81	0,83;6,80	0,81;4,18	0,90;4,16	1,62;4,15	0,89;3,95	2,02;2,84	0,91;2,83	1,69;2,81	0,91;2,47	0,33;2,16	856,19;2,13	4,46;2,12	1,58;2,11	1,73;2,11	1,82;2,10	1,68;2,09	1,31;2,08	1,44;2,08	1,12;2,07	1,19;2,05	0,84;2,04	0,69;1,96	389,96;1,95	62,01;1,95	106,27;1,94	145,13;1,93	99,91;1,93	51,45;1,89	1,30;1,88	0,96;1,88	1,09;1,86	0,82;1,79	2,20;1,78	0,40;1,77	0,59;1,77	0,86;1,76	0,60;1,76	0,34;1,41	16,00;1,27	0,40;0,91	0,75;0,01	0,69;0,00	15,01;-0,01	0,74														
Ví dụ số 56 [DMSO-D ₆]																																																																										
7,86	2,18;7,85	2,22;7,42	0,61;7,41	0,73;7,40	1,20;7,39	1,23;7,39	0,86;7,38	0,78;7,25	1,11;7,25	1,66;7,25	1,28;7,24	1,01;7,24	1,46;7,24	1,10;7,20	0,76;7,19	0,79;7,19	0,98;7,19	0,84;7,18	0,73;7,18	0,82;7,17	0,97;7,17	0,92;7,17	0,79;7,17	0,69;7,16	0,46;7,16	0,44;7,15	1,12;7,15	0,80;7,14	0,54;7,14	0,55;7,14	0,40;7,13	0,38;6,28	2,62;6,26	1,27;6,25	1,32;6,24	1,91;6,23	1,72;6,23	1,86;6,23	1,74;4,17	1,54;4,16	2,37;4,15	1,59;4,03	0,41;4,02	0,41;3,88	0,36;3,87	0,57;3,86	0,58;3,85	0,37;3,35	80,05;3,33	1,48;2,99	1,35;2,98	2,08;2,96	1,57;2,62	0,62;2,60	1,27;2,59	1,73;2,58	1,05;2,57	0,37;2,51	5,24;2,51	11,62;2,50	16,15;2,50	11,61;2,50	5,26;2,08	0,46;1,99	1,79;1,19	0,53;1,17	1,01;1,16	0,50;1,10	16,00;1,09					

15,96;1,01 0,72;1,00 0,72;0,00 6,89									
Ví dụ số 57	[CD ₃ CN]	8,70	7,26;8,70	4,26;8,69	4,42;8,68	7,66;8,67	0,53;8,65	0,38;8,63	0,56;8,62
		0,39;8,59	1,12;8,58	0,71;8,57	0,83;8,57	1,19;7,57	0,54;7,55	0,66;7,50	8,38;7,49
		4,92;7,49	4,96;7,48	8,26;7,42	1,10;7,42	0,64;7,41	1,01;7,40	0,43;7,39	0,58;7,37
		0,41;7,26	0,63;7,25	0,58;6,80	6,76;6,79	7,20;6,78	0,73;6,77	1,57;6,76	1,09;6,48
		6,83;6,47	6,42;6,45	0,32;6,44	0,33;6,44	0,33;6,43	0,35;6,39	0,99;6,38	0,99;5,48
		5,89;5,00	2,53;4,99	2,68;4,97	2,81;4,97	2,65;4,68	0,43;4,68	0,51;4,67	0,43;4,67
		0,36;4,51	0,78;4,50	1,76;4,49	0,99;4,48	1,61;4,47	3,31;4,45	1,63;4,42	1,76;4,40
		1,90;4,39	2,38;4,38	2,51;4,37	1,06;4,36	1,13;4,35	1,01;4,34	0,93;4,33	0,64;4,32
		0,68;4,31	0,50;4,30	0,46;4,29	0,35;4,27	0,62;4,25	0,35;4,12	0,52;4,10	1,47;4,08
		1,56;4,06	0,56;3,58	0,33;3,57	0,41;3,55	0,39;3,46	0,40;3,44	0,41;3,18	0,62;3,16
		0,59;3,13	0,43;3,12	0,48;2,88	0,58;2,88	0,66;2,87	1,17;2,86	1,13;2,86	0,61;2,85
		1,18;2,84	0,94;2,83	1,75;2,83	1,72;2,82	0,84;2,81	0,75;2,77	0,95;2,75	0,96;2,75
		1,09;2,73	1,53;2,72	0,94;2,72	0,64;2,71	1,35;2,69	0,64;2,69	0,62;2,67	0,45;2,63
		16,00;2,42	0,34;2,39	0,37;2,36	0,36;2,35	0,65;2,34	0,60;2,33	0,49;2,32	0,75;2,30
		1,06;2,25	144,20;2,24	210,43;2,16	1,66;2,15	0,72;2,14	0,91;2,14	1,06;2,13	0,75;2,12
		0,55;2,01	2,16;2,00	8,74;1,99	191,01;1,99	6,63;1,98	40,96;1,98	75,96;1,97	108,11;1,96
		73,24;1,96	37,20;1,83	0,41;1,82	1,25;1,81	0,44;1,80	0,62;1,80	0,77;1,79	0,54;1,79
		0,33;1,30	1,21;1,28	0,49;1,25	2,02;1,23	3,66;1,21	2,02;1,19	0,34;1,00	1,36;0,98
		2,76;0,97	1,40;0,96	1,39;0,94	2,94;0,92	1,34;0,03	0,38		
Ví dụ số 58	[CD ₃ CN]	8,64	2,38;8,18	9,09;8,17	9,01;8,04	4,38;7,36	6,82;7,35	8,54;7,35	7,26;7,34
		9,17;7,31	8,37;7,31	8,80;7,30	7,04;7,30	6,78;7,18	8,82;7,18	8,56;7,17	8,20;7,17
		7,67;6,90	8,19;6,89	8,10;6,89	8,21;6,89	7,98;5,45	0,99;4,15	8,52;4,14	15,37;4,13
		8,72;2,78	8,12;2,77	16,00;2,76	8,68;2,21	0,60;2,20	0,48;2,19	1,42;2,16	872,77;2,14
		1,02;2,10	76,19;2,09	2,51;2,08	1,78;2,08	5,50;2,07	4,41;2,07	7,95;2,06	5,30;2,06
		7,22;2,05	3,46;2,05	2,48;2,05	2,83;1,99	0,42;1,97	2,84;1,97	264,26;1,96	15,21;1,95
		17,71;1,95	146,93;1,95	270,28;1,94	396,53;1,94	268,16;1,93	133,53;1,92	0,44;1,92	0,39;1,91
		0,38;1,87	2,67;1,87	1,70;1,86	6,86;1,86	4,14;1,85	7,01;1,85	3,94;1,84	6,02;1,84
		1,64;1,83	2,87;1,83	2,29;1,82	1,52;1,82	0,81;1,27	0,69;0,01	0,95;0,00	31,85;-0,01
		0,87							
Ví dụ số 59	[CD ₃ CN]	8,57	1,21;8,17	3,52;8,16	3,62;8,07	3,46;7,36	2,32;7,35		

2,95;7,35	2,69;7,34	3,13;7,31	3,03;7,31	3,45;7,30	2,75;7,30	2,66;7,18	3,18;7,18
3,36;7,17	2,94;7,17	3,01;6,89	2,95;6,88	3,11;6,88	2,90;6,87	3,04;5,45	3,47;4,15
3,33;4,14	6,15;4,13	3,44;4,08	0,99;4,06	3,02;4,05	3,07;4,04	1,02;2,79	3,18;2,78
6,32;2,77	3,41;2,42	2,26;2,41	6,99;2,40	7,18;2,39	2,42;2,16	57,06;2,09	1,30;2,08
5,07;2,07	3,51;2,06	2,13;2,06	2,86;2,05	1,64;2,05	1,49;2,04	0,56;1,99	0,67;1,98
0,63;1,97	19,43;1,97	586,60;1,96	10,34;1,96	8,32;1,95	9,95;1,95	65,34;1,95	
118,42;1,94	170,03;1,94	118,14;1,93	60,29;1,88	1,04;1,87	0,72;1,87	2,74;1,86	
1,77;1,86	2,85;1,85	4,62;1,85	2,57;1,84	0,88;1,83	0,70;1,83	1,00;1,82	0,68;1,82
0,34;1,27	0,36;1,22	3,56;1,20	7,06;1,19	3,52;1,13	7,88;1,12	16,00;1,11	7,61;0,01
0,42;0,00	13,95;-0,01	0,45					
Ví dụ số 60 [CD ₃ CN] 8,75 0,39;8,21 1,41;8,21 1,42;8,21 1,39;8,21 1,46;8,08							
1,43;7,36	1,16;7,36	1,43;7,35	1,37;7,35	1,65;7,31	1,36;7,31	1,50;7,31	1,29;7,31
1,25;7,18	1,54;7,18	1,49;7,17	1,37;7,17	1,33;6,95	1,37;6,95	1,37;6,94	1,33;6,94
1,34;5,45	0,77;4,15	1,26;4,14	2,29;4,13	1,34;4,08	0,55;4,06	1,68;4,05	1,67;4,04
0,57;3,98	8,38;3,46	16,00;2,80	1,20;2,79	2,38;2,78	1,30;2,17	14,59;2,09	0,45;2,08
0,35;2,08	0,83;2,07	0,75;2,07	1,25;2,06	0,79;2,06	1,02;2,06	0,51;2,05	0,45;2,05
0,53;2,05	0,53;1,97	7,67;1,97	16,34;1,96	2,15;1,95	2,09;1,95	19,24;1,95	34,64;1,94
51,63;1,94	35,91;1,93	18,25;1,92	0,38;1,88	0,42;1,87	1,05;1,86	0,67;1,86	1,03;1,85
0,68;1,85	0,97;1,84	0,33;1,84	0,39;1,83	0,34;1,22	2,21;1,20	4,18;1,19	2,18;0,00
3,45							
Ví dụ số 61 [DMSO-D ₆] 8,10 4,76;8,10 4,86;7,43 0,48;7,42 0,85;7,42 0,49;7,42							
0,91;7,41	2,11;7,41	2,38;7,41	3,51;7,40	15,14;7,40	16,00;7,39	3,43;7,39	2,45;7,38
2,55;7,38	0,42;7,38	0,38;7,37	0,60;7,07	1,64;7,07	2,34;7,07	1,70;7,07	1,69;7,06
2,25;7,06	1,58;6,85	5,37;4,20	3,12;4,19	4,71;4,18	3,22;3,38	0,58;3,38	0,77;3,38
0,56;3,37	1,26;3,35	992,34;3,33	3,42;3,32	0,41;3,12	2,81;3,11	4,11;3,10	3,22;2,64
0,92;2,63	2,39;2,62	3,93;2,61	1,27;2,61	2,17;2,59	0,79;2,54	0,38;2,52	1,03;2,52
1,29;2,52	1,27;2,51	40,31;2,51	89,93;2,50	125,16;2,50	90,10;2,50	40,68;2,39	0,56;2,39
0,74;2,38	0,53;2,08	0,90;1,99	0,69;1,17	0,38;0,00	5,87		
Ví dụ số 62 [CD ₃ CN] 8,54 13,69;8,54 7,82;8,53 8,02;8,53 13,64;7,31 6,31;7,31							
6,26;7,30	6,64;7,30	6,44;7,26	16,00;7,26	9,18;7,25	9,20;7,25	15,58;6,95	6,21;6,94
7,63;6,94	5,84;6,93	7,53;6,89	7,27;6,89	7,53;6,89	6,07;6,89	5,75;5,45	2,59;4,15
6,33;4,14	11,20;4,13	6,60;2,75	6,07;2,74	11,71;2,73	6,51;2,20	0,49;2,19	0,68;2,19

0,60;2,17	523,59;2,16	0,50;2,08	1,91;2,08	1,37;2,07	3,62;2,07	3,10;2,06	5,83;2,06	3,58;2,05	5,08;2,05	1,37;2,04	2,30;1,97	0,32;1,97	28,74;1,96	5,43;1,95	6,64;1,95	58,15;1,95	105,93;1,94	157,71;1,94	107,34;1,93	52,87;1,93	1,19;1,92	0,46;1,86	2,22;1,86	1,22;1,85	5,44;1,85	2,99;1,84	4,53;1,84	4,86;1,84	2,86;1,83	4,94;1,83	1,28;1,83	1,13;1,83	1,27;1,82	1,81;1,82	0,35;1,27	0,42;1,13	0,59;0,00	5,72																																															
Ví dụ số 63	[CD ₃ CN]	8,58	0,51;8,18	1,70;8,17	1,56;8,17	1,71;8,08	1,75;7,36	1,22;7,35	1,55;7,35	1,37;7,35	1,66;7,31	1,61;7,31	1,70;7,30	1,39;7,30	1,27;7,18	1,68;7,18	1,60;7,17	1,55;7,17	1,50;6,89	1,47;6,88	1,39;6,88	1,44;6,87	1,39;5,45	0,44;4,15	1,52;4,14	2,78;4,13	1,60;3,61	0,56;2,79	1,41;2,78	2,80;2,77	1,52;2,66	0,32;2,65	0,84;2,64	1,14;2,63	0,87;2,62	0,35;2,18	415,81;2,09	0,42;2,09	0,43;2,09	0,32;2,08	0,91;2,08	0,82;2,08	0,79;2,07	1,41;2,07	0,83;2,06	1,19;2,06	0,60;2,05	0,70;2,05	0,53;1,97	0,53;1,97	60,62;1,96	3,38;1,95	3,70;1,95	32,80;1,95	60,37;1,94	88,12;1,94	59,46;1,93	30,14;1,93	0,49;1,88	0,47;1,87	1,20;1,86	0,76;1,86	1,20;1,85	0,74;1,85	1,08;1,84	0,39;1,83	0,36;1,83	0,51;1,82	0,35;1,27	0,49;1,15	16,00;1,14	15,84;0,97	0,53;0,95	0,51;0,00	5,59										
Ví dụ số 64	[CD ₃ CN]	8,58	0,47;8,18	1,49;8,18	1,55;8,17	1,50;8,17	1,65;8,08	1,29;7,35	1,32;7,35	1,75;7,35	1,48;7,34	1,87;7,31	1,71;7,31	1,85;7,30	1,47;7,30	1,47;7,18	1,66;7,18	1,65;7,17	1,52;7,17	1,51;6,90	1,52;6,89	1,52;6,89	1,50;6,88	1,53;4,15	1,33;4,14	2,44;4,13	1,44;3,27	0,36;2,79	1,29;2,78	2,52;2,77	1,39;2,25	3,64;2,24	4,55;2,16	187,11;2,13	0,83;2,11	0,87;2,10	0,88;2,09	0,86;2,09	0,78;2,08	1,18;2,08	1,28;2,07	0,83;2,07	1,37;2,06	0,88;2,06	1,30;2,06	1,17;2,05	1,39;2,05	1,12;2,04	0,53;1,97	1,48;1,97	125,29;1,96	8,47;1,95	8,35;1,95	77,11;1,95	141,39;1,94	210,88;1,94	144,04;1,93	71,86;1,93	2,18;1,92	0,89;1,88	0,44;1,87	1,10;1,86	0,71;1,86	1,05;1,85	1,13;1,85	1,03;1,84	0,40;1,84	0,41;1,84	0,55;1,83	0,90;1,83	1,21;1,82	0,83;1,82	0,43;1,48	0,34;1,44	0,33;1,27	0,65;1,22	0,35;1,20	0,41;0,97	16,00;0,95	15,50;0,94	0,61;0,93	0,57;0,01	1,30;0,00	44,51;-0,01	1,22
Ví dụ số 65	[CD ₃ CN]	8,88	2,87;8,18	9,34;8,18	9,71;8,17	9,31;8,17	9,80;8,04	8,90;7,35	8,26;7,35	9,82;7,34	8,90;7,34	10,57;7,30	9,48;7,30	10,16;7,29	8,16;7,29	7,89;7,18	10,24;7,17	10,03;7,17	9,49;7,17	9,10;6,88	9,46;6,88	9,25;6,87	9,12;6,87	9,28;5,45	11,62;4,14	8,65;4,13	15,38;4,12	8,87;4,06	0,38;4,05	0,36;3,28	1,09;3,27	1,01;2,89	1,16;2,77	1,60;2,77	8,04;2,76	16,00;2,75	8,74;2,20	0,51;2,19	1,79;2,18																																														

1,59;2,18	3,31;2,16	2864,50;2,15	3,12;2,14	1,52;2,14	1,10;2,13	0,90;2,12	0,38;2,08	2,30;2,08	1,74;2,07	4,95;2,07	4,48;2,06	9,35;2,06	6,41;2,05	8,65;2,05	4,98;2,04	2,78;2,04	2,75;1,98	0,34;1,97	2,80;1,97	167,69;1,96	23,95;1,95	28,58;1,95	315,03;1,95	583,14;1,94	830,07;1,94	575,58;1,93	291,99;1,93	9,01;1,92	4,13;1,92	1,05;1,91	0,67;1,91	0,52;1,87	2,78;1,86	1,82;1,86	6,98;1,85	4,46;1,85	6,61;1,84	4,17;1,84	6,37;1,83	4,78;1,83	6,13;1,82	3,54;1,82	1,79;1,81	1,32;1,80	2,76;1,80	2,97;1,79	1,75;1,79	5,06;1,78	3,17;1,78	2,92;1,77	1,47;1,27	1,88;1,22	0,46;1,20	0,85;1,19	0,59;0,89	2,33;0,89	1,94;0,88	8,28;0,88	12,08;0,87	7,33;0,87	6,18;0,87	11,16;0,86	4,31;0,85	1,64;0,85	2,10;0,84	4,76;0,84	11,77;0,83	6,52;0,83	5,42;0,83	12,12;0,82	6,09;0,82	2,49;0,81	2,31;0,10	1,08;0,01	8,35;0,00	298,98;-0,01	9,20;-0,10	1,12													
Ví dụ số 66	[CD ₃ CN]	9,02	0,50;8,21	1,75;8,21	1,81;8,20	1,85;8,20	1,77;8,09	1,58;7,36	1,83;7,36	2,23;7,35	1,86;7,35	2,53;7,31	2,04;7,31	2,30;7,31	1,87;7,31	1,70;7,18	2,27;7,18	2,32;7,18	2,16;7,17	2,09;6,94	2,04;6,93	1,96;6,93	1,94;6,93	1,96;5,45	16,00;4,26	0,49;4,25	0,56;4,25	0,51;4,24	0,51;4,15	1,60;4,14	2,78;4,13	1,68;4,06	0,58;4,05	0,57;4,01	0,58;4,00	0,56;2,80	1,39;2,79	2,75;2,78	1,56;2,19	0,45;2,18	0,47;2,18	0,72;2,16	404,88;2,14	0,40;2,09	0,46;2,09	0,36;2,08	0,94;2,08	1,11;2,07	1,54;2,07	0,96;2,06	1,13;2,06	1,10;2,05	1,53;2,05	0,81;2,04	0,42;1,97	2,83;1,97	39,03;1,96	0,53;1,96	4,80;1,95	5,85;1,95	65,22;1,95	118,44;1,94	182,94;1,94	127,17;1,93	61,91;1,93	1,84;1,92	0,80;1,88	0,55;1,88	0,35;1,87	1,35;1,87	0,81;1,86	1,27;1,86	0,77;1,85	1,34;1,84	0,34;1,84	0,41;1,84	0,45;1,83	0,76;1,83	1,01;1,82	0,72;1,82	0,39;1,39	9,59;1,37	9,73;1,27	0,44;1,22	0,91;1,20	1,64;1,19	0,84;1,11	0,63;0,01	1,73;0,00	66,64;-0,01	1,82
Ví dụ số 67	[CD ₃ CN]	8,16	1,25;8,16	1,28;8,15	1,33;8,15	1,26;8,12	0,43;7,82	1,39;7,36	1,12;7,36	1,38;7,35	1,27;7,35	1,53;7,31	1,34;7,31	1,40;7,31	1,20;7,31	1,14;7,19	1,41;7,18	1,40;7,18	1,30;7,18	1,28;6,87	1,31;6,87	1,29;6,86	1,28;6,86	1,27;5,45	2,80;4,15	1,16;4,14	2,10;4,13	1,22;4,06	0,49;4,05	0,49;3,70	16,00;2,79	1,12;2,78	2,19;2,77	1,21;2,16	399,73;2,15	0,76;2,14	0,32;2,09	0,33;2,08	0,67;2,08	0,77;2,07	1,08;2,07	0,67;2,06	0,84;2,06	0,85;2,05	1,14;2,05	0,62;2,04	0,35;1,97	2,44;1,97	33,49;1,96	3,95;1,95	4,93;1,95	52,98;1,95	96,11;1,94	144,50;1,94	99,18;1,93	49,40;1,93	1,38;1,92	0,61;1,88	0,40;1,87	0,98;1,86	0,61;1,86	0,93;1,85	0,58;1,85	0,86;1,84	0,36;1,84	0,35;1,83	0,61;1,83	0,82;1,82	0,58;1,22	0,64;1,20	1,26;1,19																				

0,62;1,11 0,51;0,01 1,41;0,00 49,91;-0,01 1,40															
Ví dụ số 68	[CD ₃ CN]	9,20	0,37;8,21	0,99;8,20	1,02;8,10	1,30;7,36	0,69;7,36	0,82;7,35	0,75;7,35	0,85;7,31	0,87;7,31	0,95;7,30	0,80;7,30	0,76;7,18	0,91;7,18
		0,92;7,17	0,84;7,17	0,86;6,93	0,83;6,92	0,87;6,92	0,81;6,91	0,85;4,15	0,93;4,14	1,71;4,13	0,97;3,93	0,80;2,80	0,86;2,79	1,74;2,78	0,97;2,16
		367,05;2,08	0,61;2,08	0,53;2,07	0,92;2,07	0,57;2,06	0,71;2,06	0,58;2,06	0,77;2,05	1,08;2,05	0,65;1,97	12,84;1,96	6,06;1,95	8,11;1,95	62,38;1,95
		113,23;1,94	163,35;1,94	112,62;1,93	58,71;1,87	0,77;1,87	0,51;1,86	0,80;1,85	0,66;1,83	0,37;1,83	0,65;1,83	0,95;1,82	0,63;1,82	0,36;1,42	16,00;1,27
		0,32;1,11	0,62;0,01	1,19;0,00	33,11;-0,01	1,31									
Ví dụ số 69	[DMSO-D ₆]	7,82	0,47;7,80	0,44;7,49	0,39;7,47	0,45;7,47	0,50;7,45	0,44;7,29	0,47;7,27	0,34;7,27	0,84;7,24	0,73;6,73	0,49;6,72	0,50;6,57	0,33;6,55
		0,33;4,22	0,34;4,20	0,50;4,18	0,37;4,07	0,35;3,93	4,17;3,09	0,40;2,51	5,19;2,51	10,41;2,50	13,89;2,50	10,12;2,50	5,02;1,30	6,27;1,16	2,70;1,07
		16,00;0,00	0,54												
Ví dụ số 70	[DMSO-D ₆]	8,10	0,52;8,10	0,52;7,82	2,25;7,81	2,31;7,42	1,96;7,42	2,86;7,42	0,85;7,41	1,82;7,41	3,98;7,41	3,27;7,40	2,21;7,40	1,84;7,40	0,66;7,39
		0,36;7,37	1,11;7,37	1,87;7,36	0,63;7,35	3,83;7,35	1,68;7,34	0,99;7,34	2,06;7,34	0,34;7,33	0,88;7,32	1,67;7,32	0,89;7,32	0,56;7,31	1,81;7,31
		0,37;7,30	0,54;6,85	0,58;6,28	2,55;6,28	2,60;6,21	1,35;6,21	2,25;6,21	1,97;6,20	3,14;6,20	2,40;4,20	0,34;4,19	0,52;4,18	0,37;4,16	1,52;4,15
		2,36;4,14	1,57;4,05	0,33;4,03	1,02;4,02	1,02;4,01	0,34;3,85	0,35;3,84	0,55;3,83	0,56;3,82	0,35;3,35	117,16;3,33	1,19;3,11	0,45;3,10	0,35;2,99
		1,35;2,98	2,04;2,97	1,56;2,62	0,75;2,61	0,35;2,60	1,31;2,59	1,72;2,58	1,04;2,57	0,36;2,51	8,24;2,51	18,33;2,50	25,54;2,50	18,54;2,50	8,47;1,99
		4,60;1,19	1,27;1,17	2,51;1,16	1,32;1,09	16,00;1,08	15,90;1,06	0,33;1,01	0,95;0,99	0,95;0,00	9,01				
Ví dụ số 71	[DMSO-D ₆]	7,83	1,95;7,82	2,02;7,45	1,91;7,44	0,78;7,43	2,20;7,43	2,45;7,42	0,91;7,41	2,23;7,22	2,37;7,21	0,75;7,20	0,82;7,19	4,23;7,19	0,89;7,18
		0,68;7,17	2,00;6,44	0,61;6,43	1,27;6,41	0,63;6,25	2,65;6,25	2,67;6,25	1,32;6,24	1,87;6,23	1,40;4,16	1,37;4,15	2,19;4,13	1,43;4,04	0,48;4,02
		0,48;3,35	24,21;3,35	25,51;3,34	49,43;3,31	1,33;3,00	1,20;2,99	2,03;2,97	1,49;2,94	1,39;2,92	2,43;2,91	1,78;2,89	0,36;2,63	0,45;2,61	1,13;2,59
		1,54;2,57	0,97;2,55	0,32;2,51	6,42;2,51	13,24;2,50	17,92;2,50	13,08;2,49	6,27;1,99	2,16;1,75	0,35;1,74	0,69;1,72	0,88;1,70		

0,73;1,69	0,40;1,24	0,59;1,19	0,61;1,17	1,19;1,16	0,59;0,99	0,39;0,98	0,37;0,85
16,00;0,83	15,38;0,82	2,16;0,81	0,47;0,81	0,63;0,81	1,69;0,00	5,51	
Ví dụ số 72	[DMSO-D ₆]	8,02	0,59;7,81	1,82;7,80	1,87;7,43	1,31;7,42	1,62;7,42
0,65;7,40	2,85;7,40	2,69;7,37	0,84;7,37	1,05;7,36	0,52;7,35	2,78;7,35	1,13;7,33
2,72;7,33	2,04;7,32	1,03;7,32	0,59;7,31	0,98;6,42	0,53;6,41	1,10;6,39	0,56;6,29
2,10;6,24	1,50;6,24	1,34;6,23	1,48;6,23	1,35;4,17	1,22;4,15	1,94;4,13	1,27;4,06
0,88;4,04	2,69;4,02	2,72;4,00	0,91;3,35	35,16;3,34	65,44;3,32	1,52;3,01	1,08;2,99
1,81;2,97	1,31;2,94	1,23;2,92	2,13;2,91	1,69;2,90	1,81;2,89	0,75;2,82	0,42;2,80
0,50;2,79	0,37;2,63	0,37;2,61	1,03;2,59	1,39;2,58	0,86;2,52	0,33;2,51	7,77;2,51
15,73;2,50	21,07;2,50	15,30;2,49	7,23;1,99	12,05;1,76	0,32;1,74	0,63;1,72	0,81;1,71
0,70;1,69	0,52;1,67	0,44;1,65	0,33;1,40	0,52;1,24	1,00;1,22	0,42;1,19	3,46;1,18
1,18;1,17	6,92;1,16	3,35;1,05	0,42;1,03	0,42;0,99	0,72;0,98	0,63;0,87	0,69;0,85
16,00;0,83	15,89;0,82	3,66;0,81	0,72;0,81	1,07;0,81	2,83;0,00	1,75	
Ví dụ số 73	[DMSO-D ₆]	7,85	2,33;7,85	2,30;7,84	2,36;7,84	2,38;7,42	0,66;7,41
0,87;7,40	1,28;7,39	1,28;7,39	0,89;7,38	0,77;7,26	1,21;7,25	1,73;7,25	1,38;7,24
1,08;7,24	1,49;7,24	1,16;7,19	0,68;7,19	1,03;7,18	0,90;7,17	1,34;7,17	1,21;7,17
1,44;7,17	1,19;7,16	1,26;7,16	0,98;7,15	0,78;7,15	0,60;7,14	0,60;7,14	0,42;7,14
0,38;6,49	0,69;6,48	1,44;6,47	0,71;6,29	2,07;6,27	1,79;6,27	1,49;6,26	1,74;6,26
1,52;4,17	1,58;4,16	2,46;4,15	1,69;4,05	0,32;4,03	0,97;4,02	0,99;4,01	0,32;3,37
166,66;3,35	0,70;2,99	1,43;2,98	2,18;2,97	1,67;2,95	1,08;2,94	1,81;2,93	1,12;2,62
0,54;2,61	1,28;2,59	1,84;2,58	1,13;2,57	0,40;2,51	4,37;2,51	9,64;2,51	13,51;2,50
9,63;2,50	4,35;1,99	4,49;1,75	0,32;1,74	0,65;1,73	0,83;1,72	0,68;1,71	0,35;1,24
0,42;1,19	1,32;1,17	2,61;1,16	1,23;0,85	16,00;0,85	3,05;0,84	15,75;0,84	2,67;0,82
0,39;0,82	1,46;0,81	1,40;0,00	3,26				
Ví dụ số 74	[DMSO-D ₆]	8,45	5,48;8,44	5,69;7,44	0,44;7,43	4,66;7,43	1,82;7,42
5,17;7,41	6,28;7,40	2,07;7,40	5,73;7,39	0,66;7,25	0,64;7,24	5,99;7,23	1,71;7,22
1,89;7,22	10,60;7,21	1,92;7,20	1,58;7,19	4,90;7,19	0,48;7,15	6,49;7,15	4,39;7,14
4,32;7,14	6,40;5,76	1,18;4,49	1,07;4,48	2,04;4,46	2,07;4,44	1,11;3,93	1,99;3,34
110,22;3,31	0,83;3,13	0,58;3,12	0,69;3,11	0,71;3,10	0,80;3,09	1,24;3,08	1,41;3,07
1,34;3,06	1,27;3,02	1,14;3,01	1,49;3,00	1,73;2,99	1,94;2,97	0,70;2,96	0,86;2,95
0,78;2,84	0,64;2,83	0,63;2,83	0,77;2,82	0,84;2,81	1,32;2,80	1,09;2,79	1,26;2,78

0,87;2,77 0,64;2,76 0,49;2,51 14,76;2,50 20,10;2,24 0,60;2,22 1,23;2,21 0,78;2,20 1,16;2,20 1,26;2,19 1,31;2,18 1,06;2,17 0,83;2,17 1,02;2,15 0,50;1,99 0,41;1,49 16,00;1,47 15,92;1,16 0,38;1,07 11,85;0,00 4,14
Ví dụ số 75 [CD ₃ CN] 8,21 0,50;8,21 0,51;8,20 0,50;8,20 0,51;8,10 0,43;7,30 0,50;7,30 0,54;7,29 0,52;7,29 0,55;6,96 0,54;6,96 0,59;6,96 0,44;6,96 0,45;6,95 0,61;6,95 0,85;6,95 0,87;6,94 0,74;6,94 0,41;6,93 0,66;6,93 0,42;5,45 7,73;4,14 0,46;4,13 0,83;4,12 0,49;2,76 0,44;2,75 0,86;2,74 0,47;2,43 0,36;2,42 1,14;2,40 1,17;2,39 0,38;2,17 123,39;2,06 0,44;2,06 0,43;2,05 0,34;2,05 0,52;2,05 0,35;1,97 0,72;1,97 14,22;1,96 2,29;1,95 2,60;1,95 24,64;1,95 46,24;1,94 66,64;1,94 44,02;1,93 22,38;1,93 0,57;1,86 0,38;1,85 0,36;1,84 0,35;1,83 0,42;1,20 0,39;1,20 0,40;1,13 16,00;1,12 2,98;1,11 1,38;0,00 2,77
Ví dụ số 76 [DMSO-D ₆] 10,36 0,59;8,14 0,61;8,14 0,66;8,13 0,62;8,12 0,70;8,09 0,59;7,45 0,57;7,44 0,64;7,43 0,73;7,42 0,66;7,23 0,70;7,21 1,25;7,18 0,59;6,76 0,54;6,75 0,53;6,74 0,53;6,74 0,55;3,94 2,56;3,35 55,42;2,51 4,65;2,51 6,42;2,51 4,32;2,38 1,01;2,36 1,04;2,34 0,34;2,00 0,58;1,49 1,72;1,48 1,72;1,18 0,33;1,08 16,00;1,06 1,28;1,04 2,83;1,02 1,21
Ví dụ số 77 [DMSO-D ₆] 10,39 0,32;8,13 0,37;8,12 0,73;7,43 0,35;7,20 0,55;5,76 1,66;3,96 2,81;3,35 11,07;2,51 1,15;2,51 2,51;2,50 3,45;2,50 2,49;2,50 1,13;1,48 0,85;1,47 0,85;1,12 0,36;1,11 0,35;1,07 16,00;1,06 2,11;0,00 0,42
Ví dụ số 78 [DMSO-D ₆] 10,72 0,46;8,14 0,47;8,12 0,49;8,07 0,51;7,44 0,41;7,43 0,47;7,42 0,53;7,41 0,48;7,22 0,50;7,20 0,88;7,17 0,41;6,74 0,37;6,73 0,36;6,73 0,37;6,72 0,37;3,93 0,93;3,34 6,37;3,34 9,96;3,34 8,90;2,51 1,52;2,51 2,89;2,50 3,94;2,50 2,73;2,50 1,34;1,48 1,28;1,46 1,27;1,07 16,00;0,79 1,33;0,77 1,24;0,00 0,67
Ví dụ số 79 [DMSO-D ₆] 10,23 0,80;8,05 0,76;8,05 0,74;8,04 0,79;8,04 0,77;7,87 0,54;7,26 0,65;7,25 0,74;7,24 0,76;7,23 0,69;7,04 0,73;7,03 1,35;7,01 0,64;6,64 0,63;6,64 0,61;6,64 0,62;6,63 0,63;3,93 0,49;3,93 1,05;3,92 0,51;3,19 16,00;2,76 0,50;2,75 0,99;2,74 0,47;2,35 3,21;2,35 7,13;2,35 9,90;2,35 7,10;2,34 3,17;2,10 1,14;2,09 1,16;1,58 8,13;0,30 0,75;0,30 0,77;0,29 0,35;0,29 0,35;0,29 0,73;0,28 0,75;0,01 0,78;0,01 0,81;0,00 0,75;0,00 0,81;-0,16 0,69
Ví dụ số 80 [CD ₃ CN] 10,78 0,46;10,24 0,42;8,66 7,23;8,64 7,23;8,56 0,78;8,55 0,99;8,54 0,50;8,52 0,46;8,50 1,12;8,49 1,22;8,48 1,11;8,47 1,13;8,45 1,49;8,44

1,80;7,83	0,85;7,82	1,53;7,80	0,94;7,44	8,66;7,44	5,44;7,43	5,20;7,43	8,55;7,34
1,02;7,33	1,03;7,13	0,76;7,12	0,93;7,11	1,25;7,09	1,38;7,05	0,50;7,03	1,50;7,02
1,32;6,96	1,37;6,84	6,20;6,83	6,98;6,82	1,04;6,81	0,92;6,66	6,81;6,65	6,68;6,64
1,44;6,63	0,68;6,61	0,86;6,60	0,70;6,58	0,97;6,57	0,72;6,37	0,48;6,22	0,54;5,56
0,75;5,48	0,44;5,39	2,05;5,38	4,01;5,37	2,06;5,34	0,58;5,31	0,67;4,47	0,45;4,42
1,75;4,40	2,12;4,39	2,45;4,38	2,41;4,37	1,98;4,36	0,48;4,13	0,61;4,12	1,91;4,10
1,76;4,10	1,00;4,08	2,19;4,07	2,00;4,05	1,55;4,04	1,16;2,75	0,56;2,72	0,95;2,68
0,49;2,59	0,55;2,58	0,55;2,56	0,94;2,55	1,28;2,54	1,18;2,53	1,34;2,51	1,45;2,49
1,26;2,48	1,06;2,46	0,69;2,44	0,57;2,40	0,78;2,40	0,84;2,38	0,98;2,37	1,19;2,35
1,95;2,34	1,99;2,31	4,71;2,30	7,50;2,29	7,23;2,26	949,77;2,25	2035,07;2,18	2,50;2,16
3,88;2,15	1,77;2,14	2,57;2,14	2,95;2,13	2,32;2,11	0,47;2,09	0,46;2,03	0,54;1,99
450,00;1,98	121,96;1,98	222,61;1,97	311,09;1,96	209,77;1,96	105,49;1,82	2,57;1,81	
0,73;1,80	1,11;1,80	1,74;1,79	1,19;1,79	0,83;1,34	0,55;1,30	3,25;1,26	0,43;1,25
0,68;1,23	1,24;1,22	0,44;1,22	0,70;1,16	16,00;0,98	0,44;0,94	0,70;0,91	0,53;0,87 0,51
Ví dụ số 81	[DMSO-D ₆]	7,89	3,88;7,88	4,32;7,43	0,33;7,42	3,60;7,42	4,28;7,41
3,93;7,40	4,52;6,98	3,00;6,97	4,31;6,97	3,09;6,96	4,57;6,94	4,63;6,94	5,58;6,93
3,14;6,93	3,25;6,60	0,32;6,39	0,37;6,38	4,47;6,37	16,00;5,99	0,36;5,91	0,49;5,88
7,99;5,85	0,41;5,75	0,38;5,53	0,34;4,12	3,02;4,10	5,56;4,09	3,00;4,04	0,81;4,02
0,77;4,00	0,37;3,34	1573,87;3,28	0,75;3,26	0,44;3,23	0,34;2,68	3,14;2,67	6,30;2,65
2,91;2,54	0,46;2,52	1,95;2,51	157,17;2,50	217,14;2,50	157,72;2,44	0,33;2,33	1,30;2,07
1,41;2,01	2,29;2,00	2,89;1,99	5,53;1,82	1,08;1,80	2,52;1,79	2,74;1,77	2,02;1,58
0,71;1,40	0,36;1,19	0,88;1,17	1,69;1,16	0,88;0,89	0,36;0,00	7,16	
Ví dụ số 82	[DMSO-D ₆]	9,95	1,49;8,23	1,63;8,22	1,70;7,95	1,50;7,42	1,19;7,40
1,36;7,40	1,64;7,39	0,60;7,38	1,45;7,20	1,50;7,18	2,71;7,16	1,26;6,87	1,20;6,87
1,22;6,86	1,20;6,86	1,23;4,09	0,94;4,08	2,08;4,06	1,32;4,03	5,64;3,37	1,07;3,34
65,63;3,34	63,22;3,33	84,69;3,33	101,81;2,93	0,98;2,91	1,98;2,90	0,92;2,52	0,45;2,51
31,47;2,50	42,95;2,50	30,28;1,73	16,00;1,40	4,84;1,07	1,52;0,00	1,73	
Ví dụ số 83	[DMSO-D ₆]	10,41	1,81;8,20	1,62;8,19	1,66;8,02	2,10;7,42	1,21;7,40
1,39;7,40	1,75;7,38	1,52;7,20	1,48;7,18	2,68;7,15	1,26;6,78	1,11;6,77	1,28;6,76
1,11;6,76	1,29;4,09	0,99;4,08	2,18;4,07	1,07;3,32	81,59;2,92	1,07;2,90	2,13;2,89
1,02;2,75	0,64;2,73	0,86;2,71	0,65;2,51	22,25;2,50	30,78;2,50	24,82;2,07	0,35;1,73

16,00;1,09 0,36;1,07 9,66;1,05 9,53;0,00 5,33															
Ví dụ số 84	[DMSO-D ₆]	10,78	1,74;8,21	1,64;8,20	1,70;7,98	1,96;7,41	1,28;7,40	0,55;7,40	1,55;7,39	1,63;7,37	1,46;7,20	1,58;7,17	2,75;7,15	1,24;6,79	1,29;6,78
		1,13;6,77	1,25;6,77	1,11;5,76	0,71;4,08	0,95;4,07	2,10;4,05	0,99;3,32	51,77;2,90	0,99;2,88	2,00;2,87	0,94;2,52	0,35;2,51	23,23;2,50	29,15;2,50
		20,09;2,00	0,49;1,99	0,75;1,97	0,49;1,72	16,00;1,40	2,00;0,79	2,23;0,78	2,32;0,77	4,47;0,00	5,87				
Ví dụ số 85	[CD ₃ CN]	18,32	0,43;17,36	0,42;12,09	0,40;9,25	0,43;8,50	3,39;8,49	2,77;8,49	3,49;8,47	0,53;8,45	0,59;7,40	1,90;7,39	2,19;7,38	2,41;7,37	1,97;7,23
		3,83;7,22	2,82;7,22	2,77;7,21	3,70;7,15	0,43;7,12	0,71;7,11	0,69;7,08	2,43;7,05	3,86;7,03	2,00;5,45	1,04;4,38	1,72;4,34	0,70;4,30	0,73;4,18
		0,41;4,17	0,45;4,07	0,67;4,05	0,62;4,03	0,84;4,03	0,95;4,01	0,51;3,99	0,59;3,81	0,41;3,45	0,41;3,28	0,52;3,24	16,00;2,81	0,57;2,60	3,11;2,47
		0,43;2,41	0,41;2,39	0,42;2,29	1,62;2,27	2,00;2,25	2,03;2,18	1032,82;2,12	0,98;2,11	1,48;2,11	1,68;2,10	1,14;2,08	0,49;2,06	0,46;2,05	0,49;1,96
		24,10;1,95	101,96;1,95	188,93;1,94	255,59;1,93	181,67;1,93	92,41;1,88	0,44;1,86	0,49;1,86	0,42;1,79	0,62;1,78	1,09;1,77	1,92;1,76	1,72;1,72	0,76;1,69
		0,69;1,69	0,57;1,66	0,41;1,57	0,41;1,56	0,51;1,55	0,50;1,54	0,60;1,51	0,50;1,41	0,47;1,37	0,50;1,36	0,78;1,34	0,87;1,27	12,86;1,21	0,80;1,18
		0,53;1,16	0,50;1,14	0,78;1,11	0,46;1,09	0,51;1,08	0,40;0,93	0,41;0,92	0,73;0,90	1,27;0,88	1,91;0,86	1,56;0,82	0,51;0,81	0,51;0,00	3,40
Ví dụ số 86	[DMSO-D ₆]	10,41	1,53;8,20	1,66;8,19	1,69;8,00	1,58;7,42	1,29;7,40	1,40;7,39	1,72;7,39	0,62;7,38	1,46;7,20	1,71;7,18	2,86;7,15	1,37;6,79	1,12;6,79
		1,32;6,78	1,24;6,78	1,22;5,76	0,61;4,09	1,02;4,08	1,99;4,06	1,04;4,04	1,21;4,02	1,19;4,00	0,38;3,93	0,53;3,38	0,38;3,36	0,74;3,33	1004,40;3,30
		3,22;3,28	0,49;3,27	0,42;2,91	0,90;2,90	1,81;2,88	0,90;2,68	1,17;2,67	1,62;2,67	1,21;2,54	0,84;2,52	2,75;2,52	3,94;2,51	95,26;2,51	187,51;2,50
		261,60;2,50	181,42;2,49	89,34;2,39	0,76;2,38	2,58;2,36	2,50;2,34	1,29;2,33	1,34;2,33	1,70;2,32	1,15;2,07	2,93;1,99	5,51;1,73	16,00;1,71	0,52;1,40
		0,44;1,19	1,42;1,17	3,01;1,16	1,33;1,07	2,92;1,05	3,01;1,03	6,50;1,01	2,68;0,86	4,57;0,00	5,61				
Ví dụ số 87	[CD ₃ CN]	8,67	2,40;8,21	9,20;8,21	9,26;8,21	9,38;8,20	9,13;8,08	4,62;7,30	8,59;7,30	9,02;7,29	8,95;7,29	9,32;7,29	0,48;7,28	0,35;7,28	0,35;6,97
		9,37;6,97	9,17;6,96	9,32;6,96	9,34;6,96	6,59;6,95	7,46;6,95	12,63;6,95	11,85;6,94						

12,62;6,93	6,71;6,93	11,57;6,93	6,58;6,43	0,40;5,45	4,58;4,14	8,54;4,13	15,44;4,12	8,96;4,11	0,39;2,75	8,14;2,74	16,00;2,73	8,72;2,72	0,46;2,71	0,59;2,21	0,48;2,20	0,38;2,19	0,67;2,16	598,75;2,14	1,14;2,13	0,63;2,13	0,42;2,11	79,56;2,08	2,44;2,08	1,88;2,07	5,10;2,07	4,65;2,06	8,52;2,06	3,96;2,06	5,02;2,05	5,54;2,05	6,21;2,04	2,64;2,04	2,94;2,00	0,40;1,97	1,57;1,97	17,47;1,96	11,11;1,95	15,22;1,95	144,24;1,95	260,73;1,94	388,20;1,94	269,48;1,93	134,42;1,93	4,26;1,93	2,06;1,92	0,65;1,86	2,84;1,86	1,84;1,85	7,15;1,85	4,38;1,84	6,97;1,84	4,29;1,83	6,51;1,83	3,64;1,82	3,80;1,82	1,08;1,28	0,59;1,27	2,87;1,22	0,42;1,20	0,74;1,19	0,40;0,88	0,55;0,87	0,34;0,01	1,64;0,00	50,02;-0,01	1,37																				
Ví dụ số 88	[CD ₃ CN]	8,59	0,45;8,21	1,46;8,21	1,54;8,20	1,52;8,20	1,53;8,11	1,54;8,11	1,55;7,30	1,40;7,30	1,54;7,30	1,57;7,29	1,58;6,97	1,58;6,96	1,56;6,96	1,60;6,96	2,05;6,95	1,34;6,95	2,26;6,95	2,07;6,94	2,25;6,94	1,09;6,93	2,03;6,93	1,11;5,45	12,41;4,14	1,33;4,13	2,39;4,12	1,37;3,28	1,31;3,27	1,31;2,76	1,26;2,75	2,48;2,74	1,35;2,66	0,78;2,65	1,07;2,63	0,81;2,62	0,32;2,17	110,60;2,08	0,40;2,07	0,80;2,07	0,74;2,07	1,25;2,06	0,69;2,06	0,79;2,06	1,06;2,06	0,99;2,05	1,21;2,05	0,81;2,04	0,71;1,97	0,43;1,97	7,43;1,96	3,90;1,95	5,42;1,95	49,59;1,95	95,69;1,94	142,35;1,94	95,75;1,93	46,25;1,93	1,58;1,93	0,81;1,92	0,39;1,87	0,49;1,87	0,32;1,86	1,11;1,86	0,69;1,85	1,05;1,85	0,65;1,84	0,97;1,84	0,52;1,83	0,71;1,83	0,87;1,82	0,58;1,44	10,41;1,27	1,05;1,16	16,00;1,15	0,63;1,14	15,64;1,11	0,41;0,01	0,64;0,00	19,73;-0,01	0,54					
Ví dụ số 89	[CD ₃ CN]	8,91	3,39;8,22	9,14;8,22	9,10;8,21	9,33;8,21	9,05;8,08	10,05;7,30	8,23;7,29	8,04;7,29	8,42;7,29	8,46;6,96	8,77;6,96	8,85;6,95	9,07;6,95	12,85;6,95	7,54;6,94	12,50;6,94	11,34;6,94	12,05;6,93	6,06;6,93	10,26;6,92	5,85;5,45	14,46;4,13	8,67;4,12	15,55;4,11	8,69;2,74	8,22;2,73	16,00;2,72	8,58;2,30	0,35;2,17	733,24;2,14	1,75;2,12	0,52;2,07	2,55;2,07	2,23;2,06	5,54;2,06	5,23;2,05	8,79;2,05	6,31;2,05	6,79;2,04	2,15;2,03	2,85;1,97	48,89;1,96	14,99;1,95	20,59;1,95	148,87;1,95	268,38;1,94	374,42;1,94	263,39;1,93	136,32;1,93	2,36;1,92	1,21;1,92	1,06;1,91	0,88;1,91	0,69;1,90	0,46;1,89	0,46;1,88	0,36;1,86	2,88;1,85	2,17;1,85	7,14;1,84	4,76;1,84	7,57;1,83	5,88;1,83	8,22;1,82	3,28;1,82	2,04;1,82	2,67;1,81	2,79;1,80	2,99;1,80	2,08;1,79	5,00;1,79	3,14;1,78	2,80;1,77	1,41;1,44	1,74;1,28	0,80;1,27	4,07;1,16	0,35;1,14	0,33;1,06	1,45;1,05	1,34;0,89	2,75;0,89	2,48;0,88	7,97;0,88

12,18;0,88	8,02;0,88	6,93;0,87	10,69;0,87	4,10;0,87	4,76;0,86	1,63;0,85	2,17;0,85	4,92;0,84	10,80;0,84	6,31;0,83	5,69;0,83	11,40;0,82	5,69;0,82	2,53;0,82	2,22;0,01	1,88;0,00	46,53;-0,01	1,45
Ví dụ số 90 [DMSO-D ₆] 10,49 1,22;8,21 1,56;8,21 1,61;7,96 0,72;7,41 1,30;7,40 0,59;7,40 1,54;7,39 1,50;7,39 0,70;7,38 1,34;7,20 1,47;7,19 0,51;7,18 2,64;7,17 0,54;7,17 1,23;6,82 1,23;6,82 1,13;6,81 1,21;6,81 1,10;5,77 4,47;4,08 1,10;4,07 2,25;4,06 1,10;4,03 0,47;4,02 0,47;3,39 0,37;3,35 38,82;3,33 0,66;2,90 1,09;2,89 2,14;2,88 1,03;2,51 12,38;2,50 16,01;2,50 11,43;2,09 0,94;2,05 7,29;1,99 2,01;1,76 0,40;1,73 16,00;1,48 0,32;1,19 0,55;1,17 1,08;1,16 0,54;0,00 5,33																		
Ví dụ số 91 [DMSO-D ₆] 10,46 2,46;8,21 2,38;8,21 2,35;8,20 2,49;8,20 2,44;8,05 2,44;7,42 2,02;7,41 0,89;7,41 2,31;7,40 2,39;7,40 1,02;7,39 2,19;7,20 2,30;7,20 0,79;7,19 0,99;7,19 4,25;7,18 0,97;7,18 0,78;7,17 2,03;6,78 1,96;6,78 1,90;6,78 1,93;6,77 1,92;5,61 7,16;4,13 1,64;4,12 3,53;4,11 1,69;4,05 0,66;4,03 1,98;4,02 2,01;4,01 0,67;3,39 0,73;3,35 19,15;3,33 0,55;2,98 1,50;2,97 2,97;2,96 1,43;2,76 0,33;2,75 0,82;2,74 1,11;2,72 0,83;2,71 0,33;2,52 0,33;2,52 0,35;2,51 8,34;2,51 17,69;2,50 24,06;2,50 17,58;2,50 8,24;1,99 8,76;1,91 0,81;1,40 0,47;1,19 2,41;1,17 4,69;1,16 2,38;1,12 1,45;1,11 1,44;1,06 16,00;1,05 15,89;0,00 6,78																		
Ví dụ số 92 [CD ₃ CN] 8,56 1,50;8,38 0,47;8,37 0,48;8,13 2,13;8,12 2,14;7,95 2,64;7,46 1,92;7,46 0,87;7,46 2,19;7,45 2,17;7,44 0,97;7,44 1,94;7,38 0,38;7,38 0,35;7,38 0,37;7,37 0,33;7,09 2,05;7,09 0,71;7,08 3,83;7,07 0,87;7,06 1,82;6,75 1,72;6,75 1,62;6,74 1,71;6,74 1,55;4,88 8,24;4,21 1,04;4,20 2,67;4,19 2,73;4,17 2,85;4,16 2,88;4,15 1,12;2,65 0,39;2,64 1,01;2,63 1,35;2,61 1,02;2,60 0,41;2,16 55,53;1,97 0,92;1,97 2,31;1,96 1,61;1,95 14,67;1,95 25,87;1,94 36,51;1,94 25,07;1,93 12,62;1,20 3,58;1,19 3,51;1,14 16,00;1,13 15,75;0,00 1,38																		
Ví dụ số 93 [CD ₃ CN] 8,90 1,86;8,56 0,37;8,17 4,01;8,15 4,09;7,94 5,40;7,92 0,48;7,89 0,48;7,49 3,82;7,49 1,74;7,48 4,32;7,47 4,68;7,46 2,09;7,46 4,31;7,25 0,33;7,22 0,68;7,20 0,37;7,12 4,26;7,10 7,95;7,07 3,80;6,78 3,58;6,78 3,49;6,77 3,53;6,76 3,47;4,88 16,00;4,78 1,63;4,23 1,66;4,22 4,51;4,21 6,00;4,19 6,12;4,18 4,37;4,17 5,30;4,16 2,29;4,15 0,93;4,14 0,54;4,12 0,79;4,10 2,19;4,08 2,21;4,06 0,77;2,50 0,52;2,48 0,53;2,31 0,33;2,27 0,33;2,25 0,52;2,19 929,12;2,15 0,91;2,14 1,08;2,14 1,41;2,13 0,86;2,00 10,09;1,99 10,55;1,98 80,75;1,98 150,71;1,97																		

207,03;1,96 142,18;1,96 72,27;1,84 0,56;1,82 1,27;1,82 1,45;1,80 2,81;1,80 1,80;1,79 2,21;1,78 1,52;1,77 0,69;1,47 2,07;1,37 0,36;1,30 1,25;1,25 2,61;1,23 5,20;1,22 2,74;1,20 1,07;1,18 0,53;1,17 0,67;0,94 0,53;0,92 0,75;0,91 2,85;0,90 5,74;0,90 4,91;0,89 4,64;0,88 3,17;0,87 5,35;0,86 2,66;0,86 3,23;0,85 4,72;0,84 2,34;0,83 0,76												
Ví dụ số 94 [DMSO-D ₆] 9,97 4,26;8,24 4,07;8,23 4,20;7,98 3,81;7,43 0,37;7,42 3,59;7,42 1,48;7,41 4,07;7,40 4,53;7,39 1,69;7,39 4,24;7,38 0,55;7,21 0,53;7,21 4,35;7,20 1,36;7,19 1,49;7,18 7,75;7,18 1,52;7,17 1,17;7,16 3,53;7,15 0,39;6,89 3,28;6,88 3,23;6,87 3,22;6,87 3,24;5,61 12,18;4,13 2,51;4,12 5,71;4,10 2,63;4,03 16,00;3,34 42,63;3,32 250,73;3,30 0,69;3,00 2,35;2,98 4,86;2,97 2,24;2,67 0,59;2,67 0,43;2,52 1,00;2,51 33,04;2,51 62,61;2,50 85,72;2,50 59,64;2,49 29,53;2,33 0,37;2,33 0,53;2,32 0,35;2,07 1,55;1,99 0,34;1,91 0,44;1,87 0,56;1,07 0,36;0,96 0,64;0,01 0,40;0,00 13,78;-0,01 0,38												
Ví dụ số 95 [DMSO-D ₆] 10,42 2,84;8,21 2,90;8,21 2,86;8,20 3,02;8,20 3,01;8,03 2,86;7,42 2,54;7,42 1,00;7,41 2,90;7,40 3,25;7,39 1,16;7,39 2,96;7,38 0,36;7,20 3,14;7,20 0,93;7,19 1,01;7,18 5,61;7,18 1,06;7,16 0,86;7,16 2,56;6,81 2,42;6,80 2,38;6,79 2,39;6,79 2,43;5,61 8,42;4,13 1,69;4,11 3,95;4,10 1,79;4,06 0,78;4,04 2,39;4,02 2,41;4,00 0,80;3,93 2,78;3,33 126,38;2,98 1,62;2,97 3,35;2,95 1,51;2,52 0,40;2,51 9,40;2,51 18,18;2,50 25,24;2,50 17,35;2,49 8,54;2,40 1,35;2,38 4,63;2,36 4,76;2,34 1,49;2,07 0,63;1,99 10,81;1,91 0,45;1,19 3,00;1,17 6,01;1,16 2,94;1,07 16,00;1,05 5,63;1,03 12,51;1,01 5,45;0,00 0,89												
Ví dụ số 96 [DMSO-D ₆] 10,48 2,56;8,24 2,60;8,24 2,54;8,23 2,68;8,23 2,65;7,95 1,94;7,34 2,22;7,33 0,88;7,33 2,49;7,32 2,64;7,32 1,03;7,31 2,43;7,14 2,52;7,14 0,78;7,13 0,94;7,13 4,65;7,13 0,90;7,12 0,76;7,11 2,18;6,76 2,19;6,76 2,12;6,75 2,17;6,75 2,16;4,35 1,64;4,34 1,45;4,33 1,65;3,96 1,90;3,36 141,41;3,34 0,62;2,73 1,46;2,73 1,32;2,72 1,51;2,52 0,33;2,51 9,66;2,51 21,18;2,50 29,04;2,50 20,95;2,50 9,52;2,40 1,22;2,39 0,37;2,38 3,83;2,37 3,84;2,36 1,23;1,99 0,53;1,84 1,22;1,83 1,06;1,75 1,19;1,63 0,91;1,62 1,12;1,40 6,79;1,07 16,00;1,04 5,31;1,03 11,30;1,02 5,23												
Ví dụ số 97 [DMSO-D ₆] 10,47 2,11;8,24 2,00;8,23 2,04;8,23 1,90;7,96 2,00;7,34 1,66;7,34 0,74;7,33 1,90;7,33 1,94;7,32 0,81;7,32 1,74;7,14 1,96;7,14 0,67;7,13 0,81;7,13 3,50;7,13 0,75;7,12 0,62;7,11 1,64;6,76 1,62;6,76 1,55;6,75 1,58;6,75 1,56;4,35 1,33;4,34 1,18;4,33 1,28;3,96 2,28;3,38 0,37;3,35 68,69;3,33 0,53;2,76												

0,36;2,75	0,87;2,74	1,90;2,73	1,66;2,72	1,32;2,71	0,48;2,53	0,48;2,52	0,57;2,52	0,64;2,51	6,76;2,51	14,02;2,50	18,81;2,50	13,44;2,50	6,20;1,84	1,02;1,83	0,89;1,75	0,99;1,62	0,93;1,40	3,72;1,09	0,35;1,07	16,00;1,07	14,01;1,05	12,94;0,00	1,82
Ví dụ số 98 [DMSO-D ₆] 10,78 2,37;8,26 2,53;8,26 2,44;8,25 2,62;8,25 2,55;7,92 1,83;7,33 0,85;7,33 0,78;7,32 16,00;7,32 5,70;7,31 7,18;7,31 2,92;7,30 1,40;7,30 2,88;7,29 0,33;7,25 0,72;7,25 0,93;7,24 1,02;7,24 1,13;7,23 0,80;7,23 0,65;7,22 0,32;7,13 0,34;7,13 2,57;7,12 0,84;7,12 1,04;7,11 4,65;7,11 0,94;7,10 0,83;7,10 2,17;6,77 2,17;6,77 2,07;6,77 2,14;6,76 2,13;5,77 11,89;4,33 1,63;4,32 1,46;4,32 1,59;4,03 0,81;4,02 0,82;3,70 6,48;3,57 0,97;3,36 45,81;2,72 1,46;2,71 1,33;2,70 1,44;2,53 0,35;2,52 0,45;2,52 0,53;2,51 6,82;2,51 14,16;2,50 19,07;2,50 13,75;2,50 6,17;1,99 3,67;1,82 1,22;1,81 1,06;1,73 1,20;1,59 1,14;1,19 0,98;1,17 2,00;1,16 0,97;1,07 1,30;0,00 3,09																							
Ví dụ số 99 [DMSO-D ₆] 10,50 1,50;8,24 1,69;8,23 1,71;8,23 1,72;7,92 1,25;7,34 1,48;7,34 0,65;7,33 1,70;7,32 1,97;7,31 0,70;7,31 1,80;7,14 1,85;7,14 0,60;7,13 0,64;7,12 3,28;7,12 0,71;7,10 0,52;7,10 1,52;6,77 1,42;6,77 1,39;6,76 1,40;6,76 1,44;4,35 1,05;4,34 0,96;4,33 1,04;4,06 1,13;4,04 3,57;4,02 3,64;4,00 1,21;3,33 60,54;3,32 111,85;2,73 0,95;2,71 1,01;2,52 0,47;2,51 30,09;2,50 41,12;2,50 28,24;2,06 10,48;1,99 16,00;1,91 0,49;1,84 0,80;1,75 1,66;1,62 0,82;1,36 0,78;1,19 4,25;1,17 8,53;1,16 4,17;0,00 1,16																							
Ví dụ số 100 [DMSO-D ₆] 10,42 3,63;8,18 3,78;8,17 3,79;8,16 3,92;8,16 3,96;7,92 3,77;7,41 2,07;7,40 2,09;7,40 1,94;7,39 1,43;7,39 2,12;7,39 5,47;7,38 5,79;7,37 1,31;7,36 2,14;7,36 1,25;7,35 4,99;7,35 2,26;7,34 2,59;7,34 5,94;7,33 5,57;7,32 1,35;7,32 0,88;6,73 3,10;6,73 3,06;6,72 3,07;6,71 3,13;4,87 10,04;4,23 1,22;4,22 3,22;4,21 3,13;4,17 3,20;4,16 3,49;4,15 1,27;4,06 0,39;4,04 1,20;4,02 1,21;4,00 0,42;3,93 1,21;3,34 44,41;3,34 47,95;3,33 89,77;2,52 0,48;2,51 20,91;2,50 28,27;2,40 1,77;2,38 6,05;2,36 6,24;2,34 1,95;1,99 5,34;1,19 1,45;1,17 2,92;1,16 1,40;1,11 0,32;1,09 0,73;1,07 9,81;1,06 7,28;1,04 16,00;1,02 6,97;0,00 0,79																							
Ví dụ số 101 [DMSO-D ₆] 10,69 1,52;10,64 0,61;8,21 0,62;8,20 1,49;8,20 1,49;8,20 0,78;8,20 0,72;8,19 1,52;8,19 1,49;7,97 2,12;7,41 1,69;7,40 0,70;7,39 1,94;7,39 2,11;7,38 0,79;7,37 1,88;7,19 1,61;7,19 0,60;7,19 0,80;7,18 0,60;7,17 2,87;7,16 1,31;7,16 0,52;7,15 1,33;7,14 0,59;6,82 0,50;6,81 0,47;6,80 0,48;6,80																							

0,48;6,78	1,22;6,77	1,19;6,77	1,19;6,76	1,24;5,76	8,22;4,08	1,03;4,07	1,08;4,07	1,95;4,06	0,85;4,05	0,89;4,04	0,85;4,02	0,81;3,33	37,17;3,33	70,41;3,30	0,54;2,91	0,48;2,90	0,53;2,89	0,93;2,87	1,73;2,86	0,82;2,52	0,41;2,51	16,66;2,50	22,81;2,50	15,48;1,99	3,69;1,76	0,61;1,75	0,69;1,73	8,51;1,72	16,00;1,24	0,41;1,23	0,47;1,22	0,54;1,21	0,55;1,20	0,53;1,20	0,61;1,19	1,46;1,18	0,48;1,18	2,27;1,17	0,34;1,16	0,36;1,16	1,09;1,09	0,71;1,08	4,37;1,06	3,62;1,05	2,38;1,04	1,77;1,03	0,87;1,02	0,36;0,99	0,42;0,98	0,59;0,97	0,71;0,96	0,56;0,95	0,41;0,66	0,35;0,65	0,40;0,64	0,39;0,63	0,51;0,63	0,47;0,63	0,40;0,62	0,38;0,00	5,15		
Ví dụ số 102	[DMSO-D ₆]	10,29	1,60;8,19	1,50;8,19	1,51;8,18	1,53;8,18	1,56;8,03	1,33;7,42	1,35;7,41	0,56;7,41	1,55;7,40	1,71;7,39	0,64;7,38	1,53;7,20	1,65;7,20	0,53;7,18	0,59;7,18	2,91;7,17	0,59;7,16	0,46;7,16	1,35;6,78	1,25;6,78	1,23;6,77	1,23;6,77	1,27;5,76	0,49;4,10	0,87;4,08	1,95;4,07	0,91;3,36	0,55;3,34	1,05;3,33	44,43;3,30	0,46;2,92	0,91;2,91	1,84;2,90	0,86;2,50	15,50;2,20	0,55;2,19	0,50;2,17	0,79;2,17	1,00;2,15	0,63;2,15	0,91;2,13	0,45;2,11	0,33;2,11	0,56;2,09	0,68;2,08	0,95;2,07	0,78;2,07	0,61;2,06	0,76;1,99	0,33;1,91	0,49;1,89	0,68;1,87	0,33;1,78	0,47;1,77	0,34;1,77	0,34;1,76	0,43;1,73	16,00;0,00	3,15		
Ví dụ số 103	[DMSO-D ₆]	7,98	0,34;7,97	0,34;7,85	5,61;7,84	1,67;7,84	1,71;7,83	5,91;7,45	0,45;7,44	4,48;7,44	1,84;7,43	5,08;7,42	5,87;7,41	2,08;7,41	5,39;7,40	0,73;7,21	0,67;7,20	5,45;7,20	1,72;7,19	1,86;7,18	9,84;7,18	2,00;7,16	1,51;7,16	4,62;7,15	0,46;6,64	0,42;6,29	2,62;6,28	5,68;6,28	6,58;6,27	13,56;6,04	0,46;5,85	8,08;5,76	1,39;5,58	16,00;4,10	3,26;4,09	7,56;4,07	3,42;3,93	0,53;3,57	1,58;3,32	103,95;3,30	1,31;2,94	3,07;2,92	6,41;2,91	2,91;2,67	0,35;2,52	0,59;2,51	39,53;2,50	53,86;2,50	37,13;2,33	0,37;2,07	0,43;1,07	2,95;0,00	2,93										
Ví dụ số 104	[CD ₃ CN]	8,58	1,44;8,56	0,60;8,16	3,63;8,15	3,72;7,96	4,63;7,50	3,50;7,49	1,49;7,49	3,97;7,48	4,16;7,47	1,78;7,46	3,83;7,13	3,89;7,10	7,32;7,09	1,44;7,08	3,43;6,78	3,31;6,78	3,16;6,77	3,26;6,77	3,08;4,90	14,71;4,24	1,43;4,23	4,05;4,22	5,38;4,20	5,60;4,19	3,76;4,18	4,54;4,17	1,66;4,12	0,51;4,10	1,66;4,08	1,64;4,06	0,56;2,50	0,43;2,48	0,48;2,45	2,32;2,43	7,17;2,41	7,38;2,39	2,50;2,19	450,42;2,17	0,90;2,16	0,47;2,15	0,37;2,14	0,56;2,14	0,58;2,13	0,38;2,00	7,36;1,99	4,85;1,98	38,06;1,98	71,36;1,97	98,93;1,96	67,61;1,96	34,11;1,80	0,38;1,80	0,57;1,79	0,36;1,47	0,57;1,37	0,40;1,30	0,57;1,25	1,88;1,23	3,77;1,22	2,02;1,20	0,97;1,18

0,50;1,16 7,95;1,14 16,00;1,12 7,43															
Ví dụ số 105 [DMSO-D ₆] 10,39 1,59;8,21 1,54;8,21 1,53;8,20 1,60;8,20 1,59;7,98 1,54;7,41 1,31;7,41 0,53;7,40 1,55;7,39 1,69;7,38 0,62;7,38 1,53;7,19 1,63;7,19 0,51;7,17 0,58;7,17 2,90;7,16 0,57;7,15 0,44;7,15 1,32;6,82 1,23;6,82 1,22;6,81 1,24;6,81 1,25;4,09 0,87;4,08 1,94;4,06 0,92;3,32 71,04;3,30 1,70;2,92 0,91;2,91 1,86;2,90 0,88;2,89 1,45;2,73 0,97;2,52 0,55;2,52 0,83;2,51 18,44;2,51 35,30;2,50 48,54;2,50 33,69;2,49 16,77;2,24 2,35;2,22 2,85;2,07 0,65;2,07 0,36;2,04 0,51;2,02 0,64;2,00 0,50;1,73 16,00;1,40 3,01;0,90 1,42;0,90 11,40;0,89 1,97;0,88 11,08;0,86 0,37;0,01 0,41;0,00 13,55;-0,01 0,41															
Ví dụ số 106 [DMSO-D ₆] 10,47 2,01;8,22 2,45;8,22 2,58;8,21 2,55;8,21 2,67;7,98 1,71;7,42 2,27;7,41 0,90;7,40 2,59;7,40 2,96;7,39 1,05;7,38 2,67;7,21 0,33;7,20 2,82;7,20 0,89;7,18 0,92;7,18 5,07;7,17 0,97;7,16 0,76;7,16 2,31;6,84 2,14;6,83 2,11;6,83 2,11;6,82 2,15;5,76 0,91;5,61 7,37;4,12 1,53;4,11 3,50;4,09 1,56;3,34 47,42;3,33 44,00;3,33 52,21;3,32 49,40;3,30 0,61;2,97 1,42;2,96 2,95;2,95 1,37;2,52 0,49;2,52 0,70;2,51 15,64;2,51 28,39;2,50 39,07;2,50 26,13;2,07 0,35;2,05 16,00;0,01 0,46;0,00 16,26;-0,01 0,48															
Ví dụ số 107 [DMSO-D ₆] 10,78 3,48;8,22 3,72;8,22 3,74;8,21 3,85;8,20 3,83;8,01 3,86;7,42 0,40;7,41 3,36;7,41 1,38;7,40 3,88;7,39 4,20;7,38 1,52;7,38 3,81;7,37 0,44;7,21 0,48;7,20 4,15;7,20 1,26;7,18 1,41;7,18 7,38;7,17 1,36;7,16 1,15;7,16 3,36;6,80 3,22;6,79 3,12;6,78 3,18;6,78 3,20;5,76 16,00;5,60 10,42;4,12 2,14;4,10 4,91;4,09 2,24;3,34 50,57;3,33 51,49;3,33 57,39;3,33 66,01;3,30 0,71;3,18 0,34;2,96 2,03;2,95 4,15;2,93 1,90;2,52 0,57;2,52 0,84;2,51 18,33;2,51 32,88;2,50 45,30;2,50 29,95;2,49 15,00;2,33 0,32;2,02 0,35;2,01 1,10;1,99 1,74;1,98 1,10;1,96 0,38;1,21 0,32;1,17 0,51;0,79 6,19;0,77 10,98;0,63 0,39;0,63 0,43;0,62 0,35;0,01 0,48;0,00 18,65;-0,01 0,57															
Ví dụ số 108 [DMSO-D ₆] 10,73 3,94;10,68 1,45;8,22 1,61;8,22 1,60;8,21 4,05;8,20 3,86;8,00 4,82;7,41 0,52;7,41 4,10;7,40 1,94;7,40 4,85;7,39 5,05;7,39 2,22;7,38 4,37;7,38 0,62;7,20 0,49;7,20 3,58;7,19 1,37;7,19 2,37;7,18 6,74;7,18 1,79;7,17 3,11;7,17 3,42;7,16 0,72;7,16 1,27;6,83 1,20;6,83 1,17;6,82 1,19;6,82 1,18;6,79 2,99;6,79 2,92;6,78 2,98;6,78 2,98;5,77 16,00;5,60 11,84;5,59 0,42;4,12 0,79;4,11 3,46;4,10 5,95;4,09 2,70;3,35 80,58;3,33 0,60;2,99 0,53;2,98 1,15;2,97															

1,19;2,96	0,65;2,95	2,42;2,94	4,69;2,93	2,26;2,52	0,34;2,51	10,03;2,51	21,21;2,51		
28,69;2,50	21,16;2,50	10,09;2,01	0,37;2,00	0,51;1,99	0,65;1,99	0,37;1,76	0,70;1,76		
1,31;1,75	1,37;1,74	1,30;1,74	0,75;1,25	0,45;1,25	0,60;1,24	0,80;1,23	0,79;1,23		
0,88;1,22	0,86;1,22	0,88;1,21	1,25;1,21	1,18;1,20	1,31;1,20	1,23;1,19	1,11;1,19		
0,86;1,18	0,76;1,18	0,35;1,10	0,59;1,09	0,56;1,08	0,42;1,07	11,46;1,06	10,13;1,05		
5,88;1,04	5,04;1,04	0,41;1,03	0,48;1,03	2,32;1,02	0,89;0,99	0,99;0,98	1,49;0,97		
1,79;0,96	1,40;0,96	0,95;0,93	0,40;0,93	0,49;0,92	0,71;0,91	0,69;0,91	0,52;0,90		
0,35;0,82	0,34;0,75	0,38;0,74	0,58;0,74	0,54;0,74	0,50;0,73	0,52;0,73	0,51;0,73		
0,34;0,65	0,93;0,65	1,05;0,64	1,16;0,64	1,39;0,64	1,30;0,63	1,05;0,63	1,10;0,62		
0,78;0,00	5,93								
Ví dụ số 109	[DMSO-D ₆]	10,33	5,34;8,20	5,37;8,19	5,33;8,19	5,42;8,06	3,12;7,42		
0,40;7,42	0,82;7,42	4,50;7,41	2,07;7,41	5,13;7,40	5,43;7,40	2,23;7,39	4,85;7,39		
0,61;7,21	0,68;7,20	5,15;7,20	1,88;7,19	2,14;7,19	9,54;7,18	1,67;7,17	4,49;7,17		
0,52;6,79	4,34;6,79	4,34;6,78	4,32;6,78	4,35;5,62	16,00;4,13	3,67;4,12	7,87;4,11		
3,71;3,58	0,37;3,37	0,76;3,35	338,69;3,33	1,44;3,33	2,71;2,99	3,38;2,98	6,68;2,97		
3,15;2,95	0,62;2,95	0,68;2,94	0,46;2,93	0,46;2,62	0,55;2,62	0,76;2,61	0,56;2,52		
1,45;2,52	1,93;2,52	2,31;2,51	41,63;2,51	87,11;2,50	117,52;2,50	85,88;2,50	39,66;2,39		
0,47;2,39	0,67;2,38	0,47;2,20	0,73;2,20	0,46;2,19	2,33;2,18	1,90;2,17	2,94;2,17		
3,52;2,16	2,17;2,15	3,09;2,14	0,73;2,14	1,04;2,10	0,57;2,09	1,04;2,09	1,34;2,08		
1,37;2,08	3,15;2,07	3,16;2,07	2,22;2,07	2,30;2,06	2,91;2,06	1,78;2,05	0,84;2,05		
0,87;2,04	0,88;2,04	0,72;2,00	0,42;1,99	0,61;1,98	0,35;1,98	0,54;1,94	0,49;1,93		
1,25;1,93	0,85;1,91	1,89;1,91	1,80;1,90	1,21;1,90	2,26;1,88	1,25;1,87	0,41;1,86		
0,36;1,86	0,35;1,84	0,48;1,80	0,41;1,79	0,69;1,78	0,85;1,78	1,44;1,77	0,99;1,77		
0,91;1,77	0,88;1,76	1,21;1,75	0,72;1,74	0,47;1,74	0,35;1,73	0,32;1,49	0,50;1,31		
0,53;1,23	0,38;1,08	0,34;1,07	0,39;0,01	0,98;0,00	25,43;-0,01	0,78			
Ví dụ số 110	[DMSO-D ₆]	10,40	1,02;8,16	0,99;8,16	1,04;8,15	1,03;8,15	1,07;8,09		
0,98;7,40	0,88;7,40	0,35;7,39	1,01;7,38	1,15;7,37	0,41;7,37	1,04;7,20	1,09;7,18		
0,35;7,17	1,95;7,17	0,38;7,15	0,90;6,76	0,85;6,76	0,83;6,75	0,84;6,75	0,84;4,04		
0,84;4,02	0,85;3,94	2,79;3,34	31,11;2,51	4,74;2,50	6,50;2,50	4,43;2,40	0,42;2,38		
1,45;2,36	1,59;2,35	0,53;1,99	3,78;1,40	0,53;1,19	1,01;1,18	2,06;1,16	3,63;1,14		
2,65;1,07	16,00;1,06	2,01;1,04	4,34;1,02	1,90					

Ví dụ số 111	[DMSO-D ₆]	10,39 0,56;8,16 0,55;8,16 0,56;8,15 0,56;8,15 0,59;8,09 0,60;7,40 0,48;7,39 0,55;7,38 0,62;7,37 0,57;7,20 0,59;7,17 1,06;7,15 0,49;6,76 0,47;6,75 0,46;6,74 0,46;6,74 0,48;3,94 2,46;3,34 27,70;2,51 3,07;2,50 4,21;2,50 2,82;1,99 0,34;1,16 1,44;1,15 1,43;1,07 16,00;1,05 2,92
Ví dụ số 112	[DMSO-D ₆]	10,41 2,31;8,22 2,22;8,21 2,29;8,01 2,21;7,83 0,35;7,82 0,36;7,43 0,41;7,42 2,11;7,41 0,83;7,40 2,39;7,39 2,48;7,39 0,93;7,38 2,23;7,34 0,56;7,33 0,43;7,31 1,42;7,31 1,82;7,29 1,20;7,27 0,49;7,25 0,41;7,20 0,81;7,20 2,57;7,19 0,92;7,18 1,44;7,18 4,29;7,17 0,99;7,16 0,89;7,15 1,94;6,84 1,77;6,83 1,75;6,82 1,75;6,82 1,81;6,26 0,36;6,26 0,42;6,25 0,61;5,84 0,50;5,61 6,29;4,13 1,29;4,11 2,96;4,10 1,37;4,05 0,41;3,70 2,22;3,34 70,98;2,99 1,23;2,98 2,51;2,96 1,15;2,86 0,38;2,52 0,51;2,52 0,76;2,51 17,53;2,51 34,04;2,50 47,12;2,50 33,07;2,49 16,51;2,24 3,42;2,22 4,15;2,06 0,42;2,04 0,77;2,02 0,91;2,01 0,73;1,99 0,41;1,91 0,43;1,87 0,92;1,71 3,25;0,90 16,00;0,88 15,65;0,86 1,17;0,00 1,83
Ví dụ số 113	[CD ₃ CN]	8,59 1,60;8,56 0,71;8,56 0,71;8,38 0,65;8,38 0,67;8,37 0,68;8,37 0,68;8,14 4,03;8,14 4,16;8,13 4,11;8,13 4,21;7,95 3,76;7,68 0,33;7,67 0,33;7,47 0,47;7,47 4,23;7,46 1,73;7,46 4,60;7,45 4,82;7,45 1,84;7,44 4,47;7,44 0,54;7,39 0,62;7,39 0,64;7,39 0,64;7,38 0,64;7,10 0,55;7,09 4,60;7,09 1,51;7,08 1,78;7,08 8,87;7,08 1,79;7,07 1,48;7,06 4,33;7,06 0,49;6,76 3,77;6,76 3,90;6,76 3,90;6,75 3,80;5,45 2,55;4,88 16,00;4,21 1,80;4,20 4,70;4,19 4,88;4,17 4,86;4,17 5,10;4,16 3,79;4,16 5,61;4,15 2,15;4,15 1,96;4,08 0,34;4,06 0,97;4,05 0,98;4,04 0,34;2,34 1,48;2,33 1,52;2,27 9,09;2,26 9,27;2,18 87,47;2,09 31,03;2,08 0,55;1,97 4,58;1,97 3,02;1,96 2,10;1,96 2,73;1,95 21,51;1,95 39,41;1,94 55,04;1,94 37,15;1,94 19,43;1,34 1,11;1,22 1,29;1,20 2,46;1,20 0,81;1,19 1,28;1,14 1,03;1,13 0,87;1,11 0,33;1,09 0,39;1,08 0,47;1,08 0,48;1,07 0,94;1,07 0,97;1,07 0,91;1,07 0,68;1,06 0,64;1,06 1,70;1,06 0,62;1,06 0,69;1,05 0,95;1,05 0,96;1,05 1,04;1,04 0,49;1,04 0,54;1,04 0,41;0,58 0,78;0,58 0,74;0,58 0,35;0,57 0,38;0,57 0,84;0,57 0,75;0,56 1,73;0,55 4,37;0,55 4,57;0,54 2,10;0,54 2,18;0,54 4,56;0,53 4,30;0,53 1,75;0,26 0,75;0,26 0,74;0,25 0,76;0,25 0,83;0,24 0,33;0,23 1,51;0,22 4,61;0,22 4,58;0,21 4,27;0,21 4,75;0,20 1,33;0,00 6,10
Ví dụ số 114	[CD ₃ CN]	8,59 2,54;8,59 1,53;8,58 1,54;8,58 2,57;7,37 3,17;7,37 1,88;7,36 1,84;7,36 3,12;6,82 2,59;6,81 2,86;6,67 2,84;6,67 2,67;4,32 0,65;4,32

1,32;4,31	0,57;4,28	0,34;4,28	0,33;4,27	0,33;4,27	0,32;4,26	0,42;4,26	0,38;4,25	
0,37;4,02	0,40;4,01	0,53;4,00	0,47;4,00	0,43;3,99	0,57;3,99	0,50;3,98	0,37;3,97	
0,42;3,17	16,00;2,24	0,62;2,23	0,43;2,23	0,40;2,23	0,38;2,21	0,39;2,21	0,40;2,20	
0,45;2,20	0,37;2,18	0,36;2,16	394,92;2,15	0,79;2,14	0,54;2,14	0,85;2,06	0,40;2,06	
0,74;2,05	1,10;2,05	0,75;2,04	0,38;1,98	0,34;1,97	0,52;1,97	9,52;1,96	5,44;1,95	
7,79;1,95	72,73;1,95	131,74;1,94	197,34;1,94	136,52;1,93	68,11;1,93	1,17;1,92		
0,67;1,92	0,57;1,91	0,34;1,84	0,41;1,83	0,78;1,83	1,10;1,82	0,76;1,82	0,38;1,78	
0,44;1,76	0,33;1,75	0,49;1,75	0,48;1,27	1,08;0,01	0,97;0,00	30,82;-0,01	0,89	
Ví dụ số 115 [DMSO-D ₆] 8,20 0,32;7,35 0,40;7,35 0,54;7,32 0,46;7,31 0,41;7,30								
0,42;3,93	2,43;3,89	0,85;3,34	21,37;2,51	1,65;2,51	3,53;2,50	4,82;2,50	3,58;2,49	
1,79;2,38	0,51;2,36	0,53;1,99	0,94;1,17	0,51;1,16	0,35;1,07	16,00;1,05	0,70;1,03	
1,31;1,02	0,60;0,00	0,48						
Ví dụ số 116 [DMSO-D ₆] 10,41 1,98;8,21 1,89;8,19 1,97;8,03 2,31;7,42 1,56;7,41								
0,75;7,41	1,83;7,40	2,12;7,39	0,87;7,38	1,88;7,33	0,38;7,20	1,92;7,20	0,75;7,18	
0,78;7,18	3,43;7,16	0,60;7,16	1,60;6,78	1,46;6,78	1,51;6,77	1,48;6,77	1,53;5,69	
0,34;5,67	1,21;5,66	1,23;5,64	0,36;4,31	0,50;4,30	0,54;4,28	0,65;4,27	0,59;4,06	
1,23;4,04	3,73;4,02	3,79;4,00	1,29;3,94	0,33;3,93	0,47;3,93	0,70;3,91	0,72;3,91	
0,77;3,89	0,42;3,88	0,34;3,57	0,45;3,32	28,64;3,30	0,55;3,12	0,54;3,10	0,38;3,09	
0,40;2,81	0,66;2,81	0,72;2,77	0,82;2,75	0,80;2,73	1,07;2,72	0,80;2,51	7,58;2,51	
15,92;2,50	21,76;2,50	16,77;2,49	8,99;1,99	16,00;1,72	5,27;1,71	5,31;1,40	0,42;1,20	
0,33;1,19	4,44;1,17	8,71;1,16	4,36;1,09	0,44;1,07	13,25;1,05	12,16;0,00	3,20	
Ví dụ số 117 [DMSO-D ₆] 8,54 6,04;8,54 6,22;8,34 3,94;8,34 4,00;8,33 4,08;8,33								
4,10;7,40	0,44;7,39	4,29;7,38	1,85;7,38	4,83;7,37	5,80;7,36	2,11;7,35	5,24;7,35	
0,67;7,26	3,11;7,25	3,29;7,24	3,51;7,23	3,12;7,20	0,65;7,20	5,66;7,19	1,80;7,18	
1,92;7,17	10,00;7,17	2,10;7,16	1,59;7,15	4,54;7,14	0,50;4,53	1,17;4,51	2,29;4,49	
2,31;4,48	1,15;3,94	1,70;3,46	0,35;3,41	0,63;3,35	757,79;3,34	820,12;3,01	0,46;3,00	
0,61;2,98	0,56;2,97	1,30;2,96	1,51;2,94	1,43;2,93	1,61;2,91	2,04;2,89	1,87;2,87	
0,78;2,85	0,84;2,83	0,87;2,82	0,74;2,82	0,92;2,80	1,57;2,79	1,11;2,78	1,40;2,77	
0,98;2,76	0,70;2,75	0,51;2,68	0,42;2,68	0,85;2,67	1,18;2,67	0,86;2,66	0,43;2,54	
0,57;2,54	0,53;2,53	3,59;2,52	5,35;2,51	62,19;2,51	127,34;2,50	169,68;2,50		
125,11;2,49	62,31;2,34	0,43;2,33	0,86;2,33	1,19;2,33	0,89;2,32	0,45;2,23	0,65;2,21	

1,34;2,21	0,89;2,20	1,22;2,19	1,37;2,18	1,43;2,17	1,06;2,16	0,90;2,16	1,09;2,14	0,56;2,07	1,40;1,50	16,00;1,49	15,95;1,24	0,51;1,16	2,81;1,07	13,39;0,01	0,78;0,00	25,60																																					
Ví dụ số 118	[DMSO-D ₆]	8,61	9,62;8,60	9,81;8,44	6,16;8,44	6,08;8,43	6,35;8,43	6,19;7,33	0,68;7,32	6,73;7,31	2,80;7,31	7,54;7,30	9,22;7,29	3,29;7,28	8,37;7,28	1,18;7,26	4,65;7,25	4,96;7,25	5,29;7,23	4,63;7,16	1,02;7,16	9,31;7,15	2,73;7,14	2,89;7,13	16,00;7,13	3,09;7,12	2,41;7,11	7,12;7,10	0,79;5,76	0,46;4,37	5,36;4,36	4,78;4,35	5,03;3,35	80,36;2,65	4,89;2,64	4,16;2,62	5,19;2,52	0,44;2,52	8,56;2,51	18,70;2,51	25,30;2,50	18,15;2,50	8,58;1,85	3,90;1,84	3,74;1,77	3,55;1,76	4,08;1,64	3,24;1,63	4,07;1,26	0,41;1,23	0,52;1,07	1,69;0,00	2,91

Cường độ của tín hiệu sắc nét tương quan với độ cao của các tín hiệu trong mẫu được in của phổ NMR tính bằng cm và thể hiện các tỷ lệ thực của các cường độ tín hiệu. Trong trường hợp các tín hiệu rộng, nhiều đỉnh hoặc phân trung tâm của tín hiệu và các cường độ tương đối của chúng so với tín hiệu cường độ lớn nhất trong phổ có thể được thể hiện.

Các danh sách của các đỉnh ¹H-NMR là giống với các mẫu in ¹H-NMR cổ điển và do đó thường gồm có tất cả các đỉnh được liệt kê trong các diễn giải NMR cổ điển.

Ngoài ra, giống các bản in ¹H-NMR cổ điển, chúng có thể thể hiện các tín hiệu dung môi, các tín hiệu của các chất đồng phân lập thể của các hợp chất đích, nó cũng là một phần của đối tượng của sáng chế, và/hoặc các đỉnh của các tạp chất.

Trong danh sách của các tín hiệu hợp chất trong khoảng delta của dung môi và/hoặc nước, trong các danh sách về các đỉnh ¹H-NMR của sáng chế, các đỉnh dung môi thông thường, ví dụ, các đỉnh của DMSO trong DMSO-d₆ và đỉnh của nước, thường trung bình có cường độ cao, được thể hiện.

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

Các chất đồng phân lập thể và/hoặc các tạp chất này có thể thường dùng cho các quy trình điều chế. Do đó, các đỉnh của chúng có thể giúp nhận diện sự tái tạo bất kỳ của quy trình điều chế sử dụng “các dấu tay của sản phẩm phụ”.

Nếu được yêu cầu, chuyên gia tính toán các đỉnh của các hợp chất đích bằng các phương pháp đã biết (MestreC, mô phỏng ACD, nhưng cũng sử dụng các giá trị kỳ vọng được đánh giá theo kinh nghiệm) có thể cô lập các đỉnh của các hợp chất đích, sử dụng, nếu thích hợp, các bộ lọc cường độ bổ sung. Sự cô lập này là giống với đỉnh tương ứng lựa chọn sự diễn giải $^1\text{H-NMR}$ cổ điển.

Nếu, như trường hợp có thể là, các tín hiệu có giá trị δ giống nhau diễn ra là kết quả của sự làm tròn giá trị δ tới hai vị trí thập phân, các cường độ của chúng sau khi bổ sung cho hình ảnh tương tự mà hình này cũng có thể được quan sát trong bản in của NMR cổ điển trong khoảng giá trị δ này.

Ví dụ A

Thử nghiệm hoạt tính bảo vệ với nấm *Alternaria* (ở cà chua)

Dung môi: 49 phần trọng lượng N,N-dimetylformamit

Chất nhũ hóa: 1 phần trọng lượng alkylaryl polyglycol ete

Để tạo ra chế phẩm thích hợp có hoạt chất, 1 phần trọng lượng hoạt chất được trộn với các lượng đã biết của dung môi và chất nhũ hóa, và nồng độ được pha loãng bằng nước tới nồng độ mong muốn.

Để thử nghiệm hoạt tính bảo vệ, các cây cà chua non được phun chế phẩm hoạt chất ở tỷ lệ áp dụng đã biết. 1 ngày sau xử lý, các cây được cấy truyền dịch huyền phù bào tử của nấm *Alternaria solani* và sau đó giữ ở độ ẩm tương đối là 100% và ở nhiệt độ 22°C trong thời gian 24 giờ. Các cây sau đó giữ ở độ ẩm không khí tương đối là 96% và ở nhiệt độ 20°C .

Sự đánh giá được thực hiện sau khi cấy truyền 7 ngày. 0% nghĩa là hiệu suất tương ứng với hiệu suất của đối chứng, trong khi hiệu suất là 100% nghĩa là không có sự nhiễm nào được quan sát thấy.

Trong thử nghiệm này, các hợp chất theo sáng chế bên dưới thể hiện, ở nồng độ hoạt chất là 500 ppm, hiệu suất là 70% hoặc lớn hơn.

Ví dụ, Bảng 1 (hiệu suất tính bằng %):

2 (94%), 3 (95%), 5 (100%), 6 (95%), 7 (95%), 8 (100%), 9 (100%), 10 (70%), 15 (100%), 19 (100%), 20 (100%), 21 (100%), 22 (95%), 23 (95%), 24 (95%), 25 (100%), 26 (100%), 27 (100%), 28 (100%), 29 (100%), 30 (100%), 31 (94%), 32 (78%), 33 (89%), 34 (100%), 35 (94%), 37 (95%), 38 (95%), 39 (80%), 40 (100%), 41 (70%), 43 (94%), 44 (80%), 45 (95%), 46 (70%), 47 (90%), 50 (95%), 51 (95%), 52 (90%), 54 (80%), 55 (80%), 58 (80%), 59 (70%), 62 (94%), 63 (100%), 64 (100%), 65 (100%), 66 (70%), 67 (80%), 70 (90%), 74 (95%), 75 (95%), 76 (100%), 77 (89%), 82 (89%), 83 (89%), 86 (90%), 87 (80%), 88 (90%), 89 (90%), 90 (95%), 91 (90%), 92 (90%), 93 (95%), 94 (90%), 95 (80%), 96 (90%), 97 (70%), 98 (90%), 99 (80%), 100 (80%), 101 (90%), 102 (95%), 104 (80%), 106 (80%), 108 (80%), 109 (90%), 112 (90%), 113 (90%) 117 (94%).

Ví dụ B

Thử nghiệm hoạt tính bảo vệ với khuẩn gây mốc *Botrytis* (ở cây đậu)

Dung môi: 24,5 phần trọng lượng axeton

24,5 phần trọng lượng dimethylaxetamit

Chất nhũ hóa: 1 phần trọng lượng alkylaryl polyglycol etc

Để tạo ra một chế phẩm thích hợp có hoạt chất, 1 phần trọng lượng hoạt chất được trộn với các lượng đã biết của dung môi và chất nhũ hóa, và nồng độ được pha loãng bằng nước tới nồng độ mong muốn.

Để thử nghiệm hoạt tính bảo vệ, các cây non được phun với chế phẩm hoạt chất ở tỷ lệ áp dụng đã biết. Sau khi lớp phủ phun khô đi, 2 miếng aga nhỏ được cấy khuẩn *Botrytis cinerea* được đặt trên mỗi lá. Các cây đã được cấy được đặt trong một khoang tối ở nhiệt độ khoảng 20°C và ở độ ẩm không khí tương đối là 100%.

Sau khi cấy 2 ngày, kích cỡ của các vùng bị nhiễm trên lá được đánh giá. 0% nghĩa là hiệu suất tương ứng với hiệu suất của đối chứng, trong khi hiệu suất là 100% nghĩa là không có sự nhiễm nào được quan sát thấy.

Trong thử nghiệm này, các hợp chất theo sáng chế bên dưới thể hiện, ở nồng độ hoạt chất là 100 ppm, hiệu suất là 70% hoặc lớn hơn.

Ví dụ, Bảng 1 (hiệu suất tính bằng %):

2 (100%), 5 (100%), 7 (95%), 8 (99%), 9 (93%), 15 (82%), 19 (99%), 20 (98%), 21 (98%), 22 (89%), 23 (100%), 24 (76%), 25 (90%), 26 (93%), 27 (92%), 28 (95%), 29 (100%), 30 (100%), 31 (90%), 32 (98%), 33 (98%), 34 (99%), 35 (96%), 40 (100%), 43 (99%), 51 (99%), 52 (78%), 58 (100%), 59 (100%), 63 (94%), 64 (100%), 65 (97%), 74 (100%), 76 (100%), 77 (100%), 78 (100%), 85 (100%), 86 (100%), 87 (100%), 89 (100%), 91 (100%) 117 (100%).

Ví dụ C

Thử nghiệm nấm *Fusarium graminearum* (cây lúa mạch) / bảo vệ

Dung môi: 49 phần trọng lượng N,N-dimethylacetamid

Chất nhũ hóa: 1 phần trọng lượng alkylaryl polyglycol etc

Để tạo ra một chế phẩm thích hợp có hoạt chất, 1 phần trọng lượng hoạt chất được trộn với các lượng đã biết của dung môi và chất nhũ hóa, và nồng độ được pha loãng bằng nước tới nồng độ mong muốn.

Để thử nghiệm hoạt tính bảo vệ, các cây non được phun với chế phẩm hoạt chất ở tỷ lệ áp dụng đã biết.

Sau khi lớp phủ phun khô đi, các cây được phun các bào tử của dịch huyền phù bào tử của nấm *Fusarium graminearum*.

Các cây được đặt trong khoang nhà kính dưới tấm đậy ủ trong mờ ở nhiệt độ 22°C và độ ẩm không khí tương đối là 100%.

Sự đánh giá được thực hiện sau khi ủ 5 ngày. 0% nghĩa là hiệu suất tương ứng với hiệu suất của đối chứng, trong khi hiệu suất là 100% nghĩa là không có sự nhiễm nào được quan sát thấy.

Trong thử nghiệm này, các hợp chất theo sáng chế bên dưới thể hiện, ở nồng độ hoạt chất là 1000 ppm, hiệu suất là 70% hoặc lớn hơn.

Ví dụ, Bảng 1 (hiệu suất tính bằng %):

5 (100%), 8 (88%), 15 (100%), 19 (100%), 20 (94%), 21 (100%), 22 (100%), 23 (88%), 24 (100%), 25 (94%), 26 (88%), 27 (94%), 28 (100%), 29 (94%), 30 (88%), 31

(100%), 32 (86%), 34 (100%), 36 (93%), 40 (100%), 50 (83%), 55 (83%), 58 (100%), 59 (94%), 63 (83%), 65 (83%), 76 (90%), 77 (90%) 117 (100%).

Ví dụ D

Thử nghiệm hoạt tính bảo vệ với nấm *Fusarium nivale* (var. *majus*) (ở lúa mì)

Dung môi: 49 phần trọng lượng N,N-dimethylacetamid

Chất nhũ hóa: 1 phần trọng lượng alkylaryl polyglycol etc

Để tạo ra một chế phẩm thích hợp có hoạt chất, 1 phần trọng lượng hoạt chất được trộn với các lượng đã biết của dung môi và chất nhũ hóa, và nồng độ được pha loãng bằng nước tới nồng độ mong muốn.

Để thử nghiệm hoạt tính bảo vệ, các cây non được phun với chế phẩm hoạt chất ở tỷ lệ áp dụng đã biết.

Sau khi lớp phủ phun khô đi, các cây được phun các bào tử của dịch huyền phù bào tử của nấm *Fusarium nivale* (var. *majus*).

Các cây được đặt trong khoang nhà kính dưới tấm dày ủ trong mờ ở nhiệt độ 10°C và độ ẩm không khí tương đối là 100%.

Sự đánh giá được thực hiện sau khi ủ 5 ngày. 0% nghĩa là hiệu suất tương ứng với hiệu suất của đối chứng, trong khi hiệu suất là 100% nghĩa là không có sự nhiễm nào được quan sát thấy.

Trong thử nghiệm này, các hợp chất theo sáng chế bên dưới thể hiện, ở nồng độ hoạt chất là 1000 ppm, hiệu suất là 70% hoặc lớn hơn.

Ví dụ, Bảng 1 (hiệu suất tính bằng %):

5 (100%), 8 (100%), 15 (100%), 19 (100%), 20 (100%), 21 (100%), 22 (86%), 23 (86%), 24 (100%), 25 (100%), 26 (86%), 27 (86%), 28 (100%), 29 (86%), 30 (86%), 31 (100%), 32 (86%), 34 (100%), 36 (88%), 37 (86%), 38 (86%), 40 (100%), 43 (80%), 47 (80%), 50 (83%), 55 (100%), 58 (100%), 59 (100%), 63 (83%), 65 (100%), 76 (100%), 77 (100%) 117 (100%).

Ví dụ E

Thử nghiệm hoạt tính bảo vệ với nấm *Leptosphaeria nodorum* (cây lúa mì)

Dung môi: 49 phần trọng lượng N,N-dimetylformamit

Chất nhũ hóa: 1 phần trọng lượng alkylaryl polyglycol etc

Để tạo ra một chế phẩm thích hợp có các hoạt chất, 1 phần trọng lượng hoạt chất được trộn với các lượng đã biết của dung môi và chất nhũ hóa, và nồng độ được pha loãng bằng nước tới nồng độ mong muốn.

Để thử nghiệm hoạt tính bảo vệ, young wheat plants được phun chế phẩm hoạt chất ở tỷ lệ áp dụng đã biết. 1 ngày sau xử lý, các cây được cấy ủ dịch huyền phù bào tử nước của nấm *Leptosphaeria nodorum* và sau đó giữ ở độ ẩm không khí tương đối là 100% và ở nhiệt độ 22°C trong thời gian 48 giờ. Các cây sau đó được đặt vào trong nhà kính ở độ ẩm không khí tương đối là 90% và ở nhiệt độ 22°C.

Sự đánh giá được thực hiện sau khi ủ 7 - 9 ngày. 0% nghĩa là hiệu suất tương ứng với hiệu suất của đối chứng, trong khi hiệu suất là 100% nghĩa là không có sự nhiễm nào được quan sát thấy.

Trong thử nghiệm này, các hợp chất theo sáng chế bên dưới thể hiện, ở nồng độ hoạt chất là 500 ppm, hiệu suất là 70% hoặc lớn hơn.

Ví dụ, Bảng 1 (hiệu suất tính bằng %):

2 (80%), 3 (89%), 5 (94%), 6 (70%), 8 (95%), 9 (95%), 10 (80%), 11 (70%), 15 (95%), 19 (95%), 20 (95%), 21 (95%), 22 (80%), 23 (90%), 24 (90%), 25 (95%), 26 (80%), 28 (90%), 29 (90%), 30 (90%), 31 (90%), 32 (90%), 33 (70%), 34 (95%), 35 (90%), 36 (90%), 37 (90%), 40 (95%), 43 (90%), 55 (90%), 58 (94%), 59 (89%), 60 (78%), 62 (78%), 63 (94%), 64 (94%), 65 (94%), 70 (90%), 74 (88%), 76 (89%), 77 (94%), 78 (100%), 82 (88%), 83 (75%), 84 (88%), 85 (75%), 86 (70%), 87 (70%), 89 (80%), 90 (89%), 91 (78%), 92 (90%), 93 (80%), 95 (90%), 96 (90%), 97 (80%), 99 (95%), 100 (70%), 101 (70%), 102 (90%), 107 (90%), 108 (70%), 112 (90%), 113 (78%) 117 (86%).

Ví dụ F

Thử nghiệm hoạt tính bảo vệ với nấm *Phytophthora* (cây cà chua)

Dung môi: 49 phần trọng lượng N,N-dimetylformamit

Chất nhũ hóa: 1 phần trọng lượng alkylaryl polyglycol ete

Để tạo ra một chế phẩm thích hợp có hoạt chất, 1 phần trọng lượng hoạt chất được trộn với các lượng đã biết của dung môi và chất nhũ hóa, và nồng độ được pha loãng bằng nước tới nồng độ mong muốn.

Để thử nghiệm hoạt tính bảo vệ, các cây cà chua non được phun chế phẩm hoạt chất ở tỷ lệ áp dụng đã biết. 1 ngày sau xử lý, các cây được cấy ủ dịch huyền phù bào tử của nấm *Phytophthora infestans* và sau đó giữ ở độ ẩm tương đối 100% và ở nhiệt độ 22°C trong thời gian 24 giờ. Các cây sau đó được đặt trong khoang điều tiết khí hậu ở độ ẩm không khí tương đối là khoảng 96% và ở nhiệt độ khoảng 20°C.

Sự đánh giá được thực hiện sau khi ủ 7 ngày. 0% nghĩa là hiệu suất tương ứng với hiệu suất của đối chứng, trong khi hiệu suất là 100% nghĩa là không có sự nhiễm nào được quan sát thấy.

Trong thử nghiệm này, các hợp chất theo sáng chế bên dưới thể hiện, ở nồng độ hoạt chất là 500 ppm, hiệu suất là 70% hoặc lớn hơn.

Ví dụ, Bảng 1 (hiệu suất tính bằng %):

2 (94%), 3 (90%), 5 (95%), 7 (95%), 8 (95%), 9 (90%), 10 (70%), 11 (80%), 14 (70%), 15 (95%), 17 (80%), 19 (100%), 20 (100%), 21 (90%), 22 (90%), 23 (80%), 24 (90%), 25 (80%), 26 (95%), 27 (80%), 28 (95%), 29 (90%), 30 (80%), 31 (80%), 32 (70%), 33 (70%), 34 (95%), 35 (80%), 36 (80%), 37 (70%), 38 (70%), 39 (80%), 40 (70%), 41 (70%), 43 (70%), 44 (70%), 45 (90%), 46 (70%), 47 (80%), 48 (70%), 52 (95%), 56 (80%), 58 (70%), 62 (80%), 63 (95%), 64 (80%), 65 (90%), 66 (80%), 67 (70%), 69 (70%), 70 (95%), 71 (80%), 74 (90%), 75 (80%), 82 (70%), 83 (70%), 85 (90%), 87 (90%), 88 (80%), 89 (90%), 90 (78%), 92 (80%), 93 (90%), 96 (70%), 113 (70%).

Ví dụ G

Thử nghiệm hoạt tính bảo vệ với nấm *Puccinia triticina* (cây lúa mì)

Dung môi: 49 phần trọng lượng N,N-dimethylaxetamid

Chất nhũ hóa: 1 phần trọng lượng alkylaryl polyglycol ete

Để tạo ra một chế phẩm thích hợp có hoạt chất, 1 phần trọng lượng hoạt chất được trộn với các lượng đã biết của dung môi và chất nhũ hóa, và nồng độ được pha loãng bằng nước tới nồng độ mong muốn.

Để thử nghiệm hoạt tính bảo vệ, các cây non được phun với chế phẩm hoạt chất ở tỷ lệ áp dụng đã biết.

Sau khi lớp phủ phun khô đi, các cây được phun các bào tử của dịch huyền phù bào tử của nấm *Puccinia triticina*. Các cây giữ trong khoang ủ ở nhiệt độ 20°C và độ ẩm không khí tương đối là 100% trong thời gian 48 giờ.

Các cây được đặt trong nhà kính ở nhiệt độ khoảng 20°C và độ ẩm không khí tương đối là khoảng 80%.

Sự đánh giá được thực hiện sau khi ủ 8 ngày. 0% nghĩa là hiệu suất tương ứng với hiệu suất của đối chứng, trong khi hiệu suất là 100% nghĩa là không có sự nhiễm nào được quan sát thấy.

Trong thử nghiệm này, các hợp chất theo sáng chế bên dưới thể hiện, ở nồng độ hoạt chất là 1000 ppm, hiệu suất là 70% hoặc lớn hơn.

Ví dụ, Bảng 1 (hiệu suất tính bằng %):

5 (100%), 8 (100%), 15 (94%), 19 (100%), 19 (95%), 20 (100%), 21 (95%), 22 (75%), 23 (75%), 24 (100%), 25 (88%), 26 (100%), 27 (75%), 28 (100%), 29 (94%), 30 (88%), 31 (94%), 32 (89%), 34 (94%), 36 (78%), 37 (78%), 40 (100%), 43 (100%), 50 (86%), 55 (100%), 58 (100%), 59 (100%), 63 (86%), 65 (86%), 76 (88%), 77 (88%) 117 (100%).

Ví dụ H

Thử nghiệm hoạt tính bảo vệ với nấm *Pyrenophora teres* (cây lúa mạch)

Dung môi: 49 phần trọng lượng N,N-dimetylformamit

Chất nhũ hóa: 1 phần trọng lượng alkylaryl polyglycol etc

Để tạo ra một chế phẩm thích hợp có các hoạt chất, 1 phần trọng lượng hoạt chất được trộn với các lượng đã biết của dung môi và chất nhũ hóa, và nồng độ được pha loãng bằng nước tới nồng độ mong muốn.

Để thử nghiệm hoạt tính bảo vệ, các cây lúa mạch con được phun chế phẩm hoạt chất ở tỷ lệ áp dụng đã biết. 1 ngày sau xử lý, các cây được cấy ủ dịch huyền phù bào tử nước của nấm *Pyrenophora teres* và sau đó giữ ở độ ẩm không khí tương đối là 100% và ở nhiệt độ là 22°C trong thời gian là 48 giờ. Các cây sau đó được đặt vào trong nhà kính ở độ ẩm không khí tương đối là 80% và ở nhiệt độ là 20°C.

Sự đánh giá được thực hiện sau khi ủ từ 7 tới 9 ngày. 0% nghĩa là hiệu suất tương ứng với hiệu suất của đối chứng, trong khi hiệu suất là 100% nghĩa là không có sự nhiễm nào được quan sát thấy.

Trong thử nghiệm này, các hợp chất theo sáng chế bên dưới thể hiện, ở nồng độ hoạt chất là 500 ppm, hiệu suất là 70% hoặc lớn hơn.

Ví dụ, Bảng 1 (hiệu suất tính bằng %):

2 (95%), 3 (95%), 5 (100%), 6 (70%), 7 (80%), 8 (100%), 9 (94%), 10 (80%), 11 (70%), 13 (80%), 15 (100%), 19 (100%), 20 (100%), 21 (100%), 22 (95%), 23 (95%), 24 (95%), 25 (100%), 26 (95%), 27 (90%), 28 (100%), 29 (100%), 30 (100%), 31 (100%), 32 (78%), 33 (78%), 34 (94%), 35 (78%), 36 (89%), 37 (100%), 38 (95%), 39 (95%), 40 (95%), 41 (95%), 43 (95%), 44 (90%), 45 (95%), 46 (70%), 47 (90%), 50 (95%), 51 (90%), 52 (80%), 55 (95%), 58 (90%), 59 (90%), 60 (90%), 61 (70%), 62 (95%), 63 (95%), 64 (100%), 65 (95%), 66 (95%), 67 (95%), 70 (80%), 71 (80%), 72 (80%), 73 (70%), 74 (100%), 75 (100%), 78 (95%), 82 (94%), 83 (94%), 84 (94%), 85 (100%), 86 (100%), 87 (90%), 88 (90%), 89 (95%), 90 (95%), 91 (95%), 92 (95%), 93 (100%), 94 (95%), 95 (100%), 96 (100%), 97 (100%), 98 (95%), 99 (95%), 100 (100%), 101 (95%), 102 (95%), 103 (90%), 104 (95%), 105 (95%), 106 (95%), 107 (95%), 108 (95%), 109 (95%), 112 (95%), 113 (94%) 117 (100%).

Ví dụ I

Thử nghiệm hoạt tính bảo vệ với nấm *Septoria tritici* (cây lúa mì)

Dung môi: 49 phần trọng lượng N,N-dimethylaxetamit

Chất nhũ hóa: 1 phần trọng lượng alkylaryl polyglycol ete

Để tạo ra một chế phẩm thích hợp có hoạt chất, 1 phần trọng lượng hoạt chất được trộn với lượng đã biết của dung môi và chất nhũ hóa, và nồng độ được pha loãng bằng nước tới nồng độ mong muốn.

Để thử nghiệm hoạt tính bảo vệ, các cây non được phun với chế phẩm hoạt chất ở tỷ lệ áp dụng đã biết. Sau khi lớp phủ phun khô đi, các cây được phun dịch huyền phù bào tử của nấm *Septoria tritici*. Các cây được giữ trong khoang ủ ở nhiệt độ là 20°C và độ ẩm không khí tương đối 100% trong thời gian 48 giờ. Các cây sau đó được đặt dưới tấm dày trong mờ ở nhiệt độ 15°C và độ ẩm không khí tương đối là 100% thêm 60 giờ nữa.

Các cây được đặt trong nhà kính ở nhiệt độ khoảng 15°C và độ ẩm không khí tương đối là 80%.

Sự đánh giá được thực hiện sau khi ủ 21 ngày. 0% nghĩa là hiệu suất tương ứng với hiệu suất của đối chứng, trong khi hiệu suất là 100% nghĩa là không có sự nhiễm nào được quan sát thấy.

Trong thử nghiệm này, các hợp chất theo sáng chế bên dưới thể hiện, ở nồng độ hoạt chất là 1000 ppm, hiệu suất là 70% hoặc lớn hơn.

Ví dụ, Bảng 1 (hiệu suất tính bằng %):

8 (100%), 15 (100%), 19 (100%), 21 (100%), 22 (86%), 23 (86%), 24 (100%), 25 (86%), 26 (86%), 28 (100%), 29 (71%), 30 (100%), 31 (100%), 32 (100%), 34 (93%), 36 (100%), 40 (90%), 43 (100%), 47 (100%), 50 (90%), 55 (90%), 58 (89%), 63 (100%), 65 (90%), 76 (100%), 77 (100%) 117 (100%).

Ví dụ J

Thử nghiệm hoạt tính bảo vệ với nấm *Sphaerotheca* (cây dưa chuột)

Dung môi: 49 phần trọng lượng N,N-dimetylformamit

Chất nhũ hóa: 1 phần trọng lượng alkylaryl polyglycol etc

Để tạo ra một chế phẩm thích hợp có các hoạt chất, 1 phần trọng lượng hoạt chất được trộn với các lượng đã biết của dung môi và chất nhũ hóa, và nồng độ được pha loãng bằng nước tới nồng độ mong muốn.

Để thử nghiệm hoạt tính bảo vệ, các cây dưa chuột con được phun chế phẩm hoạt chất ở tỷ lệ áp dụng đã biết. 1 ngày sau xử lý, các cây được cấy ủ với dịch huyền phù bào tử của nấm *Sphaerotheca fuliginea*. Các cây sau đó được đặt vào trong nhà kính ở độ ẩm không khí tương đối là 70% và ở nhiệt độ là 23°C.

Sự đánh giá được thực hiện sau khi ủ 7 ngày. 0% nghĩa là hiệu suất tương ứng với hiệu suất của đối chứng, trong khi hiệu suất là 100% nghĩa là không có sự nhiễm nào được quan sát thấy.

Trong thử nghiệm này, các hợp chất theo sáng chế bên dưới thể hiện, ở nồng độ hoạt chất là 500 ppm, hiệu suất là 70% hoặc lớn hơn.

Ví dụ, Bảng 1 (hiệu suất tính bằng %):

2 (91%), 5 (95%), 7 (90%), 8 (99%), 9 (86%), 10 (94%), 11 (88%), 15 (98%), 19 (98%), 20 (100%), 21 (100%), 22 (90%), 23 (89%), 24 (94%), 25 (94%), 26 (98%), 28 (100%), 29 (83%), 30 (95%), 31 (95%), 33 (95%), 34 (100%), 36 (94%), 40 (94%), 47 (96%), 50 (94%), 55 (95%), 58 (96%), 59 (98%), 60 (90%), 63 (93%), 64 (86%), 65 (100%), 70 (94%), 74 (93%), 75 (95%), 76 (100%), 78 (100%), 82 (95%), 83 (98%), 84 (98%), 85 (85%), 86 (100%), 87 (95%), 88 (95%), 89 (100%), 90 (95%), 91 (100%), 92 (98%), 93 (98%), 94 (93%), 95 (95%), 96 (95%), 97 (100%), 98 (90%), 99 (98%), 100 (95%), 101 (98%), 102 (100%), 104 (93%), 106 (75%), 107 (100%), 108 (95%), 109 (93%), 112 (95%), 113 (98%) 117 (95%).

Ví dụ K

Thử nghiệm hoạt tính bảo vệ với nấm *Uromyces* (cây đậu)

Dung môi: 24,5 phần trọng lượng axeton

24,5 phần trọng lượng dimetylaxetamit

Chất nhũ hóa: 1 phần trọng lượng alkylaryl polyglycol etc

Để tạo ra một chế phẩm thích hợp có hoạt chất, 1 phần trọng lượng hoạt chất được trộn với các lượng đã biết của dung môi và chất nhũ hóa, và nồng độ được pha loãng bằng nước tới nồng độ mong muốn.

Để thử nghiệm hoạt tính bảo vệ, các cây non được phun với chế phẩm hoạt chất ở tỷ lệ áp dụng đã biết. Sau khi lớp phủ phun khô đi, các cây được cấy ủ dịch huyền phù bào tử nước của nấm gây bệnh gỉ sắt ở cây đậu *Uromyces appendiculatus* và sau đó giữ trong khoang ủ ở nhiệt độ khoảng 20°C và độ ẩm không khí tương đối 100% trong thời gian 1 ngày.

Các cây sau đó được đặt vào trong nhà kính ở khoảng 21°C và độ ẩm không khí tương đối là khoảng 90%..

Sự đánh giá được thực hiện sau khi ủ 10 ngày. 0% nghĩa là hiệu suất tương ứng với hiệu suất của đối chứng, trong khi hiệu suất là 100% nghĩa là không có sự nhiễm nào được quan sát thấy.

Trong thử nghiệm này, các hợp chất theo sáng chế bên dưới thể hiện, ở nồng độ hoạt chất là 100 ppm, hiệu suất là 70% hoặc lớn hơn.

Ví dụ, Bảng 1 (hiệu suất tính bằng %):

5 (98%), 8 (100%), 15 (94%), 19 (94%), 20 (94%), 21 (94%), 22 (94%), 23 (95%), 24 (91%), 25 (94%), 26 (94%), 27 (94%), 28 (95%), 29 (94%), 30 (95%), 31 (94%), 32 (96%), 33 (95%), 34 (95%), 36 (85%), 40 (81%), 40 (75%), 43 (90%), 51 (86%), 63 (75%), 64 (78%), 65 (95%), 76 (95%), 77 (98%), 78 (94%), 85 (85%), 86 (95%), 87 (93%), 89 (95%), 91 (95%) 117 (90%).

Ví dụ L

Thử nghiệm hoạt tính bảo vệ với nấm *Venturia* (cây táo)

Dung môi: 24,5 phần trọng lượng axeton

24,5 phần trọng lượng dimethylaxetamit

Chất nhũ hóa: 1 phần trọng lượng alkylaryl polyglycol etc

Để tạo ra một chế phẩm thích hợp có hoạt chất, 1 phần trọng lượng hoạt chất được trộn với các lượng đã biết của dung môi và chất nhũ hóa, và nồng độ được pha loãng bằng nước tới nồng độ mong muốn.

Để thử nghiệm hoạt tính bảo vệ, các cây non được phun với chế phẩm hoạt chất ở tỷ lệ áp dụng đã biết. Sau khi lớp phủ phun khô đi, các cây được cấy ủ dịch huyền phù bào tử đỉnh của nấm gây bệnh nấm vảy cây táo *Venturia inaequalis* và sau đó giữ trong khoang ủ ở nhiệt độ khoảng 20°C và độ ẩm không khí tương đối 100% trong thời gian 1 ngày.

Các cây sau đó được đặt vào trong nhà kính ở nhiệt độ khoảng 21°C và độ ẩm không khí tương đối là khoảng 90%.

Sự đánh giá được thực hiện sau khi ủ 10 ngày. 0% nghĩa là hiệu suất tương ứng với hiệu suất của đối chứng, trong khi hiệu suất là 100% nghĩa là không có sự nhiễm nào được quan sát thấy.

Trong thử nghiệm này, các hợp chất theo sáng chế bên dưới thể hiện, ở nồng độ hoạt chất là 100 ppm, hiệu suất là 70% hoặc lớn hơn.

Ví dụ, Bảng 1 (hiệu suất tính bằng %):

2 (95%), 5 (98%), 7 (76%), 8 (96%), 9 (95%), 15 (94%), 19 (93%), 20 (99%), 21 (99%), 22 (76%), 23 (98%), 24 (83%), 25 (94%), 26 (93%), 27 (89%), 28 (100%), 29 (95%), 30 (99%), 31 (100%), 32 (90%), 33 (95%), 34 (95%), 35 (95%), 40 (94%), 43 (98%), 50 (88%), 51 (74%), 52 (94%), 58 (99%), 59 (97%), 63 (99%), 64 (99%), 65 (96%), 70 (100%), 74 (95%), 76 (100%), 77 (100%), 78 (100%), 86 (95%), 89 (94%), 91 (95%) 117 (100%).

Ví dụ M

Thử nghiệm hoạt tính bảo vệ với nấm *Pyricularia* (cây lúa)

Dung môi: 28,5 phần trọng lượng axeton

Chất nhũ hóa: 1,5 phần trọng lượng alkylaryl polyglycol ete

Để tạo ra một chế phẩm thích hợp có hoạt chất, 1 phần trọng lượng hoạt chất được trộn với lượng đã biết của dung môi, và nồng độ được làm loãng bằng nước và lượng đã biết của chất nhũ hóa tới nồng độ mong muốn.

Để thử nghiệm hoạt tính bảo vệ, các cây lúa con được phun chế phẩm hoạt chất ở tỷ lệ áp dụng đã biết. 1 ngày sau xử lý, các cây được cấy ủ dịch huyền phù bào tử nước của nấm *Pyricularia oryzae*. Các cây sau đó được đặt vào trong nhà kính ở độ ẩm không khí tương đối là 100% và ở nhiệt độ 25°C.

Sự đánh giá được thực hiện sau khi ủ 5 ngày. 0% nghĩa là hiệu suất tương ứng với hiệu suất của đối chứng, trong khi hiệu suất là 100% nghĩa là không có sự nhiễm nào được quan sát thấy.

Trong thử nghiệm này, các hợp chất theo sáng chế bên dưới thể hiện, ở nồng độ hoạt chất là 250 ppm, hiệu suất là 80% hoặc lớn hơn.

Ví dụ, Bảng 1 (hiệu suất tính bằng %):

19 (92%), 20 (92%), 21 (98%), 28 (90%), 29 (95%), 30 (94%), 31 (98%), 34 (95%).

Ví dụ N

Thử nghiệm hoạt tính bảo vệ với nấm *Rhizoctonia* (cây lúa)

Dung môi: 28,5 phần trọng lượng axeton

Chất nhũ hóa: 1,5 phần trọng lượng alkylaryl polyglycol ete

Để tạo ra một chế phẩm thích hợp có hoạt chất, 1 phần trọng lượng hoạt chất được trộn với lượng đã biết của dung môi, và nồng độ được làm loãng bằng nước và lượng đã biết của chất nhũ hóa tới nồng độ mong muốn.

Để thử nghiệm hoạt tính bảo vệ, các cây lúa con được phun chế phẩm hoạt chất ở tỷ lệ áp dụng đã biết. 1 ngày sau xử lý, các cây được cấy ủ sợi *Rhizoctonia solani*. Các cây sau đó được đặt vào trong nhà kính ở độ ẩm không khí tương đối là 100% và ở nhiệt độ 25°C.

Sự đánh giá được thực hiện sau khi ủ 4 ngày. 0% nghĩa là hiệu suất tương ứng với hiệu suất của đối chứng, trong khi hiệu suất là 100% nghĩa là không có sự nhiễm nào được quan sát thấy.

Trong thử nghiệm này, các hợp chất theo sáng chế bên dưới thể hiện, ở nồng độ hoạt chất là 250 ppm, hiệu suất là 80% hoặc lớn hơn.

Ví dụ, Bảng 1 (hiệu suất tính bằng %):

19 (100%), 20 (100%), 21 (100%), 28 (100%), 29 (100%), 30 (100%), 31 (100%), 34 (85%).

Ví dụ O

Thử nghiệm hoạt tính bảo vệ với nấm *Cochliobolus* (cây lúa)

Dung môi: 28,5 phần trọng lượng axeton

Chất nhũ hóa: 1,5 phần trọng lượng alkylaryl polyglycol etc

Để tạo ra một chế phẩm thích hợp có hoạt chất, 1 phần trọng lượng hoạt chất được trộn với lượng đã biết của dung môi, và nồng độ được làm loãng bằng nước và lượng đã biết của chất nhũ hóa tới nồng độ mong muốn.

Để thử nghiệm hoạt tính bảo vệ, các cây lúa con được phun chế phẩm hoạt chất ở tỷ lệ áp dụng đã biết. 1 ngày sau xử lý, các cây được cấy ủ dịch huyền phù bào tử nước của nấm *Cochliobolus miyabeanus*. Các cây sau đó được đặt vào trong nhà kính ở độ ẩm không khí tương đối là 100% và ở nhiệt độ 25°C.

Sự đánh giá được thực hiện sau khi ủ 4 ngày. 0% nghĩa là hiệu suất tương ứng với hiệu suất của đối chứng, trong khi hiệu suất là 100% nghĩa là không có sự nhiễm nào được quan sát thấy.

Trong thử nghiệm này, các hợp chất theo sáng chế bên dưới thể hiện, ở nồng độ hoạt chất là 250 ppm, hiệu suất là 80% hoặc lớn hơn.

Ví dụ, Bảng 1 (hiệu suất tính bằng %):

19 (96%), 20 (96%), 21 (96%), 28 (95%), 29 (95%), 30 (96%), 31 (95%), 34 (90%).

Ví dụ P

Thử nghiệm hoạt tính bảo vệ với nấm *Gibberella* (cây lúa)

Dung môi: 28,5 phần trọng lượng axeton

Chất nhũ hóa: 1,5 phần trọng lượng alkylaryl polyglycol ete

Để tạo ra một chế phẩm thích hợp có hoạt chất, 1 phần trọng lượng hoạt chất được trộn với lượng đã biết của dung môi, và nồng độ được làm loãng bằng nước và lượng đã biết của chất nhũ hóa tới nồng độ mong muốn.

Để thử nghiệm hoạt tính bảo vệ, các cây lúa con được phun chế phẩm hoạt chất ở tỷ lệ áp dụng đã biết. 1 ngày sau xử lý, các cây được cấy ủ dịch huyền phù bào tử nước của nấm *Gibberella zeae*. Các cây sau đó được đặt vào trong nhà kính ở độ ẩm không khí tương đối 100% và 25°C.

Sự đánh giá được thực hiện sau khi ủ 5 ngày. 0% nghĩa là hiệu suất tương ứng với hiệu suất của đối chứng, trong khi hiệu suất là 100% nghĩa là không có sự nhiễm nào được quan sát thấy.

Trong thử nghiệm này, các hợp chất theo sáng chế bên dưới thể hiện, ở nồng độ hoạt chất là 250 ppm, hiệu suất là 80% hoặc lớn hơn.

Ví dụ, Bảng 1 (hiệu suất tính bằng %):

28 (85%), 29 (80%), 31 (80%), 34 (80%).

Ví dụ Q

Thử nghiệm với nấm *Phakopsora* (cây đậu tương) / bảo vệ

Dung môi: 28,5 phần trọng lượng axeton

Chất nhũ hóa: 1,5 phần trọng lượng alkylaryl polyglycol ete

Để tạo ra một chế phẩm thích hợp có hoạt chất, 1 phần trọng lượng hoạt chất được trộn với lượng đã biết của dung môi, và nồng độ được làm loãng bằng nước và lượng đã biết của chất nhũ hóa tới nồng độ mong muốn.

Để thử nghiệm hoạt tính bảo vệ, các cây con được phun chế phẩm hoạt chất ở tỷ lệ áp dụng đã biết. 1 ngày sau xử lý, các cây được cấy ủ dịch huyền phù bào tử nước

của nấm *Phakopsora pachyrhizi*. Các cây sau đó được đặt vào trong nhà kính ở độ ẩm không khí tương đối là 80% và ở nhiệt độ 20°C.

Sự đánh giá được thực hiện sau 1 ngày cấy ủ. 0% nghĩa là hiệu suất tương ứng với hiệu suất của đối chứng, trong khi hiệu suất là 100% nghĩa là không có sự nhiễm nào được quan sát thấy.

Trong thử nghiệm này, các hợp chất theo sáng chế bên dưới thể hiện, ở nồng độ hoạt chất là 250 ppm, hiệu suất là 80% hoặc lớn hơn.

Ví dụ, Bảng 1 (hiệu suất tính bằng %):

5 (80%).

Ví dụ R

Sự tạo ra DON/axetyl-DON bởi nấm *Fusarium graminearum*

Các hợp chất được thử nghiệm trong các đĩa vi chuẩn độ trong môi trường chất lỏng có DON (1 g $(\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4$, 0,2 g $\text{MgSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$, 3 g KH_2PO_4 , 10 g glyxerol, 5 g NaCl và 40 g sucroza mỗi lít) và DMSO (0,5%). Sự cấy ghép được thực hiện sử dụng dịch huyền phù bào tử đặc của nấm *Fusarium graminearum* ở nồng độ cuối là 2000 bào tử/ml.

Tắm được ủ ở nhiệt độ 28°C và độ ẩm không khí cao trong thời gian 7 ngày.

Ở ngày bắt đầu và sau 3 ngày, OD được đo ở OD620 (lặp đi lặp lại các phép đo: 3 x 3 lần đo trên mỗi giếng) để tính toán quá trình ức chế sự phát triển.

Sau khoảng thời gian 7 ngày, 1 thể tích của hỗn hợp 84/16 axetonitril/nước được bổ sung, và mẫu của môi trường chất lỏng từ mỗi giếng sau đó được bỏ ra và được làm loãng ở tỷ lệ 1:100 trong axetonitril độ mạnh 10%. Các tỷ lệ của DON và axetyl-DON của các mẫu được phân tích bằng HPLC-MS/MS, và các giá trị đo được được sử dụng để tính toán quá trình ức chế sự tạo ra DON/AcDON so với đối chứng không có hoạt chất.

Các phép đo HPLC-MS/MS được thực hiện sử dụng các thông số sau đây:

Sự ion hóa: ESI âm

Điện thế phun ion: -4500 V

Nhiệt độ khí phun: 500°C

Điện thế khử cùm: -40 V

Năng lượng va chạm: -22eV

Khí va chạm: N₂

Vết NMR: 355,0 > 264,9;

cột HPLC: Nước Atlantis T3 (được gắn C18 ba chức năng, được làm kín)

cỡ hạt: 3µm

các kích cỡ cột: 50 x 2 mm

nhiệt độ: 40°C

Dung môi A: nước/2,5 mM NH₄OAc + 0,05% CH₃COOH (v/v)

Dung môi B: metanol/2,5 mM NH₄OAc + 0,05% CH₃COOH (v/v)

Lưu lượng: 400µl/phút

Thể tích phun: 11µl

Gradient:

Thời gian [phút]	A%	B%
0	100	0
0,75	100	0
1,5	5	95
4	5	95
5	100	0
10	100	0

Các ví dụ, ức chế DON

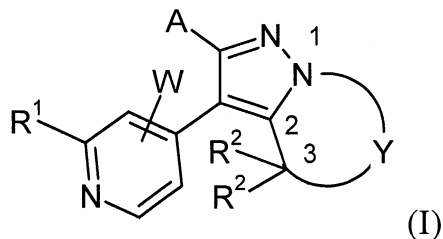
Các ví dụ, dưới đây đã thể hiện hoạt tính > 80% để ức chế sự tạo ra DON/AcDON ở nồng độ 50µM. Ức chế sự phát triển của nấm *Fusarium graminearum* của các ví dụ, đã đề cập thay đổi trong khoảng từ 0 tới 100% ở nồng độ 50µM.

Ví dụ số	% ức chế DON/AcDON ở nồng độ 50 μ M	% ức chế sự phát triển của nấm ở nồng độ 50 μ M
2	100	99
3	94	30
5	99	100
6	99	70
7	99	100
8	99	100
9	99	100
10	100	87
11	100	92
13	96	17
14	93	24
15	99	88
16	93	0
19	100	100
20	100	95
21	100	97
22	100	97
23	100	97
24	99	74
25	99	92
26	98	57
27	99	56
28	99	100
29	99	100
30	99	88
31	99	97
32	99	94
33	99	100
34	99	98
36	99	94
37	99	93
38	99	89
41	98	100
42	98	100
43	98	100
44	100	61
45	100	21
46	100	52
47	100	76
50	92	57
51	100	41
52	99	19

Ví dụ số	% ức chế DON/AcDON ở nồng độ 50 μ M	% ức chế sự phát triển của nấm ở nồng độ 50 μ M
54	100	0
56	92	27
58	100	100
59	100	100
60	100	100
61	100	0
62	100	35
63	100	100
64	100	100
65	100	100
66	98	50
67	100	60

YÊU CẦU BẢO HỘ

1. Hợp chất có công thức (I)



trong đó các ký hiệu được định nghĩa như sau:

Y cùng với nguyên tử nitơ liên kề “1” và hai nguyên tử cacbon “2” và “3” tạo thành nhân dị vòng không thơm có 5 đến 7 phần tử, mà tiếp đó các phần tử của nhân này được chọn từ nhóm bao gồm $C(R^2)_2$, O, S, NR^3 , $C(R^2)=C(R^2)$, $C(R^2)=N$, $N=N$, $C(=O)$, $C(=S)$, $C(=NR^4)$, $S(=O)_p(=NR^4)_q$ và $SiR^{5a}R^{5b}$;

R^2 độc lập là một trong số H, halogen, xyano, hydroxyl, -CHO, -NHCHO, -N₃, -N=C=O, -N=C=S, -SH, -C(=O)NH₂, -C(=O)NHCN, -C(=O)OR⁶, -C(=O)NHOR^{6a}, C₁-C₅-alkyl, C₂-C₅-alkenyl, C₂-C₅-alkynyl, C₃-C₆-xycloalkyl, C₃-C₆-haloxycloalkyl, C₃-C₆-xycloalkenyl, C₁-C₅-haloalkyl, C₁-C₅-alkoxy, C₁-C₅-haloalkoxy, C₃-C₆-xycloalkoxy, C₂-C₅-alkenyloxy, C₃-C₅-haloalkenyloxy, C₂-C₅-alkynyloxy, C₂-C₅-alkylcarbonyl, C₂-C₅-alkylcarbonyloxy, C₂-C₅-haloalkylcarbonyloxy, C₃-C₅-alkoxycarbonylalkoxy, C₁-C₅-alkylthio, C₁-C₅-haloalkylthio, C₃-C₆-xycloalkylthio, C₂-C₅-alkyl(thiocarbonyl), C₂-C₅-alkylthio(thiocarbonyl), C₁-C₅-alkylsulphinyl, C₁-C₅-haloalkylsulphinyl, C₃-C₆-xycloalkylsulphinyl, C₁-C₅-alkylsulphonyl, C₁-C₅-haloalkylsulphonyl, C₃-C₆-xycloalkylsulphonyl, C₃-C₅-trialkylsilyl, C₃-C₅-halotrialkylsilyl, C₁-C₅-alkylamino, C₂-C₅-haloalkylamino, C₃-C₆-xycloalkylamino, C₂-C₅-dialkylamino hoặc C₃-C₅-halodialkylamino;

R^3 là H, -CN, -C(=O)NH₂, -C(=O)NHCN, -CHO, -NHCHO, -C(=O)OR⁶, -C(=O)NHOR^{6a}, hydroxyl, C₁-C₅-alkyl, C₂-C₅-alkenyl, C₂-C₅-alkynyl, C₃-C₆-xycloalkyl, C₃-C₆-haloxycloalkyl, C₃-C₆-xycloalkenyl, C₄-C₁₀-xycloalkylalkyl, C₄-C₇-alkylxycloalkyl, C₅-C₇-alkylxycloalkylalkyl, C₂-C₅-haloalkyl, C₁-C₄-alkylcarbonyl, C₁-C₄-haloalkylcarbonyl, C₃-C₇-xycloalkylcarbonyl, C₁-C₆-alkoxycarbonyl, C₁-C₄-

haloalkoxycarbonyl, C₃-C₆-xycloalkoxycarbonyl, C₂-C₆-alkoxyalkylcarbonyl, C₂-C₆-alkoxyalkoxycarbonyl, C₁-C₆-(alkylthio)carbonyl, C₁-C₆-alkoxy(thiocarbonyl), C₁-C₆-alkyl(thiocarbonyl), C₁-C₆-alkylthio(thiocarbonyl), C₁-C₆-alkylaminocarbonyl, C₃-C₆-xycloalkylaminocarbonyl, C₂-C₆-dialkylaminocarbonyl, C₁-C₆-alkylamino(thiocarbonyl), C₂-C₆-dialkylamino(thiocarbonyl), C₂-C₆-alkoxy(alkyl)aminocarbonyl, C₁-C₅-alkoxy, C₁-C₅-haloalkoxy, C₁-C₅-alkylthio, C₁-C₅-haloalkylthio, C₃-C₆-xycloalkylthio, C₁-C₅-alkylaminosulphonyl, C₃-C₅-trialkylsilyl hoặc C₃-C₅-halotrialkylsilyl;

R⁴ là một trong số H, xyano, amino, hydroxyl, C₁-C₆-alkyl, C₃-C₆-xycloalkyl, C₁-C₄-alkylcarbonyl, C₁-C₄-haloalkylcarbonyl, C₁-C₄-alkoxy, phenyl hoặc benzoyl;

R^{5a}, R^{5b} độc lập với nhau là C₁-C₄-alkyl, C₂-C₅-alkenyl, C₂-C₅-alkynyl, C₃-C₅-xycloalkyl, C₃-C₆-haloxycloalkyl, C₄-C₇-xycloalkylalkyl, C₄-C₇-alkylxycloalkyl, C₅-C₇-alkylxycloalkylalkyl, C₁-C₅-haloalkyl, C₁-C₅-alkoxy hoặc C₁-C₅-haloalkoxy;

R⁶ là một trong số H, C₁-C₆-alkyl, C₁-C₆-haloalkyl, C₃-C₆-xycloalkyl, C₄-C₇-xycloalkylalkyl, C₄-C₇-alkylxycloalkyl hoặc benzyl;

R^{6a} là một trong số C₁-C₆-alkyl, C₁-C₆-haloalkyl, C₃-C₆-xycloalkyl, C₄-C₇-xycloalkylalkyl hoặc C₄-C₇-alkylxycloalkyl;

A là vòng phenyl có thể tùy ý được thế một hoặc nhiều lần bằng R⁷ hoặc là vòng thiophenyl có thể tùy ý được thế một hoặc nhiều lần bằng R⁸;

R⁷ độc lập với nhau là halogen, C₁-C₆-alkyl, C₂-C₆-alkenyl, C₂-C₆-alkynyl, C₃-C₆-xycloalkyl, C₃-C₆-haloxycloalkyl, C₄-C₇-alkylxycloalkyl, C₁-C₆-haloalkyl, C₂-C₆-haloalkenyl, xyano, nitro, C₁-C₆-alkoxy, C₁-C₆-haloalkoxy, C₁-C₆-alkylthio, C₁-C₆-alkylsulphinyl, C₁-C₆-alkylsulphonyl, C₁-C₆-haloalkylthio, C₁-C₆-haloalkylsulphinyl, C₁-C₆-haloalkylsulphonyl, C₁-C₆-alkylamino, C₂-C₆-dialkylamino, C₁-C₆-alkylcarbonyl, C₁-C₆-alkoxycarbonyl, C₁-C₆-alkylaminocarbonyl, C₂-C₆-dialkylaminocarbonyl hoặc C₃-C₆-trialkylsilyl;

R^8 độc lập với nhau là halogen, xyano, C_1 - C_3 -alkyl; C_1 - C_3 -alkoxy, C_1 - C_3 -haloalkyl, C_1 - C_3 -haloalkoxy;

R^1 là H, halogen, xyano, hydroxyl, C_1 - C_4 -alkyl, $CONR^{9a}R^{9b}$, $COOH$, $COOR^{12}$, $-NR^{9a}R^{9b}$, $-N(R^{9b})COR^{9a}$, $-N(R^{9b})CSR^{9a}$, $-N(R^{9b})COOR^{12}$, $-N(R^{9b})SO_2R^{12}$, $-NR^{10}$, $NR^{11a}R^{11b}$, $-S(O)_mR^{12}$, $-OR^{12}$, $-N=CR^{13a}R^{13b}$ hoặc $-NR^{10}N=CR^{14a}R^{14b}$;

mỗi gốc R^{9a} và R^{11a} độc lập với nhau là H, C_1 - C_6 -alkyl, C_2 - C_6 -alkenyl, C_2 - C_6 -alkynyl, C_1 - C_6 -haloalkyl, C_2 - C_6 -haloalkenyl, C_2 - C_6 -haloalkynyl, C_2 - C_6 -alkoxyalkyl, C_3 - C_6 -alkoxyalkoxyalkyl, C_3 - C_6 -alkoxyalkenyl, C_3 - C_6 -alkoxyalkynyl, C_3 - C_6 -dialkoxyalkyl, C_4 - C_{10} -trialkoxyalkyl, C_2 - C_6 -haloalkoxyalkyl, C_2 - C_6 -alkoxyhaloalkyl, C_2 - C_6 -haloalkoxyhaloalkyl, C_1 - C_6 -hydroxyalkyl, C_1 - C_{10} -xyanoalkyl, C_2 - C_6 -alkylthioalkyl, C_2 - C_6 -alkylsulphinylalkyl, C_3 - C_6 -alkylaminoalkyl, C_3 - C_6 -haloalkylaminoalkyl, C_5 - C_{10} -xycloalkylaminoalkyl, C_4 - C_{10} -dialkylaminoalkyl, C_4 - C_{10} -halodialkylaminoalkyl, C_5 - C_{10} -xycloalkyl(alkyl)aminoalkyl hoặc $-(CR^{15a}R^{15b})_mR^{16}$;

mỗi R^{9b} và R^{11b} độc lập với nhau là H, C_1 - C_6 -alkyl, C_2 - C_6 -alkenyl, C_2 - C_6 -alkynyl, C_1 - C_6 -haloalkyl, C_2 - C_6 -haloalkenyl, C_2 - C_6 -haloalkynyl, C_2 - C_6 -alkoxyalkyl, C_3 - C_6 -alkoxyalkoxyalkyl, C_3 - C_6 -alkoxyalkenyl, C_3 - C_6 -alkoxyalkynyl, C_3 - C_6 -dialkoxyalkyl, C_4 - C_{10} -trialkoxyalkyl, C_2 - C_6 -haloalkoxyalkyl, C_2 - C_6 -alkoxyhaloalkyl, C_2 - C_6 -haloalkoxyhaloalkyl, C_1 - C_6 -hydroxyalkyl, C_1 - C_{10} -xyanoalkyl, C_2 - C_6 -alkylthioalkyl, C_2 - C_6 -alkylsulphinylalkyl, C_3 - C_6 -alkylaminoalkyl, C_3 - C_6 -haloalkylaminoalkyl, C_5 - C_{10} -xycloalkylaminoalkyl, C_4 - C_{10} -dialkylaminoalkyl, C_4 - C_{10} -halodialkylaminoalkyl, C_5 - C_{10} -xycloalkyl(alkyl)aminoalkyl hoặc $-(CR^{15a}R^{15b})_mR^{16}$;

hoặc

mỗi gốc R^{9a} và R^{9b} hoặc R^{11a} và R^{11b} cùng với nguyên tử nitơ hoặc nhóm (NCO) hoặc nhóm (NCS) mà chúng gắn vào để tạo thành vòng có 3 đến 6 phần tử mà vòng này có thể tùy ý còn gồm có các phần tử vòng được chọn từ nhóm bao gồm O, NR^3 , $C(=O)$, $C(=S)$, $C(=NR^4)$, $SiR^{5a}R^{5b}$ và $S(=O)_p(=NR^4)_q$ và vòng này có thể tùy ý được thế ở các nguyên tử cacbon của vòng bằng 1 đến 4 phần tử thế được chọn từ nhóm bao gồm halogen, -CN, C_1 - C_2 -alkyl và C_1 - C_2 -alkoxy;

R^{12} là một trong số C_1 - C_{10} -alkyl, C_2 - C_{10} -alkenyl, C_2 - C_{10} -alkynyl, C_1 - C_{10} -haloalkyl, C_2 - C_{10} -haloalkenyl, C_2 - C_{10} -haloalkynyl, C_2 - C_{10} -alkoxyalkyl, C_3 - C_{10} -alkoxyalkoxyalkyl, C_3 - C_{10} -alkoxyalkenyl, C_3 - C_{10} -alkoxyalkynyl, C_3 - C_{10} -dialkoxyalkyl, C_4 - C_{10} -trialkoxyalkyl, C_2 - C_{10} -haloalkoxyalkyl, C_2 - C_{10} -alkoxyhaloalkyl, C_2 - C_{10} -haloalkoxyhaloalkyl, C_2 - C_{10} -hydroxyalkyl, C_2 - C_{10} -xyanoalkyl, C_2 - C_{10} -alkylthioalkyl, C_2 - C_{10} -alkylsulphinylalkyl, C_3 - C_{10} -alkylaminoalkyl, C_3 - C_{10} -haloalkylaminoalkyl, C_5 - C_{10} -xycloalkylaminoalkyl, C_4 - C_{10} -dialkylaminoalkyl, C_4 - C_{10} -halodialkylaminoalkyl, C_6 - C_{10} -xycloalkyl(alkyl)-aminoalkyl hoặc $-(CR^{15a}R^{15b})_mR^{16}$;

R^{15a} , R^{15b} độc lập với nhau là H, halogen, C_1 - C_5 -alkyl, C_1 - C_5 -haloalkyl hoặc C_1 - C_5 -alkoxy;

hoặc

cặp gốc đôi R^{15a} và R^{15b} cùng với nguyên tử cacbon mà cặp này được gắn vào tạo thành $C(=O)$ hoặc vòng C_3 - C_6 -xycloalkyl hoặc vòng C_3 - C_6 -haloxycloalkyl;

R^{16} là phenyl, C_3 - C_8 -xycloalkyl, C_3 - C_8 -xycloalkenyl, nhân dị vòng thơm có 5 hoặc 6 phần tử hoặc naphtalenyl hoặc hệ nhân hai vòng dị vòng thơm có 8, 9 hoặc 10 phần tử; hoặc nhân dị vòng không thơm có 5 hoặc 6 phần tử tùy ý chứa các phần tử của vòng được chọn từ nhóm bao gồm $C(=O)$, $C(=S)$, $C(=NR^4)$, $SiR^{5a}R^{5b}$ và $S(=O)_p(=NR^4)_q$; trong đó mỗi nhân hoặc mỗi hệ nhân có thể tùy ý được thế ở các nguyên tử cacbon của vòng bởi 5 phần tử thế độc lập với nhau được chọn từ R^{17} ;

R^{17} độc lập là một trong số halogen, C_1 - C_6 -alkyl, C_2 - C_6 -alkenyl, C_2 - C_6 -alkynyl, C_3 - C_6 -xycloalkyl, C_4 - C_{10} -alkylxycloalkyl, C_3 - C_6 -haloxycloalkyl, C_1 - C_6 -haloalkyl, C_2 - C_6 -haloalkenyl, xyano, nitro, C_1 - C_6 -alkoxy, C_3 - C_8 -xycloalkoxy, C_3 - C_8 -haloxycloalkoxy, C_1 - C_6 -haloalkoxy, C_1 - C_6 -alkylthio, C_1 - C_6 -alkylsulphinyl, C_1 - C_6 -alkylsulphonyl, C_1 - C_6 -haloalkylthio, C_1 - C_6 -haloalkylsulphinyl, C_1 - C_6 -haloalkylsulphonyl, C_1 - C_6 -alkylamino, C_1 - C_6 -dialkylamino, C_1 - C_6 -alkylcarbonyl, C_1 - C_6 -alkoxycarbonyl, C_1 - C_6 -alkylaminocarbonyl, C_3 - C_6 -dialkylaminocarbonyl, C_3 - C_6 -trialkylsilyl, phenyl, naphtalenyl hoặc nhân dị vòng thơm có 5 hoặc 6 phần tử;

m là 0, 1 hoặc 2;

R^{10} là một trong số H, C_1 - C_5 -alkyl, C_2 - C_5 -alkenyl, C_2 - C_5 -alkynyl, C_3 - C_6 -xycloalkyl, C_3 - C_6 -haloxycloalkyl, C_1 - C_5 -haloalkyl, C_2 - C_5 -haloalkenyl, C_2 - C_5 -haloalkynyl, C_2 - C_5 -alkoxyalkyl, C_2 - C_5 -alkylcarbonyl hoặc C_1 - C_5 -alkoxy;

R^{13a} , R^{13b} độc lập với nhau là H, -CN, $-C(=O)OR^{18}$, C_1 - C_6 -alkyl, C_2 - C_6 -alkenyl, C_2 - C_6 -alkynyl, C_3 - C_8 -xycloalkyl, C_3 - C_8 -haloxycloalkyl, C_3 - C_8 -xycloalkenyl, C_4 - C_{10} -xycloalkylalkyl, C_4 - C_{10} -alkylxycloalkyl, C_5 - C_{10} -alkylxycloalkylalkyl, C_1 - C_6 -alkylamino, C_2 - C_6 -dialkylamino, C_2 - C_6 -alkylaminoalkyl, C_2 - C_6 -haloalkylaminoalkyl, C_4 - C_6 -xycloalkylaminoalkyl, C_3 - C_6 -dialkylaminoalkyl, C_3 - C_6 -halodialkylaminoalkyl, C_5 - C_{10} -xycloalkyl(alkyl)aminoalkyl, C_1 - C_6 -alkoxy, C_1 - C_6 -haloalkoxy, C_3 - C_{10} -xycloalkoxy, C_1 - C_{10} -alkylthio, C_1 - C_{10} -haloalkylthio, C_3 - C_{10} -xycloalkylthio, C_3 - C_{10} -trialkylsilyl hoặc C_3 - C_{10} -halotrialkylsilyl, hoặc phenyl hoặc nhân dị vòng thơm có 5 hoặc 6 phần tử, hệ nhân dị vòng thơm hai vòng có 8, 9, hoặc 10 phần tử, hoặc nhân dị vòng không thơm có 5 hoặc 6 phần tử được chọn từ nhóm bao gồm NR^3 , $C(=O)$, $C(=S)$, $C(=NR^4)$, $SiR^{5a}R^{5b}$ và $S(=O)_p(=NR^4)_q$; trong đó mỗi vòng hoặc mỗi hệ vòng có thể tùy ý được thế ở các nguyên tử cacbon của vòng bởi 1 đến 5 phần tử thế được chọn từ nhóm bao gồm C_1 - C_3 -alkyl, halogen, -CN và C_1 - C_3 -alkoxy;

hoặc

R^{13a} và R^{13b} cùng với nguyên tử cacbon mà chúng được gắn với để tạo thành vòng có 3 đến 6 phần tử, trong đó vòng đã nêu có thể tùy ý chứa các phần tử của vòng được chọn từ nhóm bao gồm NR^3 , $C(=O)$, $C(=S)$, $C(=NR^4)$, $SiR^{5a}R^{5b}$ và $S(=O)_p(=NR^4)_q$ và có thể tùy ý được thế ở các nguyên tử cacbon bởi 1 đến 4 phần tử thế được chọn từ nhóm bao gồm C_1 - C_2 -alkyl, halogen, -CN và C_1 - C_2 -alkoxy;

R^{14a} , R^{14b} độc lập với nhau là H, -CN, $-C(=O)OR^{18}$, C_1 - C_6 -alkyl, C_2 - C_6 -alkenyl, C_2 - C_6 -alkynyl, C_3 - C_8 -xycloalkyl, C_3 - C_8 -haloxycloalkyl, C_3 - C_8 -xycloalkenyl, C_4 - C_{10} -xycloalkylalkyl, C_4 - C_{10} -alkylxycloalkyl, C_5 - C_{10} -alkylxycloalkylalkyl, C_1 - C_6 -alkylamino, C_2 - C_6 -dialkylamino, C_2 - C_6 -alkylaminoalkyl, C_2 - C_6 -haloalkylaminoalkyl, C_4 - C_6 -xycloalkylaminoalkyl, C_3 - C_6 -dialkylaminoalkyl, C_3 - C_6 -halodialkylaminoalkyl, C_5 - C_{10} -xycloalkyl(alkyl)aminoalkyl, C_1 - C_6 -alkoxy, C_1 - C_6 -haloalkoxy, C_3 - C_{10} -xycloalkoxy, C_1 - C_{10} -alkylthio, C_1 - C_{10} -haloalkylthio, C_3 - C_{10} -xycloalkylthio, C_3 - C_{10} -trialkylsilyl hoặc C_3 -

C₁₀-halotrialkylsilyl; hoặc phenyl hoặc nhân dị vòng thơm có 5 hoặc 6 phần tử, hệ nhân dị vòng thơm hai vòng có 8, 9, 10 phần tử vòng, hoặc nhân dị vòng không thơm có 5 hoặc 6 phần tử có thể tùy ý chứa các phần tử của vòng được chọn từ nhóm bao gồm NR³, C(=O), C(=S), C(=NR⁴), SiR^{5a}R^{5b} và S(=O)_p(=NR⁴)_q; trong đó mỗi vòng hoặc mỗi hệ vòng có thể tùy ý được thế ở các nguyên tử cacbon của vòng bởi 1 đến 5 phần tử thế được chọn từ nhóm bao gồm C₁-C₃-alkyl, halogen, -CN và C₁-C₃-alkoxy;

hoặc

R^{14a}, R^{14b} cùng với nguyên tử cacbon mà chúng được gắn với để tạo thành vòng có 3 đến 6 phần tử, trong đó vòng đã nêu có thể tùy ý chứa các phần tử của vòng được chọn từ nhóm bao gồm NR³, C(=O), C(=S), C(=NR⁴), SiR^{5a}R^{5b} và S(=O)_p(=NR⁴)_q và có thể tùy ý được thế ở các nguyên tử cacbon bởi 1 đến 4 phần tử thế được chọn từ nhóm bao gồm C₁-C₂-alkyl, halogen, -CN và C₁-C₂-alkoxy;

p, q độc lập với nhau là 0, 1 hoặc 2, miễn là tổng của p và q là 1 hoặc 2;

R¹⁸ là C₁-C₆-alkyl, C₁-C₆-haloalkyl, C₃-C₆-xycloalkyl, C₄-C₇-xycloalkylalkyl hoặc C₄-C₇-alkylxycloalkyl;

W là H

hoặc

W là halogen, CN, C₁-C₄-haloalkyl, C₁-C₄-alkyl, C₁-C₄-alkoxy;

và các muối nông dụng của chúng.

2. Hợp chất có công thức (I) theo điểm 1, trong đó các ký hiệu được định nghĩa như sau:

Y cùng với nguyên tử nitơ liền kề “1” và hai nguyên tử cacbon “2” và “3” tạo thành nhân dị vòng không thơm có 5 đến 7 phần tử, mà tiếp đến các phần tử của nhân được chọn từ nhóm bao gồm C(R²)₂, O, S, SO₂, NR³, -C(R²)=C(R²)-, C(=O) và C(=S);

R² là độc lập là một trong số H, halogen, xyano, hydroxyl, -CHO, -C(=O)OR⁶, -C(=O)NHOR^{6a}, C₁-C₅-alkyl, C₂-C₅-alkenyl, C₂-C₅-alkynyl, C₃-C₆-xycloalkyl, C₃-C₆-

haloxycloalkyl, C₃-C₆-xycloalkenyl, C₁-C₅-haloalkyl, C₁-C₅-alkoxy, C₁-C₅-haloalkoxy, C₃-C₆-xycloalkoxy, C₂-C₅-alkenyloxy, C₃-C₅-haloalkenyloxy, C₂-C₅-alkynyloxy, C₂-C₅-alkylcarbonyl, C₁-C₅-alkylthio, C₁-C₅-haloalkylthio hoặc C₃-C₆-xycloalkylthio;

R³ là H, -CN, -C(=O)NH₂, -C(=O)NHCN, -CHO, -C(=O)OR⁶, -C(=O)NHOR^{6a}, C₁-C₅-alkyl, C₂-C₅-haloalkyl, C₁-C₄-alkylcarbonyl, C₁-C₄-haloalkylcarbonyl, C₃-C₆-xycloalkylcarbonyl, C₁-C₄-alkoxycarbonyl, C₁-C₄-haloalkoxycarbonyl, C₃-C₆-xycloalkoxycarbonyl, C₃-C₆-alkoxyalkylcarbonyl, C₃-C₆-alkoxyalkoxycarbonyl, C₁-C₄-(alkylthio)carbonyl, C₁-C₄-alkoxy(thiocarbonyl), C₁-C₄-alkyl(thiocarbonyl), C₁-C₄-alkylthio(thiocarbonyl), C₁-C₄-alkylaminocarbonyl, C₃-C₆-xycloalkylaminocarbonyl, C₂-C₆-dialkylaminocarbonyl, C₂-C₆-alkylamino(thiocarbonyl), C₂-C₆-dialkylamino(thiocarbonyl) hoặc C₃-C₆-alkoxy(alkyl)aminocarbonyl;

R⁶ là một trong số H hoặc C₁-C₄-alkyl;

R^{6a} là một trong số C₁-C₄-alkyl;

A là vòng phenyl có thể tùy ý được thế một hoặc nhiều lần bằng R⁷ hoặc là vòng thiophenyl có thể tùy ý được thế một hoặc nhiều lần bằng R⁸;

R⁷ độc lập với nhau là halogen, C₁-C₄-alkyl, C₁-C₄-haloalkyl, xyano, C₁-C₄-alkoxy, C₁-C₄-haloalkoxy, C₁-C₄-alkylthio, C₁-C₄-alkylsulphinyl, C₁-C₄-alkylsulphonyl hoặc C₁-C₄-haloalkylthio;

R⁸ độc lập với nhau là halogen, xyano, C₁-C₃-alkyl, C₁-C₃-alkoxy, C₁-C₃-haloalkyl;

R¹ là H, halogen, C₁-C₃-alkyl, xyano, -NR^{9a}R^{9b}, -N(R^{9b})COR^{9a}, -N(R^{9b})CSR^{9a}, -N(R^{9b})COOR¹², -OR¹², -S(O)mR^{6a}, COOR₁₂ hoặc -CONR^{9a}R^{9b};

R^{9a} là một trong số H, C₁-C₆-alkyl, C₂-C₆-alkenyl, C₂-C₆-alkynyl, C₁-C₆-haloalkyl, C₂-C₆-haloalkenyl, C₂-C₆-haloalkynyl, C₂-C₆-alkoxyalkyl, C₃-C₆-alkoxyalkoxyalkyl, C₃-C₆-alkoxyalkenyl, C₃-C₆-alkoxyalkynyl, C₃-C₆-dialkoxylalkyl, C₂-C₆-haloalkoxyalkyl, C₂-C₆-alkoxyhaloalkyl, C₂-C₆-haloalkoxyhaloalkyl, C₁-C₆-hydroxyalkyl, C₁-C₆-xyanoalkyl, C₂-C₆-alkylthioalkyl, C₂-C₆-alkylsulphinylalkyl, C₃-C₆-

alkylaminoalkyl, C₃-C₆-haloalkylaminoalkyl, C₅-C₁₀-xycloalkylaminoalkyl, C₄-C₁₀-dialkylaminoalkyl, C₄-C₁₀-halodialkylaminoalkyl hoặc $-(CR^{15a}R^{15b})_mR^{16}$;

R^{9b} là một trong số H, C₁-C₆-alkyl, C₂-C₆-alkenyl, C₂-C₆-alkynyl, C₁-C₆-haloalkyl hoặc $-(CR^{15a}R^{15b})_mR^{16}$;

hoặc

mỗi gốc R^{9a}, R^{9b} cùng với nguyên tử nitơ hoặc nhóm (NCO) hoặc nhóm (NCS) mà chúng gắn vào tạo thành vòng có 3 đến 6 phần tử mà vòng này có thể tùy ý còn gồm có các phần tử vòng được chọn từ nhóm bao gồm NR³, C(=O), C(=S), O và vòng này có thể tùy ý được thế ở các nguyên tử cacbon của vòng bằng 1 đến 4 phần tử thế được chọn từ nhóm bao gồm halogen, -CN, C₁-C₂-alkyl và C₁-C₂-alkoxy;

R¹² là một trong số C₁-C₆-alkyl, C₂-C₆-alkenyl, C₂-C₆-alkynyl, C₁-C₆-haloalkyl, C₂-C₆-haloalkenyl hoặc $-(CR^{15a}R^{15b})_mR^{16}$;

R^{15a}, R¹⁵ độc lập với nhau là H, halogen hoặc C₁-C₄-alkyl;

R¹⁶ là phenyl, C₃-C₈-xycloalkyl, C₃-C₈-xycloalkenyl, nhân dị vòng thơm có 5 hoặc 6 phần tử hoặc naphtalenyl hoặc hệ nhân dị vòng thơm hai vòng có 8, 9 hoặc 10 phần tử; hoặc nhân dị vòng không thơm có 5 hoặc 6 phần tử tùy ý chứa các phần tử của vòng được chọn từ nhóm bao gồm C(=O), C(=S), C(=NR⁴); trong đó mỗi nhân hoặc mỗi hệ nhân có thể tùy ý được thế ở các nguyên tử cacbon của vòng bởi 3 phần tử thế độc lập với nhau được chọn từ R¹⁷;

R¹⁷ độc lập là một trong số halogen, xyano, C₁-C₆-alkyl, C₂-C₆-alkenyl, C₂-C₆-alkynyl, C₃-C₆-xycloalkyl, C₁-C₆-haloalkyl, C₁-C₆-alkoxy;

m là 0, 1 hoặc 2;

W là H;

hoặc

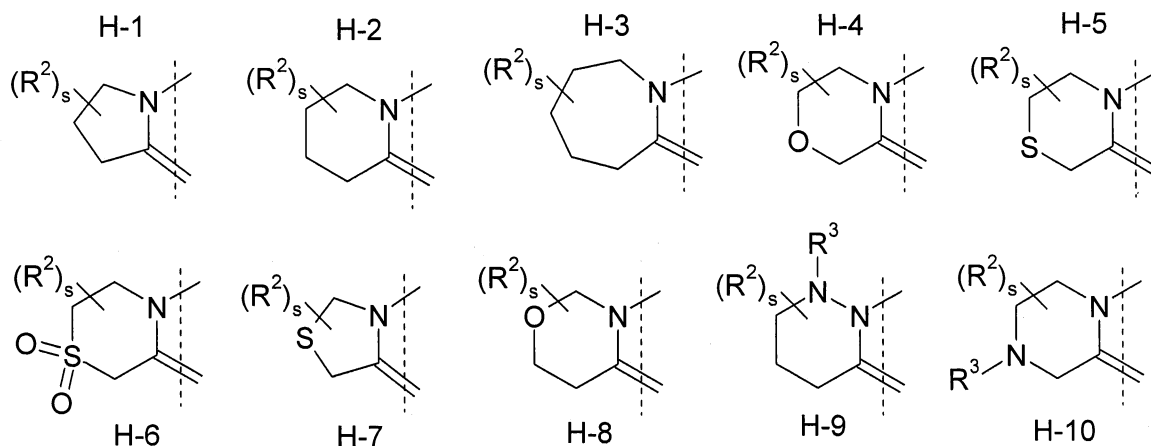
W là flo, clo, CN, CF₃, metyl, etyl, metoxy;

và các muối nông dụng của chúng.

3. Hợp chất có công thức (I) theo điểm 1 hoặc 2, trong đó các ký hiệu được định nghĩa như sau:

Y cùng với nguyên tử nitơ liền kề “1” và hai nguyên tử cacbon “2” và “3” tạo thành nhân dị vòng không thơm có 5 đến 7 phần tử được chọn từ nhóm bao gồm: H-1, H-2, H-3, H-4, H-5, H-6, H-7, H-8, H-9 và H-10 được thể hiện trong sơ đồ 1, trong đó s là số có giá trị từ 0 tới 4;

Sơ đồ 1



R^2 độc lập là một trong số H, F, Cl, Br, I, xyano, hydroxyl, $-CHO$, $-C(=O)OR^6$, metyl, etyl, isopropyl, n-propyl, triflometyl, diflometyl, diclometyl, pentaflöetyl, metoxy, etoxy, n-propoxy, isopropoxy, triflometoxy, diflometoxy hoặc axetyl, propionyl, isobutyryl, 2,2-dimetylpropanoyl;

R^3 là H, $-CHO$, metyl, etyl, isopropyl, n-propyl, axetyl, propionyl, isobutyryl, 2,2-dimetylpropanoyl, trifloaxetyl, difloaxetyl, $CH_3OC(O)$, $CH_3CH_2C(O)$, $(CH_3)_2CHC(O)$ hoặc $CF_3OC(O)$, $CF_2HOC(O)$;

R^6 là một trong số H, metyl, etyl, isopropyl, n-propyl;

A là phenyl hoặc vòng thiophen tùy ý được thế bằng các gốc được chọn từ nhóm bao gồm F, Cl, Br, I, xyano, metyl, etyl, isopropyl, n-propyl, triflometyl, diflometyl, diclometyl, pentaflöetyl hoặc metoxy, etoxy, n-propoxy, isopropoxy;

R^1 là H, F, Cl, Br, I, CH_3 , $S(O)_mMe$, $-NR^{9a}R^{9b}$, $N(R^{9b})COR^{9a}$, $N(R^{9b})COOR^{12}$;

R^{9a} là một trong số H, metyl, etyl, isopropyl, n-propyl, n-butyl, sec-butyl, tert-butyl, isobutyl, n-pentyl, n-hexyl, $-CH=CH_2$, $-CH_2CH=CH_2$, $-CH=CHCH_3$, $-CH_2C\equiv CH$, $-C\equiv CH$, triflometyl, diflometyl, diclometyl, pentaflometyl, metoxymetyl, etoxymetyl, metoxyetyl, tert-butoxymetyl, hydroxymetyl, 1-hydroxyetyl, 2-hydroxypropan-2-yl hoặc $-(CH_2)_mR^{16}$;

R^{9b} là một trong số H, metyl, etyl, isopropyl, n-propyl, n-butyl, sec-butyl, tert-butyl, isobutyl, n-pentyl, n-hexyl, $-CH_2CH=CH_2$, $-CH=CHCH_3$, $-CH_2C\equiv CH$, $-C\equiv CH$;

mỗi gốc R^{9a} , R^{9b} cùng với nguyên tử nitơ mà chúng được gắn với để tạo thành vòng có 5 hoặc 6 phần tử mà vòng này tùy ý được thế ở các nguyên tử cacbon bởi 1 hoặc 2 phần tử thế được chọn từ nhóm bao gồm F, Cl, Br, I, $-CN$ và metyl, etyl;

R^{12} là metyl, etyl, isopropyl, n-propyl, n-butyl, sec-butyl, tert-butyl, isobutyl, $-CH_2CH=CH_2$, $-CH=CHCH_3$, $CH_2C\equiv CH$, $-C\equiv CH$, triflometyl, diflometyl, diclometyl hoặc $-(CH_2)_mR^{16}$;

R^{16} là xyclopropyl, xyclobutyl, xyclopentyl, xyclohexyl, xyclopentenyl, xyclohexenyl, phenyl hoặc thienyl, mỗi chúng có thể tùy ý được thế bởi tới 2 gốc được chọn từ nhóm R^{17} ;

R^{17} độc lập là một trong số F, Cl, Br, I, metyl, etyl, isopropyl, n-propyl, n-butyl, sec-butyl, tert-butyl, isobutyl, triflometyl, diflometyl, diclometyl, metoxy, etoxy hoặc xyano;

m là 0, 1 và 2;

W là H;

hoặc

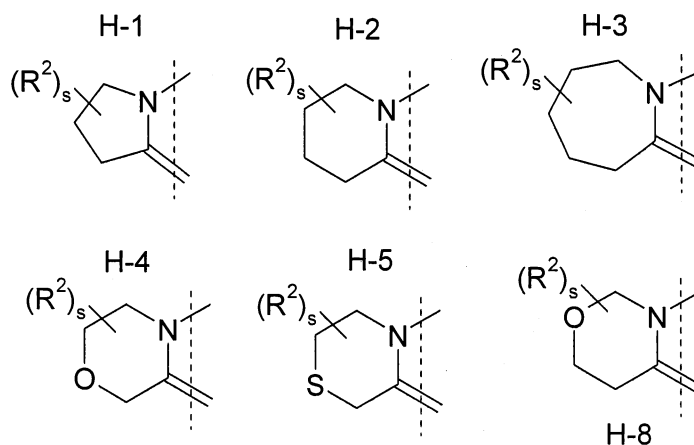
W là flo, clo, CN, CF_3 , metyl, etyl;

và các muối nông dụng của chúng làm các thuốc diệt nấm.

4. Hợp chất có công thức (I) theo điểm bất kỳ trong số các điểm 1 đến 3, trong đó các ký hiệu được định nghĩa như sau:

Y cùng với nguyên tử nitơ liên kề “1” và hai nguyên tử cacbon “2” và “3” tạo thành nhân dị vòng không thơm có 5 đến 7 phần tử được chọn từ nhóm bao gồm: H-1, H-2, H-3, H-4, H-5 và H-8 được thể hiện trong Sơ đồ 2, trong đó n là số có giá trị từ 0 tới 4;

Sơ đồ 2



R^2 độc lập là một trong số H, flo, clo, xyano, CF_3 , metyl hoặc metoxy;

A là phenyl hoặc vòng thiophen tùy ý được thế bởi các gốc được chọn từ nhóm bao gồm F, Cl, xyano, CH_3 , CF_3 ;

R^1 là H, flo, clo, $S(O)_mMe$, $NR^{9a}R^{9b}$, $N(R^{9b})COR^{9a}$, $N(R^{9b})COOR^{12}$;

R^{9a} là một trong số H, metyl, etyl, n-propyl, isopropyl, n-butyl, isobutyl, sec-butyl, tert-butyl, n-pentyl, n-hexyl, metoxymetyl, etoxymetyl, etoxyetyl, metoxyetyl, metoxypropyl, hydroxymetyl, 1-hydroxyetyl, 2-hydroxyetyl, hydroxypropyl hoặc $-(CH_2)_mR^{16}$;

R^{9b} là một trong số H, metyl, etyl, n-propyl, isopropyl, n-butyl, alyl hoặc propargyl;

R^{12} là metyl, etyl, n-propyl, isopropyl, t-butyl, allyl, propargyl hoặc $-(CH_2)_mR^{16}$;

R^{16} là xyclopropyl, xyclopentyl, xyclobutyl, xyclohexyl, thienyl hoặc phenyl, mỗi chúng có thể được thế bởi gốc được chọn từ nhóm R^{17} ;

m là 0, 1 hoặc 2;

R^{17} là metyl, etyl, flo, clo, CF_3 , OMe, xyano;

W là H;

hoặc

W là flo, clo, xyano;

và các muối nông dụng của chúng làm các thuốc diệt nấm.

5. Phương pháp phi điều trị để kiểm soát nấm gây bệnh ở cây và nấm sinh độc tố, đặc trưng ở bước dùng các pyridinylpyrazol hai vòng có công thức (I) theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 tới 4 trên nấm và/hoặc môi trường sống của chúng.

6. Chế phẩm để kiểm soát nấm gây bệnh ở cây và nấm sinh độc tố, đặc trưng ở chỗ chế phẩm này chứa ít nhất một pyridinylpyrazol hai vòng có công thức (I) theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 tới 4, cùng với các chất bổ sung và/hoặc các chất có hoạt tính bề mặt.

7. Quy trình điều chế chế phẩm để kiểm soát nấm có hại gây bệnh ở cây, đặc trưng ở bước trộn pyridinylpyrazol hai vòng có công thức (I) theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 tới 4 với các chất bổ sung và/hoặc các chất có hoạt tính bề mặt.