



(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)



1-0029748

(51)⁷ C07D 211/76; C07D 417/04; C07D
401/04; A01N 57/00; C07D 211/78

(13) B

(21) 1-2016-05187

(22) 30/06/2015

(86) PCT/US2015/038473 30/06/2015

(87) WO2016/003997 07/01/2016

(30) 62/020,140 02/07/2014 US

(45) 25/10/2021 403

(43) 25/04/2017 349A

(73) FMC CORPORATION (US)

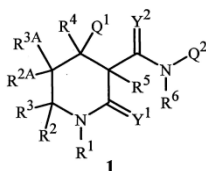
2929 Walnut Street, Philadelphia, PA 19104, United States of America

(72) SATTERFIELD, Andrew Duncan (US); BEREZNAK, James Francis (US);
CAMPBELL, Matthew James (US).

(74) Công ty Luật TNHH Phạm và Liên danh (PHAM & ASSOCIATES)

(54) HỢP CHẤT PIPERIDINON, CHẾ PHẨM DIỆT CỎ, HỖN HỢP DIỆT CỎ VÀ
PHƯƠNG PHÁP NGĂN NGỪA SỰ SINH TRƯỞNG CỦA THỰC VẬT KHÔNG
MONG MUỐN

(57)



Sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức 1, kể cả các chất đồng phân lập thể, *N*-oxit, và muối của chúng, trong đó R¹, R², R³, R^{2A}, R^{3A}, R⁴, R⁵, R⁶, Q¹, Q², Y¹ và Y² là như được xác định trong bản mô tả. Ngoài ra, sáng chế còn đề cập đến chế phẩm và hỗn hợp chứa hợp chất có công thức 1 và phương pháp ngăn ngừa sự sinh trưởng của thực vật không mong muốn bao gồm việc cho thực vật không mong muốn hoặc môi trường của nó tiếp xúc với lượng hữu hiệu của hợp chất hoặc chế phẩm theo sáng chế.

Lĩnh vực kỹ thuật được đề cập

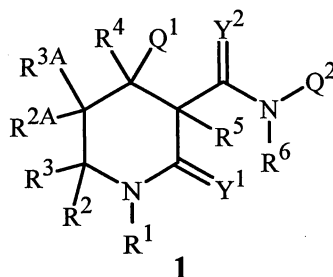
Sáng chế đề cập đến các hợp chất piperidinon nhất định, các N-oxit và các muối của chúng, và các chế phẩm và các phương pháp dùng chúng để phòng trừ thực vật không mong muốn.

Tình trạng kỹ thuật của sáng chế

Việc phòng trừ thực vật không mong muốn là cực kỳ quan trọng để đạt được năng suất thu hoạch cao. Việc phòng trừ chọn lọc đối với quá trình sinh trưởng của cỏ dại, đặc biệt trong việc trồng các cây có ích như lúa, đậu tương, củ cải đường, ngô, khoai tây, lúa mì, lúa mạch, cà chua và các cây trồng trang trại, không kể các cây trồng khác là điều rất được mong muốn. Sự sinh trưởng của cỏ dại không bị kìm hãm khi trồng các cây có ích như vậy có thể làm giảm đáng kể năng suất và do vậy dẫn tới giá thành tăng đối với người tiêu thụ. Việc phòng trừ thực vật không mong muốn trong các vùng không trồng trọt cũng là điều quan trọng. Có nhiều sản phẩm hiện đang được bán trên thị trường nhằm mục đích này, nhưng vẫn cần có các hợp chất mới có hiệu quả hơn, giá thành thấp hơn, ít độc hơn, an toàn với môi trường hoặc có các vị trí tác động khác nhau.

Bản chất kỹ thuật của sáng chế

Sáng chế đề cập đến hợp chất có công thức 1 (bao gồm tất cả các chất đồng phân lập thể), kể cả các N-oxit và muối của nó, các chế phẩm nông dụng chứa chúng và sử dụng chúng làm thuốc diệt cỏ:



trong đó:

Q^1 là vòng phenyl hoặc hệ vòng naphtalenyl, mỗi vòng hoặc hệ vòng này tùy ý được thế bằng tối đa 5 phần tử thế độc lập được chọn từ R^7 ; hoặc vòng dị vòng có 4 tới 7 cạnh hoặc hệ vòng hai vòng có 8 tới 10 cạnh, mỗi vòng hoặc hệ vòng này chứa các thành viên vòng được chọn từ nguyên tử cacbon và 1 tới 4 nguyên tử khác loại độc lập được chọn từ tối đa 2 nguyên tử O, tối đa 2 nguyên tử S và tối đa 4 nguyên tử N, trong đó tối đa 3 thành viên vòng là nguyên tử cacbon độc lập được chọn từ $C(=O)$ và $C(=S)$, và thành viên vòng là nguyên tử lưu huỳnh độc lập được chọn từ $S(=O)_u(=NR^8)_v$, mỗi vòng hoặc hệ vòng này tùy ý được thế bằng tối đa 5 phần tử thế độc lập được chọn từ R^7 trên các thành viên vòng là nguyên tử cacbon và được chọn từ R^9 trên các thành viên vòng là nguyên tử nitơ;

Q^2 là vòng phenyl hoặc hệ vòng naphtalenyl, mỗi vòng hoặc hệ vòng này tùy ý được thế bằng tối đa 5 phần tử thế độc lập được chọn từ R^{10} ; hoặc vòng dị vòng có 4 tới 7 cạnh hoặc hệ vòng hai vòng có 8 tới 10 cạnh, mỗi vòng hoặc hệ vòng này chứa các thành viên vòng được chọn từ nguyên tử cacbon và 1 tới 4 nguyên tử khác loại độc lập được chọn từ tối đa 2 nguyên tử O, tối đa 2 nguyên tử S và tối đa 4 nguyên tử N, trong đó tối đa 3 thành viên vòng là nguyên tử cacbon độc lập được chọn từ $C(=O)$ và $C(=S)$, và thành viên vòng là nguyên tử lưu huỳnh độc lập được chọn từ $S(=O)_u(=NR^8)_v$, mỗi vòng hoặc hệ vòng này tùy ý được thế bằng tối đa 5 phần tử thế độc lập được chọn từ R^{10} trên các thành viên vòng là nguyên tử cacbon và được chọn từ R^{11} trên các thành viên vòng là nguyên tử nitơ;

Y^1 và Y^2 độc lập với nhau là O, S hoặc NR^{12} ;

R^1 là H, hydroxy, amino, C_1-C_6 alkyl, xyano, formyl, C_3-C_8 alkylcarbonylalkyl, $-C(C_1-C_4 \text{ alkyl})=N-O(C_1-C_4 \text{ alkyl})$, $-C(O)NH_2$,

C_1-C_6 haloalkyl, C_2-C_6 alkenyl, C_3-C_6 alkynyl, C_2-C_6 xyanoalkyl,
 C_3-C_6 xycloalkyl, C_4-C_8 xycloalkylalkyl, C_2-C_8 alkoxyalkyl, C_2-C_8
haloalkoxyalkyl, C_2-C_8 haloalkenylalkyl, C_2-C_8 alkylthioalkyl, C_2-
 C_8 alkylsulfinylalkyl, C_2-C_8 alkylsulfonylalkyl, C_2-C_8 alkylcarbonyl,
 C_2-C_8 haloalkylcarbonyl, C_4-C_{10} xycloalkylcarbonyl, C_5-C_{10}
xycloalkylcarbonylalkyl, C_2-C_8 alkoxycarbonyl, C_2-C_8
haloalkoxycarbonyl, C_4-C_{10} cycloalkoxycarbonyl, C_2-C_8
alkylaminocarbonyl, C_3-C_{10} dialkylaminocarbonyl, C_4-C_{10}
xycloalkylaminocarbonyl, C_1-C_6 alkoxy, C_1-C_6 alkylthio, C_1-C_6
haloalkylthio, C_3-C_8 xycloalkylthio, C_1-C_6 alkylsulfinyl, C_1-C_6
haloalkylsulfinyl, C_3-C_8 xycloalkylsulfinyl, C_1-C_6 alkylsulfonyl, C_1-
 C_6 haloalkylsulfonyl, C_3-C_8 xycloalkylsulfonyl, C_1-C_6
alkylaminosulfonyl, C_2-C_8 dialkylaminosulfonyl, C_3-C_{10} trialkylsilyl;
hoặc arylcarbonyl, arylalkenylalkyl, arylcarbonylalkyl hoặc $-CPh=N-$
 $O(C_1-C_4 \text{ alkyl})$, mỗi nhóm này tùy ý được thế trên các thành viên vòng
bằng tối đa 5 phần tử thế độc lập được chọn từ R^{13} ; hoặc G^1 ;
 R^2 và R^3 độc lập với nhau là H, halogen, hydroxy, C_1-C_4 alkyl, C_1-C_4
haloalkyl hoặc C_1-C_4 alkoxy; hoặc
 R^2 và R^3 cùng với nguyên tử cacbon mà chúng gắn vào tạo ra vòng C_3-C_7
xycloalkyl;
 R^{2A} và R^{3A} độc lập với nhau là H, halogen, hydroxy, C_1-C_4 alkyl, C_1-C_4
haloalkyl hoặc C_1-C_4 alkoxy; hoặc
 R^{2A} và R^{3A} cùng với nguyên tử cacbon mà chúng gắn vào tạo ra vòng C_3-
 C_7 xycloalkyl hoặc $C=O$;
 R^4 và R^5 độc lập với nhau là H, halogen, hydroxy, C_1-C_4 alkoxy, C_1-C_4
haloalkyl hoặc C_1-C_4 alkyl;

R^6 là H, hydroxy, amino, C_1 – C_6 alkyl, C_1 – C_6 haloalkyl, C_2 – C_6 alkenyl, C_3 – C_6 alkynyl, C_2 – C_8 alkoxyalkyl, C_2 – C_8 haloalkoxyalkyl, C_2 – C_8 alkylthioalkyl, C_2 – C_8 alkylsulfinylalkyl, C_2 – C_8 alkylsulfonylalkyl, C_2 – C_8 alkylcarbonyl, C_2 – C_8 haloalkylcarbonyl, C_4 – C_{10} xycloalkylcarbonyl, C_2 – C_8 alkoxycarbonyl, C_2 – C_8 haloalkoxycarbonyl, C_4 – C_{10} cycloalkoxycarbonyl, C_2 – C_8 alkylaminocarbonyl, C_3 – C_{10} dialkylaminocarbonyl, C_4 – C_{10} xycloalkylaminocarbonyl, C_1 – C_6 alkoxy, C_1 – C_6 alkylthio, C_1 – C_6 haloalkylthio, C_3 – C_8 xycloalkylthio, C_1 – C_6 alkylsulfinyl, C_1 – C_6 haloalkylsulfinyl, C_3 – C_8 xycloalkylsulfinyl, C_1 – C_6 alkylsulfonyl, C_1 – C_6 haloalkylsulfonyl, C_3 – C_8 xycloalkylsulfonyl, C_1 – C_6 alkylaminosulfonyl, C_2 – C_8 dialkylaminosulfonyl, C_3 – C_{10} trialkylsilyl hoặc G^1 ;

R^6 và Q^2 cùng với nguyên tử nitơ mà chúng liên kết tạo ra hệ vòng hai vòng có 8 tới 10 cạnh, mỗi vòng hoặc hệ vòng này chứa các thành viên vòng được chọn từ nguyên tử cacbon và 1 tới 4 nguyên tử khác loại độc lập được chọn từ tối đa 2 nguyên tử O, tối đa 2 nguyên tử S và tối đa 4 nguyên tử N, trong đó tối đa 3 thành viên vòng là nguyên tử cacbon độc lập được chọn từ $C(=O)$ và $C(=S)$, và thành viên vòng là nguyên tử lưu huỳnh độc lập được chọn từ $S(=O)_u(=NR^8)_v$, mỗi vòng hoặc hệ vòng này tùy ý được thế bằng tối đa 5 phần tử thế độc lập được chọn từ R^{10} trên các thành viên vòng là nguyên tử cacbon và được chọn từ R^{11} trên các thành viên vòng là nguyên tử nitơ;

mỗi R^7 và R^{10} độc lập là halogen, hydroxy, xyano, nitro, amino, C_1 – C_8 alkyl, C_1 – C_8 xyanoalkyl, C_1 – C_8 xyanoalkoxy, C_1 – C_8 haloalkyl, C_1 – C_8 nitroalkyl, C_2 – C_8 alkenyl, C_2 – C_8 haloalkenyl, C_2 – C_8 nitroalkenyl, C_2 – C_8 alkynyl, C_2 – C_8 haloalkynyl, C_3 – C_8 alkoxyalkoxyalkyl, C_2 – C_8

haloalkoxyhaloalkoxy, C₄–C₁₀ xycloalkylalkyl, C₄–C₁₀
 haloxyaloalkylalkyl, C₅–C₁₂ alkylxycloalkylalkyl, C₅–C₁₂
 xycloalkylalkenyl, C₅–C₁₂ xycloalkylalkynyl, C₃–C₈ xycloalkyl, C₃–
 C₈ haloxyaloalkyl, C₄–C₁₀ alkylxycloalkyl, C₆–C₁₂
 xycloalkylxycloalkyl, C₃–C₈ cycloalkenyl, C₃–C₈ halocycloalkenyl,
 C₂–C₈ haloalkoxyalkoxy, C₂–C₈ alkoxyalkoxy, C₂–C₈ alkoxyalkyl,
 C₂–C₈ haloalkoxyalkyl, C₄–C₁₀ xycloalkoxyalkyl, C₃–C₁₀
 alkoxyalkoxyalkyl, C₂–C₈ alkylthioalkyl, C₂–C₈ alkylsulfinylalkyl,
 C₂–C₈ alkylsulfonylalkyl, C₂–C₈ alkylamino, C₂–C₈ dialkylamino,
 C₂–C₈ haloalkylamino, C₂–C₈ alkylaminoalkyl, C₂–C₈
 haloalkylaminoalkyl, C₄–C₁₀ xycloalkylaminoalkyl, C₃–C₁₀
 dialkylaminoalkyl, -CHO, C₂–C₈ alkylcarbonyl, C₂–C₈
 haloalkylcarbonyl, C₄–C₁₀ xycloalkylcarbonyl, -C(=O)OH, C₂–C₈
 alkoxycarbonyl, C₂–C₈ haloalkoxycarbonyl, C₄–C₁₀
 xycloalkoxycarbonyl, C₅–C₁₂ xycloalkylalkoxycarbonyl, -C(=O)NH₂,
 C₂–C₈ alkylaminocarbonyl, C₄–C₁₀ xycloalkylaminocarbonyl, C₃–
 C₁₀ dialkylaminocarbonyl, C₁–C₈ alkoxy, C₁–C₈ haloalkoxy, C₂–C₈
 alkoxyalkoxy, C₂–C₈ alkenyloxy, C₂–C₈ haloalkenyloxy, C₃–C₈
 alkynyloxy, C₃–C₈ haloalkynyloxy, C₃–C₈ xycloalkoxy, C₃–C₈
 haloxyaloalkoxy, C₄–C₁₀ xycloalkylalkoxy, C₃–C₁₀
 alkylcarbonylalkoxy, C₂–C₈ alkylcarbonyloxy, C₂–C₈
 haloalkylcarbonyloxy, C₄–C₁₀ xycloalkylcarbonyloxy, C₁–C₈
 alkylsulfonyloxy, C₁–C₈ haloalkylsulfonyloxy, C₁–C₈ alkylthio, C₁–
 C₈ haloalkylthio, C₃–C₈ xycloalkylthio, C₁–C₈ alkylsulfinyl, C₁–C₈
 haloalkylsulfinyl, C₁–C₈ alkylsulfonyl, C₁–C₈ haloalkylsulfonyl, C₃–
 C₈ xycloalkylsulfonyl, formylamino, C₂–C₈ alkylcarbonylamino, C₂–
 C₈ haloalkylcarbonylamino, C₃–C₈ xycloalkylamino, C₂–C₈

- alkoxycarbonylamino, C₁–C₆ alkylsulfonylamino, C₁–C₆ haloalkylsulfonylamino, -SF₅, -SCN, SO₂NH₂, C₃–C₁₂ trialkylsilyl, C₄–C₁₂ trialkylsilylalkyl hoặc C₄–C₁₂ trialkylsilylalkoxy; hoặc G²;
- mỗi R⁸ độc lập là H, xyano, C₂–C₃ alkylcarbonyl hoặc C₂–C₃ haloalkylcarbonyl;
- mỗi R⁹ và R¹¹ độc lập là xyano, C₁–C₃ alkyl, C₂–C₃ alkenyl, C₂–C₃ alkynyl, C₃–C₆ xycloalkyl, C₂–C₃ alkoxyalkyl, C₁–C₃ alkoxy, C₂–C₃ alkylcarbonyl, C₂–C₃ alkoxycarbonyl, C₂–C₃ alkylaminoalkyl hoặc C₃–C₄ dialkylaminoalkyl;
- mỗi R¹² độc lập là H, xyano, hydroxy, CHO, C₁–C₄ alkyl, C₁–C₄ haloalkyl, C₁–C₄ alkoxy, C₂–C₆ alkylcarbonyl, C₂–C₆ haloalkylcarbonyl, - (C=O)CH₃ hoặc -(C=O)CF₃;
- mỗi G¹ độc lập là phenyl, phenylmetyl (tức là benzyl), pyridinylmetyl, phenylcarbonyl (tức là benzoyl), phenoxy, phenyletynyl, phenylsulfonyl, *p*-metoxybenzyl hoặc vòng dị thơm có 5 hoặc 6 cạnh, mỗi nhóm này tùy ý được thế trên các thành viên vòng bằng tối đa 5 phần tử thế độc lập được chọn từ R¹³;
- mỗi G² độc lập là phenyl, phenylmetyl (tức là benzyl), pyridinylmetyl, phenylcarbonyl (tức là benzoyl), phenoxy, phenyletynyl, phenylsulfonyl hoặc vòng dị thơm có 5 hoặc 6 cạnh, mỗi nhóm này tùy ý được thế trên các thành viên vòng bằng tối đa 5 phần tử thế độc lập được chọn từ R¹⁴;
- mỗi R¹³ và R¹⁴ độc lập là halogen, xyano, hydroxy, amino, nitro, -CHO, -C(=O)OH, -C(=O)NH₂, -SO₂NH₂, C₁–C₆ alkyl, C₁–C₆ haloalkyl, C₂–C₆ alkenyl, C₂–C₆ alkynyl, C₂–C₈ alkylcarbonyl, C₂–C₈ haloalkylcarbonyl, C₂–C₈ alkoxycarbonyl, C₄–C₁₀ xycloalkoxycarbonyl, C₅–C₁₂ xycloalkylalkoxycarbonyl, C₂–C₈

alkylaminocarbonyl, C₃–C₁₀ dialkylaminocarbonyl, C₁–C₆ alkoxy, C₁–C₆ haloalkoxy, C₂–C₈ alkylcarbonyloxy, C₁–C₆ alkylthio, C₁–C₆ haloalkylthio, C₁–C₆ alkylsulfinyl, C₁–C₆ haloalkylsulfinyl, C₁–C₆ alkylsulfonyl, C₁–C₆ haloalkylsulfonyl, C₁–C₆ alkylaminosulfonyl, C₂–C₈ dialkylaminosulfonyl, C₃–C₁₀ trialkylsilyl, C₁–C₆ alkylamino, C₂–C₈ dialkylamino, C₂–C₈ alkylcarbonylamino, C₁–C₆ alkylsulfonylamino, phenyl, pyridinyl hoặc thienyl; và

mỗi u và v độc lập bằng 0, 1 hoặc 2 trong mỗi trường hợp $S(=O)_u(=NR^8)_v$, miễn là tổng của u và v bằng 0, 1 hoặc 2.

Cụ thể hơn, sáng chế đề cập đến các hợp chất có công thức 1 (bao gồm tất cả các chất đồng phân lập thể), *N*-oxit hoặc muối của nó. Sáng chế cũng đề cập đến chế phẩm diệt cỏ chứa hợp chất theo sáng chế (tức là với lượng có tác dụng diệt cỏ) và ít nhất một thành phần được chọn từ nhóm bao gồm chất hoạt động bề mặt, chất pha loãng dạng rắn và chất pha loãng dạng lỏng. Ngoài ra, sáng chế còn đề cập đến phương pháp ngăn ngừa sự sinh trưởng của thực vật không mong muốn bao gồm việc cho thực vật này hoặc môi trường của nó tiếp xúc với lượng có tác dụng diệt cỏ của hợp chất theo sáng chế (ví dụ, dưới dạng chế phẩm được mô tả trong bản mô tả này).

Sáng chế cũng đề cập đến hỗn hợp diệt cỏ chứa (a) hợp chất có công thức 1, *N*-oxit, và các muối của chúng, và (b) ít nhất một hoạt chất bổ sung được chọn từ các hợp chất nêu trong các mục (b1) đến (b16); và các muối của các hợp chất có các công thức (b1) đến (b16), như được mô tả dưới đây.

Mô tả chi tiết sáng chế

Trong bản mô tả này, các thuật ngữ "bao gồm", "chứa", "có", "khác biệt ở chỗ" hoặc các biến thể ngữ pháp bất kỳ của chúng, được dự định bao hàm phương án không mang tính loại trừ, tùy thuộc vào giới hạn được chỉ ra một cách rõ ràng. Ví dụ, chế phẩm, hỗn hợp, quy trình hoặc phương pháp bao gồm nhiều yếu tố thì không nhất thiết giới hạn chỉ ở các yếu tố này mà có thể còn bao gồm các yếu tố

khác không được nêu một cách rõ ràng hoặc vốn có đối với các chế phẩm, hỗn hợp, quy trình hoặc phương pháp như vậy.

Cụm từ “chứa” không bao gồm yếu tố, bước hoặc thành phần bất kỳ không được nêu một cách cụ thể. Nếu trong yêu cầu bảo hộ thì cụm từ này sẽ giới hạn yêu cầu bảo hộ ở các chất ngoài các chất được nêu, trừ các tạp chất thường liên quan đến nó. Nếu cụm từ “chứa” xuất hiện trong mệnh đề của phần nội dung trong yêu cầu bảo hộ, chứ không xuất hiện sau phần mở đầu, thì nó chỉ giới hạn yếu tố nêu trong mệnh đề đó; các yếu tố khác không bị loại trừ toàn bộ ra khỏi yêu cầu bảo hộ.

Cụm từ “về cơ bản chứa” được sử dụng để xác định chế phẩm, phương pháp bao gồm các chất, các bước, các dấu hiệu, các thành phần hoặc các yếu tố, ngoài các chất, các bước, các dấu hiệu, các thành phần hoặc các yếu tố được đề cập trong bản mô tả, với điều kiện các chất, các bước, các dấu hiệu, các thành phần hoặc các yếu tố bổ sung này không ảnh hưởng nhiều đến các đặc điểm đặc trưng cơ bản và mới của đối tượng sáng chế. Thuật ngữ “về cơ bản chứa” ở mức độ giữa “bao gồm” và “chứa”.

Khi các tác giả sáng chế xác định sáng chế hoặc một phần của nó bằng thuật ngữ có kết cấu mở như “bao gồm”, cần phải hiểu rằng (trừ khi có quy định cụ thể) phần mô tả cũng nhằm mô tả sáng chế bằng cách sử dụng các thuật ngữ “về cơ bản chứa” hoặc “chứa”.

Ngoài ra, trừ khi có quy định cụ thể, “hoặc” được dùng để chỉ sự bao hàm và không phải là loại trừ. Ví dụ, điều kiện “A hoặc B” thỏa mãn một trường hợp trong số các trường hợp bất kỳ trong số các trường hợp sau: A đúng (hoặc có mặt) và B sai (hoặc không có mặt), A sai (hoặc không có mặt) và B đúng (hoặc có mặt), và cả A và B đều đúng (hoặc có mặt).

Hơn nữa, các mạo từ không xác định “một” đứng trước phần tử hoặc thành phần theo sáng chế được dự định dùng để chỉ một cách không giới hạn một số trường hợp (tức là biến) của phần tử hoặc thành phần này. Vì vậy “một” phải được hiểu là bao hàm một hoặc ít nhất một, và dạng từ số ít của phần tử hoặc thành phần này cũng bao hàm cả số nhiều trừ khi số này có nghĩa rõ ràng là số ít.

Như được đề cập trong bản mô tả này, thuật ngữ “nảy mầm”, được sử dụng riêng biệt hoặc trong các từ kết hợp nghĩa là cây non phát triển từ phôi của hạt.

Như được đề cập trong bản mô tả này, thuật ngữ “lá rộng” được sử dụng riêng biệt hoặc trong các từ kết hợp như “cỏ đại lá rộng” nghĩa là hai lá mầm hoặc cây hai lá mầm, thuật ngữ này được sử dụng để mô tả nhóm cây hạt kín, khác biệt ở chỗ phôi có hai lá mầm.

Trong bản mô tả này, thuật ngữ “chất alkyl hoá” dùng để chỉ hợp chất hoá học trong đó gốc chứa nguyên tử cacbon được gắn kết qua nguyên tử cacbon với nhóm rời chuyển như halogenua hoặc sulfonat, mà có thể thay thế được bằng cách gắn kết ái nhân với nguyên tử cacbon này. Trừ khi có quy định khác, thuật ngữ “alkyl hóa” không giới hạn gốc chứa nguyên tử cacbon ở alkyl; các gốc chứa nguyên tử cacbon trong chất alkyl hoá bao gồm nhiều gốc thế gắn kết nguyên tử cacbon chỉ định cho R¹.

Trong các phần mô tả nêu trên, thuật ngữ “alkyl”, được sử dụng riêng biệt hoặc trong các từ kết hợp như “alkylthio” hoặc “haloalkyl” bao gồm alkyl mạch nhánh hoặc mạch thẳng như metyl, etyl, *n*-propyl, *i*-propyl, hoặc các chất đồng phân butyl, pentyl hoặc hexyl khác nhau. “Alkenyl” bao gồm alken mạch nhánh hoặc mạch thẳng như etenyl, 1-propenyl, 2-propenyl, và các chất đồng phân khác nhau butenyl, pentenyl và hexenyl. “Alkenyl” cũng bao gồm polyen như 1,2-propadienyl và 2,4-hexadienyl. “Alkynyl” bao gồm alkyn mạch nhánh hoặc mạch thẳng như etynyl, 1-propynyl, 2-propynyl và các chất đồng phân butynyl, pentynyl và hexynyl khác nhau. “Alkynyl” cũng có thể bao gồm các gốc chứa nhiều liên kết ba như 2,5-hexadiynyl. “C=O” là carbonyl nằm trong nhóm R^{2A} và R^{3A} cùng với nguyên tử cacbon mà chúng gắn vào tạo ra vòng C₃–C₇ xycloalkyl hoặc C=O.

“Alkoxy” bao gồm, ví dụ, metoxy, etoxy, *n*-propyloxy, isopropyloxy và các chất đồng phân butoxy, pentoxy và hexyloxy khác nhau. “Alkoxyalkyl” được dùng để chỉ sự thay thế trên alkyl. Ví dụ về “alkoxyalkyl” bao gồm CH₃OCH₂, CH₃OCH₂CH₂, CH₃CH₂OCH₂, CH₃CH₂CH₂CH₂OCH₂ và

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_2$. “Alkoxy carbonyl” được dùng để chỉ sự thay thế trên carbonyl. Ví dụ về “alkoxy carbonyl” bao gồm $\text{CH}_3\text{OC}(=\text{O})$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OC}(=\text{O})$ và $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OC}(=\text{O})$. “Alkoxyalkoxyalkyl” dùng để chỉ ít nhất sự thay thế alkoxy trên the alkoxy moiety of alkoxyalkyl moiety. Ví dụ về “alkoxyalkoxyalkyl” bao gồm $\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{OCH}_2$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{O}(\text{CH}_3)\text{CHOCH}_2$ và $(\text{CH}_3\text{O})_2\text{CHOCH}_2$. “Alkoxyalkoxy” được dùng để chỉ sự thay thế trên alkoxy. “Alkenyloxy” bao gồm các gốc alkenyloxy mạch thẳng hoặc mạch nhánh. Ví dụ về “alkenyloxy” bao gồm $\text{H}_2\text{C}=\text{CHCH}_2\text{O}$, $(\text{CH}_3)_2\text{C}=\text{CHCH}_2\text{O}$, $(\text{CH}_3)\text{CH}=\text{CHCH}_2\text{O}$, $(\text{CH}_3)\text{CH}=\text{C}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{O}$ và $\text{CH}_2=\text{CHCH}_2\text{CH}_2\text{O}$. “Alkynyloxy” bao gồm các gốc alkynyloxy mạch thẳng hoặc mạch nhánh. Ví dụ về “alkynyloxy” bao gồm $\text{HC}\equiv\text{CCH}_2\text{O}$, $\text{CH}_3\text{C}\equiv\text{CCH}_2\text{O}$ và $\text{CH}_3\text{C}\equiv\text{CCH}_2\text{CH}_2\text{O}$. “Alkylthio” bao gồm các gốc alkylthio mạch thẳng hoặc mạch nhánh như methylthio, ethylthio, và các chất đồng phân propylthio, butylthio, pentylthio và hexylthio khác nhau. “Alkylsulfinyl” bao gồm cả hai chất đồng phân đối ảnh của nhóm alkylsulfinyl. Ví dụ về “alkylsulfinyl” bao gồm $\text{CH}_3\text{S}(=\text{O})-$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{S}(=\text{O})-$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{S}(=\text{O})-$, $(\text{CH}_3)_2\text{CHS}(=\text{O})-$ và các chất đồng phân butylsulfinyl, pentylsulfinyl và hexylsulfinyl khác nhau. Ví dụ về “alkylsulfonyl” bao gồm $\text{CH}_3\text{S}(=\text{O})_2-$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{S}(=\text{O})_2-$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{S}(=\text{O})_2-$, $(\text{CH}_3)_2\text{CHS}(=\text{O})_2-$, và các chất đồng phân butylsulfonyl, pentylsulfonyl và hexylsulfonyl khác nhau. “Alkylthioalkyl” chỉ sự thay thế alkylthio trên alkyl. Ví dụ về “alkylthioalkyl” bao gồm CH_3SCH_2 , $\text{CH}_3\text{SCH}_2\text{CH}_2$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{SCH}_2$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{SCH}_2$ và $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{SCH}_2\text{CH}_2$. “Alkylsulfinylalkyl” chỉ sự thay thế alkylsulfinyl trên alkyl. Ví dụ về “alkylsulfinylalkyl” bao gồm $\text{CH}_3\text{S}(=\text{O})\text{CH}_2$, $\text{CH}_3\text{S}(=\text{O})\text{CH}_2\text{CH}_2$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{S}(=\text{O})\text{CH}_2$ và $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{S}(=\text{O})\text{CH}_2\text{CH}_2$. “Alkylsulfonylalkyl” chỉ sự thay thế alkylsulfonyl trên alkyl. Ví dụ về “alkylsulfonylalkyl” bao gồm $\text{CH}_3\text{S}(=\text{O})_2\text{CH}_2$, $\text{CH}_3\text{S}(=\text{O})_2\text{CH}_2\text{CH}_2$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{S}(=\text{O})_2\text{CH}_2$ và $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{S}(=\text{O})_2\text{CH}_2\text{CH}_2$. “Alkylamino”, “dialkylamino”, và các nhóm tương tự, được xác định theo phương pháp tương

tự với ví dụ nêu trên. Ví dụ về “alkylaminoalkyl” bao gồm $\text{CH}_3\text{NHCH}_2-$, $(\text{CH}_3)_2\text{CHNHCH}_2-$ và $\text{CH}_3\text{NHCH}(\text{CH}_3)-$. Ví dụ về “đialkylaminoalkyl” bao gồm $(\text{CH}_3)_2\text{NCH}_2-$, $(\text{CH}_3)_2\text{NC}(\text{CH}_3)\text{H}-$ và $(\text{CH}_3)(\text{CH}_3)\text{NCH}_2-$. Ví dụ về “đialkylaminocarbonyl” bao gồm $(\text{CH}_3)_2\text{NC}(=\text{O})-$. Ví dụ về “đialkylaminosulfonyl” bao gồm $(\text{CH}_3)_2\text{NS}(=\text{O})_2-$. Thuật ngữ “alkoxycarbonylamino” chỉ các gốc alkoxy mạch thẳng hoặc mạch nhánh liên kết với nhóm $\text{C}(=\text{O})$ của nhóm carbonylamino. Ví dụ về “alkoxycarbonylamino” bao gồm $\text{CH}_3\text{OC}(=\text{O})\text{NH}-$ và $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OC}(=\text{O})\text{NH}-$.

“Xycloalkyl” bao gồm, ví dụ, xyclopropyl, xyclobutyl, xyclopentyl và xyclohexyl. Thuật ngữ “alkylxycloalkyl” chỉ sự thay thế alkyl trên gốc xycloalkyl và bao gồm, ví dụ, 1-etylxcyclopropyl, *i*-propylxyclobutyl, 3-metylxcyclopentyl và 4-metylxcyclohexyl. Thuật ngữ “xycloalkylalkyl” chỉ sự thay thế xycloalkyl trên gốc alkyl. Ví dụ về “xycloalkylalkyl” bao gồm xyclopropylmetyl, xyclopentyletyl, và các gốc xycloalkyl khác liên kết với các nhóm alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh. Thuật ngữ “xycloalkoxy” chỉ xycloalkyl được nối qua một nguyên tử oxy như xyclopentylloxy và xyclohexylloxy. “Xycloalkylalkoxy” chỉ gốc xycloalkyl được liên kết qua một nguyên tử oxy. “Xycloalkylamino” chỉ sự thay thế xycloalkyl trên nhóm amino. Ví dụ về “xycloalkylalkoxy” bao gồm xyclopropylmetoxy, xyclopentyletoxy, và các gốc xycloalkyl khác được liên kết với các nhóm alkoxy mạch thẳng hoặc mạch nhánh. “Xycloalkenyl” bao gồm các nhóm như xyclopentenyl và xyclohexenyl cũng như các nhóm có nhiều liên kết đôi như 1,3- và 1,4-xyclohexadienyl.

Thuật ngữ “halogen”, khi được sử dụng riêng biệt hoặc trong các từ kết hợp như “haloalkyl”, hoặc khi được sử dụng trong phần mô tả như “alkyl được thế bằng halogen” bao gồm flo, clo, brom hoặc iot. Ngoài ra, khi được sử dụng trong các từ kết hợp như “haloalkyl”, hoặc khi được sử dụng trong phần mô tả như “alkyl được thế bằng halogen” thì alkyl này có thể được thế một phần hoặc hoàn toàn bằng các nguyên tử halogen có thể là giống nhau hoặc khác nhau. Ví dụ về “haloalkyl” hoặc “alkyl được thế bằng halogen” bao gồm F_3C , ClCH_2 , CF_3CH_2

và CF_3CCl_2 . Thuật ngữ “haloxycloalkyl”, “haloalkoxy”, “haloalkylthio”, “haloalkenyl”, “haloalkynyl”, “haloalkenyloxy”, “haloalkylcarbonylamino”, “haloalkylsulfonylamino”, “haloalkylsulfonyloxy”, “haloalkoxyalkyl”, “haloalkylcarbonyloxy”, “haloalkylaminoalkyl” và các thuật ngữ tương tự, được xác định theo phương pháp tương tự với thuật ngữ “haloalkyl”. Ví dụ về “haloalkoxy” bao gồm $\text{CF}_3\text{O}-$, $\text{CCl}_3\text{CH}_2\text{O}-$, $\text{HCF}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O}-$ và $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{O}-$. Ví dụ về “haloalkylthio” bao gồm $\text{CCl}_3\text{S}-$, $\text{CF}_3\text{S}-$, $\text{CCl}_3\text{CH}_2\text{S}-$ và $\text{ClCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{S}-$. Ví dụ về “haloalkylsulfinyl” bao gồm $\text{CF}_3\text{S}(=\text{O})-$, $\text{CCl}_3\text{S}(=\text{O})-$, $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{S}(=\text{O})-$ và $\text{CF}_3\text{CF}_2\text{S}(=\text{O})-$. Ví dụ về “haloalkylsulfonyl” bao gồm $\text{CF}_3\text{S}(=\text{O})_2-$, $\text{CCl}_3\text{S}(=\text{O})_2-$, $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{S}(=\text{O})_2-$ và $\text{CF}_3\text{CF}_2\text{S}(=\text{O})_2-$. Ví dụ về “haloalkenyl” bao gồm $(\text{Cl})_2\text{C}=\text{CHCH}_2$ và $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{CH}=\text{CHCH}_2$. Ví dụ về “haloalkenyloxy” bao gồm $(\text{Cl})_2\text{C}=\text{CHCH}_2\text{O}-$ và $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{CH}=\text{CHCH}_2\text{O}-$. Ví dụ về “haloalkynyl” bao gồm $\text{HC}\equiv\text{CCHCl}-$, $\text{CF}_3\text{C}\equiv\text{C}-$, $\text{CCl}_3\text{C}\equiv\text{C}-$ và $\text{FCH}_2\text{C}\equiv\text{CCH}_2-$. Ví dụ về “haloalkoxyalkyl” bao gồm CF_3OCH_2 , $\text{ClCH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_2$, $\text{Cl}_3\text{CCH}_2\text{OCH}_2$ cũng như các chất dẫn xuất alkyl mạch nhánh. Ví dụ về “haloalkoxycarbonyl” bao gồm $\text{CF}_3\text{OC}(=\text{O})-$, $\text{ClCH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_2-$, $\text{Cl}_3\text{CCH}_2\text{OCH}_2\text{OC}(=\text{O})-$ cũng như các chất dẫn xuất alkyl mạch nhánh.

“Alkylcarbonyl” chỉ các gốc alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh liên kết với gốc $\text{C}(=\text{O})$. Ví dụ về “alkylcarbonyl” bao gồm $\text{CH}_3\text{C}(=\text{O})-$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{C}(=\text{O})-$ và $(\text{CH}_3)_2\text{CHC}(=\text{O})-$. Ví dụ về “alkoxycarbonyl” bao gồm $\text{CH}_3\text{OC}(=\text{O})-$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OC}(=\text{O})-$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OC}(=\text{O})-$, $(\text{CH}_3)_2\text{CHOC}(=\text{O})-$ và các chất đồng phân butoxycarbonyl hoặc pentoxycarbonyl khác nhau.

“Xycloalkylalkoxycarbonyl” chỉ gốc xycloalkylalkyl liên kết với nguyên tử oxy của gốc alkoxycarbonyl. Ví dụ về “xycloalkylalkoxycarbonyl” bao gồm xyclopropyl- $\text{CH}_2\text{OC}(=\text{O})-$, xyclopropyl- $\text{CH}(\text{CH}_3)\text{OC}(=\text{O})-$ và xyclopentyl- $\text{CH}_2\text{OC}(=\text{O})-$.

Tổng số nguyên tử cacbon trong nhóm thế được biểu thị bằng tiền tố “Ci-Cj”, trong đó i và j là các số từ 1 tới 12. Ví dụ, $\text{C}_1\text{--C}_4$ alkylsulfonyl bao gồm

methylsulfonyl đến butylsulfonyl; C₂ alkoxyalkyl bao gồm CH₃OCH₂-; C₃ alkoxyalkyl bao gồm, ví dụ, CH₃CH(OCH₃)-, CH₃OCH₂CH₂- hoặc CH₃CH₂OCH₂-; và C₄ alkoxyalkyl bao gồm các chất đồng phân khác nhau của nhóm alkyl được thế bằng nhóm alkoxy chứa tổng cộng bốn nguyên tử cacbon, ví dụ, bao gồm CH₃CH₂CH₂OCH₂- và CH₃CH₂OCH₂CH₂-.

Khi hợp chất được thế bằng phần tử thế mang chỉ số dưới biểu thị số phần tử thế có thể lớn hơn 1, phần tử thế này (khi chúng lớn hơn 1) độc lập được chọn từ nhóm các phần tử thế đã được xác định, (ví dụ, $[(R^7)_n]$, bằng 1, 2, 3, 4 hoặc 5). Ngoài ra, khi số dưới này là một khoảng, ví dụ, $(R)_{i-j}$, thì số lượng phần tử thế có thể được chọn từ các số nguyên nằm trong khoảng từ i đến j kể cả hai đầu mút. Khi nhóm chứa phần tử thế có thể là hydro, ví dụ R¹ hoặc R², thì khi phần tử thế này lấy dưới dạng hydro, cần phải hiểu rằng phần tử này là tương đương với nhóm không được thế. Khi nhóm biến thiên thể hiện được gắn tùy ý với một vị trí, ví dụ $[R^{(7)}_n]$ trong đó n có thể bằng 0, thì hydro có thể ở vị trí thậm chí không được đề cập trong phần xác định nhóm biến thiên. Khi một hoặc nhiều vị trí trên nhóm là “không thể” hoặc “không được thế”, thì có nghĩa là nguyên tử hydro được gắn vào để mang hóa trị tự do bất kỳ.

Cụm từ “bão hoà hoàn toàn” liên quan đến vòng chứa nguyên tử có nghĩa là các gắn kết giữa nguyên tử của vòng này đều là liên kết đơn. Cụm từ “chưa bão hoà hoàn toàn” liên quan đến vòng có nghĩa là các gắn kết giữa nguyên tử trong vòng là liên kết đơn hoặc liên kết đôi theo thuyết gắn kết hóa trị và hơn nữa các gắn kết giữa nguyên tử trong vòng bao gồm nhiều liên kết đôi nhất có thể mà không có các liên kết đôi bị chồng chất (tức là không có C=C=C, N=C=C, v.v.). Thuật ngữ “chưa bão hoà hoàn toàn” liên quan đến vòng biểu thị vòng chứa ít nhất một thành viên vòng gắn kết với thành viên vòng liền kề thông qua liên kết đôi và điều chỉnh tiềm năng về mặt khái niệm số liên kết đôi không chồng chất thông qua các thành viên vòng liền kề (tức là ở dạng tương ứng chưa bão hoà hoàn toàn của nó) lớn hơn số liên kết đôi có mặt (tức là ở dạng chưa bão hoà một phần của nó).

Khi vòng chưa bão hoà hoàn toàn thỏa mãn quy tắc Hückel thì nó có thể cũng được mô tả là vòng thơm.

Trừ khi có quy định khác, “vòng” hoặc “hệ vòng” dưới dạng thành phần có công thức 1 (ví dụ, phần tử thế Q^1) là vòng cacbon hoặc dị vòng. Thuật ngữ “hệ vòng” dùng để chỉ hai hoặc nhiều vòng ngưng tụ. Các thuật ngữ “hệ nhân hai vòng” và “hệ nhân hai vòng ngưng tụ” dùng để chỉ hệ vòng bao gồm hai vòng ngưng tụ, trong đó vòng có thể là bão hoà, chưa bão hoà hoàn toàn, hoặc chưa bão hoà hoàn toàn trừ khi có quy định khác. Thuật ngữ “hệ dị vòng hai vòng ngưng tụ” dùng để chỉ hệ vòng hai vòng ngưng tụ trong đó ít nhất một nguyên tử vòng không phải là cacbon. “Hệ vòng hai vòng được liên kết cầu nối” được tạo ra bằng cách gắn kết một phần của một hoặc nhiều nguyên tử với các thành viên vòng không liền kề của vòng. Thuật ngữ “thành viên vòng” dùng để chỉ nguyên tử hoặc gốc khác, ví dụ, $C(=O)$, $C(=S)$, $S(O)$ hoặc $S(O)_2$ tạo ra khung của vòng hoặc hệ vòng.

Các thuật ngữ “vòng cacbon”, “vòng cacbon” hoặc “hệ vòng cacbon” dùng để chỉ vòng hoặc hệ vòng trong đó nguyên tử tạo ra khung của vòng chỉ được chọn từ cacbon. Trừ khi có quy định khác, nhân vòng cacbon có thể là bão hoà, chưa bão hoà hoàn toàn, hoặc vòng chưa bão hoà hoàn toàn. Khi nhân vòng cacbon chưa bão hoà hoàn toàn thỏa mãn quy tắc Hückel, thì vòng này cũng được gọi là “nhân thơm”. “Vòng cacbon bão hoà” dùng để chỉ vòng có khung bao gồm nguyên tử cacbon được liên kết với một nguyên tử khác bằng các liên kết đơn; trừ khi có quy định cụ thể khác, hóa trị cacbon còn lại được chiếm bởi nguyên tử hydro.

Các thuật ngữ “vòng dị vòng”, “dị vòng” hoặc “hệ vòng dị vòng” dùng để chỉ vòng hoặc hệ vòng trong đó ít nhất một nguyên tử tạo ra khung của vòng không phải là cacbon, ví dụ, nitơ, oxy hoặc lưu huỳnh. Thông thường, nhân dị vòng chứa không quá 4 nguyên tử nitơ, không quá 2 nguyên tử oxy và không quá 2 nguyên tử lưu huỳnh. Trừ khi có quy định khác, vòng dị vòng có thể là bão hoà, chưa bão hoà hoàn toàn, hoặc vòng chưa bão hoà hoàn toàn. Khi vòng dị vòng chưa bão hoà hoàn toàn thỏa mãn quy tắc Hückel, thì vòng này cũng được gọi là “nhân dị thơm” hoặc “vòng dị vòng thơm”. Trừ khi có quy định khác, các vòng và

hệ vòng dị vòng có thể được gắn thông qua nguyên tử cacbon hoặc nitơ bất kỳ bằng cách thay thế hydro trên nguyên tử cacbon hoặc nitơ này.

“Thơm” chỉ ra rằng mỗi nguyên tử vòng về cơ bản trong cùng một mặt phẳng và có quỹ đạo p vuông góc với mặt phẳng của vòng, và $(4n + 2) \pi$ điện tử, trong đó n là số nguyên dương, đi liền với vòng phù hợp với quy tắc Hückel. Thuật ngữ “vòng thơm hoặc hệ vòng thơm” chỉ vòng cacbon hoặc vòng dị vòng hoặc hệ vòng thơm trong đó vòng hoặc ít nhất một vòng của hệ vòng thơm này là vòng thơm. Thuật ngữ “vòng thơm hoặc hệ vòng thơm” cũng dùng để chỉ cho “aryl”. Thuật ngữ “aryl” chỉ vòng chứa 5 tới 12 thành viên vòng có thể được sử dụng riêng biệt hoặc trong các từ kết hợp như “arylcarbonyl”. “Arylcarbonyl” chỉ nhóm aryl liên kết với gốc $C(=O)$. Các thuật ngữ “arylalkenylalkyl” và “arylcarbonylalkyl” được xác định theo cách tương tự. “Aryl” Thuật ngữ “hệ vòng thơm” chỉ hệ vòng cacbon hoặc hệ vòng dị vòng trong đó ít nhất một vòng của hệ vòng thơm này là vòng thơm. Thuật ngữ “hệ vòng cacbon thơm” chỉ hệ vòng cacbon thơm trong đó ít nhất một vòng của hệ vòng thơm này là vòng thơm. Thuật ngữ “hệ vòng dị vòng thơm” chỉ hệ vòng dị vòng trong đó ít nhất một vòng của hệ vòng thơm này là vòng thơm. Thuật ngữ “hệ vòng không thơm” chỉ vòng cacbon hoặc hệ vòng dị vòng có thể là bão hoà hoàn toàn, cũng như chưa bão hoà một phần hoặc chưa bão hoà hoàn toàn, với điều kiện tất cả các vòng trong hệ vòng đều không phải là vòng thơm. Thuật ngữ “hệ vòng cacbon không thơm” trong đó tất cả các vòng trong hệ vòng đều không phải là vòng thơm. Thuật ngữ “hệ vòng dị vòng không thơm” chỉ hệ vòng dị vòng trong đó tất cả các vòng trong hệ vòng đều không phải là vòng thơm.

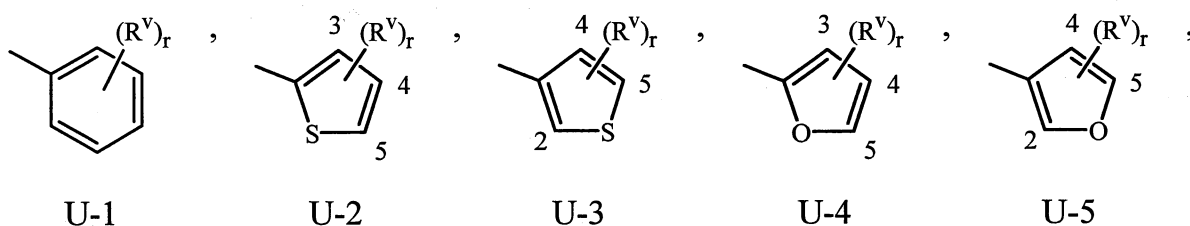
Thuật ngữ “tùy ý được thế” liên quan đến các vòng dị vòng dùng để chỉ các nhóm không được thế hoặc có ít nhất một phần tử thế không phải là hydro không triệt tiêu hoạt tính sinh học đã có của chất tương tự không được thế. Như được sử dụng trong bản mô tả này, định nghĩa sau sẽ áp dụng trừ khi có quy định khác. Thuật ngữ “tùy ý được thế” được sử dụng hoán đổi với cụm từ “được thế hoặc không được thế” hoặc với thuật ngữ “(không) được thế.” Trừ khi có quy định

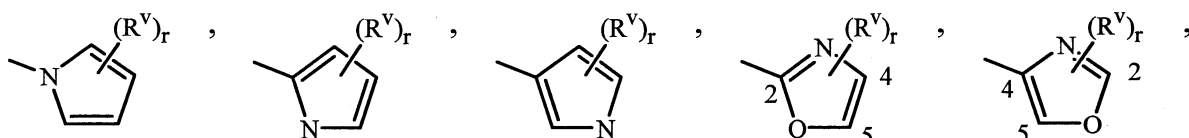
khác, nhóm tùy ý được thế có thể có phân tử thế ở mỗi vị trí thế của nhóm, và mỗi sự thay thế đều độc lập với nhau.

Nếu Q^1 hoặc Q^2 là vòng dị vòng chứa nitơ có 5 hoặc 6 cạnh, nó có thể được gắn với phần còn lại của công thức 1 thông qua nguyên tử vòng cacbon hoặc nitơ sẵn có bất kỳ, trừ khi có quy định khác. Như nêu trên, Q^1 và Q^2 có thể là (trong số những cái khác) phenyl tùy ý được thế bằng một hoặc nhiều phân tử thế được chọn từ nhóm phân tử thế như được xác định trong phần Bản chất kỹ thuật của sáng chế. Một ví dụ về phenyl tùy ý được thế bằng 1 đến 5 phân tử thế là vòng được minh họa dưới dạng U-1 trong Bảng thể hiện 1, trong đó, ví dụ, R^v là R^7 như được xác định trong phần Bản chất kỹ thuật của sáng chế cho Q^1 , hoặc R^v là R^{10} như được xác định trong phần Bản chất kỹ thuật của sáng chế cho Q^2 , và r là một số nguyên (từ 0 tới 5).

Như nêu trên, Q^1 và Q^2 có thể là (trong số những cái khác) vòng dị vòng chưa bão hòa hoàn toàn có 5 hoặc 6 cạnh, tùy ý được thế bằng một hoặc nhiều phân tử thế được chọn từ nhóm phân tử thế như được xác định trong phần Bản chất kỹ thuật của sáng chế. Ví dụ về vòng dị vòng thơm chưa bão hòa có 5 hoặc 6 cạnh tùy ý được thế bằng từ một hoặc nhiều phân tử thế bao gồm các vòng U-2 đến U-61 được minh họa trong Bảng thể hiện 1 trong đó R^v là phân tử thế bất kỳ như được xác định trong phần Bản chất kỹ thuật của sáng chế cho Q^1 và Q^2 , và r là số nguyên nằm trong khoảng từ 0 tới 4, giới hạn bởi số các vị trí sẵn có trên mỗi nhóm U. Đối với U-29, U-30, U-36, U-37, U-38, U-39, U-40, U-41, U-42 và U-43 chỉ có một vị trí sẵn có, đối với các nhóm U này r được giới hạn ở các số nguyên 0 hoặc 1, và r là 0 có nghĩa là nhóm U là không được thế và hydro có mặt ở vị trí được chỉ ra bởi $(R^v)_r$.

Bảng thể hiện 1





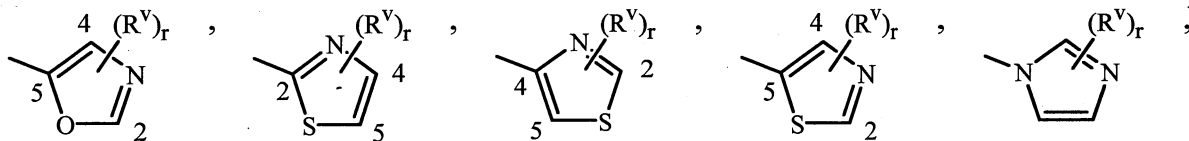
U-6

U-7

U-8

U-9

U-10



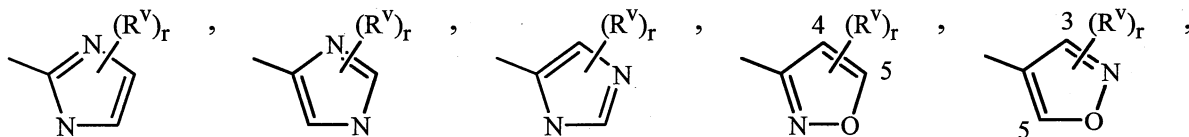
U-11

U-12

U-13

U-14

U-15



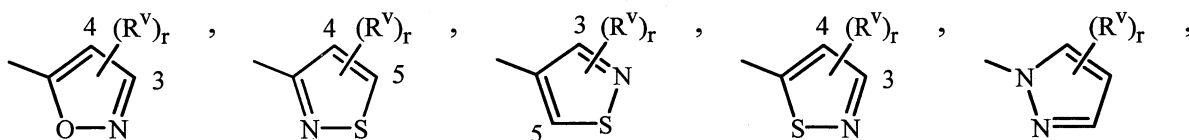
U-16

U-17

U-18

U-19

U-20



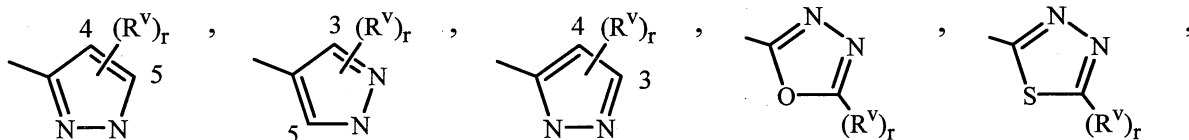
U-21

U-22

U-23

U-24

U-25



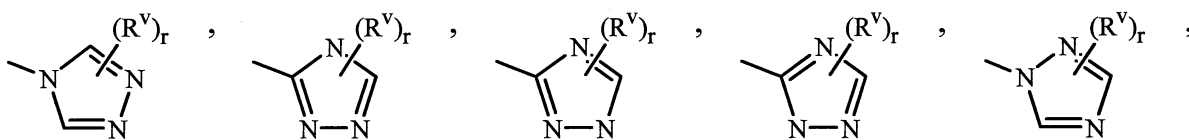
U-26

U-27

U-28

U-29

U-30



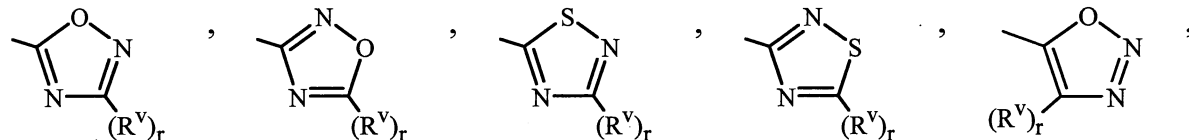
U-31

U-32

U-33

U-34

U-35



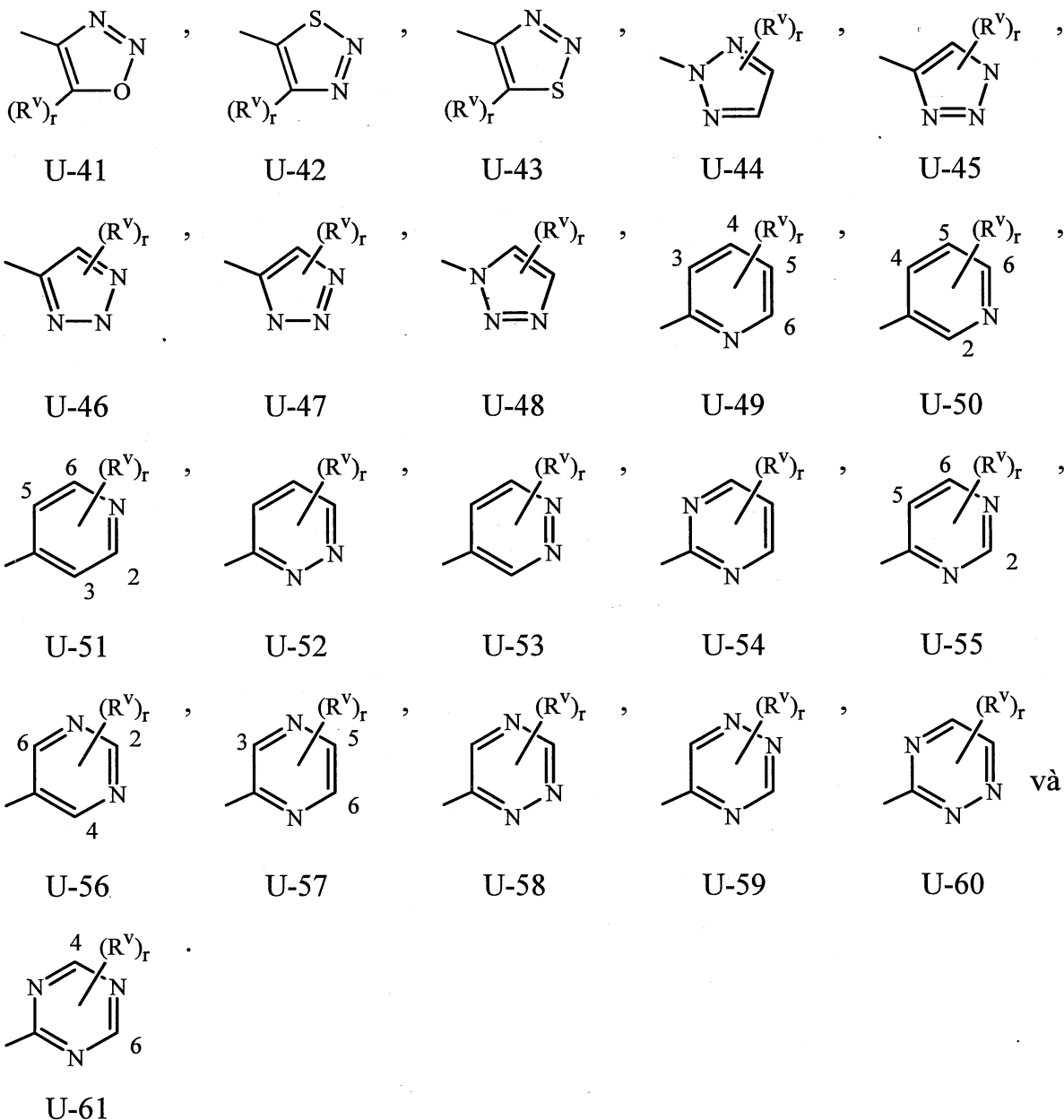
U-36

U-37

U-38

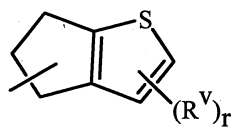
U-39

U-40

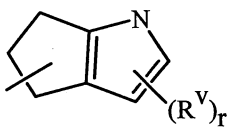


Như nêu trên, Q^1 và Q^2 có thể là (trong số những cái khác) hệ vòng hai vòng dị thơm có 8, 9 hoặc 10 cạnh tùy ý được thể bằng một hoặc nhiều phần tử thể được chọn từ nhóm phần tử thể như được xác định trong phần Bản chất kỹ thuật của sáng chế cho Q^1 và Q^2 . Ví dụ về hệ vòng hai vòng dị thơm có 8, 9 hoặc 10 cạnh tùy ý được thể bằng từ một hoặc nhiều phần tử thể bao gồm các vòng U-62 đến U-100 được minh họa trong Bảng thể hiện 2 trong đó R^v là phần tử thể bất kỳ như được xác định trong phần Bản chất kỹ thuật của sáng chế cho Q^1 hoặc Q^2 , và r thường là số nguyên từ 0 tới 4.

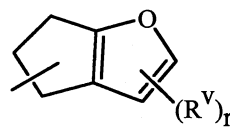
Bảng thể hiện 2



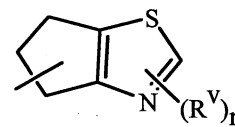
U-62



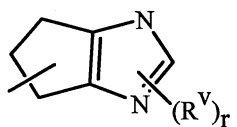
U-63



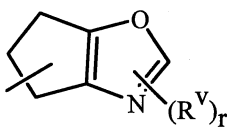
U-64



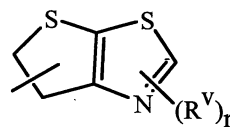
U-65



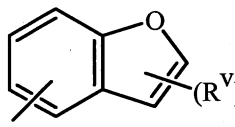
U-66



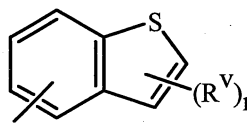
U-67



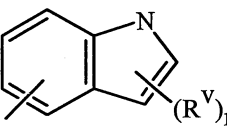
U-68



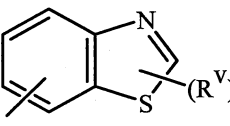
U-69



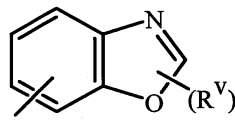
U-70



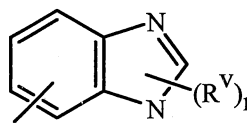
U-71



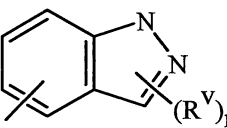
U-72



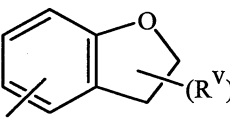
U-73



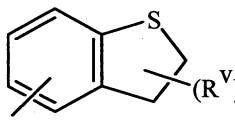
U-74



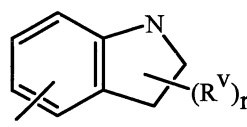
U-75



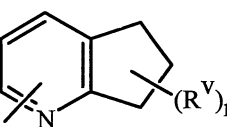
U-76



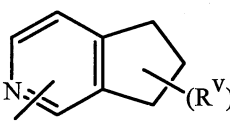
U-77



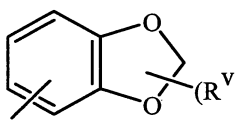
U-78



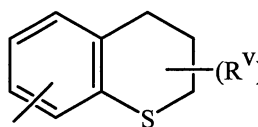
U-79



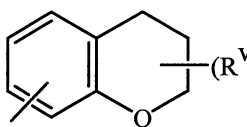
U-80



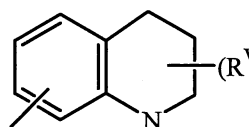
U-81



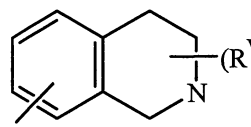
U-82



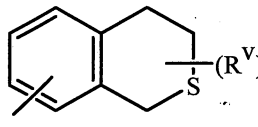
U-83



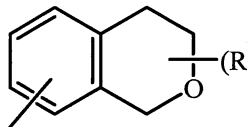
U-84



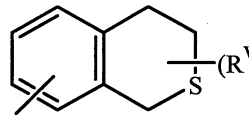
U-85



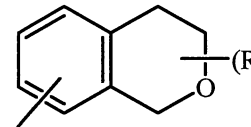
U-86



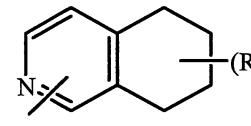
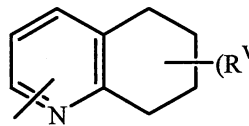
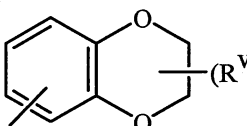
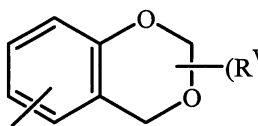
U-87

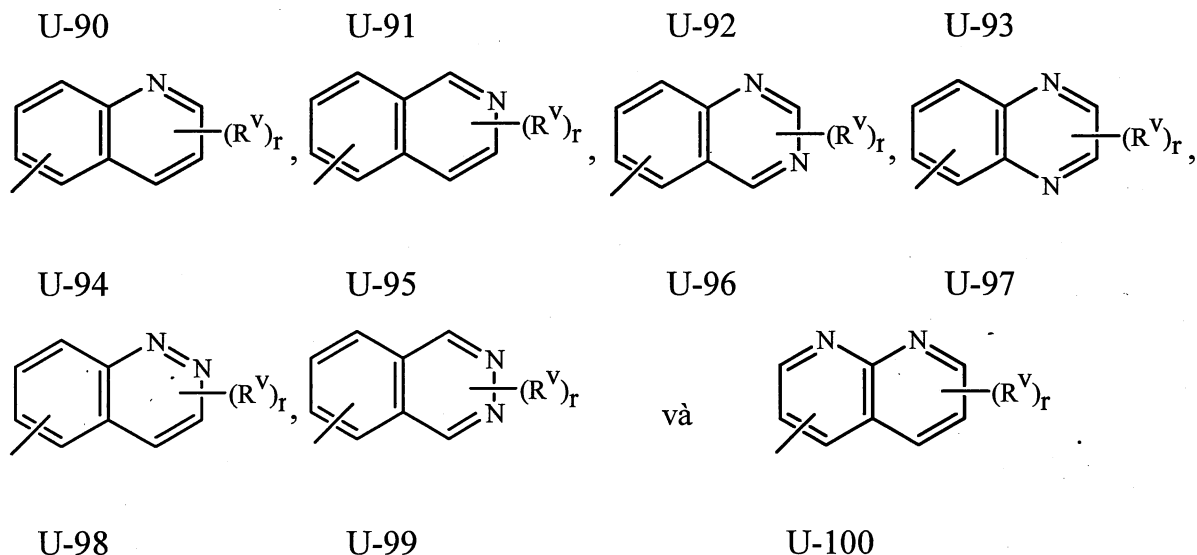


U-88



U-89

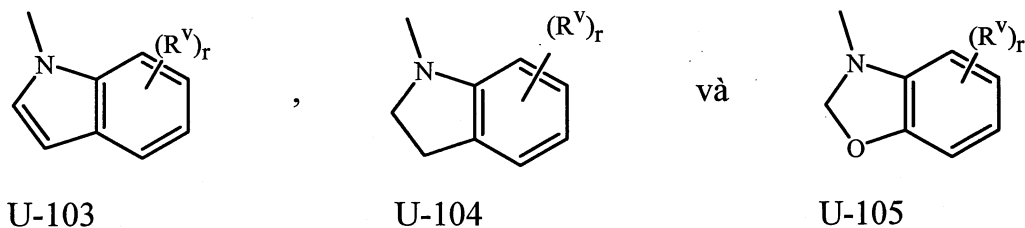




Mặc dù các nhóm R^V được chỉ ra trong các cấu trúc U-1 đến U-100, lưu ý rằng chúng không cần có mặt do chúng là phần tử thế tùy ý. Lưu ý rằng khi R^V là H khi được gắn vào nguyên tử, thì nó là giống nhau như thế nguyên tử này không được thế. Nguyên tử nitơ cần thay thế để đáp ứng hóa trị của chúng được thế bằng H hoặc R^V . Lưu ý rằng khi điểm gắn kết giữa $(R^V)_r$ và nhóm U được minh họa dưới dạng treo lơ lửng, $(R^V)_r$ có thể được gắn vào nguyên tử cacbon hoặc nitơ sẵn có bất kỳ của nhóm U. Lưu ý rằng khi điểm gắn kết trên nhóm U được minh họa dưới dạng treo lơ lửng, nhóm U có thể được gắn vào phần còn lại của công thức 1 thông qua nguyên tử cacbon hoặc nitơ sẵn có bất kỳ của nhóm U bằng cách thay thế nguyên tử hydro. Để hoạt tính diệt cỏ lớn nhất, tốt hơn là, nhóm U được gắn với phần còn lại của công thức 1 thông qua nguyên tử cacbon hoặc nitơ sẵn có trên vòng chưa bão hòa hoàn toàn của nhóm U. Lưu ý rằng một số nhóm U chỉ có thể được thế bằng dưới 5 nhóm R^V (ví dụ, U-2 đến U-5, U-7 đến U-48, và U-52 đến U-61).

Như nêu trên, R^6 và Q^2 cùng với nguyên tử nitơ mà cả hai liên kết tạo ra hệ vòng hai vòng có 8 tới 10 cạnh. Một vài ví dụ được thể hiện trong Bảng thể hiện 3.

Bảng thể hiện 3



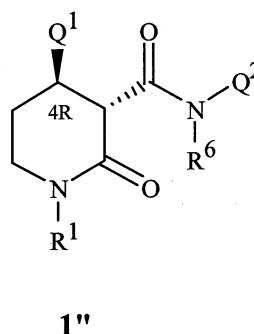
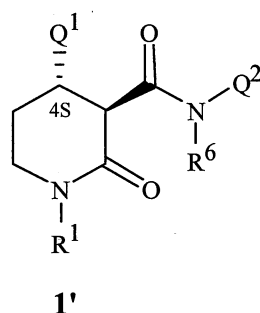
Trong phần mô tả và yêu cầu bảo hộ, thuật ngữ “piperidinon” và các thuật ngữ liên quan như như “vòng piperidinon” chỉ chất dẫn xuất 2-oxo-piperidin theo hệ danh pháp tóm tắt hóa học, bao gồm dẫn xuất trong đó nguyên tử oxy của gốc 2-oxo được thay thế bằng S hoặc NR¹² dưới dạng Y¹, trừ khi được giới hạn ở nguyên tử oxy trong trường hợp cụ thể.

Nhiều phương pháp tổng hợp khác nhau đã biết trong lĩnh vực kỹ thuật này để có thể điều chế các vòng và hệ vòng dị vòng thơm và không thơm; để xem xét kỹ hơn tham khảo bộ tám tập *Comprehensive Heterocyclic Chemistry*, A. R. Katritzky and C. W. Rees editors-in-chief, Pergamon Press, Oxford, 1984 và bộ mười hai tập *Comprehensive Heterocyclic Chemistry II*, A. R. Katritzky, C. W. Rees and E. F. V. Scriven editors-in-chief, Pergamon Press, Oxford, 1996.

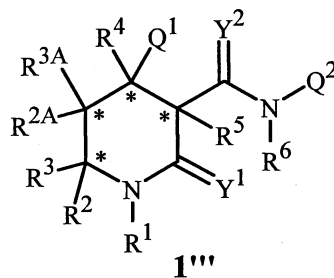
Hợp chất theo sáng chế có thể có mặt dưới dạng một hoặc nhiều chất đồng phân lập thể. Chất đồng phân lập thể khác nhau bao gồm các chất đồng phân đối ảnh, các chất đồng phân không đối quang, các chất đồng phân atropy và các chất đồng phân dị hình. Chất đồng phân lập thể là các chất đồng phân có cấu trúc giống nhau nhưng khác nhau về việc sắp xếp nguyên tử của chúng trong không gian và bao gồm chất đồng phân đối ảnh, chất đồng phân không đối quang, chất đồng phân cis-trans (còn gọi là chất đồng phân dị hình) và chất đồng phân atropy. Chất đồng phân atropy là kết quả của việc quay có hạn chế quanh các liên kết đơn mà tại đó hàng rào quay là đủ lớn để cho phép tách các chất đồng phân. Người có hiểu biết trong lĩnh vực này cần hiểu rằng một chất đồng phân lập thể có thể hoạt động nhiều hơn và/hoặc có thể có các tác dụng có lợi khi được làm giàu tương đối so với các chất đồng phân lập thể khác hoặc khi được tách khỏi các chất đồng phân lập thể khác. Ngoài ra, người có hiểu biết trong lĩnh vực này cũng biết cách để

tách, làm giàu, và/hoặc điều chế một cách có chọn lọc các chất đồng phân lập thể này. Hợp chất theo sáng chế có thể có mặt dưới dạng hỗn hợp chứa chất đồng phân lập thể, chất đồng phân lập thể riêng rẽ hoặc dưới dạng quang hoạt. Cụ thể, khi R^4 và R^5 đều là H, thì phần tử thể $C(=Y^2)N(Q^2)(R^6)$ và Q^1 phần lớn là ở dạng cấu hình trans được ưu tiên về mặt nhiệt động trên vòng piperidinon.

Ví dụ, như được thể hiện ở dưới, gốc $C(O)N(Q^2)(R^6)$ (tức là trong công thức 1 trong đó cả hai Y^1 và Y^2 đều là O; và J là $-CR^2R^3-$ và R^2 và R^3 đều là H) gắn kết với nguyên tử cacbon ở vị trí 3 của vòng amit và Q^1 gắn kết với nguyên tử cacbon ở vị trí 4 của vòng piperidinon thường được tìm thấy trong cấu hình *trans*. Hai nguyên tử cacbon này đều có tâm không đối xứng. Hai cặp liên quan nhất của các chất đồng phân đối ảnh được thể hiện dưới dạng công thức 1' và công thức 1''. Mặc dù sáng chế đề cập đến tất cả các chất đồng phân lập thể, nhưng được ưu tiên là cặp đồng phân đối ảnh về khả năng kiểm soát sinh học được xác định dưới dạng công thức 1'. Để xem xét toàn diện về tất cả các khía cạnh của chất đồng phân lập thể, xem Ernest L. Eliel and Samuel H. Wilen, *Stereochemistry of Organic Các hợp chất*, John Wiley & Sons, 1994.



Người có hiểu biết trong lĩnh vực kỹ thuật này cũng cần hiểu rằng nguyên tử cacbon ở vị trí thứ 5 hoặc 6 của vòng piperidinon cũng chứa tâm lập thể được chỉ ra bởi ký hiệu (*) như được thể hiện trong Công thức 1'''. Sáng chế đề cập đến tất cả các chất đồng phân lập thể, và vì vậy, khi R^2 và R^3 , hoặc R^{2A} và R^{3A} không phải là phần tử thể giống nhau, thì hỗn hợp chứa các chất đồng phân không đối quang là khả thi.



Phần mô tả phân tử được thể hiện bằng hình vẽ trong bản mô tả này tuân theo quy ước chuẩn về mô tả hóa học lập thể. Để thể hiện cấu hình lập thể, các liên kết xuất hiện trên mặt phẳng của hình vẽ và hướng đến người xem được thể hiện bằng các mối nối rỗng trong đó điểm cuối rộng của mối nối này được gắn vào nguyên tử xuất hiện trên mặt phẳng của hình vẽ về phía người xem. Các gắn kết bên dưới mặt phẳng của hình vẽ và cách xa người xem được biểu hiện bằng các mối nối phụ trong đó điểm cuối hẹp của mối nối này được gắn vào nguyên tử cách xa hơn nữa người xem. Đường kẻ rộng cố định để chỉ gắn kết có hướng ngược lại hoặc trung tính so với gắn kết được thể hiện bằng các mối nối rỗng hoặc mối nối phụ; đường kẻ rộng cố định cũng thể hiện gắn kết trong các phân tử hoặc các phần của phân tử mà cấu hình lập thể đặc biệt không được dự định để mô tả cụ thể.

Sáng chế cũng bao gồm các hỗn hợp raxemic, ví dụ, lượng bằng nhau của các chất đồng phân đối ảnh có các Công thức 1' và 1" (và tùy ý 1'''). Ngoài ra, sáng chế bao gồm hợp chất được làm giàu so với hỗn hợp raxemic trong chất đồng phân đối ảnh có công thức 1. Sáng chế cũng bao gồm các chất đồng phân đối ảnh hầu như tinh khiết của hợp chất có công thức 1, ví dụ, Công thức 1' và Công thức 1".

Khi được làm giàu về mức đồng phân đối ảnh, một chất đồng phân đối ảnh có mặt với lượng lớn hơn so với các chất đồng phân đối ảnh khác, và mức độ giàu này có thể được xác định bằng sự biểu thị của tỷ lệ đồng phân đối ảnh (ER) được biểu thị dưới dạng diện tích % tương đối của hai chất đồng phân đối ảnh được xác định bằng sắc ký lỏng hiệu năng cao không đối xứng.

Tốt hơn là, chế phẩm theo sáng chế có ít nhất 50% ER; tốt hơn nữa là ít nhất 75% ER; còn tốt hơn nữa là ít nhất 90% ER; và tốt nhất là ít nhất 94% ER của chất đồng phân hoạt động hơn. Được ưu tiên là các phương án độ tinh khiết về

mặt đồng phân đối ảnh của chất đồng phân hoạt động hơn.

Hợp chất có công thức 1 có thể chứa các tâm không đối xứng bổ sung. Ví dụ, chính các phần tử thể và các hợp phần phân tử khác như R^2 , R^3 và R^6 có thể chứa các tâm không đối xứng. Sáng chế bao hàm hỗn hợp racemic cũng như các cấu hình lập thể giàu và gần như tinh khiết ở các tâm không đối xứng bổ sung này.

Hợp chất theo sáng chế có thể có mặt dưới dạng một hoặc nhiều chất đồng phân cấu hình do sự quay giới hạn ở khoảng gắn kết amit $C(O)N(Q^2)(R^6)$ trong Công thức 1. Sáng chế bao gồm hỗn hợp của chất đồng phân cấu hình. Ngoài ra, sáng chế bao gồm hợp chất được làm giàu ở conforme so với các hợp chất khác. Hợp chất có công thức 1 thường tồn tại ở nhiều hơn một dạng, và do đó Công thức 1 bao gồm tất cả các dạng tinh thể và không tinh thể của các hợp chất chúng có mặt. Dạng không tinh thể bao gồm các phương án là chất rắn như sáp và gồm cũng như các phương án là chất lỏng như dung dịch và chất nóng chảy. Dạng tinh thể bao gồm các phương án về cơ bản là dạng tinh thể đơn và các phương án là hỗn hợp chứa chất đa hình (tức là các dạng tinh thể khác nhau). Thuật ngữ “dạng đa hình” được dùng để chỉ dạng tinh thể cụ thể của hợp chất hoá học có thể kết tinh ở các dạng tinh thể khác nhau, các dạng này có các phân tử trong mạng tinh thể có sự sắp xếp và/hoặc cấu hình khác nhau. Mặc dù chất đa hình có thể có thành phần hóa học giống nhau, chúng cũng có thể khác nhau về thành phần do sự có mặt hoặc không có mặt của nước đồng kết tinh hoặc các phân tử khác, có thể được liên kết yếu hoặc mạnh trong mạng này. Chất đa hình có thể khác về các đặc tính hóa học, vật lý và sinh học như hình dạng, tỷ trọng, độ cứng, màu sắc, độ ổn định hóa học, điểm nóng chảy, độ ẩm, độ nhay, tốc độ hòa tan và tính sinh khả dụng của tinh thể. Người có hiểu biết trong lĩnh vực này cần hiểu rằng chất đa hình của hợp chất có công thức 1 có thể có các tác dụng có lợi (ví dụ, thích hợp để điều chế các chế phẩm hữu ích, đặc tính sinh học cải thiện) so với các chất đa hình khác hoặc hỗn hợp của chất đa hình của cùng hợp chất có công thức 1. Việc điều chế và tách chất đa hình cụ thể của hợp chất có công thức 1 có thể đạt được bằng các phương pháp đã biết đối với người có hiểu biết trong lĩnh vực này bao gồm, ví dụ, phương pháp kết tinh bằng cách sử dụng các dung môi và các nhiệt độ đã

chọn. Để xem xét toàn diện về chất đa hình, xem R. Hilfiker, Ed., *Polymorphism In the Pharmaceutical Industrial*, Wiley-VCH, Weinheim, 2006.

Người có hiểu biết trong lĩnh vực này cần hiểu rằng không phải tất cả các dị vòng chứa nitơ có thể tạo thành các *N*-oxit vì nitơ cần một cặp đơn lẻ để oxy hoá thành oxit; người có hiểu biết trong lĩnh vực này cần hiểu rằng các dị vòng chứa nitơ này có thể tạo thành các *N*-oxit. Người có hiểu biết trong lĩnh vực cũng cần hiểu rằng các amin bậc ba có thể tạo thành *N*-oxit. Các phương pháp tổng hợp để điều chế các *N*-oxit của các dị vòng và amin bậc ba là đã biết đối với người có hiểu biết trong lĩnh vực này bao gồm phương pháp oxy hoá dị vòng và amin bậc ba bằng các axit peroxy như axit peraxetic và 3-cloperbenzoic (MCPBA), hydro peroxit, alkyl hydroperoxit như *t*-butyl hydroperoxit, natri perborat, và đioxiran như dimetylđioxiran. Các phương pháp điều chế các *N*-oxit này được mô tả rộng rãi và xem xét trong tài liệu, ví dụ: T. L. Gilchrist in *Comprehensive Organic Synthesis*, vol. 7, pp 748–750, S. V. Ley, Ed., Pergamon Press; M. Tisler và B. Stanovnik in *Comprehensive Heterocyclic Chemistry*, vol. 3, pp 18–20, A. J. Boulton và A. McKillop, Eds., Pergamon Press; M. R. Grimmett và B. R. T. Keene in *Advances in Heterocyclic Chemistry*, vol. 43, pp 149–161, A. R. Katritzky, Ed., Academic Press; M. Tisler và B. Stanovnik in *Advances in Heterocyclic Chemistry*, vol. 9, pp 285–291, A. R. Katritzky và A. J. Boulton, Eds., Academic Press; và G. W. H. Cheeseman và E. S. G. Werstiuk in *Advances in Heterocyclic Chemistry*, vol. 22, pp 390–392, A. R. Katritzky và A. J. Boulton, Eds., Academic Press.

Người có hiểu biết trong lĩnh vực này cũng cần hiểu rằng do môi trường và các điều kiện sinh lý học, các muối của hợp chất hoá học ở trạng thái cân bằng với các dạng không muối tương ứng của chúng, các muối có tính hữu ích sinh học của các dạng không muối. Do đó, rất nhiều dạng muối của hợp chất có công thức 1 hữu ích để phòng trừ thực vật không được mong muốn (tức là thích hợp về mặt nông dụng). Các muối của hợp chất có công thức 1 bao gồm các muối cộng axit với các axit vô cơ hoặc hữu cơ như axit bromhydric, axit clohydric, axit nitric, axit phosphoric, axit sulfuric, axit axetic, axit butyric, axit fumaric, axit lactic, axit

maleic, axit malonic, axit oxalic, axit propionic, axit salixylic, axit tarttric, axit 4-toluensulfonic hoặc axit valeric. Khi hợp chất có công thức 1 chứa gốc axit như axit carboxylic hoặc phenol, muối cũng bao gồm các muối được tạo ra từ các bazơ vô cơ hoặc hữu cơ như pyridin, trietylamin hoặc amoniac, hoặc amin, hydrit, hydroxit hoặc cacbonat của natri, kali, lithi, canxi, magie hoặc bari. Do đó, sáng chế bao gồm hợp chất được chọn từ hợp chất có công thức 1, N-oxit và các muối thích hợp của chúng

Các phương án theo sáng chế như được mô tả trong phần Bản chất kỹ thuật của sáng chế bao gồm (trong đó Công thức 1 được sử dụng trong các phương án sau kể cả các N-oxit và muối của chúng):

Phương án 1. Hợp chất có công thức 1, trong đó Q^1 là vòng phenyl tùy ý được thể bằng tối đa 5 phần tử thể độc lập được chọn từ R^7 .

Phương án 2. Hợp chất theo phương án 1, trong đó Q^1 là vòng phenyl được thể bằng 1 tới 3 phần tử thể độc lập được chọn từ R^7 .

Phương án 3. Hợp chất theo phương án 2, trong đó Q^1 là vòng phenyl được thể bằng 1 tới 2 phần tử thể độc lập được chọn từ R^7 .

Phương án 4. Hợp chất có công thức 1 hoặc theo phương án bất kỳ trong số các phương án từ 1 tới 3, trong đó Q^1 là vòng phenyl có phần tử thể được chọn từ R^7 ở vị trí meta (ví dụ, 3-) hoặc vị trí para (4-) (và các phần tử thể khác tùy ý).

Phương án 5. Hợp chất theo phương án 4, trong đó Q^1 là vòng phenyl có phần tử thể được chọn từ R^7 ở vị trí meta (và các phần tử thể khác tùy ý).

Phương án 6. Hợp chất theo phương án 4, trong đó Q^1 là vòng phenyl có phần tử thể được chọn từ R^7 ở vị trí para (và các phần tử thể khác tùy ý).

Phương án 7. Hợp chất có công thức 1 hoặc theo phương án bất kỳ trong số các phương án từ 1 tới 6, trong đó khi Q^1 là vòng phenyl được thể bằng ít nhất hai phần tử thể được chọn từ R^7 , thì một phần tử thể ở vị trí meta và ít nhất một phần tử thể kia ở vị trí para liên kề (của vòng phenyl).

Phương án 8. Hợp chất có công thức 1 hoặc theo phương án bất kỳ trong số các phương án từ 1 tới 7, trong đó Q^1 là vòng phenyl được thế bằng 1 phần tử thế được chọn từ R^7 ở vị trí meta hoặc vị trí para hoặc được thế bằng 2 phần tử thế độc lập được chọn từ R^7 trong đó một phần tử thế ở vị trí meta và phần tử thế kia ở vị trí para liền kề.

Phương án 9. Hợp chất theo phương án 8, trong đó Q^1 là vòng phenyl được thế bằng 1 phần tử thế được chọn từ R^7 ở vị trí meta hoặc được thế bằng 2 phần tử thế độc lập được chọn từ R^7 trong đó một phần tử thế ở vị trí meta và phần tử thế kia ở vị trí para liền kề.

Phương án 10. Hợp chất theo phương án 8, trong đó Q^1 là vòng phenyl được thế bằng 1 phần tử thế được chọn từ R^7 ở vị trí para hoặc được thế bằng 2 phần tử thế độc lập được chọn từ R^7 trong đó một phần tử thế ở vị trí meta và phần tử thế kia ở vị trí para liền kề.

Phương án 11. Hợp chất có công thức 1 hoặc theo phương án bất kỳ trong số các phương án từ 1 tới 10, trong đó Q^2 là vòng phenyl được thế bằng tối đa 5 phần tử thế độc lập được chọn từ R^{10} .

Phương án 12. Hợp chất theo phương án 11, trong đó Q^2 là vòng phenyl được thế bằng 1 tới 3 phần tử thế độc lập được chọn từ R^{10} .

Phương án 13. Hợp chất theo phương án 12, trong đó Q^2 là vòng phenyl được thế bằng 1 tới 2 phần tử thế độc lập được chọn từ R^{10} .

Phương án 14. Hợp chất có công thức 1 hoặc theo phương án bất kỳ trong số các phương án từ 1 tới 13, trong đó Q^2 là vòng phenyl có ít nhất một phần tử thế được chọn từ R^{10} ở vị trí ortho (ví dụ, 2-) (và các phần tử thế khác tùy ý).

Phương án 15. Hợp chất có công thức 1 hoặc theo phương án bất kỳ trong số các phương án từ 1 tới 14, trong đó khi Q^2 là vòng phenyl được thế bằng ít nhất hai phần tử thế được chọn từ R^{10} , thì ít nhất một phần tử thế ở vị trí ortho và ít nhất một phần tử thế ở vị trí meta liền kề (của vòng phenyl).

Phương án 16. Hợp chất có công thức 1 hoặc theo phương án bất kỳ trong số các phương án từ 1 tới 15, trong đó Q^2 là vòng phenyl được thế bằng 1 phần tử thế được chọn từ R^{10} ở vị trí ortho hoặc được thế bằng 2 phần tử thế độc lập được chọn từ R^{10} trong đó một phần tử thế ở vị trí ortho và phần tử thế kia ở vị trí meta liền kề.

Phương án 17. Hợp chất có công thức 1 hoặc theo phương án bất kỳ trong số các phương án từ 1 tới 16, trong đó mỗi R^7 và R^{10} độc lập là halogen, xyano, nitro, C_1 – C_4 alkyl, C_1 – C_4 haloalkyl, C_2 – C_4 alkenyl, C_2 – C_4 haloalkenyl, C_2 – C_4 alkynyl, C_2 – C_4 haloalkynyl, C_1 – C_4 nitroalkyl, C_2 – C_4 nitroalkenyl, C_2 – C_4 alkoxyalkyl, C_2 – C_4 haloalkoxyalkyl, C_3 – C_4 xycloalkyl, C_3 – C_4 haloalkoxyalkyl, C_1 – C_4 alkoxy, C_1 – C_4 haloalkoxy, C_2 – C_4 alkenyloxy, C_2 – C_4 haloalkenyloxy, C_3 – C_4 alkynyloxy, C_3 – C_4 haloalkynyloxy, C_3 – C_4 xycloalkoxy, C_1 – C_4 alkylthio, C_1 – C_4 haloalkylthio, C_1 – C_4 alkylsulfinyl, C_1 – C_4 haloalkylsulfinyl, C_1 – C_4 alkylsulfonyl, C_1 – C_4 haloalkylsulfonyl, C_2 – C_4 alkylcarbonyl, C_2 – C_4 alkylcarbonyloxy, C_1 – C_4 alkylsulfonyloxy, C_1 – C_4 haloalkylsulfonyloxy, C_1 – C_4 alkylamino, C_2 – C_4 dialkylamino, formylamino, C_2 – C_4 alkylcarbonylamino, - SF_5 , -SCN, C_3 – C_4 trialkylsilyl, trimethylsilylmetyl hoặc trimethylsilylmetoxy.

Phương án 18. Hợp chất theo phương án 17, trong đó mỗi R^7 độc lập là halogen, xyano, C_1 – C_2 alkyl, C_1 – C_3 haloalkyl hoặc C_1 – C_3 alkylsulfonyl.

Phương án 19. Hợp chất theo phương án 18, trong đó mỗi R^7 độc lập là halogen hoặc C_1 – C_2 haloalkyl.

Phương án 20. Hợp chất theo phương án 19, trong đó mỗi R^7 độc lập là halogen hoặc C_1 haloalkyl.

Phương án 21. Hợp chất theo phương án 20, trong đó mỗi R^7 độc lập là halogen hoặc C_1 fluoroalkyl.

Phương án 22. Hợp chất theo phương án 21, trong đó mỗi R^7 độc lập là halogen hoặc CF_3 .

Phương án 23. Hợp chất theo phương án 22, trong đó mỗi R^7 độc lập là F, Cl, Br hoặc CF_3 .

Phương án 24. Hợp chất theo phương án 23, trong đó mỗi R^7 độc lập là F hoặc CF_3 .

Phương án 25. Hợp chất theo phương án 23, hoặc 24 trong đó tối đa duy nhất một phần tử thể CF_3 có mặt và ở vị trí meta hoặc vị trí para của vòng phenyl Q^1 .

Phương án 26. Hợp chất theo phương án 25, trong đó tối đa duy nhất một phần tử thể CF_3 có mặt và ở vị trí meta của vòng phenyl Q^1 .

Phương án 27. Hợp chất theo phương án 25, trong đó tối đa duy nhất một phần tử thể CF_3 có mặt và ở vị trí para của vòng phenyl Q^1 .

Phương án 28. Hợp chất theo phương án bất kỳ trong số các phương án từ 17 tới 27, trong đó mỗi R^{10} độc lập là halogen, xyano, nitro, C_1 – C_2 alkyl, C_1 – C_3 haloalkyl hoặc C_1 – C_3 alkylsulfonyl.

Phương án 29. Hợp chất theo phương án 28, trong đó mỗi R^{10} độc lập là halogen hoặc C_1 – C_2 haloalkyl.

Phương án 30. Hợp chất theo phương án 29, trong đó mỗi R^{10} độc lập là halogen hoặc C_1 haloalkyl.

Phương án 31. Hợp chất theo phương án 30, trong đó mỗi R^{10} độc lập là halogen hoặc C_1 floroalkyl.

Phương án 32. Hợp chất theo phương án 31, trong đó mỗi R^{10} độc lập là halogen hoặc CF_3 .

Phương án 33. Hợp chất theo phương án 32, trong đó mỗi R^{10} độc lập là F, Cl, Br hoặc CF_3 .

Phương án 34. Hợp chất theo phương án 33, trong đó mỗi R^{10} độc lập là F hoặc CF_3 .

Phương án 35. Hợp chất theo phương án 34 trong đó mỗi R^{10} là F.

Phương án 36. Hợp chất có công thức 1 hoặc theo phương án bất kỳ trong số các phương án từ 1 tới 35, trong đó độc lập với nhau, mỗi R^9 và R^{11} độc lập là H hoặc C_1-C_2 alkyl.

Phương án 37. Hợp chất theo phương án 36, trong đó độc lập với nhau, mỗi R^9 và R^{11} là CH_3 .

Phương án 38. Hợp chất có công thức 1 hoặc theo phương án bất kỳ trong số các phương án từ 1 tới 37, trong đó Y^1 là O.

Phương án 39. Hợp chất có công thức 1 hoặc theo phương án bất kỳ trong số các phương án từ 1 tới 38 trong đó Y^2 là O.

Phương án 39a. Hợp chất có công thức 1 hoặc theo phương án bất kỳ trong số các phương án từ 1 tới 38 trong đó R^1 là H hoặc C_1-C_6 alkyl.

Phương án 40. Hợp chất theo phương án 39a, trong đó R^1 là H hoặc CH_3 .

Phương án 41. Hợp chất theo phương án 40, trong đó R^1 là H.

Phương án 41a. Hợp chất theo phương án 40, trong đó R^1 là CH_3 .

Phương án 42. Hợp chất có công thức 1 hoặc theo phương án bất kỳ trong số các phương án từ 1 tới 41a, trong đó R^2 là H hoặc CH_3 .

Phương án 43. Hợp chất theo phương án 42, trong đó R^2 là H.

Phương án 44. Hợp chất có công thức 1 hoặc theo phương án bất kỳ trong số các phương án từ 1 tới 43, trong đó R^3 là H hoặc CH_3 .

Phương án 45. Hợp chất theo phương án 44, trong đó R^3 là H.

Phương án 46. Hợp chất có công thức 1 hoặc theo phương án bất kỳ trong số các phương án từ 1 tới 45, trong đó R^{2A} là H hoặc CH_3 .

Phương án 47. Hợp chất theo phương án 46, trong đó R^{2A} là H.

Phương án 48. Hợp chất có công thức 1 hoặc theo phương án bất kỳ trong số các phương án từ 1 tới 47, trong đó R^{3A} là H hoặc CH_3 .

Phương án 49. Hợp chất theo phương án 48, trong đó R^{3A} là H.

Phương án 50. Hợp chất có công thức 1 hoặc theo phương án bất kỳ trong số các phương án từ 1 tới 49, trong đó R^4 là H hoặc CH_3 .

Phương án 51. Hợp chất theo phương án 50, trong đó R^4 là H.

Phương án 52. Hợp chất có công thức 1 hoặc theo phương án bất kỳ trong số các phương án từ 1 tới 51, trong đó R^5 là H hoặc CH_3 .

Phương án 53. Hợp chất theo phương án 52, trong đó R^5 là H.

Phương án 54. Hợp chất có công thức 1 hoặc theo phương án bất kỳ trong số các phương án từ 1 tới 53, trong đó R^6 là H hoặc CH_3 .

Các phương án của sáng chế, bao gồm các phương án 1–54 nêu trên cũng như các phương án khác bất kỳ được mô tả trong bản mô tả này, có thể được kết hợp theo cách bất kỳ, và phần mô tả về các biến trong các phương án này không những đề cập đến các hợp chất có công thức 1 mà còn đề cập đến các hợp chất ban đầu và các hợp chất trung gian hữu ích để điều chế hợp chất có công thức 1. Ngoài ra, các phương án của sáng chế, bao gồm các phương án 1–54 nêu trên cũng như các phương án khác bất kỳ được mô tả trong bản mô tả này, và tổ hợp bất kỳ của chúng, đề cập đến chế phẩm và phương pháp theo sáng chế.

Tổ hợp của các phương án 1–54 được minh họa bằng:

Phương án A. Hợp chất có công thức 1, trong đó:

mỗi R^7 và R^{10} độc lập là halogen, xyano, nitro, C_1 – C_4 alkyl, C_1 – C_4 haloalkyl, C_2 – C_4 alkenyl, C_2 – C_4 haloalkenyl, C_2 – C_4 alkynyl, C_2 – C_4 haloalkynyl, C_1 – C_4 nitroalkyl, C_2 – C_4 nitroalkenyl, C_2 – C_4 alkoxyalkyl, C_2 – C_4 haloalkoxyalkyl, C_3 – C_4 xycloalkyl, C_3 – C_4 haloalkoxy, C_1 – C_4 alkoxy, C_1 – C_4 haloalkoxy, C_2 – C_4 alkenyloxy, C_2 – C_4 haloalkenyloxy, C_3 – C_4 alkynyloxy, C_3 – C_4 haloalkynyloxy, C_3 – C_4 xycloalkoxy, C_1 – C_4 alkylthio, C_1 – C_4 haloalkylthio, C_1 – C_4 alkylsulfinyl, C_1 – C_4 haloalkylsulfinyl, C_1 – C_4 alkylsulfonyl, C_1 – C_4 haloalkylsulfonyl, C_2 – C_4 alkylcarbonyl, C_2 – C_4 alkylcarbonyloxy, C_1 – C_4 alkylsulfonyloxy, C_1 – C_4 haloalkylsulfonyloxy, C_1 – C_4 alkylamino, C_2 – C_4

dialkylamino, formylamino, C₂–C₄ alkylcarbonylamino, -SF₅, -SCN, C₃–C₄ trialkylsilyl, trimethylsilylmethyl hoặc trimethylsilylmethoxy; và mỗi R⁹ và R¹¹ độc lập là H hoặc C₁–C₂ alkyl.

Phương án B. Hợp chất theo phương án A, trong đó:
mỗi Y¹ và Y² là O;
R¹ là H hoặc C₁–C₆ alkyl; và
mỗi R², R³, R^{2A}, R^{3A}, R⁴, R⁵ và R⁶ là H.

Phương án C. Hợp chất theo phương án B, trong đó:
R¹ là H hoặc Me.

Phương án D. Hợp chất theo phương án C, trong đó:
Q¹ là vòng phenyl được thế bằng 1 tới 3 phần tử thế độc lập được chọn từ R⁷; và
Q² là vòng phenyl được thế bằng 1 tới 3 phần tử thế độc lập được chọn từ R¹⁰.

Phương án E. Hợp chất theo phương án D, trong đó:
mỗi R⁷ độc lập là halogen, xyano, C₁–C₂ alkyl, C₁–C₃ haloalkyl hoặc C₁–C₃ alkylsulfonyl; và
mỗi R¹⁰ độc lập là halogen, xyano, nitro, C₁–C₂ alkyl, C₁–C₃ haloalkyl hoặc C₁–C₃ alkylsulfonyl.

Phương án F. Hợp chất theo phương án E, trong đó:
Q¹ là vòng phenyl được thế bằng 1 phần tử thế được chọn từ R⁷ ở vị trí meta hoặc vị trí para hoặc được thế bằng 2 phần tử thế độc lập được chọn từ R⁷ trong đó một phần tử thế ở vị trí meta và phần tử thế kia ở vị trí para; và
Q² là vòng phenyl được thế bằng 1 phần tử thế được chọn từ R¹⁰ ở vị trí ortho hoặc được thế bằng 2 phần tử thế độc lập được chọn từ R¹⁰ trong đó một phần tử thế ở vị trí ortho và phần tử thế kia ở vị trí meta liền kề.

Phương án G. Hợp chất theo phương án F, trong đó:
mỗi R⁷ độc lập là F hoặc CF₃; và
mỗi R¹⁰ là F.

Theo các phương án cụ thể, sáng chế bao gồm các hợp chất có công thức 1 được chọn từ nhóm bao gồm các hợp chất sau:

N-(2,3-điflophenyl)-2-oxo-4-[3-(triflometyl)phenyl]-3-piperidincarboxamit (Hợp chất 9);

2-oxo-*N*-[2-(triflometyl)phenyl]-4-[3-(triflometyl)phenyl]-3-piperidincarboxamit (Hợp chất 10);

N-(2,3-điflophenyl)-2-oxo-4-[4-(triflometyl)phenyl]-3-piperidincarboxamit (Hợp chất 11);

(3*S*,4*S*)-*N*-(2,3-điflophenyl)-4-(4-flophenyl)-1-metyl-2-oxo-3-piperidincarboxamit (Hợp chất 52);

4-[3-(diflometyl)phenyl]-*N*-(2,3-điflophenyl)-2-oxo-3-piperidincarboxamit (Hợp chất 49);

(3*R*,4*S*)-4-(3-clophenyl)-*N*-(2,3-điflophenyl)-2-oxo-3-piperidincarboxamit (Hợp chất 42);

4-(3-clophenyl)-*N*-(2,3-điflophenyl)-2-oxo-3-piperidincarboxamit (Hợp chất 36);

2-oxo-4-[3-(triflometyl)phenyl]-*N*-(2,3,4-triflophenyl)-3-piperidincarboxamit (Hợp chất 30);

(3*R*,4*S*)-*N*-(3-clo-2-flophenyl)-2-oxo-4-[3-(triflometyl)phenyl]-3-piperidincarboxamit (Hợp chất 25);

(3*R*,4*S*)-*N*-(2,3-điflophenyl)-2-oxo-4-[4-(triflometyl)phenyl]-3-piperidincarboxamit (Hợp chất 22); và

(3*R*,4*S*)-*N*-(2,3-điflophenyl)-2-oxo-4-[3-(triflometyl)phenyl]-3-piperidincarboxamit (Hợp chất 21).

Sáng chế cũng đề cập đến phương pháp phòng trừ thực vật không mong muốn bao gồm bước đưa vào nơi trồng thực vật lượng có tác dụng diệt cỏ của hợp chất theo sáng chế (ví dụ, dưới dạng chế phẩm được mô tả trong bản mô tả này). Đáng chú ý là các phương án đề cập đến các phương pháp sử dụng là các phương án chứa các hợp chất theo các phương án được mô tả trên đây. Hợp chất theo sáng chế có thể được sử dụng để phòng trừ cỏ dại ở nhiều cây trồng như lúa mì, lúa

mạch, ngô, đậu tương, hoa hướng dương, cây bông, cây cải dầu và cây lúa, và các cây trồng đặc sản như mía, cam quýt, cây ăn quả và cây lấy hạt.

Cũng đáng lưu ý là các phương án về chế phẩm diệt cỏ theo sáng chế chứa hợp chất theo các Phương án được mô tả trên đây.

Sáng chế cũng bao gồm hỗn hợp diệt cỏ chứa (a) hợp chất được chọn từ công thức 1, *N*-oxit, và các muối của chúng, và (b) ít nhất một hoạt chất bổ sung được chọn từ (b1) chất ức chế hệ quang hợp II, (b2) chất ức chế synthaza của axit axetohydroxy (AHAS), (b3) chất ức chế axetyl-CoA carboxylaza (ACCaza), (b4) chất tựa auxin, và (b5) chất ức chế 5 enol-pyruvylshikimat-3-phosphat (EPSP) synthaza, (b6) chất làm chuyển hướng điện tử trong hệ quang hợp I, (b7) chất ức chế protoporphyrinogen oxidaza (PPO), (b8) chất ức chế glutamin synthetaza (GS), (b9) chất ức chế elongaza của axit béo mạch rất dài (VLCFA), (b10) chất ức chế vận chuyển auxin, (b11) chất ức chế phytoen desaturaza (PDS), (b12) chất ức chế 4-hydroxyphenyl pyruvat dioxyaza (HPPD), (b13) chất ức chế homogentisat solanesyltransferaza (HST), (b14) chất ức chế sinh tổng hợp xenluloza, (b15) chất diệt cỏ khác bao gồm chất phá vỡ quá trình nguyên phân, hợp chất arsen hữu cơ, asulam, bromobutit, xinmetylin, cumyluron, đazomet, đifenzoquat, đymron, etobenzanit, flurenol, fosamin, fosamin-amoni, metam, metylđymron, axit oleic, oxaziclomefon, axit pelargonic và pyributicarb, và (b16) chất an toàn diệt cỏ; và các muối của các hợp chất từ các hợp chất nêu trong các mục (b1) đến (b16).

“Chất ức chế hệ quang hợp II” (b1) là các hợp chất hoá học gắn kết với protein D-1 trên phân đoạn gắn kết Q_B và do đó phong bế sự vận chuyển điện tử từ Q_A đến Q_B trong màng thylakoit lục lạp. Các điện tử bị phong bế đi qua hệ quang hợp II được chuyển nhờ một loạt phản ứng để tạo ra các hợp chất độc phá vỡ màng tế bào và gây hiện tượng phồng lục lạp, rò rỉ màng, và cuối cùng là phá vỡ cấu trúc tế bào. Phân đoạn gắn kết Q_B có ba vị trí gắn kết khác nhau: vị trí gắn kết A gắn kết triazin như atrazin, triazinon như hexazinon, và uraxil như bromaxil, vị trí gắn kết B gắn kết phenylure như diuron, và vị trí gắn kết C gắn kết benzothiadiazol như bentazon, nitril như bromoxynil và phenyl-pyridazin như pyridat. Ví dụ, về chất ức chế hệ quang hợp II bao gồm ametryn, amicarbazon,

atrazin, bentazon, bromaxin, bromfenoxim, bromoxynil, clobromuron, cloridazon, clotoluron, cloxuron, cumyluron, xyanazin, đaimuron, đesmedipham, đesmetryn, đimefuron, đimetametryn, điuiron, ethidimuron, fenuron, flometuron, hexazinon, ioxynil, isoproturon, isouron, lenaxil, linuron, metamitron, metabenzthiazuron, metobromuron, metoxuron, metribuzin, monolinuron, neburon, pentanochlor, phenmedipham, prometon, prometryn, propanil, propazin, pyridafol, pyridat, siduron, simazin, simetryn, tebuthiuron, terbaxin, terbumeton, terbutylazin, terbutryn và trietazin. Lưu ý là hợp chất theo sáng chế được phối trộn với atrazin, bromoxynil hoặc bentazon. Đáng lưu ý là hợp chất theo sáng chế được phối trộn với atrazin, bromoxynil hoặc metribuzin.

“Chất ức chế AHAS” (b2) là các hợp chất hoá học ức chế synthaza của axit axetohydroxy (AHAS), còn được gọi là axetolactat synthaza (ALS), và do đó tiêu diệt thực vật bằng cách ức chế quá trình tạo ra axit amin béo mạch nhánh như valin, leuxin và isoleuxin, cần cho quá trình tổng hợp protein và sinh trưởng tế bào. Ví dụ, về chất ức chế AHAS bao gồm amidosulfuron, azimsulfuron, bensulfuron-metyl, bispyribac-natri, cloransulam-metyl, clorimuron-etyl, closulfuron, xinosulfuron, xyclosulfamuron, diclosulam, etametsulfuron-metyl, etoxysulfuron, flazasulfuron, florasulam, flucarbazon-natri, flumetsulam, flupyrsulfuron-metyl, flupyrsulfuron-natri, foramsulfuron, halosulfuron-metyl, imazametabenz-metyl, imazamox, imazapic, imazapyr, imazaquin, imazetapyr, imazosulfuron, iodosulfuron-metyl (bao gồm muối natri), iofensulfuron (2-iodo-*N*-[[[(4-methoxy-6-methyl-1,3,5-triazin-2-yl)amino]carbonyl]benzensulfonamit), mesosulfuron-metyl, metazosulfuron (3-clo-4-(5,6-đihydro-5-methyl-1,4,2-đioxazin-3-yl)-*N*-[[[(4,6-đimethoxy-2-pyrimidinyl)amino]carbonyl]-1-methyl-1*H*-pyrazol-5-sulfonamit), metosulam, metsulfuron-metyl, nicosulfuron, oxasulfuron, penoxsulam, primisulfuron-metyl, propoxycarbazon-natri, propyrisulfuron (2-clo-*N*-[[[(4,6-đimethoxy-2-pyrimidinyl)amino]carbonyl]-6-propylimidazo[1,2-*b*]pyridazin-3-sulfonamit), prosulfuron, pyrazosulfuron-etyl, pyribenzoxim, pyriftalit, pyriminobac-metyl, pyriothiobac-natri, rimsulfuron, sulfometuron-metyl, sulfosulfuron, thiencarbazon, thifensulfuron-metyl, triafamone (*N*-[2-[(4,6-

dimetoxy-1,3,5-triazin-2-yl)carbonyl]-6-flophenyl]-1,1-điflo-*N*-methylmetansulfonamit), triasulfuron, tribenuron-metyl, trifloxysulfuron (bao gồm muối natri), triflusulfuron-metyl và tritosulfuron. Lưu ý là hợp chất theo sáng chế được phối trộn với nicosulfuron, flupyrasulfuron hoặc clorimuron.

“Chất ức chế ACCaza” (b3) là các hợp chất hoá học ức chế enzym axetyl CoA carboxylaza có tác dụng xúc tác giai đoạn sớm trong quá trình tổng hợp lipit và axit béo ở thực vật. Lipit là hợp phần thiết yếu của màng tế bào, và không có chúng thì các tế bào mới không thể tạo ra được. Việc ức chế axetyl CoA carboxylaza và việc thiếu quá trình tạo lipit sau đó dẫn đến việc làm mất tính nguyên vẹn màng tế bào, nhất là ở các vùng phát triển tích cực như mô phân sinh. Cuối cùng, sự phát triển ở chồi và thân rễ bị ngừng, và mô phân sinh của chồi và chồi của thân rễ bị sâu ăn hết. Ví dụ, về chất ức chế ACCaza bao gồm aloxyđim, butroxyđim, clethodim, clodinafop, xycloxyđim, xyhalofop, điclofop, fenoxaprop, fluazifop, haloxyfop, pinoxaden, profoxyđim, propaquizafop, quizalofop, setoxyđim, tepraloxymet và tralkoxyđim, bao gồm các dạng phân giải như fenoxaprop-P, fluazifop-P, haloxyfop-P và quizalofop-P và các dạng este như clodinafop-propargyl, xyhalofop-butyl, điclofop-metyl và fenoxaprop-P-etyl. Lưu ý là hợp chất theo sáng chế được phối trộn với pinoxaden hoặc quizalofop.

Auxin là hormon thực vật điều hòa quá trình sinh trưởng ở nhiều mô thực vật. “Chất tựa auxin” (b4) là các hợp chất hoá học tựa hormon sinh trưởng thực vật auxin, do đó gây ra sự sinh trưởng mất kiểm soát và thiếu tổ chức dẫn đến chết thực vật ở các loài mẫn cảm. Ví dụ, về chất tựa auxin bao gồm aminoxyclopyrachlor (axit 6-amino-5-clo-2-xyclopropyl-4-pyrimidin carboxylic) và các este metyl và etyl của nó và các muối natri và kali của nó, aminopyralit, benazolin-etyl, cloramben, clacyfos, clomeprop, clopyralid, dicamba, 2,4-D, 2,4-DB, đicloprop, fluroxypyr, halauxifen (axit 4-amino-3-clo-6-(4-clo-2-flo-3-metoxyphe-nyl)-2-pyridin-carboxylic), halauxifen-metyl (metyl 4-amino-3-clo-6-(4-clo-2-flo-3-metoxyphe-nyl)-2-pyridin-carboxylat), MCPA, MCPB, mecoprop, picloram, quinclorac, quinmerac, 2,3,6-TBA, triclopyr, và metyl 4-amino-3-clo-6-(4-clo-2-flo-3-metoxyphe-nyl)-5-flo-2-pyridin-carboxylat. Đáng lưu ý là hợp chất

theo sáng chế được phối trộn với dicamba.

“Chất ức chế EPSP syntaza” (b5) là các hợp chất hoá học ức chế enzym, 5-enol-pyruvylshikimat-3-phosphat synthaza, liên quan đến quá trình tổng hợp axit amin thơm như tyrosin, tryptophan và phenylalanin. Chất ức chế thuốc diệt cỏ EPSP được hấp thụ một cách dễ dàng qua tán lá cây và dịch chuyển trong libe đến các điểm sinh trưởng. Glyphosat là thuốc diệt cỏ hậu nảy mầm tương đối không chọn lọc thuộc nhóm này. Glyphosat bao gồm các este và các muối như amoni, isopropylamoni, kali, natri (kể cả sesquinatri) và trimesi (theo cách khác còn được gọi là sulfosat).

“Chất làm chuyển hướng điện tử trong hệ quang hợp I” (b6) là các hợp chất hoá học nhận các điện tử từ hệ quang hợp I, và sau một vài chu trình, sinh ra các gốc hydroxyl. Các gốc này cực kỳ dễ phản ứng và phá hủy một cách dễ dàng các lipid chưa bão hoà, bao gồm axit béo của màng và chất diệp lục. Điều này làm phá vỡ tính nguyên vẹn màng tế bào, gây “rò rỉ” các tế bào và các hạt cơ quan, dẫn đến việc lá mất nước và héo rũ nhanh, và cuối cùng là gây chết thực vật. Ví dụ, về dạng chất ức chế quang tổng hợp thứ hai này bao gồm điquat và paraquat.

“Chất ức chế PPO” (b7) là các hợp chất hoá học ức chế enzym protoporphyrinogen oxidaza, dẫn đến việc tạo ra một cách nhanh chóng các hợp chất có tính phản ứng cao ở thực vật làm phá vỡ màng tế bào, gây rò rỉ các chất lỏng của tế bào. Ví dụ, về chất ức chế PPO bao gồm axiflofen-natri, azafenidin, benzfendizon, bifenox, butafenaxil, carfentrazon, carfentrazon-etyl, clometoxyfen, xinidon-etyl, fluazolat, flufenpyr-etyl, flumiclorac-pentyl, flumioxazin, floglycofen-etyl, fluthiaket-metyl, fomesafen, halosafen, lactofen, oxadiargyl, oxadiazon, oxyfluorfen, pentoxazon, profluazol, pyraclonil, pyraflufen-etyl, saflufenacil, sulfentrazon, thidiazimin và tiafenacil (metyl *N*-[2-[[2-clo-5-[3,6-dihydro-3-metyl-2,6-dioxo-4-(triflometyl)-1(2*H*)-pyrimidinyl]-4-flophenyl]thio]-1-oxopropyl]-β-alaninat).

“Chất ức chế GS” (b8) là các hợp chất hoá học ức chế hoạt tính của enzym glutamin synthetaza, mà thực vật sử dụng để chuyển hóa amoniac thành glutamin. Tiếp theo, amoniac tích tụ và mức glutamin giảm. Việc làm tổn hại ở thực vật có

lẽ xảy ra do tác dụng kết hợp của amoniac độc tính và sự thiếu hụt axit amin cần cho các quá trình trao đổi chất khác. Chất ức chế GS bao gồm glufosinat và các este và các muối của chúng, như glufosinat-amoni và dẫn xuất phosphinothrixin khác, glufosinat-P ((2*S*)-2-amino-4-(axit hydroxymetylphosphinyl)butanoic) và bilanaphos.

“Chất ức chế VLCFA elongaza” (b9) là thuốc diệt cỏ có nhiều cấu trúc hóa học khác nhau, ức chế elongaza. Elongaza là một trong số các enzym nằm ở trong hoặc gần lục lạp liên quan đến quá trình sinh tổng hợp VLCFAs. Ở thực vật, axit béo mạch rất dài là thành phần chính của polyme kỵ nước ngăn ngừa hiện tượng khô lá ở bề mặt lá và tạo ra độ ổn định cho hạt phấn hoa. Thuốc diệt cỏ như vậy bao gồm axetoclo, alaclo, anilofos, butaclo, cafenstrol, đimethachlor, đimethenamit, diphenamit, fenoxasulfon (3-[[2,5-điclo-4-etoxyphenyl)metyl]sulfonyl]-4,5-đihydro-5,5-đimetylisoxazol), fentrazamit, flufenaxet, indanofan, mefenaxet, metazaclo, metolaclo, naproanilit, napropamit, napropamit-M ((2*R*)-*N,N*-đietyl-2-(1-naphtalenyloxy)propanamit), pethoxamid, piperophos, pretilaclo, propaclo, propisoclo, pyroxasulfon, và thenylclo, bao gồm các dạng phân giải như S-metolaclo và cloaxetamit và oxyaxetamit. Đáng lưu ý là hợp chất theo sáng chế được phối trộn với flufenaxet.

“Chất ức chế vận chuyển auxin” (b10) là các hợp chất hóa học ức chế vận chuyển auxin ở thực vật, như bằng cách gắn kết với protein mang auxin. Ví dụ, về chất ức chế vận chuyển auxin bao gồm điflufenzopyr, naptalam (còn được gọi là axit *N*-(1-naphtyl)phtalamic và axit 2-[(1-naphtalenylamino)carbonyl]benzoic).

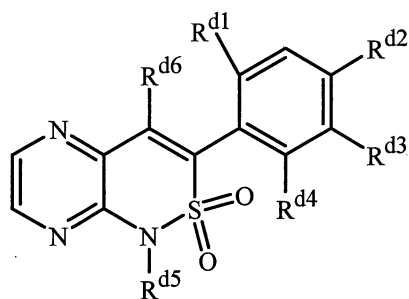
“Chất ức chế PDS” (b11) là các hợp chất hóa học ức chế quá trình sinh tổng hợp carotenoid ở bước phytoen desaturaza. Ví dụ, về chất ức chế PDS bao gồm beflubutamit, điflufenican, fluridon, flurochloridone, flurtamon norflurzon và picolinafen.

“Chất ức chế HPPD” (b12) là các hợp chất hóa học ức chế quá trình sinh tổng hợp 4-hydroxyphenyl-pyruvat dioxyaza. Ví dụ, về chất ức chế HPPD bao gồm benzobixyclon, benzofenap, bixyclopyron (4-hydroxy-3-[[2-[(2-metoxyetoxy)metyl]-6-(triflometyl)-3-pyridinyl]carbonyl]bixyclo[3,2,1]oct-3-en-

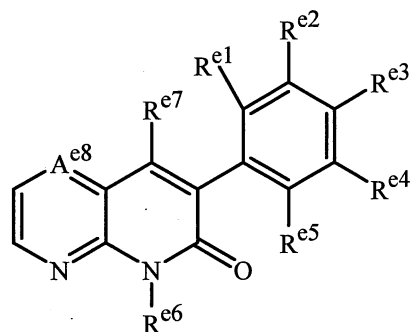
2-on), fenquintotriol (2-[[8-clo-3,4-đihydro-4-(4-metoxiphenyl)-3-oxo-2-quinoxaliny]carbonyl]-1,3-xyclohexandion), isoxaclotol, isoxaflutol, mesotriol, pyrasulfotol, pyrazolynat, pyrazoxyfen, sulcotriol, tefuryltrion, tembotriol, topamezon, 5-clo-3-[(2-hydroxy-6-oxo-1-xyclohexen-1-yl)carbonyl]-1-(4-metoxiphenyl)-2(1*H*)-quinoxalino, 4-(2,6-đietyl-4-metylphenyl)-5-hydroxy-2,6-đimetyl-3(2*H*)-pyridazinon, 4-(4-flophenyl)-6-[(2-hydroxy-6-oxo-1-xyclohexen-1-yl)carbonyl]-2-metyl-1,2,4-triazin-3,5(2*H*,4*H*)-đion, 5-[(2-hydroxy-6-oxo-1-xyclohexen-1-yl)carbonyl]-2-(3-metoxiphenyl)-3-(3-metoxipropyl)-4(3*H*)-pyrimidinon, 2-metyl-*N*-(4-metyl-1,2,5-oxadiazol-3-yl)-3-(metylsulfinyl)-4-(triflometyl)benzamid và 2-metyl-3-(metylsulfonyl)-*N*-(1-metyl-1*H*-tetrazol-5-yl)-4-(triflometyl)benzamid. Đáng lưu ý là hợp chất theo sáng chế được phối trộn với mesotriol hoặc pyrasulfatol.

Chất ức chế HST (homogentisat solanesyltransferaza) (b13) có tác dụng phá vỡ khả năng của thực vật trong việc chuyển hóa homogentisat thành 2-metyl-6-solanyl-1,4-benzoquinon, nhờ đó phá vỡ quá trình sinh tổng hợp carotenoid. Ví dụ, về chất ức chế HST bao gồm haloxyđin, pyriclo, 3-(2-clo-3,6-điflophenyl)-4-hydroxy-1-metyl-1,5-naphthyridin-2(1*H*)-on, 7-(3,5-điclo-4-pyridinyl)-5-(2,2-đifloetyl)-8-hydroxypyrido[2,3-*b*]pyrazin-6(5*H*)-on và 4-(2,6-đietyl-4-metylphenyl)-5-hydroxy-2,6-đimetyl-3(2*H*)-pyridazinon.

Chất ức chế HST cũng bao gồm hợp chất có các công thức A và B.



A



B

trong đó R^{d1} là H, Cl hoặc CF_3 ; R^{d2} là H, Cl hoặc Br; R^{d3} là H hoặc Cl; R^{d4} là H, Cl hoặc CF_3 ; R^{d5} là CH_3 , CH_2CH_3 hoặc CH_2CHF_2 ; và R^{d6} là OH, hoặc

-OC(=O)-*i*-Pr; và Re^1 là H, F, Cl, CH₃ hoặc CH₂CH₃; Re^2 là H hoặc CF₃; Re^3 là H, CH₃ hoặc CH₂CH₃; Re^4 là H, F hoặc Br; Re^5 là Cl, CH₃, CF₃, OCF₃ hoặc CH₂CH₃; Re^6 là H, CH₃, CH₂CHF₂ hoặc C≡CH; Re^7 là OH, -OC(=O)Et, -OC(=O)-*i*-Pr hoặc -OC(=O)-*t*-Bu; và Ae^8 là N hoặc CH.

Chất ức chế sinh tổng hợp xenluloza (b14) ức chế quá trình sinh tổng hợp xenluloza ở các thực vật nhất định. Chúng hiệu quả nhất khi sử dụng ở giai đoạn tiền nảy mầm hoặc ở giai đoạn hậu nảy mầm sớm trên thực vật non hoặc thực vật sinh trưởng nhanh. Ví dụ, về chất ức chế sinh tổng hợp xenluloza bao gồm clothiamit, điclobenil, flupoxam, indaziflam (*N*²-[(1*R*,2*S*)-2,3-đihydro-2,6-đimetyl-1*H*-inden-1-yl]-6-(1-floetyl)-1,3,5-triazin-2,4-điamin), isoxaben và triaziflam.

Chất diệt cỏ khác (b15) bao gồm chất diệt cỏ tác động thông qua nhiều kiểu tác động khác nhau như chất phá vỡ quá trình nguyên phân (ví dụ, flamprop-M-metyl và flamprop-M-isopropyl), hợp chất arsen hữu cơ (ví dụ, DSMA, và MSMA), chất ức chế 7,8-đihydropteroat synthaza, chất ức chế tổng hợp isoprenoit lục lạp và chất ức chế sinh tổng hợp thành tế bào. Chất diệt cỏ khác bao gồm các chất diệt cỏ có kiểu tác động chưa biết hoặc không nằm trong một tiêu chí cụ thể được liệt kê trong (b1) đến (b14) hoặc tác động thông qua kết hợp các kiểu tác động nêu trên. Ví dụ, về chất diệt cỏ khác bao gồm aclonifen, asulam, Amitrol, brombutit, xinmetylin, clomazon, cumyluron, xyclopyrimorat (6-clo-3-(2-xyclopropyl-6-metylphenoxy)-4-pyridazinyl 4-morpholincacboxylat), đaimuron, đifenzoquat, etobenzanit, flometuron, flurenol, fosamin, fosamin-amoni, đazomet, đymron, ipfencarbazon (1-(2,4-điclophenyl)-*N*-(2,4-điflophenyl)-1,5-đihydro-*N*-(1-metyletyl)-5-oxo-4*H*-1,2,4-triazol-4-carboxamit), metam, metylđymron, axit oleic, oxaziclomefon, axit pelargonic, pyributicarb và 5-[[[2,6-điflophenyl)methoxy]metyl]-4,5-đihydro-5-metyl-3-(3-metyl-2-thienyl)isoxazol.

“Chất an toàn diệt cỏ” (b16) là chất được bổ sung vào chế phẩm diệt cỏ để làm mất hoặc giảm tác động gây độc thực vật của thuốc diệt cỏ đối với các cây trồng nhất định. Các hợp chất này có tác dụng bảo vệ cây trồng không bị tổn hại

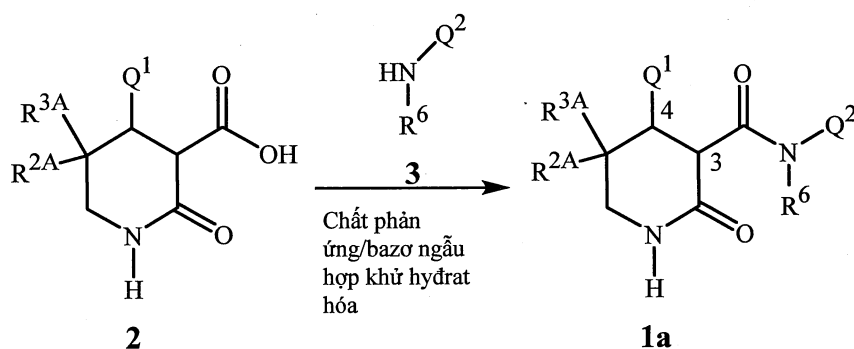
bởi thuốc diệt cỏ, nhưng thường không ngăn cản được việc phòng trừ thực vật không mong muốn của thuốc diệt cỏ. Ví dụ, về chất an toàn diệt cỏ bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, benoxacor, cloquintoxet-mexyl, cumyluron, xyometrinil, xyprosulfamid, đaimuron, điclomit, dixyclonon, dimepiperat, fenchlorazol-etyl, fenclorim, flurazol, fluxofenim, furilazol, isoxadifen-etyl, mefenpyr-dietyl, mephenat, metoxyphenon; naphtalic anhydrit, oxabetrinil, *N*-(aminocarbonyl)-2-methylbenzensulfonamid và *N*-(aminocarbonyl)-2-flobenzensulfonamid, 1-brom-4-[(clometyl)sulfonyl]benzen, 2-(điclometyl)-2-metyl-1,3-dioxolan (MG 191), 4-(đicloaxetyl)-1-oxa-4-azospiro[4,5]đecan (MON 4660), 2,2-điclo-1-(2,2,5-trimetyl-3-oxazolidinyl)-etanon và 2-metoxy-*N*-[[4-[[[(metylaminocarbonyl)amino]phenyl]sulfonyl]-benzamid. Đáng lưu ý là 2-metoxy-*N*-[[4-[[[(metylaminocarbonyl)amino]phenyl]sulfonyl]-benzamid (còn được gọi theo cách khác là *N*-(2-metoxybenzoyl)-4-[(metylaminocarbonyl)amino]benzensulfonamid; CAS #129531-12-0) được phối trộn với hợp chất bất kỳ trong số các hợp chất được liệt kê trong Bảng A.

Hợp chất có công thức 1 có thể được điều chế bằng các phương pháp chung đã biết trong lĩnh vực hoá hữu cơ tổng hợp. Đáng lưu ý là các phương pháp được mô tả sau đây trong các Sơ đồ 1–15 và các biến thể của chúng. Các định nghĩa về R^1 , R^2 , R^3 , R^{2A} , R^{3A} , R^4 , R^5 , R^6 , Q^1 , Q^2 , Y^1 , và Y^2 trong hợp chất có công thức 1 đến 19 dưới đây là như được xác định trên đây trong phần Bản chất kỹ thuật của sáng chế, trừ khi có quy định khác. Các công thức 1a–1h và 5a và 10a là các nhóm công thức phụ khác nhau của lần lượt hợp chất có công thức 1, 5 và 10. Phần tử thế cho mỗi công thức trong nhóm công thức phụ là như được xác định cho công thức gốc của nó trừ khi có quy định khác.

Như được thể hiện trong Sơ đồ 1, hợp chất có công thức 1a (tức là công thức 1 trong đó R^1 , R^2 , R^3 , R^4 và R^5 là H, và Y^1 và Y^2 là O) có thể được điều chế bằng cách cho các axit có công thức 2 phản ứng với amin có công thức 3 với sự có mặt của chất phản ứng ngẫu hợp khử hydrat như anhydrit propylphosphonic, đixyclohexylcarbodiimit, *N*-(3-đimetylaminopropyl)-*N'*-etylcarbodiimit, *N,N'*-cacbonylđiimidazol, 2-clo-1,3-đimetylimidazoli clorua hoặc 2-clo-1-

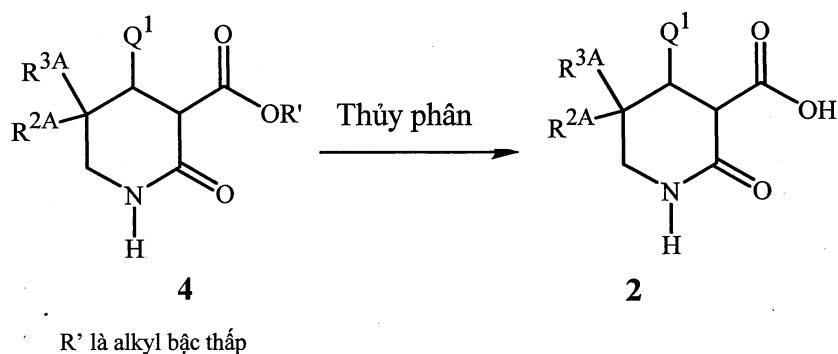
methylpyridinium iđua. Chất phản ứng nền polyme, như xyclohexylcarbodiimide nền polyme, cũng thích hợp. Các phản ứng này thường vận hành ở các nhiệt độ nằm trong khoảng từ 0–60°C trong dung môi như đicłometan, axetonitril, *N,N*-đimetylformamit hoặc etyl axetat với sự có mặt của bazơ như trietylamin, *N,N*-điisopropylamin, hoặc 1,8-điazabixyclo[5,4,0]undec-7-en. Xem: *Organic Process Research & Development* 2009, 13, 900–906 về các điều kiện ngẫu hợp dùng anhydrit propylphosphonic. Phương pháp theo Sơ đồ 1 sử dụng anhydrit propylphosphonic được minh họa bằng Bước E của Ví dụ tổng hợp 1. Phần tử thế ở vị trí 3 và 4 của vòng piperidinon của lần lượt hợp chất có công thức 1a, tức là C(O)N(Q²)(R⁶) và Q¹, chủ yếu ở dạng cấu hình trans.

Sơ đồ 1



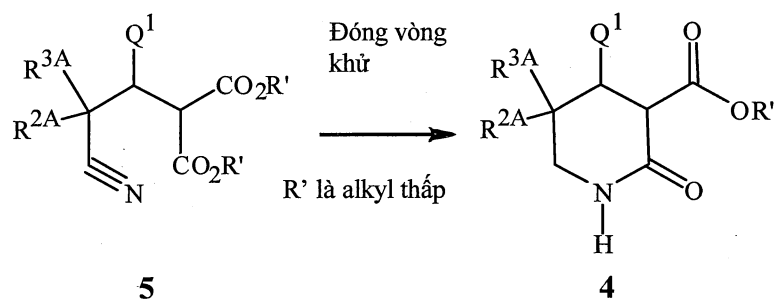
Như được thể hiện trong Sơ đồ 2, hợp chất có công thức 2 có thể được điều chế bằng cách thủy phân các este có công thức 4 bằng các phương pháp đã biết đối với người có hiểu biết trong lĩnh vực kỹ thuật này. Việc thủy phân được thực hiện bằng nước bazơ hoặc nước axit, thường với sự có mặt của đồng dung môi. Các bazơ thích hợp cho phản ứng bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, hydroxit natri và kali hydroxit và cacbonat như natri và kali cacbonat. Các axit thích hợp cho phản ứng bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, axit vô cơ như axit clohydric, axit bromhydric và axit sulfuric, và axit hữu cơ như axit axetic và axit trifloaxetic. Một loạt các chất đồng dung môi khác nhau thích hợp để phản ứng bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, metanol, etanol và tetrahydrofuran. Phản ứng được tiến hành ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ -20°C đến nhiệt độ sôi của dung môi, và thường là nằm trong khoảng từ 0 đến 100°C . Phương pháp theo Sơ đồ 2 được minh họa bằng Bước D của Ví dụ tổng hợp 1.

Sơ đồ 2



Như được thể hiện trong Sơ đồ 3, hợp chất có công thức 4 có thể thu được bằng cách khử hợp chất có công thức 5 và tiếp theo là đóng mạch vòng in situ hợp chất trung gian amin. Một loạt các phương pháp khử nhóm nitro béo trong hợp chất có công thức 5 đã biết trong tài liệu chuyên ngành. Các phương pháp đã biết đối với người có hiểu biết trong lĩnh vực kỹ thuật này bao gồm phương pháp hydro hóa bằng xúc tác với sự có mặt của niken Raney và lithi nhôm hydrit. Phương pháp theo Sơ đồ 3 được minh họa bằng Bước C của Ví dụ tổng hợp 1.

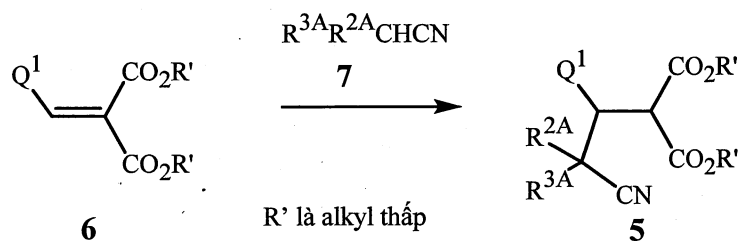
Sơ đồ 3



Như được thể hiện trong Sơ đồ 4, hợp chất có công thức 5 có thể được điều chế bằng cách cho dieste của Công thức 6 phản ứng với nitroalkan có công thức 7, thường với sự có mặt của bazơ. Các bazơ thích hợp cho phản ứng bao gồm alkoxit thấp của kim loại kiềm như natri metoxit trong metanol hoặc natri etoxit trong etanol. Các bazơ như lithi hexametyldisilazit trong tetrahydrofuran cũng là hữu ích. Phương pháp theo Sơ đồ 4 được minh họa bằng Bước B của Ví dụ tổng hợp 1. Hợp chất có công thức 6 có thể được điều chế một cách dễ dàng bằng các phương pháp đã biết đối với người có hiểu biết trong lĩnh vực kỹ thuật này, ví dụ, bằng

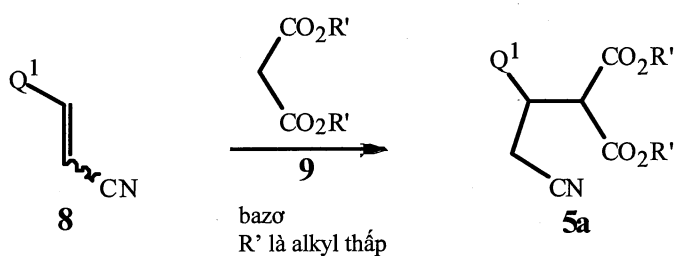
phương pháp ngưng tụ Knoevenagel aldehyt và malonat (xem, ví dụ, G. Jones, *Organic Reactions* Volume 15, John Wiley và Sons, 1967).

Sơ đồ 4



Hợp chất có công thức 5a (tức là Công thức 5 trong đó R^{2A} và R^{3A} là H) có thể được điều chế bằng cách cho hợp chất có công thức 8 phản ứng với malonat có công thức 9 với sự có mặt của bazơ như được thể hiện trong Sơ đồ 5. Các bazơ thích hợp cho phản ứng này bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, alkoxit thấp của kim loại kiềm như natri metoxit trong metanol hoặc natri etoxit trong etanol, hoặc các bazơ như lithi bis(trimetylsilyl)amit, natri bis(trimetylsilyl)amit và lithi diisopropylamit trong các dung môi như tetrahydrofuran. Thông thường, phản ứng được thực hiện ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ $-78^\circ C$ đến $23^\circ C$. Nitroalken có công thức 8 có thể được điều chế một cách dễ dàng từ aldehyt và nitrometan bằng các phương pháp đã biết đối với người có hiểu biết trong lĩnh vực kỹ thuật này.

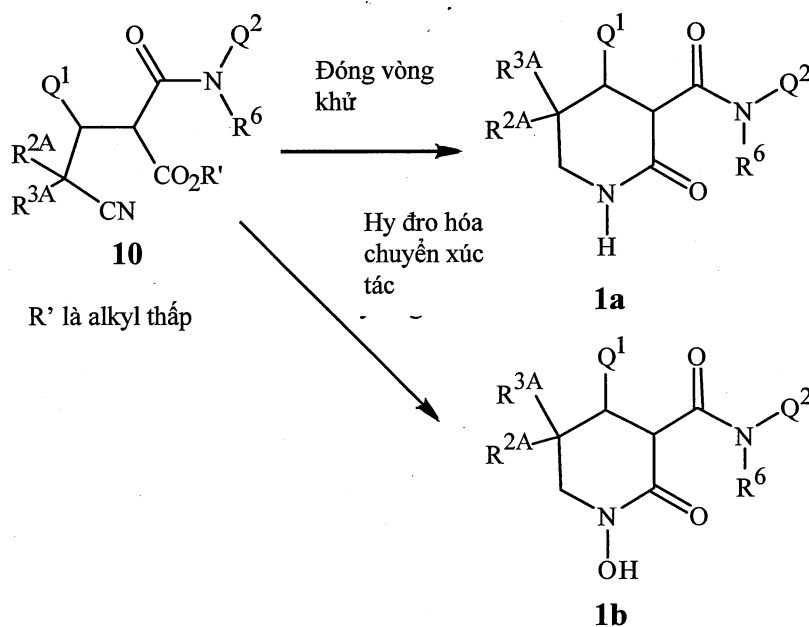
Sơ đồ 5



Như được thể hiện trong Sơ đồ 6, hợp chất có công thức 1a cũng có thể được điều chế bằng cách đóng mạch vòng khử hợp chất có công thức 10 tương tự theo phương pháp theo Sơ đồ 3. Như được thể hiện trong Sơ đồ 6, hợp chất có công thức 1b (tức là công thức 1 trong đó R^1 là OH, R^{2A} , R^{3A} , R^4 và R^5 là H, và Y^1 và Y^2 là O) có thể được điều chế từ hợp chất có công thức 10 bằng cách hydro

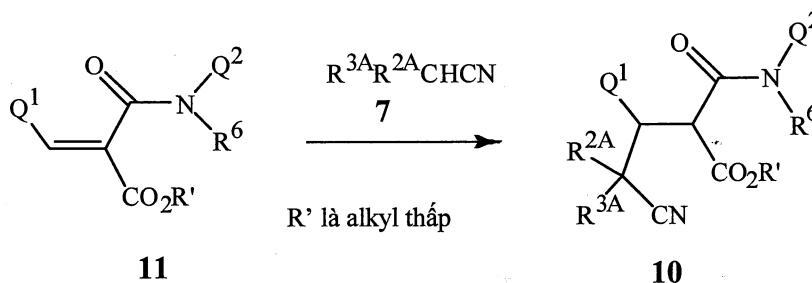
hóa chuyển hóa bằng cách xúc tác bằng amoni format với sự có mặt của paladi trên cacbon, và tiếp theo là đóng mạch vòng in situ sản phẩm trung gian hydroxylamin. Xem *J. Med. Chem.* 1993, 36, 1041–1047 về các điều kiện hydro hóa/đóng mạch vòng chuyển hóa bằng cách xúc tác để tạo ra *N*-hydroxypiperidinon.

Sơ đồ 6



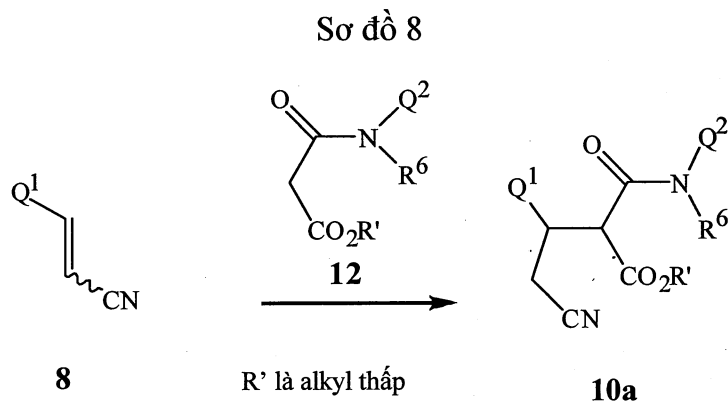
Như được thể hiện trong Sơ đồ 7, hợp chất có công thức 10 có thể được điều chế bằng cách cho hợp chất có công thức 11 phản ứng với nitril có công thức 7 trong dung môi, với sự có mặt của bazơ tương tự theo phương pháp được mô tả trong Sơ đồ 4.

Sơ đồ 7

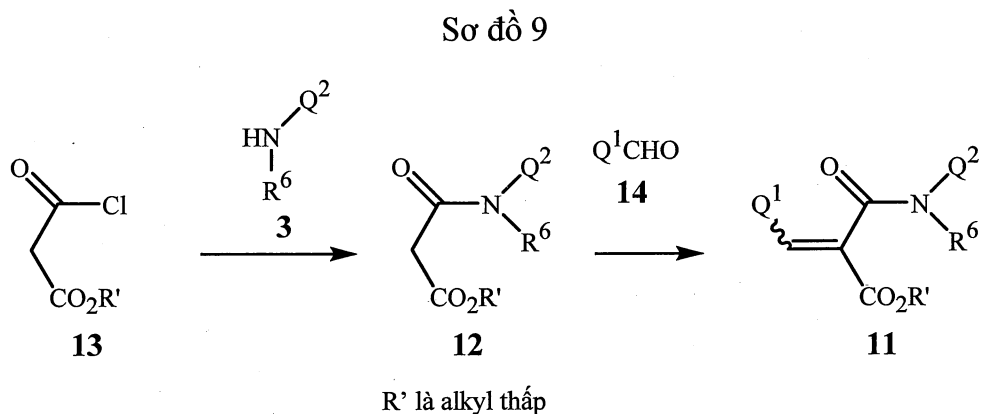


Như được thể hiện trong Sơ đồ 8, hợp chất có công thức 10a (tức là công thức 10 trong đó R^{2A} và R^{3A} là H) có thể được điều chế tương tự theo phương

pháp theo Sơ đồ 5, bằng cách cho xyanoalken có công thức 8 phản ứng với malonat có công thức 12.



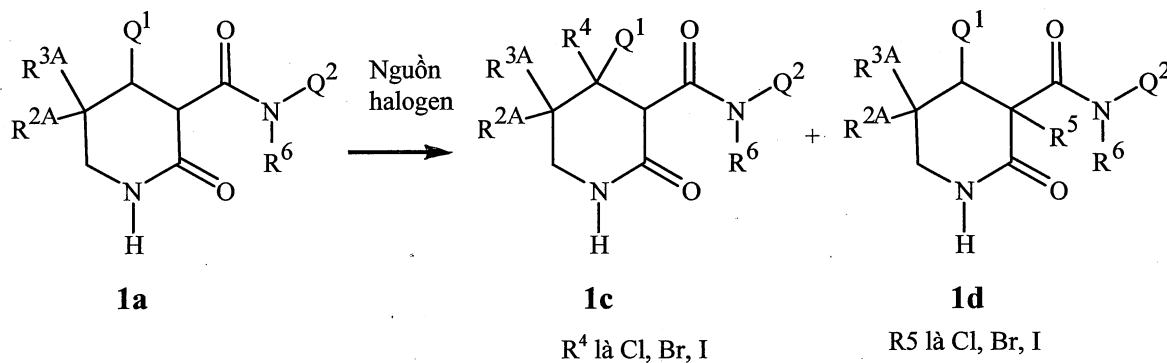
Như được thể hiện trong Sơ đồ 9, hợp chất có công thức 11 có thể được điều chế bằng cách cho malonat có công thức 12 phản ứng với aldehyt có công thức 14 bằng các phương pháp đã biết đối với người hiểu biết trong lĩnh vực kỹ thuật này. Cũng như được thể hiện trong Sơ đồ 9, malonat có công thức 12 có thể điều chế được một cách dễ dàng từ alkyl thấp malonyl clorua có công thức 13 như methyl malonyl clorua và amin có công thức 3 bằng các phương pháp đã biết đối với người hiểu biết trong lĩnh vực kỹ thuật này.



Như được thể hiện trong Sơ đồ 10, hỗn hợp của hợp chất có công thức 1c (tức là công thức 1 trong đó R¹, R², R³ và R⁵ là H, R⁴ là halogen và Y¹ và Y² là O) và công thức 1d (tức là công thức 1 trong đó R¹, R², R³ và R⁴ là H, R⁵ là halogen và Y¹ và Y² là O) có thể được điều chế bằng cách cho hợp chất có công thức 1a phản ứng với nguồn halogen trong dung môi, với sự có mặt hoặc không có mặt của chất khơi mào. Việc tách các chất đồng phân vùng tạo ra trong phản

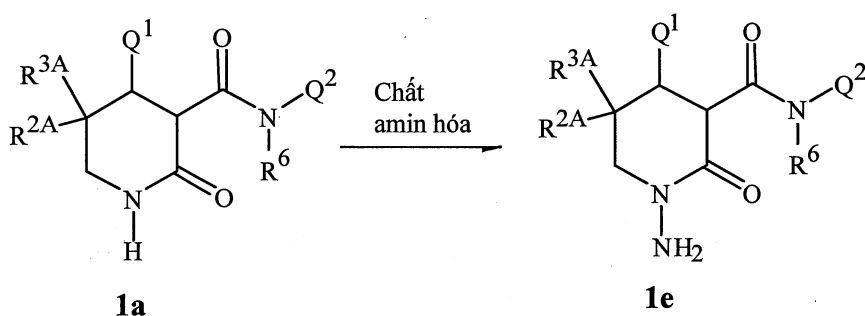
ứng này có thể đạt được bằng các phương pháp chuẩn như sắc ký hoặc kết tinh phân đoạn. Các nguồn halogen thích hợp cho phản ứng này bao gồm brom, clo, *N*-closucxinimit, *N*-bromosucxinimit và *N*-iodosucxinimit. Chất khơi mào thích hợp cho phản ứng này bao gồm 2,2'-azobisisobutyronitril (AIBN) và benzoyl peroxit. Thông thường, phản ứng được thực hiện trong các dung môi như điclorometan nằm trong khoảng từ 0°C đến nhiệt độ sôi của dung môi.

Sơ đồ 10



Như được thể hiện trong Sơ đồ 11, hợp chất có công thức 1e (tức là công thức 1 trong đó R^1 là NH_2 , R^2 , R^3 , R^4 và R^5 là H và Y^1 và Y^2 là O) có thể được điều chế bằng cách cho hợp chất có công thức 1a phản ứng với chất phản ứng amin hóa như *O*-(điphenylphosphinyl)hydroxylamin và axit hydroxylamino-*O*-sulphonic. Đối với quy trình, các điều kiện và các chất phản ứng, xem: *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters* 2009, 19, 5924–5926 and *Journal of Organic Chemistry* 2002, 67, 6236–6239.

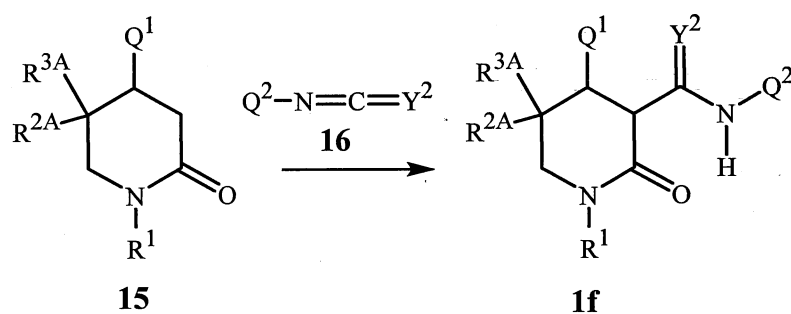
Sơ đồ 11



Như được thể hiện trong Sơ đồ 12, hợp chất có công thức 1f (tức là công thức 1 trong đó R^2 , R^3 , R^4 , R^5 và R^6 là H và Y^1 là O) có thể được tạo ra bằng

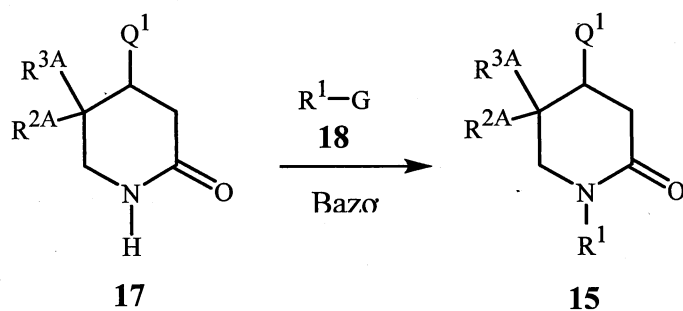
cách cho hợp chất có công thức 15 phản ứng với isoxyanat (tức là hợp chất có công thức 16 trong đó Y^2 là O) hoặc isothioxyanat (tức là hợp chất có công thức 16 trong đó Y^2 là S) với sự có mặt của bazơ. Ví dụ về bazơ mà có thể được sử dụng cho quy trình theo sáng chế bao gồm các quy trình được liệt kê cho phương pháp theo Sơ đồ 4. Nhiệt độ phản ứng có thể được chọn nằm trong khoảng từ -78°C đến nhiệt độ sôi của dung môi trơ được sử dụng. Thông thường, phản ứng được thực hiện ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ -78°C đến 100°C trong các dung môi như toluen.

Sơ đồ 12



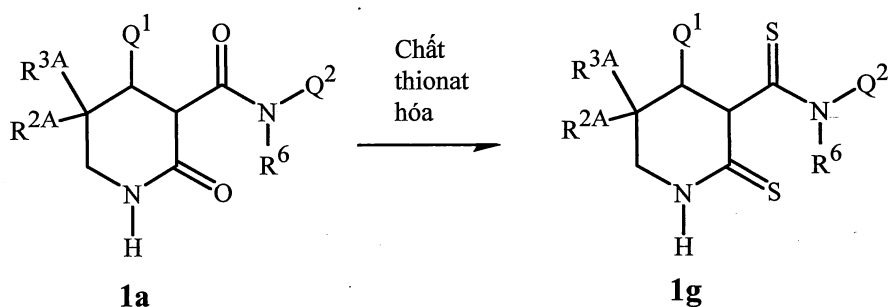
Như được thể hiện trong Sơ đồ 13, hợp chất có công thức 15 có thể được điều chế bằng cách cho hợp chất có công thức 17 phản ứng với các ái điện tử tương ứng có công thức 18 với sự có mặt của bazơ. Trong Công thức 18, G biểu thị nhóm rời chuyển, tức là chất tách nhân. Tùy thuộc vào việc chọn lọc R^1 , các ái điện tử thích hợp cho phản ứng có thể bao gồm alkyl halogenua như clorua, bromua và iodua, alkylsulfonat, axit anhydrit như *tert*-butoxycarbonyl anhydrit và axetic anhydrit, và haloalkylsilan như clotrimetylsilan. Các bazơ thích hợp cho phản ứng bao gồm bazơ vô cơ như kiềm hoặc kim loại kiềm thổ (ví dụ, lithi, natri, kali và xesi) hydroxit, alkoxit, cacbonat, và phosphat, và bazơ hữu cơ như trietylamin, *N,N*-điisopropyletylamin và 1,8-diazabicyclo[5,4,0]undec-7-en. Một loạt các dung môi thích hợp để phản ứng bao gồm, ví dụ, nhưng không chỉ giới hạn ở, tetrahydrofuran, điclorometan, *N,N*-dimetylformamit, *N,N*-dimetylaxetamit, *N*-metylpyrolidinon, axetonitril, rượu $\text{C}_2\text{--C}_6$ và axeton cũng như hỗn hợp của các dung môi này. Phản ứng này được tiến hành ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ -20 đến 200°C , và thông thường là nằm trong khoảng từ 0 đến 50°C .

Sơ đồ 13



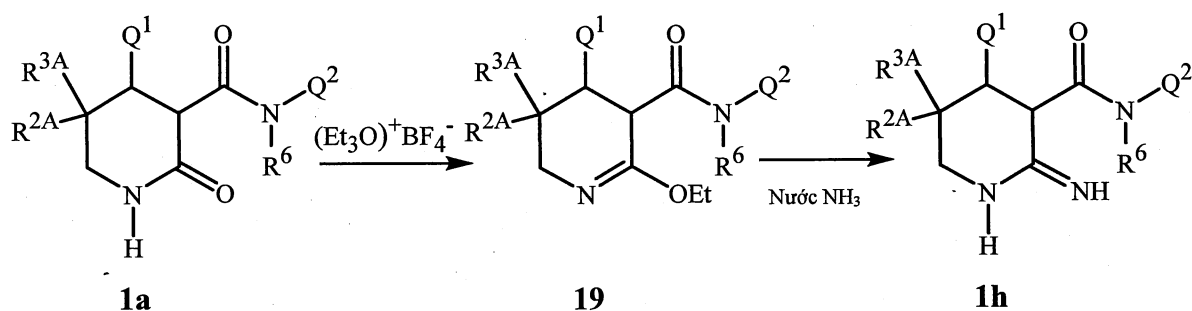
Như được thể hiện trong Sơ đồ 14, hợp chất có công thức 1g (tức là hợp chất có công thức 1 trong đó R¹, R², R³, R⁴ và R⁵ là H, và Y¹ và Y² là S) có thể được điều chế bằng cách cho hợp chất có công thức 1a phản ứng với ít nhất hai đương lượng chất phản ứng thionat hóa như chất phản ứng Lawesson, tetraphospho đecasulfua hoặc diphospho pentasulfua trong dung môi như tetrahydrofuran hoặc toluen. Thông thường, phản ứng được thực hiện ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ 0 đến 115°C. Người có hiểu biết trong lĩnh vực kỹ thuật này cần hiểu rằng việc sử dụng ít hơn hai đương lượng chất phản ứng lưu huỳnh hóa có thể tạo ra hỗn hợp chứa sản phẩm có công thức 1 trong đó Y¹ là O và Y² là S, hoặc Y¹ là S và Y² là O, mà có thể được tách bằng các phương pháp thông thường như sắc ký và kết tinh.

Sơ đồ 14



Như được thể hiện trong Sơ đồ 15, hợp chất có công thức 1h (tức là hợp chất có công thức 1 trong đó R¹, R², R³, R⁴, và R⁵ là H, Y² là O và Y¹ là NH) có thể được điều chế bằng cách alkyl hóa hợp chất có công thức 1a trietyloxoni tetrafloroborat (chất phản ứng Meerwein) tiếp đó là xử lý imino ete thu được có công thức 19 bằng nước amoniac.

Sơ đồ 15

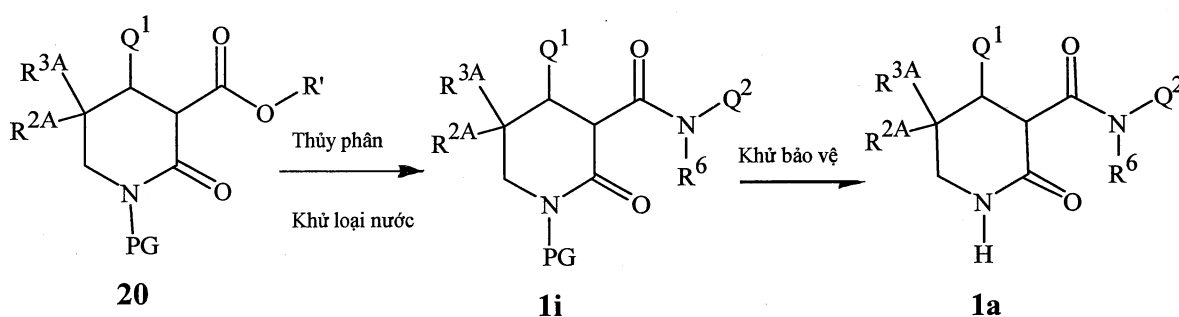


Như được thể hiện trong Sơ đồ 16, hợp chất có công thức 1a có thể được điều chế theo cách khác từ hợp chất có công thức 1i (tức là tập phụ có công thức 1, trong đó R^1 là nhóm bảo vệ, PG). Các nhóm bảo vệ thích hợp cho quá trình biến đổi này bao gồm các nhóm alkoxy, benzyloxy hoặc benzyl đã được thế hoặc không được thế. Đáng lưu ý là nhóm bảo vệ là nhóm PMB (tức là nhóm *p*-methoxybenzyl). Việc loại bỏ nhóm bảo vệ ra khỏi hợp chất có công thức 1i có thể được thực hiện bằng nhiều cách thức khác nhau. Ví dụ, việc loại bỏ nhóm bảo vệ methoxy có thể được thực hiện bằng cách sử dụng $\text{Mo}(\text{CO})_6$ hoặc SmI_2 như được mô tả trong ấn phẩm: *Synlett* 2003, 9, 1352 và *Tetrahedron Lett.* 2004, 45(22), 4229, respectively. Nhóm bảo vệ methoxy cũng có thể được loại bỏ thông qua quá trình hydro hóa có xúc tác như đã được mô tả bởi Takahashi, *Chem. Eur. J.* 2006, 12(22), 5868. Các nhóm bảo vệ benzyloxy có thể loại bỏ được bằng cách hydro hóa có xúc tác như được mô tả bởi Panday, *Tetrahedron Lett.* 1995, 36(45), 8205, cũng như bởi SmI_2 như được mô tả trong ấn phẩm: Langlois, *Tetrahedron Lett.* 2000, 41(43), 8285 hoặc Williams, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2005, 44(41), 6715. Các nhóm bảo vệ benzyl có thể được loại bỏ bởi axit trifloaxetic (Kudou, EP2336104, p125), boron triflorua eterat (Kawanaka, *Bioorg. Med. Chem.* 2003, 11(8), 1723), $\text{Ce}(\text{NH}_4)_2(\text{NO}_3)_6$ (Yuan, *Bioorg. Med. Chem. Letters*, 2007, 17(6), 1651), DDQ (Fernandez, *J. Org. Chem.* 2004, 69(10), 3562) hoặc quá trình hydro hóa có xúc tác (Tsai, *J. Org. Chem.*, 2005, 70(5), 1780). Các ví dụ khác về các nhóm bảo vệ thích hợp và việc loại bỏ chúng có thể tìm thấy trong ấn phẩm: Wuts,

P. G. M.; Greene, T. *Greene's Protective Groups in Organic Synthesis*, 4th ed.; Wiley-Interscience: New Jersey, 2007.

Cũng như được thể hiện trong Sơ đồ 16, hợp chất có công thức 1i có thể được điều chế từ hợp chất có công thức 20 bằng cách sử dụng phương pháp thủy phân/ngẫu hợp như đã mô tả cho các sơ đồ 1 và 2. Người có hiểu biết trong lĩnh vực kỹ thuật này sẽ thừa nhận rằng các phản ứng thủy phân, ngẫu hợp, và khử bảo vệ không nhất thiết phải theo một trình tự cụ thể, và có thể được bố trí để đạt được nhu cầu hoặc hoạt tính phản ứng cụ thể.

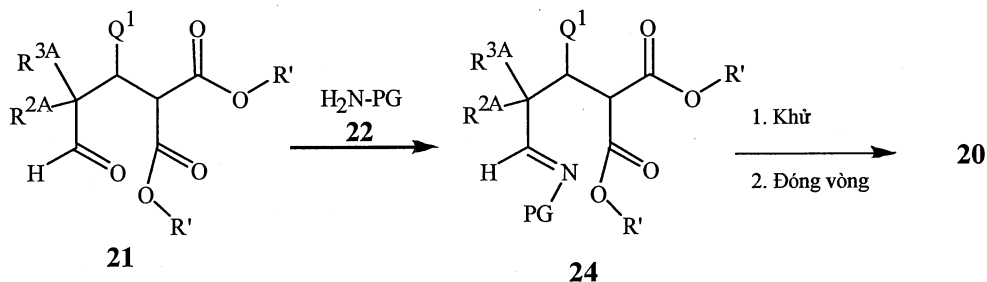
Sơ đồ 16



Hợp chất có công thức 20 có thể được điều chế từ hợp chất có công thức 21 như được thể hiện trong Sơ đồ 17. Amin có công thức 22 có thể phản ứng với hợp chất có công thức 21 để tạo ra hợp chất trung gian có công thức 24 in-situ, tiếp đó nó có thể lần lượt được khử và đóng vòng để tạo ra hợp chất có công thức 20 sau khi xử lý và tinh chế thích hợp. Amin có công thức 22 thường phản ứng với hợp chất có công thức 21 trong rượu, aren, hoặc dung môi ete như metanol, etanol, toluen, tetrahydrofuran hoặc dioxan ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ 0°C đến nhiệt độ hồi lưu của dung môi trong khoảng thời gian nằm trong khoảng từ 5 phút đến 24 giờ. Chất loại nước như $MgSO_4$ hoặc sàng rây phân tử tùy ý có thể được sử dụng để tạo thuận lợi cho việc tạo ra hợp chất trung gian có công thức 24. Việc bổ sung 1-5 đương lượng axit (ví dụ CH_3CO_2H , CF_3CO_2H hoặc HCl) có thể cũng tạo thuận lợi cho việc tạo ra hợp chất có công thức 24. Mặc dù hợp chất trung gian có công thức 24 thường được tạo ra in-situ và được khử/đóng vòng thành hợp chất có công thức 20 trong cùng một bình phản ứng, song việc phân lập hợp chất trung gian có công thức 24 có thể được thực hiện và phản ứng trong một hệ dung môi

khác để khử/đóng vòng để thu được hợp chất có công thức 20, nếu muốn. Nhiều phương pháp khác nhau sử dụng chất khử cho bước khử/đóng vòng như natri bohyđrua (Fang, WO2005/044818, p44), natri xyanobohyđrua (Pichette, *Eur. J. Org. Chem.* 2012, 7, 1328), natri triaxetoxibohyđrua (“STAB”, Brandau, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2006, 45, 4305), phức chất pyridin/Boran (Sakamoto, *J. Org. Chem.* 1994, 59(4), 929), và quá trình hydro hóa có xúc tác (Tietze, *Tetrahedron* 1989, 45, 681).

Sơ đồ 17

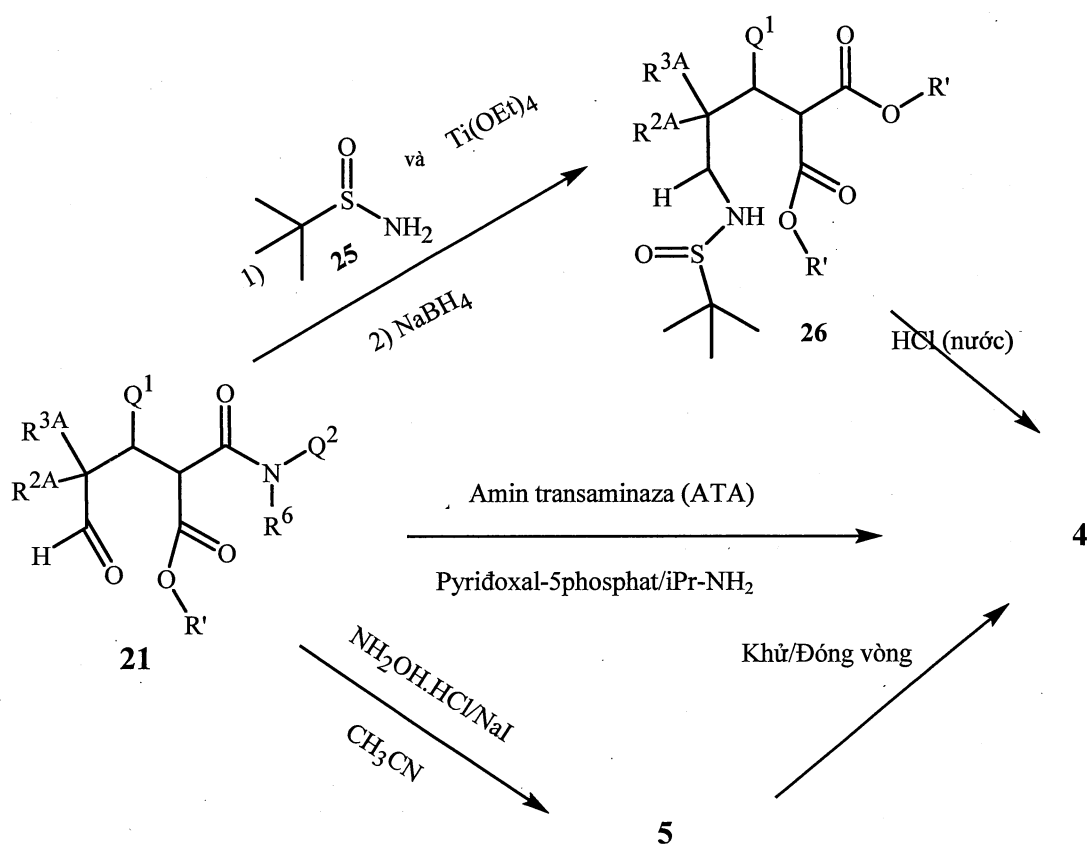


Như được thể hiện trong Sơ đồ 18, hợp chất có công thức 4 có thể được điều chế theo cách khác từ hợp chất có công thức 21 bằng cách sử dụng phương pháp đã mô tả trong WO2005/044818, trang 55. Hợp chất có công thức 21 phản ứng với hợp chất có công thức 25 với sự có mặt của titan (IV) etoxit, tiếp đó xử lý bằng natri bohyđrua để thu được hợp chất trung gian sulfonamit có công thức 26. Lần lượt khử bảo vệ bằng axit và đóng vòng hợp chất có công thức 26 nhờ đó thu được hợp chất có công thức 4.

Một phương pháp khác để tạo ra hợp chất có công thức 4 được thể hiện trong sơ đồ 18. Hợp chất có công thức 21 có thể được tiến hành quá trình khử có xúc tác sinh học bằng cách sử dụng amin transaminaza (“ATA”) theo phương pháp đã mô tả trong ấn phẩm: *Org. Process Res. Dev.* 2014, 18, 215. Phản ứng này có thể được thực hiện trong dung dịch đệm dimetyl sulfoxit/borat trong khoảng thời gian nằm trong khoảng từ 24 đến 72 giờ ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ nhiệt độ trong phòng đến 50°C nhờ sử dụng các ATA thương phẩm khác nhau (Codexis, Inc, Redwood, CA, USA). Pyridoxal-5-phosphat được sử dụng làm đồng yếu tố enzym, trong khi isopropylamin dùng làm nguồn amin.

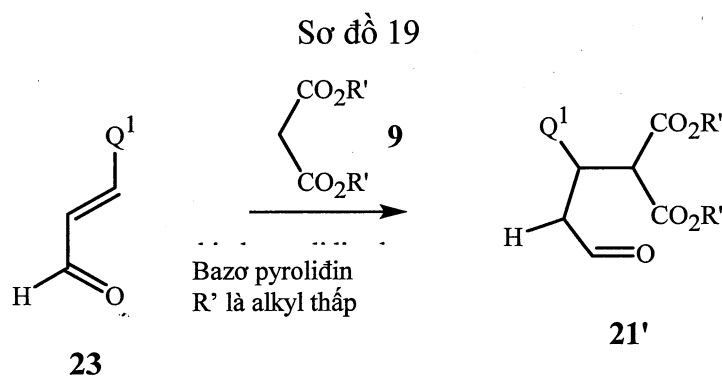
Theo cách khác, như được thể hiện trong Sơ đồ 18, hợp chất có công thức 4 có thể được điều chế từ hợp chất có công thức 21 thông qua hợp chất trung gian nitril có công thức 5. Aldehyt có công thức 21 phản ứng với hydroxylamin hydroclorua với sự có mặt của natri iodua với sự hồi lưu trong khoảng thời gian nằm trong khoảng từ 0,5 đến 24 giờ bằng cách sử dụng phương pháp được mô tả trong ấn phẩm: Ballini, *Synlett* 2003, 12, 1841. Hợp chất trung gian nitril có công thức 5 tiếp đó có thể được tiến hành đóng vòng khử để thu được hợp chất có công thức 4 bằng cách sử dụng phương pháp như đã mô tả cho sơ đồ 3.

Sơ đồ 18



Như được thể hiện trong Sơ đồ 19, hợp chất có công thức 21' (tức là tập phụ có công thức 21, trong đó $\text{R}^{2\text{A}}$ và $\text{R}^{3\text{A}}$ cả hai đều là H) có thể được điều chế bằng cách cho aldehyt có công thức 23 phản ứng với malonat có công thức 9 với sự có mặt của bazơ. Các bazơ như natri carbonat và kali carbonat đã được sử dụng để thực hiện việc biến đổi này trong các dung môi aren dưới điều kiện chuyển pha (ví dụ Kryshstal, *Synthesis*, 1979, 2, 107).

Ngoài ra, các tiến bộ gần đây trong ngành xúc tác hữu cơ đã cho thấy rằng các amin bazơ khác nhau cũng có thể được sử dụng để chuyển hóa hợp chất có công thức 23 thành hợp chất có công thức 21 (ví dụ, xem trong: Feu, *Eur. J. Org. Chem.* 2013, 5917 và các tài liệu trích dẫn trong đó; và Zhao, *Chem. Commun.* 2013, 49, 7555). Cụ thể, các bazơ pyrrolidin không đối xứng khác nhau đã được sử dụng cho việc tổng hợp lựa chọn đồng phân đối ảnh hợp chất có công thức 21' (tức là hợp chất có công thức 21 dưới dạng chất đồng phân đối ảnh riêng) (xem, ví dụ, Brandau, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2006, 45, 4305; Fang, *Org. Lett.*, 2010, 12(23), 5366; và Ghosh, *Org. Biomol. Chem.* 2012, 10, 8322). Có lợi nhất, nếu các phản ứng được tiến hành trong nước hoặc các dung môi rượu ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ 0°C đến nhiệt độ môi trường trong khoảng thời gian nằm trong khoảng từ 1 giờ đến 5 ngày. Lượng bazơ pyrrolidin được dùng nằm trong khoảng 5%–20 mol% so với malonat có công thức 9. Việc xử lý và tinh chế để thu được hợp chất có công thức 21 có thể được thực hiện bằng cách sử dụng phương pháp đã mô tả trong Brandau, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2006, 45, 4305. Aldehyt có công thức 23 là thương phẩm có bán sẵn hoặc có thể được điều chế bằng cách sử dụng các phương pháp nêu trong tài liệu chuyên ngành (xem, ví dụ, Battistuzzi, *Org. Lett.* 2003, 5(5), 777). Phương pháp này được minh họa ở Bước A của Ví dụ tổng hợp 4.



Người có hiểu biết trong lĩnh vực kỹ thuật này cần hiểu rằng các nhóm chức khác nhau có thể được chuyển hoá thành các nhóm chức khác để tạo ra các hợp chất khác nhau có công thức 1. Đối với các tài nguyên có giá trị cho thấy rằng sự hoán đổi của các nhóm chức theo kiểu dễ hiểu và đơn giản, xem Larock, R. C., *Comprehensive Organic Transformations: A Guide to Functional Group*

Preparations, 2nd Ed., Wiley-VCH, New York, 1999. Ví dụ, các hợp chất trung gian để điều chế hợp chất có công thức 1 có thể chứa nhóm nitro thơm, mà có thể được khử thành nhóm amin, và tiếp theo được chuyển hóa bằng các phản ứng đã biết rõ trong lĩnh vực kỹ thuật này như phản ứng Sandmeyer, thành các halogenua khác nhau, tạo ra hợp chất có công thức 1. Trong một số trường hợp, các phản ứng nêu trên cũng có thể được thực hiện theo trình tự xen kẽ.

Cần phải hiểu rằng một số chất phản ứng và các điều kiện phản ứng được mô tả trên đây để điều chế hợp chất có công thức 1 có thể không tương hợp với một số chức có mặt trong các hợp chất trung gian. Trong các trường hợp này, việc đưa trình tự bảo vệ/khử bảo vệ hoặc hoán chuyển nhóm chức vào quy trình tổng hợp sẽ giúp thu được các sản phẩm mong muốn. Việc sử dụng và lựa chọn các nhóm bảo vệ là dễ dàng đối với người có hiểu biết trong lĩnh vực tổng hợp hóa học (xem, ví dụ, Greene, T. W.; Wuts, P. G. M. *Protective Groups in Organic Synthesis*, 2nd ed.; Wiley: New York, 1991). Người có hiểu biết trong lĩnh vực này cần hiểu rằng, trong một số trường hợp, sau khi đưa vào chất phản ứng như được thể hiện trong các sơ đồ riêng rẽ, có thể cần thực hiện bước tổng hợp bổ sung không được mô tả chi tiết để hoàn thành quy trình tổng hợp hợp chất có công thức 1. Người có hiểu biết trong lĩnh vực này cũng cần hiểu rằng có thể cần thực hiện kết hợp các bước được minh họa trong các Sơ đồ trên đây theo một trình tự ngoài trình tự được thể hiện cụ thể để điều chế hợp chất có công thức 1.

Người có hiểu biết trong lĩnh vực này cũng cần hiểu rằng hợp chất có công thức 1 và các hợp chất trung gian được mô tả ở đây có thể tham gia vào các phản ứng ưa điện tử, ái nhân, gốc, kim loại hữu cơ, oxy hoá, và khử để bổ sung phần tử thể hoặc cải biến phần tử thể đang có.

Không cần mô tả chi tiết hơn, tin rằng người có hiểu biết trong lĩnh vực này bằng cách sử dụng phần mô tả trên đây có thể sử dụng sáng chế ở phạm vi rộng nhất của nó. Vì vậy, các Ví dụ tổng hợp sau chỉ minh họa và không giới hạn phần mô tả theo cách bất kỳ. Các bước trong các Ví dụ tổng hợp minh họa quy trình cho mỗi bước trong toàn bộ một quá trình chuyển hóa, và nguyên liệu ban đầu cho mỗi bước có thể không nhất thiết được điều chế bằng con đường điều chế cụ thể có

quy trình được mô tả trong các Ví dụ hoặc Bước khác. Tỷ lệ phần trăm là khối lượng chỉ khác là hỗn hợp dung môi sắc ký hoặc trừ khi có quy định khác. Các phần và tỷ lệ phần trăm của hỗn hợp dung môi sắc ký được tính theo thể tích, trừ khi có quy định khác. Phổ ^1H NMR được thông báo theo trường thấp ppm từ dung dịch tetrametylsilanin CDCl_3 trừ khi có quy định khác; “s” nghĩa là vạch đơn, “d” nghĩa là vạch đôi, “t” nghĩa là vạch ba, “q” nghĩa là vạch bốn, “m” nghĩa là đa vạch và “br s” nghĩa là vạch đơn rộng.

Ví dụ tổng hợp 1

Điều chế *N*-(2,3-điflophenyl)-2-oxo-4-[3-(triflometyl)phenyl]-3-piperidincarboxamit (Hợp chất 9)

Bước A: Điều chế 3-[3-(triflometyl)phenyl]-2-propenenitril

Hỗn hợp có khuấy gồm natri hydrua (1,0g, 43,1mmol) trong tetrahydrofuran (60mL) ở 0°C được bổ sung (xyanometyl)triphenylphosphoni clorua (11,6g, 34,4mmol) thành nhiều phần và hỗn hợp thu được được khuấy trong 15 phút. Dung dịch 3-(triflometyl) benzaldehyt (5,0g, 28,7mmol) trong tetrahydrofuran được bổ sung nhỏ giọt và hỗn hợp phản ứng thu được được khuấy trong 2 giờ ở nhiệt độ trong phòng. Hỗn hợp phản ứng này được rót lên được đá lạnh và chiết bằng etyl axetat. Các phẩm chiết hữu cơ đã gộp lại được làm khô (Na_2SO_4) và cô dưới áp suất giảm. Sản phẩm thô được tinh chế bằng cách sắc ký trên cột trên silica gel rửa giải bằng 7% etyl axetat/ete dầu mỏ để cho hợp chất nêu ở đề mục (4,0 g).

^1H NMR δ 7,8–7,5 (m, 4H), 7,4 (d, 1H), 6,0 (d, 1H).

Bước B: Điều chế 1,3-đietyl 2-[2-xyano-1-[3-(triflometyl)phenyl]etyl]propandioat

Dung dịch natri etoxit đã điều chế mới (960mg), được điều chế bằng cách hòa tan kim loại natri (41,8mmol) trong etanol (60mL), được bổ sung đietyl malonat (4,04g, 25,26mmol) và hỗn hợp phản ứng thu được được khuấy trong 10 phút ở 0°C . Dung dịch 3-[3-(triflometyl)phenyl]-2-propenenitril (tức là sản phẩm của Bước A, 4,0g, 21,05mmol) trong etanol được bổ sung nhỏ giọt vào hỗn hợp

phản ứng này ở 0°C, hỗn hợp thu được được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 1 giờ, và tiếp đó hồi lưu trong 2 giờ nữa. Hỗn hợp phản ứng này được rót lên được đá lạnh và chiết bằng etyl axetat. Các phẩm chiết hữu cơ đã gộp lại được làm khô (Na_2SO_4), và cô dưới áp suất giảm. Sản phẩm thô được tinh chế bằng cách sắc ký trên cột trên silica gel rửa giải bằng 10% etyl axetat/ete dầu mỏ để cho hợp chất nêu ở đề mục (6,0g).

^1H NMR δ ($\text{DMSO}-d_6$) 7,8 (s, 1H), 7,7 (d, 1H), 7,6 (d, 1H), 7,5 (t, 1H), 4,2 (q, 2H), 4,1 (q, 2H), 3,8 (q, 2H), 3,7 (m, 1H), 3,1 (m, 1H), 1,2 (t, 6H).

Bước C: Điều chế etyl 2-oxo-4-[3-(triflometyl)phenyl]-3-piperidincarboxylat

Dung dịch 1,3-đietyl 2-[2-xyano-1-[3-(triflometyl)phenyl]etyl]propandioat (tức là sản phẩm của Bước B, 6g, 16,8mmol) trong etanol (100mL) được đun nóng ở 100°C trong 16 giờ trong bình thép với sự có mặt của niken Raney (7,47g, 84,03mmol) và hydro dưới áp suất (40 atm+). Hỗn hợp phản ứng này được lọc qua đệm chất trợ lọc đất thỏ Celite® và dịch lọc được cô dưới áp suất giảm. Sản phẩm thô được nghiền thành bột cùng với pentan/đietyl ete để cho hợp chất nêu ở đề mục (3,0 g).

^1H NMR ($\text{DMSO}-d_6$) δ 7,8 (br s, 1H), 7,7 (d, 1H), 7,6 (d, 2H), 7,5 (t, 1H), 4 (d, 1H), 3,9 (m, 2H), 3,6 (t, 1H), 3,2 (m, 2H), 1,96 (m, 1H), 1,9 (m, 1H), 0,96 (t, 3H).

Bước D: Điều chế axit 2-oxo-4-[3-(triflometyl)phenyl]-3-piperidincarboxylic

Dung dịch có khuấy chứa etyl 2-oxo-4-[3-(triflometyl)phenyl]-3-piperidincarboxylat (tức là sản phẩm của Bước C, 3,0g, 9,52 mmol) trong etanol (30mL) ở 0°C được bổ sung dung dịch nước 50% natri hydroxit (2,2mL; 28,5mmol) và hỗn hợp thu được được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 2 giờ. Hỗn hợp phản ứng này được cô dưới áp suất giảm, xử lý bằng dung dịch nước 6M axit clohydric để điều chỉnh độ pH nằm trong khoảng 4–5, và chất rắn thu được được lọc và rửa bằng dietyl ete để cho hợp chất nêu ở đề mục dưới dạng chất rắn (1,8 g).

^1H NMR (DMSO- d_6) δ 12,4 (br s, 1H), 7,8 (br s, 1H), 7,6 (d, 2H), 7,4 (d, 2H), 3,6 (d, 1H), 3,4 (m, 1H), 3,2 (m, 1H), 2,01 (m, 1H), 1,9 (m, 1H).

Bước E: Điều chế *N*-(2,3-điflophenyl)-2-oxo-4-[3-(triflometyl)phenyl]-3-piperidincarboxamit

Dung dịch axit 2-oxo-4-[3-(triflometyl)phenyl]-3-piperidincarboxylic (tức là sản phẩm của Bước D, 500mg, 1,74mmol) và 2,3-đifloanilin (270mg, 2,09mmol) trong *N,N*-đimetylformamit (20mL) được bổ sung trietylamin (0,75mL, 5,22mmol) và anhydrit propylphosphonic (830mg, 2,61mmol) và hỗn hợp thu được được khuấy trong 16 giờ ở nhiệt độ trong phòng. Hỗn hợp phản ứng này được làm nguội bằng nước và chiết bằng etyl axetat (3X). Các phần chiết hữu cơ đã gộp lại được rửa bằng nước, nước muối, được làm khô (Na_2SO_4) và cô dưới áp suất giảm. Sản phẩm thô được tinh chế bằng cách sắc ký trên oxit nhôm trung tính, rửa giải bằng etyl axetat để cho hợp chất nêu ở đề mục dưới dạng chất rắn (300 mg).

^1H NMR (DMSO- d_6) δ 10,1 (s, 1H), 7,9 (br s, 1H), 7,7–7,4 (m, 5H), 7,2–7,0 (m, 2H), 3,8 (d, 1H), 3,6 (t, 1H), 3,4–3,2 (m, 2H), 2,01–1,98 (m, 2H).

Ví dụ tổng hợp 2

Điều chế *N*-(2-flophenyl)-2-oxo-4-[4-(triflometyl)phenyl]-3-piperidincarboxamit (Hợp chất 14)

Bằng cách sử dụng phương pháp nêu trong ví dụ 1, axit 2-oxo-4-[4-(triflometyl)phenyl]-3-piperidincarboxylic và 2-floanilin đã thu được hợp chất nêu ở đề mục (300mg) dưới dạng chất rắn.

^1H NMR (DMSO- d_6) δ 10,2 (br s, 1H), 8,00 (m, 1H), 7,28 (m, 5H), 7,02 (m, 3H), 6,45 (br s, 1H), 4,15 (d, 1H), 4,05 (m, 1H), 3,55 (d, 1H).

Ví dụ tổng hợp 3

Điều chế *N*-(2-clophenyl)-2-oxo-4-[4-(triflometyl)phenyl]-3-piperidincarboxamit (Hợp chất 13)

Bằng cách sử dụng phương pháp nêu trong ví dụ 1, axit 2-oxo-4-[4-(triflometyl)phenyl]-3-piperidincarboxylic và 2-cloanilin đã thu được hợp chất nêu ở đề mục (220 mg) dưới dạng chất rắn.

^1H NMR δ 9,6 (br s, 1H), 7,9 (br s, 1H), 7,7 (d, 2H), 7,6–7,5 (m, 3H), 7,4 (d, 1H), 7,3 (t, 1H), 7,1 (t, 1H), 3,9 (d, 1H), 3,6–3,5 (m, 1H), 3,4–3,2 (m, 2H), 2,0–1,9 (m, 2H).

Ví dụ tổng hợp 4

Điều chế (3*S*,4*S*)-4-(4-flophenyl)-1-metyl-2-oxo-*N*-[2-(triflometyl)phenyl]-3-piperidincarboxamit (Hợp chất 53)

Bước A: Điều chế 1,3-bis(phenylmetyl)-2-[(1*S*)-1-(4-flophenyl)-3-oxopropyl]propandioat

Dung dịch *trans*-4-floxinamaldehyt (14,57g, 97,07mmol) trong etanol (150mL) được bổ sung chất xúc tác (R)-Jorgensen (tức là (R)- α , α -Bis[3,5-bis(triflometyl)phenyl]-2-pyrolidinmetanol trimetylsilyl ete) (2,9g, 4,86mmol) và đibenzyl malonat (13,8g, 48,53mmol) ở 0°C. Hỗn hợp thu được này được khuấy ở 0°C trong 100 giờ. Sau khi hoàn thành, hỗn hợp phản ứng này được cô dưới áp suất giảm và phần cặn được rót vào nước (300mL) và chiết bằng etyl axetat (3 x 200mL). Các lớp hữu cơ đã gộp lại được rửa bằng nước, tiếp đó bằng dung dịch nước muối, và làm khô trên Na_2SO_4 khan. Hỗn hợp này được lọc và cô dưới áp suất giảm để thu được phần cặn thô. Tiếp đó, phần cặn này được tinh chế bằng cách sắc ký trên cột rửa giải bằng etyl axetat trong ete dầu mỏ (1:4) để thu được hợp chất nêu ở đề mục (12,0g) dưới dạng chất rắn màu trắng đục.

MS = 433,10 (M-1); $[\alpha]^{23}_{\text{D}} = +16,07$.

Bước B: Điều chế phenylmetyl (3*R*,4*S*)-4-(4-flophenyl)-1-metyl-2-oxo-3-piperidincarboxylat

Dung dịch 1,3-bis(phenylmetyl)-2-[(1*S*)-1-(4-flophenyl)-3-oxopropyl]propandioat (tức là sản phẩm của Bước A, 7,0g, 16,12 mmol) trong 1,4-đioxan (70mL) được bổ sung dung dịch 2*M* metylamin trong tetrahydrofuran (24,2mL, 48,37mmol) và hỗn hợp thu được này được khuấy ở nhiệt độ môi trường trong 15 phút. Tiếp đó, hỗn hợp này được bổ sung natri triaxetoxibohydrit (4,43g, 20,9mmol) ở nhiệt độ môi trường, và hỗn hợp thu được này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 16 giờ. Hỗn hợp phản ứng này được cô dưới áp suất giảm để thu được phần cặn thô, nó được pha loãng bằng etyl axetat (200mL) và rửa bằng dung dịch natri bicarbonat bão hòa (100mL) trước khi rửa bằng nước. Các lớp hữu cơ được gộp lại và làm khô trên Na₂SO₄ khan, được lọc, tiếp đó cô dưới áp suất giảm để thu được phần cặn thô. Việc tinh chế được thực hiện bằng HPLC điều chế để thu được hợp chất nêu ở đề mục (1,0g) dưới dạng chất rắn màu trắng đục.

MS = 342,20 (M+1).

Bước C: Điều chế axit (3*R*,4*S*)-4-(4-flophenyl)-1-metyl-2-oxo-3-piperidincarboxylic

Dung dịch (3*R*,4*S*)-4-(4-flophenyl)-1-metyl-2-oxo-3-piperidincarboxylat (tức là sản phẩm của Bước B, 1,0g, 3,6mmol) trong tetrahydrofuran (10mL) và nước (10mL) được bổ sung lithi hydroxit monohydrat (0,614g, 17,92mmol) và hỗn hợp thu được này được khuấy ở nhiệt độ môi trường trong 16 giờ. Hỗn hợp phản ứng này được cô dưới áp suất giảm, và phần cặn này được pha loãng bằng etyl axetat (100mL) và rửa bằng nước (50mL). Lớp hữu cơ được bỏ ra và lớp nước được axit hóa bằng dung dịch nước 1*N* axit clohydric và chiết bằng etyl axetat (3 x 30mL). Các lớp hữu cơ đã gộp lại được rửa bằng nước, dung dịch nước muối, tiếp đó làm khô trên Na₂SO₄ khan và được lọc. Việc cô phần lọc dưới áp suất giảm thu được phần cặn thô. Phần cặn thô này được tinh chế bằng cách rửa bằng dietyl ete để thu được hợp chất nêu ở đề mục (0,5 g) dưới dạng chất rắn màu trắng đục.

MS = 252,21(M+1).

Bước D: Điều chế (3*S*,4*S*)-4-(4-flophenyl)-1-metyl-2-oxo-*N*-[2-(triflometyl)phenyl]-3-piperidincarboxamit

Dung dịch axit (3*R*,4*S*)-4-(4-flophenyl)-1-metyl-2-oxo-3-piperidincarboxylic (tức là sản phẩm của Bước C, 0,2g, 0,8mmol) trong điclometan (10mL) được bổ sung 2-(triflometyl)anilin (0,153g, 0,95mmol), anhydrit propylphosphonic (dung dịch 50% trong etyl axetat, 1mL, 1,6mmol), trietylamin (0,35mL, 3,0mmol) và hỗn hợp thu được được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 16 giờ. Hỗn hợp phản ứng này được pha loãng bằng điclometan (50mL) và rửa bằng nước (20mL). Lớp hữu cơ được tách, làm khô trên Na₂SO₄ khan, được lọc, và cô dưới áp suất giảm để thu được phần cặn thô. Tiếp đó, phần cặn này được tinh chế bằng cách sắc ký trên cột rửa giải bằng etyl axetat trong ete dầu mỏ (1:5) để thu được hợp chất nêu ở đề mục dưới dạng chất rắn màu trắng đục.

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃): δ 9,48 (br s, 1H), 8,13 (d, 1H), 7,59 (d, 1H), 7,51 (t, 1H), 7,17–7,23 (m, 3H), 7,02 (t, 2H), 3,98 (t, 1H), 3,64 (d, 1H), 3,38 (m, 1H), 3,19 (m, 1H), 3,06 (s, 3H), 2,18 (m, 1H), 1,98 (m, 1H); MS = 395,2 (M+1); m.p. = 72–74 °C.

Ví dụ tổng hợp 5

Điều chế (3*R*,4*S*)-4-(4-flophenyl)-2-oxo-*N*-[2-(triflometyl)phenyl]-3-piperidincarboxamit (Hợp chất 57)

Bước A: Điều chế phenylmetyl (3*R*,4*S*)-4-(4-flophenyl)-1-[(4-metoxyphenyl)metyl]-2-oxo-3-piperidincarboxylat

Dung dịch 1,3-bis(phenylmetyl)-2-[(1*S*)-1-(4-flophenyl)-3-oxopropyl]propandioat (tức là sản phẩm của Bước A trong ví dụ tổng hợp 4, 3,0g, 6,91mmol) trong 1,4-dioxan (30mL) được bổ sung 4-metoxybenzylamin (2,70mL, 20,73mmol) và hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 15 phút. Tiếp đó, hỗn hợp này được bổ sung natri triaxetoxibohydrit (2,92 g, 13,81mmol), và hỗn hợp thu được này được khuấy trong 16 giờ. Hỗn hợp phản ứng này được cô dưới áp suất giảm để tạo ra phần cặn thô. Phần cặn này được pha loãng bằng etyl

axetat (200mL) và rửa bằng dung dịch natri bicarbonat bão hòa (100mL), tiếp đó bằng nước. Các lớp được tách, và lớp hữu cơ được làm khô trên Na_2SO_4 khan, được lọc, và cô dưới áp suất giảm. Chất liệ đã tạo ra như vậy được tinh chế bằng cách sắc ký trên cột silica gel rửa giải bằng etyl axetat trong ete dầu mỏ (1:1) để thu được hợp chất nêu ở đề mục (2,5 g) dưới dạng chất lỏng màu vàng nhạt.
 MS = 448,3 (M+1).

Bước B: Điều chế axit (3*R*,4*S*)-4-(4-flophenyl)-1-[(4-metoxyphephenyl)metyl]-2-oxo-3-piperidincarboxylic

Dung dịch (3*R*,4*S*)-4-(4-flophenyl)-1-[(4-metoxyphephenyl)metyl]-2-oxo-3-piperidincarboxylat (tức là sản phẩm của Bước A, 2,0g, 4,46mmol) trong tetrahydrofuran (20mL) và nước (20mL) được bổ sung lithi hydroxit monohydrat (0,94g, 22,34mmol) và hỗn hợp phản ứng này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 16 giờ. Hỗn hợp phản ứng này được cô dưới áp suất giảm, và phần cặn này được pha loãng bằng dietyl ete (100mL) và rửa bằng nước (50mL). Các lớp được tách và lớp nước được axit hóa bằng dung dịch nước 1N axit clohydric và chiết bằng etyl axetat (3x40mL). Các lớp hữu cơ đã gộp lại được rửa bằng nước, tiếp đó bằng dung dịch nước muối, tiếp đó làm khô trên Na_2SO_4 khan. Tiếp đó, hỗn hợp này được lọc và cô dưới áp suất giảm để thu được hợp chất nêu ở đề mục (1,5g) dưới dạng chất rắn màu nâu nhạt.

MS = 358,20 (M+1); m.p. = 64–67°C.

Bước C: Điều chế (3*S*,4*S*)-4-(4-flophenyl)-1-[(4-metoxyphephenyl)metyl]-2-oxo-*N*-[2-(triflometyl)phenyl]-3-piperidincarboxamit

Dung dịch axit (3*R*,4*S*)-4-(4-flophenyl)-1-[(4-metoxyphephenyl)metyl]-2-oxo-3-piperidincarboxylic (tức là sản phẩm của Bước B, 0,8g, 2,24mmol) và 2-triflometylanilin (0,43g, 2,68mmol) trong điclometan (10mL) được bổ sung anhydrit propylphosphonic (dung dịch 50% trong etyl axetat, 2,84mL, 4,47mmol), trietylamin (0,9mL, 6,70mmol), và hỗn hợp phản ứng này được khuấy ở nhiệt độ môi trường trong 16 giờ. Hỗn hợp phản ứng này được pha loãng bằng điclometan

(100mL) và rửa bằng nước (50mL). Lớp hữu cơ được tách, làm khô trên Na₂SO₄ khan, được lọc, và cô dưới áp suất giảm để thu được phần cặn thô. Chất liệu thô này được tinh chế bằng cách sắc ký trên cột rửa giải bằng etyl axetat trong ete dầu mỏ (1:3) để thu được hợp chất nêu ở đề mục (0,6g) dưới dạng chất lỏng màu xanh nhạt.

MS = 501,29 (M+1).

Bước D: Điều chế (3*R*,4*S*)-4-(4-flophenyl)-2-oxo-*N*-[2-(triflometyl)phenyl]-3-piperidincarboxamit

(3*S*,4*S*)-4-(4-flophenyl)-1-[(4-metoxypheyl)metyl]-2-oxo-*N*-[2-(triflometyl)phenyl]-3-piperidincarboxamit (tức là sản phẩm của Bước C, 0,5g, 0,99mmol) được bổ sung axit trifloaxetic (10mL) và hỗn hợp phản ứng này được khuấy ở 110°C trong 72 giờ. Hỗn hợp phản ứng này được cô dưới áp suất giảm để loại bỏ axit trifloaxetic. Phần cặn này được trung hòa bằng dung dịch NaHCO₃ bão hòa và chiết bằng điclotetan (2 X 100mL). Các lớp hữu cơ đã gộp lại được làm khô trên Na₂SO₄ khan, được lọc, và cô dưới áp suất giảm. Chất liệu thu được này được tinh chế bằng cách sắc ký trên cột silicagel rửa giải bằng etyl axetat trong ete dầu mỏ (1:3) để thu được hợp chất nêu ở đề mục dưới dạng chất rắn màu trắng đục.

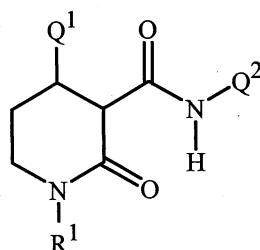
¹H NMR (400 MHz, DMSO-*d*₆): δ 9,58 (s, 1H), 7,89 (s, 1H), 7,61 (m, 2H), 7,40–7,29 (m, 4H), 7,11 (m, 2H), 3,76 (d, 1H), 3,42 (m, 1H), 3,23 (m, 1H), 2,45 (m, 1H), 1,91 (m, 2H);

MS = 381,22 (M+1); m.p. = 81–84 °C.

Bằng các quy trình được mô tả ở đây cùng với các phương pháp đã biết trong lĩnh vực kỹ thuật này, có thể điều chế được các hợp chất nêu trong các Bảng 1 đến 56 dưới đây. Các từ viết tắt sau được sử dụng trong các bảng này là như sau: *t* nghĩa là bậc ba, *s* nghĩa là bậc hai, *n* nghĩa là thường, *i* nghĩa là iso, *c* nghĩa là xyclo, Me nghĩa là metyl, Et nghĩa là etyl, Pr nghĩa là propyl, Bu nghĩa là butyl,

i-Pr nghĩa là isopropyl, *c*-Pr xyclopropyl, *t*-Bu nghĩa là butyl bậc ba, *c*-Bu nghĩa là xyclobutyl, Ph nghĩa là phenyl, OMe nghĩa là metoxy, OEt nghĩa là etoxy, SMe nghĩa là metylthio, NHMe nghĩa là metylamino, CN nghĩa là xyano, NO₂ nghĩa là nitro, TMS nghĩa là trimetylsilyl, SOMe nghĩa là metylsulfinyl, C₂F₅ nghĩa là CF₂CF₃ và SO₂Me nghĩa là metylsulfonyl.

Bảng 1



R¹ là H; Q² là Ph(2-F); và Q¹ là

Q ¹	Q ¹	Q ¹
Ph(3-Cl)	Ph(3-F,4-OCHF ₂)	Ph(2-F,3-F,4-TMS)
Ph(3-F)	Ph(3-F,4-SO ₂ Me)	Ph(2-F,3-F,4-CN)
Ph(3-Br)	Ph(3-F,4-TMS)	Ph(2-F,3-Br,4-Cl)
Ph(3-Me)	Ph(3-F,4-CN)	Ph(2-F,3-Br,4-F)
Ph(3-Et)	Ph(3-Br,4-Cl)	Ph(2-F,3-Br,4-Br)
Ph(3- <i>t</i> -Bu)	Ph(3-Br,4-F)	Ph(2-F,3-Br,4-Me)
Ph(3- <i>i</i> -Pr)	Ph(3,4-đi-Br)	Ph(2-F,3-Br,4- <i>t</i> -Bu)
Ph(3- <i>c</i> -Pr)	Ph(3-Br,4-Me)	Ph(2-F,3-Br,4- <i>c</i> -Pr)
Ph(3-xyclohexyl)	Ph(3-F,4- <i>t</i> -Bu)	Ph(2-F,3-Br,4-CF ₃)
Ph(3-CH-CH ₂)	Ph(3-Br,4- <i>c</i> -Pr)	Ph(2-F,3-Br,4-CHF ₂)
Ph(3-CF ₃)	Ph(3-Br,4-CF ₃)	Ph(2-F,3-Br,4-OCF ₃)
Ph(3-CH ₂ CF ₃)	Ph(3-Br,4-CHF ₂)	Ph(2-F,3-Br,4-OCHF ₂)
Ph(3-CHF ₂)	Ph(3-Br,4-OCF ₃)	Ph(2-F,3-Br,4-SO ₂ Me)
Ph(3-CH ₂ F)	Ph(3-Br,4-OCHF ₂)	Ph(2-F,3-Br,4-TMS)
Ph(3-OCF ₃)	Ph(3-Br,4-SO ₂ Me)	Ph(2-F,3-Br,4-CN)
Ph(3-OCH ₂ F)	Ph(3-Br,4-TMS)	Ph(2-F,3-Me,4-Cl)
Ph(3-SCF ₃)	Ph(3-Br,4-CN)	Ph(2-F,3-Me,4-F)
Ph(3-SMe)	Ph(3-Me,4-Cl)	Ph(2-F,3-Me,4-Br)
Ph(3-SOMe)	Ph(3-Me,4-F)	Ph(2-F,3-Me,4-Me)
3-SO ₂ Me	Ph(3-Me,4-Br)	Ph(2-F,3-Me,4- <i>t</i> -Bu)
Ph(3-OSO ₂ Me)	Ph(3,4-đi-Me)	Ph(2-F,3-Me,4- <i>t</i> -Bu)
Ph(3-C=CH)	Ph(3-Me,4- <i>t</i> -Bu)	Ph(2-F,3-Me,4-CF ₃)
Ph(3-OMe)	Ph(3-Me,4- <i>c</i> -Pr)	Ph(2-F,3-Me,4-CHF ₂)
Ph(3-OEt)	Ph(3-Me,4-CF ₃)	Ph(2-F,3-Me,4-OCF ₃)
Ph(3-NHCO ₂ - <i>t</i> -Bu)	Ph(3-Br,4-CHF ₂)	Ph(2-F,3-Me,4-OCHF ₂)
Ph(3-NHCOMe)	Ph(3-Me,4-OCF ₃)	Ph(2-F,3-Me,4-SO ₂ Me)

Q ¹	Q ¹	Q ¹
Ph(3-NHCOCF ₃)	Ph(3-Me,4-OCHF ₂)	Ph(2-F,3-Me,4-TMS)
Ph(3-CN)	Ph(3-Me,4-SO ₂ Me)	Ph(2-F,3-Me,4-CN)
Ph(3-NO ₂)	Ph(3-Me,4-TMS)	Ph(2-F,3- <i>t</i> -Bu,4-Cl)
Ph(3-Ph)	Ph(3-Me,4-CN)	Ph(2-F,3- <i>t</i> -Bu,4-F)
Ph(3-COMe)	Ph(3- <i>t</i> -Bu,4-Cl)	Ph(2-F,3- <i>t</i> -Bu,4-Br)
Ph(3-OCOMe)	Ph(3- <i>t</i> -Bu,4-F)	Ph(2-F,3- <i>t</i> -Bu,4-Me)
Ph(3-CO ₂ Me)	Ph(3- <i>t</i> -Bu,4-Br)	Ph(2-F,3- <i>t</i> -Bu,4- <i>t</i> -Bu)
Ph(3-OCO ₂ Me)	Ph(3- <i>t</i> -Bu,4-Me)	Ph(2-F,3- <i>t</i> -Bu,4- <i>c</i> -Pr)
Ph(3-TMS)	Ph(3,4- <i>di-t</i> -Bu)	Ph(2-F,3- <i>t</i> -Bu,4-CF ₃)
Ph(3-Ph)	Ph(3- <i>t</i> -Bu,4- <i>c</i> -Pr)	Ph(2-F,3- <i>t</i> -Bu,4-CHF ₂)
Ph[3-(1 <i>H</i> -pyrazol-1-yl)]	Ph(3- <i>t</i> -Bu,4-CF ₃)	Ph(2-F,3- <i>t</i> -Bu,4-OCF ₃)
Ph[3-(2 <i>H</i> -1,2,3-triazol-2-yl)]	Ph(3- <i>t</i> -Bu,4-CHF ₂)	Ph(2-F,3- <i>t</i> -Bu,4-OCHF ₂)
Ph[3-(1 <i>H</i> -imidazol-1-yl)]	Ph(3- <i>t</i> -Bu,4-OCF ₃)	Ph(2-F,3- <i>t</i> -Bu,4-SO ₂ Me)
Ph[3-(3-pyridinyl)]	Ph(3- <i>t</i> -Bu,4-OCHF ₂)	Ph(2-F,3- <i>t</i> -Bu,4-TMS)
Ph[3-(4-pyridinyl)]	Ph(3- <i>t</i> -Bu,4-SO ₂ Me)	Ph(2-F,3- <i>t</i> -Bu,4-CN)
Ph[3-(2-pyridinyl)]	Ph(3- <i>t</i> -Bu,4-TMS)	Ph(2-F,3- <i>c</i> -Pr,4-Cl)
4-pyridinyl(2-CF ₃)	Ph(3- <i>t</i> -Bu,4-CN)	Ph(2-F,3- <i>c</i> -Pr,4-F)
4-pyridinyl(2-Cl)	Ph(3- <i>c</i> -Pr,4-Cl)	Ph(2-F,3- <i>c</i> -Pr,4-Br)
4-pyridinyl(2-F)	Ph(3- <i>c</i> -Pr,4-F)	Ph(2-F,3- <i>c</i> -Pr,4-Me)
4-pyridinyl(2-OCF ₃)	Ph(3- <i>c</i> -Pr,4-Br)	Ph(2-F,3- <i>c</i> -Pr,4- <i>t</i> -Bu)
4-pyridinyl(2-Me)	Ph(3- <i>c</i> -Pr,4-Me)	Ph(2-F,3,4- <i>di-c</i> -Pr)
4-pyridinyl(2-Br)	Ph(3- <i>c</i> -Pr,4- <i>t</i> -Bu)	Ph(2-F,3- <i>c</i> -Pr,4-CF ₃)
4-pyridinyl	Ph(3,4- <i>di-c</i> -Pr)	Ph(2-F,3- <i>c</i> -Pr,4-CHF ₂)
1 <i>H</i> -pyrazol-4-yl(1-Me)	Ph(3- <i>c</i> -Pr,4-CF ₃)	Ph(2-F,3- <i>c</i> -Pr,4-OCF ₃)
1 <i>H</i> -pyrazol-4-yl(1-CH ₂ CF ₃)	Ph(3- <i>c</i> -Pr,4-CHF ₂)	Ph(2-F,3- <i>c</i> -Pr,4-OCHF ₂)
1 <i>H</i> -imidazol-2-yl(1-Me)	Ph(3- <i>c</i> -Pr,4-OCF ₃)	Ph(2-F,3- <i>c</i> -Pr,4-SO ₂ Me)
1 <i>H</i> -imidazol-2-yl(1-CH ₂ CF ₃)	Ph(3- <i>c</i> -Pr,4-OCHF ₂)	Ph(2-F,3- <i>c</i> -Pr,4-TMS)
1 <i>H</i> -imidazol-2-yl(1-Me,5-Cl)	Ph(3- <i>c</i> -Pr,4-SO ₂ Me)	Ph(2-F,3- <i>c</i> -Pr,4-CN)
1 <i>H</i> -imidazol-2-yl(1-Me,5-F)	Ph(3- <i>c</i> -Pr,4-TMS)	Ph(2-F,3-CF ₃ ,4-Cl)
2-thienyl	Ph(3- <i>c</i> -Pr,4-CN)	Ph(2-F,3-CF ₃ ,4-F)
2-thienyl(4-F)	Ph(3-CF ₃ ,4-Cl)	Ph(2-F,3-CF ₃ ,4-Br)
2-thienyl(4-Cl)	Ph(3-CF ₃ ,4-F)	Ph(2-F,3-CF ₃ ,4-Me)
2-thienyl(4-CF ₃)	Ph(3-CF ₃ ,4-Br)	Ph(2-F,3-CF ₃ ,4- <i>t</i> -Bu)
2-thienyl(5-F)	Ph(3-CF ₃ ,4-Me)	Ph(2-F,3-CF ₃ ,4- <i>c</i> -Pr)
2-thienyl(5-Cl)	Ph(3-CF ₃ ,4- <i>t</i> -Bu)	Ph(2-F,3-CF ₃ ,4-CF ₃)
2-thienyl(5-CF ₃)	Ph(3-CF ₃ ,4- <i>c</i> -Pr)	Ph(2-F,3-CF ₃ ,4-CHF ₂)
Ph(4-Cl)	Ph(3,4- <i>di</i> -CF ₃)	Ph(2-F,3-CF ₃ ,4-OCF ₃)
Ph(4-F)	Ph(3-CF ₃ ,4-CHF ₂)	Ph(2-F,3-CF ₃ ,4-OCHF ₂)
Ph(4-Br)	Ph(3-CF ₃ ,4-OCF ₃)	Ph(2-F,3-CF ₃ ,4-SO ₂ Me)
Ph(4-Me)	Ph(3-CF ₃ ,4-OCHF ₂)	Ph(2-F,3-CF ₃ ,4-TMS)
Ph(4-Et)	Ph(3-CF ₃ ,4-SO ₂ Me)	Ph(2-F,3-CF ₃ ,4-CN)
Ph(4- <i>t</i> -Bu)	Ph(3-CF ₃ ,4-TMS)	Ph(2-F,3-OCF ₃ ,4-Cl)
Ph(4- <i>i</i> -Pr)	Ph(3-CF ₃ ,4-CN)	Ph(2-F,3-OCF ₃ ,4-F)

Q ¹	Q ¹	Q ¹
Ph(4- <i>c</i> -Pr)	Ph(3-OCF ₃ ,4-Cl)	Ph(2-F,3-OCF ₃ ,4-Br)
Ph(4-xyclohexyl)	Ph(3-OCF ₃ ,4-F)	Ph(2-F,3-OCF ₃ ,4-Me)
Ph(4-CH-CH ₂)	Ph(3-OCF ₃ ,4-Br)	Ph(2-F,3-OCF ₃ ,4- <i>t</i> -Bu)
Ph(4-CF ₃)	Ph(3-OCF ₃ ,4-Me)	Ph(2-F,3-OCF ₃ ,4- <i>c</i> -Pr)
Ph(4-CH ₂ CF ₃)	Ph(3-OCF ₃ ,4- <i>t</i> -Bu)	Ph(2-F,3-OCF ₃ ,4-CF ₃)
Ph(4-CHF ₂)	Ph(3-OCF ₃ ,4- <i>c</i> -Pr)	Ph(2-F,3-OCF ₃ ,4-CHF ₂)
Ph(4-CH ₂ F)	Ph(3-OCF ₃ ,4-CF ₃)	Ph(2-F,3-OCF ₃ ,4-OCF ₃)
Ph(4-OCF ₃)	Ph(3-OCF ₃ ,4-CHF ₂)	Ph(2-F,3-OCF ₃ ,4-OCHF ₂)
Ph(4-OCH ₂ F)	Ph(3,4-di-OCF ₃)	Ph(2-F,3-OCF ₃ ,4-SO ₂ Me)
Ph(4-SCF ₃)	Ph(3-OCF ₃ ,4-OCHF ₂)	Ph(2-F,3-OCF ₃ ,4-TMS)
Ph(4-Sme)	Ph(3-OCF ₃ ,4-SO ₂ Me)	Ph(2-F,3-OCF ₃ ,4-CN)
Ph(4-SOMe)	Ph(3-OCF ₃ ,4-TMS)	Ph(2-F,3-SO ₂ Me,4-Cl)
Ph(4-SO ₂ Me)	Ph(3-OCF ₃ ,4-CN)	Ph(2-F,3-SO ₂ Me,4-F)
Ph(4-OSO ₂ Me)	Ph(3-SO ₂ Me,4-Cl)	Ph(2-F,3-SO ₂ Me,4-Br)
Ph(4-C=CH)	Ph(3-SO ₂ Me,4-F)	Ph(2-F,3-SO ₂ Me,4-Me)
Ph(4-Ome)	Ph(3-SO ₂ Me,4-Br)	Ph(2-F,3-SO ₂ Me,4- <i>t</i> -Bu)
Ph(4-Oet)	Ph(3-SO ₂ Me,4-Me)	Ph(2-F,3-SO ₂ Me,4- <i>c</i> -Pr)
Ph(4-NHCO ₂ - <i>t</i> -Bu)	Ph(3-SO ₂ Me,4- <i>t</i> -Bu)	Ph(2-F,3-SO ₂ Me,4-CF ₃)
Ph(4-NHCOMe)	Ph(3-SO ₂ Me,4- <i>c</i> -Pr)	Ph(2-F,3-SO ₂ Me,4-CHF ₂)
Ph(4-NHCOCF ₃)	Ph(3-SO ₂ Me,4-CF ₃)	Ph(2-F,3-SO ₂ Me,4-OCF ₃)
Ph(4-CN)	Ph(3-SO ₂ Me,4-CHF ₂)	Ph(2-F,3-SO ₂ Me,4-OCHF ₂)
Ph(4-NO ₂)	Ph(3-SO ₂ Me,4-OCF ₃)	Ph(2-F,3,4-di-SO ₂ Me)
Ph(4-Ph)	Ph(3-SO ₂ Me,4-OCHF ₂)	Ph(2-F,3-SO ₂ Me,4-TMS)
Ph(4-COMe)	Ph(3,4-di-SO ₂ Me)	Ph(2-F,3-SO ₂ Me,4-CN)
Ph(4-OCOMe)	Ph(3-SO ₂ Me,4-TMS)	Ph(2-F,3-CHF ₂ ,4-Cl)
Ph(4-CO ₂ Me)	Ph(3-SO ₂ Me,4-CN)	Ph(2-F,3-CHF ₂ ,4-F)
Ph(4-OCO ₂ Me)	Ph(3-CHF ₂ ,4-Cl)	Ph(2-F,3-CHF ₂ ,4-Br)
Ph(4-TMS)	Ph(3-CHF ₂ ,4-F)	Ph(2-F,3-CHF ₂ ,4-Me)
Ph(4-Ph)	Ph(3-CHF ₂ ,4-Br)	Ph(2-F,3-CHF ₂ ,4- <i>t</i> -Bu)
Ph(1 <i>H</i> -pyrazol-1-yl)	Ph(3-CHF ₂ ,4-Me)	Ph(2-F,3-CHF ₂ ,4- <i>c</i> -Pr)
Ph(2 <i>H</i> -1,2,3-triazol-2-yl)	Ph(3-CHF ₂ ,4- <i>t</i> -Bu)	Ph(2-F,3-CHF ₂ ,4-CF ₃)
Ph(1 <i>H</i> -imidazol-1-yl)	Ph(3-CHF ₂ ,4- <i>c</i> -Pr)	Ph(2-F,3-CHF ₂ ,4-CHF ₂)
Ph[4-(3-pyridinyl)]	Ph(3-CHF ₂ ,4-CF ₃)	Ph(2-F,3-CHF ₂ ,4-OCF ₃)
Ph[4-(4-pyridinyl)]	Ph(3-CHF ₂ ,4-CHF ₂)	Ph(2-F,3-CHF ₂ ,4-OCHF ₂)
Ph[4-(2-pyridinyl)]	Ph(3-CHF ₂ ,4-OCF ₃)	Ph(2-F,3-CHF ₂ ,4-SO ₂ Me)
3-pyridinyl(5-CF ₃)	Ph(3-CHF ₂ ,4-OCHF ₂)	Ph(2-F,3-CHF ₂ ,4-TMS)
3-pyridinyl(5-Cl)	Ph(3-CHF ₂ ,4-SO ₂ Me)	Ph(2-F,3-CHF ₂ ,4-CN)
3-pyridinyl(5-F)	Ph(3-CHF ₂ ,4-TMS)	Ph(2-F,3-CN,4-Cl)
3-pyridinyl(5-OCF ₃)	Ph(3-CHF ₂ ,4-CN)	Ph(2-F,3-CN,4-F)
3-pyridinyl(5-Me)	Ph(3-CN,4-Cl)	Ph(2-F,3-CN,4-Br)
3-pyridinyl(5-Br)	Ph(3-CN,4-F)	Ph(2-F,3-CN,4-Me)
3-pyridinyl	Ph(3-CN,4-Br)	Ph(2-F,3-CN,4- <i>t</i> -Bu)
1 <i>H</i> -pyrazol-3-yl(1-Me)	Ph(3-CN,4-Me)	Ph(2-F,3-CN,4- <i>c</i> -Pr)

Q ¹	Q ¹	Q ¹
1 <i>H</i> -pyrazol-3-yl(1-CH ₂ CF ₃)	Ph(3-CN,4- <i>t</i> -Bu)	Ph(2-F,3-CN,4-CF ₃)
1 <i>H</i> -pyrazol-3-yl(1-Me,4-F)	Ph(3-CN,4- <i>c</i> -Pr)	Ph(2-F,3-CN,4-CHF ₂)
1 <i>H</i> -pyrazol-3-yl(1-Me,4-Cl)	Ph(3-CN,4-CF ₃)	Ph(2-F,3-CN,4-OCF ₃)
1 <i>H</i> -imidazol-5-yl(1-Me)	Ph(3-CN,4-CHF ₂)	Ph(2-F,3-CN,4-OCHF ₂)
1 <i>H</i> -imidazol-5-yl(1-CH ₂ CF ₃)	Ph(3-CN,4-OCF ₃)	Ph(2-F,3-CN,4-SO ₂ Me)
1 <i>H</i> -imidazol-4-yl(1-Me)	Ph(3-CN,4-OCHF ₂)	Ph(2-F,3-CN,4-TMS)
1 <i>H</i> -imidazol-4-yl(1-CH ₂ CF ₃)	Ph(3-CN,4-SO ₂ Me)	Ph(2-F,3-CN,4-CN)
3-thienyl	Ph(3-CN,4-TMS)	Ph(2-F,4-Cl)
3-thienyl(5-F)	Ph(3,4-di-CN)	Ph(2-F,4-F)
3-thienyl(5-Cl)	Ph(2-F,3-Cl,4-Cl)	Ph(2-F,4-Br)
3-thienyl(5-CF ₃)	Ph(2-F,3-Cl,4-F)	Ph(2-F,4-Me)
Ph(3,4-di-Cl)	Ph(2-F,3-Cl,4-Br)	Ph(2-F,4- <i>t</i> -Bu)
Ph(3-Cl,4-F)	Ph(2-F,3-Cl,4-Me)	Ph(2-F,4- <i>c</i> -Pr)
Ph(3-Cl,4-Br)	Ph(2-F,3-Cl,4- <i>t</i> -Bu)	Ph(2-F,4-CF ₃)
Ph(3-Cl,4-Me)	Ph(2-F,3-Cl,4- <i>c</i> -Pr)	Ph(2-F,4-CHF ₂)
Ph(3-Cl,4- <i>t</i> -Bu)	Ph(2-F,3-Cl,4-CF ₃)	Ph(2-F,4-OCF ₃)
Ph(3-Cl,4- <i>c</i> -Pr)	Ph(2-F,3-Cl,4-CHF ₂)	Ph(2-F,4-OCHF ₂)
Ph(3-Cl,4-CF ₃)	Ph(2-F,3-Cl,4-OCF ₃)	Ph(2-F,4-SO ₂ Me)
Ph(3-Cl,4-CHF ₃)	Ph(2-F,3-Cl,4-OCHF ₂)	Ph(2-F,4-TMS)
Ph(3-Cl,4-OCF ₃)	Ph(2-F,3-Cl,4-SO ₂ Me)	Ph(2-F,4-CN)
Ph(3-Cl,4-OCHF ₂)	Ph(2-F,3-Cl,4-TMS)	Ph(2-F,3-Cl)
Ph(3-Cl,4-SO ₂ Me)	Ph(2-F,3-Cl,4-CN)	Ph(2-F,3-F)
Ph(3-Cl,4-TMS)	Ph(2-F,3-F,4-Cl)	Ph(2-F,3-Br)
Ph(3-Cl,4-CN)	Ph(2-F,3-F,4-F)	Ph(2-F,3-Me)
Ph(3-F,4-Cl)	Ph(2-F,3-F,4-Br)	Ph(2-F,3- <i>t</i> -Bu)
Ph(3,4-di-F)	Ph(2-F,3-F,4-Me)	Ph(2-F,3- <i>c</i> -Pr)
Ph(3-F,4-Br)	Ph(2-F,3-F,4- <i>t</i> -Bu)	Ph(2-F,3-CF ₃)
Ph(3-F,4-Me)	Ph(2-F,3-F,4- <i>c</i> -Pr)	Ph(2-F,3-CHF ₂)
Ph(3-F,4- <i>t</i> -Bu)	Ph(2-F,3-F,4-CF ₃)	Ph(2-F,3-OCF ₃)
Ph(3-F,4- <i>c</i> -Pr)	Ph(2-F,3-F,4-CHF ₂)	Ph(2-F,3-OCHF ₂)
Ph(3-F,4-CF ₃)	Ph(2-F,3-F,4-OCF ₃)	Ph(2-F,3-SO ₂ Me)
Ph(3-F,4-CHF ₂)	Ph(2-F,3-F,4-OCHF ₂)	Ph(2-F,3-TMS)
Ph(3-F,4-OCF ₃)	Ph(2-F,3-F,4-SO ₂ Me)	Ph(2-F,3-CN)

Q ¹	Q ¹
1 <i>H</i> -imidazol-2-yl(1-CH ₂ CF ₃ ,5-Cl)	1,3-benzodioxol-4-yl(2,2-di-F)
1 <i>H</i> -imidazol-2-yl(1-CH ₂ CF ₃ ,5-F)	1 <i>H</i> -pyrazol-3-yl(1-CH ₂ CF ₃ ,4-F)
1 <i>H</i> -imidazol-2-yl(1-Me,5-CF ₃)	1 <i>H</i> -pyrazol-3-yl(1-CH ₂ CF ₃ ,4-Cl)
1 <i>H</i> -imidazol-2-yl(1-CH ₂ CF ₃ ,5-CF ₃)	

Bảng 2 được xây dựng theo cách giống như vậy chỉ khác là Đề mục của hàng “R¹ là H; Q² là Ph(2-F); và Q¹ là” được thay thế bằng Đề mục của hàng được nêu cho Bảng 2 dưới đây (tức là “R¹ là H; Q² là Ph(2,3-F); và Q¹ là”). Vì vậy, mục thứ nhất trong Bảng 2 là hợp chất có công thức 1 trong đó R¹ là H; Q² là Ph(2,3-di-F); và Q¹ là Ph(3-Cl) (tức là 3-clophenyl). Các bảng 3 tới 56 được xây dựng theo cách tương tự.

Bảng	Đề mục của hàng
2	R ¹ là H; Q ² là Ph(2,3-di-F); và Q ¹ là
3	R ¹ là H; Q ² là Ph(2-CF ₃); và Q ¹ là
4	R ¹ là H; Q ² là Ph(2-NO ₂); và Q ¹ là
5	R ¹ là H; Q ² là Ph(2-SO ₂ Me); và Q ¹ là
6	R ¹ là H; Q ² là Ph(2-Me); và Q ¹ là
7	R ¹ là H; Q ² là Ph(2-OCF ₃); và Q ¹ là
8	R ¹ là H; Q ² là Ph(2,4-di-F); và Q ¹ là
9	R ¹ là H; Q ² là 2-pyridinyl; và Q ¹ là
10	R ¹ là H; Q ² là Ph(2-Cl); và Q ¹ là
11	R ¹ là H; Q ² là Ph(2-Br); và Q ¹ là
12	R ¹ là H; Q ² là Ph(2-Cl,3-F); và Q ¹ là
13	R ¹ là H; Q ² là Ph(3-Cl,2-F); và Q ¹ là
14	R ¹ là H; Q ² là Ph(2,3,4-tri-F); và Q ¹ là
15	R ¹ là Me; Q ² là Ph(2-F); và Q ¹ là
16	R ¹ là Me; Q ² là Ph(2,3-di-F); và Q ¹ là
17	R ¹ là Me; Q ² là Ph(2-CF ₃); và Q ¹ là
18	R ¹ là Me; Q ² là Ph(2-NO ₂); và Q ¹ là
19	R ¹ là Me; Q ² là Ph(2-SO ₂ Me); và Q ¹ là
20	R ¹ là Me; Q ² là Ph(2-Me); và Q ¹ là
21	R ¹ là Me; Q ² là Ph(2-OCF ₃); và Q ¹ là
22	R ¹ là Me; Q ² là Ph(2,4-di-F); và Q ¹ là
23	R ¹ là Me; Q ² là 2-pyridinyl; và Q ¹ là
24	R ¹ là Me; Q ² là Ph(2-Cl); và Q ¹ là
25	R ¹ là Me; Q ² là Ph(2-Br); và Q ¹ là
26	R ¹ là Me; Q ² là Ph(2-Cl,3-F); và Q ¹ là
27	R ¹ là Me; Q ² là Ph(3-Cl,2-F); và Q ¹ là
28	R ¹ là Me; Q ² là Ph(2,3,4-tri-F); và Q ¹ là
29	R ¹ là Et; Q ² là Ph(2-F); và Q ¹ là
30	R ¹ là Et; Q ² là Ph(2,3-di-F); và Q ¹ là
31	R ¹ là Et; Q ² là Ph(2-CF ₃); và Q ¹ là

32	R^1 là Et; Q^2 là Ph(2-NO ₂); và Q^1 là
33	R^1 là Et; Q^2 là Ph(2-SO ₂ Me); và Q^1 là
34	R^1 là Et; Q^2 là Ph(2-Me); và Q^1 là
35	R^1 là Et; Q^2 là Ph(2-OCF ₃); và Q^1 là
36	R^1 là Et; Q^2 là Ph(2,4-đi-F); và Q^1 là
37	R^1 là Et; Q^2 là 2-pyridinyl; và Q^1 là
38	R^1 là Et; Q^2 là Ph(2-Cl); và Q^1 là
39	R^1 là Et; Q^2 là Ph(2-Br); và Q^1 là
40	R^1 là Et; Q^2 là Ph(2-Cl,3-F); và Q^1 là
41	R^1 là Et; Q^2 là Ph(3-Cl,2-F); và Q^1 là
42	R^1 là Et; Q^2 là Ph(2,3,4-tri-F); và Q^1 là
43	R^1 là -CH ₂ OCH ₃ ; Q^2 là Ph(2-F); và Q^1 là
44	R^1 là -CH ₂ OCH ₃ ; Q^2 là Ph(2,3-đi-F); và Q^1 là
45	R^1 là -CH ₂ OCH ₃ ; Q^2 là Ph(2-CF ₃); và Q^1 là
46	R^1 là -CH ₂ OCH ₃ ; Q^2 là Ph(2-NO ₂); và Q^1 là
47	R^1 là -CH ₂ OCH ₃ ; Q^2 là Ph(2-SO ₂ Me); và Q^1 là
48	R^1 là -CH ₂ OCH ₃ ; Q^2 là Ph(2-Me); và Q^1 là
49	R^1 là -CH ₂ OCH ₃ ; Q^2 là Ph(2-OCF ₃); và Q^1 là
50	R^1 là -CH ₂ OCH ₃ ; Q^2 là Ph(2,4-đi-F); và Q^1 là
51	R^1 là -CH ₂ OCH ₃ ; Q^2 là 2-pyridinyl; và Q^1 là
52	R^1 là -CH ₂ OCH ₃ ; Q^2 là Ph(2-Cl); và Q^1 là
53	R^1 là -CH ₂ OCH ₃ ; Q^2 là Ph(2-Br); và Q^1 là
54	R^1 là -CH ₂ OCH ₃ ; Q^2 là Ph(2-Cl,3-F); và Q^1 là
55	R^1 là -CH ₂ OCH ₃ ; Q^2 là Ph(3-Cl,2-F); và Q^1 là
56	R^1 là -CH ₂ OCH ₃ ; Q^2 là Ph(2,3,4-tri-F); và Q^1 là

Chế phẩm/Tính hữu ích

Hợp chất theo sáng chế thường được sử dụng làm hoạt chất diệt cỏ trong chế phẩm, tức là thành phần, với ít nhất một thành phần bổ sung được chọn từ nhóm bao gồm chất hoạt động bề mặt, chất pha loãng rắn và chất pha loãng lỏng, dùng làm chất mang. Các thành phần của chế phẩm hoặc hỗn hợp được chọn phù hợp với các tính chất lý học của hoạt chất, kiểu dùng và các yếu tố môi trường như loại đất, độ ẩm và nhiệt độ.

Dạng pha chế hữu ích bao gồm cả chế phẩm dạng lỏng và chế phẩm dạng rắn. Chế phẩm dạng lỏng bao gồm dung dịch (bao gồm dạng cô đặc dễ nhũ hóa),

huyền phù, nhũ tương (bao gồm vi nhũ tương và/hoặc nhũ tương-huyền phù) và các dạng tương tự tùy ý có thể được làm đặc thành các gel. Dạng chế phẩm lỏng chứa nước thông thường là dạng cô đặc tan, dạng cô đặc hỗn dịch, hỗn dịch viên nang, nhũ tương cô đặc, vi nhũ tương, nhũ tương dầu trong nước, chất cô đặc dễ chảy và nhũ tương-huyền phù. Dạng chế phẩm lỏng không chứa nước thường là dạng cô đặc dễ nhũ hóa, dạng cô đặc vi nhũ hóa, dạng cô đặc dễ phân tán và dạng phân tán dạng dầu.

Chế phẩm dạng rắn thông thường là dạng bột mịn để rắc khô, bột, hạt, viên tròn, viên tròn, viên hình thoi, viên nén, dạng màng bao (kể cả các lớp phủ hạt) và các dạng tương tự, có thể dễ phân tán trong nước (“thấm ướt”) hoặc tan trong nước. Các lớp màng và lớp phủ được tạo ra từ các dung dịch tạo màng hoặc huyền phù dễ chảy đặc biệt hữu ích dùng để xử lý hạt. Hoạt chất có thể được bao (vi) nang và còn được tạo thành hỗn dịch hoặc chế phẩm rắn; theo cách khác, toàn bộ chế phẩm chứa hoạt chất có thể được bao nang (hoặc “được bao”). Việc bao nang này có thể kiểm soát hoặc làm chậm quá trình giải phóng hoạt chất. Hạt dễ nhũ hóa kết hợp được các ưu điểm của cả chế phẩm dạng cô đặc dễ nhũ hóa lẫn chế phẩm dạng hạt khô. Các chế phẩm đậm đặc được sử dụng chủ yếu làm chất trung gian dùng để pha chế tiếp.

Chế phẩm dạng phun thường được đưa vào môi trường thích hợp trước khi phun. Các chế phẩm lỏng và rắn như vậy được bào chế để được pha loãng một cách dễ dàng trong môi trường phun, thường là nước, nhưng đôi khi là môi trường thích hợp khác như hydrocacbon thơm hoặc parafin hoặc dầu thực vật. Lượng dung dịch để phun có thể nằm trong khoảng từ một tới một vài nghìn lít cho một hecta, nhưng thông thường là nằm trong khoảng từ mười tới vài trăm lít cho một hecta. Các chế phẩm phun có thể được trộn sẵn trong thùng với nước hoặc môi trường thích hợp khác dùng để xử lý lá bằng cách phun lên không trung hoặc đưa vào đất, hoặc đưa vào môi trường sinh trưởng của thực vật. Các chế phẩm lỏng và rắn có thể được định lượng trực tiếp trong hệ tưới phun hoặc được định lượng trong rãnh khi gieo trồng.

Chế phẩm thường chứa lượng hữu hiệu của hoạt chất, chất pha loãng và chất

hoạt động bề mặt trong khoảng gần đúng sau đây để tổng lượng là 100 phần trăm khối lượng.

	Phần trăm khối lượng		
	<u>Hoạt chất</u>	<u>Chất pha</u> <u>loãng</u>	<u>Chất hoạt động</u> <u>bề mặt</u>
Hạt, viên nén và bột dễ hòa tan trong nước và dễ phân tán trong nước	0,001–90	0–99,999	0–15
Thể phân tán dạng dầu, huyền phù, nhũ tương, dung dịch (bao gồm dạng cô đặc dễ nhũ hóa)	1–50	40–99	0–50
Bột mịn dễ rắc khô	1–25	70–99	0–5
Hạt và viên tròn	0,001–99	5–99,999	0–15
Chế phẩm có độ bền cao	90–99	0–10	0–2

Chất pha loãng rắn bao gồm, ví dụ, đất sét như bentonit, montmorillonit, attapulgit và kaolanh, thạch cao, xenluloza, titan đioxit, kẽm oxit, tinh bột, dextrin, đường (ví dụ, lactoza, sucroza), silic oxit, bột đá bột talc, mica, đất tảo silic, ure, canxi cacbonat, natri cacbonat và bicarbonat, và natri sulfat. Chất pha loãng rắn thông thường được mô tả trong Watkins et al., *Handbook of Insecticide Dust Diluents and Carriers*, 2nd Ed., Dorland Books, Caldwell, New Jersey.

Chất pha loãng lỏng bao gồm, ví dụ, nước, *N,N*-đimetylalkanamit (ví dụ, *N,N*-đimetylformamit), limonen, đimetyl sulfoxit, *N*-alkylpyrrolidon (ví dụ, *N*-metylpyrrolidinon), etylen glycol, trietylen glycol, propylen glycol, dipropylen glycol, polypropylen glycol, propylen cacbonat, butylen cacbonat, parafin (ví dụ, dầu khoáng trắng, parafin thông thường, isoparafin), alkylbenzen, alkylnaphtalen, glyxerin, glyxerol triaxetat, sorbitol, triacetin, hydrocacbon thơm, chất béo đã được khử gốc thơm, alkylbenzen, alkylnaphtalen, keton như xyclohexanon, 2-heptanon, isophoron và 4-hydroxy-4-metyl-2-pentanon, axetat như isoamyl axetat, hexyl axetat, heptyl axetat, octyl axetat, nonyl axetat, tridexyl axetat và

isobornyl axetat, các este khác như este lactat alkylat hóa, este dibazo và γ -butyrolacton, và các rượu, chúng có thể là mạch thẳng, mạch nhánh, bão hoà hoặc không bão hoà như metanol, etanol, *n*-propanol, rượu isopropylic, *n*-butanol, rượu isobutylic, *n*-hexanol, 2-ethylhexanol, *n*-octanol, decanol, rượu isodexylic, isooctadecanol, rượu xetylic, rượu laurylic, rượu tridexylic, rượu oleylic, xyclohexanol, rượu tetrahydrofurfurylic, rượu diaxeton và rượu benzylic. Chất pha loãng lỏng cũng bao gồm các este glyxerol của các axit béo bão hoà và không bão hoà (thường là có 6 đến 22 nguyên tử cacbon), như dầu thực vật từ hạt và quả (ví dụ, dầu ôliu, thầu dầu, hạt lanh, vừng, ngũ cốc (ngô), lạc, hướng dương, hạt nho, rum, hạt bông, đậu tương, hạt cải dầu, dừa và cọ), chất béo có nguồn gốc động vật (ví dụ, mỡ bò, mỡ lợn, dầu gan cá tuyết, dầu cá), và các hỗn hợp của chúng. Chất pha loãng lỏng cũng bao gồm các axit béo được alkylat hóa (ví dụ, được metyl hóa, etyl hóa, butyl hóa) trong đó các axit béo có thể thu được bằng cách thủy phân các este glyxerol từ các nguồn thực vật và động vật, và có thể được tinh chế bằng chưng cất. Chất pha loãng lỏng thông thường được mô tả trong Marsden, *Solvents Guide*, 2nd Ed., Interscience, New York, 1950.

Chế phẩm rắn và lỏng theo sáng chế thường chứa một hoặc nhiều chất hoạt động bề mặt. Khi bổ sung vào chất lỏng, chất hoạt động bề mặt thường biến đổi, thường làm giảm, sức căng bề mặt của chất lỏng. Tùy thuộc vào bản chất của các nhóm ưa nước và ưa chất béo trong phân tử chất hoạt động bề mặt, có thể sử dụng chất hoạt động bề mặt làm chất thấm ướt, chất phân tán, chất nhũ hoá hoặc chất khử bọt.

Chất hoạt động bề mặt có thể được phân loại thành dạng không ion, anion hoặc cation. Chất hoạt động bề mặt không ion hữu dụng đối với các hỗn hợp này bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở: rượu alkoxylat như rượu alkoxylat trên cơ sở các rượu tự nhiên và tổng hợp (có thể là mạch nhánh hoặc mạch thẳng) và được điều chế từ các rượu và etylen-oxit, propylen-oxit, butylen-oxit hoặc hỗn hợp của chúng; etoxylat amin, alkanolamit và alkanolamit được etoxylat hóa; triglyxerit được alkoxylat hóa như đậu tương được etoxylat hóa, dầu thầu dầu và hạt cải dầu; alkylphenol alkoxylat như octylphenol etoxylat, nonylphenol etoxylat, đinonyl

phenol etoxylat và dodecyl phenol etoxylat (được điều chế từ các phenol và etylen-oxit, propylen-oxit, butylen-oxit hoặc hỗn hợp của chúng); polyme khối được điều chế từ etylen-oxit hoặc propylen-oxit và các polyme khối ngược, trong đó các khối ở cuối mạch được điều chế từ propylen-oxit; các axit béo etoxylat hóa; các este béo và các dầu được etoxylat hóa; các methyl este được etoxylat hóa; tristyrylphenol được etoxylat hóa (bao gồm các loại được điều chế từ etylen-oxit, propylen-oxit, butylen-oxit hoặc hỗn hợp của chúng); các este axit béo, các este glyxerol, các dẫn xuất trên cơ sở mỡ lông cừu, các este polyetoxylat như các este sorbitan axit béo được polyetoxi hoá, các este sorbitol axit béo được polyetoxi hoá và các este glyxerol axit béo được polyetoxi hoá; các dẫn xuất sorbitan khác như các este sorbitan; chất hoạt động bề mặt polyme như các copolyme ngẫu nhiên, các copolyme khối, nhựa peg alkyl (polyetylen glycol), các polyme ghép hoặc dạng lược và các polyme hình sao; polyetylen glycol (peg); các este polyetylen glycol axit béo; chất hoạt động bề mặt trên cơ sở silicon; và dẫn xuất của đường như các este sucroza, alkyl polyglycosit và alkyl polysaccarit.

Chất hoạt động bề mặt anion hữu dụng bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở: các axit alkylaryl sulfonic và các muối của chúng; rượu được carboxylat hóa hoặc etoxylat alkylphenol; các dẫn xuất diphenyl sulfonat; lignin và các dẫn xuất của lignin như lignosulfonat; các axit maleic hoặc succinic hoặc các anhydrit của chúng; olefin sulfonat; các este phosphat như các este phosphat của rượu alkoxylat, các este phosphat của alkylphenol alkoxylat và các este phosphat của styryl phenol etoxylat; chất hoạt động bề mặt trên cơ sở protein; các dẫn xuất sarcosin; styryl phenol ete sulfat; sulfat và sulfonat của các dầu và các axit béo; sulfat và sulfonat của alkylphenol được etoxylat hóa; sulfat của các rượu; sulfat của các rượu được etoxylat hóa; các sulfonat của amin và các amit như *N,N*-alkyltaurat; các sulfonat của benzen, cumen, toluen, xylen, và dodecyl và tridecylbenzen; các sulfonat của naphtalen được ngưng tụ; các sulfonat của naphtalen và alkyl naphtalen; các sulfonat của dầu mỏ được cắt phân đoạn; sulfosuccinamat; và sulfosuccinat và các dẫn xuất của chúng như các muối dialkyl sulfosuccinat.

Chất hoạt động bề mặt cation hữu dụng bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở: các amit và các amit được etoxylat hóa; các amin như *N*-alkyl propandiamin, tripropylentriamin và dipropylentetramin, và các amin được etoxylat hóa, các điamin được etoxylat hóa và các amin được propoxylat hóa (được điều chế từ các amin và etylen-oxit, propylen-oxit, butylen-oxit hoặc hỗn hợp của chúng); các muối amin như amin axetat và các muối điamin; các muối amoni bậc bốn như muối bậc bốn, các muối bậc bốn và các muối được tạo bậc bốn hai lần được etoxylat hóa; và amin-oxit như alkylđimetylamin-oxit và bis-(2-hydroxyetyl)-alkylamin-oxit.

Cũng hữu dụng đối với các chế phẩm theo sáng chế là hỗn hợp của chất hoạt động bề mặt không ion và anion hoặc hỗn hợp của chất hoạt động bề mặt không ion và cation. Chất hoạt động bề mặt không ion, anion và cation và các dạng sử dụng được khuyến dùng của chúng được đề cập trong nhiều ấn phẩm đã được công bố bao gồm *McCutcheon's Emulsifiers and Detergents*, Ấn phẩm hàng năm của Mỹ và quốc tế do McCutcheon's Division xuất bản, The Manufacturing Confectioner Publishing Co.; Sisely and Wood, *Encyclopedia of Surface Active Agents*, Chemical Publ. Co., Inc., New York, 1964; and A. S. Davidson and B. Milwidsky, *Synthetic Detergents*, Seventh Edition, John Wiley and Sons, New York, 1987.

Chế phẩm theo sáng chế có thể còn chứa hỗn hợp chất hỗ trợ và chất phụ gia, đã biết đối với người có hiểu biết trong lĩnh vực làm chất trợ điều chế (một số chất trong số các chất này có thể được xem là hoạt động chức năng như chất pha loãng rắn, chất pha loãng lỏng và chất hoạt động bề mặt). Chất hỗ trợ và chất phụ gia như vậy có thể kiểm soát được: độ pH (chất đệm), hiện tượng tạo bọt trong quá trình xử lý (chất chống tạo bọt như polyorganosiloxan), hiện tượng lắng hoạt chất (chất tạo huyền phù), độ nhớt (chất làm đặc tạo sol-gel thuận nghịch), sự phát triển của vi khuẩn trong đồ chứa (chất kháng khuẩn), sự đông đặc của sản phẩm (chất chống đông), màu sắc (chất phân tán tạo màu/thuốc nhuộm), hiện tượng rửa trôi (chất tạo màng hoặc chất dính), sự bay hơi (chất làm chậm bay hơi), và các hiện tượng khác tương tự. Chất tạo màng bao gồm, ví dụ, polyvinyl axetat, copolyme

polyvinyl axetat, copolyme polyvinylpyrrolidon-vinyl axetat, rượu polyvinylic, copolyme rượu polyvinylic và sáp. Ví dụ về chất bổ trợ và chất phụ gia cho chế phẩm bao gồm chất được liệt kê trong *McCutcheon's Volume 2: Functional Materials*, các ấn phẩm hàng năm của thế giới và Bắc Mỹ do McCutcheon's Division xuất bản, The Manufacturing Confectioner Publishing Co.; và Công bố đơn PCT số WO 03/024222.

Hợp chất có công thức 1 và các hoạt chất khác bất kỳ thường được đưa vào các hỗn hợp này bằng cách hoà tan hoạt chất trong dung môi hoặc bằng cách nghiền trong chất pha loãng lỏng hoặc khô. Các dung dịch, bao gồm dạng cô đặc dễ nhũ hóa, có thể được điều chế đơn giản bằng cách trộn các thành phần này với nhau. Nếu dung môi chứa hỗn hợp lỏng được dự định để sử dụng làm dạng cô đặc dễ nhũ hóa là không thể trộn lẫn với nước, thì chất nhũ hoá thường được bổ sung để nhũ hóa dung môi chứa hoạt chất khi pha loãng với nước. Huyền phù đặc chứa hoạt chất, với hạt có đường kính tới 2.000 μm có thể được nghiền ướt bằng cách sử dụng các thiết bị nghiền để thu được các hạt có đường kính trung bình dưới 3 μm . Dung dịch nước huyền phù đặc có thể được tạo thành hỗn dịch dạng cô đặc (ví dụ, xem, U.S. 3,060,084) hoặc được xử lý tiếp bằng cách sấy phun để thu được hạt phân tán trong nước. Các chế phẩm khô thường cần tới quy trình nghiền khô, quy trình này tạo ra đường kính hạt trung bình nằm trong khoảng từ 2 tới 10 μm . Bột mịn để rắc khô và bột có thể được điều chế bằng cách trộn và thường là nghiền như bằng máy nghiền búa hoặc máy nghiền dùng năng lượng lỏng. Các hạt và viên tròn có thể được tạo ra bằng cách phun hoạt chất lên chất mang dạng hạt đã được tạo ra trước hoặc bằng các kỹ thuật kết tụ. Xem, Browning, "Agglomeration", *Chemical Engineering*, December 4, 1967, pp 147–48, *Perry's Chemical Engineer's Handbook*, 4th Ed., McGraw-Hill, New York, 1963, các trang 8–57 và sau đó, và WO 91/13546. Dạng viên tròn có thể được bào chế như được mô tả trong U.S. 4,172,714. Hạt phân tán trong nước và tan trong nước có thể được điều chế như được mô tả trong U.S. 4,144,050, U.S. 3,920,442 và DE 3,246,493. Viên nén có thể được điều chế như được mô tả trong U.S. 5,180,587, U.S. 5,232,701 và U.S. 5,208,030. Các lớp màng có thể được điều chế

như được mô tả trong GB 2,095,558 và U.S. 3,299,566.

Để biết thêm thông tin về các phương pháp điều chế đã được đề cập trong lĩnh vực kỹ thuật này, xem T. S. Woods, “The Formulator’s Toolbox – Product Forms for Modern Agriculture” in *Pesticide Chemistry and Bioscience, The Food–Environment Challenge*, T. Brooks and T. R. Roberts, Eds., Proceedings of the 9th International Congress on Pesticide Chemistry, The Royal Society of Chemistry, Cambridge, 1999, pp. 120–133. Cũng xem trong U.S. 3,235,361, cột 6, dòng 16 đến cột 7, dòng 19 và các Ví dụ 10–41; U.S. 3,309,192, Col. 5, dòng 43 đến cột 7, dòng 62 và các Ví dụ 8, 12, 15, 39, 41, 52, 53, 58, 132, 138–140, 162–164, 166, 167 và 169–182; U.S. 2,891,855, Cột 3, dòng 66 đến cột 5, dòng 17 và các Ví dụ 1–4; Klingman, *Weed Control as a Science*, John Wiley and Sons, Inc., New York, 1961, trang 81–96; Hance et al., *Weed Control Handbook*, 8th Ed., Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1989; và *Developments in formulation technology*, PJB Publications, Richmond, UK, 2000.

Trong các ví dụ sau, tất cả các chế phẩm đều được điều chế theo cách thông thường. Số hợp chất dùng để chỉ các hợp chất trong Bảng phụ lục A–F. Không cần mô tả kỹ hơn, các tác giả sáng chế cho rằng người có hiểu biết trong lĩnh vực kỹ thuật này có thể sử dụng phần mô tả trên của sáng chế với phạm vi rộng nhất. Do đó, các ví dụ sau chỉ nhằm mục đích minh họa sáng chế và không giới hạn phần mô tả theo bất kỳ cách nào. Phần trăm được tính theo khối lượng trừ khi có quy định khác.

Ví dụ thực hiện sáng chế

Ví dụ A

Chất cô đặc có độ bền cao

Hợp chất 9	98,5%
silic oxit aerogel	0,5%
silic oxit mịn vô định hình tổng hợp	1,0%

Ví dụ B

Bột thấm ướt

Hợp chất 9	65,0%
đodexylphenol polyetylen glycol ete	2,0%
natri ligninsulfonat	4,0%
natri silicoaluminat	6,0%
monmorilonit (được nung)	23,0%

Ví dụ C

Hạt

Hợp chất 9	10,0%
hạt atapulgit (chất bay hơi thấp 0,71/0,30 mm; Sàng Mỹ có cỡ lỗ 25–50)	90,0%

Ví dụ D

Viên ép đùn

Hợp chất 9	25,0%
natri sulfat khan	10,0%
canxi ligninsulfonat thô	5,0%
natri alkylnaphtalensulfonat	1,0%
canxi/magie bentonit	59,0%

Ví dụ E

Chất cô đặc dễ nhũ hóa

Hợp chất 9	10,0%
polyoxyetylen sorbitol hexoleat C6–C10	20,0%
metyl este của axit béo	70,0%

Ví dụ F

Vì nhũ tương

Hợp chất 9	5,0%
Copolyme polyvinylpyrrolidon-vinyl axetat	30,0%
Alkylpolyglycosit	30,0%
glyxeryl monooleat	15,0%
nước	20,0%

Ví dụ G

Huyền phù cô đặc

Hợp chất 9	35%
copolyme khối butyl polyoxyetylen/polypropylen	4,0%
copolyme axit stearic/polyetylen glycol	1,0%
polyme styren acrylic	1,0%
Gôm xanthan	0,1%
propylen glycol	5,0%
chất khử bọt trên cơ sở silicon	0,1%
1,2-benzisothiazolin-3-on	0,1%
nước	53,7%

Ví dụ H

Nhũ tương trong nước

Hợp chất 9	10,0%
copolyme khối butyl polyoxyetylen/polypropylen	4,0%
copolyme axit stearic/polyetylen glycol	1,0%
polyme styren acrylic	1,0%
Gôm xanthan	0,1%
propylen glycol	5,0%
chất khử bọt trên cơ sở silicon	0,1%

1,2-benzisothiazolin-3-on	0,1%
hydrocacbon trên cơ sở dầu mỏ thơm	20,0
nước	58,7%

Ví dụ I

Chất phân tán dạng dầu

Hợp chất 9	25%
polyoxyetylen sorbitol hexaoleat	15%
Đất sét bentonit được cải biến bằng hữu cơ	2,5%
este của axit béo metyl	57,5%

Sáng chế cũng bao gồm các hợp chất theo các ví dụ A tới I nêu trên chỉ khác khác “Hợp chất 9” được thay bằng “Hợp chất 1”, “Hợp chất 2”, “Hợp chất 3”, “Hợp chất 4”, “Hợp chất 5”, “Hợp chất 6”, “Hợp chất 7”, “Hợp chất 8”, “Hợp chất 10”, “Hợp chất 11”, “Hợp chất 12”, “Hợp chất 13”, “Hợp chất 14”, “Hợp chất 15”, “Hợp chất 16”, “Hợp chất 17”, “Hợp chất 18”, “Hợp chất 19”, “Hợp chất 20”, “Hợp chất 21”, “Hợp chất 22”, “Hợp chất 23”, “Hợp chất 24”, “Hợp chất 25”, “Hợp chất 26”, “Hợp chất 27”, “Hợp chất 28”, “Hợp chất 29”, “Hợp chất 30”, “Hợp chất 31”, “Hợp chất 32”, “Hợp chất 33”, “Hợp chất 34”, “Hợp chất 35”, “Hợp chất 36”, “Hợp chất 37”, “Hợp chất 38”, “Hợp chất 39”, “Hợp chất 40”, “Hợp chất 41”, “Hợp chất 42”, “Hợp chất 43”, “Hợp chất 44”, “Hợp chất 45”, “Hợp chất 46”, “Hợp chất 47”, “Hợp chất 48”, “Hợp chất 49”, “Hợp chất 50”, “Hợp chất 51”, “Hợp chất 52”, “Hợp chất 53”, “Hợp chất 54”, “Hợp chất 55”, “Hợp chất 56”, “Hợp chất 57”, “Hợp chất 58”, “Hợp chất 59”, “Hợp chất 60”, “Hợp chất 61”, “Hợp chất 62” hoặc “Hợp chất 63” nêu trên.

Kết quả thử nghiệm chỉ ra rằng hợp chất theo sáng chế là các thuốc diệt cỏ và/hoặc chất điều hòa sinh trưởng thực vật trước nảy mầm và/hoặc sau nảy mầm có hoạt tính cao. Hợp chất theo sáng chế thường có cao nhất hoạt tính đối với việc phòng trừ cỏ dại ở giai đoạn sớm sau nảy mầm (tức là phun ngay sau khi hạt giống cỏ dại nảy mầm từ đất) và phòng trừ cỏ dại ở giai đoạn sau nảy mầm (tức là phun

trước khi hạt giống cỏ dại nảy mầm từ đất). Nhiều hợp chất trong số chúng có tính hữu dụng cho việc phòng trừ cỏ dại phổ rộng trước và/hoặc sau nảy mầm ở những khu vực trong đó mong muốn phòng trừ hoàn toàn tất cả các loại thực vật như quanh thùng cất giữ nhiên liệu, khu vực cất giữ công nghiệp, nơi đỗ xe, khu vực đậu lái xe, sân bay, bờ sông, các đường tưới và tiêu khác, quanh bảng quảng cáo và cấu trúc đường quốc lộ và đường sắt. Nhiều hợp chất bất kỳ trong số các hợp chất theo sáng chế, nhờ trao đổi chất một cách chọn lọc ở cây trồng và cỏ dại, hoặc bằng cách chọn lọc hoạt tính ở vị trí ức chế về mặt sinh lý ở cây trồng và cỏ dại, hoặc bằng cách thay thế một cách chọn lọc trên hoặc trong môi trường gồm hỗn hợp cây trồng và cỏ dại, là hữu ích để phòng trừ một cách chọn lọc cỏ và cỏ dại lá rộng trong hỗn hợp cây trồng/cỏ dại. Người có hiểu biết trong lĩnh vực kỹ thuật này sẽ hiểu rằng tổ hợp các yếu tố chọn lọc được ưu tiên này trong hợp chất hoặc nhóm hợp chất có thể được xác định một cách dễ dàng bằng cách thực hiện các thử nghiệm sinh học và/hoặc sinh hóa thông thường. Hợp chất theo sáng chế có thể có tính chống chịu các cây trồng nông nghiệp quan trọng bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, cỏ linh lăng, lúa mạch, bông, lúa mì, cây cải dầu, cây củ cải đường, ngũ cốc (ngô), lúa miến, đậu tương, lúa, yến mạch, lạc, cây rau, cà chua, khoai tây, cây trồng đồn điền lâu năm bao gồm cà phê, ca cao, cọ, cao su, mía, cam quýt, nho, cây ăn quả, cây lấy hạt, chuối, mã đề, dứa, cây hoa bia, chè và rừng như bạch đàn và cây có quả hình nón (ví dụ, thông), và các loài trên lớp đất mặt (ví dụ, cỏ Kentucky, cỏ St. Augustine, cỏ đuôi trâu Kentucky và cỏ Bermuda). Hợp chất theo sáng chế có thể được sử dụng ở cây trồng được biến nạp bằng di truyền hoặc được gây giống để kết hợp tính kháng thuốc diệt cỏ, có các protein độc với các vật gây hại không xương sống (như độc tố *Bacillus thuringiensis*), và/hoặc có các tính trạng hữu ích khác. Người có hiểu biết trong lĩnh vực kỹ thuật này cần hiểu rằng không phải tất cả các hợp chất đều có tác dụng chống lại tất cả các loại cỏ dại như nhau. Theo cách khác, hợp chất theo sáng chế hữu ích để cải biến sự sinh trưởng của thực vật. n

Do hợp chất theo sáng chế có hoạt tính (diệt cỏ cả ở giai đoạn trước nảy mầm lẫn ở giai đoạn sau nảy mầm), để phòng trừ thực vật không mong muốn bằng

cách diệt hoặc gây tổn thương thực vật hoặc làm giảm sự sinh trưởng của nó, hợp chất theo sáng chế có thể được phun hữu ích bằng nhiều phương pháp bao gồm bước cho lượng hữu hiệu có tác dụng diệt cỏ của hợp chất theo sáng chế, hoặc chế phẩm chứa hợp chất này và ít nhất một trong số các chất hoạt động bề mặt, chất pha loãng chất rắn hoặc chất pha loãng lỏng, tiếp xúc với tán lá hoặc bộ phận khác của thực vật không mong muốn hoặc môi trường của thực vật không mong muốn như đất hoặc nước trong đó thực vật không mong muốn đang sinh trưởng hoặc bao quanh hạt hoặc cành chiết khác của thực vật không mong muốn.

Lượng hữu hiệu có tác dụng diệt cỏ của hợp chất theo sáng chế được xác định bằng một số yếu tố. Các yếu tố này bao gồm: chế phẩm được chọn, phương pháp phun, số lượng và loại thực vật có mặt, các điều kiện sinh trưởng, v.v. Nói chung, lượng hữu hiệu có tác dụng diệt cỏ của hợp chất theo sáng chế nằm trong khoảng từ 0,005 đến 20 kg/ha với khoảng được ưu tiên là từ 0,01 đến 1 kg/ha. Người có hiểu biết trong lĩnh vực kỹ thuật này có thể xác định một cách dễ dàng lượng hữu hiệu có tác dụng diệt cỏ cần thiết cho mức phòng trừ cỏ dại mong muốn.

Theo một phương án chung, hợp chất theo sáng chế được phun, thường dưới dạng chế phẩm đã được bào chế, vào nơi có thực vật mong muốn (ví dụ, cây trồng) và thực vật không mong muốn (tức là cỏ dại), cả hai đều có thể là hạt giống, cây con và/hoặc cây đã lớn, tiếp xúc với môi trường sinh trưởng (ví dụ, đất). Ở nơi này, chế phẩm chứa hợp chất theo sáng chế có thể được phun trực tiếp lên thực vật hoặc bộ phận của chúng, đặc biệt là lên thực vật không mong muốn, và/hoặc vào môi trường sinh trưởng tiếp xúc với thực vật này.

Hợp chất theo sáng chế hữu ích để xử lý toàn bộ cây và các bộ phận của cây. Các giống cây trồng và các cây trồng có thể thu được bằng phương pháp nhân giống và truyền giống thông thường hoặc bằng các phương pháp sử dụng kỹ thuật di truyền. Cây trồng biến đổi gen (cây trồng chuyển gen) là các cây trồng trong đó gen khác loài (gen chuyển) đã được hợp nhất một cách ổn định vào bộ gen của cây trồng. Gen chuyển mà được xác định bằng vị trí cụ thể của nó trong bộ gen của cây trồng được gọi là gen biến nạp hoặc gen chuyển.

Cây trồng biến đổi gen có thể được xử lý theo sáng chế bao gồm các cây trồng có tính kháng một hoặc nhiều áp lực sinh học (loài gây hại như giun tròn, sâu bọ, ve bét, nấm, v.v.) hoặc áp lực phi sinh học (hiện tượng khô hạn, nhiệt độ lạnh, độ mặn của đất, v.v.), hoặc chứa các đặc tính mong muốn khác. Cây trồng có thể được biến đổi về mặt di truyền để có các tính trạng, ví dụ, kháng thuốc diệt cỏ, kháng sâu bọ, cải thiện profin dầu hoặc chống chịu sự khô hạn. Cây trồng biến đổi gen hữu ích chứa gen biến nạp gồm một gen hoặc tổ hợp của các gen biến nạp được thể hiện trong Bảng 3. Thông tin bổ sung về biến đổi gen được nêu trong Bảng 3 có thể thu được từ các cơ sở dữ liệu sẵn có công khai đã được, ví dụ, Phòng nông nghiệp Hoa Kỳ lưu giữ.

Các chữ viết tắt dưới đây, T1 đến T37, được sử dụng trong phần các dạng thể hiện C về các tính trạng. “tol.” có nghĩa là “chịu”. Dấu “-” có nghĩa là mục không có sẵn.

Tính trạng	Mô tả	Tính trạng	Mô tả	Tính trạng	Mô tả
T1	Chịu glyphosat	T15	Chịu lạnh	T27	Tryptophan cao
T2	Dầu cao axit lauric	T16	Chịu thuốc diệt cỏ imidazolinon	T28	Lá thẳng đứng Bán lùn
T3	Chịu glufosinat	T17	Alpha-amylaza cải biến	T29	Bán lùn
T4	Phá vỡ phytat	T18	Kiểm soát sự thụ phấn	T30	Chịu sắt kém
T5	Chịu oxynil	T19	Chịu 2,4-D	T31	Dầu /axit béo cải biến
T6	Kháng bệnh	T20	Lysin tăng	T32	Chịu HPPD
T7	Kháng sâu bọ	T21	Chịu khô hạn	T33	Cao dầu
T9	Màu sắc hoa biến đổi	T22	Quá trình chín/già chậm	T34	Kháng aryloxyalkanoat
T11	chịu thuốc diệt cỏ	T23	Chất lượng sản phẩm cải biến	T35	Chịu Mesotrion
T12	Chịu dicamba	T24	Cao xenluloza	T36	Nicotin giảm
T13	Chống kích ứng	T25	Tinh bột/hydrat cacbon cải biến	T37	Sản phẩm cải biến
T14	Chịu muối	T26	Kháng bệnh & sâu bọ		

Bảng 3

Cây trồng	Tên gen	Mã gen	Tình trạng	Gen
Cỏ linh lăng	J101	MON-00101-8	T1	cp4 epsps (aroA:CP4)
Cỏ linh lăng	J163	MON-00163-7	T1	cp4 epsps (aroA:CP4)
Cải dầu*	23-18-17 (Gen 18)	CGN-89465-2	T2	te
Cải dầu*	23-198 (Gen 23)	CGN-89465-2	T2	te
Cải dầu*	61061	DP-061061-7	T1	gat4621
Cải dầu*	73496	DP-073496-4	T1	gat4621
Cải dầu*	GT200 (RT200)	MON-89249-2	T1	cp4 epsps (aroA:CP4); goxv247
Cải dầu*	GT73 (RT73)	MON-00073-7	T1	cp4 epsps (aroA:CP4); goxv247
Cải dầu*	HCN10 (Topas 19/2)	-	T3	bar
Cải dầu*	HCN28 (T45)	ACS-BN008-2	T3	pat (syn)
Cải dầu*	HCN92 (Topas 19/2)	ACS-BN007-1	T3	bar
Cải dầu*	MON88302	MON-88302-9	T1	cp4 epsps (aroA:CP4)
Cải dầu*	MPS961	-	T4	phyA
Cải dầu*	MPS962	-	T4	phyA
Cải dầu*	MPS963	-	T4	phyA
Cải dầu*	MPS964	-	T4	phyA
Cải dầu*	MPS965	-	T4	phyA
Cải dầu*	MS1 (B91-4)	ACS-BN004-7	T3	bar
Cải dầu*	MS8	ACS-BN005-8	T3	bar
Cải dầu*	OXY-235	ACS-BN011-5	T5	bxn
Cải dầu*	PHY14	-	T3	bar
Cải dầu*	PHY23	-	T3	bar
Cải dầu*	PHY35	-	T3	bar
Cải dầu*	PHY36	-	T3	bar
Cải dầu*	RF1 (B93-101)	ACS-BN001-4	T3	bar
Cải dầu*	RF2 (B94-2)	ACS-BN002-5	T3	bar
Cải dầu*	RF3	ACS-BN003-6	T3	bar
Đậu	EMBRAPA 5,1	EMB-PV051-1	T6	ac1 (có nghĩa và đối nghĩa)
Cà tím #	EE-1	-	T7	cry1Ac
Bông	19-51a	DD-01951A-7	T11	S4-HrA
Bông	281-24-236	DAS-24236-5	T3,T7	pat (syn); cry1F
Bông	3006-210-23	DAS-21023-5	T3,T7	pat (syn); cry1Ac
Bông	31707	-	T5,T7	bxn; cry1Ac
Bông	31803	-	T5,T7	bxn; cry1Ac
Bông	31807	-	T5,T7	bxn; cry1Ac
Bông	31808	-	T5,T7	bxn; cry1Ac
Bông	42317	-	T5,T7	bxn; cry1Ac

Bông	BNLA-601	-	T7	cry1Ac
Bông	BXN10211	BXN10211-9	T5	bxn; cry1Ac
Bông	BXN10215	BXN10215-4	T5	bxn; cry1Ac
Bông	BXN10222	BXN10222-2	T5	bxn; cry1Ac
Bông	BXN10224	BXN10224-4	T5	bxn; cry1Ac
Bông	COT102	SYN-IR102-7	T7	vip3A(a)
Bông	COT67B	SYN-IR67B-1	T7	cry1Ab
Bông	COT202	-	T7	vip3A
Bông	Gen 1	-	T7	cry1Ac
Bông	GMF Cry1A	GTL-GMF311-7	T7	cry1Ab-Ac
Bông	GHB119	BCS-GH005-8	T7	cry2Ae
Bông	GHB614	BCS-GH002-5	T1	2mepsps
Bông	GK12	-	T7	cry1Ab-Ac
Bông	LLCotton25	ACS-GH001-3	T3	bar
Bông	MLS 9124	-	T7	cry1C
Bông	MON1076	MON-89924-2	T7	cry1Ac
Bông	MON1445	MON-01445-2	T1	cp4 epsps (aroA:CP4)
Bông	MON15985	MON-15985-7	T7	cry1Ac; cry2Ab2
Bông	MON1698	MON-89383-1	T7	cp4 epsps (aroA:CP4)
Bông	MON531	MON-00531-6	T7	cry1Ac
Bông	MON757	MON-00757-7	T7	cry1Ac
Bông	MON88913	MON-88913-8	T1	cp4 epsps (aroA:CP4)
Bông	Nqwe Chi 6 Bt	-	T7	-
Bông	SKG321	-	T7	cry1A; CpTI
Bông	T303-3	BCS-GH003-6	T3,T7	cry1Ab; bar
Bông	T304-40	BCS-GH004-7	T3,T7	cry1Ab; bar
Bông	CE43-67B	-	T7	cry1Ab
Bông	CE46-02A	-	T7	cry1Ab
Bông	CE44-69D	-	T7	cry1Ab
Bông	1143-14A	-	T7	cry1Ab
Bông	1143-51B	-	T7	cry1Ab
Bông	T342-142	-	T7	cry1Ab
Bông	PV-GHGT07 (1445)	-	T1	cp4 epsps (aroA:CP4)
Bông	EE-GH3	-	T1	Mepsps
Bông	EE-GH5	-	T7	cry1Ab
Bông	MON88701	MON-88701-3	T3,T12	dmo đã cải biến; bar
Bông	OsCr11	-	T13	Cry j đã cải biến
Lanh	FP967	CDC-FL001-2	T11	Als
Đậu lăng	RH44	-	T16	Als
Ngô	3272	SYN-E3272-5	T17	amy797E
Ngô	5307	SYN-05307-1	T7	ecry3,1Ab

Ngô	59122	DAS-59122-7	T3,T7	cry34Ab1; cry35Ab1; pat
Ngô	676	PH-000676-7	T3,T18	pat; dam
Ngô	678	PH-000678-9	T3,T18	pat; dam
Ngô	680	PH-000680-2	T3,T18	pat; dam
Ngô	98140	DP-098140-6	T1,T11	gat4621; zm-hra
Ngô	Bt10	-	T3,T7	cry1Ab; pat
Ngô	Bt176 (176)	SYN-EV176-9	T3,T7	cry1Ab; bar
Ngô	BVLA430101	-	T4	phyA2
Ngô	CBH-351	ACS-ZM004-3	T3,T7	cry9C; bar
Ngô	DAS40278-9	DAS40278-9	T19	aad-1
Ngô	DBT418	DKB-89614-9	T3,T7	cry1Ac; pinII; bar
Ngô	DLL25 (B16)	DKB-89790-5	T3	Bar
Ngô	GA21	MON-00021-9	T1	Mepsps
Ngô	GG25	-	T1	Mepsps
Ngô	GJ11	-	T1	Mepsps
Ngô	FI117	-	T1	Mepsps
Ngô	GAT-ZM1	-	T3	Pat
Ngô	LY038	REN-00038-3	T20	cordapA
Ngô	MIR162	SYN-IR162-4	T7	vip3Aa20
Ngô	MIR604	SYN-IR604-5	T7	mcry3A
Ngô	MON801 (MON80100)	MON801	T1,T7	cry1Ab; cp4 epsps (aroA:CP4); goxv247
Ngô	MON802	MON-80200-7	T1,T7	cry1Ab; cp4 epsps (aroA:CP4); goxv247
Ngô	MON809	PH-MON-809- 2	T1,T7	cry1Ab; cp4 epsps (aroA:CP4); goxv247
Ngô	MON810	MON-00810-6	T1,T7	cry1Ab; cp4 epsps (aroA:CP4); goxv247
Ngô	MON832	-	T1	cp4 epsps (aroA:CP4); goxv247
Ngô	MON863	MON-00863-5	T7	cry3Bb1
Ngô	MON87427	MON-87427-7	T1	cp4 epsps (aroA:CP4)
Ngô	MON87460	MON-87460-4	T21	cspB
Ngô	MON88017	MON-88017-3	T1,T7	cry3Bb1; cp4 epsps (aroA:CP4)
Ngô	MON89034	MON-89034-3	T7	cry2Ab2; cry1A.105
Ngô	MS3	ACS-ZM001-9	T3,T18	bar; barnase
Ngô	MS6	ACS-ZM005-4	T3,T18	bar; barnase
Ngô	NK603	MON-00603-6	T1	cp4 epsps (aroA:CP4)
Ngô	T14	ACS-ZM002-1	T3	pat (syn)
Ngô	T25	ACS-ZM003-2	T3	pat (syn)
Ngô	TC1507	DAS-01507-1	T3,T7	cry1Fa2; pat
Ngô	TC6275	DAS-06275-8	T3,T7	mocry1F; bar
Ngô	VIP1034	-	T3,T7	vip3A; pat
Ngô	43A47	DP-043A47-3	T3,T7	cry1F; cry34Ab1; cry35Ab1; pat
Ngô	40416	DP-040416-8	T3,T7	cry1F; cry34Ab1; cry35Ab1; pat

Ngô	32316	DP-032316-8	T3,T7	cry1F; cry34Ab1; cry35Ab1; pat
Ngô	4114	DP-004114-3	T3,T7	cry1F; cry34Ab1; cry35Ab1; pat
Dưa hấu	Dưa hấu A	-	T22	sam-k
Dưa hấu	Dưa hấu B	-	T22	sam-k
Đu đủ	55-1	CUH-CP551-8	T6	prsv cp
Đu đủ	63-1	CUH-CP631-7	T6	prsv cp
Đu đủ	Huanong No. 1	-	T6	prsv rep
Đu đủ	X17-2	UFL-X17CP-6	T6	prsv cp
Mận	C-5	ARS-PLMC5-6	T6	ppv cp
Cải dầu**	ZSR500	-	T1	cp4 epsps (aroA:CP4); goxv247
Cải dầu**	ZSR502	-	T1	cp4 epsps (aroA:CP4); goxv247
Cải dầu**	ZSR503	-	T1	cp4 epsps (aroA:CP4); goxv247
Lúa	7Crp#242-95-7	-	T13	7crp
Lúa	7Crp#10	-	T13	7crp
Lúa	GM Shanyou 63	-	T7	cry1Ab; cry1Ac
Lúa	Huahui-1/TT51-1	-	T7	cry1Ab; cry1Ac
Lúa	LLRICE06	ACS-OS001-4	T3	bar
Lúa	LLRICE601	BCS-OS003-7	T3	bar
Lúa	LLRICE62	ACS-OS002-5	T3	bar
Lúa	Tarom molaii + cry1Ab	-	T7	cry1Ab (đã làm cùn)
Lúa	GAT-OS2	-	T3	Bar
Lúa	GAT-OS3	-	T3	Bar
Lúa	PE-7	-	T7	Cry1Ac
Lúa	7Crp#10	-	T13	7crp
Lúa	KPD627-8	-	T27	OASA1D
Lúa	KPD722-4	-	T27	OASA1D
Lúa	KA317	-	T27	OASA1D
Lúa	HW5	-	T27	OASA1D
Lúa	HW1	-	T27	OASA1D
Lúa	B-4-1-18	-	T28	Ả OsBRI1
Lúa	G-3-3-22	-	T29	OSGA2ox1
Lúa	AD77	-	T6	DEF
Lúa	AD51	-	T6	DEF
Lúa	AD48	-	T6	DEF
Lúa	AD41	-	T6	DEF
Lúa	13pNasNa800725atApr t1	-	T30	HvNAS1; HvNAAT-A; APRT
Lúa	13pAprt1	-	T30	APRT
Lúa	gHvNAS1- gHvNAAT-1	-	T30	HvNAS1; HvNAAT-A; HvNAAT-B
Lúa	gHvIDS3-1	-	T30	HvIDS3
Lúa	gHvNAAT1	-	T30	HvNAAT-A; HvNAAT-B

Lúa	gHvNAS1-1	-	T30	HvNAS1
Lúa	NIA-OS006-4	-	T6	WRKY45
Lúa	NIA-OS005-3	-	T6	WRKY45
Lúa	NIA-OS004-2	-	T6	WRKY45
Lúa	NIA-OS003-1	-	T6	WRKY45
Lúa	NIA-OS002-9	-	T6	WRKY45
Lúa	NIA-OS001-8	-	T6	WRKY45
Lúa	OsCr11	-	T13-	Modified Cry j
Lúa	17053	-	T1	cp4 epsps (aroA:CP4)
Lúa	17314	-	T1	cp4 epsps (aroA:CP4)
Hoa hồng	WKS82 / 130-4-1	IFD-52401-4	T9	5AT; bp40 (f3'5'h)
Hoa hồng	WKS92 / 130-9-1	IFD-52901-9	T9	5AT; bp40 (f3'5'h)
Đậu tương	260-05 (G94-1, G94-19, G168)	-	T9	gm-fad2-1 (vị trí cam)
Đậu tương	A2704-12	ACS-GM005-3	T3	Pat
Đậu tương	A2704-21	ACS-GM004-2	T3	Pat
Đậu tương	A5547-127	ACS-GM006-4	T3	Pat
Đậu tương	A5547-35	ACS-GM008-6	T3	Pat
Đậu tương	CV127	BPS-CV127-9	T16	csr1-2
Đậu tương	DAS68416-4	DAS68416-4	T3	Pat
Đậu tương	DP305423	DP-305423-1	T11,T31	gm-fad2-1 (vị trí cam); gm-hra
Đậu tương	DP356043	DP-356043-5	T1,T31	gm-fad2-1 (vị trí cam); gat4601
Đậu tương	FG72	MST-FG072-3	T32,T1	2mepsps; hppdPF W336
Đậu tương	GTS 40-3-2 (40-3-2)	MON-04032-6	T1	cp4 epsps (aroA:CP4)
Đậu tương	GU262	ACS-GM003-1	T3	Pat
Đậu tương	MON87701	MON-87701-2	T7	cry1Ac
Đậu tương	MON87705	MON-87705-6	T1,T31	fatb1-A (có nghĩa & đối nghĩa); fad2-1A (có nghĩa & đối nghĩa); cp4 epsps (aroA:CP4)
Đậu tương	MON87708	MON-87708-9	T1,T12	dmo; cp4 epsps (aroA:CP4)
Đậu tương	MON87769	MON-87769-7	T1,T31	Pj.D6D; Nc.Fad3; cp4 epsps (aroA:CP4)
Đậu tương	MON89788	MON-89788-1	T1	cp4 epsps (aroA:CP4)
Đậu tương	W62	ACS-GM002-9	T3	Bar
Đậu tương	W98	ACS-GM001-8	T3	Bar
Đậu tương	MON87754	MON-87754-1	T33	dgat2A
Đậu tương	DAS21606	DAS-21606	T34,T3	aad-12 đã cải biến; pat
Đậu tương	DAS44406	DAS-44406-6	T1,T3,T34	aad-12 đã cải biến; 2mepsps; pat
Đậu tương	SYHT04R	SYN-0004R-8	T35	Mod. Avhppd
Đậu tương	9582,814,19,1	-	T3,T7	cry1Ac, cry1F, PAT
Bí	CZW3	SEM-ØCZW3-2	T6	cmv cp, zymv cp, wmv cp
Bí	ZW20	SEM-ØZW20-7	T6	zymv cp, wmv cp
Củ cải đường	GTSB77 (T9100152)	SY-GTSB77-8	T1	cp4 epsps (aroA:CP4); goxv247

Củ cải đường	H7-1	KM-000H71-4	T1	cp4 epsps (aroA:CP4)
Củ cải đường	T120-7	ACS-BV001-3	T3	Pat
Củ cải đường	T227-1	-	T1	cp4 epsps (aroA:CP4)
Mía	NXI-1T	-	T21	EcbetA
Hoa hướng dương	X81359	-	T16	Als
Hồ tiêu	PK-SP01	-	T6	cmv cp
Thuốc lá	C/F/93/08-02	-	T5	Bxn
Thuốc lá	Vector 21-41	-	T36	NtQPT1 (đối nghĩa)
Hoa hướng dương	X81359	-	T16	Als
Lúa mì	MON71800	MON-71800-3	T1	cp4 epsps (aroA:CP4)

* Ac-hen-ti-na (*Brassica napus*), ** Ba Lan (*B. rapa*), # Cây cà tím

Mặc dù phổ biến nhất, các hợp chất theo sáng chế được sử dụng để phòng trừ thực vật không mong muốn, việc tiếp xúc của thực vật mong muốn ở nơi được xử lý với các hợp chất theo sáng chế có thể tạo ra tác dụng siêu cộng hợp hoặc tác dụng hiệp đồng với các tính trạng di truyền ở thực vật mong muốn, bao gồm các tính trạng được đưa vào thông qua biến đổi gen. Ví dụ, tính kháng côn trùng gây hại ăn thực vật hoặc các bệnh ở thực vật, chịu stress sinh học/phi sinh học hoặc độ ổn định khi bảo quản có thể là cao hơn kỳ vọng từ các tính trạng di truyền ở thực vật mong muốn.

Hợp chất theo sáng chế cũng có thể được trộn với một hoặc nhiều hợp chất hoặc chất có hoạt tính sinh học bao gồm thuốc trừ sâu, thuốc diệt nấm, thuốc diệt giun tròn, thuốc diệt khuẩn, thuốc diệt ve bét, thuốc diệt cỏ, chất tăng cường độ tương thích của cây trồng cho thuốc diệt cỏ, chất điều hoà sinh trưởng như chất ức chế côn trùng lột xác và chất kích thích rễ, thuốc tiết dục, chất bán hoá học, chất xua đuổi, chất dẫn dụ côn trùng, pheromon, chất kích thích ăn, các hoạt chất sinh học hoặc vi khuẩn gây bệnh côn trùng, virus hoặc nấm để tạo ra thuốc trừ sâu nhiều thành phần có phổ sử dụng trong nông nghiệp và phi nông nghiệp rộng hơn. Do đó, sáng chế cũng đề xuất chế phẩm chứa lượng hữu hiệu sinh học của hợp chất có công thức 1, ít nhất một thành phần bổ sung được chọn từ nhóm bao gồm chất hoạt động bề mặt, chất pha loãng rắn hoặc chất pha loãng lỏng và lượng hữu

hiệu của ít nhất một hợp chất hoặc chất có hoạt tính sinh học bổ sung. Đối với hỗn hợp theo sáng chế, các hợp chất hoặc chất có hoạt tính sinh học khác có thể được điều chế cùng với chế phẩm theo sáng chế, bao gồm các hợp chất có công thức 1, để tạo ra hỗn hợp sơ chế, hoặc các hợp chất hoặc chất có hoạt tính sinh học khác có thể được điều chế riêng lẻ từ chế phẩm theo sáng chế, chứa hợp chất có công thức 1, và hai chế phẩm được kết hợp cùng nhau trước khi sử dụng (ví dụ, trong thùng phun) hoặc, theo một cách khác, được dùng liên tiếp.

Hỗn hợp chứa một hoặc nhiều thuốc diệt cỏ sau với hợp chất theo sáng chế có thể đặc biệt hữu ích để phòng trừ cỏ dại: axetoclo, axiflofen và muối natri của nó, aclonifen, acrolein (2-propenal), alaclo, aloxyđim, ametryn, amicarbazon, amidosulfuron, aminoxyclopyraclo và este của nó (ví dụ, metyl, etyl) và các muối (ví dụ, natri, kali), aminopyralit, amitrole, amoni sulfamate, anilofos, asulam, atrazin, azimsulfuron, beflubutomit, benazolin, benazolin-etyl, bencarbazon, benfluralin, benfuresat, bensulfuron-metyl, bensulide, bentazon, benzobixyclon, benzofenap, bixyclopyron, bifenox, bilanafos, bispyribac và muối natri của nó, bromaxil, bromobutit, bromofenoxim, bromoxynil, bromoxynil octanoat, butaclo, butafenaxil, butamifos, butralin, butroxyđim, butylat, cafenstrol, carbetamit, carfentrazon-etyl, catechin, clometoxyfen, cloramben, clobromuron, cloflurenol-metyl, cloridazon, clorimuron-etyl, clotoluron, clopropham, closulfuron, clothal-đimetyl, clothiamid, xinidon-etyl, xinmetylin, xinosulfuron, clacyfos, clefoxyđim, xyclopyrimorat, clodinafop-propargyl, clomazon, clomeprop, clopyralid, clopyralid-olamin, cloransulam-metyl, cumyluron, xyanazin, xycloat, xyclopyrimorat, xyclosulfamuron, xycloxyđim, xyhalofop-butyl, 2,4-D và butotyl của nó, butyl, isoctyl và este isopropyl và đimetylamoni của nó, diolamin và muối trolamin, daimuron, dalapon, dalapon-natri, dazomet, 2,4-DB và đimetylamoni của nó, các muối kali và natri, desmedipham, desmetryn, dicamba và diglycolamoni của nó, đimetylamoni, các muối kali và natri, dichlobenil, đicloprop, điclofop-metyl, diclosulam, đifenzoquat metilsulfat, diflufenican, diflufenzopyr, đimefuron, đimepiperat, đimethaclo, đimethametryn, dimethenamit, dimethenamit-P, đimethipin, axit đimethylarsinic và muối natri của nó, đinitramin, dinoterb,

diphenamit, điquat đibromua, đithiopyr, điuron, DNOC, endothal, EPTC, esprocarb, etalfluralin, etametsulfuron-metyl, ethiozin, ethofumesate, etoxyfen, etoxysulfuron, etobenzanit, fenoxaprop-etyl, fenoxaprop-P-etyl, fenoxasulfon, fenquino-trione, fentrazamit, fenuron, fenuron-TCA, flamprop-metyl, flamprop-M-isopropyl, flamprop-M-metyl, flazasulfuron, florasulam, fluazifop-butyl, fluazifop-P-butyl, fluazolat, flucarbazon, flucetosulfuron, flucloalin, flufenaxet, flufenpyr, flufenpyr-etyl, flumetsulam, flumiclorac-pentyl, flumioxazin, fluometuron, floglycofen-etyl, flupoxam, flupyrsulfuron-metyl và muối natri của nó, flurenol, flurenol-butyl, fluridon, flurocloidone, fluroxypyr, flurtamon, fluthiaxet-metyl, fomesafen, foramsulfuron, fosamine-amoni, glufosinat, glufosinat-amoni, glufosinat-P, glyphosat và các muối của chúng như amoni, isopropylamoni, kali, natri (bao gồm sesquinati) và trimesi (được gọi theo cách khác là sulfosat), halauxifen, halauxifen-metyl, halosulfuron-metyl, haloxyfop-etotyl, haloxyfop-metyl, hexazinon, imazametabenz-metyl, imazamox, imazapic, imazapyr, imazaquin, imazaquin-amoni, imazetapyr, imazetapyr-amoni, imazosulfuron, indanofan, indaziflam, iofensulfuron, iodosulfuron-metyl, ioxynil, ioxynil octanoat, ioxynil-natri, ipfencarbazon, isoproturon, isouron, isoxaben, isoxaflutol, isoxaflotol, lactofen, lenaxil, linuron, maleic hyđrazit, MCPA và các muối của chúng (ví dụ, MCPA-đimetylamoni, MCPA-kali và MCPA-natri, este (ví dụ, MCPA-2-etylhexyl, MCPA-butotyl) và thioeste (ví dụ, MCPA-thioetyl), MCPB và các muối của chúng (ví dụ, MCPB-natri) và este (ví dụ, MCPB-etyl), mecoprop, mecoprop-P, mefenaxet, mefluidide, mesosulfuron-metyl, mesotrion, metam-natri, metamifop, metamitron, metazaclo, metazosulfuron, methabenzthiazuron, axit metylarsonic và canxi của nó, monoamoni, muối mononatri và đinatri, metylđymron, metobenzuron, metobromuron, metolaclo, S-metolaclo, metosulam, metoxuron, metribuzin, metsulfuron-metyl, molinat, monolinuron, naproanilit, napropamit, napropamit-M, naptalam, neburon, nicosulfuron, norflurazon, orbencarb, orthosulfamuron, oryzalin, oxadiargyl, oxadiazon, oxasulfuron, oxaziclomefon, oxyfluorfen, paraquat điclorua, pebulat, axit pelargonic, pendimetalin, penoxsulam, pentanoclo, pentoxazon, perfluidone,

pethoxamid, petoxyamid, phenmedipham, picloram, picloram-kali, picolinafen, pinoxaden, piperophos, pretilaclo, primisulfuron-metyl, prodiamin, profoxydim, prometon, prometryn, propaclo, propanil, propaquizafop, propazin, propham, propisoclo, propoxycarbazon, propyrisulfuron, propyzamit, prosulfocarb, prosulfuron, pyraclonil, pyraflufen-etyl, pyrasulfotole, pyrazogyl, pyrazolynate, pyrazoxyfen, pyrazosulfuron-etyl, pyribenzoxim, pyributicarb, pyridat, pyriftalit, pyriminobac-metyl, pyrimisulfan, pyriothiobac, pyriothiobac-natri, pyroxasulfon, pyroxsulam, quinclorac, quinmerac, quinclamin, quizalofop-etyl, quizalofop-P-etyl, quizalofop-P-tefuryl, rimsulfuron, saflufenacil, setoxydim, siduron, simazin, simetryn, sulcotrion, sulfentrazon, sulfometuron-metyl, sulfosulfuron, 2,3,6-TBA, TCA, TCA-natri, tebutam, tebuthiuron, tefuryltrione, tembotrione, tepraloxym, terbacil, terbumeton, terbutylazin, terbutryn, thenylclo, thiazopir, thiencarbazon, thifensulfuron-metyl, thiobencarb, tiafenacil, tiocarbamil, topramezon, tralkoxym, tri-allate, triafamone, triasulfuron, triaziflam, tribenuron-metyl, triclopir, triclopir-butetyl, triclopir-trietylami, tridiphan, trietazin, trifloxysulfuron, trifluralin, triflusulfuron-metyl, tritosulfuron, vernolate, 3-(2-clo-3,6-diflophenyl)-4-hydroxy-1-metyl-1,5-naphthyridin-2(1H)-on, 5-clo-3-[(2-hydroxy-6-oxo-1-xyclohexen-1-yl)cacbonyl]-1-(4-metoxiphenyl)-2(1H)-quinoxalinon, 2-clo-N-(1-metyl-1H-tetrazol-5-yl)-6-(triflometyl)-3-pyridincaroxyamit, 7-(3,5-diclo-4-pyridinyl)-5-(2,2-difloetyl)-8-hydroxypyrido[2,3-b]pyrazin-6(5H)-on, 4-(2,6-dietyl-4-metylphenyl)-5-hydroxy-2,6-dimetyl-3(2H)-pyridazinon, 5-[[[(2,6-diflophenyl)metoxy]metyl]-4,5-dihydro-5-metyl-3-(3-metyl-2-thienyl)isoxazol (previously methioxolin), 3-[7-flo-3,4-dihydro-3-oxo-4-(2-propyn-1-yl)-2H-1,4-benzoxazin-6-yl]dihydro-1,5-dimetyl-6-thioxo-1,3,5-triazin-2,4(1H,3H)-dion, 4-(4-flophenyl)-6-[(2-hydroxy-6-oxo-1-xyclohexen-1-yl)cacbonyl]-2-metyl-1,2,4-triazin-3,5(2H,4H)-dion, metyl 4-amino-3-clo-6-(4-clo-2-flo-3-metoxiphenyl)-5-flo-2-pyridincaroxylat, 2-metyl-3-(metylsulfonyl)-N-(1-metyl-1H-tetrazol-5-yl)-4-(triflometyl)benzamid, và 2-metyl-N-(4-metyl-1,2,5-oxadiazol-3-yl)-3-(metylsulfinyl)-4-(triflometyl)benzamid. Thuốc diệt cỏ khác cũng bao gồm các thuốc diệt cỏ sinh học như *Alternaria destruens*

Simmons, *Colletotrichum gloeosporioides* (Penz.) Penz. & Sacc., *Drechslera monoceras* (MTB-951), *Myrothecium verrucaria* (Albertini & Schweinitz)

Ditmar: Fries, *Phytophthora palmivora* (Butl.) Butl. và *Puccinia thlaspeos* Schub.

Hợp chất theo sáng chế cũng có thể được sử dụng kết hợp với chất điều hòa sinh trưởng thực vật như aviglyxin, *N*-(phenylmetyl)-1*H*-purin-6-amin, epocholeone, gibberellic axit, gibberelin A₄ và A₇, harpin protein, mepiquat clorua, prohexadion canxi, prohydrojasmon, natri nitrophenolat và trinexapacmetyl, và sinh vật cải biến sinh trưởng thực vật như chủng *Bacillus cereus* BP01.

Các tài liệu tham khảo chung về chất bảo vệ trong nông nghiệp này (tức là các thuốc trừ sâu, thuốc diệt nấm, thuốc diệt giun tròn, thuốc diệt ve bét, thuốc diệt cỏ và tác nhân sinh học) gồm *The Pesticide Manual, 13th Edition*, C. D. S. Tomlin, Ed., British Crop Protection Council, Farnham, Surrey, U.K., 2003 and *The BioPesticide Manual, 2nd Edition*, L. G. Copping, Ed., British Crop Protection Council, Farnham, Surrey, U.K., 2001.

Đối với các phương án, trong đó một hoặc nhiều thành phần phối trộn khác nhau này được sử dụng, các thành phần phối trộn thường được sử dụng với lượng tương tự với các lượng thông thường khi thành phần phối trộn này được sử dụng một mình. Cụ thể hơn, trong hỗn hợp, các hoạt chất thường được áp dụng với tỷ lệ áp dụng nằm trong khoảng từ tỷ lệ áp dụng một nửa đến tỷ lệ áp dụng đầy đủ được mô tả trên nhãn sản phẩm đối với việc sử dụng một mình hoạt chất. Các lượng này đã được liệt kê trong các tài liệu tham khảo như *The Pesticide Manual* and *The BioPesticide Manual*. Tỷ lệ khối lượng của các thành phần trộn khác nhau này (tổng số) với hợp chất có công thức 1 thường nằm trong khoảng từ 1:3000 đến 3000:1. Tốt hơn là tỷ lệ khối lượng nằm trong khoảng từ 1:300 đến 300:1 (ví dụ, tỷ lệ nằm trong khoảng từ 1:30 đến 30:1). Người có hiểu biết trong lĩnh vực kỹ thuật này có thể xác định một cách dễ dàng bằng cách thử nghiệm một cách đơn giản lượng hữu hiệu sinh học của hoạt chất cần để có phổ hoạt tính sinh học mong muốn. Điều hiển nhiên là việc đưa các thành phần bổ sung này vào có thể mở rộng phổ phòng trừ cỏ dại vượt trội hơn phổ phòng trừ của riêng hợp chất có công thức 1.

Trong các trường hợp nhất định, hỗn hợp của hợp chất theo sáng chế với khác hợp chất hoặc chất có hoạt tính sinh học (thuốc diệt cỏ cụ thể) (tức là các thành phần hoạt tính) có thể dẫn đến tạo ra hiệu quả cộng hợp lớn hơn (tức là hiệu quả hiệp đồng) đối với cỏ dại và/hoặc hiệu quả cộng hợp thấp hơn (tức là hiệu quả an toàn) đối với cây trồng hoặc các thực vật mong muốn khác. Vẫn luôn mong muốn làm giảm được số lượng các thành phần hoạt tính được giải phóng trong môi trường trong khi vẫn đảm bảo phòng trừ loài gây hại một cách hiệu quả. Cũng mong muốn có thể sử dụng lượng lớn hơn các thành phần hoạt tính để thu được hiệu quả phòng trừ cỏ dại cao hơn mà không gây tổn thương cây trồng quá mức. Khi hiệu quả hiệp đồng của các thành phần có tác dụng diệt cỏ xảy ra đối với cỏ dại ở các tỷ lệ dùng thu được mức phòng trừ cỏ dại thỏa mãn trong nông nghiệp, các hỗn hợp như vậy có thể có lợi trong việc làm giảm chi phí sản xuất vụ mùa và làm giảm gánh nặng về mặt môi trường. Khi làm an toàn các thành phần có tác dụng diệt cỏ xảy ra đối với cây trồng, các hỗn hợp như vậy có thể có lợi để làm tăng sự bảo vệ mùa màng bằng cách làm giảm tính cạnh tranh cỏ dại.

Lưu ý là hỗn hợp của hợp chất theo sáng chế với ít nhất một hoạt chất diệt cỏ khác. Lưu ý đặc biệt là hỗn hợp như vậy có hoạt chất diệt cỏ khác có vị trí tác động khác nhau từ hợp chất theo sáng chế. Trong các trường hợp nhất định, hỗn hợp với ít nhất một hoạt chất diệt cỏ khác có phổ phòng trừ tương tự nhưng vị trí tác động khác nhau sẽ đặc biệt có lợi để quản lý tính kháng. Do vậy, chế phẩm theo sáng chế có thể chứa thêm (với lượng hữu hiệu có tác dụng diệt cỏ) ít nhất một hoạt chất diệt cỏ bổ sung có phổ phòng trừ tương tự nhưng vị trí tác động khác nhau.

Hợp chất theo sáng chế cũng có thể được sử dụng kết hợp với chất an toàn diệt cỏ như allidochlor, benoxacor, cloquintocet-mexyl, cumyluron, cyometrinil, xyprosulfonamid, đaimuron, dichlormid, dicyclonon, dietolat, dimepiperat, fenchlorazole-ethyl, fenclorim, flurazole, fluxofenim, furilazole, isoxadifen-ethyl, mefenpyr-diethyl, mephenate, metoxyphenon naphthalic anhydrit (1,8-naphthalic anhydrit), oxabetrinil, *N*-(aminocarbonyl)-2-metylbenzensulfonamid, *N*-(aminocarbonyl)-2-flobenzensulfonamid, 1-brom-4-[(clometyl)sulfonyl]benzen

(BCS), 4-(đicloaxetyl)-1-oxa-4-azospiro[4,5]đecan (MON 4660), 2-(điclometyl)-2-metyl-1,3-đioxolan (MG 191), etyl 1,6-đihydro-1-(2-metoxypheyl)-6-oxo-2-pheyl-5-pyrimidinacarboxylat, 2-hydroxy-*N,N*-đimetyl-6-(triflometyl)pyridin-3-carboxamit, 3-oxo-1-xyclohexen-1-yl 1-(3,4-đimetylphenyl)-1,6-đihydro-6-oxo-2-pheyl-5-pyrimidinacarboxylat, 2,2-điclo-1-(2,2,5-trimetyl-3-oxazolidinyl)-etanon và 2-metoxy-*N*-[[4-[[[(metylaminocarbonyl)amino]phenyl]sulfonyl]-benzamit để làm tăng an toàn cho các cây trồng nhất định. Đáng lưu ý là 2-metoxy-*N*-[[4-[[[(metylaminocarbonyl)amino]phenyl]sulfonyl]-benzamit (còn có tên gọi khác là *N*-(2-metoxybenzoyl)-4-[(metylaminocarbonyl)amino] benzensulfonamit; CAS #129531-12-0) được phối trộn với một hợp chất bất kỳ trong số các hợp chất được xác định trong Bảng chỉ số A nêu trên. Lượng hữu hiệu có tác dụng giải độc của chất an toàn diệt cỏ có thể được phun đồng thời dưới dạng hợp chất theo sáng chế, hoặc được phun dưới dạng chất xử lý hạt. Vì vậy, theo một khía cạnh, sáng chế đề xuất hỗn hợp diệt cỏ chứa hợp chất theo sáng chế và lượng hữu hiệu có tác dụng giải độc của chất an toàn diệt cỏ. Việc xử lý hạt là đặc biệt hữu ích để phòng trừ cỏ dại một cách chọn lọc, bởi vì nó giới hạn về mặt sinh lý việc giải độc cho cây trồng. Vì vậy, một phương án đặc biệt hữu ích theo sáng chế là phương pháp phòng trừ một cách có chọn lọc sự sinh trưởng của thực vật không mong muốn ở cây trồng bao gồm bước cho vị trí của cây trồng tiếp xúc với lượng hữu hiệu có tác dụng diệt cỏ của hợp chất theo sáng chế trong đó hạt mà từ đó cây trồng sinh trưởng được xử lý bằng lượng hữu hiệu có tác dụng giải độc của chất an toàn. Lượng hữu hiệu có tác dụng giải độc của chất an toàn có thể được xác định một cách dễ dàng bởi người có hiểu biết trong lĩnh vực kỹ thuật này thông qua thử nghiệm đơn giản.

Lưu ý là chế phẩm chứa hợp chất theo sáng chế (với lượng hữu hiệu có tác dụng diệt cỏ), ít nhất một hoạt chất bổ sung được chọn từ nhóm bao gồm thuốc diệt cỏ khác và chất an toàn diệt cỏ (safener) (với lượng hữu hiệu), và ít nhất một thành phần được chọn từ nhóm bao gồm chất hoạt động bề mặt, chất pha loãng dạng rắn và chất pha loãng dạng lỏng.

Tốt hơn là, để phòng trừ tốt hơn thực vật không mong muốn (ví dụ, tỷ lệ sử dụng thấp hơn như từ hiệu quả hiệp đồng, phổ phòng trừ cỏ dại rộng hơn, hoặc mức an toàn cây trồng tốt hơn) hoặc để ngăn ngừa sự phát triển của cỏ dại có tính kháng là hỗn hợp của hợp chất theo sáng chế với một thuốc diệt cỏ khác. Bảng A1 liệt kê hỗn hợp cụ thể của thành phần (a) (tức là hợp chất cụ thể theo sáng chế) với thuốc diệt cỏ khác dưới dạng thành phần (b) minh họa cho hỗn hợp của chế phẩm và phương pháp theo sáng chế. Hợp chất 17 trong cột Thành phần (a) được xác định trong Bảng chỉ số A. Cột thứ hai của Bảng A1 liệt kê hợp chất (ví dụ, “2,4-D” trong dòng thứ nhất) với Thành phần (b) cụ thể. Các cột thứ ba, thứ tư, thứ năm của Bảng A1 liệt kê khoảng tỷ lệ khối lượng cho các tỷ lệ mà tại đó hợp chất chứa thành phần (a) thường được phun lên cây trồng sinh trưởng trên cánh đồng so với thành phần (b) (tức là (a):(b)). Do vậy, ví dụ, dòng thứ nhất của Bảng A1 thể hiện một cách rõ ràng tổ hợp của thành phần (a) (tức là Hợp chất 17 trong Bảng chỉ số A) với 2,4-D thường được phun với tỷ lệ khối lượng nằm trong khoảng từ 1:192 đến 6:1. Các dòng còn lại của Bảng A1 được cấu trúc theo cách tương tự.

Bảng A1

Thành phần (a) (Hợp chất #)	Thành phần (b)	Tỷ lệ khối lượng điển hình	Tỷ lệ khối lượng điển hình hơn	Tỷ lệ khối lượng điển hình nhất
1	2,4-D	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	Acetochlor	1:768 – 2:1	1:256 – 1:2	1:96 – 1:11
1	Acifluorfen	1:96 – 12:1	1:32 – 4:1	1:12 – 1:2
1	Aclonifen	1:857 – 2:1	1:285 – 1:3	1:107 – 1:12
1	Alachlor	1:768 – 2:1	1:256 – 1:2	1:96 – 1:11
1	Ametryn	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Amicarbazone	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	Amidosulfuron	1:6 – 168:1	1:2 – 56:1	1:1 – 11:1
1	Aminocyclopyrachlor	1:48 – 24:1	1:16 – 8:1	1:6 – 2:1
1	Aminopyralid	1:20 – 56:1	1:6 – 19:1	1:2 – 4:1
1	Amitrole	1:768 – 2:1	1:256 – 1:2	1:96 – 1:11
1	Anilofos	1:96 – 12:1	1:32 – 4:1	1:12 – 1:2
1	Asulam	1:960 – 2:1	1:320 – 1:3	1:120 – 1:14
1	Atrazine	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	Azimsulfuron	1:6 – 168:1	1:2 – 56:1	1:1 – 11:1
1	Beflubutamid	1:342 – 4:1	1:114 – 2:1	1:42 – 1:5
1	Benfuresate	1:617 – 2:1	1:205 – 1:2	1:77 – 1:9
1	Bensulfuron-methyl	1:25 – 45:1	1:8 – 15:1	1:3 – 3:1
1	Bentazone	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3

Thành phần (a) (Hợp chất #)	Thành phần (b)	Tỷ lệ khối lượng điển hình	Tỷ lệ khối lượng điển hình hơn	Tỷ lệ khối lượng điển hình nhất
1	Benzobicyclon	1:85 – 14:1	1:28 – 5:1	1:10 – 1:2
1	Benzofenap	1:257 – 5:1	1:85 – 2:1	1:32 – 1:4
1	Bicyclopypyrone	1:42 – 27:1	1:14 – 9:1	1:5 – 2:1
1	Bifenox	1:257 – 5:1	1:85 – 2:1	1:32 – 1:4
1	Bispyribac-natri	1:10 – 112:1	1:3 – 38:1	1:1 – 7:1
1	Bromacil	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Bromobutide	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Bromoxynil	1:96 – 12:1	1:32 – 4:1	1:12 – 1:2
1	Butachlor	1:768 – 2:1	1:256 – 1:2	1:96 – 1:11
1	Butafenacil	1:42 – 27:1	1:14 – 9:1	1:5 – 2:1
1	Butylate	1:1542 – 1:2	1:514 – 1:5	1:192 – 1:22
1	Cafenstrole	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	Carfentrazone-ethyl	1:128 – 9:1	1:42 – 3:1	1:16 – 1:2
1	Chlorimuron-ethyl	1:8 – 135:1	1:2 – 45:1	1:1 – 9:1
1	Chlorotoluron	1:768 – 2:1	1:256 – 1:2	1:96 – 1:11
1	Chlorsulfuron	1:6 – 168:1	1:2 – 56:1	1:1 – 11:1
1	Cinosulfuron	1:17 – 68:1	1:5 – 23:1	1:2 – 5:1
1	Cinidon-ethyl	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Cinmethylin	1:34 – 34:1	1:11 – 12:1	1:4 – 3:1
1	Clacyfos	1:34 – 34:1	1:11 – 12:1	1:4 – 3:1
1	Clethodim	1:48 – 24:1	1:16 – 8:1	1:6 – 2:1
1	Clodinafop-propargyl	1:20 – 56:1	1:6 – 19:1	1:2 – 4:1
1	Clomazone	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Clomeprop	1:171 – 7:1	1:57 – 3:1	1:21 – 1:3
1	Clopyralid	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	Cloransulam-methyl	1:12 – 96:1	1:4 – 32:1	1:1 – 6:1
1	Cumyluron	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Cyanazine	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Cyclopyrimorate	1:17 – 68:1	1:5 – 23:1	1:2 – 5:1
1	Cyclosulfamuron	1:17 – 68:1	1:5 – 23:1	1:2 – 5:1
1	Cycloxydim	1:96 – 12:1	1:32 – 4:1	1:12 – 1:2
1	Cyhalofop	1:25 – 45:1	1:8 – 15:1	1:3 – 3:1
1	Daimuron	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	Desmedipham	1:322 – 4:1	1:107 – 2:1	1:40 – 1:5
1	Dicamba	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	Dichlobenil	1:1371 – 1:2	1:457 – 1:4	1:171 – 1:20
1	Dichlorprop	1:925 – 2:1	1:308 – 1:3	1:115 – 1:13
1	Diclofop-methyl	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Diclosulam	1:10 – 112:1	1:3 – 38:1	1:1 – 7:1
1	Difenzoquat	1:288 – 4:1	1:96 – 2:1	1:36 – 1:4
1	Diflufenican	1:857 – 2:1	1:285 – 1:3	1:107 – 1:12
1	Diflufenzopyr	1:12 – 96:1	1:4 – 32:1	1:1 – 6:1
1	Dimethachlor	1:768 – 2:1	1:256 – 1:2	1:96 – 1:11
1	Dimethametryn	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	Dimethenamid-P	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Dithiopyr	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	Diuron	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	EPTC	1:768 – 2:1	1:256 – 1:2	1:96 – 1:11

Thành phần (a) (Hợp chất #)	Thành phần (b)	Tỷ lệ khối lượng điển hình	Tỷ lệ khối lượng điển hình hơn	Tỷ lệ khối lượng điển hình nhất
1	Esprocarb	1:1371 – 1:2	1:457 – 1:4	1:171 – 1:20
1	Ethalfuralin	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Ethametsulfuron-methyl	1:17 – 68:1	1:5 – 23:1	1:2 – 5:1
1	Ethoxyfen	1:8 – 135:1	1:2 – 45:1	1:1 – 9:1
1	Ethoxysulfuron	1:20 – 56:1	1:6 – 19:1	1:2 – 4:1
1	Etobenzanid	1:257 – 5:1	1:85 – 2:1	1:32 – 1:4
1	Fenoxaprop-ethyl	1:120 – 10:1	1:40 – 4:1	1:15 – 1:2
1	Fenoxasulfone	1:85 – 14:1	1:28 – 5:1	1:10 – 1:2
1	Fenquinotrione	1:17 – 68:1	1:5 – 23:1	1:2 – 5:1
1	Fentrazamide	1:17 – 68:1	1:5 – 23:1	1:2 – 5:1
1	Flazasulfuron	1:17 – 68:1	1:5 – 23:1	1:2 – 5:1
1	Florasulam	1:2 – 420:1	1:1 – 140:1	2:1 – 27:1
1	Fluazifop-butyl	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	Flucarbazone	1:8 – 135:1	1:2 – 45:1	1:1 – 9:1
1	Flucetosulfuron	1:8 – 135:1	1:2 – 45:1	1:1 – 9:1
1	Flufenacet	1:257 – 5:1	1:85 – 2:1	1:32 – 1:4
1	Flumetsulam	1:24 – 48:1	1:8 – 16:1	1:3 – 3:1
1	Flumiclorac-pentyl	1:10 – 112:1	1:3 – 38:1	1:1 – 7:1
1	Flumioxazin	1:25 – 45:1	1:8 – 15:1	1:3 – 3:1
1	Fluometuron	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Flupyrsulfuron-methyl	1:3 – 336:1	1:1 – 112:1	2:1 – 21:1
1	Fluridone	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Fluroxypyr	1:96 – 12:1	1:32 – 4:1	1:12 – 1:2
1	Flurtamone	1:857 – 2:1	1:285 – 1:3	1:107 – 1:12
1	Fluthiacet-methyl	1:48 – 42:1	1:16 – 14:1	1:3 – 3:1
1	Fomesafen	1:96 – 12:1	1:32 – 4:1	1:12 – 1:2
1	Foramsulfuron	1:13 – 84:1	1:4 – 28:1	1:1 – 6:1
1	Glufosinate	1:288 – 4:1	1:96 – 2:1	1:36 – 1:4
1	Glyphosate	1:288 – 4:1	1:96 – 2:1	1:36 – 1:4
1	Halauxifen	1:20 – 56:1	1:6 – 19:1	1:2 – 4:1
1	Halauxifen-methyl	1:20 – 56:1	1:6 – 19:1	1:2 – 4:1
1	Halosulfuron-methyl	1:17 – 68:1	1:5 – 23:1	1:2 – 5:1
1	Haloxypyr-methyl	1:34 – 34:1	1:11 – 12:1	1:4 – 3:1
1	Hexazinone	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	Imazamox	1:13 – 84:1	1:4 – 28:1	1:1 – 6:1
1	Imazapic	1:20 – 56:1	1:6 – 19:1	1:2 – 4:1
1	Imazapyr	1:85 – 14:1	1:28 – 5:1	1:10 – 1:2
1	Imazaquin	1:34 – 34:1	1:11 – 12:1	1:4 – 3:1
1	Imazethabenz-methyl	1:171 – 7:1	1:57 – 3:1	1:21 – 1:3
1	Imazethapyr	1:24 – 48:1	1:8 – 16:1	1:3 – 3:1
1	Imazosulfuron	1:27 – 42:1	1:9 – 14:1	1:3 – 3:1
1	Indanofan	1:342 – 4:1	1:114 – 2:1	1:42 – 1:5
1	Indaziflam	1:25 – 45:1	1:8 – 15:1	1:3 – 3:1
1	Iodosulfuron-methyl	1:3 – 336:1	1:1 – 112:1	2:1 – 21:1
1	Ioxynil	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	Ipfencarbazone	1:85 – 14:1	1:28 – 5:1	1:10 – 1:2
1	Isoproturon	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Isoxaben	1:288 – 4:1	1:96 – 2:1	1:36 – 1:4

Thành phần (a) (Hợp chất #)	Thành phần (b)	Tỷ lệ khối lượng điển hình	Tỷ lệ khối lượng điển hình hơn	Tỷ lệ khối lượng điển hình nhất
1	Isoxaflutole	1:60 – 20:1	1:20 – 7:1	1:7 – 2:1
1	Lactofen	1:42 – 27:1	1:14 – 9:1	1:5 – 2:1
1	Lenacil	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Linuron	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	MCPA	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	MCPB	1:288 – 4:1	1:96 – 2:1	1:36 – 1:4
1	Mecoprop	1:768 – 2:1	1:256 – 1:2	1:96 – 1:11
1	Mefenacet	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Mefluidide	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	Mesosulfuron-methyl	1:5 – 224:1	1:1 – 75:1	1:1 – 14:1
1	Mesotrione	1:42 – 27:1	1:14 – 9:1	1:5 – 2:1
1	Metamifop	1:42 – 27:1	1:14 – 9:1	1:5 – 2:1
1	Metazachlor	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Metazosulfuron	1:25 – 45:1	1:8 – 15:1	1:3 – 3:1
1	Methabenzthiazuron	1:768 – 2:1	1:256 – 1:2	1:96 – 1:11
1	Metolachlor	1:768 – 2:1	1:256 – 1:2	1:96 – 1:11
1	Metosulam	1:8 – 135:1	1:2 – 45:1	1:1 – 9:1
1	Metribuzin	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	Metsulfuron-methyl	1:2 – 560:1	1:1 – 187:1	3:1 – 35:1
1	Molinate	1:1028 – 2:1	1:342 – 1:3	1:128 – 1:15
1	Napropamide	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Napropamide-M	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	Naptalam	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	Nicosulfuron	1:12 – 96:1	1:4 – 32:1	1:1 – 6:1
1	Norflurazon	1:1152 – 1:1	1:384 – 1:3	1:144 – 1:16
1	Orbencarb	1:1371 – 1:2	1:457 – 1:4	1:171 – 1:20
1	Orthosulfamuron	1:20 – 56:1	1:6 – 19:1	1:2 – 4:1
1	Oryzalin	1:514 – 3:1	1:171 – 1:2	1:64 – 1:8
1	Oxadiargyl	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Oxadiazon	1:548 – 3:1	1:182 – 1:2	1:68 – 1:8
1	Oxasulfuron	1:27 – 42:1	1:9 – 14:1	1:3 – 3:1
1	Oxaziclomefone	1:42 – 27:1	1:14 – 9:1	1:5 – 2:1
1	Oxyfluorfen	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Paraquat	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	Pendimethalin	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Penoxsulam	1:10 – 112:1	1:3 – 38:1	1:1 – 7:1
1	Pentoxamid	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Pentoxazone	1:102 – 12:1	1:34 – 4:1	1:12 – 1:2
1	Phenmedipham	1:102 – 12:1	1:34 – 4:1	1:12 – 1:2
1	Picloram	1:96 – 12:1	1:32 – 4:1	1:12 – 1:2
1	Picolinafen	1:34 – 34:1	1:11 – 12:1	1:4 – 3:1
1	Pinoxaden	1:25 – 45:1	1:8 – 15:1	1:3 – 3:1
1	Pretilachlor	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	Primisulfuron-methyl	1:8 – 135:1	1:2 – 45:1	1:1 – 9:1
1	Prodiamine	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Profoxydim	1:42 – 27:1	1:14 – 9:1	1:5 – 2:1
1	Prometryn	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Propachlor	1:1152 – 1:1	1:384 – 1:3	1:144 – 1:16

Thành phần (a) (Hợp chất #)	Thành phần (b)	Tỷ lệ khối lượng điển hình	Tỷ lệ khối lượng điển hình hơn	Tỷ lệ khối lượng điển hình nhất
1	Propanil	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Propaquizafop	1:48 – 24:1	1:16 – 8:1	1:6 – 2:1
1	Propoxycarbazone	1:17 – 68:1	1:5 – 23:1	1:2 – 5:1
1	Propyrisulfuron	1:17 – 68:1	1:5 – 23:1	1:2 – 5:1
1	Propyzamide	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Prosulfocarb	1:1200 – 1:2	1:400 – 1:4	1:150 – 1:17
1	Prosulfuron	1:6 – 168:1	1:2 – 56:1	1:1 – 11:1
1	Pyraclonil	1:42 – 27:1	1:14 – 9:1	1:5 – 2:1
1	Pyraflufen-ethyl	1:5 – 224:1	1:1 – 75:1	1:1 – 14:1
1	Pyrasulfotole	1:13 – 84:1	1:4 – 28:1	1:1 – 6:1
1	Pyrazolynate	1:857 – 2:1	1:285 – 1:3	1:107 – 1:12
1	Pyrazosulfuron-ethyl	1:10 – 112:1	1:3 – 38:1	1:1 – 7:1
1	Pyrazoxyfen	1:5 – 224:1	1:1 – 75:1	1:1 – 14:1
1	Pyribenzoxim	1:10 – 112:1	1:3 – 38:1	1:1 – 7:1
1	Pyributicarb	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Pyridate	1:288 – 4:1	1:96 – 2:1	1:36 – 1:4
1	Pyriftalid	1:10 – 112:1	1:3 – 38:1	1:1 – 7:1
1	Pyriminobac-methyl	1:20 – 56:1	1:6 – 19:1	1:2 – 4:1
1	Pyrimisulfan	1:17 – 68:1	1:5 – 23:1	1:2 – 5:1
1	Pyrithiobac	1:24 – 48:1	1:8 – 16:1	1:3 – 3:1
1	Pyroxasulfone	1:85 – 14:1	1:28 – 5:1	1:10 – 1:2
1	Pyroxsulam	1:5 – 224:1	1:1 – 75:1	1:1 – 14:1
1	Quinclorac	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	Quizalofop-ethyl	1:42 – 27:1	1:14 – 9:1	1:5 – 2:1
1	Rimsulfuron	1:13 – 84:1	1:4 – 28:1	1:1 – 6:1
1	Saflufenacil	1:25 – 45:1	1:8 – 15:1	1:3 – 3:1
1	Sethoxydim	1:96 – 12:1	1:32 – 4:1	1:12 – 1:2
1	Simazine	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Sulcotrione	1:120 – 10:1	1:40 – 4:1	1:15 – 1:2
1	Sulfentrazone	1:147 – 8:1	1:49 – 3:1	1:18 – 1:3
1	Sulfometuron-methyl	1:34 – 34:1	1:11 – 12:1	1:4 – 3:1
1	Sulfosulfuron	1:8 – 135:1	1:2 – 45:1	1:1 – 9:1
1	Tebuthiuron	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Tefuryltrione	1:42 – 27:1	1:14 – 9:1	1:5 – 2:1
1	Tembotrione	1:31 – 37:1	1:10 – 13:1	1:3 – 3:1
1	Tepraloxym	1:25 – 45:1	1:8 – 15:1	1:3 – 3:1
1	Terbacil	1:288 – 4:1	1:96 – 2:1	1:36 – 1:4
1	Terbuthylazine	1:857 – 2:1	1:285 – 1:3	1:107 – 1:12
1	Terbutryn	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	Thenylchlor	1:85 – 14:1	1:28 – 5:1	1:10 – 1:2
1	Thiazopyr	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Thiencarbazone	1:3 – 336:1	1:1 – 112:1	2:1 – 21:1
1	Thifensulfuron-methyl	1:5 – 224:1	1:1 – 75:1	1:1 – 14:1
1	Tiafenacil	1:17 – 68:1	1:5 – 23:1	1:2 – 5:1
1	Thiobencarb	1:768 – 2:1	1:256 – 1:2	1:96 – 1:11
1	Topramezone	1:6 – 168:1	1:2 – 56:1	1:1 – 11:1
1	Tralkoxydim	1:68 – 17:1	1:22 – 6:1	1:8 – 2:1
1	Triallate	1:768 – 2:1	1:256 – 1:2	1:96 – 1:11

Thành phần (a) (Hợp chất #)	Thành phần (b)	Tỷ lệ khối lượng điển hình	Tỷ lệ khối lượng điển hình hơn	Tỷ lệ khối lượng điển hình nhất
1	Triasulfuron	1:5 – 224:1	1:1 – 75:1	1:1 – 14:1
1	Triaziflam	1:171 – 7:1	1:57 – 3:1	1:21 – 1:3
1	Tribenuron-methyl	1:3 – 336:1	1:1 – 112:1	2:1 – 21:1
1	Triclopyr	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	Trifloxysulfuron	1:2 – 420:1	1:1 – 140:1	2:1 – 27:1
1	Trifluralin	1:288 – 4:1	1:96 – 2:1	1:36 – 1:4
1	Triflusulfuron-methyl	1:17 – 68:1	1:5 – 23:1	1:2 – 5:1
1	Tritosulfuron	1:13 – 84:1	1:4 – 28:1	1:1 – 6:1

Bảng A2 được xây dựng giống như Bảng A1 nêu trên chỉ khác là các mục nằm dưới đề mục của cột “Thành phần (a)” được thay thế bằng mục cột Thành phần (a) tương ứng được thể hiện dưới đây. Hợp chất 1 trong cột Thành phần (a) được xác định trong Bảng chỉ số A. Do vậy, ví dụ, trong Bảng A2 các mục nằm dưới đề mục của cột “Thành phần (a)” đều để chỉ “Hợp chất 2” (tức là Hợp chất 1 được xác định trong Bảng chỉ số A), và dòng thứ nhất của các đề mục của cột trong Bảng A2 dưới đây đề cập một cách rõ ràng hỗn hợp chứa Hợp chất 2 với 2,4-D. Bảng A3 được xây dựng theo cách tương tự.

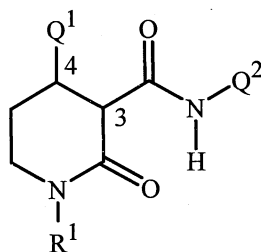
Bảng số Mục của cột Thành phần (a) Bảng số Mục của cột Thành phần (a)

<u>Bảng số</u>	<u>Mục của cột Thành phần (a)</u>	<u>Bảng số</u>	<u>Mục của cột Thành phần (a)</u>
A2	Hợp chất 2	A33	Hợp chất 33
A3	Hợp chất 3	A34	Hợp chất 34
A4	Hợp chất 4	A35	Hợp chất 35
A5	Hợp chất 5	A36	Hợp chất 36
A6	Hợp chất 6	A37	Hợp chất 37
A7	Hợp chất 7	A38	Hợp chất 38
A8	Hợp chất 8	A39	Hợp chất 39
A9	Hợp chất 9	A40	Hợp chất 40
A10	Hợp chất 10	A41	Hợp chất 41
A11	Hợp chất 11	A42	Hợp chất 42
A12	Hợp chất 12	A43	Hợp chất 43
A13	Hợp chất 13	A44	Hợp chất 44
A14	Hợp chất 14	A45	Hợp chất 45
A15	Hợp chất 15	A46	Hợp chất 46
A16	Hợp chất 16	A47	Hợp chất 47
A17	Hợp chất 17	A48	Hợp chất 48
A18	Hợp chất 18	A49	Hợp chất 49
A19	Hợp chất 19	A50	Hợp chất 50
A20	Hợp chất 20	A51	Hợp chất 51
A21	Hợp chất 21	A52	Hợp chất 52
A22	Hợp chất 22	A53	Hợp chất 53
A23	Hợp chất 23	A54	Hợp chất 54
A24	Hợp chất 24	A55	Hợp chất 55
A25	Hợp chất 25	A56	Hợp chất 56
A26	Hợp chất 26	A57	Hợp chất 57
A27	Hợp chất 27	A58	Hợp chất 58
A28	Hợp chất 28	A59	Hợp chất 59
A29	Hợp chất 29	A60	Hợp chất 60
A30	Hợp chất 30	A61	Hợp chất 61
A31	Hợp chất 31	A62	Hợp chất 62
A32	Hợp chất 32	A63	Hợp chất 63

Tốt hơn là, để phòng trừ tốt hơn thực vật không mong muốn (ví dụ, tỷ lệ sử dụng thấp hơn như từ hiệu quả hiệp đồng, phổ phòng trừ cỏ dại rộng hơn, hoặc mức an toàn cây trồng tốt hơn) hoặc để ngăn ngừa sự phát triển cỏ dại có tính kháng là hỗn hợp của hợp chất theo sáng chế với thuốc diệt cỏ được chọn từ nhóm bao gồm clorimuron-ethyl, nicosulfuron, mesotrion, thifensulfuron-methyl, flupyrsulfuron-methyl, tribenuron, pyroxasulfon, pinoxaden, tembotrione, pyroxsulam, metolaclo và *S*-metolaclo.

Các thử nghiệm chứng minh hiệu quả phòng trừ của hợp chất theo sáng chế đối với các mầm bệnh cụ thể. Tuy nhiên, việc bảo vệ bằng cách phòng trừ mầm bệnh đạt được bằng các hợp chất không bị giới hạn ở các loài này. Xem Bảng chỉ số A về phần mô tả hợp chất. Các từ viết tắt được sử dụng trong Bảng chỉ số là như sau: Ph là chữ viết tắt cho phenyl, PMB là chữ viết tắt cho *p*-methoxybenzyl và “Cmpd. No” là chữ viết tắt cho Hợp chất số, “Ex.” là chữ viết tắt cho “Ví dụ và tiếp đó là số chỉ hợp chất ví dụ được điều chế.

Bảng chỉ số A (1)



Hợp chất No.	Q ¹	Q ²	R ¹	Điểm nóng chảy (°C)	MS
1	Ph(3,4-đi-F)	Ph(2-F)	H	137–131	
2	Ph	Ph(2-CF ₃)	H	140–143	
3	Ph	Ph(2-F)	H	143–147	
4	Ph(4-F)	Ph(2-CF ₃)	H	155–158	
5	Ph(4-F)	Ph(2-F)	H	158–161	
6	Ph(3,4-đi-F)	Ph(2-CF ₃)	H	142–145	
7	Ph(2-CF ₃)	Ph(2-CF ₃)	H	195–196	
8	Ph(2-CF ₃)	Ph(2,3-đi-F)	H	178–180	
9 (Ex. 1)	Ph(3-CF ₃)	Ph(2,3-đi-F)	H	109–111*	
10	Ph(3-CF ₃)	Ph(2-CF ₃)	H	292–295	
11	Ph(4-CF ₃)	Ph(2,3-đi-F)	H	180–182	
12	Ph(4-CF ₃)	Ph(2-CF ₃)	H	204–207	
13 (Ex. 3)	Ph(4-CF ₃)	Ph(2-Cl)	H	108–112*	
14 (Ex. 2)	Ph(4-CF ₃)	Ph(2-F)	H	103–107*	
15	Ph(4-CF ₃)	Ph(2-Cl,3-F)	H	203–207	
16	Ph(3-CF ₃)	Ph(3-Cl,2-F)	H	77–79	
17	Ph(3-CF ₃)	Ph(2-Cl)	H	70–77	
19	Ph(3-CF ₃)	Ph(2-Cl,3-F)	H	68–70	
20 (3 <i>S</i> ,4 <i>R</i>)	Ph(3-CF ₃)	Ph(2,3-đi-F)	H	133–137	
21 (3 <i>R</i> ,4 <i>S</i>)	Ph(3-CF ₃)	Ph(2,3-đi-F)	H	136–139	
22 (3 <i>R</i> ,4 <i>S</i>)	Ph(4-CF ₃)	Ph(2,3-đi-F)	H		399(M+1)
23 (3 <i>S</i> ,4 <i>R</i>)	Ph(4-CF ₃)	Ph(2,3-đi-F)	H	76–79	
24 (3 <i>S</i> ,4 <i>R</i>)	Ph(3-CF ₃)	Ph(3-Cl,2-F)	H	74–77	

Hợp chất No.	Q ¹	Q ²	R ¹	Điểm nóng chảy (°C)	MS
25 (3 <i>R</i> ,4 <i>S</i>)	Ph(3-CF ₃)	Ph(3-Cl,2-F)	H	81–84	
26	Ph(3-CF ₃)	Ph(2-Me,3-F)	H	189–192	
27	Ph(3-CF ₃)	Ph(2,4-đi-F)	H	169–171	
28	Ph(3-CF ₃)	Ph(2,3,4-tri-F)	H	66–68	
29 (3 <i>S</i> ,4 <i>R</i>)	Ph(3-CF ₃)	Ph(2,3,4-tri-F)	H	183–187	
30 (3 <i>R</i> ,4 <i>S</i>)	Ph(3-CF ₃)	Ph(2,3,4-tri-F)	H	183–186	
31	Ph(3-CF ₃)	Ph(2,3-đi-Cl)	H	170–172	
32	Ph(3-CF ₃)	Ph(2-S(O) ₂ Me)	H	209–211	
33	Ph(3-Cl)	Ph(2-CF ₃)	H	167–169	
34	Ph(3-Cl)	Ph(2-F)	H	88–90	
35	Ph	Ph(2,3-đi-F)	H	190–192	
36	Ph(3-Cl)	Ph(2,3-đi-F)	H	100–102	
37	Ph(3-OCF ₃)	Ph(2-F)	H		397(M+1)
38	Ph(3-OCF ₃)	Ph(2-CF ₃)	H	141–143	
39	Ph(3-OCF ₃)	Ph(2,3-đi-F)	H	89–91	
40 (3 <i>R</i> ,4 <i>S</i>)	Ph(3-OCF ₃)	Ph(2,3-đi-F)	H		415(M+1)
41 (3 <i>S</i> ,4 <i>R</i>)	Ph(3-OCF ₃)	Ph(2,3-đi-F)	H		415(M+1)
42 (3 <i>R</i> ,4 <i>S</i>)	Ph(3-Cl)	Ph(2,3-đi-F)	H	103–105	
43 (3 <i>S</i> ,4 <i>R</i>)	Ph(3-Cl)	Ph(2,3-đi-F)	H	91–93	
44	Ph(3-OCHF ₂)	Ph(2,3,4-tri-F)	H	150–154	
45	Ph(3-OCHF ₂)	Ph(2-F)	H	196–200	
46	Ph(3-OCHF ₂)	Ph(2,3-đi-F)	H	173–177	
47	Ph(3-CHF ₂)	Ph(2,3,4-tri-F)	H	144–147	
48	Ph(3-CHF ₂)	Ph(2-F)	H	169–172	
49	Ph(3-CHF ₂)	Ph(2,3-đi-F)	H	134–137	
50 (3 <i>S</i> ,4 <i>S</i>)	Ph(4-F)	Ph(2-CF ₃)	<i>c</i> -Pr		419(M–1)
51 (3 <i>S</i> ,4 <i>S</i>)	Ph(4-F)	Ph(2-CF ₃)	-CH ₂ -Ph		471(M+1)
52 (3 <i>S</i> ,4 <i>S</i>)	Ph(4-F)	Ph(2,3-đi-F)	Me	128–131	
53 (3 <i>S</i> ,4 <i>S</i>) (Ex. 4)	Ph(4-F)	Ph(2-CF ₃)	Me	72–74	
54 (3 <i>R</i> ,4 <i>S</i>)	Ph(4-CF ₃)	Ph(2,3,4-tri-F)	H	85–88	
55 (3 <i>S</i> ,4 <i>R</i>)	Ph(4-CF ₃)	Ph(2,3,4-tri-F)	H	85–88	
56 (3 <i>S</i> ,4 <i>S</i>)	Ph(4-F)	Ph(2-CF ₃)	PMB		501(M+1)
57 (3 <i>R</i> ,4 <i>S</i>) (Ex. 5)	Ph(4-F)	Ph(2-CF ₃)	H	81–84	
58 (3 <i>S</i> ,4 <i>R</i>)	Ph(3-OCF ₃)	Ph(3-Cl,2-F)	H		431(M+1)
59 (3 <i>R</i> ,4 <i>S</i>)	Ph(3-OCF ₃)	Ph(3-Cl,2-F)	H	71–74	
60 (3 <i>S</i> ,4 <i>R</i>)	Ph(3-OCF ₃)	Ph(2,3,4-tri-F)	H		433(M+1)
61 (3 <i>R</i> ,4 <i>S</i>)	Ph(3-OCF ₃)	Ph(2,3,4-tri-F)	H	128–131	
62 (3 <i>S</i> ,4 <i>R</i>)	Ph(4-CF ₃)	Ph(3-Cl,2-F)	H	86–89	
63 (3 <i>R</i> ,4 <i>S</i>)	Ph(4-CF ₃)	Ph(3-Cl,2-F)	H	123–127	

(1) Phần tử thế ở các vị trí 3 và 4 của vòng piperidinon, tức là $C(=O)N(Q^2)(H)$ và Q^1 , lần lượt chiếm ưu thế trong cấu hình trans.

* Xem Ví dụ tổng hợp về dữ liệu 1H NMR.

Ví dụ sinh học của sáng chế

Thử nghiệm A

Hạt của loài thực vật được chọn từ cỏ lồng vực (*Echinochloa crus-galli*), địa phu tử (*Địa phu tử scoparia*), cỏ phấn hương (cỏ phấn hương thông thường, *Ambrosia elatior*), cỏ mạch đen, Italia (cỏ mạch đen Italia, *Lolium multiflorum*), cỏ lồng vực, lớn (cỏ lồng vực lớn *Digitaria sanguinalis*), cỏ đuôi cáo khổng lồ (*Setaria faberii*), cây bìm bìm hoa tía (*Ipomoea* spp.), cây đèn ngược (*Amaranthus retroflexus*), cây cối xay (*Abutilon theophrasti*), lúa mì (*Triticum aestivum*), và ngũ cốc (*Zea mays*) được trồng vào hỗn hợp đất mùn và cát và được xử lý ở giai đoạn trước nảy mầm bằng cách phun trực tiếp vào đất sử dụng các hóa chất thử nghiệm được điều chế trong hỗn hợp dung môi không gây độc thực vật mà có chứa chất hoạt động bề mặt.

Đồng thời, thực vật được chọn từ các loài cây trồng và cỏ dại này và cả cỏ đen (*Alopecurus myosuroides*), và cây đông sữa (cây vắn vương, *Cây đông sữa aparine*) được trồng trong chậu chứa cùng hỗn hợp đất mùn và cát và được xử lý ở giai đoạn sau nảy mầm bằng cách phun các hóa chất thử nghiệm được điều chế theo cùng cách. Các thực vật có độ cao nằm trong khoảng từ 2 đến 10 cm và ở giai đoạn một lá đến hai lá để xử lý ở giai đoạn sau nảy mầm. Thực vật đã được xử lý và thực vật kiểm chứng không được xử lý được duy trì trong nhà kính trong khoảng 10 ngày, sau thời gian đó tất cả các thực vật đã xử lý được so sánh với mẫu kiểm chứng không được xử lý và được đánh giá bằng trực quan về mức độ tổn thương. Tỷ lệ đáp ứng của thực vật, được tóm tắt trong Bảng A, được tính theo thang đo từ 0 đến 100 trong đó 0 là không có tác dụng diệt cỏ và 100 là phòng trừ cỏ dại hoàn toàn. Nét gạch ngang (—) nghĩa là không có kết quả thử nghiệm.

Bảng A	Các hợp chất													
500g hoạt chất/ha	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
Hậu nảy mầm														
Cỏ lồng vực	50	0	0	20	30	50	0	0	90	90	90	60	90	90
Cỏ mật	-	-	-	-	-	-	0	0	-	-	50	0	0	0
Cây ngô	0	0	0	0	0	0	0	0	80	0	40	0	0	0
Cỏ mần trâu lớn	70	10	0	70	0	80	-	-	90	80	-	-	-	-
Cỏ đuôi cáo khổng lồ	0	0	0	0	0	70	0	0	90	70	90	60	90	90
Cây đồng sữa	-	-	-	-	-	-	0	0	-	-	60	0	0	0
Địa phu tử	-	-	-	-	-	-	0	0	-	-	50	0	0	0
Bìm bìm hoa tím	0	0	0	0	0	0	-	-	40	0	-	-	-	-
Cỏ tam khôi	0	0	0	0	0	30	0	0	0	0	30	0	0	0
Cỏ phấn hương	-	-	-	-	-	-	0	0	-	-	20	0	0	0
Cỏ mạch đen Ý	-	-	-	-	-	-	0	0	-	-	30	0	0	0
Rau tàu bay	0	0	0	0	0	0	-	-	0	0	-	-	-	-
Lúa mì	0	0	0	0	0	0	0	0	40	0	50	0	0	0

Bảng A	Các hợp chất													
500g hoạt chất/ha	15	16	17	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29
Hậu nảy mầm														
Cỏ lồng vực	70	90	80	80	80	90	90	70	80	80	80	60	80	30
Cỏ mật	50	60	30	50	20	80	60	10	30	80	40	0	20	0
Cây ngô	0	30	0	50	20	80	60	20	30	70	40	0	60	0
Cỏ mần trâu lớn	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Cỏ đuôi cáo khổng lồ	80	80	80	80	80	80	90	60	80	80	90	70	90	0
Cây đồng sữa	70	20	20	20	0	20	70	20	0	30	0	0	0	0
Địa phu tử	60	20	20	20	0	0	60	50	0	0	0	0	0	0
Bìm bìm hoa tím	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Cỏ tam khôi	0	0	0	0	0	20	50	0	0	0	0	0	0	0
Cỏ phấn hương	40	0	0	0	0	0	50	0	0	0	0	0	0	0
Cỏ mạch đen Ý	0	20	20	20	20	40	70	20	20	40	20	0	0	0
Rau tàu bay	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Lúa mì	0	30	20	30	0	60	60	20	30	60	20	0	20	0

Bảng A	Các hợp chất													
500g hoạt chất/ha	30	31	32	33	34	36	37	38	39	42	43	44	45	46
Hậu nảy mầm														
Cỏ lồng vực	80	80	70	90	90	90	80	70	80	90	0	80	60	90
Cỏ mật	80	40	0	0	0	60	0	0	60	70	0	20	20	40
Cây ngô	70	0	30	0	0	0	0	0	50	60	0	0	0	50

Cỏ mần trâu lớn	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Cỏ đuôi cáo không lồ	80	80	40	90	80	90	70	60	90	90	0	80	50	80
Cây đồng sữa	0	0	0	0	0	30	0	0	0	10	0	20	0	0
Địa phu tử	0	0	20	0	0	0	0	0	0	30	0	0	0	0
Bìm bìm hoa tím	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Cỏ tam khôi	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Cỏ phấn hương	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Cỏ mạch đen Ý	20	0	20	0	0	20	20	0	50	50	0	20	0	0
Rau tàu bay	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Lúa mì	60	0	0	0	0	0	0	0	30	60	0	0	0	50

Bảng A

Các hợp chất

500g hoạt chất/ha	47	48	49	50	51	52	53	55	57
Hậu này mầm									
Cỏ lồng vực	90	80	90	0	0	90	0	0	70
Cỏ mặt	0	0	50	0	0	0	20	0	0
Cây ngô	0	0	50	0	0	10	20	0	0
Cỏ mần trâu lớn	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Cỏ đuôi cáo không lồ	80	30	80	0	0	80	20	0	60
Cây đồng sữa	0	0	0	0	0	50	0	0	0
Địa phu tử	0	0	0	0	0	20	0	0	0
Bìm bìm hoa tím	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Cỏ tam khôi	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Cỏ phấn hương	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Cỏ mạch đen Ý	20	0	0	0	0	20	0	0	0
Rau tàu bay	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Lúa mì	30	0	30	0	0	20	20	0	0

Bảng A

Các hợp chất

125g hoạt chất/ha	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
Hậu này mầm														
Cỏ lồng vực	0	0	0	0	0	0	0	0	80	80	70	20	30	20
Cỏ mặt	-	-	-	-	-	-	0	0	-	-	20	0	0	0
Cây ngô	0	0	0	0	0	0	0	0	40	0	0	0	0	0
Cỏ mần trâu lớn	30	0	0	40	0	50	-	-	80	60	-	-	-	-
Cỏ đuôi cáo không lồ	0	0	0	0	0	30	0	0	80	40	80	20	30	30
Cây đồng sữa	-	-	-	-	-	-	0	0	-	-	40	0	0	0
Địa phu tử	-	-	-	-	-	-	0	0	-	-	20	0	0	0
Bìm bìm hoa tím	0	0	0	0	0	0	-	-	0	0	-	-	-	-
Cỏ tam khôi	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Cỏ phần hương	-	-	-	-	-	-	0	0	-	-	0	0	0	0
Cỏ mạch đen Ý	-	-	-	-	-	-	0	0	-	-	0	0	0	0
Rau tàu bay	0	0	0	0	0	0	-	-	0	0	-	-	-	-
Lúa mì	0	0	0	0	0	0	0	0	20	0	0	0	0	0

Bảng A	Các hợp chất													
125g hoạt chất/ha	15	16	17	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29
Hậu này mầm														
Cỏ lồng vực	60	70	80	60	40	90	80	20	50	80	30	50	60	0
Cỏ mật	20	40	30	40	0	60	50	0	0	60	0	0	0	0
Cây ngô	0	0	0	0	0	50	0	0	20	20	20	0	30	0
Cỏ mần trâu lớn	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Cỏ đuôi cáo khổng lồ	70	80	80	70	40	80	90	20	50	80	30	40	70	0
Cây đồng sữa	30	20	20	20	0	0	50	0	0	30	0	0	0	0
Địa phu tử	10	0	0	0	0	0	40	20	0	0	0	0	0	0
Bìm bìm hoa tím	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Cỏ tam khôi	0	0	0	0	0	0	40	0	0	0	0	0	0	0
Cỏ phần hương	0	0	0	0	0	0	50	0	0	0	0	0	0	0
Cỏ mạch đen Ý	0	0	0	0	0	30	40	0	0	30	20	0	0	0
Rau tàu bay	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Lúa mì	0	20	20	0	0	0	0	0	20	40	0	0	0	0

Bảng A	Các hợp chất													
125g hoạt chất/ha	30	31	32	33	34	36	37	38	39	42	43	44	45	46
Hậu này mầm														
Cỏ lồng vực	80	60	60	60	40	80	60	50	80	80	0	20	0	60
Cỏ mật	70	20	0	0	0	0	0	0	0	40	0	0	0	0
Cây ngô	30	0	0	0	0	0	0	0	0	10	0	0	0	0
Cỏ mần trâu lớn	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Cỏ đuôi cáo khổng lồ	80	70	40	50	40	90	20	0	70	90	0	30	0	20
Cây đồng sữa	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Địa phu tử	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Bìm bìm hoa tím	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Cỏ tam khôi	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Cỏ phần hương	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Cỏ mạch đen Ý	0	0	0	0	0	0	0	0	0	40	0	0	0	0
Rau tàu bay	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Lúa mì	30	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Bảng A	Các hợp chất													
--------	--------------	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--

125g hoạt chất/ha	47	48	49	50	51	52	53	55	57
Hậu này mầm									
Cỏ lồng vực	50	30	80	0	0	70	0	0	0
Cỏ mặt	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Cây ngô	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Cỏ màn trâu lớn	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Cỏ đuôi cáo khổng lồ	70	0	80	0	0	80	0	0	0
Cây đồng sữa	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Địa phu tử	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Bìm bìm hoa tím	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Cỏ tam khôi	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Cỏ phấn hương	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Cỏ mạch đen Ý	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Rau tàu bay	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Lúa mì	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Bảng A

Các hợp chất

500g hoạt chất/ha	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
Tiền này mầm														
Cỏ lồng vực	70	20	0	50	30	80	0	0	90	90	90	70	70	90
Cây ngô	0	0	0	0	0	0	-	-	70	0	-	-	-	-
Cỏ màn trâu lớn	90	90	30	90	90	90	-	-	100	100	-	-	-	-
Cỏ đuôi cáo khổng lồ	90	70	0	70	50	90	0	0	90	90	90	70	90	90
Địa phu tử	-	-	-	-	-	-	0	0	-	-	60	0	40	20
Bìm bìm hoa tím	0	0	0	0	0	0	-	-	0	0	-	-	-	-
Cỏ tam khôi	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	40	0	0	0
Cỏ phấn hương	-	-	-	-	-	-	0	0	-	-	80	0	0	0
Cỏ mạch đen Ý	-	-	-	-	-	-	0	0	-	-	0	0	0	0
Rau tàu bay	0	0	0	0	0	0	-	-	0	0	-	-	-	-
Lúa mì	0	0	20	0	0	0	-	-	50	0	-	-	-	-

Bảng A

Các hợp chất

500g hoạt chất/ha	15	16	17	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29
Tiền này mầm														
Cỏ lồng vực	80	90	80	80	90	90	90	70	80	90	90	90	90	20
Cây ngô	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Cỏ màn trâu lớn	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Cỏ đuôi cáo khổng lồ	90	90	90	90	90	90	90	80	80	90	90	90	90	20
Địa phu tử	0	50	30	20	0	0	80	40	0	0	0	0	20	0
Bìm bìm hoa tím	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

Cỏ tam khôi	0	0	0	0	0	0	50	0	0	0	0	0	20	0
Cỏ phần hương	80	0	0	20	0	0	80	60	0	0	0	0	0	0
Cỏ mạch đen Ý	0	40	40	30	0	60	60	20	0	50	50	0	40	0
Rau tàu bay	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Lúa mì	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

Bảng A	Các hợp chất													
500g hoạt chất/ha	30	31	32	33	34	36	37	38	39	42	43	44	45	46
Tiền nảy mầm														
Cỏ lồng vực	90	80	90	90	90	90	70	80	90	90	0	90	70	90
Cây ngô	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Cỏ mần trâu lớn	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Cỏ đuôi cáo khổng lồ	90	90	90	90	90	90	90	80	90	90	0	90	80	90
Địa phu tử	0	0	20	30	30	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Bìm bìm hoa tím	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Cỏ tam khôi	0	0	0	0	30	0	0	0	10	10	0	0	0	0
Cỏ phần hương	0	0	0	0	30	0	0	0	0	0	0	30	0	0
Cỏ mạch đen Ý	50	0	30	0	0	30	0	0	70	60	0	0	0	20
Rau tàu bay	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Lúa mì	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

Bảng A	Các hợp chất								
500g hoạt chất/ha	47	48	49	50	51	52	53	55	57
Tiền nảy mầm									
Cỏ lồng vực	90	90	90	0	0	90	80	0	70
Cây ngô	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Cỏ mần trâu lớn	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Cỏ đuôi cáo khổng lồ	90	90	90	40	0	90	90	0	90
Địa phu tử	0	0	0	0	0	20	0	0	0
Bìm bìm hoa tím	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Cỏ tam khôi	0	0	0	0	0	80	50	0	0
Cỏ phần hương	0	0	0	0	0	30	0	0	0
Cỏ mạch đen Ý	40	0	60	0	0	30	0	0	0
Rau tàu bay	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Lúa mì	-	-	-	-	-	-	-	-	-

Bảng A	Các hợp chất													
125g hoạt chất/ha	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
Tiền nảy mầm														
Cỏ lồng vực	0	0	0	0	0	60	0	0	90	60	60	20	40	50

Cây ngô	0	0	0	0	0	0	-	-	20	0	-	-	-	-
Cỏ mần trâu lớn	80	70	0	90	60	90	-	-	90	90	-	-	-	-
Cỏ đuôi cáo khổng lồ	30	10	0	10	30	60	0	0	90	90	70	20	70	30
Địa phu tử	-	-	-	-	-	-	0	0	-	-	0	0	0	0
Bìm bìm hoa tím	0	0	0	0	0	0	-	-	0	0	-	-	-	-
Cỏ tam khôi	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Cỏ phấn hương	-	-	-	-	-	-	0	0	-	-	40	0	0	0
Cỏ mạch đen Ý	-	-	-	-	-	-	0	0	-	-	0	0	0	0
Rau tàu bay	0	0	0	0	0	0	-	-	0	0	-	-	-	-
Lúa mì	0	0	0	0	0	0	-	-	20	0	-	-	-	-

Bảng A	Các hợp chất													
125g hoạt chất/ha	15	16	17	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29
Tiền này mầm														
Cỏ lồng vực	60	70	50	70	50	90	90	30	50	90	30	60	90	0
Cây ngô	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Cỏ mần trâu lớn	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Cỏ đuôi cáo khổng lồ	80	90	80	80	60	90	90	30	70	90	60	80	90	0
Địa phu tử	0	30	30	0	0	0	70	0	0	0	0	0	20	0
Bìm bìm hoa tím	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Cỏ tam khôi	0	0	0	0	0	0	20	0	0	0	0	0	0	0
Cỏ phấn hương	0	0	0	0	0	0	60	0	0	0	0	0	0	0
Cỏ mạch đen Ý	0	20	20	20	0	0	20	0	0	0	0	0	20	0
Rau tàu bay	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Lúa mì	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

Bảng A	Các hợp chất													
125g hoạt chất/ha	30	31	32	33	34	36	37	38	39	42	43	44	45	46
Tiền này mầm														
Cỏ lồng vực	90	70	20	50	40	90	40	30	80	90	0	60	20	50
Cây ngô	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Cỏ mần trâu lớn	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Cỏ đuôi cáo khổng lồ	90	70	70	70	50	90	70	50	90	90	0	80	40	90
Địa phu tử	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Bìm bìm hoa tím	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Cỏ tam khôi	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Cỏ phấn hương	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Cỏ mạch đen Ý	20	0	0	0	0	0	0	0	30	40	0	0	0	0
Rau tàu bay	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Lúa mì	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

Bảng A	Các hợp chất									
125g hoạt chất/ha	47	48	49	50	51	52	53	55	57	
Tiền nảy mầm										
Cỏ lồng vực	70	40	80	0	0	90	0	0	30	
Cây ngô	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
Cỏ mần trâu lớn	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
Cỏ đuôi cáo khổng lồ	80	70	90	0	0	90	0	0	60	
Địa phu tử	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
Bìm bìm hoa tím	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
Cỏ tam khôi	0	0	0	0	0	30	0	0	0	
Cỏ phấn hương	0	0	0	0	0	20	0	0	0	
Cỏ mạch đen Ý	0	0	0	0	0	20	0	0	0	
Rau tàu bay	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
Lúa mì	-	-	-	-	-	-	-	-	-	

Thử nghiệm B

Các loài thực vật trong thử nghiệm ruộng ngập nước được chọn từ cây lúa (*Oryza sativa*), cây cỏi túi, có lác châu Mỹ (cỏ lác tán rộng hoa nhỏ, *Cyperus difformis*), rau chân vịt (*Heteranthera limosa*), và cỏ lồng vực (*Echinochloa crus-galli*) được phát triển đến giai đoạn 2 lá để thử nghiệm. Tại thời điểm xử lý, các chậu thử nghiệm được làm ngập nước 3cm kể từ bề mặt đất, được xử lý bằng cách phun các hợp chất thử nghiệm trực tiếp lên nước trong ruộng, và sau đó được duy trì độ ngập nước đó trong quá trình thử nghiệm. Các cây đã được xử lý và cây đối chứng được duy trì trong nhà kính trong thời gian 13 đến 15 ngày, sau thời gian đó, tất cả các loài cây này được so sánh với cây đối chứng và được đánh giá bằng mắt. Tỷ lệ đáp ứng của thực vật, được tóm tắt trong bảng B, được tính theo thang đo từ 0 đến 100 trong đó 0 là không có tác dụng diệt cỏ và 100 là phòng trừ cỏ dại hoàn toàn. Đáp ứng ký hiệu dấu gạch ngang (-) tức là không có kết quả thử nghiệm.

Bảng B	Các hợp chất		
1000g hoạt chất/ha	7	13	14
Ngập nước			
Cỏ lồng vực	0	40	30
Rau chân vịt	0	100	100

Lúa	0	0	0
Cỏ lạc tán rộng	0	0	0

Bảng B	Các hợp chất													
500g hoạt chất/ha	15	16	17	19	26	27	28	31	32	33	34	44	45	46
Ngập nước														
Cỏ lồng vực	40	0	35	60	40	0	100	95	0	20	0	60	0	65
Rau chân vịt	60	0	40	60	50	0	85	0	40	80	40	85	50	100
Lúa	0	0	0	0	0	0	15	10	0	0	0	0	0	0
Cỏ lạc tán rộng	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Bảng B	Các hợp chất													
250g hoạt chất/ha	1	2	3	4	5	6	9	10	13	14	20	21	22	23
Ngập nước														
Cỏ lồng vực	0	0	0	0	0	0	75	0	0	30	0	75	65	0
Rau chân vịt	0	0	0	0	0	60	90	40	70	80	0	100	100	0
Lúa	0	0	0	0	0	0	0	10	0	0	0	10	0	0
Cỏ lạc tán rộng	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Bảng B	Các hợp chất													
250g hoạt chất/ha	24	25	29	30	36	37	38	39	42	43	47	48	49	50
Ngập nước														
Cỏ lồng vực	0	60	0	50	60	35	35	65	75	0	0	20	70	0
Rau chân vịt	0	45	0	50	90	90	85	100	95	0	50	60	100	0
Lúa	0	0	0	20	0	0	0	0	0	0	0	15	0	0
Cỏ lạc tán rộng	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Bảng B	Các hợp chất				
250g hoạt chất/ha	51	52	53	55	57
Ngập nước					
Cỏ lồng vực	0	30	0	0	0
Rau chân vịt	0	100	0	0	40
Lúa	0	0	0	0	0
Cỏ lạc tán rộng	0	0	0	0	0

Thử nghiệm C

Hạt của các loài thực vật được chọn từ cỏ mật (*Alopecurus myosuroides*), cỏ mạch đen Ý (cỏ mạch đen Ý, *Lolium multiflorum*), lúa mì (lúa mì mùa đông, *Triticum aestivum*), cây đông sữa (cây vắn vương, *Galium aparine*), cây ngô (*Zea mays*), cỏ màn trâu lớn (cỏ màn trâu lớn, *Digitaria sanguinalis*), cỏ đuôi cáo

không lồ (cỏ đuôi cáo không lồ, *Setaria faberii*), cỏ Johnson (*Sorghum halepense*), cây kinh giới trắng (*Chenopodium album*), cây bìm bìm hoa tím (*Ipomoea coccinea*), cỏ gấu vàng (cỏ gấu vàng, *Cyperus esculentus*), cây rau muối (*Amaranthus retroflexus*), cỏ phấn hương (cỏ phấn hương thông thường, *Ambrosia elatior*), cây đậu tương (*Glyxin max*), cỏ lồng vực (*Echinochloa crus-galli*), cây cải dầu (*Brassica napus*), cỏ Cỏ Waterhemp (cỏ Cỏ Waterhemp thông thường, *Amaranthus rudis*), và cây cối xay (*Abutilon theophrasti*) được trồng vào trong hỗn hợp đất mùn và cát và được xử lý ở giai đoạn tiền nảy mầm bằng các hợp chất thử nghiệm điều chế trong hỗn hợp dung môi không gây độc thực vật mà có chứa chất hoạt động bề mặt.

Đồng thời, thực vật được chọn từ các loài cây trồng và cỏ dại này và cả cây tràng sao (cây tràng sao thông thường, *Stellaria media*), cây địa phu tử (Cây địa phu tử *scoparia*), và cây yến mạch dại (yến mạch dại, *Avena fatua*), được trồng trong chậu chứa môi trường sinh trưởng Redi-Earth® Redi-Earth® planting bao gồm than bùn rêu Spagnum, vermiculit, chất làm ẩm và các dưỡng chất khởi động và được xử lý ở giai đoạn hậu nảy mầm bằng cách phun các hợp chất thử nghiệm được điều chế theo cùng cách. Các cây có độ cao từ 2 đến 18 cm (giai đoạn 1-4 lá) để xử lý hậu nảy mầm. Các cây đã được xử lý và cây đối chứng được duy trì trong nhà kính trong thời gian 13 đến 15 ngày, sau thời gian đó, tất cả các loài cây này được so sánh với cây đối chứng và được đánh giá bằng mắt. Tỷ lệ đáp ứng của thực vật, được tóm tắt trong bảng C, được tính theo thang đo từ 0 đến 100 trong đó 0 là không có tác dụng diệt cỏ và 100 là phòng trừ cỏ dại hoàn toàn. Đáp ứng ký hiệu dấu gạch ngang (–) tức là không có kết quả thử nghiệm.

Các loài thực vật trong thử nghiệm ruộng ngập nước được chọn từ cây lúa (*Oryza sativa*), cây cối túi, có lác châu Mỹ (cỏ lác tán rộng hoa nhỏ, *Cyperus difformis*), rau chân vịt (*Heteranthera limosa*), và cỏ lồng vực (*Echinochloa crus-galli*) được phát triển đến giai đoạn 2 lá để thử nghiệm. Tại thời điểm xử lý, các chậu thử nghiệm được làm ngập nước 3cm kể từ bề mặt đất, được xử lý bằng cách phun các hợp chất thử nghiệm trực tiếp lên nước trong ruộng, và sau đó được duy trì độ ngập nước đó trong quá trình thử nghiệm. Các cây đã được xử lý và cây đối

chứng được duy trì trong nhà kính trong thời gian 13 đến 15 ngày, sau thời gian đó, tất cả các loài cây này được so sánh với cây đối chứng và được đánh giá bằng mắt. Tỷ lệ đáp ứng của thực vật, được tóm tắt trong bảng C, được tính theo thang đo từ 0 đến 100 trong đó 0 là không có tác dụng diệt cỏ và 100 là phòng trừ cỏ dại hoàn toàn. Đáp ứng ký hiệu dấu gạch ngang (-) tức là không có kết quả thử nghiệm.

Bảng C	Các hợp chất	
250g hoạt chất/ha	9	17
Hậu nảy mầm		
Cỏ lồng vực	85	50
Cỏ mật	0	0
Cỏ gà	5	5
Cây ngô	0	0
Cỏ màn trâu lớn	75	55
Cỏ đuôi cáo không lông	85	5
Cây đồng sữa	40	0
Cỏ Johnson	5	0
Địa phu tử	0	0
Cỏ chân ngỗng	0	80
Bìm bìm hoa tím	40	5
Cỏ gấu vàng	0	0
Cỏ yến mạch hoang	0	0
Cải dầu	5	0
Cỏ tam khôi	5	5
Cỏ phấn hương	5	0
Cỏ mạch đen Ý	0	0
Đậu tương	10	0
Rau tàu bay	0	0
Cỏ Waterhemp	5	0
Lúa mì	0	0

Bảng C	Các hợp chất	
125g hoạt chất/ha	9	17
Hậu nảy mầm		
Cỏ lồng vực	60	5
Cỏ mật	0	0
Cỏ gà	0	0
Cây ngô	0	0
Cỏ màn trâu lớn	75	20
Cỏ đuôi cáo không lông	35	5
Cây đồng sữa	0	0
Cỏ Johnson	0	0
Địa phu tử	0	0
Cỏ chân ngỗng	5	-
Bìm bìm hoa tím	30	0
Cỏ gấu vàng	0	0
Cỏ yến mạch hoang	0	0
Cải dầu	0	0
Cỏ tam khôi	5	0
Cỏ phấn hương	0	0
Cỏ mạch đen Ý	0	0
Đậu tương	0	0
Rau tàu bay	0	0
Cỏ Waterhemp	0	0
Lúa mì	0	0

Bảng C	Các hợp chất	
62g hoạt chất/ha	9	17
Hậu nảy mầm		
Cỏ lồng vực	5	0
Cỏ mật	0	0

Bảng C	Các hợp chất	
31g hoạt chất/ha	9	17
Hậu nảy mầm		
Cỏ lồng vực	0	0
Cỏ mật	0	0

Cò gà	0	0
Cây ngô	0	0
Cò mần trâu lớn	35	20
Cò đuôi cáo khổng lồ	5	5
Cây đông sữa	0	0
Cò Johnson	0	0
Địa phu tử	0	0
Cò chân ngỗng	0	75
Bìm bìm hoa tím	0	0
Cò gấu vàng	0	0
Cò yến mạch hoang	0	0
Cải dầu	0	0
Cò tam khôi	0	0
Cò phấn hương	0	0
Cò mạch đen Ý	0	0
Đậu tương	0	10
Rau tàu bay	0	0
Cò Cò Waterhemp	5	0
Lúa mì	0	0

Cò gà	0	0
Cây ngô	0	0
Cò mần trâu lớn	0	5
Cò đuôi cáo khổng lồ	0	0
Cây đông sữa	0	0
Cò Johnson	0	0
Địa phu tử	0	0
Cò chân ngỗng	0	-
Bìm bìm hoa tím	0	0
Cò gấu vàng	0	0
Cò yến mạch hoang	0	0
Cải dầu	0	0
Cò tam khôi	0	0
Cò phấn hương	0	0
Cò mạch đen Ý	0	0
Đậu tương	0	0
Rau tàu bay	0	0
Cò Waterhemp	0	0
Lúa mì	0	0

Bảng C Các hợp chất

250g hoạt chất/ha	9	28
Tiền nảy mầm		
Cò lồng vực	95	95
Cò mật	90	90
Cây ngô	90	55
Cò mần trâu lớn	98	90
Cò đuôi cáo khổng lồ	98	95
Cây đông sữa	75	-
Cò Johnson	55	10
Cò chân ngỗng	0	15
Bìm bìm hoa tím	45	30
Cò gấu vàng	0	50
Cải dầu	40	0
Cò tam khôi	10	-
Cò phấn hương	20	0
Cò mạch đen Ý	80	35
Đậu tương	0	0

Bảng C Các hợp chất

125g hoạt chất/ha	9	28
Tiền nảy mầm		
Cò lồng vực	95	90
Cò mật	80	70
Cây ngô	75	30
Cò mần trâu lớn	98	90
Cò đuôi cáo khổng lồ	95	95
Cây đông sữa	0	-
Cò Johnson	35	0
Cò chân ngỗng	0	5
Bìm bìm hoa tím	5	5
Cò gấu vàng	0	10
Cải dầu	0	0
Cò tam khôi	0	0
Cò phấn hương	10	0
Cò mạch đen Ý	30	0
Đậu tương	0	0

Rau tàu bay	0	20
Cỏ Waterhemp	0	60
Lúa mì	70	10

Rau tàu bay	0	20
Cỏ Waterhemp	20	0
Lúa mì	55	0

Bảng C Các hợp chất

62g hoạt chất/ha	9	28
Tiền nảy mầm		
Cỏ lồng vực	90	75
Cỏ mật	40	40
Cây ngô	0	0
Cỏ mần trâu lớn	95	85
Cỏ đuôi cáo khổng lồ	95	85
Cây đồng sữa	0	-
Cỏ Johnson	0	0
Cỏ chân ngỗng	0	5
Bìm bìm hoa tím	20	5
Cỏ gấu vàng	0	0
Cải dầu	0	0
Cỏ tam khôi	0	-
Cỏ phấn hương	0	0
Cỏ mạch đen Ý	50	0
Đậu tương	0	0
Rau tàu bay	5	0
Cỏ Waterhemp	0	-
Lúa mì	30	0

Bảng C Các hợp chất

31g hoạt chất/ha	9	28
Tiền nảy mầm		
Cỏ lồng vực	75	60
Cỏ mật	50	35
Cây ngô	0	0
Cỏ mần trâu lớn	95	80
Cỏ đuôi cáo khổng lồ	90	60
Cây đồng sữa	0	0
Cỏ Johnson	0	0
Cỏ chân ngỗng	0	5
Bìm bìm hoa tím	0	5
Cỏ gấu vàng	0	0
Cải dầu	0	0
Cỏ tam khôi	5	-
Cỏ phấn hương	0	0
Cỏ mạch đen Ý	30	0
Đậu tương	0	0
Rau tàu bay	0	10
Cỏ Waterhemp	15	0
Lúa mì	0	0

Bảng C Các hợp chất

1000g hoạt chất/ha	9	10	11	12
Ngập nước				
Cỏ lồng vực	80	65	70	25
Rau chân vịt	98	85	100	100
Lúa	10	10	0	0
Cỏ lạc tán rộng	0	0	0	25

Bảng C Các hợp chất

500g hoạt chất/ha	11	12
Ngập nước		
Cỏ lồng vực	50	20
Rau chân vịt	95	75
Lúa	0	0
Cỏ lạc tán rộng	0	10

Bảng C Các hợp chất

250g hoạt chất/ha	11	12	16	19	28
Ngập nước					
Cỏ lồng vực	20	15	0	0	75

Bảng C Các hợp chất

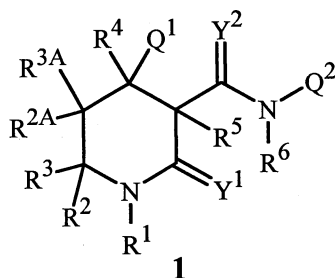
125g hoạt chất/ha	11	12	16	19	28
Ngập nước					
Cỏ lồng vực	10	0	0	0	70

Rau chân vịt	80	35	0	0	70	Rau chân vịt	30	0	0	0	60
Lúa	0	0	0	0	0	Lúa	0	0	0	0	0
Cỏ lạc tán rộng	0	0	0	0	0	Cỏ lạc tán rộng	0	0	0	0	0

Bảng C	Các hợp chất			Bảng C	Các hợp chất		
62g hoạt chất/ha	16	19	28	31g hoạt chất/ha	16	19	28
Ngập nước				Ngập nước			
Cỏ lồng vực	0	0	65	Cỏ lồng vực	0	0	60
Rau chân vịt	0	0	50	Rau chân vịt	0	0	45
Lúa	0	0	0	Lúa	0	0	0
Cỏ lạc tán rộng	0	0	0	Cỏ lạc tán rộng	0	0	0

YÊU CẦU BẢO HỘ

1. Hợp chất được chọn từ hợp chất có công thức 1, các *N*-oxit và muối của nó:



trong đó:

Q^1 là vòng phenyl hoặc hệ vòng naphtalenyl, mỗi vòng hoặc hệ vòng này tùy ý được thế bằng tối đa 5 phần tử thế độc lập được chọn từ R^7 ; hoặc vòng dị vòng có 4 tới 7 cạnh hoặc hệ vòng hai vòng có 8 tới 10 cạnh, mỗi vòng hoặc hệ vòng này chứa các thành viên vòng được chọn từ nguyên tử cacbon và 1 tới 4 nguyên tử khác loại độc lập được chọn từ tối đa 2 nguyên tử O, tối đa 2 nguyên tử S và tối đa 4 nguyên tử N, trong đó tối đa 3 thành viên vòng là nguyên tử cacbon độc lập được chọn từ $C(=O)$ và $C(=S)$, và thành viên vòng là nguyên tử lưu huỳnh độc lập được chọn từ $S(=O)_u(=NR^8)_v$, mỗi vòng hoặc hệ vòng này tùy ý được thế bằng tối đa 5 phần tử thế độc lập được chọn từ R^7 trên các thành viên vòng là nguyên tử cacbon và được chọn từ R^9 trên các thành viên vòng là nguyên tử nitơ;

Q^2 là vòng phenyl hoặc hệ vòng naphtalenyl, mỗi vòng hoặc hệ vòng này tùy ý được thế bằng tối đa 5 phần tử thế độc lập được chọn từ R^{10} ; hoặc vòng dị vòng có 4 tới 7 cạnh hoặc hệ vòng hai vòng có 8 tới 10 cạnh, mỗi vòng hoặc hệ vòng này chứa các thành viên vòng được chọn từ nguyên tử cacbon và 1 tới 4 nguyên tử khác loại độc lập được chọn từ tối đa 2 nguyên tử O, tối đa 2 nguyên tử S và tối đa 4 nguyên tử N, trong đó tối đa 3 thành viên vòng là nguyên tử cacbon độc lập được chọn từ $C(=O)$ và $C(=S)$, và thành viên vòng là nguyên tử lưu huỳnh độc lập được chọn từ $S(=O)_u(=NR^8)_v$, mỗi vòng hoặc hệ vòng này tùy ý được thế bằng tối đa 5 phần tử thế độc lập được chọn từ R^{10} trên các thành viên vòng là nguyên tử cacbon và được chọn từ R^{11} trên các thành viên vòng là nguyên tử nitơ;

Y^1 và Y^2 độc lập với nhau là O, S hoặc NR^{12} ;

R^1 là H, hydroxy, amino, C_1 – C_6 alkyl, xyano, formyl, C_3 – C_8 alkylcarbonylalkyl, $-C(C_1$ – C_4 alkyl)=N–O(C_1 – C_4 alkyl), $-C(O)NH_2$, C_1 – C_6 haloalkyl, C_2 – C_6 alkenyl, C_3 – C_6 alkynyl, C_2 – C_6 xyanoalkyl, C_3 – C_6 xycloalkyl, C_4 – C_8 xycloalkylalkyl, C_2 – C_8 alkoxyalkyl, C_2 – C_8 haloalkoxyalkyl, C_2 – C_8 haloalkenylalkyl, C_2 – C_8 alkylthioalkyl, C_2 – C_8 alkylsulfinylalkyl, C_2 – C_8 alkylsulfonylalkyl, C_2 – C_8 alkylcarbonyl, C_2 – C_8 haloalkylcarbonyl, C_4 – C_{10} xycloalkylcarbonyl, C_5 – C_{10} xycloalkylcarbonylalkyl, C_2 – C_8 alkoxycarbonyl, C_2 – C_8 haloalkoxycarbonyl, C_4 – C_{10} xycloalkoxycarbonyl, C_2 – C_8 alkylaminocarbonyl, C_3 – C_{10} dialkylaminocarbonyl, C_4 – C_{10} xycloalkylaminocarbonyl, C_1 – C_6 alkoxy, C_1 – C_6 alkylthio, C_1 – C_6 haloalkylthio, C_3 – C_8 xycloalkylthio, C_1 – C_6 alkylsulfinyl, C_1 – C_6 haloalkylsulfinyl, C_3 – C_8 xycloalkylsulfinyl, C_1 – C_6 alkylsulfonyl, C_1 – C_6 haloalkylsulfonyl, C_3 – C_8 xycloalkylsulfonyl, C_1 – C_6 alkylaminosulfonyl, C_2 – C_8 dialkylaminosulfonyl, C_3 – C_{10} trialkylsilyl; hoặc arylcarbonyl, arylalkenylalkyl, arylcarbonylalkyl hoặc $-CPh=N-O(C_1$ – C_4 alkyl), mỗi nhóm này tùy ý được thế trên các thành viên vòng bằng tối đa 5 phần tử thế độc lập được chọn từ R^{13} ; hoặc G^1 ;

R^2 và R^3 độc lập với nhau là H, halogen, hydroxy, C_1 – C_4 alkyl, C_1 – C_4 haloalkyl hoặc C_1 – C_4 alkoxy; hoặc

R^2 và R^3 cùng với nguyên tử cacbon mà chúng gắn vào tạo ra vòng C_3 – C_7 xycloalkyl;

R^{2A} và R^{3A} độc lập với nhau là H, halogen, hydroxy, C_1 – C_4 alkyl, C_1 – C_4 haloalkyl hoặc C_1 – C_4 alkoxy; hoặc

R^{2A} và R^{3A} cùng với nguyên tử cacbon mà chúng gắn vào tạo ra vòng C_3 – C_7 xycloalkyl hoặc $C=O$;

R^4 và R^5 độc lập với nhau là H, halogen, hydroxy, C_1 – C_4 alkoxy, C_1 – C_4 haloalkyl hoặc C_1 – C_4 alkyl;

R^6 là H, hydroxy, amino, C_1 – C_6 alkyl, C_1 – C_6 haloalkyl, C_2 – C_6 alkenyl, C_3 – C_6 alkynyl, C_2 – C_8 alkoxyalkyl, C_2 – C_8 haloalkoxyalkyl, C_2 – C_8 alkylthioalkyl, C_2 – C_8 alkylsulfinylalkyl, C_2 – C_8 alkylsulfonylalkyl, C_2 – C_8 alkylcarbonyl, C_2 – C_8 haloalkylcarbonyl, C_4 – C_{10} xycloalkylcarbonyl, C_2 – C_8 alkoxycarbonyl, C_2 – C_8 haloalkoxycarbonyl, C_4 – C_{10} xycloalkoxycarbonyl, C_2 – C_8 alkylaminocarbonyl, C_3 – C_{10} dialkylaminocarbonyl, C_4 – C_{10} xycloalkylaminocarbonyl, C_1 – C_6 alkoxy, C_1 – C_6 alkylthio, C_1 – C_6 haloalkylthio, C_3 – C_8 xycloalkylthio, C_1 – C_6 alkylsulfinyl, C_1 – C_6 haloalkylsulfinyl, C_3 – C_8 xycloalkylsulfinyl, C_1 – C_6 alkylsulfonyl, C_1 – C_6 haloalkylsulfonyl, C_3 – C_8 xycloalkylsulfonyl, C_1 – C_6 alkylaminosulfonyl, C_2 – C_8 dialkylaminosulfonyl, C_3 – C_{10} trialkylsilyl hoặc G^1 ;

R^6 và Q^2 cùng với nguyên tử nitơ mà chúng liên kết tạo ra hệ vòng hai vòng có 8 tới 10 cạnh, mỗi vòng hoặc hệ vòng này chứa các thành viên vòng được chọn từ nguyên tử cacbon và 1 tới 4 nguyên tử khác loại độc lập được chọn từ tối đa 2 nguyên tử O, tối đa 2 nguyên tử S và tối đa 4 nguyên tử N, trong đó tối đa 3 thành viên vòng là nguyên tử cacbon độc lập được chọn từ $C(=O)$ và $C(=S)$, và thành viên vòng là nguyên tử lưu huỳnh độc lập được chọn từ $S(=O)_u(=NR^8)_v$, mỗi vòng hoặc hệ vòng này tùy ý được thế bằng tối đa 5 phần tử thế độc lập được chọn từ R^{10} trên các thành viên vòng là nguyên tử cacbon và được chọn từ R^{11} trên các thành viên vòng là nguyên tử nitơ;

mỗi R^7 và R^{10} độc lập là halogen, hydroxy, xyano, nitro, amino, C_1 – C_8 alkyl, C_1 – C_8 xyanoalkyl, C_1 – C_8 xyanoalkoxy, C_1 – C_8 haloalkyl, C_1 – C_8 nitroalkyl, C_2 – C_8 alkenyl, C_2 – C_8 haloalkenyl, C_2 – C_8 nitroalkenyl, C_2 – C_8 alkynyl, C_2 – C_8 haloalkynyl, C_3 – C_8 alkoxyalkoxyalkyl, C_2 – C_8 haloalkoxyhaloalkoxy, C_4 – C_{10} xycloalkylalkyl, C_4 – C_{10} haloalkoxycycloalkylalkyl, C_5 – C_{12} alkylxycloalkylalkyl, C_5 – C_{12} xycloalkylalkenyl, C_5 – C_{12} xycloalkylalkynyl, C_3 – C_8 xycloalkyl, C_3 – C_8

haloxycycloalkyl, C₄-C₁₀ alkylxycycloalkyl, C₆-C₁₂ xycycloalkylxycycloalkyl, C₃-C₈ xycycloalkenyl, C₃-C₈ haloxycycloalkenyl, C₂-C₈ haloalkoxyalkoxy, C₂-C₈ alkoxyalkoxy, C₂-C₈ alkoxyalkyl, C₂-C₈ haloalkoxyalkyl, C₄-C₁₀ xycycloalkoxyalkyl, C₃-C₁₀ alkoxyalkoxyalkyl, C₂-C₈ alkylthioalkyl, C₂-C₈ alkylsulfinylalkyl, C₂-C₈ alkylsulfonylalkyl, C₂-C₈ alkylamino, C₂-C₈ dialkylamino, C₂-C₈ haloalkylamino, C₂-C₈ alkylaminoalkyl, C₂-C₈ haloalkylaminoalkyl, C₄-C₁₀ xycycloalkylaminoalkyl, C₃-C₁₀ dialkylaminoalkyl, -CHO, C₂-C₈ alkylcarbonyl, C₂-C₈ haloalkylcarbonyl, C₄-C₁₀ xycycloalkylcarbonyl, -C(=O)OH, C₂-C₈ alkoxycarbonyl, C₂-C₈ haloalkoxycarbonyl, C₄-C₁₀ xycycloalkoxycarbonyl, C₅-C₁₂ xycycloalkylalkoxycarbonyl, -C(=O)NH₂, C₂-C₈ alkylaminocarbonyl, C₄-C₁₀ xycycloalkylaminocarbonyl, C₃-C₁₀ dialkylaminocarbonyl, C₁-C₈ alkoxy, C₁-C₈ haloalkoxy, C₂-C₈ alkoxyalkoxy, C₂-C₈ alkenyloxy, C₂-C₈ haloalkenyloxy, C₃-C₈ alkynyloxy, C₃-C₈ haloalkynyloxy, C₃-C₈ xycycloalkoxy, C₃-C₈ haloxycycloalkoxy, C₄-C₁₀ xycycloalkylalkoxy, C₃-C₁₀ alkylcarbonylalkoxy, C₂-C₈ alkylcarbonyloxy, C₂-C₈ haloalkylcarbonyloxy, C₄-C₁₀ xycycloalkylcarbonyloxy, C₁-C₈ alkylsulfonyloxy, C₁-C₈ haloalkylsulfonyloxy, C₁-C₈ alkylthio, C₁-C₈ haloalkylthio, C₃-C₈ xycycloalkylthio, C₁-C₈ alkylsulfinyl, C₁-C₈ haloalkylsulfinyl, C₁-C₈ alkylsulfonyl, C₁-C₈ haloalkylsulfonyl, C₃-C₈ xycycloalkylsulfonyl, formylamino, C₂-C₈ alkylcarbonylamino, C₂-C₈ haloalkylcarbonylamino, C₃-C₈ xycycloalkylamino, C₂-C₈ alkoxycarbonylamino, C₁-C₆ alkylsulfonylamino, C₁-C₆ haloalkylsulfonylamino, -SF₅, -SCN, SO₂NH₂, C₃-C₁₂ trialkylsilyl, C₄-C₁₂ trialkylsilylalkyl hoặc C₄-C₁₂ trialkylsilylalkoxy; hoặc G²;

mỗi R⁸ độc lập là H, xyano, C₂-C₃ alkylcarbonyl hoặc C₂-C₃ haloalkylcarbonyl;

mỗi R^9 và R^{11} độc lập là xyano, C_1 – C_3 alkyl, C_2 – C_3 alkenyl, C_2 – C_3 alkynyl, C_3 – C_6 xycloalkyl, C_2 – C_3 alkoxyalkyl, C_1 – C_3 alkoxy, C_2 – C_3 alkylcarbonyl, C_2 – C_3 alkoxycarbonyl, C_2 – C_3 alkylaminoalkyl hoặc C_3 – C_4 dialkylaminoalkyl;

mỗi R^{12} độc lập là H, xyano, hydroxy, CHO, C_1 – C_4 alkyl, C_1 – C_4 haloalkyl, C_1 – C_4 alkoxy, C_2 – C_6 alkylcarbonyl, C_2 – C_6 haloalkylcarbonyl, $-(C=O)CH_3$ hoặc $-(C=O)CF_3$;

mỗi G^1 độc lập là phenyl, phenylmetyl, pyridinylmetyl, phenylcarbonyl, phenoxy, phenyletynyl, phenylsulfonyl, *p*-metoxybenzyl hoặc vòng dị thơm có 5 hoặc 6 cạnh, mỗi nhóm này tùy ý được thế trên các thành viên vòng bằng tối đa 5 phần tử thế độc lập được chọn từ R^{13} ;

mỗi G^2 độc lập là phenyl, phenylmetyl, pyridinylmetyl, phenylcarbonyl, phenoxy, phenyletynyl, phenylsulfonyl hoặc vòng dị thơm có 5 hoặc 6 cạnh, mỗi nhóm này tùy ý được thế trên các thành viên vòng bằng tối đa 5 phần tử thế độc lập được chọn từ R^{14} ;

mỗi R^{13} và R^{14} độc lập là halogen, xyano, hydroxy, amino, nitro, $-CHO$, $-C(=O)OH$, $-C(=O)NH_2$, $-SO_2NH_2$, C_1 – C_6 alkyl, C_1 – C_6 haloalkyl, C_2 – C_6 alkenyl, C_2 – C_6 alkynyl, C_2 – C_8 alkylcarbonyl, C_2 – C_8 haloalkylcarbonyl, C_2 – C_8 alkoxycarbonyl, C_4 – C_{10} xycloalkoxycarbonyl, C_5 – C_{12} xycloalkylalkoxycarbonyl, C_2 – C_8 alkylaminocarbonyl, C_3 – C_{10} dialkylaminocarbonyl, C_1 – C_6 alkoxy, C_1 – C_6 haloalkoxy, C_2 – C_8 alkylcarbonyloxy, C_1 – C_6 alkylthio, C_1 – C_6 haloalkylthio, C_1 – C_6 alkylsulfinyl, C_1 – C_6 haloalkylsulfinyl, C_1 – C_6 alkylsulfonyl, C_1 – C_6 haloalkylsulfonyl, C_1 – C_6 alkylaminosulfonyl, C_2 – C_8 dialkylaminosulfonyl, C_3 – C_{10} trialkylsilyl, C_1 – C_6 alkylamino, C_2 – C_8 dialkylamino, C_2 – C_8 alkylcarbonylamino, C_1 – C_6 alkylsulfonylamino, phenyl, pyridinyl hoặc thienyl; và
mỗi u và v độc lập bằng 0, 1 hoặc 2 trong mỗi trường hợp $S(=O)_u(=NR^8)_v$, miễn là tổng của u và v bằng 0, 1 hoặc 2.

2. Hợp chất theo điểm 1, trong đó:

mỗi R^7 và R^{10} độc lập là halogen, xyano, nitro, C_1 – C_4 alkyl, C_1 – C_4 haloalkyl, C_2 – C_4 alkenyl, C_2 – C_4 haloalkenyl, C_2 – C_4 alkynyl, C_2 – C_4 haloalkynyl, C_1 – C_4 nitroalkyl, C_2 – C_4 nitroalkenyl, C_2 – C_4 alkoxyalkyl, C_2 – C_4 haloalkoxyalkyl, C_3 – C_4 xycloalkyl, C_3 – C_4 haloxycloalkyl, C_1 – C_4 alkoxy, C_1 – C_4 haloalkoxy, C_2 – C_4 alkenyloxy, C_2 – C_4 haloalkenyloxy, C_3 – C_4 alkynyloxy, C_3 – C_4 haloalkynyloxy, C_3 – C_4 xycloalkoxy, C_1 – C_4 alkylthio, C_1 – C_4 haloalkylthio, C_1 – C_4 alkylsulfinyl, C_1 – C_4 haloalkylsulfinyl, C_1 – C_4 alkylsulfonyl, C_1 – C_4 haloalkylsulfonyl, C_2 – C_4 alkylcarbonyl, C_2 – C_4 alkylcarbonyloxy, C_1 – C_4 alkylsulfonyloxy, C_1 – C_4 haloalkylsulfonyloxy, C_2 – C_4 alkylamino, C_2 – C_4 dialkylamino, formylamino, C_2 – C_4 alkylcarbonylamino, $-SF_5$, $-SCN$, C_3 – C_4 trialkylsilyl, trimethylsilylmethyl hoặc trimethylsilylmetoxy; và
mỗi R^9 và R^{11} là C_1 – C_2 alkyl.

3. Hợp chất theo điểm 2, trong đó:

mỗi Y^1 và Y^2 là O;

R^1 là H hoặc C_1 – C_6 alkyl; và

mỗi R^2 , R^3 , R^{2A} , R^{3A} , R^4 , R^5 và R^6 là H.

4. Hợp chất theo điểm 3, trong đó:

R^1 là H hoặc Me.

5. Hợp chất theo điểm 4, trong đó:

Q^1 là vòng phenyl được thế bằng 1 tới 3 phần tử thế độc lập được chọn từ R^7 ; và

Q^2 là vòng phenyl được thế bằng 1 tới 3 phần tử thế độc lập được chọn từ R^{10} .

6. Hợp chất theo điểm 5, trong đó:

mỗi R^7 độc lập là halogen, xyano, C_1-C_2 alkyl, C_1-C_3 haloalkyl hoặc C_1-C_3 alkylsulfonyl; và

mỗi R^{10} độc lập là halogen, xyano, nitro, C_1-C_2 alkyl, C_1-C_3 haloalkyl hoặc C_1-C_3 alkylsulfonyl.

7. Hợp chất theo điểm 6, trong đó:

Q^1 là vòng phenyl được thế bằng 1 phần tử thế được chọn từ R^7 ở vị trí meta hoặc vị trí para hoặc được thế bằng 2 phần tử thế độc lập được chọn từ R^7 trong đó một phần tử thế ở vị trí meta và phần tử thế kia ở vị trí para; và

Q^2 là vòng phenyl được thế bằng 1 phần tử thế được chọn từ R^{10} ở vị trí ortho hoặc được thế bằng 2 phần tử thế độc lập được chọn từ R^{10} trong đó một phần tử thế ở vị trí ortho và phần tử thế kia ở vị trí meta liền kề.

8. Hợp chất theo điểm 7, trong đó:

mỗi R^7 độc lập là F hoặc CF_3 ; và

mỗi R^{10} là F.

9. Hợp chất theo điểm 1, trong đó hợp chất này được chọn từ nhóm bao gồm:

N-(2,3-điflophenyl)-2-oxo-4-[3-(triflometyl)phenyl]-3-piperidincarboxamit;

2-oxo-*N*-[2-(triflometyl)phenyl]-4-[3-(triflometyl)phenyl]-3-piperidincarboxamit;

và

N-(2,3-điflophenyl)-2-oxo-4-[4-(triflometyl)phenyl]-3-piperidincarboxamit.

10. Hợp chất theo điểm 1, trong đó hợp chất này được chọn từ nhóm bao gồm:

N-(2,3-điflophenyl)-2-oxo-4-[3-(triflometyl)phenyl]-3-piperidincarboxamit;

2-oxo-*N*-[2-(triflometyl)phenyl]-4-[3-(triflometyl)phenyl]-3-piperidincarboxamit;

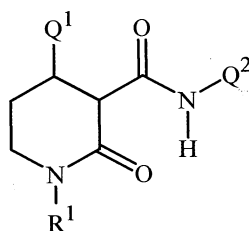
N-(2,3-điflophenyl)-2-oxo-4-[4-(triflometyl)phenyl]-3-piperidincarboxamit;

(3*S*,4*S*)-*N*-(2,3-điflophenyl)-4-(4-flophenyl)-1-metyl-2-oxo-3-

piperidincarboxamit;

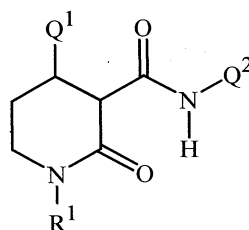
4-[3-(diflometyl)phenyl]-*N*-(2,3-điflophenyl)-2-oxo-3-piperidincarboxamit;
 (3*R*,4*S*)-4-(3-clophenyl)-*N*-(2,3-điflophenyl)-2-oxo-3-piperidincarboxamit;
 4-(3-clophenyl)-*N*-(2,3-điflophenyl)-2-oxo-3-piperidincarboxamit;
 2-oxo-4-[3-(triflometyl)phenyl]-*N*-(2,3,4-triflophenyl)-3-piperidincarboxamit;
 (3*R*,4*S*)-*N*-(3-clo-2-flophenyl)-2-oxo-4-[3-(triflometyl)phenyl]-3-piperidincarboxamit;
 (3*R*,4*S*)-*N*-(2,3-điflophenyl)-2-oxo-4-[4-(triflometyl)phenyl]-3-piperidincarboxamit; và
 (3*R*,4*S*)-*N*-(2,3-điflophenyl)-2-oxo-4-[3-(triflometyl)phenyl]-3-piperidincarboxamit.

11. Hợp chất có công thức:



trong đó: R¹ là Me; Q² là Ph(2-F); và Q¹ là Ph(3-CF₃).

12. Hợp chất có công thức:



trong đó R¹ là Me; Q² là Ph(2,3,4-tri-F); và Q¹ là Ph(4-CF₃).

13. Chế phẩm diệt cỏ chứa hợp chất theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 tới 12 và ít nhất một thành phần được chọn từ nhóm bao gồm chất hoạt động bề mặt, chất pha loãng dạng rắn và chất pha loãng dạng lỏng.

14. Chế phẩm diệt cỏ chứa hợp chất theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 tới 12, trong đó chế phẩm này còn chứa ít nhất một hoạt chất bổ sung được chọn từ nhóm bao gồm các chất diệt cỏ khác và chất an toàn diệt cỏ.

15. Hỗn hợp diệt cỏ chứa (a) hợp chất theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 tới 12, và (b) ít nhất một hoạt chất bổ sung được chọn từ (b1) chất ức chế hệ quang hợp II, (b2) chất ức chế synthaza của axit axetohydroxy (AHAS), (b3) chất ức chế axetyl-CoA carboxylaza (ACCaza), (b4) chất tựa auxin, và (b5) chất ức chế 5 enol-pyruvylshikimat-3-phosphat (EPSP) synthaza, (b6) chất làm chuyển hướng điện tử trong hệ quang hợp I, (b7) chất ức chế protoporphyrinogen oxidaza (PPO), (b8) chất ức chế glutamin synthetaza (GS), (b9) chất ức chế elongaza của axit béo mạch rất dài (VLCFA), (b10) chất ức chế vận chuyển auxin, (b11) chất ức chế phytoen desaturaza (PDS), (b12) chất ức chế 4-hydroxyphenyl pyruvat dioxyaza (HPPD), (b13) chất ức chế homogentisat solanesyltransferaza (HST), (b14) chất ức chế sinh tổng hợp xenluloza, (b15) chất diệt cỏ khác bao gồm chất phá vỡ quá trình nguyên phân, hợp chất arsen hữu cơ, asulam, bromobutit, xinmetylin, cumyluron, đazomet, đifenzoquat, đymron, etobenzanit, flurenol, fosamin, fosamin-amoni, metam, metylđymron, axit oleic, oxaziclomefon, axit pelargonic và pyributicarb, và (b16) chất an toàn diệt cỏ; và các muối của các hợp chất (b1) đến (b16).

16. Phương pháp ngăn ngừa sự sinh trưởng của thực vật không mong muốn bao gồm việc cho thực vật này hoặc môi trường của nó tiếp xúc với lượng có tác dụng diệt cỏ của hợp chất theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 tới 12.