



(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)



1-0030646

(51)⁷ C07C 323/22; C07D 493/08; C07D
309/32; C07D 311/96; A01N 35/06;
C07C 49/753

(13) B

(21) 1-2015-04589

(22) 29/05/2014

(86) PCT/EP2014/061207 29/05/2014

(87) WO 2014/191535 A1 04/12/2014

(30) 1309679.7 30/05/2013 GB; 1322855.6 23/12/2013 GB

(45) 25/01/2022 406

(43) 25/04/2016 337A

(73) Syngenta Limited (GB)

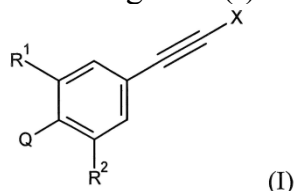
European Regional Centre, Priestley Road, Surrey Research Park, Guildford Surrey
GU2 7YH (GB)

(72) BLACK, Janice (GB); SCUTT, James, Nicholas (GB); WHALLEY, Louisa (GB);
WILLETS, Nigel, James (GB).

(74) Công ty TNHH Ban Ca (BANCA)

(54) HỢP CHẤT DION VÒNG ĐƯỢC THỂ (ALKYNYL-PHENYL) CÓ HOẠT TÍNH
DIỆT CỎ VÀ CÁC DẪN XUẤT CỦA CHÚNG, CHẾ PHẨM DIỆT CỎ CHỨA
HỢP CHẤT NÀY VÀ PHƯƠNG PHÁP KIỂM SOÁT CỎ ĐẠI MỘT LÁ MẦM

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



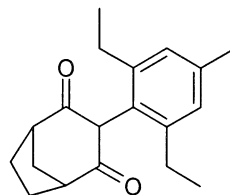
trong đó X, R¹, R² và Q như được xác định trong bản mô tả. Các hợp chất này thích hợp để sử dụng làm chất diệt cỏ. Ngoài ra, sáng chế còn đề cập đến chế phẩm diệt cỏ chứa hợp chất này và phương pháp kiểm soát cỏ dại một lá mầm ở cây trồng thuộc cây có ích, bao gồm việc bón hợp chất có công thức (I), hoặc chế phẩm diệt cỏ chứa hợp chất này, lên cỏ dại và/hoặc lên cây và/hoặc lên khu vực trồng của chúng.

Lĩnh vực kỹ thuật được đề cập

Sáng chế đề cập đến hợp chất dion vòng được thế (alkynyl-phenyl) có hoạt tính diệt cỏ, cụ thể là hợp chất pyrandion, thiopyrandion, piperidindion, xyclohexandion, xyclohexantrion hoặc xycloheptandion, cụ thể hơn là hợp chất dion vòng được thế (alkynyl-phenyl) và được bắc cầu alkandiyl như hợp chất pyrandion, thiopyrandion, piperidindion, xyclohexandion, xyclohexantrion hoặc xycloheptandion, và các dẫn xuất của chúng (ví dụ các dẫn xuất chất hỗ biến enol keton của chúng và/hoặc các dẫn xuất dung hợp và/hoặc hai vòng của chúng khi phù hợp), quy trình điều chế chúng, chế phẩm diệt cỏ chứa hợp chất này, và phương pháp kiểm soát cỏ như cỏ dại một lá mầm, đặc biệt là ở cây trồng thuộc cây có ích, hoặc trong việc ức chế sự phát triển của thực vật không mong muốn.

Tình trạng kỹ thuật của sáng chế

Tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 01/17972 A2 (Syngenta Participations AG) bộc lộ vòng cacbon hoặc dị vòng được thế (4-metyl-phenyl) (như được thế 4-metyl-2,6-dietyl-phenyl), cụ thể là dion vòng cacbon hoặc dị vòng, thích hợp để dùng làm chất diệt cỏ. Trong số nhiều hợp chất được bộc lộ cụ thể trong tài liệu công bố đơn



quốc tế số WO 01/17972 A2 là hợp chất 21.115 (), mà được bộc lộ ở trang 105 của tài liệu công bố đơn quốc tế này.

Tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 03/013249 A1 (Bayer AG) và tài liệu đơn tương đương số US 2005/0054535 A1 bộc lộ các chế phẩm diệt cỏ chọn lọc chứa (a) ketoenol vòng được thế bởi (phenyl được thế) và (b) hợp chất mà cải thiện tính tương hợp với cây trồng, cụ thể là cloquintoxet-mexyl hoặc mefenpyr-dietyl. Trong các tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 03/013249 A1 và US 2005/0054535 A1, ketoenol vòng (chất hỗ biến của nó là dion vòng) có thể cụ thể là dẫn xuất 3-(phenyl được thế)-pyrrolidin-2,4-dion, 3-(phenyl được thế)-tetrahydrofuran-2,4-dion, 3-(phenyl được thế)-pyran-2,4-dion, 2-(phenyl được thế)-xyclopentan-1,3-dion, hoặc 2-(phenyl được thế)-

xyclohexan-1,3-dion, và tương đương, hoặc dẫn xuất (ví dụ dẫn xuất este hoặc cacbonat) của các ketoenol vòng/dion vòng này.

Tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2007/068427 A2 (Bayer CropScience AG) và tài liệu đơn tương đương số US 2009/0227563 A1 bộc lộ chế phẩm chứa (a) ketoenol vòng được thế (phenyl được thế) làm chất diệt cỏ, và (b) muối amoni và/hoặc phosphoni để tăng cường hoạt tính. Trong các tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2007/068427 A2 và US 2009/0227563 A1, ketoenol vòng (chất hỗ biến của nó là dion vòng) có thể cụ thể là dẫn xuất 3-(phenyl được thế)-pyrrolidin-2,4-dion, 3-(phenyl được thế)-tetrahydrofuran-2,4-dion, 3-(phenyl được thế)-pyran-2,4-dion, 2-(phenyl được thế)-xyclopentan-1,3-dion, hoặc 2-(phenyl được thế)-xyclohexan-1,3-dion, 4-(phenyl được thế)-pyrazolidin-3,5-dion, và tương đương, hoặc dẫn xuất (ví dụ dẫn xuất este hoặc cacbonat) của các ketoenol vòng / dion vòng này.

Mỗi tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2008/071405 A1 và WO 2009/074314 A1 (cả hai của Syngenta Limited và Syngenta Participations AG) bộc lộ pyran-3,5-dion, thiopyran-3,5-dion và xyclohexan-1,3,5-trion có hoạt tính diệt cỏ, mỗi hợp chất được thế ở vị trí 4 của dion hoặc trion vòng bởi phenyl được thế aryl hoặc bởi phenyl được thế heteroaryl.

Mỗi tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2010/081755 A1 và WO 2010/089211 A1 (cả hai của Syngenta Limited) bộc lộ pyran-3,5-dion, thiopyran-3,5-dion, xyclohexandion, xycloheptandion và xyclohexantrion có hoạt tính diệt cỏ, mỗi hợp chất được thế bởi phenyl được thế aryloxy hoặc bởi phenyl được thế heteroaryloxy.

Tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2008/110308 A1 (Syngenta Participations AG) bộc lộ hợp chất và dẫn xuất 2-(phenyl được thế)-xyclohexan-1,3-dion, chứa nhóm thế $R^8-X-(CR^6R^7)_n$ - (trong đó X là O, S, S(O) hoặc S(O)₂), mà có thể là ví dụ spirocycle chứa X-nguyên tử khác loại, ở vị trí 5 của xyclohexan-1,3-dion, và có đặc tính diệt cỏ. Tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2010/081689 A2 (Bayer CropScience AG) bộc lộ sử dụng hợp chất hoặc dẫn xuất 2-(phenyl được thế)-5-[$R^8-X-(CR^6R^7)_n$]-xyclohexan-1,3-dion (tức là hợp chất chủ yếu như được bộc lộ trong tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2008/110308) làm chất diệt côn trùng và/hoặc chất diệt nhện và/hoặc chất diệt nấm.

Tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2008/110307 A1 (Syngenta Participations AG) bộc lộ hợp chất và dẫn xuất 2-(phenyl được thế)-5-(heteroxyclyl được liên kết cacbon)-xyclohexan-1,3-dion, và sử dụng chúng làm chất diệt cỏ. Tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2010/081687 A1 (Bayer CropScience AG) bộc lộ sử dụng hợp chất

hoặc dẫn xuất 2-(phenyl được thế)-5-(heteroxyclyl được liên kết cacbon)-xyclohexan-1,3-dion (tức là hợp chất chủ yếu như được bộc lộ trong tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2008/110307) làm chất diệt côn trùng và/hoặc chất diệt nhện và/hoặc chất diệt nấm.

Tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2010/046194 A1 (Syngenta Limited) bộc lộ các hợp chất 2-(phenyl được thế)-xyclohexan-1,3-dion và các dẫn xuất, chứa nhóm thế Q-CR⁶R⁷- ở vị trí 5 của xyclohexan-1,3-dion (trong đó Q là dị vòng bão hòa hoặc dị vòng đơn không bão hòa), và có đặc tính diệt cỏ.

Tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2008/145336 A1 và A8 (Syngenta Limited) bộc lộ hợp chất (được bắc cầu cacbon, ví dụ được bắc cầu alkandiyl) 1,3-dion hai vòng được thế phenyl có hoạt tính diệt cỏ, chẳng hạn như 3-(phenyl được thế)-bixyclo[3.2.1]octan-2,4-dion.

Hợp chất xyclopentan-1,3-dion được thế ở vị trí 2 bởi phenyl được thế và có hoạt tính diệt cỏ được mô tả, ví dụ, trong các tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2010/000773 A1, WO 2010/069834 A1, WO 2010/089210 A1, WO 2010/102848 A1 và WO 2011/007146 A1 (tất cả đều của Syngenta Limited và cộng sự). Ví dụ, tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2010/000773 A1 (Syngenta Limited) bộc lộ hợp chất 5-(heteroxyclylalkyl)-3-hydroxy-2-phenylxyclopent-2-en-1-on và một số dẫn xuất của chúng làm chất diệt cỏ. Tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2011/073060 A2 (Syngenta Participations AG) bộc lộ phương pháp diệt trừ và kiểm soát côn trùng, ve bét, giun tròn hoặc ốc sên bao gồm việc sử dụng hợp chất theo tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2010/000773. Ngoài ra, ví dụ, tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2010/069834 A1 (Syngenta Limited) bộc lộ xyclopentan-1,3-dion có cả nhóm thế heteroarylmetyl- và 2-(phenyl được thế) trên vòng xyclopentan, và các dẫn xuất của chúng chứa nhóm rời chuyển; các hợp chất này được bộc lộ là có đặc tính diệt cỏ. Các dẫn xuất hai vòng dung hợp và xyclopentandion bắc cầu oxy, đặc biệt là 10-oxatrixyclo-[5.2.1.0^{2,6}]dexan-3,5-dion và dẫn xuất, mà được thế bởi phenyl được thế và mà có hoạt tính diệt cỏ, được bộc lộ trong các tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2009/019005 A2 và WO 2009/019015 A1 (cả hai của Syngenta Limited). Các dẫn xuất phenyl-được thế bixyclooctan-1,3-dion, và sử dụng chúng làm các chất diệt loài gây hại và/hoặc chất diệt cỏ, được bộc lộ trong tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2010/040460 A2 (Bayer Cropscience AG).

Đơn PCT số PCT/EP2012/074118, nộp ngày 30/11/2012 và công bố ngày 6/6/2013 theo tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2013/079672 A1 (Syngenta Limited

và Syngenta Participations AG) bộc lộ một số hợp chất pyrrolidin dion dị vòng spiro được thể, có nhóm đầu alkynyl-phenyl-, có đặc tính diệt cỏ.

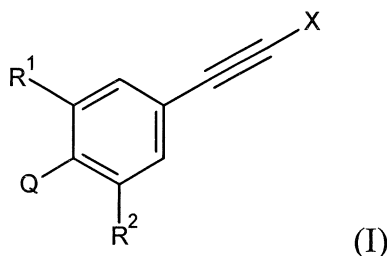
Đơn PCT số PCT/EP2012/074172, nộp ngày 30/11/2012 và được công bố ngày 6/6/2013 theo tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2013/079708 A1 (Syngenta Limited và Syngenta Participations AG) bộc lộ hợp chất và dẫn xuất xyclopentan-1,3-dion (ví dụ dẫn xuất dung hợp và/hoặc spiroxycyclic hai vòng) của chúng, mà được thể ở vị trí 2 của xyclopentan-1,3-dion bởi phenyl mà bản thân nó được thể ở vị trí 4 bởi (một cách đặc biệt) hoặc là prop-1-ynyl hoặc cloetynyl và ở vị trí 2 bởi (một cách đặc biệt) hoặc là metyl hoặc clo, và dẫn xuất của chất hỗ biến enol keton của xyclopentandion này, mà có hoạt tính diệt cỏ và/hoặc các đặc tính ức chế sự tăng trưởng của cây trồng, đặc biệt là trong việc kiểm soát cỏ dại một lá mầm và/hoặc khi được sử dụng sau khi nảy mầm.

Hợp chất alkandiyl xyclic 1,3-dion được bắc cầu (trong đó một cacbon trên vòng carbonyl được xác định là ở vị trí 1 của vòng / mạch vòng) và dẫn xuất (ví dụ dẫn xuất spiroxycyclic hai vòng) của chúng, mà được thể ở vị trí 2 của xyclic 1,3-dion bởi phenyl mà bản thân nó được thể ở vị trí 4 bởi (một cách đặc biệt) hoặc là prop-1-ynyl hoặc cloetynyl và ở vị trí 2 bởi (một cách đặc biệt) hoặc là flo hoặc brom, và dẫn xuất của chất hỗ biến enol keton của xyclic 1,3-dion này, mà có hoạt tính diệt cỏ và/hoặc các đặc tính ức chế sự tăng trưởng của cây trồng, đặc biệt là trong việc kiểm soát cỏ dại một lá mầm và/hoặc khi được sử dụng sau khi nảy mầm, nay đã được phát hiện, đều được bao hàm trong sáng chế.

Bản chất kỹ thuật của sáng chế

Mục đích của sáng chế là đề xuất hợp chất dion vòng được thể (alkynyl-phenyl) có hoạt tính diệt cỏ, cụ thể là hợp chất pyrandion, thiopyrandion, piperidindion, xyclohexandion, xyclohexantrion hoặc xycloheptandion, cụ thể hơn là hợp chất dion vòng được thể (alkynyl-phenyl) và được bắc cầu alkandiyl như hợp chất pyrandion, thiopyrandion, piperidindion, xyclohexandion, xyclohexantrion hoặc xycloheptandion, và các dẫn xuất của chúng (ví dụ các dẫn xuất chất hỗ biến enol keton của chúng và/hoặc các dẫn xuất dung hợp và/hoặc hai vòng của chúng khi phù hợp), quy trình điều chế chúng, chế phẩm diệt cỏ chứa hợp chất này, và phương pháp kiểm soát cỏ như cỏ dại một lá mầm, đặc biệt là ở cây trồng thuộc cây có ích, hoặc trong việc ức chế sự phát triển của thực vật không mong muốn.

Sáng chế trên cơ sở phát hiện rằng dion vòng có công thức chung (I)



trong đó:

X là metyl hoặc clo (ưu tiên là metyl);

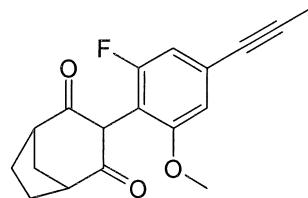
R¹ là flo hoặc brom (ưu tiên là flo);

R² là etynyl, C₁-C₃alkoxy-, C₁-C₃haloalkoxy-, hoặc C₁-C₃alkoxy-C₁-C₃alkoxy- (ưu tiên là -O-R^{2A}, trong đó R^{2A} là metyl, etyl, triflometyl, diflometyl, trifloetyl, hoặc -CH₂CH₂OCH₃; ưu tiên hơn là -O-R^{2A}, trong đó R^{2A} là metyl, etyl, triflometyl hoặc diflometyl); và

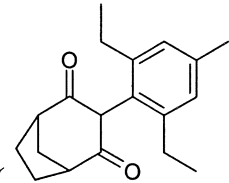
Q là pyran-3,5-dion-4-yl, thiopyran-3,5-dion-4-yl, piperidin-3,5-dion-4-yl, xyclohexan-1,3,5-trion-2-yl, xyclohexan-1,3-dion-2-yl, hoặc xycloheptan-1,3-dion-2-yl, trong đó mỗi dion vòng được bắc cầu bởi alkandiyl, cũng như các dẫn xuất của chúng (ví dụ dẫn xuất spiroxyclic, và/hoặc các dẫn xuất chất hỗ biến enol keton của chúng), cụ thể là trong đó Q là như được xác định thêm ở đây, là mới;

và rằng các hợp chất ví dụ A1, A2, A3, A4, A5, A6, A7, A8, P1, P2, P3, P4 và P5 trong công thức (I) và được bộc lộ ở đây thể hiện là chất diệt cỏ sau nảy mầm tiềm năng khi được dùng để chống cỏ dại (cụ thể là cỏ dại mọc khí hậu ẩm) cỏ dại một lá mầm, khi được sử dụng ở khoảng 250 và/hoặc 30g/ha sau nảy mầm (ví dụ như được thể hiện trong các ví dụ sinh học 1 và 2 dưới đây), hoặc, đối với các hợp chất ví dụ A1, A3, A4, A7, P1, P2 và P4, khi được sử dụng ở 8g/ha sau nảy mầm với một số hệ hỗ trợ nhất định (ví dụ xem ví dụ sinh học 3).

Cụ thể là, các kết quả ở ví dụ sinh học 1A dưới đây thể hiện rằng hợp chất A1, có công thức theo sáng chế (I), có gốc 2-flo-6-metoxi-4-(prop-1-ynyl)-phenyl được gắn vào bixyclo[3.2.1]octan-2,4-dion, là chất diệt cỏ tiềm năng hơn chống cỏ dại một lá mầm ALOMY (*Alopecurus myosuroides*) và ECHCG (*Echinochloa crus-galli*) hơn hợp chất B1, có gốc 2-flo-6-metoxi-4-etynyl-phenyl được gắn vào cùng bixyclo[3.2.1]octan-2,4-dion, khi được áp dụng sau khi nảy mầm ở 30 và 8g/ha theo điều kiện quy định ở ví dụ sinh học 1A.



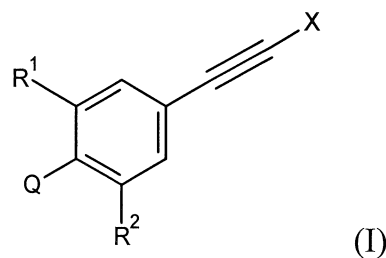
Hơn nữa, cụ thể là, hợp chất A1 (), có công thức (I) theo sáng chế, xuất hiện từ quan sát đầu tiên là có hoạt tính sau nảy mầm cao hơn ở 30g/ha chống cỏ dại một lá mầm LOLPE (*Lolium perenne*), POAAN (*Poa annua*), BROTE (*Bromus tectorum*) và SORVU (*Sorghum bicolor* (L.) Moench ssp. *Bicolor*, hoặc



Sorghum vulgare Pers.), so với hoạt tính của hợp chất so sánh X10 (), được bộc lộ là hợp chất 21.115 ở trang 105 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 01/17972 A2 (ví dụ xem ví dụ sinh học 2 dưới đây, và lưu ý ở cuối bảng kết quả hoạt tính diệt cỏ sau nảy mầm của nó).

Tương tự, các hợp chất ví dụ A1, A2, A7, P1, P2, P3, P4 và P5 có công thức (I) theo sáng chế, ví dụ khi được sử dụng ở 30g/ha sau nảy mầm thể hiện tính độc đối với thực vật thấp hoặc thấp đáng kể đối với một số cây hai lá mầm nhất định, cụ thể là đậu nành và/hoặc củ cải đường (ví dụ xem ví dụ sinh học 2 dưới đây); ngoài ra xem ví dụ sinh học 3 đối với tính độc đối với thực vật thấp của một số hợp chất ví dụ bao gồm A1, A3, A4, A7, P1, P2 và P4 trên đậu nành. Cuối cùng, các hợp chất A1, A2, A7, P1 và P5 có công thức (I) theo sáng chế thể hiện tính độc đối với thực vật trung bình hoặc thấp đáng kể đối với lúa mì so với hoạt tính diệt cỏ (thường cao hơn) của chúng (tính độc đối với thực vật) chống cỏ dại một lá mầm khí hậu ẩm, ví dụ khi được sử dụng sau khi nảy mầm (ví dụ xem ví dụ sinh học 2 dưới đây).

Để đạt được mục đích trên đây, theo một khía cạnh, sáng chế đề xuất hợp chất có công thức (I)



trong đó:

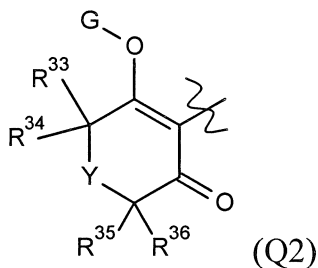
X là methyl hoặc clo;

R¹ là flo hoặc brom;

R² là etynyl, C₁-C₃alkoxy-, C₁-C₃haloalkoxy- (cụ thể là C₁-C₃floalkoxy-), hoặc

C₁-C₃alkoxy-C₁-C₃alkoxy-;

và Q là nhóm có công thức Q2:



trong đó trong Q2:

R³³ và R³⁶, độc lập với nhau, là hydro, C₁-C₅alkyl (cụ thể là C₁-C₄alkyl, ví dụ C₁-C₂alkyl), C₂-C₄ alkenyl (cụ thể là C₂-C₃alkenyl-CH₂-, ví dụ ethenyl-CH₂-), C₂-C₄ alkynyl (cụ thể là C₂-C₃alkynyl-CH₂-, ví dụ etynyl-CH₂-), C₁-C₂floalkyl, C₁-C₃alkoxyC₁-C₃alkyl, C₁-C₃alkylthioC₁-C₃alkyl, C₁-C₃alkylsulfinylC₁-C₃alkyl, C₁-C₃alkylsulfonylC₁-C₃alkyl; C₃-C₄xcycloalkyl (cụ thể là xyclopropyl); hoặc heteroxyclyl đơn vòng có 4, 5 hoặc 6 (ví dụ 4 hoặc 5) cạnh không được thể có một nguyên tử khác loại trên vòng độc lập được chọn từ oxy, lưu huỳnh và nitơ, heteroxyclyl này được gắn ở nguyên tử cacbon trên vòng trong heteroxyclyl (cụ thể là tetrahydrofuranyl như tetrahydrofuran-3-yl, hoặc tetrahydropyranyl như tetrahydropyran-4-yl);

với điều kiện là không nhiều hơn một (cụ thể là không có) trong số R³³ và R³⁶ là alkenyl, alkynyl, alkoxyalkyl, alkylthioalkyl, alkylsulfinylalkyl, alkylsulfonylalkyl, xcycloalkyl hoặc heteroxyclyl; và

R³⁴ và R³⁵ đều là -(CH₂)_{n34}- hoặc -(CH₂)_{n35}-C(R^{37a})(R^{37b})-(CH₂)_{n36}-;

trong đó R^{37a} là C₁-C₂alkyl; R^{37b} là hydro hoặc C₁-C₂alkyl;

n₃₄ là 1, 2 hoặc 3; và

n₃₅ và n₃₆ độc lập là 0, 1 hoặc 2 với điều kiện là n₃₅ + n₃₆ là 0, 1 hoặc 2; và

Y là O, S, S(O), S(O)₂, N(C₁-C₂alkyl), N(C₁-C₂alkoxy), C(O), CR³⁸R³⁹ hoặc -CR³¹⁰R³¹¹CR³¹²R³¹³-; và

R³⁸ và R³⁹ độc lập với nhau là hydro, C₁-C₆alkyl (cụ thể là C₁-C₄alkyl, ví dụ C₁-C₂alkyl), C₂-C₄alkenyl (cụ thể là C₂-C₃alkenyl-CH₂-, ví dụ ethenyl-CH₂-), C₂-C₄alkynyl (cụ thể là C₂-C₃alkynyl-CH₂-, ví dụ etynyl-CH₂-), C₁-C₂floalkyl, C₁-C₃alkoxyC₁-C₃alkyl, C₁-C₃alkylthioC₁-C₃alkyl, C₁-C₃alkylsulfinylC₁-C₃alkyl, hoặc C₁-C₃alkylsulfonylC₁-C₃alkyl; C₃-C₆xcycloalkyl hoặc C₃-C₆xcycloalkyl được thể bởi một hoặc hai nhóm thế mà độc lập là C₁-C₃alkyl (cụ thể là metyl hoặc etyl) hoặc C₁-C₂floalkyl, và trong đó một gốc CH₂ trên vòng của C₄-C₆xcycloalkyl tùy ý (ví dụ ưu tiên là) được thay thế bởi nguyên tử oxy hoặc lưu huỳnh hoặc bởi gốc S(O), S(O)₂,

NH, N(C₁-C₃alkyl), N(C₁-C₂floalkyl), N[C(O)C₁-C₃alkyl], N[C(O)C₁-C₂floalkyl] hoặc N(C₁-C₂alkoxy);

C₃-C₆xycloalkyl được thế bởi một nhóm thế là C₁-C₃alkoxy (cụ thể là C₁-C₂alkoxy) và tùy ý còn được thế bởi một nhóm thế là C₁-C₂alkyl (cụ thể là metyl); các nhóm thế C₅-C₆xycloalkenyl hoặc C₅-C₆xycloalkenyl được thế bởi một hoặc hai C₁-C₃alkyl (cụ thể là metyl); C₃-C₆xycloalkylC₁-C₂alkyl- (cụ thể là C₃-C₆xycloalkylmetyl-) hoặc C₃-C₆xycloalkylC₁-C₂alkyl- (cụ thể là C₃-C₆xycloalkylmetyl-) được thế bởi một hoặc hai nhóm thế trên vòng mà độc lập là C₁-C₃alkyl hoặc C₁-C₂floalkyl, và trong đó một gốc CH₂ trên vòng của C₄-C₆xycloalkylC₁-C₂alkyl- (cụ thể là C₄-C₆xycloalkylmetyl-) tùy ý (ví dụ ưu tiên là) được thay thế bởi nguyên tử oxy hoặc lưu huỳnh hoặc bởi gốc S(O), S(O)₂, NH, N(C₁-C₂alkyl), N(C₁-C₂floalkyl), N[C(O)C₁-C₃alkyl], N[C(O)C₁-C₂floalkyl] hoặc N(C₁-C₂alkoxy); C₃-C₆xycloalkylC₁-C₂alkyl- (cụ thể là C₃-C₆xycloalkylmetyl-) được thế bởi một nhóm thế trên vòng là C₁-C₃alkoxy (cụ thể là C₁-C₂alkoxy) và tùy ý còn được thế bởi một nhóm thế trên vòng là C₁-C₂alkyl (cụ thể là metyl); hoặc HetA hoặc HetA-CH₂-;

trong đó HetA là heteroaryl, được gắn ở cacbon trên vòng, mà tùy ý được thế bởi 1, 2 hoặc 3 (cụ thể là 1 hoặc 2, ví dụ 1) nhóm thế cacbon trên vòng độc lập là C₁-C₃alkyl, C₁-C₂floalkyl, C₁-C₃alkyl-C(O)-, C₁-C₂floalkyl-C(O)-, -C(O)-N(R^{6H})(R^{6J}), SR^{6E}, S(O)R^{6E}, -S(O)₂-R^{6E}, -N(R^{6F})(R^{6G}), hydroxy, C₂-C₃alkenyl, -C(R^{6BB})=C(R^{6C1})(R^{6C2}), C₂-C₃alkynyl, -C≡C-R^{6AA}, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₂floalkoxy, xyclopropyloxy, CH₂=CH-CH₂-O-, HC≡C-CH₂-O-, halogen, xyano hoặc nitro; và/hoặc, trong trường hợp vòng heteroaryl có 5 cạnh chứa nguyên tử nitơ trên vòng không cùng trong liên kết đôi trên vòng C=N, heteroaryl tùy ý được thế trên nguyên tử nitơ của vòng không cùng trong liên kết đôi trên vòng C=N bởi một nhóm thế C₁-C₃alkyl, C₁-C₂floalkyl, C₁-C₃alkyl-C(O)-, C₁-C₂floalkyl-C(O)- hoặc C₁-C₂alkyl-S(O)₂;

với điều kiện là không nhiều hơn một trong số R³⁸ và R³⁹ là xycloalkyl được thế tùy ý; xycloalkyl được thế tùy ý trong đó một gốc CH₂ trên vòng được thay thế bởi nguyên tử oxy hoặc lưu huỳnh hoặc bởi gốc S(O), S(O)₂, NH, N(C₁-C₃alkyl), N(C₁-C₂floalkyl), N[C(O)C₁-C₃alkyl], N[C(O)C₁-C₂floalkyl] hoặc N(C₁-C₂alkoxy); xycloalkenyl được thế tùy ý; xycloalkyl được thế tùy ý alkyl; xycloalkyl được thế tùy ý alkyl trong đó một gốc CH₂ trên vòng được thay thế bởi nguyên tử oxy hoặc lưu huỳnh hoặc bởi gốc S(O), S(O)₂, NH, , N(C₁-C₂alkyl), N(C₁-C₂floalkyl), N[C(O)C₁-C₃alkyl], N[C(O)C₁-C₂floalkyl] hoặc N(C₁-C₂alkoxy); hoặc HetA hoặc HetA-CH₂-;

hoặc R^{38} là hydro hoặc C_1 - C_2 alkyl (cụ thể là H hoặc Me), và R^{39} là C_1 - C_2 alkoxy (cụ thể là metoxy);

hoặc R^{38} và R^{39} đều là $-(CH_2)_{n37}-$ hoặc $-(CH_2)_{n38}-X^{32}-(CH_2)_{n39}-$;

trong đó X^{32} là O, S, S(O), S(O)₂, NH, N(C_1 - C_3 alkyl), N(C_1 - C_2 floalkyl), N[C(O) C_1 - C_3 alkyl], N[C(O) C_1 - C_2 floalkyl], N(C_1 - C_2 alkoxy), C(H)(C_1 - C_3 alkyl), C(C_1 - C_2 alkyl)₂ hoặc C(H)(C_1 - C_3 alkoxy);

$n37$ là 2, 3, 4, 5 hoặc 6 (cụ thể là 4 hoặc 5); và

$n38$ và $n39$ độc lập là 0, 1, 2 hoặc 3 với điều kiện là $n38 + n39$ là 2, 3, 4 hoặc 5 (cụ thể là 3 hoặc 4); và

R^{310} , R^{311} , R^{312} và R^{313} độc lập với nhau là hydro hoặc C_1 - C_4 alkyl (cụ thể là C_1 - C_2 alkyl) với điều kiện là không nhiều hơn một trong số R^{310} , R^{311} , R^{312} và R^{313} là C_3 - C_4 alkyl;

và trong đó:

R^{6AA} là C_1 floalkyl (ưu tiên là triflometyl), flo, clo hoặc brom;

R^{6BB} , R^{6C1} và R^{6C2} độc lập là hydro, metyl, C_1 floalkyl (ưu tiên là triflometyl), flo hoặc clo; với điều kiện là R^{6BB} , R^{6C1} và R^{6C2} tổng số chứa không nhiều hơn một nguyên tử cacbon, và R^{6BB} , R^{6C1} và R^{6C2} tổng số bao gồm không nhiều hơn một clo; và với điều kiện là $-C(R^{6BB})=C(R^{6C1})(R^{6C2})$ không phải là C_2 - C_3 alkenyl; và

R^{6E} là C_1 - C_3 alkyl (ưu tiên là C_1 - C_2 alkyl chẳng hạn như metyl), C_1 floalkyl (ưu tiên là triflometyl), hoặc $-N(R^{6H})(R^{6J})$;

R^{6F} là $-C(O)-C_1$ - C_2 alkyl (ưu tiên là $-C(O)$ -metyl), $-C(O)-C_1$ floalkyl (ưu tiên là $-C(O)$ -triflometyl), $-S(O)_2-C_1$ - C_2 alkyl (ưu tiên là $-S(O)_2$ -metyl), $-S(O)_2-C_1$ floalkyl (ưu tiên là $-S(O)_2$ -triflometyl), C_1 - C_2 alkyl (ưu tiên là metyl), hoặc C_1 floalkyl (ưu tiên là triflometyl);

R^{6G} và R^{6J} độc lập là hydro, metyl hoặc C_1 floalkyl (ưu tiên là triflometyl); và

R^{6H} là hydro, C_1 - C_2 alkyl (ưu tiên là metyl), hoặc C_1 floalkyl (ưu tiên là triflometyl); và
và trong đó trong Q2:

G là hydro; kim loại nông nghiệp, hoặc nhóm sulfoni hoặc amoni nông nghiệp; hoặc

G là $-C(X^a)-R^a$, $-C(X^b)-X^c-R^b$, $-C(X^d)-N(R^e)-R^d$, $-SO_2-R^e$, $-P(X^e)(R^f)-R^g$, $-CH_2-X^f-R^h$; hoặc phenyl- CH_2 - hoặc phenyl- $CH(C_1-C_2$ alkyl)- (ở mỗi nhóm phenyl tùy ý được thế bởi 1, 2 hoặc 3, một cách độc lập, C_1 - C_2 alkyl, C_1 floalkyl, C_1 - C_2 alkoxy, C_1 floalkoxy, flo, clo, brom, xyano hoặc nitro), hoặc heteroaryl- CH_2 - hoặc heteroaryl- $CH(C_1-C_2$ alkyl)- (ở mỗi nhóm heteroaryl này tùy ý được thế bởi 1, 2 hoặc 3, một cách độc lập, C_1 - C_2 alkyl, C_1 floalkyl, C_1 - C_2 alkoxy, C_1 floalkoxy, flo, clo, brom, xyano hoặc nitro),

hoặc phenyl-C(O)-CH₂- (trong đó phenyl tùy ý được thế bởi 1, 2 hoặc 3, một cách độc lập, C₁-C₂alkyl, C₁floalkyl, C₁-C₂alkoxy, C₁floalkoxy, flo, clo, brom, xyano hoặc nitro); hoặc C₁-C₆alkoxy-C(O)-CH₂-, C₁-C₆alkoxy-C(O)-CH=CH-, C₂-C₇alken-1-yl-CH₂-, C₂-C₇alken-1-yl-CH(C₁-C₂alkyl)-, C₂-C₄floalken-1-yl-CH₂-, C₂-C₇alkyn-1-yl-CH₂-, hoặc C₂-C₇alkyn-1-yl-CH(C₁-C₂alkyl)-;

trong đó X^a, X^b, X^c, X^d, X^e và X^f độc lập với nhau là oxy hoặc lưu huỳnh (cụ thể là oxy); và trong đó

R^a là H, C₁-C₂₁alkyl, C₂-C₂₁alkenyl, C₂-C₁₈alkynyl, C₁-C₁₀floalkyl, C₁-C₁₀xyanoalkyl, C₁-C₁₀nitroalkyl, C₁-C₁₀aminoalkyl, C₁-C₅alkylamino(C₁-C₅)alkyl, C₂-C₈dialkylamino(C₁-C₅)alkyl, C₃-C₇xycloalkyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkoxy(C₁-C₅)alkyl, C₃-C₅alkenyloxy(C₁-C₅)alkyl, C₃-C₅alkynyloxy(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylthio(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylsulfinyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylsulfonyl(C₁-C₅)alkyl, C₂-C₈alkylidenaminoxy(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylcarbonyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkoxycarbonyl(C₁-C₅)alkyl, aminocarbonyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylaminocarbonyl(C₁-C₅)alkyl, C₂-C₈dialkylaminocarbonyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylcarbonylamino(C₁-C₅)alkyl, N-(C₁-C₅)alkylcarbonyl-N-(C₁-C₅)alkylamino(C₁-C₅)alkyl, C₃-C₆trialkylsilyl(C₁-C₅)alkyl, phenyl(C₁-C₅)alkyl (trong đó phenyl tùy ý được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano, hoặc nitro), heteroaryl(C₁-C₅)alkyl (trong đó heteroaryl tùy ý được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano, hoặc nitro), C₂-C₅floalkenyl, C₃-C₈xycloalkyl; phenyl hoặc phenyl được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; hoặc heteroaryl hoặc heteroaryl được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; R^b là C₁-C₁₈alkyl, C₃-C₁₈alkenyl, C₃-C₁₈alkynyl, C₂-C₁₀floalkyl, C₁-C₁₀xyanoalkyl, C₁-C₁₀nitroalkyl, C₂-C₁₀aminoalkyl, C₁-C₅alkylamino(C₁-C₅)alkyl, C₂-C₈dialkylamino(C₁-C₅)alkyl, C₃-C₇xycloalkyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkoxy(C₁-C₅)alkyl, C₃-C₅alkenyloxy(C₁-C₅)alkyl, C₃-C₅alkynyloxy(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylthio(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylsulfinyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylsulfonyl(C₁-C₅)alkyl, C₂-C₈alkylidenaminoxy(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylcarbonyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkoxycarbonyl(C₁-C₅)alkyl, aminocarbonyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylaminocarbonyl(C₁-C₅)alkyl, C₂-C₈dialkylaminocarbonyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-

C₅alkylcarbonylamino(C₁-C₅)alkyl, N-(C₁-C₅)alkylcarbonyl-N-(C₁-C₅)alkylamino(C₁-C₅)alkyl, C₃-C₆trialkylsilyl(C₁-C₅)alkyl, phenyl(C₁-C₅)alkyl (trong đó phenyl tùy ý được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano, hoặc nitro), heteroaryl(C₁-C₅)alkyl (trong đó heteroaryl tùy ý được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano, hoặc nitro), C₃-C₅floalkenyl, C₃-C₈xycloalkyl; phenyl hoặc phenyl được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; hoặc heteroaryl hoặc heteroaryl được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; và

mỗi R^c và R^d độc lập với nhau là hydro, C₁-C₁₀alkyl, C₃-C₁₀alkenyl, C₃-C₁₀alkynyl, C₂-C₁₀floalkyl, C₁-C₁₀xyanoalkyl, C₁-C₁₀nitroalkyl, C₁-C₁₀aminoalkyl, C₁-C₅alkylamino(C₁-C₅)alkyl, C₂-C₈dialkylamino(C₁-C₅)alkyl, C₃-C₇xycloalkyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkoxy(C₁-C₅)alkyl, C₃-C₅alkenyloxy(C₁-C₅)alkyl, C₃-C₅alkynyloxy(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylthio(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylsulfinyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylsulfonyl(C₁-C₅)alkyl, C₂-C₈alkylidenaminoxy(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylcarbonyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkoxycarbonyl(C₁-C₅)alkyl, aminocarbonyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylaminocarbonyl(C₁-C₅)alkyl, C₂-C₈dialkylaminocarbonyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylcarbonylamino(C₁-C₅)alkyl, N-(C₁-C₅)alkylcarbonyl-N-(C₂-C₅)alkylaminoalkyl, C₃-C₆trialkylsilyl(C₁-C₅)alkyl, phenyl(C₁-C₅)alkyl (trong đó phenyl tùy ý được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano, hoặc nitro), heteroaryl(C₁-C₅)alkyl (trong đó heteroaryl tùy ý được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano, hoặc nitro), C₂-C₅floalkenyl, C₃-C₈xycloalkyl; phenyl hoặc phenyl được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; heteroaryl hoặc heteroaryl được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; heteroarylamino hoặc heteroarylamino được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; diheteroarylamino hoặc diheteroarylamino được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong

số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; phenylamino hoặc phenylamino được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc bởi nitro; diphenylamino hoặc diphenylamino được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; hoặc C₃-C₇xycloalkylamino, di(C₃-C₇xycloalkyl)amino hoặc C₃-C₇xycloalkoxy; hoặc R^c và R^d, cùng với nitơ mà chúng liên kết với, tạo thành vòng có 4, 5, 6 hoặc 7 (ví dụ 5 hoặc 6) cạnh không được thế, tùy ý chứa một nguyên tử khác loại được chọn từ O hoặc S; và

R^e là C₁-C₁₀alkyl, C₂-C₁₀alkenyl, C₂-C₁₀alkynyl, C₁-C₁₀floalkyl, C₁-C₁₀xyanoalkyl, C₁-C₁₀nitroalkyl, C₁-C₁₀aminoalkyl, C₁-C₅alkylamino(C₁-C₅)alkyl, C₂-C₈dialkylamino(C₁-C₅)alkyl, C₃-C₇xycloalkyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkoxy(C₁-C₅)alkyl, C₃-C₅alkenyloxy(C₁-C₅)alkyl, C₃-C₅alkynyloxy(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylthio(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylsulfinyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylsulfonyl(C₁-C₅)alkyl, C₂-C₈alkylidenaminoxy(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylcarbonyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkoxycarbonyl(C₁-C₅)alkyl, aminocarbonyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylaminocarbonyl(C₁-C₅)alkyl, C₂-C₈dialkylaminocarbonyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylcarbonylamino(C₁-C₅)alkyl, N-(C₁-C₅)alkylcarbonyl-N-(C₁-C₅)alkylamino(C₁-C₅)alkyl, C₃-C₆trialkylsilyl(C₁-C₅)alkyl, phenyl(C₁-C₅)alkyl (trong đó phenyl tùy ý được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano, hoặc nitro), heteroaryl(C₁-C₅)alkyl (trong đó heteroaryl tùy ý được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano, hoặc nitro), C₂-C₅floalkenyl, C₃-C₈xycloalkyl; phenyl hoặc phenyl được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; heteroaryl hoặc heteroaryl được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; heteroarylamino hoặc heteroarylamino được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; diheteroarylamino hoặc diheteroarylamino được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; phenylamino hoặc phenylamino được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro;

diphenylamino hoặc diphenylamino được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; hoặc C₃-C₇xycloalkylamino, di(C₃-C₇xycloalkyl)amino, C₃-C₇xycloalkoxy, C₁-C₁₀alkoxy, C₁-C₁₀floalkoxy, C₁-C₅alkylamino hoặc di(C₁-C₄alkyl)amino;

mỗi R^f và R^g độc lập với nhau là C₁-C₁₀alkyl, C₂-C₁₀alkenyl, C₂-C₁₀alkynyl, C₁-C₁₀alkoxy, C₁-C₁₀floalkyl, C₁-C₁₀xyanoalkyl, C₁-C₁₀nitroalkyl, C₁-C₁₀aminoalkyl, C₁-C₅alkylamino(C₁-C₅)alkyl, C₂-C₈dialkylamino(C₁-C₅)alkyl, C₃-C₇xycloalkyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkoxy(C₁-C₅)alkyl, C₃-C₅alkenyloxy(C₁-C₅)alkyl, C₃-C₅alkynyloxy(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylthio(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylsulfinyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylsulfonyl(C₁-C₅)alkyl, C₂-C₈alkylidenaminoxy(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylcarbonyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkoxycarbonyl(C₁-C₅)alkyl, aminocarbonyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylaminocarbonyl(C₁-C₅)alkyl, C₂-C₈dialkylaminocarbonyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylcarbonylamino(C₁-C₅)alkyl, N-(C₁-C₅)alkylcarbonyl-N-(C₂-C₅)alkylaminoalkyl, C₃-C₆trialkylsilyl(C₁-C₅)alkyl, phenyl(C₁-C₅)alkyl (trong đó phenyl tùy ý được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano, hoặc nitro), heteroaryl(C₁-C₅)alkyl (trong đó heteroaryl tùy ý được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano, hoặc nitro), C₂-C₅floalkenyl, C₃-C₈xycloalkyl; phenyl hoặc phenyl được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; heteroaryl hoặc heteroaryl được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; heteroarylamino hoặc heteroarylamino được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; diheteroarylamino hoặc diheteroarylamino được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; phenylamino hoặc phenylamino được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; diphenylamino hoặc diphenylamino được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; hoặc C₃-C₇xycloalkylamino, di(C₃-C₇xycloalkyl)amino, C₃-C₇xycloalkoxy, C₁-C₁₀floalkoxy, C₁-C₅alkylamino hoặc di(C₁-C₄alkyl)amino; hoặc benzyloxy hoặc phenoxy, trong đó nhóm benzyl và phenyl đến lượt mình tùy ý được thế bởi 1, 2 hoặc

3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; và

R^h là C₁-C₁₀alkyl, C₃-C₁₀alkenyl, C₃-C₁₀alkynyl, C₁-C₁₀floalkyl, C₁-C₁₀xyanoalkyl, C₁-C₁₀nitroalkyl, C₂-C₁₀aminoalkyl, C₁-C₅alkylamino(C₁-C₅)alkyl, C₂-C₈dialkylamino(C₁-C₅)alkyl, C₃-C₇xycloalkyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkoxy(C₁-C₅)alkyl, C₃-C₅alkenyloxy(C₁-C₅)alkyl, C₃-C₅alkynyloxy(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylthio(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylsulfinyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylsulfonyl(C₁-C₅)alkyl, C₂-C₈alkylidenaminoxy(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylcarbonyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkoxycarbonyl(C₁-C₅)alkyl, aminocarbonyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylaminocarbonyl(C₁-C₅)alkyl, C₂-C₈dialkylaminocarbonyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylcarbonylamino(C₁-C₅)alkyl, N-(C₁-C₅)alkylcarbonyl-N-(C₁-C₅)alkylamino(C₁-C₅)alkyl, C₃-C₆trialkylsilyl(C₁-C₅)alkyl, phenyl(C₁-C₅)alkyl (trong đó phenyl tùy ý được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano hoặc nitro), heteroaryl(C₁-C₅)alkyl (trong đó heteroaryl tùy ý được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano hoặc nitro), phenoxy(C₁-C₅)alkyl (trong đó phenyl tùy ý được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano hoặc nitro), heteroaryloxy(C₁-C₅)alkyl (trong đó heteroaryl tùy ý được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano hoặc nitro), C₃-C₅floalkenyl, C₃-C₈xycloalkyl; phenyl hoặc phenyl được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; heteroaryl hoặc heteroaryl được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; C₁-C₆alkyl-C(O)-; hoặc phenyl-C(O)- trong đó phenyl tùy ý được thế bởi 1 hoặc 2 trong số, độc lập là, C₁-C₂alkyl, C₁floalkyl, C₁-C₂alkoxy, C₁floalkoxy, flo, clo, brom, xyano hoặc nitro;

và trong đó "heteroaryl" nghĩa là hệ vòng thơm chứa ít nhất một nguyên tử khác loại trên vòng và gồm hoặc là vòng đơn hoặc hai vòng dung hợp;

và trong đó hợp chất có công thức (I) tùy ý có mặt (ví dụ khi có thể về mặt hóa học) là muối nông hóa học của chúng.

Mô tả chi tiết sáng chế

Theo định nghĩa nhóm thế của các hợp chất có công thức I, mỗi gốc alkyl riêng rẽ hoặc dưới dạng một phần của nhóm lớn hơn (như alkoxy, alkylthio, alkoxycarbonyl, alkylcarbonyl, alkylaminocarbonyl, hoặc dialkylaminocarbonyl, và các nhóm tương tự) có thể là mạch thẳng hoặc mạch nhánh. Phổ biến là, alkyl là, ví dụ, metyl, etyl, n-propyl, isopropyl, n-butyl, sec-butyl, isobutyl, tert-butyl, n-pentyl, neopentyl, hoặc n-hexyl. Nhóm alkyl có thể là ví dụ nhóm C₁-C₆alkyl (trừ khi đã được xác định hẹp hơn), nhưng ưu tiên là nhóm C₁-C₄alkyl hoặc C₁-C₃alkyl (trừ khi đã được xác định hẹp hơn), và, ưu tiên hơn là, nhóm C₁-C₂alkyl như metyl.

Các gốc alkenyl và alkynyl có thể ở dạng mạch nhánh hoặc mạch thẳng, và các gốc alkenyl, khi thích hợp, có thể có cấu hình (E)- hoặc (Z)-. Alkenyl hoặc alkynyl phổ biến là C₂-C₃alkenyl hoặc C₂-C₃alkynyl như vinyl, allyl, etynyl, propargyl hoặc prop-1-ynyl. Các gốc alkenyl và alkynyl có thể chứa một hoặc nhiều liên kết đôi và/hoặc ba ở dạng kết hợp bất kỳ; nhưng tốt hơn là chỉ chứa một liên kết đôi (đối với alkenyl) hoặc chỉ chứa một liên kết ba (đối với alkynyl).

Halogen là flo, clo, brom hoặc iot. Các halogen ưu tiên là flo, clo hoặc brom.

Các nhóm floalkyl là các nhóm alkyl mà được thế bởi một hoặc nhiều (ví dụ, 1, 2, 3, 4 hoặc 5; cụ thể là 1, 2 hoặc 3; ví dụ, 1 hoặc 2) nguyên tử flo. Floalkyl phổ biến là C₁-C₃floalkyl hoặc C₁-C₂floalkyl (tốt hơn là C₁floalkyl), như CF₃, CHF₂, CH₂F, CH₃CHF-, CF₃CH₂-, CHF₂CH₂-, CH₂FCH₂-, CHF₂CF₂- hoặc (CH₃)₂CF-. Floalkoxy phổ biến là C₁-C₃floalkoxy hoặc C₁-C₂floalkoxy (tốt hơn là C₁floalkoxy), như CF₃O, CHF₂O, CH₂FO, CH₃CHFO-, CF₃CH₂O-, CHF₂CH₂O- hoặc CH₂FCH₂O-.

Trong ngữ cảnh của bản mô tả này, thuật ngữ "aryl" nghĩa là phenyl hoặc naphthyl. Nhóm aryl được ưu tiên là phenyl.

Thuật ngữ "heteroaryl" như được sử dụng ở đây nghĩa là hệ vòng thơm chứa ít nhất một nguyên tử khác loại trên vòng và gồm có một vòng hoặc hai vòng ngưng tụ. Ưu tiên là, các vòng heteroaryl đơn sẽ chứa 1, 2 hoặc 3 nguyên tử khác loại trên vòng và/hoặc hệ heteroaryl hai vòng sẽ chứa 1, 2, 3 hoặc 4 nguyên tử khác loại trên vòng, mỗi nguyên tử trong đó sẽ ưu tiên là được chọn từ nitơ, oxy và lưu huỳnh. Phổ biến là, "heteroaryl" là furyl, thienyl, pyrolyl, pyrazolyl, imidazolyl, 1,2,3-triazolyl, 1,2,4-triazolyl, oxazolyl, isoxazolyl, thiazolyl, isothiazolyl, 1,2,4-oxadiazolyl, 1,3,4-oxadiazolyl, 1,2,5-oxadiazolyl, 1,2,3-thiadiazolyl, 1,2,4-thiadiazolyl, 1,3,4-thiadiazolyl, 1,2,5-thiadiazolyl, pyridyl, pyrimidinyl, pyridazinyl, pyrazinyl, 1,2,3-triazinyl, 1,2,4-triazinyl, 1,3,5-triazinyl, benzofuryl, benzisofuryl, benzothienyl,

benzisoethienyl, indolyl, isoindolyl, indazolyl, benzothiazolyl, benzisothiazolyl, benzoxazolyl, benzisoxazolyl, benzimidazolyl, 2,1,3-benzoxadiazol, quinolyl, isoquinolyl, cinnolyl, phthalazyl, quinazolyl, quinoxalyl, naphthyridyl, benzotriazinyl, purinyl, pteridinyl hoặc indolizyl; tùy ý có mặt, nếu có thể về mặt hóa học, dưới dạng muối nông hóa học của nó.

Thuật ngữ “heterocyclyl” như được sử dụng ở đây, trừ khi có quy định ngược lại rõ ràng, nghĩa là vòng đơn hữu cơ có 4, 5, 6 hoặc 7 (cụ thể là 5, 6 hoặc 7) cạnh hoặc hệ vòng đôi hữu cơ có 8, 9, 10 hoặc 11 (cụ thể là 8, 9 hoặc 10) cạnh, mà bảo hòa toàn phần, và mà có một hoặc hai (tốt hơn là một) nguyên tử khác loại trên vòng độc lập được chọn từ oxy, lưu huỳnh và nitơ. Nếu heterocyclyl có hai nguyên tử khác loại trên vòng, tốt hơn là, hai nguyên tử khác loại trên vòng này được tách nhau bởi ít nhất hai nguyên tử cacbon trên vòng. Tốt hơn là, heterocyclyl được gắn ở nguyên tử cacbon trên vòng trong heterocyclyl. Cụ thể là, heterocyclyl có thể là tetrahydrofuranyl, tetrahydropyranyl, tetrahydrothiophenyl, 1,4-dioxanyl, 1,4-dithianyl, morpholyl, thiomorpholyl, pyrrolidyl, piperidyl hoặc piperazinyl; đặc biệt là tetrahydrofuranyl (ví dụ, tetrahydrofuran-2-yl hoặc đặc biệt là tetrahydrofuran-3-yl), tetrahydropyranyl (ví dụ, tetrahydropyran-2-yl, tetrahydropyran-3-yl hoặc đặc biệt là tetrahydropyran-4-yl), morpholyl, pyrrolidyl (ví dụ, pyrrolidin-2-yl hoặc đặc biệt là pyrrolidin-3-yl), piperidyl (ví dụ, piperidin-2-yl, piperidin-3-yl hoặc đặc biệt là piperidin-4-yl) hoặc piperazinyl. Theo phương án cụ thể, heterocyclyl, khi tùy ý được thế, tùy ý được thế bởi 1 hoặc 2 (ví dụ 1) nhóm thế cacbon trên vòng độc lập là C₁-C₃alkyl (ví dụ C₁-C₂alkyl), C₁-C₂floalkyl hoặc oxo (=O), và/hoặc tùy ý được thế bởi một nhóm thế C₁-C₃alkyl (ví dụ C₁-C₂alkyl), C₁-C₂floalkyl hoặc C₁-C₃alkoxy (ví dụ C₁-C₂alkyl hoặc C₁-C₂floalkyl) trên nitơ trên vòng nếu có mặt, và/hoặc tùy ý được thế bởi một hoặc hai nhóm thế oxo (=O) trên lưu huỳnh trên vòng nếu có mặt.

Tốt hơn là, xycloalkyl là xyclopropyl, xyclobutyl, xyclopentyl hoặc xyclohexyl. (Xycloalkyl)alkyl tốt hơn là (xycloalkyl)metyl như (C₃-C₆xycloalkyl)metyl cụ thể là xyclopropylmetyl. Tốt hơn là, xycloalkenyl là xyclopentenyl hoặc xyclohexenyl.

Sáng chế còn đề cập đến các muối sử dụng được trong nông nghiệp mà các hợp chất có công thức I có thể tạo ra với các bazơ kim loại chuyển tiếp, kim loại kiềm và kim loại kiềm thổ, amin, bazơ amoni bậc bốn hoặc bazơ sulfoni bậc ba.

Trong số kim loại chuyển tiếp, dạng muối của kim loại kiềm và kim loại kiềm thổ, được đặc biệt lưu ý là hydroxit của đồng, sắt, lithi, natri, kali, magiê và canxi, và ưu tiên là hydroxit, bicarbonat và cacbonat của natri và kali.

Ví dụ về các amin thích hợp để tạo muối amoni bao gồm amoniac cũng như C₁-C₁₈alkylamin, C₁-C₄hydroxyalkylamin và C₂-C₄alkoxyalkyl-amin bậc một, bậc hai và bậc ba, ví dụ metylamin, etylamin, n-propylamin, isopropylamin, bốn đồng phân butylamin, n-amylamin, isoamylamin, hexylamin, heptylamin, octylamin, nonylamin, dexylamin, pentadexylamin, hexadexylamin, heptadexylamin, octadexylamin, metyletylamin, metylisopropylamin, metylhexylamin, metylnonylamin, metylpentadexylamin, metyloctadexylamin, etylbutylamin, etylheptylamin, etyloctylamin, hexylheptylamin, hexyloctylamin, dimetylamin, dietylamin, di-n-propylamin, di-isopropylamin, di-n-butylamin, di-n-amylamin, di-isoamylamin, dihexylamin, diheptylamin, dioctylamin, etanolamin, n-propanolamin, isopropanolamin, N,N-diethanolamin, N-etylpropanolamin, N-butyletanolamin, allylamin, n-but-2-enylamin, n-pent-2-enylamin, 2,3-dimetylbut-2-enylamin, dibut-2-enylamin, n-hex-2-enylamin, propylendiamin, trimetylamin, trietylamin, tri-n-propylamin, tri-isopropylamin, tri-n-butylamin, tri-isobutylamin, tri-sec-butylamin, tri-n-amylamin, metoxyetylamin và etoxyetylamin; amin dị vòng, ví dụ pyridin, quinolin, isoquinolin, morpholin, piperidin, pyrrolidin, indolin, quinuclidin và azepin; arylamin bậc một, ví dụ anilin, metoxyanilin, etoxyanilin, o-, m- và p-toluidin, phenylendiamin, benzidin, naphtylamin và o-, m- và p-cloanilin; nhưng đặc biệt là trietylamin, isopropylamin và di-isopropylamin.

Các bazơ amoni bậc bốn được ưu tiên thích hợp để tạo thành muối tương ứng, ví dụ, với công thức $[N(R_a R_b R_c R_d)]OH$, trong đó mỗi R_a, R_b, R_c và R_d độc lập với nhau là hydro, C₁-C₄alkyl. Các bazơ tetraalkylamoni thích hợp hơn có các anion khác có thể thu được, ví dụ, bằng phản ứng trao đổi anion.

Các bazơ sulfoni bậc ba được ưu tiên thích hợp để tạo thành muối tương ứng, ví dụ, với công thức $[SR_e R_f R_g]OH$, trong đó R_e, R_f và R_g độc lập với nhau là C₁-C₄alkyl. Trimetylsulfoni hydroxit được đặc biệt ưu tiên. Các bazơ sulfoni thích hợp có thể thu được từ phản ứng của thioete, cụ thể là dialkylsulfua, với alkylhalogenua, sau đó chuyển đổi thành bazơ thích hợp, ví dụ hydroxit, bằng phản ứng trao đổi anion.

Có thể được hiểu rằng trong các hợp chất có công thức I, trong đó G là kim loại, amoni hoặc sulfoni như được đề cập ở trên và do đó thể hiện cation, điện tích âm tương ứng bị phân bổ rộng qua đơn vị O-C=C-C=O.

Các hợp chất có công thức I theo sáng chế còn bao gồm các hydrat mà có thể được tạo ra trong quá trình tạo muối.

Nhóm rời chuyển (tức là nhóm chuyển hoặc có thể loại bỏ) trong đó G (ví dụ, không giới hạn, nhóm rời chuyển trong đó G là $-C(X^a)-R^a$ hoặc $-C(X^b)-X^c-R^b$, và tương đương) thường được chọn để cho phép loại bỏ chúng, thường bởi một hoặc kết hợp của các quy trình sinh hóa, hóa học hoặc vật lý, để thu được hợp chất tương ứng có công thức (I) khi G là H, trước, trong hoặc sau (ưu tiên là trong hoặc sau) khi bốn hợp chất có công thức (I) lên vùng được xử lý (ví dụ cánh đồng) hoặc lên cây. Ví dụ của các quy trình này bao gồm phân cắt enzym hoặc phân cắt khác trong/trên cây (ví dụ phân cắt các gốc este, cacbonat và/hoặc thiocacbonat), thủy phân hóa học, và/hoặc quang phân. Một số hợp chất mang nhóm G này đôi khi tạo ra một số lợi ích nhất định hoặc đặc tính kỹ thuật khác nhau, như sự thâm nhập biểu bì của cây được xử lý được cải thiện và/hoặc thống nhất hơn và/hoặc khác nhau, sức kháng tăng và/hoặc khác nhau (không- có tính độc đối với thực vật) trên một số cây, khả năng tương hợp hoặc tính ổn định cải thiện và/hoặc khác nhau ở các hỗn hợp phối chế chứa chất diệt cỏ, chất an toàn diệt cỏ, chất điều chỉnh tăng trưởng thực vật, chất diệt nấm hoặc chất diệt côn trùng khác, hoặc đặc tính rửa lửa trong đất giảm và/hoặc khác nhau.

Các giá trị được ưu tiên, thích hợp và/hoặc cụ thể của nhóm thế trong hoặc ngoài dấu hiệu của hợp chất có công thức (I), cụ thể là G, X, Y, R^1 , R^2 , R^{2A} , R^{6AA} , R^{6BB} , R^{6C1} , R^{6C2} , R^{6E} , R^{6F} , R^{6G} , R^{6H} , R^{6J} , R^{33} , R^{34} , R^{35} , R^{36} , R^{37} , R^{37a} , R^{37b} , R^{38} , R^{39} , R^{310} , R^{311} , R^{312} , R^{313} , R^a , R^b , R^c , R^d , R^e , R^f , R^g , R^h , X^a , X^b , X^c , X^d , X^e , X^f , Q, V, HetA, X^{32} , n34, n35, n36, n37, n38, và/hoặc n39, được xác định dưới đây (và/hoặc thường ở đây), và có thể hoặc là được lấy riêng hoặc được lấy cùng một hoặc nhiều trong số bất kỳ các dấu hiệu được ưu tiên, thích hợp và/hoặc cụ thể khác trong (các) kết hợp bất kỳ của chúng. Trong đoạn này, “được ưu tiên” được dự tính bao gồm được ưu tiên hơn, thậm chí hoặc còn hoặc vẫn được ưu tiên hơn, được ưu tiên đặc biệt hoặc cao, được ưu tiên nhất và tất cả các thuật ngữ tương tự. Để tránh sự mập mờ, các dấu hiệu được ưu tiên, thích hợp và/hoặc cụ thể có thể được kết hợp với các dấu hiệu được ưu tiên, thích hợp và/hoặc cụ thể có mức xếp hạng khác nhau (ví dụ có mức ưu tiên khác nhau).

Theo một phương án cụ thể của sáng chế, X là clo. Tuy nhiên, theo sáng chế, tốt nhất là, X là methyl.

Theo sáng chế, ưu tiên nhất là, R^1 là flo. Theo phương án được ưu tiên hơn của sáng chế, R^1 là brom.

Do đó, ưu tiên nhất là, X là methyl, và R^1 là flo, đối với tất cả các khía cạnh và/hoặc phương án của sáng chế. Theo phương án tùy ý, cũng được ưu tiên cao của

sáng chế (mà ví dụ có thể áp dụng cho tất cả các khía cạnh và/hoặc các phương án của sáng chế), X là metyl, và R^1 là brom.

Như được mô tả ở trên, R^2 là etynyl, C_1 - C_3 alkoxy-, C_1 - C_3 haloalkoxy- (cụ thể là C_1 - C_3 floalkoxy-), hoặc C_1 - C_3 alkoxy- C_1 - C_3 alkoxy-.

Theo một phương án, R^2 là etynyl.

Ưu tiên là, R^2 là $-O-R^{2A}$, trong đó R^{2A} là C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 haloalkyl (cụ thể là C_1 - C_3 floalkyl), hoặc C_1 - C_3 alkoxy- C_1 - C_3 alkyl-. Khi R^{2A} là C_1 - C_3 alkyl, R^{2A} là metyl hoặc etyl được ưu tiên. Khi R^{2A} là C_1 - C_3 haloalkyl, R^{2A} là C_1 - C_3 floalkyl được ưu tiên (ưu tiên hơn là C_1 - C_2 floalkyl, còn ưu tiên hơn là C_1 floalkyl). Khi R^{2A} là C_1 - C_3 haloalkyl hoặc C_1 - C_3 floalkyl, đặc biệt hơn, R^{2A} là triflometyl, diflometyl, hoặc trifloetyl (ví dụ 2,2,2-trifloetyl) đặc biệt được ưu tiên, đặc biệt nhất là triflometyl hoặc diflometyl. Khi R^{2A} là C_1 - C_3 alkoxy- C_1 - C_3 alkyl-, $-CH_2CH_2OCH_3$ (tức là 2-metoxetyl-) được ưu tiên. Theo các phương án được ưu tiên này, ưu tiên là R^1 là flo và/hoặc X là metyl.

Do đó, ưu tiên hơn là, theo tất cả các khía cạnh và/hoặc phương án của sáng chế, R^2 là $-O-R^{2A}$, trong đó R^{2A} là metyl, etyl, C_1 - C_2 floalkyl (cụ thể là triflometyl, diflometyl, hoặc trifloetyl như 2,2,2-trifloetyl), hoặc $-CH_2CH_2OCH_3$ (tức là 2-metoxetyl-). Theo phương án được ưu tiên này, ưu tiên là R^1 là flo và/hoặc X là metyl.

Còn ưu tiên hơn là, theo tất cả các khía cạnh và/hoặc phương án của sáng chế, R^2 là $-O-R^{2A}$, trong đó R^{2A} là metyl, etyl hoặc C_1 floalkyl, cụ thể là metyl, etyl, triflometyl hoặc diflometyl. Theo các phương án còn được ưu tiên hơn nữa, ưu tiên là R^1 là flo và/hoặc X là metyl.

Ưu tiên nhất là, theo tất cả các khía cạnh và/hoặc phương án của sáng chế, R^2 là $-O-R^{2A}$, trong đó R^{2A} là metyl. Theo phương án được ưu tiên nhất này, ưu tiên là R^1 là flo và/hoặc X là metyl.

Do đó, ưu tiên nhất là, theo tất cả các khía cạnh và/hoặc phương án của sáng chế, X là metyl, R^1 là flo, và R^2 là $-O-R^{2A}$ trong đó R^{2A} là metyl.

Ưu tiên là, ví dụ theo tất cả các khía cạnh và/hoặc phương án của sáng chế, G là hydro; kim loại nông nghiệp (ví dụ kim loại kiềm nông nghiệp hoặc kim loại kiềm thổ, ví dụ lithi, natri, kali, magie hoặc canxi), hoặc nhóm sulfoni hoặc amoni nông nghiệp; hoặc G là $-C(X^a)-R^a$, $-C(X^b)-X^c-R^b$, $-SO_2-R^e$, hoặc $-CH_2-X^f-R^h$; trong đó X^a , X^b , X^c , X^f , R^a , R^b , R^e và R^h là như được xác định ở đây.

Ưu tiên hơn là, ví dụ theo tất cả các khía cạnh và/hoặc phương án của sáng chế, G là hydro; kim loại nông nghiệp (ví dụ kim loại kiềm nông nghiệp hoặc kim loại kiềm thổ, ví dụ lithi, natri, kali, magie hoặc canxi), hoặc nhóm sulfoni hoặc amoni nông nghiệp; hoặc G là $-C(X^a)-R^a$ hoặc $-C(X^b)-X^c-R^b$, trong đó X^a , R^a , X^b , X^c và R^b là như được xác định ở đây.

Theo phương án cụ thể, G là nhóm $-C(X^a)-R^a$ hoặc $-C(X^b)-X^c-R^b$, trong đó X^a , R^a , X^b , X^c và R^b là như được xác định ở đây.

Ưu tiên là, ví dụ theo tất cả các khía cạnh và/hoặc phương án của sáng chế, X^a , X^b , X^c , X^d , X^e và/hoặc X^f là oxy; và/hoặc X^c là lưu huỳnh.

Ưu tiên hơn là, X^a , X^b , X^d , X^e và X^f là oxy; và X^c là oxy hoặc lưu huỳnh. Còn ưu tiên hơn là, X^a , X^b , X^c , X^d , X^e và X^f là oxy.

Tốt hơn là, R^a là C_1 - C_{10} alkyl (ví dụ, C_1 - C_6 alkyl), C_2 - C_6 alkenyl (ví dụ, C_2 - C_4 alkenyl), C_2 - C_6 alkynyl (ví dụ, C_2 - C_4 alkynyl), C_3 - C_6 xycloalkyl hoặc C_1 - C_4 alkoxy C_1 - C_4 alkyl. Tùy ý, ưu tiên là, R^a là C_3 - C_7 xycloalkyl C_1 alkyl; hoặc phenyl hoặc phenyl được thế bởi 1, 2 hoặc 3 (ví dụ 1 hoặc 2) trong số, độc lập là, C_1 - C_3 alkyl (ví dụ C_1 alkyl), C_1 - C_3 floalkyl (ví dụ C_1 floalkyl), C_1 - C_3 alkoxy (ví dụ C_1 alkoxy), C_1 - C_3 floalkoxy (ví dụ C_1 floalkoxy), halogen (ví dụ flo, clo hoặc brom), xyano hoặc nitro; hoặc heteroaryl hoặc heteroaryl được thế bởi 1, 2 hoặc 3 (ví dụ 1 hoặc 2) trong số, độc lập là, C_1 - C_3 alkyl (ví dụ C_1 alkyl), C_1 - C_3 floalkyl (ví dụ C_1 floalkyl), C_1 - C_3 alkoxy (ví dụ C_1 alkoxy), C_1 - C_3 floalkoxy (ví dụ C_1 floalkoxy), halogen (ví dụ flo, clo hoặc brom), hoặc xyano (trong đó heteroaryl ưu tiên là chứa vòng đơn).

Ưu tiên hơn là, R^a là C_1 - C_{10} alkyl (ví dụ C_1 - C_6 alkyl), C_2 - C_6 alkenyl (ví dụ C_2 - C_4 alkenyl), C_2 - C_6 alkynyl (ví dụ C_2 - C_4 alkynyl), C_3 - C_6 xycloalkyl, C_1 - C_4 alkoxy C_1 - C_4 alkyl, C_3 - C_7 xycloalkyl C_1 alkyl; hoặc phenyl hoặc phenyl được thế bởi 1, 2 hoặc 3 (ví dụ 1 hoặc 2) trong số, độc lập là, C_1 - C_3 alkyl (ví dụ C_1 alkyl), C_1 - C_3 floalkyl (ví dụ C_1 floalkyl), C_1 - C_3 alkoxy (ví dụ C_1 alkoxy), C_1 - C_3 floalkoxy (ví dụ C_1 floalkoxy), halogen (ví dụ flo, clo hoặc brom), xyano hoặc nitro.

Tốt hơn là, R^b là C_1 - C_{10} alkyl (ví dụ, C_1 - C_6 alkyl), C_2 - C_5 alkenyl- CH_2 - (ví dụ, C_2 - C_3 alkenyl- CH_2 -), C_2 - C_4 alkenyl- $CH(Me)$ - (ví dụ, C_2 - C_3 alkenyl- $CH(Me)$ -), C_2 - C_5 alkynyl- CH_2 - (ví dụ, C_2 - C_3 alkynyl- CH_2 -), C_2 - C_4 alkynyl- $CH(Me)$ - (ví dụ, C_2 - C_3 alkynyl- $CH(Me)$ -), C_3 - C_6 xycloalkyl hoặc C_1 - C_4 alkoxy C_1 - C_4 alkyl. Tùy ý, ưu tiên là, R^b là C_3 - C_7 xycloalkyl C_1 alkyl; hoặc phenyl hoặc phenyl được thế bởi 1, 2 hoặc 3 (ví dụ 1 hoặc 2) trong số, độc lập là, C_1 - C_3 alkyl (ví dụ C_1 alkyl), C_1 - C_3 floalkyl (ví dụ C_1 floalkyl), C_1 - C_3 alkoxy (ví dụ C_1 alkoxy), C_1 - C_3 floalkoxy (ví dụ C_1 floalkoxy),

halogen (ví dụ flo, clo hoặc brom), xyano hoặc nitro; hoặc heteroaryl hoặc heteroaryl được thế bởi 1, 2 hoặc 3 (ví dụ 1 hoặc 2) trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl (ví dụ C₁alkyl), C₁-C₃floalkyl (ví dụ C₁floalkyl), C₁-C₃alkoxy (ví dụ C₁alkoxy), C₁-C₃floalkoxy (ví dụ C₁floalkoxy), halogen (ví dụ flo, clo hoặc brom), hoặc xyano (trong đó heteroaryl ưu tiên là chứa vòng đơn).

Ưu tiên hơn là, R^b là C₁-C₁₀alkyl (ví dụ C₁-C₆alkyl), C₂-C₅alkenyl-CH₂- (ví dụ C₂-C₃alkenyl-CH₂-), C₂-C₄alkenyl-CH(Me)- (ví dụ C₂-C₃alkenyl-CH(Me)-), C₂-C₅alkynyl-CH₂- (ví dụ C₂-C₃alkynyl-CH₂-), C₂-C₄alkynyl-CH(Me)- (ví dụ C₂-C₃alkynyl-CH(Me)-), C₃-C₆xycloalkyl, C₁-C₄alkoxyC₁-C₄alkyl, C₃-C₇xycloalkylC₁alkyl; hoặc phenyl hoặc phenyl được thế bởi 1, 2 hoặc 3 (ví dụ 1 hoặc 2) trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl (ví dụ C₁alkyl), C₁-C₃floalkyl (ví dụ C₁floalkyl), C₁-C₃alkoxy (ví dụ C₁alkoxy), C₁-C₃floalkoxy (ví dụ C₁floalkoxy), halogen (ví dụ flo, clo hoặc brom), xyano hoặc nitro.

Ưu tiên là, R^e là C₁-C₁₀alkyl (ví dụ C₁-C₆alkyl hoặc C₁-C₄alkyl), C₁-C₁₀floalkyl (ví dụ C₁-C₃floalkyl); hoặc phenyl hoặc phenyl được thế bởi 1, 2 hoặc 3 (ví dụ 1 hoặc 2) trong đó, độc lập là, C₁-C₃alkyl (ví dụ C₁alkyl), C₁-C₃floalkyl (ví dụ C₁floalkyl), C₁-C₃alkoxy (ví dụ C₁alkoxy), C₁-C₃floalkoxy (ví dụ C₁floalkoxy), halogen (ví dụ flo, clo hoặc brom), xyano hoặc nitro.

Ưu tiên là, R^h là C₁-C₁₀alkyl (ví dụ C₁-C₆alkyl hoặc C₁-C₄alkyl), C₁-C₁₀floalkyl (ví dụ C₁-C₃floalkyl) hoặc C₁-C₆alkyl-C(O)- (ví dụ C₁-C₄alkyl-C(O)-). Cụ thể là, R^e là C₁-C₁₀alkyl (ví dụ, C₁-C₆alkyl hoặc C₁-C₄alkyl).

Khi G là -C(X^a)-R^a hoặc -C(X^b)-X^c-R^b, sau đó ưu tiên là X^a và X^b là oxy, và X^c là oxy hoặc lưu huỳnh, R^a là C₁-C₁₀alkyl (ví dụ C₁-C₆alkyl), C₂-C₆alkenyl (ví dụ C₂-C₄alkenyl), C₂-C₆alkynyl (ví dụ C₂-C₄alkynyl), C₃-C₆xycloalkyl hoặc C₁-C₄alkoxyC₁-C₄alkyl; và R^b là C₁-C₁₀alkyl (ví dụ C₁-C₆alkyl), C₂-C₅alkenyl-CH₂- (ví dụ C₂-C₃alkenyl-CH₂-), C₂-C₄alkenyl-CH(Me)- (ví dụ C₂-C₃alkenyl-CH(Me)-), C₂-C₅alkynyl-CH₂- (ví dụ C₂-C₃alkynyl-CH₂-), C₂-C₄alkynyl-CH(Me)- (ví dụ C₂-C₃alkynyl-CH(Me)-), C₃-C₆xycloalkyl hoặc C₁-C₄alkoxyC₁-C₄alkyl.

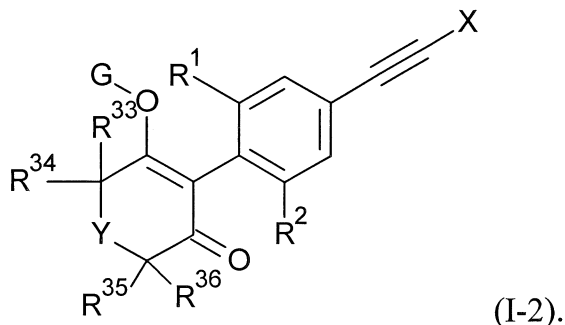
Theo phương án cụ thể khác, G là hydro, hoặc kim loại kiềm nông nghiệp hoặc kim loại kiềm thổ (ví dụ lithi, natri, kali, magie hoặc canxi), hoặc nhóm sulfoni hoặc nhóm amoni nông nghiệp. Ưu tiên hơn là, G là hydro, hoặc kim loại kiềm nông nghiệp hoặc kim loại kiềm thổ (ví dụ lithi, natri, kali, magie hoặc canxi). Tốt nhất là G là hydro.

Theo phương án ưu tiên đặc biệt của sáng chế, hợp chất có công thức (I) là hợp chất được mô tả trong bảng bất kỳ trong số các bảng 1, 2, 3, 4, 5 hoặc 6, như được mô tả và/hoặc được minh họa ở đây, tùy ý có mặt (ví dụ khi có thể về mặt hóa học) là muối nông nghiệp của chúng.

Theo phương án ưu tiên đặc biệt của sáng chế, hợp chất có công thức (I) là bất kỳ một trong số các hợp chất A1 đến A7, hoặc A8, hoặc A9 hoặc A10, hoặc P1 đến P5, như được mô tả và/hoặc được minh họa ở đây, tùy ý có mặt (ví dụ khi có thể về mặt hóa học) là muối nông nghiệp (ví dụ muối kim loại, muối sulfoni hoặc muối amoni nông nghiệp) của chúng.

Theo phương án được ưu tiên còn đặc biệt hơn của sáng chế, hợp chất có công thức (I) là hợp chất bất kỳ trong số các hợp chất A1 đến A7, hoặc A8, hoặc P1 đến P5, như được mô tả và/hoặc được minh họa ở đây, tùy ý có mặt (ví dụ khi có thể về mặt hóa học) là muối nông nghiệp (ví dụ muối kim loại, muối sulfoni hoặc muối amoni nông nghiệp) của chúng.

Theo sáng chế, Q là nhóm phụ có công thức Q2 như được xác định ở trên, và do đó hợp chất có công thức (I) có cấu trúc chung (I-2)



Theo tất cả các khía cạnh và/hoặc phương án của sáng chế, R^{34} và R^{35} đều là - $(CH_2)_{n34}$ - hoặc $-(CH_2)_{n35}-C(R^{37a})(R^{37b})-(CH_2)_{n36}-$.

Theo sáng chế, R^{37a} là C_1 - C_2 alkyl; và R^{37b} là hydro hoặc C_1 - C_2 alkyl.

Theo tất cả các khía cạnh và/hoặc phương án của sáng chế:

R^{34} và R^{35} đều là $-(CH_2)_{n34}$ - hoặc $-(CH_2)_{n35}-C(R^{37a})(R^{37b})-(CH_2)_{n36}-$;

trong đó R^{37a} là C_1 - C_2 alkyl; R^{37b} là hydro hoặc C_1 - C_2 alkyl;

$n34$ là 1, 2 hoặc 3 (ưu tiên là 2 hoặc 3); và

$n35$ và $n36$ độc lập là 0, 1 hoặc 2 với điều kiện là $n35 + n36$ là 0, 1 hoặc 2 (ưu tiên là 1 hoặc 2).

Ưu tiên là, $n34$ là 2 hoặc 3.

Ưu tiên là, $n35$ và $n36$ độc lập là 0, 1 hoặc 2 với điều kiện là $n35 + n36$ là 1 hoặc 2.

Ưu tiên là, ví dụ theo tất cả các khía cạnh và/hoặc phương án của sáng chế khi Q là Q2, R³³ và/hoặc R³⁶, độc lập với nhau, là hydro, C₁-C₄alkyl (ví dụ C₁-C₂alkyl), C₂-C₄ alkynyl (cụ thể là C₂-C₃alkynyl-CH₂-, ví dụ etynyl-CH₂-), C₁-C₃alkoxyC₁-C₃alkyl, C₁-C₃alkylthioC₁-C₃alkyl, C₁-C₃alkylsulfinylC₁-C₃alkyl, C₁-C₃alkylsulfonylC₁-C₃alkyl; C₃-C₄xycloalkyl (cụ thể là xyclopropyl); hoặc heteroxyclyl đơn vòng có 4, 5 hoặc 6 (ví dụ 4 hoặc 5) cạnh không được thể có một nguyên tử khác loại trên vòng độc lập được chọn từ oxy, lưu huỳnh và nitơ, heteroxyclyl này được gắn ở nguyên tử cacbon trên vòng trong heteroxyclyl (cụ thể là tetrahydrofuranyl chẳng hạn như tetrahydrofuran-3-yl, hoặc tetrahydropyranyl chẳng hạn như tetrahydropyran-4-yl); với điều kiện là không nhiều hơn một (cụ thể là không) trong số R³³ và R³⁶ là alkenyl, alkynyl, alkoxyalkyl, alkylthioalkyl, alkylsulfinylalkyl, alkylsulfonylalkyl, xycloalkyl hoặc heteroxyclyl;

và/hoặc R³⁴ và R³⁵ đều là -(CH₂)_{n34}- hoặc -(CH₂)_{n35}-C(R^{37a})(R^{37b})-(CH₂)_{n36}-; trong đó R^{37a} là C₁-C₂alkyl; R^{37b} là hydro hoặc C₁-C₂alkyl; n34 là 1, 2 hoặc 3 (ưu tiên là 2 hoặc 3); và n35 và n36 độc lập là 0, 1 hoặc 2 với điều kiện là n35 + n36 là 0, 1 hoặc 2 (ưu tiên là 1 hoặc 2).

Ưu tiên hơn là, ví dụ theo tất cả các khía cạnh và/hoặc phương án của sáng chế khi Q là Q2, R³³ và/hoặc R³⁶, độc lập với nhau, là hydro, C₁-C₄alkyl (cụ thể là C₁-C₂alkyl), C₂-C₄alkynyl (cụ thể là C₂-C₃alkynyl-CH₂-, ví dụ etynyl-CH₂-), C₁-C₃alkoxyC₁-C₃alkyl (cụ thể là C₁-C₂alkoxyC₁-C₂alkyl), C₁-C₃alkylthioC₁-C₃alkyl (cụ thể là C₁-C₂alkylthioC₁-C₂alkyl), C₁-C₃alkylsulfinylC₁-C₃alkyl (cụ thể là C₁-C₂alkylsulfinylC₁-C₂alkyl), C₁-C₃alkylsulfonylC₁-C₃alkyl (cụ thể là C₁-C₂alkylsulfonylC₁-C₂alkyl); C₃-C₄xycloalkyl (cụ thể là xyclopropyl); hoặc heteroxyclyl đơn vòng có 4, 5 hoặc 6 (ví dụ 4 hoặc 5) cạnh không được thể có một nguyên tử khác loại trên vòng độc lập được chọn từ oxy, lưu huỳnh và nitơ, heteroxyclyl này được gắn ở nguyên tử cacbon trên vòng trong heteroxyclyl (cụ thể là tetrahydrofuranyl như tetrahydrofuran-3-yl, hoặc tetrahydropyranyl như tetrahydropyran-4-yl); với điều kiện là không nhiều hơn một (cụ thể là không) trong số R³³ và R³⁶ là alkenyl, alkynyl, alkoxyalkyl, alkylthioalkyl, alkylsulfinylalkyl, alkylsulfonylalkyl, xycloalkyl hoặc heteroxyclyl;

và/hoặc R³⁴ và R³⁵ đều là -(CH₂)_{n34}- hoặc -(CH₂)_{n35}-C(R^{37a})(R^{37b})-(CH₂)_{n36}-; trong đó R^{37a} là C₁-C₂alkyl; R^{37b} là hydro hoặc C₁-C₂alkyl; n34 là 2 hoặc 3; và n35 và n36 độc lập là 0, 1 hoặc 2 với điều kiện là n35 + n36 là 1 hoặc 2.

Còn ưu tiên hơn là, R^{33} và/hoặc R^{36} , độc lập với nhau, là hydro, C_1 - C_3 alkyl (cụ thể là C_1 - C_2 alkyl như metyl) hoặc C_1 - C_3 alkoxy C_1 - C_3 alkyl (cụ thể là C_1 - C_2 alkoxy C_1 - C_2 alkyl); với điều kiện là không nhiều hơn một (cụ thể là không) trong số R^{33} và R^{36} là alkoxyalkyl; và/hoặc R^{34} và R^{35} đều là $-(CH_2)_{n34}-$ hoặc $-(CH_2)_{n35}-C(R^{37a})(R^{37b})-(CH_2)_{n36}-$; trong đó R^{37a} là C_1 - C_2 alkyl; R^{37b} là hydro hoặc C_1 - C_2 alkyl; $n34$ là 2 hoặc 3; và $n35$ và $n36$ độc lập là 0, 1 hoặc 2 với điều kiện là $n35 + n36$ là 1 hoặc 2.

Còn ưu tiên hơn là, R^{33} và/hoặc R^{36} , độc lập với nhau, là hydro hoặc C_1 - C_2 alkyl (ưu tiên là hydro hoặc metyl); và/hoặc R^{34} và R^{35} đều là $-(CH_2)_{n34}-$ trong đó $n34$ là 2 hoặc 3, và ưu tiên hơn là $n34$ là 2.

Ưu tiên nhất là (đặc biệt là khi Y là $CR^{38}R^{39}$ hoặc $-CR^{310}R^{311}CR^{312}R^{313}-$), R^{33} và R^{36} là hydro; và/hoặc R^{34} và R^{35} đều là $-(CH_2)_{n34}-$ trong đó $n34$ là 2 hoặc 3, và R^{33} và R^{36} là hydro.

Ưu tiên là, ví dụ theo tất cả các khía cạnh và/hoặc phương án của sáng chế khi Q là Q2, ít nhất một (ưu tiên hơn là 2, 3 hoặc 4, còn ưu tiên hơn là 3 hoặc 4, ưu tiên nhất tất cả là bốn) trong số R^{33} và R^{36} , độc lập với nhau, là hydro hoặc C_1 - C_4 alkyl (ví dụ H hoặc C_1 - C_3 alkyl, hoặc H hoặc C_1 - C_2 alkyl); và/hoặc R^{34} và R^{35} đều là như được mô tả ở đây.

Ưu tiên là, ví dụ theo tất cả các khía cạnh và/hoặc phương án của sáng chế khi Q là Q2, Y là O, S, S(O), S(O)₂, C(O), $CR^{38}R^{39}$ or $-CR^{310}R^{311}CR^{312}R^{313}-$. Ưu tiên hơn là, Y là O, C(O), $CR^{38}R^{39}$ hoặc $-CR^{310}R^{311}CR^{312}R^{313}-$. Còn ưu tiên hơn là, Y là O hoặc $CR^{38}R^{39}$, cụ thể là Y là O hoặc CH₂. Ưu tiên nhất là, Y là $CR^{38}R^{39}$, cụ thể là Y là CH₂.

Ưu tiên là, ví dụ theo tất cả các khía cạnh và/hoặc phương án của sáng chế, với R^{38} và R^{39} , một hoặc cả hai trong số R^{38} và R^{39} là hydro; hoặc R^{38} và R^{39} đều là $-(CH_2)_{n37}-$ hoặc ưu tiên là $-(CH_2)_{n38}-X^{32}-(CH_2)_{n39}-$. Theo phương án này, tốt hơn là Y là $CR^{38}R^{39}$ và/hoặc tốt hơn là X^{32} là O.

Theo một phương án cụ thể khi Q là Q2, R^{38} và R^{39} đều là $-(CH_2)_{n37}-$ hoặc $-(CH_2)_{n38}-X^{32}-(CH_2)_{n39}-$. Theo phương án này, tốt hơn là Y là $CR^{38}R^{39}$ và/hoặc tốt hơn là X^{32} là O.

Ưu tiên là, ví dụ theo tất cả các khía cạnh và/hoặc phương án của sáng chế khi Q là Q2, X^{32} là O, S, S(O), S(O)₂, C(H)(C_1 - C_3 alkyl), C(C_1 - C_2 alkyl)₂ hoặc C(H)(C_1 - C_3 alkoxy). Tốt nhất là, X^{32} là O.

Ưu tiên là, $n37$ là 2, 3, 4 hoặc 5, ưu tiên hơn là 4 hoặc 5.

Ưu tiên là, n38 và n39 độc lập là 1, 2 hoặc 3 với điều kiện là n38 + n39 là 2, 3 hoặc 4. Ưu tiên là, n38 + n39 là 3 hoặc 4. Ưu tiên nhất là, n38 là 2 và n39 là 2 (trong trường hợp, ưu tiên là, X³² là O).

Ưu tiên là, ví dụ theo tất cả các khía cạnh và/hoặc phương án của sáng chế khi Q là Q2, R³⁸ và R³⁹ độc lập với nhau, là:

hydro, C₁-C₄alkyl (cụ thể là C₁-C₂alkyl), C₂-C₃alkenyl-CH₂- (cụ thể là etenyl-CH₂-), C₂-C₃alkynyl-CH₂- (cụ thể là etynyl-CH₂-), C₁-C₂floalkyl (cụ thể là C₁floalkyl), C₁-C₃alkoxyC₁-C₃alkyl, C₁-C₃alkylthioC₁-C₃alkyl, C₁-C₃alkylsulfinylC₁-C₃alkyl, hoặc C₁-C₃alkylsulfonylC₁-C₃alkyl;

C₃-C₆xycloalkyl hoặc C₃-C₆xycloalkyl được thế bởi một hoặc hai nhóm thế mà độc lập là C₁-C₃alkyl (cụ thể là metyl hoặc etyl) hoặc C₁-C₂floalkyl, và trong đó một gốc CH₂ vòng của C₄-C₆xycloalkyl tùy ý (ví dụ ưu tiên là) được thay thế bởi nguyên tử oxy hoặc lưu huỳnh hoặc bởi gốc S(O), S(O)₂, NH, N(C₁-C₃alkyl), N(C₁-C₂floalkyl), N[C(O)C₁-C₃alkyl], N[C(O)C₁-C₂floalkyl] hoặc N(C₁-C₂alkoxy);

C₃-C₆xycloalkyl được thế bởi một nhóm thế là C₁-C₃alkoxy (cụ thể là C₁-C₂alkoxy) và tùy ý còn được thế bởi một nhóm thế là C₁-C₂alkyl (cụ thể là metyl);

C₃-C₆xycloalkylC₁-C₂alkyl- (cụ thể là C₃-C₆xycloalkylmetyl-) hoặc C₃-C₆xycloalkylC₁-C₂alkyl- (cụ thể là C₃-C₆xycloalkylmetyl-) được thế bởi một hoặc hai nhóm thế trên vòng mà độc lập là C₁-C₃alkyl hoặc C₁-C₂floalkyl, và trong đó một gốc CH₂ vòng của C₄-C₆xycloalkylC₁-C₂alkyl- (cụ thể là C₄-C₆xycloalkylmetyl-) tùy ý (ví dụ ưu tiên là) được thay thế bởi nguyên tử oxy hoặc lưu huỳnh hoặc bởi gốc S(O), S(O)₂, NH, N(C₁-C₂alkyl), N(C₁-C₂floalkyl), N[C(O)C₁-C₃alkyl], N[C(O)C₁-C₂floalkyl] hoặc N(C₁-C₂alkoxy);

C₃-C₆xycloalkylC₁-C₂alkyl- (cụ thể là C₃-C₆xycloalkylmetyl-) được thế bởi một nhóm thế trên vòng là C₁-C₃alkoxy (cụ thể là C₁-C₂alkoxy) và tùy ý còn được thế bởi một nhóm thế trên vòng là C₁-C₂alkyl (cụ thể là metyl); hoặc

HetA hoặc HetA-CH₂-, trong đó HetA là heteroaryl, được gắn ở cacbon trên vòng, mà tùy ý được thế bởi 1, 2 hoặc 3 (cụ thể là 1 hoặc 2, ví dụ 1) nhóm thế cacbon trên vòng độc lập là C₁-C₃alkyl (ví dụ C₁-C₂alkyl), C₁-C₂floalkyl, C₁-C₃alkyl-C(O)-, C₁-C₂floalkyl-C(O)-, hydroxy (bao gồm chất hỗ biến oxo bất kỳ), C₂-C₃alkenyl (ví dụ ethenyl hoặc prop-1-enyl), C₂-C₃alkynyl (ví dụ etynyl hoặc prop-1-ynyl), C₁-C₃alkoxy (ví dụ C₁-C₂alkoxy), C₁-C₂floalkoxy, halogen (ví dụ flo hoặc clo), xyano hoặc nitro; và/hoặc, trong trường hợp vòng heteroaryl có 5 cạnh chứa nguyên tử nitơ trên vòng không cùng trong liên kết đôi trên vòng C=N, heteroaryl tùy ý được thế trên nguyên tử

nitơ của vòng không cùng trong liên kết đôi trên vòng C=N bởi một nhóm thế C₁-C₃alkyl, C₁-C₂floalkyl, C₁-C₃alkyl-C(O)-, C₁-C₂floalkyl-C(O)- hoặc C₁-C₂alkyl-S(O)₂-;

với điều kiện là không nhiều hơn một trong số R³⁸ và R³⁹ là xycloalkyl được thế tùy ý; xycloalkyl được thế tùy ý trong đó một gốc CH₂ trên vòng được thay thế bởi nguyên tử oxy hoặc lưu huỳnh hoặc bởi gốc S(O), S(O)₂, NH, N(C₁-C₃alkyl), N(C₁-C₂floalkyl), N[C(O)C₁-C₃alkyl], N[C(O)C₁-C₂floalkyl] hoặc N(C₁-C₂alkoxy); xycloalkenyl được thế tùy ý; xycloalkyl được thế tùy ý-alkyl-; xycloalkyl được thế tùy ý-alkyl- trong đó một gốc CH₂ trên vòng được thay thế bởi nguyên tử oxy hoặc lưu huỳnh hoặc gốc S(O), S(O)₂, NH, N(C₁-C₃alkyl), N(C₁-C₂floalkyl), N[C(O)C₁-C₃alkyl], N[C(O)C₁-C₂floalkyl] hoặc N(C₁-C₂alkoxy); hoặc HetA hoặc HetA-CH₂-;

hoặc R³⁸ là hydro hoặc C₁-C₂alkyl (cụ thể là H hoặc Me), và R³⁹ là C₁-C₂alkoxy (cụ thể là metoxy);

hoặc R³⁸ và R³⁹ đều là -(CH₂)_{n37}- hoặc -(CH₂)_{n38}-X³²-(CH₂)_{n39}-.

Theo phương án ưu tiên nêu trên, tốt hơn là Y là CR³⁸R³⁹ và/hoặc tốt hơn là X³² là O.

Ưu tiên hơn là, ví dụ theo tất cả các khía cạnh và/hoặc phương án của sáng chế khi Q là Q2:

R³⁸ là hydro hoặc C₁-C₂alkyl (tốt hơn là H hoặc Me, tốt hơn là hydro); và

R³⁹ là:

C₁-C₂alkoxy (cụ thể là metoxy);

C₂-C₃alkynyl-CH₂- (cụ thể là etynyl-CH₂-);

C₁-C₃alkoxyC₁-C₃alkyl;

C₁-C₃alkylthioC₁-C₃alkyl (ưu tiên là C₁-C₂alkylthio-CH₂CH₂- hoặc ưu tiên hơn là C₁-C₂alkylthio-CH(Me)CH₂-);

C₁-C₃alkylsulfinylC₁-C₃alkyl;

C₁-C₃alkylsulfonylC₁-C₃alkyl;

C₃-C₆xycloalkyl hoặc C₃-C₆xycloalkyl được thế bởi một hoặc hai nhóm thế mà độc lập là C₁-C₃alkyl (cụ thể là metyl hoặc etyl) hoặc C₁-C₂floalkyl, và trong đó một gốc CH₂ vòng của C₄-C₆xycloalkyl tùy ý (ví dụ ưu tiên là) được thay thế bởi nguyên tử oxy hoặc lưu huỳnh hoặc bởi gốc S(O), S(O)₂, NH, N(C₁-C₃alkyl), N(C₁-C₂floalkyl), N[C(O)C₁-C₃alkyl], N[C(O)C₁-C₂floalkyl] hoặc N(C₁-C₂alkoxy) (hoặc ưu tiên hơn là được thay thế bởi nguyên tử oxy hoặc lưu huỳnh hoặc bởi gốc S(O), S(O)₂,

NH, N(C₁-C₃alkyl) hoặc N(C₁-C₂alkoxy); hoặc còn ưu tiên hơn là được thay thế bởi nguyên tử oxy hoặc lưu huỳnh);

C₃-C₆cycloalkyl được thế bởi một nhóm thế là C₁-C₃alkoxy (cụ thể là C₁-C₂alkoxy) và tùy ý còn được thế bởi một nhóm thế là C₁-C₂alkyl (cụ thể là metyl);

C₃-C₆cycloalkylmetyl- hoặc C₃-C₆cycloalkylmetyl- được thế bởi một hoặc hai nhóm thế trên vòng mà độc lập là C₁-C₃alkyl (cụ thể là C₁-C₂alkyl) hoặc C₁-C₂floalkyl, và trong đó một gốc CH₂ trên vòng của C₄-C₆cycloalkylmetyl- tùy ý (ví dụ ưu tiên là) được thay thế bởi nguyên tử oxy hoặc lưu huỳnh hoặc bởi gốc S(O), S(O)₂, NH, N(C₁-C₂alkyl), N(C₁-C₂floalkyl), N[C(O)C₁-C₃alkyl], N[C(O)C₁-C₂floalkyl] hoặc N(C₁-C₂alkoxy) (hoặc ưu tiên hơn được thay thế bởi nguyên tử oxy hoặc lưu huỳnh hoặc bởi gốc N[C(O)C₁-C₃alkyl] hoặc N[C(O)C₁-C₂floalkyl]);

C₃-C₆cycloalkylmetyl- được thế bởi một nhóm thế trên vòng là C₁-C₃alkoxy (cụ thể là C₁-C₂alkoxy) và tùy ý còn được thế bởi một nhóm thế trên vòng là C₁-C₂alkyl (cụ thể là metyl); hoặc

HetA hoặc HetA-CH₂-, trong đó Het A là heteroaryl, được gắn ở cacbon trên vòng, mà tùy ý được thế bởi 1, 2 hoặc 3 (cụ thể là 1 hoặc 2, ví dụ 1) nhóm thế cacbon trên vòng độc lập là C₁-C₃alkyl (cụ thể là C₁-C₂alkyl), C₁-C₂floalkyl (cụ thể là C₁floalkyl), C₁-C₃alkyl-C(O)-, C₁-C₂floalkyl-C(O)-, hydroxy (bao gồm chất hỗ biến oxo bất kỳ), C₂-C₃alkenyl (cụ thể là ethenyl hoặc prop-1-enyl), C₂-C₃alkynyl (cụ thể là etynyl hoặc prop-1-ynyl), C₁-C₃alkoxy (cụ thể là C₁-C₂alkoxy), C₁-C₂floalkoxy (cụ thể là C₁floalkoxy), halogen (cụ thể là flo hoặc clo), xyano hoặc nitro; và/hoặc, trong trường hợp vòng heteroaryl có 5 cạnh chứa nguyên tử nitơ trên vòng không cùng trong liên kết đôi trên vòng C=N, heteroaryl tùy ý được thế trên nguyên tử nitơ của vòng không cùng trong liên kết đôi trên vòng C=N bởi một nhóm thế C₁-C₃alkyl, C₁-C₂floalkyl, C₁-C₃alkyl-C(O)-, C₁-C₂floalkyl-C(O)- hoặc C₁-C₂alkyl-S(O)₂;

hoặc R³⁸ và R³⁹ đều là -(CH₂)_{n37}- hoặc -(CH₂)_{n38}-X³²-(CH₂)_{n39}-.

Theo phương án ưu tiên nêu trên, tốt hơn là Y là CR³⁸R³⁹ và/hoặc tốt hơn là X³² là O.

Còn ưu tiên hơn là, ví dụ theo tất cả các khía cạnh và/hoặc phương án của sáng chế khi Q là Q2:

R³⁸ là hydro hoặc C₁-C₂alkyl (tốt hơn là H hoặc Me, tốt hơn là hydro); và

R³⁹ là:

C₁-C₃alkylthioC₁-C₃alkyl (ưu tiên là C₁-C₂alkylthio-CH₂CH₂- hoặc ưu tiên hơn là C₁-C₂alkylthio-CH(Me)CH₂-);

C₃-C₆xycloalkyl hoặc C₃-C₆xycloalkyl được thế bởi một hoặc hai nhóm thế mà độc lập là C₁-C₃alkyl (cụ thể là metyl hoặc etyl) hoặc C₁-C₂floalkyl, và trong đó một gốc CH₂ trên vòng của C₄-C₆xycloalkyl được thay thế bởi nguyên tử oxy hoặc lưu huỳnh hoặc bởi gốc S(O), S(O)₂, NH, N(C₁-C₃alkyl), N(C₁-C₂floalkyl), N[C(O)C₁-C₃alkyl], N[C(O)C₁-C₂floalkyl] hoặc N(C₁-C₂alkoxy) (hoặc ưu tiên là được thay thế bởi nguyên tử oxy hoặc lưu huỳnh hoặc bởi gốc S(O), S(O)₂, NH, N(C₁-C₃alkyl) hoặc N(C₁-C₂alkoxy); hoặc ưu tiên hơn là được thay thế bởi nguyên tử oxy hoặc lưu huỳnh);

C₃-C₆xycloalkylmetyl- hoặc C₃-C₆xycloalkylmetyl- được thế bởi một hoặc hai nhóm thế trên vòng mà độc lập là C₁-C₃alkyl (cụ thể là C₁-C₂alkyl) hoặc C₁-C₂floalkyl, và trong đó một gốc CH₂ trên vòng của C₄-C₆xycloalkylmetyl- được thay thế bởi nguyên tử oxy hoặc lưu huỳnh hoặc bởi gốc S(O), S(O)₂, NH, N(C₁-C₂alkyl), N(C₁-C₂floalkyl), N[C(O)C₁-C₃alkyl], N[C(O)C₁-C₂floalkyl] hoặc N(C₁-C₂alkoxy) (hoặc ưu tiên là được thay thế bởi nguyên tử oxy hoặc lưu huỳnh hoặc bởi gốc N[C(O)C₁-C₃alkyl] hoặc N[C(O)C₁-C₂floalkyl]);

HetA hoặc HetA-CH₂-, trong đó Het A là heteroaryl, được gắn ở cacbon trên vòng, mà tùy ý được thế bởi 1, 2 hoặc 3 (cụ thể là 1 hoặc 2, ví dụ 1) nhóm thế cacbon trên vòng độc lập là C₁-C₃alkyl (cụ thể là C₁-C₂alkyl), C₁-C₂floalkyl (cụ thể là C₁floalkyl), C₁-C₃alkyl-C(O)-, C₁-C₂floalkyl-C(O)-, hydroxy (bao gồm chất hỗ biến oxo bất kỳ), C₂-C₃alkenyl (cụ thể là ethenyl hoặc prop-1-enyl), C₂-C₃alkynyl (cụ thể là etynyl hoặc prop-1-ynyl), C₁-C₃alkoxy (cụ thể là C₁-C₂alkoxy), C₁-C₂floalkoxy (cụ thể là C₁floalkoxy), halogen (cụ thể là flo hoặc clo), xyano hoặc nitro; và/hoặc, trong trường hợp vòng heteroaryl có 5 cạnh chứa nguyên tử nitơ trên vòng không cùng trong liên kết đôi trên vòng C=N, heteroaryl tùy ý được thế trên nguyên tử nitơ của vòng không cùng trong liên kết đôi trên vòng C=N bởi một nhóm thế C₁-C₃alkyl, C₁-C₂floalkyl, C₁-C₃alkyl-C(O)-, C₁-C₂floalkyl-C(O)- hoặc C₁-C₂alkyl-S(O)₂-;

hoặc R³⁸ và R³⁹ đều là -(CH₂)_{n37}- hoặc -(CH₂)_{n38}-X³²-(CH₂)_{n39}-.

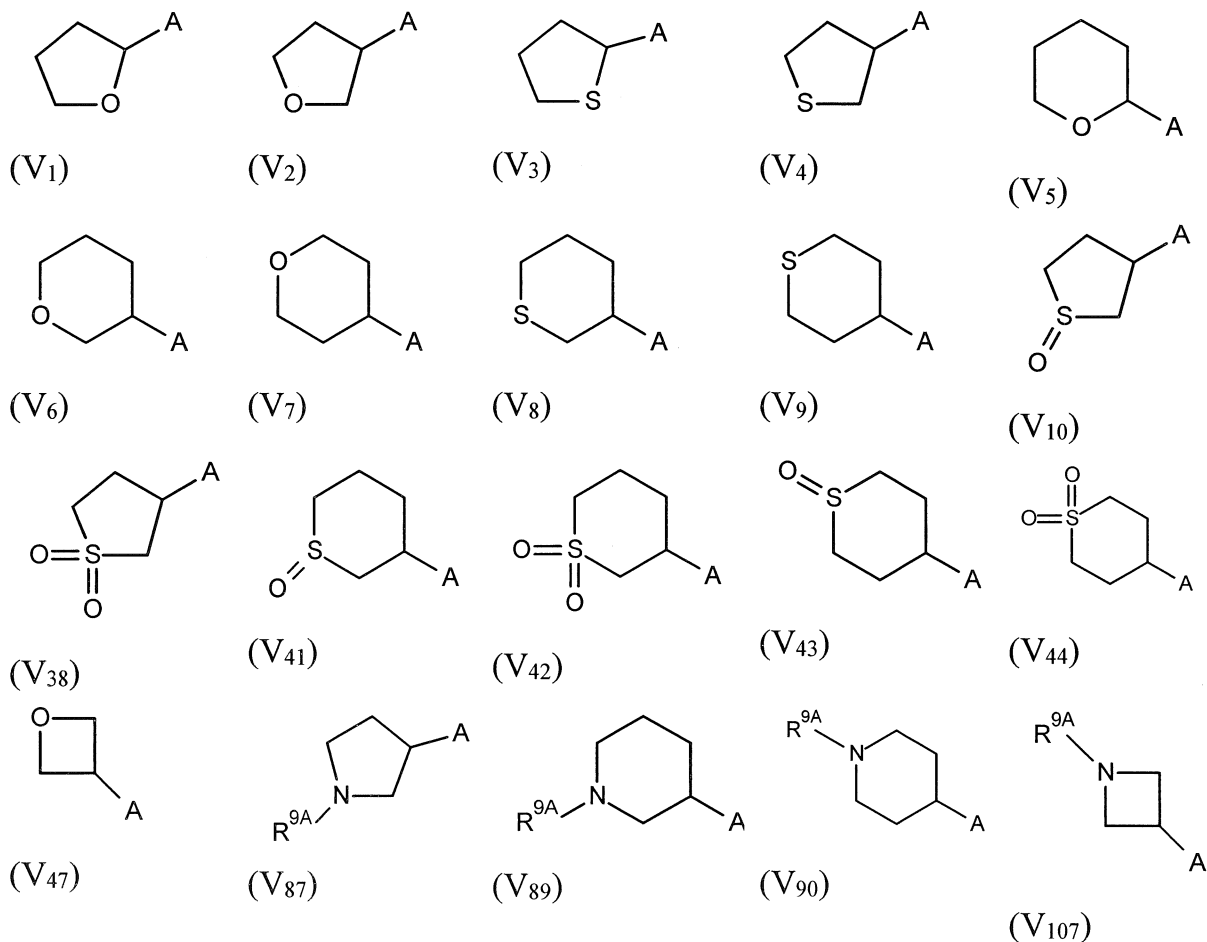
Theo phương án thậm chí còn ưu tiên hơn nữa nêu trên, tốt hơn là Y là CR³⁸R³⁹ và/hoặc tốt hơn là X³² là O.

Theo một phương án được ưu tiên nhất (mà ví dụ có thể áp dụng cho tất cả các khía cạnh và/hoặc phương án của sáng chế khi Q là Q2), R³⁸ và R³⁹ độc lập với nhau, là hydro hoặc C₁-C₃alkyl (ưu tiên là hydro hoặc C₁-C₂alkyl, ưu tiên hơn là hydro hoặc metyl, ưu tiên nhất là hydro). Theo phương án này, tốt hơn là, Y là CR³⁸R³⁹.

Theo phương án ưu tiên khác (mà ví dụ, có thể áp dụng cho tất cả các khía cạnh và/hoặc phương án của sáng chế), R^{38} là hydro, và R^{39} là C_1 - C_3 alkylthio C_1 - C_3 alkyl. Theo phương án này, R^{39} tốt hơn là C_1 - C_2 alkylthio- CH_2CH_2 - hoặc tốt hơn là C_1 - C_2 alkylthio- $CH(Me)CH_2$ -. Theo phương án này, tốt hơn là, Y là $CR^{38}R^{39}$.

Theo phương án được ưu tiên khác (mà ví dụ có thể áp dụng cho tất cả các khía cạnh và/hoặc phương án của sáng chế khi Q là Q2), R^{38} là hydro và R^{39} là C_4 - C_6 xycloalkylmetyl- hoặc C_4 - C_6 xycloalkylmetyl- được thế bởi một hoặc hai nhóm thế trên vòng mà độc lập là C_1 - C_3 alkyl (cụ thể là C_1 - C_2 alkyl) hoặc C_1 - C_2 floalkyl, và trong đó một gốc CH_2 trên vòng được thay thế bởi nguyên tử oxy hoặc lưu huỳnh hoặc bởi gốc $S(O)$, $S(O)_2$, NH , $N(C_1$ - C_2 alkyl), $N(C_1$ - C_2 floalkyl), $N[C(O)C_1$ - C_3 alkyl], $N[C(O)C_1$ - C_2 floalkyl] hoặc $N(C_1$ - C_2 alkoxy) (hoặc ưu tiên hơn là được thay thế bởi nguyên tử oxy hoặc lưu huỳnh hoặc bởi gốc $N[C(O)C_1$ - C_3 alkyl] hoặc $N[C(O)C_1$ - C_2 floalkyl]). Theo phương án này, tốt hơn là, Y là $CR^{38}R^{39}$.

Theo phương án ưu tiên trên, sau đó ưu tiên là R^{38} là hydro và R^{39} là heteroxycyl-metyl-, trong đó heteroxycyl là V, trong đó V là một trong số các công thức phụ sau V_1 , V_2 , V_3 , V_4 , V_5 , V_6 , V_7 , V_8 , V_9 , V_{10} , V_{38} , V_{41} , V_{42} , V_{43} , V_{44} , V_{47} , V_{87} , V_{89} , V_{90} ,:



trong đó: A là vị trí gắn với gốc -metyl-; và R^{9A} là hydro, C_1 - C_2 alkyl (ví dụ methyl), C_1 - C_2 floalkyl (ví dụ C_1 floalkyl), $-C(O)C_1$ - C_3 alkyl (ví dụ $-C(O)$ -metyl), $-C(O)C_1$ - C_2 floalkyl (ví dụ $-C(O)C_1$ floalkyl) hoặc C_1 - C_2 alkoxy.

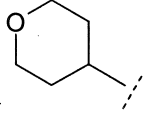
Ưu tiên hơn là, V là một trong số các công thức phụ V_1 , V_2 , V_4 , V_6 , V_7 , V_{41} , V_{42} , V_{43} , V_{44} , V_{87} , V_{89} hoặc V_{90} . Còn ưu tiên hơn là, V là một trong số các công thức phụ V_2 , V_6 , V_7 , V_{41} , V_{42} , V_{43} , V_{44} , V_{87} , V_{89} hoặc V_{90} .

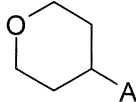
Ưu tiên hơn nữa là, V là một trong số các công thức phụ V_2 , V_7 , V_{87} hoặc V_{90} . Còn ưu tiên hơn là, V là một trong số các công thức phụ V_2 , V_7 hoặc V_{90} .

Ưu tiên nhất là, V là công thức phụ V_7 .

Ưu tiên là, R^{9A} là $-C(O)C_1$ - C_3 alkyl (ví dụ $-C(O)$ metyl) hoặc $-C(O)C_1$ - C_2 floalkyl (ví dụ $-C(O)C_1$ floalkyl).

Theo một phương án ưu tiên của sáng chế (mà ví dụ có thể áp dụng cho tất cả các khía cạnh và/hoặc phương án của sáng chế), R^{38} là hydro, và R^{39} là tetrahydro-2H-

pyran-4-yl () hoặc (tetrahydro-2H-pyran-4-yl)-metyl-. Theo phương án này, tốt hơn là, Y là $CR^{38}R^{39}$. Khi R^{39} là (tetrahydro-2H-pyran-4-yl)-metyl-, sau đó R^{39} là

V_7 -metyl- trong đó V_7 là  A trong đó A là vị trí gắn vào gốc -metyl-.

Theo phương án được ưu tiên khác (mà ví dụ có thể áp dụng cho tất cả các khía cạnh và/hoặc phương án của sáng chế khi Q là Q2), R^{38} là hydro và R^{39} là HetA hoặc HetA- CH_2 - như được xác định ở đây. Theo phương án này, ưu tiên hơn là, R^{38} là hydro và R^{39} là HetA như được xác định ở đây. Theo phương án này, tốt hơn là, Y là $CR^{38}R^{39}$.

Ưu tiên là, ví dụ theo tất cả các khía cạnh và/hoặc phương án của sáng chế khi Q là Q2, và R^{39} là HetA hoặc HetA- CH_2 , HetA là heteroaryl (cụ thể là heteroaryl đơn vòng), được gắn ở cacbon trên vòng, mà tùy ý được thế bởi 1, 2 hoặc 3 (cụ thể là 1 hoặc 2, ví dụ 1) nhóm thế cacbon trên vòng độc lập là C_1 - C_2 alkyl, C_1 floalkyl, C_1 - C_2 alkyl- $C(O)$ -, C_1 floalkyl- $C(O)$ -, hydroxy (bao gồm chất hỗ biến oxo bất kỳ), etynyl, prop-1-ynyl, C_1 - C_2 alkoxy, C_1 floalkoxy, flo, clo, brom, xyano hoặc nitro, với điều kiện là clo, brom, alkoxy hoặc floalkoxy bất kỳ không được thế ở cacbon trên vòng bất kỳ được liên kết trực tiếp với nitơ trên vòng của heteroaryl; và/hoặc, trong trường hợp vòng heteroaryl có 5 cạnh chứa nguyên tử nitơ trên vòng không cùng trong liên kết đôi trên vòng $C=N$, heteroaryl tùy ý được thế trên nguyên tử nitơ của vòng không cùng

trong liên kết đôi trên vòng C=N bởi một nhóm thế C₁-C₃alkyl, C₁-C₂floalkyl, C₁-C₃alkyl-C(O)-, C₁-C₂floalkyl-C(O)- hoặc C₁-C₂alkyl-S(O)₂-.

Ưu tiên hơn là, ví dụ theo tất cả các khía cạnh và/hoặc phương án của sáng chế khi Q là Q₂, và R³⁹ là HetA hoặc HetA-CH₂, HetA là heteroaryl (cụ thể là heteroaryl đơn vòng), được gắn ở cacbon trên vòng, mà tùy ý được thế bởi 1 hoặc 2 (cụ thể là 1) nhóm thế cacbon trên vòng độc lập là C₁-C₂alkyl (cụ thể là metyl), C₁floalkyl (cụ thể là CF₃), C₁-C₂alkyl-C(O)- (cụ thể là Me-C(O)-), C₁floalkyl-C(O)-, etynyl, prop-1-ynyl, flo hoặc xyano; và/hoặc, trong trường hợp vòng heteroaryl có 5 cạnh chứa nguyên tử nitơ trên vòng không cùng trong liên kết đôi trên vòng C=N, heteroaryl tùy ý được thế trên nguyên tử nitơ của vòng không cùng trong liên kết đôi trên vòng C=N bởi một nhóm thế C₁-C₂alkyl (ví dụ metyl), C₁floalkyl, metyl-C(O)- hoặc C₁floalkyl-C(O)-.

Ưu tiên hơn là, ví dụ theo tất cả các khía cạnh và/hoặc phương án của sáng chế khi Q là Q₂, và R³⁹ là HetA hoặc HetA-CH₂, HetA là heteroaryl (cụ thể là heteroaryl đơn vòng), được gắn ở cacbon trên vòng, mà tùy ý được thế bởi 1 hoặc 2 (cụ thể là 1) nhóm thế cacbon trên vòng độc lập là C₁-C₂alkyl (cụ thể là metyl), C₁floalkyl (cụ thể là CF₃), flo hoặc xyano;

và/hoặc, trong trường hợp vòng heteroaryl 5 cạnh chứa nguyên tử nitơ trên vòng không tham gia vào liên kết đôi trên vòng C=N, heteroaryl này tùy ý được thế trên nguyên tử nitơ trên vòng không tham gia vào liên kết đôi trên vòng C=N bởi một nhóm thế metyl.

Ưu tiên là, ví dụ theo tất cả các khía cạnh và/hoặc phương án của sáng chế khi Q là Q₂, và R³⁹ là HetA hoặc HetA-CH₂, HetA là monoxycyclic heteroaryl đơn vòng được thế tùy ý, được gắn ở cacbon trên vòng. Chẳng hạn như heteroaryl đơn vòng có thể là heteroaryl đơn vòng 5 hoặc 6 cạnh.

Ưu tiên hơn là, ví dụ theo tất cả các khía cạnh và/hoặc phương án của sáng chế khi Q là Q₂, và R³⁹ là HetA hoặc HetA-CH₂, HetA là heteroaryl đơn vòng được thế tùy ý, được gắn ở cacbon trên vòng, mà là:

pyridinyl (tốt hơn là pyridin-3-yl hoặc tốt nhất là pyridin-2-yl), pyrazolyl (tốt hơn là pyrazol-5-yl hoặc pyrazol-4-yl, hoặc tốt nhất là pyrazol-3-yl), imidazolyl (tốt hơn là imidazol-2-yl), pyrazinyl, pyrimidinyl (tốt hơn là pyrimidin-4-yl), pyridazinyl (tốt hơn là pyridazin-3-yl), triazolyl (ví dụ, 1,2,3-triazolyl), tetrazol-5-yl, oxazolyl, thiazolyl, isoxazolyl, isothiazolyl hoặc oxadiazolyl; tùy ý có mặt (ví dụ, khi có thể về mặt hóa học) dưới dạng muối nông hóa học của chúng (chẳng hạn như muối cộng axit nông hóa học của chúng).

Còn ưu tiên hơn là, ví dụ theo tất cả các khía cạnh và/hoặc phương án của sáng chế khi Q là Q2, và R³⁹ là HetA hoặc HetA-CH₂, HetA là heteroaryl đơn vòng được thể tùy ý, được gắn ở cacbon trên vòng, mà là: pyridinyl (ưu tiên là pyridin-3-yl hoặc ưu tiên nhất là pyridin-2-yl), pyrazolyl (ưu tiên là pyrazol-5-yl hoặc pyrazol-4-yl, hoặc ưu tiên nhất là pyrazol-3-yl), imidazolyl (ưu tiên là imidazol-2-yl), pyrazinyl, pyrimidinyl (ưu tiên là pyrimidin-4-yl), pyridazinyl (ưu tiên là pyridazin-3-yl), triazolyl (ví dụ 1,2,3-triazolyl), hoặc tetrazol-5-yl; tùy ý có mặt (ví dụ khi có thể về mặt hóa học) là muối nông hóa học của chúng (như muối cộng axit nông hóa học của chúng).

Còn ưu tiên hơn là, ví dụ theo tất cả các khía cạnh và/hoặc phương án của sáng chế khi Q là Q2, và R³⁹ là HetA hoặc HetA-CH₂, HetA là heteroaryl đơn vòng được thể tùy ý, được gắn ở cacbon trên vòng, mà là: pyridinyl (ưu tiên là pyridin-3-yl hoặc ưu tiên nhất là pyridin-2-yl), pyrazolyl (ưu tiên là pyrazol-5-yl hoặc pyrazol-4-yl, hoặc ưu tiên nhất là pyrazol-3-yl), imidazolyl (ưu tiên là imidazol-2-yl), pyrazinyl, pyrimidinyl (ưu tiên là pyrimidin-4-yl), hoặc pyridazinyl (ưu tiên là pyridazin-3-yl); tùy ý có mặt (ví dụ khi có thể về mặt hóa học) là muối nông hóa học của chúng (như muối cộng axit nông hóa học của chúng).

Ưu tiên hơn nữa là, ví dụ theo tất cả các khía cạnh và/hoặc phương án của sáng chế khi Q là Q2, và R³⁹ là HetA hoặc HetA-CH₂, HetA là heteroaryl đơn vòng được thể tùy ý, được gắn ở cacbon trên vòng, mà là: pyridin-3-yl, pyridin-2-yl, hoặc pyrazolyl (ưu tiên là pyrazol-5-yl hoặc pyrazol-4-yl, hoặc ưu tiên nhất là pyrazol-3-yl); tùy ý có mặt (ví dụ khi có thể về mặt hóa học) là muối nông hóa học của chúng (như muối cộng axit nông hóa học của chúng).

Ưu tiên nhất là, ví dụ theo tất cả các khía cạnh và/hoặc phương án của sáng chế khi Q là Q2, và R³⁹ là HetA hoặc HetA-CH₂, HetA là heteroaryl đơn vòng được thể tùy ý, được gắn ở cacbon trên vòng, mà là: pyridin-2-yl hoặc pyrazol-3-yl; tùy ý có mặt (ví dụ khi có thể về mặt hóa học) là muối nông hóa học của chúng (như muối cộng axit nông hóa học của chúng).

Được đặc biệt ưu tiên (ví dụ theo tất cả các khía cạnh và/hoặc phương án của sáng chế khi Q là Q2 và R³⁹ là HetA hoặc HetA-CH₂,) là, trong HetA, nguyên tử cacbon trên vòng bất kỳ, mà liên kết trực tiếp với nguyên tử cacbon trên vòng mà là điểm gắn (ví dụ hoặc tức là điểm gắn vào nguyên tử cacbon trung tâm trong gốc Y = CR³⁸R³⁹ (đối với HetA), hoặc mà là điểm gắn vào gốc -CH₂- (đối với Het-CH₂-), là không được thể. Do đó, ví dụ, tốt hơn là, nếu Het là pyridin-2-yl tùy ý được thể (tùy ý

có mặt dưới dạng muối nông hóa học của nó), thì nguyên tử cacbon trên vòng ở vị trí 3 của vòng này (được tính đối với nguyên tử nitơ trên vòng của pyridin) không được thế.

Ưu tiên là, ví dụ theo tất cả các khía cạnh và/hoặc phương án của sáng chế khi Q là Q2, R^{310} , R^{311} , R^{312} và/hoặc R^{313} là, độc lập với nhau, hydro hoặc C₁-C₂alkyl (cụ thể là hydro hoặc metyl). Ưu tiên hơn là, hai, ba hoặc tất cả R^{310} , R^{311} , R^{312} và R^{313} là hydro. Tốt nhất là, R^{310} , R^{311} , R^{312} và R^{313} là hydro.

Theo phương án đặc biệt ưu tiên của sáng chế (mà ví dụ, có thể áp dụng cho tất cả các khía cạnh và/hoặc phương án của sáng chế): Y là O hoặc CR³⁸R³⁹ (ưu tiên là CR³⁸R³⁹); và R^{34} và R^{35} đều là $-(CH_2)_{n34}-$ hoặc $-(CH_2)_{n35}-C(R^{37a})(R^{37b})-(CH_2)_{n36}-$; trong đó R^{37a} là C₁-C₂alkyl; R^{37b} là hydro hoặc C₁-C₂alkyl; n34 là 2 hoặc 3; và n35 và n36 độc lập là 0, 1 hoặc 2 với điều kiện là n35 + n36 là 1 hoặc 2. Theo phương án đặc biệt ưu tiên này, ưu tiên hơn là, Y là O hoặc CR³⁸R³⁹ (ưu tiên là CR³⁸R³⁹) trong đó R^{38} và R^{39} độc lập với nhau, là hydro hoặc C₁-C₃alkyl (cụ thể là, C₁-C₃alkyl có thể là C₁-C₂alkyl chẳng hạn như metyl). Theo phương án đặc biệt ưu tiên này, còn ưu tiên hơn là Y là O hoặc CH₂; hoặc, ưu tiên nhất là, Y là CH₂. Theo phương án đặc biệt ưu tiên này, tốt hơn là, R^{33} và R^{36} , độc lập với nhau, là hydro, C₁-C₃alkyl (cụ thể là C₁-C₂alkyl chẳng hạn như metyl) hoặc C₁-C₃alkoxyC₁-C₃alkyl (cụ thể là C₁-C₂alkoxyC₁-C₂alkyl); với điều kiện là không nhiều hơn một (cụ thể là không có) R^{33} và R^{36} là alkoxyalkyl. Theo phương án đặc biệt ưu tiên này, còn ưu tiên hơn là, R^{33} và R^{36} , độc lập với nhau, là hydro hoặc C₁-C₂alkyl (ưu tiên là hydro hoặc metyl); và/hoặc R^{34} và R^{35} đều là $-(CH_2)_{n34}-$ trong đó n34 là 2 hoặc 3 (ưu tiên là 2).

Theo phương án đặc biệt ưu tiên hơn, R¹ là flo, X là metyl, R² là OR^{2A}, trong đó R^{2A} được chọn từ metyl, etyl, CH₂CH₂OCH₃, 2,2,2-trifloetyl và diflometyl (ưu tiên nhất là R^{2A} được chọn từ metyl, etyl và diflometyl), Q là Q2 trong đó Y là CR³⁸R³⁹ và mỗi R^{38} và R^{39} độc lập là hydro hoặc metyl (ưu tiên đều là hydro hoặc đều là metyl, ưu tiên hơn là đều là hydro), R^{34} và R^{35} đều là $-(CH_2)_{n34}-$ hoặc $-(CH_2)_{n35}-C(R^{37a})(R^{37b})-(CH_2)_{n36}$ trong đó n34, n35, n36, R^{37a} và R^{37b} là như được mô tả ở trên đây. Ưu tiên là, theo phương án đặc biệt ưu tiên này, n34 là 2 hoặc 3; và n35 và n36 độc lập là 0, 1 hoặc 2 với điều kiện là n35 + n36 là 1 hoặc 2. Ưu tiên là, theo phương án đặc biệt ưu tiên này, R^{34} và R^{35} đều là $-(CH_2)_{n34}-$ trong đó n34 là 2. Ưu tiên là, theo phương án đặc biệt ưu tiên này, G là hydro. Theo phương án đặc biệt ưu tiên này, ưu tiên hơn là, R^{33} và R^{36} , độc lập với nhau, là hydro, C₁-C₃alkyl (cụ thể là C₁-C₂alkyl chẳng hạn như metyl) hoặc C₁-C₃alkoxyC₁-C₃alkyl (cụ thể là C₁-C₂alkoxyC₁-C₂alkyl); với điều kiện là không nhiều hơn một (cụ thể là không) trong số R^{33} và R^{36} là alkoxyalkyl. Theo

phương án đặc biệt ưu tiên này, còn ưu tiên hơn là, R^{33} và R^{36} , độc lập với nhau, là hydro hoặc C_1 - C_2 alkyl (ưu tiên là hydro hoặc metyl); và/hoặc R^{34} và R^{35} đều là $-(CH_2)_{n34}$ trong đó $n34$ là 2 hoặc 3 (ưu tiên là 2).

Theo phương án được ưu tiên cụ thể, hợp chất theo sáng chế (hợp chất có công thức (I)) là như được mô tả ở đây trong các bảng sau (ví dụ là hợp chất như được mô tả ở đây trong một trong các bảng 1, 2, 3, 4, 5 hoặc 6), tùy ý có mặt (ví dụ khi có thể về mặt hóa học) là muối nông hóa học (ví dụ muối kim loại, muối sulfoni hoặc muối amoni nông hóa học) của chúng.

Đặc biệt ưu tiên là, hợp chất theo sáng chế (hợp chất có công thức (I)) là hợp chất A1, A2, A3, A4, A5, A6, A7, A8, P1, P2, P3, P4 hoặc P5, tùy ý có mặt (ví dụ khi có thể về mặt hóa học) là muối nông hóa học (ví dụ muối kim loại, muối sulfoni hoặc muối amoni nông hóa học) của chúng. Theo phương án tùy ý, hợp chất theo sáng chế (hợp chất có công thức (I)) là hợp chất A9 hoặc A10, tùy ý có mặt (ví dụ khi có thể về mặt hóa học) là muối nông hóa học (ví dụ muối kim loại, muối sulfoni hoặc muối amoni nông nghiệp) của chúng.

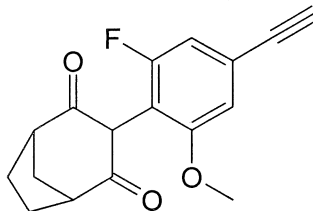
Đặc biệt ưu tiên là, hợp chất theo sáng chế (hợp chất có công thức (I)) là hợp chất A1, A2, A3, A4, A5, A6 hoặc A7 (ưu tiên hơn là hợp chất A1, A2, A3, A4 hoặc A7), tùy ý có mặt (ví dụ khi có thể về mặt hóa học) là muối nông hóa học (ví dụ muối kim loại, muối sulfoni hoặc muối amoni nông nghiệp) của chúng.

Tùy ý, ưu tiên là, hợp chất theo sáng chế (hợp chất có công thức (I)) là hợp chất A8, tùy ý có mặt (ví dụ khi có thể về mặt hóa học) là muối nông hóa học (ví dụ muối kim loại, muối sulfoni hoặc muối amoni nông hóa học) của chúng.

Tùy ý, đặc biệt ưu tiên là, hợp chất theo sáng chế (hợp chất có công thức (I)) là hợp chất P1, P2, P3, P4 hoặc P5, tùy ý có mặt (ví dụ khi có thể về mặt hóa học) là muối nông hóa học (ví dụ muối kim loại, muối sulfoni hoặc muối amoni nông hóa học) của chúng.

Đặc biệt ưu tiên đặc biệt là, hợp chất theo sáng chế (hợp chất có công thức (I)) là hợp chất A1, A2, A3, A4, A7, P1, P2, P3, P4 hoặc P5, tùy ý có mặt (ví dụ khi có thể về mặt hóa học) là muối nông hóa học (ví dụ muối kim loại, muối sulfoni hoặc muối amoni nông hóa học) của chúng.

Theo khía cạnh khác của sáng chế mà không là phần được sáng chế bảo hộ, đề



xuất hợp chất B1, có cấu trúc sau đây: , tùy ý có mặt (ví dụ khi có thể về mặt hóa học) là muối nông hóa học (ví dụ muối kim loại, muối sulfoni hoặc muối amoni nông hóa học) của chúng.

Quy trình điều chế các hợp chất, ví dụ, hợp chất có công thức (I)

Hợp chất có công thức I, trong đó Q là Q2 nói chung có thể được điều chế theo các phương pháp thông thường được mô tả dưới đây.

Hợp chất có công thức I, trong đó Q là Q2 và G là: $-C(X^a)-R^a$, $-C(X^b)-X^c-R^b$, $-C(X^d)-N(R^e)-R^d$, $-SO_2-R^e$, $-P(X^e)(R^f)-R^g$, $-CH_2-X^f-R^h$; hoặc phenyl- CH_2- hoặc phenyl- $CH(C_1-C_2alkyl)-$ (ở mỗi nguyên tử trong đó phenyl tùy ý được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C_1-C_2alkyl , $C_1floalkyl$, $C_1-C_2alkoxy$, $C_1floalkoxy$, flo, clo, brom, xyano, nitro, SC_1-C_3alkyl , $S(O)C_1-C_3alkyl$, hoặc $S(O)_2C_1-C_3alkyl$), hoặc heteroaryl- CH_2- hoặc heteroaryl- $CH(C_1-C_2alkyl)-$ (ở mỗi nguyên tử trong đó heteroaryl tùy ý được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C_1-C_2alkyl , $C_1floalkyl$, $C_1-C_2alkoxy$, $C_1floalkoxy$, flo, clo, brom, xyano, nitro, S, $S(O)$, hoặc $S(O)_2$), hoặc phenyl- $C(O)-CH_2-$ (trong đó phenyl tùy ý được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C_1-C_2alkyl , $C_1floalkyl$, $C_1-C_2alkoxy$, $C_1floalkoxy$, flo, clo, brom, xyano, nitro, SC_1-C_3alkyl , $S(O)C_1-C_3alkyl$, hoặc $S(O)_2C_1-C_3alkyl$); hoặc $C_1-C_6alkoxy-C(O)-CH_2-$, $C_1-C_6alkoxy-C(O)-CH=CH-$, $C_2-C_7alken-1-yl-CH_2-$, $C_2-C_7alken-1-yl-CH(C_1-C_2alkyl)-$, $C_2-C_4floalken-1-yl-CH_2-$, $C_2-C_7alkyn-1-yl-CH_2-$, hoặc $C_2-C_7alkyn-1-yl-CH(C_1-C_2alkyl)-$; có thể được điều chế bằng cách xử lý hợp chất có công thức (2A), mà là hợp chất có công thức I trong đó Q là Q2 và G là H,

(a) với chất phản ứng G1-Z, trong đó G1-Z là tác nhân alkyl hóa (trong đó G1 là nhóm hữu cơ theo G trong hợp chất có công thức (I), trong đó Q là Q2, và được liên kết bởi nguyên tử cacbon không chứa carbonyl hoặc thiocarbonyl) như halogenua hữu cơ (trong đó Z = halogen như clo, brom hoặc iot); trong đó halogenua hữu cơ (ví dụ clorua) thông thường có thể là alkyl halogenua được thế (ví dụ clorua) như clometyl alkyl ete $Cl-CH_2-X^f-R^h$ trong đó X^f là oxy, clometyl alkyl sunfit $Cl-CH_2-X^f-R^h$ trong đó X^f là lưu huỳnh, halogenua benzyl được thế tùy ý thích hợp (ví dụ clorua) như $Cl-CH_2$ -[phenyl được thế tùy ý], [phenyl được thế tùy ý]- $C(O)-CH_2$ -[halogen ví dụ Cl], $C_1-C_6alkoxy-C(O)-CH_2$ -[halogen ví dụ Cl], $C_1-C_6alkoxy-C(O)-CH=CH-$

27 (9), 1577-1582; S. Chandra Roy và cộng sự, Chem. Letters, (2006), 35 (1), 16-17; P. K. Zubaidha và cộng sự, Tetrahedron Lett., (2004), 45, 7187-7188.

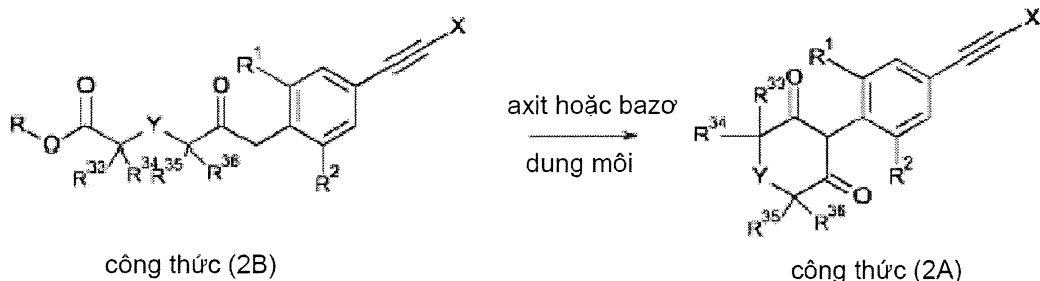
Quá trình O-axyl hóa các 1,3-dion vòng này có thể được thực hiện, ví dụ, bằng các quy trình tương tự với các quy trình được mô tả, ví dụ, bởi R. Haines, US4175135, và bởi T. Wheeler, US4422870, US4659372 và US4436666. Các dion thông thường có công thức (2A) có thể được xử lý với chất axyl hóa ưu tiên là với sự có mặt của ít nhất một đương lượng (tức là đương lượng mol) bazơ thích hợp, và tùy ý với sự có mặt của một dung môi thích hợp. Bazơ này có thể là bazơ vô cơ, như cacbonat hoặc hydroxit kim loại kiềm, hoặc hydrua kim loại, hoặc bazơ hữu cơ như amin bậc ba hoặc alkoxit kim loại. Các ví dụ về bazơ vô cơ thích hợp gồm có natri cacbonat, natri hoặc kali hydroxit, natri hydrua, và các bazơ hữu cơ thích hợp gồm có các trialkylamin, chẳng hạn như trimetylamin và trietylamin, các pyridin hoặc các bazơ amin khác như 1,4-diazobicyclo[2.2.2]-octan và 1,8-diazabicyclo[5.4.0]undec-7-en. Các bazơ ưu tiên bao gồm trietylamin và pyridin. Các dung môi thích hợp cho phản ứng này được lựa chọn để tương hợp với các chất phản ứng và bao gồm các ete chẳng hạn như tetrahydrofuran và 1,2-dimethoxyetan và dung môi được halogen hóa chẳng hạn như diclometan và clorofom. Một số bazơ nhất định, chẳng hạn như pyridin và trietylamin, có thể được dùng thành công làm bazơ và dung môi. Đối với các trường hợp mà tác nhân axyl hóa là axit carboxylic, quá trình axyl hóa tốt hơn là được thực hiện với sự có mặt của tác nhân nổi đã biết chẳng hạn như 2-clo-1-metylpyridin iodua, N,N'-dicyclohexylcarbodiimide, 1-(3-dimetylaminopropyl)-3-ethylcarbodiimide và N,N'-carbodiimidazol, và tùy ý với sự có mặt của bazơ như trietylamin hoặc pyridin trong dung môi thích hợp như tetrahydrofuran, diclometan hoặc axetonitril. Các quy trình thích hợp được mô tả, ví dụ, bởi W. Zhang và G. Pugh, Tetrahedron Lett., (1999), 40 (43), 7595-7598; T. Isobe và T. Ishikawa, J. Org. Chem., (1999), 64 (19), 6984-6988 và K. Nicolaou, T. Montagnon, G. Vassilikogiannakis, C. Mathison, J. Am. Chem. Soc., (2005), 127(24), 8872-8888.

Quá trình phosphoryl hóa các 1,3-dion vòng có thể được thực hiện, ví dụ, nhờ sử dụng phosphoryl halua hoặc thiophosphoryl halua và bazơ, ví dụ, bởi các quy trình tương tự với các quy trình được mô tả bởi L. Hodakowski, US4409153.

Quá trình sulfonyl hóa hợp chất có công thức (2A) có thể được thực hiện, ví dụ, sử dụng alkyl hoặc aryl sulfonyl halogenua, ưu tiên là với sự có mặt của ít nhất một đương lượng (tức là đương lượng mol) bazơ, ví dụ bằng quy trình của C. Kowalski và K. Fields, J. Org. Chem., (1981), 46, 197-201.

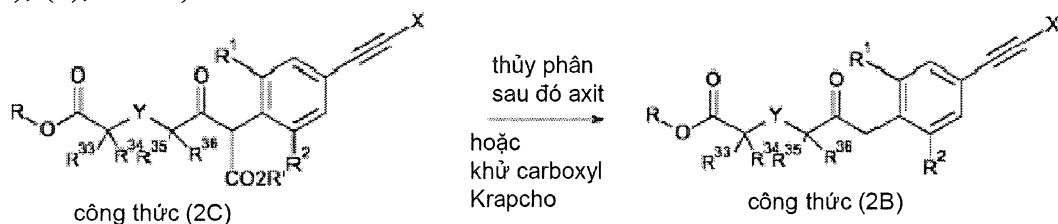
Hợp chất có công thức (2A), trong đó Y là S(O) hoặc S(O)₂ có thể được điều chế từ hợp chất có công thức (2A) trong đó Y là S bằng cách oxy hóa, ví dụ theo quy trình tương đồng với quy trình của E. Fehnel và A. Paul, J. Am. Chem. Soc., (1955), 77, 4241-4244.

Hợp chất có công thức (2A), trong đó Y là O, S, C(O) hoặc CR³⁸R³⁹ có thể được điều chế bằng cách tạo vòng cho hợp chất có công thức (2B), ưu tiên là với sự có mặt của axit hoặc bazơ, và với sự có mặt của dung môi thích hợp tùy ý, ví dụ bằng các phương pháp tương đồng với các phương pháp được mô tả bởi T. Wheeler, US4209532. Hợp chất có công thức (2B) được thiết kế đặc biệt như chất trung gian trong việc tổng hợp hợp chất có công thức I trong đó Q là Q₂, và khía cạnh khác của sáng chế mà không là phần sáng chế bảo hộ đề xuất hợp chất có công thức (2B) (xem dưới đây). Hợp chất có công thức (2B) trong đó R là hydro hoặc C₁-C₄alkyl, (đặc biệt là metyl, etyl và tert-butyl) có thể là được tạo vòng trong điều kiện axit, ưu tiên là với sự có mặt của axit mạnh như axit sulfuric, axit polyphosphoric hoặc chất phản ứng Eaton, với sự có mặt của dung môi thích hợp tùy ý như axit axetic, toluen hoặc diclometan. Hợp chất có công thức (2B) trong đó R là alkyl (ưu tiên là metyl hoặc etyl) cũng có thể được tạo vòng trong các điều kiện cơ bản với sự có mặt của ít nhất một đương lượng (tức là đương lượng mol) bazơ mạnh trong dung môi như tetrahydrofuran, toluen, dimetylsulfoxit hoặc N,N-dimetylformamit. Các bazơ thích hợp bao gồm kali tert-butoxit, lithi diisopropylamit, natri bis(trimetylsilyl)amit hoặc natri hydrua. Hợp chất có công thức (2B), trong đó R là alkyl, có thể được tạo ra từ hợp chất có công thức (2B), trong đó R là H, bằng cách este hóa trong các điều kiện đã biết (ví dụ bằng cách xử lý với rượu, R-OH, với sự có mặt của chất xúc tác axit).

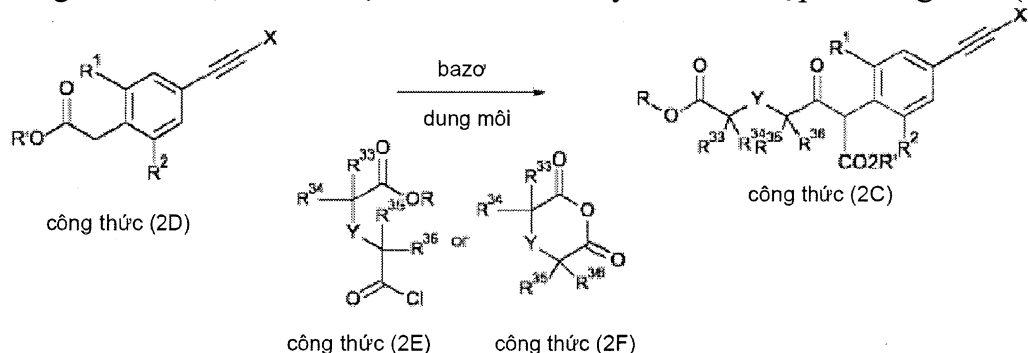


Hợp chất có công thức (2B), trong đó R là H, có thể được điều chế bằng cách thủy phân hợp chất có công thức (2C) trong đó R là H hoặc alkyl và R' là alkyl (ưu tiên là metyl hoặc etyl), sau đó axit hóa hỗn hợp phản ứng để tạo thành sự tách carboxyl, ví dụ bằng các quy trình tương tự với các quy trình được mô tả bởi, ví dụ, T. Wheeler, US4209532. Tùy ý, hợp chất có công thức (2B), trong đó R là alkyl hoặc H có thể được điều chế từ hợp chất có công thức (2C), trong đó R' là alkyl (ưu tiên là

metyl), thông qua quy trình tách carboxyl Krapcho, ví dụ trong các điều kiện đã biết sử dụng các chất phản ứng đã biết (ví dụ xem G. Quallich, P. Morrissey, *Synthesis*, (1993), (1), 51-53).



Hợp chất có công thức (2C) trong đó R là alkyl có thể được điều chế bằng cách xử lý hợp chất có công thức (2D) với clorua của axit carboxylic thích hợp có công thức (2E) trong đó R là alkyl trong các điều kiện bazơ. Các bazơ thích hợp bao gồm kali tert-butoxit, natri bis(trimetyl-silyl)amit và lithi diisopropylamit và phản ứng này tốt hơn là được tiến hành trong dung môi thích hợp (như tetrahydrofuran hoặc toluen) ở nhiệt độ giữa -78°C và 30°C . Trong các điều kiện tương tự hợp chất có công thức (2C), trong đó R là H, có thể được điều chế từ anhydrit thích hợp có công thức (2F).



Hợp chất có công thức (2E) và có công thức (2F) là đã biết (tham khảo, ví dụ T. Terasawa và T. Okada, *J. Org. Chem.*, (1977), 42 (7), 1163-1169; G. Bennett, W. Houlihan, R. Mason; R. Engstrom, *J. Med. Chem.*, (1976), 19 (5), 709-14; L. J. J. Hronowski, Lucjan W. A. Szarek, *Canadian Journal of Chemistry* (1988), 66(1), 61-70; S. F. Birch, V. E. Gripp, D. T. McAllan, W. S. Nathan, *Journal of the Chemical Society* (1952), 1363-8; S. Kitamura, T. D. Aicher, Gonzales, Steve; Y. Le Huerou, S. A. Pratt, Y. Nakada, WO 2008011130; O. Jentzer, M. Guglieri, WO 2009092795), hoặc có thể được thực hiện bằng các phương pháp tương tự từ các nguyên liệu ban đầu đã được bán trên thị trường.

Hợp chất có công thức (2D), trong đó X là metyl và R' là $\text{C}_1\text{-C}_4$ alkyl, có thể được điều chế bằng cách cho hợp chất có công thức (2G) phản ứng với propyn với sự có mặt của chất xúc tác thích hợp, tùy ý chất phụ gia thích hợp, tùy ý trong dung môi thích hợp ở nhiệt độ thích hợp. Các chất xúc tác thích hợp gồm có các muối kim loại

chuyển tiếp hoặc phức chất của các muối kim loại chuyển tiếp (ví dụ paladi axetat, bis(triphenylphosphin) paladi(II) diclorua, tetrakis(triphenyl-phosphin)paladi(0), bis(triphenylphosphin) niken(II) diclorua và tris(axetylaxetonato) iron(III)), với một lượng thông thường nằm trong khoảng từ 0,001-25% mol đối với hợp chất có công thức (2G). Các chất phụ gia thích hợp gồm có các muối đồng, ví dụ đồng(I) iodua với lượng thông thường nằm trong khoảng từ 0,001-50% mol đối với hợp chất có công thức (2G), và các muối tetraalkyl amoni. Các bazơ thích hợp bao gồm dietylamín, trietylamin, piperidin và pyrrolidin, và các dung môi thích hợp bao gồm 1,4-dioxan, N,N-dimetylaxetamit hoặc N,N-dimetylformamit. Ưu tiên là phản ứng được thực hiện sử dụng 0,05-10% mol bis(triphenylphosphin) paladi(II) diclorua (đối với hợp chất có công thức (2G)), 0,05-10% mol triphenylphosphin (đối với hợp chất có công thức (2G)), 0,05-25% mol đồng(I) iodua (đối với hợp chất có công thức (2G)), 5-200% mol tetrabutyl amoni iodua (đối với hợp chất có công thức (2G)), trietylamin và N,N-dimetylformamit ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ 25°C đến 150°C. Phản ứng này là ví dụ về phản ứng ghép đôi Sonogashira và phản ứng tương tự đã biết trong các tài liệu (ví dụ xem F. Labrie, S. Gauthier, J. Cloutier, J. Mailhot, S. Potvin, S. Dion, J-Y. Sanceau, WO 2008124922; M. S. Viciu, S. P. Nolan, *Modern Arylation Methods* (2009), 183-220; R. Chinchilla, C. Najera, *Chemical Reviews* (2007), 107(3), 874-922; I. P. Beletskaya, G. V. Latyshev, A. V. Tsvetkov, N. V. Lukashev, *Tetrahedron Letters* (2003), 44(27), 5011-5013 và J. Mao, G. Xie, M. Wu, J. Guo, S. Ji, *Advanced Synthesis & Catalysis* (2008), 350(16), 2477-2482). Theo một nghiên cứu khác hợp chất có công thức (2D) có thể được điều chế từ hợp chất có công thức (2G) bằng cách cho phản ứng với chất phản ứng chuyển tiếp propynyl như 1-propynyllithi, 1-propynylmagie bromua, 1-propynylmagie clorua, 1-propynylmagie iodua, 1-propynyl kẽm clorua, 1-propynyl kẽm bromua, 1-propynyl kẽm iodua, tributylpropynylstanan, axit 1-propyn-1-boronic (hoặc este của chúng), axit 2-butynoic hoặc 1-(trimetylsilyl)propyn, với hệ xúc tác kim loại chuyển tiếp trong các điều kiện thích hợp (ví dụ xem P. Wessig, G. Mueller, C. Pick, A. Matthes, *Synthesis* (2007), (3), 464-477; J. H. Chaplin, G. S. Gill, D. W. Grobelny, B. L. Flynn, G. Kremmidiotis, WO07087684; A. Akao, T. Tsuritani, S. Kii, K. Sato, N. Nonoyama, T. Mase, N. Yasuda, *Synlett* (2007), (1), 31-36. A. Coelho Coton, E. Sotelo Perez, F. Guitian Rivera, A. Gil Gonzalez, WO 2011048247; C. H. Oh, S. H. Jung, *Tetrahedron Letters* (2000), 41(44), 8513-8516; D. Zhao, C. Gao, X. Su, Y. He, J. You, Y. Xue, *Chemical Communications* (2010), 46(47), 9049-9051; C. Yang, S. P. Nolan, *Organometallics*

(2002), 21(6), 1020-1022). Trong tập hợp các điều kiện được ưu tiên, hợp chất có công thức (2G) được cho phản ứng với 1-propynylmagie bromua với sự có mặt của 0,05-10% mol bis(triphenylphosphin) paladi(II) diclorua (đối với hợp chất có công thức (2G)), trong tetrahydrofuran ở nhiệt độ nằm trong khoảng giữa 25°C và 100°C, như được mô tả bởi J. H. Chaplin, G. S. Gill, D. W. Grobelny, B. L. Flynn, G. Kremmiodiotis, WO 07087684. Hợp chất có công thức (2G) là đã biết, hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết sử dụng các chất phản ứng đã biết.

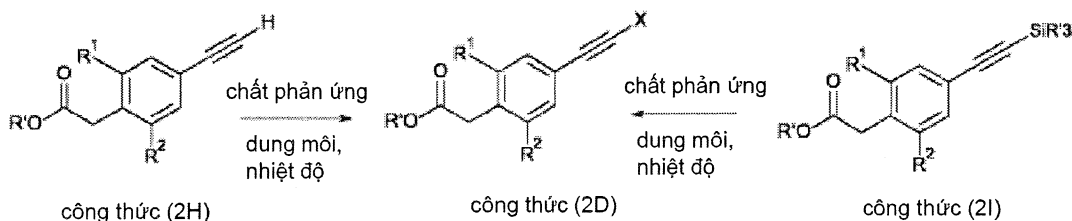


Hợp chất có công thức (2D), trong đó X là clo và R' là C₁-C₄alkyl, có thể được điều chế từ hợp chất có công thức (2H) hoặc hợp chất có công thức (2I). Theo một phương án hợp chất có công thức (2H) bị khử proton lần đầu với bazơ như butyllithi, natri hydrua, lithi diisopropylamit hoặc etylmagie bromua, sau đó được cho phản ứng với nguồn clo như N-clo succinimit, clo hoặc cacbon tetracolorua. Nguồn clo cụ thể được chọn để tạo ra clo-axetylen yêu cầu. Các phản ứng và điều kiện tương tự được báo cáo trong tài liệu (ví dụ xem M. Tajbakhsh, S. Habibzadeh, Letters in Organic Chemistry (2007), 4(7), 512-514; D. Sud, T. J. Wigglesworth, N. R. Branda, Angewandte Chemie, International Edition (2007), 46(42), 8017-8019; M. A. P. Martins, D. J. Emmerich, C. M. P. Pereira, W. Cunico, M. Rossato, N. Zanatta, H. G. Bonacorso, Tetrahedron Letters (2004), 45(25), 4935-4938; A. Poloukhine, V. Rassadin, A. Kuzmin, V. V. Popik, Journal of Organic Chemistry (2010), 75(17), 5953-5962; C. R. Hickenboth, J. D. Rule, J. S. Moore, Tetrahedron (2008), 64(36), 8435-8448; F. H. M. Graichen, A. C. Warden, S. Kyi, M. S. O'Shea, Australian Journal of Chemistry (2010), 63(4), 719-722; và M. L. Narayana, M. L. N. Rao, M. Periasamy, Synthetic Communications (1995), 25(15), 2295-9).

Theo phương án khác hợp chất có công thức (2D), trong đó X là Clo và R' là C₁-C₄alkyl, có thể được điều chế từ hợp chất có công thức (2H) bằng cách xử lý với hỗn hợp các chất phản ứng là đã biết để thúc đẩy sự clo hóa, như kali cacbonat, tetrabutylamoni bromua và cacbon tetracolorua (ví dụ xem T. Matsuda, S. Kadowaki, Y. Yamaguchi, M. Murakami, Chemical Communications (2008), (24), 2744-2746), pyridin và clo (ví dụ xem R. B. Gutsulyak, V. N. Britsuk, L. A. Kostrikina, Y.

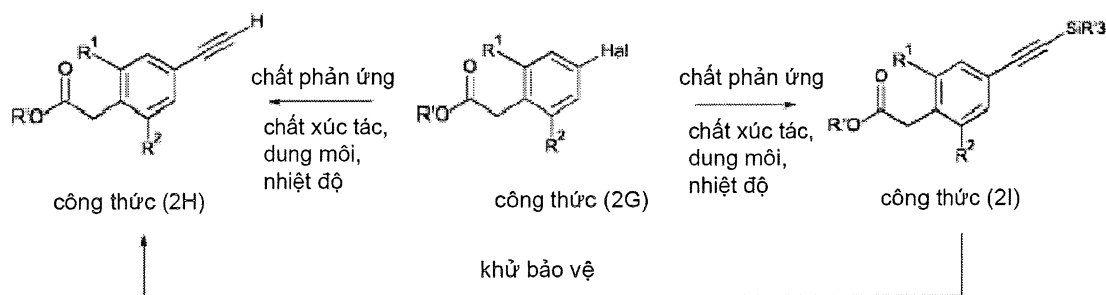
Serguchev, *Ukrainskii Khimicheskii Zhurnal* (1993), 59(10), 1062-7), bạc nitrat và N-clo succinimit, N-clo succinimit và hexametylphosphoramit (ví dụ xem G. Pangon, J. L. Philippe, P. Cadiot, *Comptes Rendus des Seances de l'Academie des Sciences, Serie C: Sciences Chimiques* (1973), 277(18), 879-81), và/hoặc axit percloric và axit axetic (ví dụ xem J. P. Montheard, M. Camps, M. Chatzopoulos, M. O. A. Yahia, R. Guilluy, D. Deruaz, *Journal of Chemical Research, Synopses* (1983), (9), 224-5). Các điều kiện được chọn để tạo ra clo-axetylen yêu cầu. Khi X là clo, các điều kiện được ưu tiên gồm có cho hợp chất có công thức (2H) phản ứng với 1-5 đương lượng mol của N-clo succinimit và 0,05-50% mol bạc axetat (đối với hợp chất có công thức (2H)) trong axeton ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ 25°C đến 100°C.

Hợp chất có công thức (2I), trong đó R' là C₁-C₄alkyl và R' là C₁-C₄alkyl, còn có thể được chuyển đổi trực tiếp thành hợp chất có công thức (2D), ví dụ bằng cách xử lý với isoxyanuric clorua hoặc N-clo succinimit và bạc nitrat (ví dụ xem M. H. Vilhelmsen, A. S. Andersson, M B. Nielsen, *Synthesis* (2009), (9), 1469-1472).

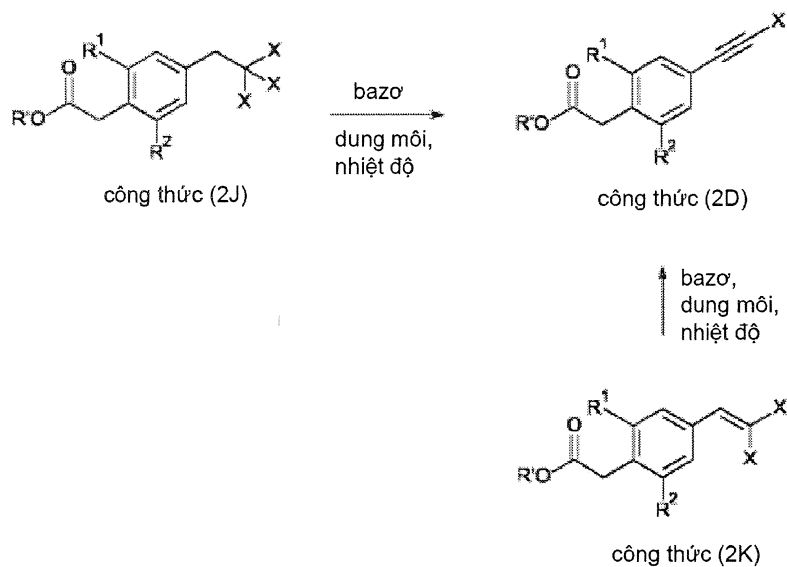


Hợp chất có công thức (2I), trong đó R' là C₁-C₄alkyl và R' là C₁-C₄alkyl, có thể được điều chế bằng cách cho hợp chất có công thức (2G) phản ứng với trialkylsilylaxetylen, trong các điều kiện tương tự được mô tả trước đây để chuyển đổi hợp chất có công thức (2G) thành hợp chất có công thức (2D) (trong đó X là metyl).

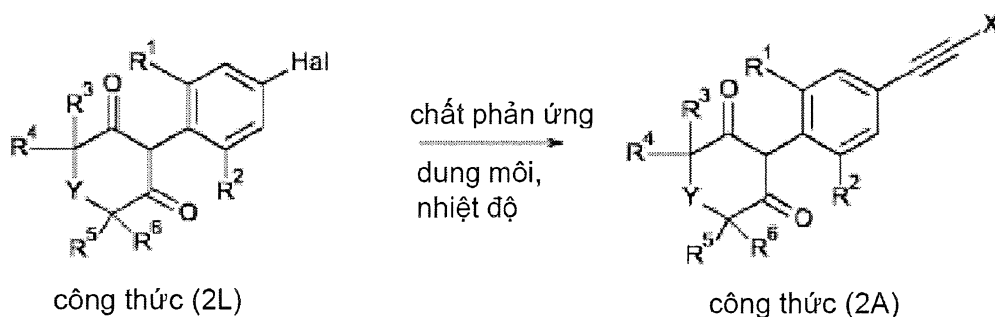
Hợp chất có công thức (2H) có thể hoặc là được điều chế bằng cách khử bảo vệ hợp chất có công thức (2I) trong các điều kiện đã biết, hoặc bằng cách cho hợp chất có công thức (2G) phản ứng với các chất phản ứng chuyển tiếp etynyl như tributylstannylaxetylen, phức chất lithi axetylit etylendiamin, etynyl kẽm bromua hoặc etynylmagie clorua với sự có mặt của hệ xúc tác thích hợp, ví dụ trong các điều kiện tương tự với các điều kiện đã được mô tả trong tài liệu tham khảo (ví dụ xem C. Fischer, J. Methot, H. Zhou, A. J. Schell, B. Munoz, A. A. Rivkin, S. P. Ahearn, S. Chichetti, R. N. Maccoss, S. D. Kattar, M. Christopher, C. Li, A. Rosenau, W. C. Brown, WO 2010071741; M. Behler, A. Eluntlaut, C. Ferman, A. Chapuf, CN 101195641; G. Wang, G. Zhu, E. Negishi, *Journal of Organometallic Chemistry* (2007), 692(21), 4731-4736 và E. Negishi, M. Kotora, C. Xu, *Journal of Organic Chemistry* (1997), 62(25), 8957-8960).



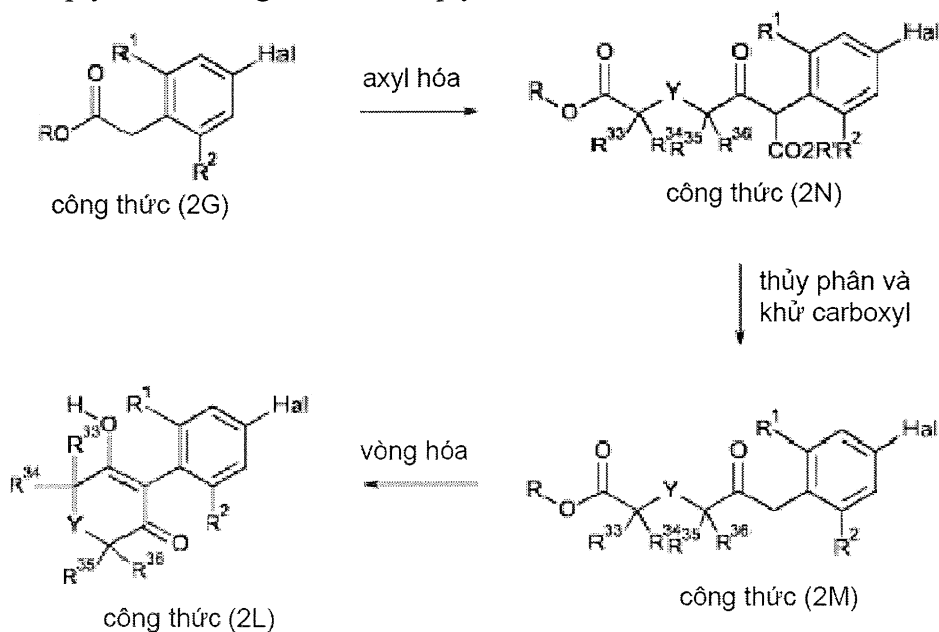
Theo phương án khác, hợp chất có công thức (2D) (trong đó X là clo) có thể hoặc là được điều chế từ hợp chất có công thức (2J) hoặc hợp chất có công thức (2K), bằng cách xử lý với bazơ thích hợp, trong dung môi thích hợp, ở nhiệt độ thích hợp. Hợp chất có công thức (2J) có thể được biến đổi thành hợp chất có công thức (2D) trong các điều kiện tương tự với các điều kiện đã được mô tả trong tài liệu tham khảo, ví dụ xử lý sử dụng kali tert-butoxit trong tert-butanol ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ 25°C đến 150°C, hoặc lithi 2,2,6,6-tetramethylpiperidin trong tetrahydrofuran ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ -25°C đến 50°C (ví dụ xem E. Bartmann, R. Hittich, H. Plach, U. Finkenzeller, US5188759 và Indian Journal of Chemistry, Section B: Organic Chemistry Including Medicinal Chemistry, 1978, tập 16, 1051-1054). Hợp chất có công thức (2K) còn có thể được biến đổi thành hợp chất có công thức (2D) trong các điều kiện tương tự với điều kiện đã được mô tả trong tài liệu tham khảo, ví dụ bằng cách xử lý với xesi cacbonat trong N,N-dimetylformamit ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ 25°C đến 150°C, natri tert-butoxit trong toluen ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ 25°C đến 150°C, 1,8-diazabicyclo[5.4.0]undec-7-en trong dimetylsulfoxit ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ 0°C đến 50°C, hoặc kali tert-butoxit trong tetrahydrofuran ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ -78°C đến 25°C (ví dụ xem B. C. G. Soederberg, S. P. Gorugantula, C. R. Howerton, J. L. Petersen, S. W. Dantale, Tetrahedron (2009), 65(36), 7357-7363; S-C. Lo, R. E. Harding, E. Brightman, P. L. Burn, I. D. W. Samuel, Journal of Materials Chemistry (2009). 19(20), 3213-3227; S. Wang, T. Kohn, Z. Fu, X. Y. Jiao, S. Lai, M. Schmitt, Tetrahedron Letters (2008), 49(51), 7284-7286 và M. L. G. Borst, R. E. Bulow, D. J. Gibney, Y. Alem, F. J. J. de Kanter, A. W. Ehlers, M. Schakel, M. Lutz, A. L. Spek, K. Lammertsma, Journal of the American Chemical Society (2005), 127(48), 16985-16999). Hợp chất có công thức (2J) và (2K) (trong đó X là clo) có thể được điều chế từ hợp chất đã biết sử dụng các phương pháp và các chất phản ứng đã biết.



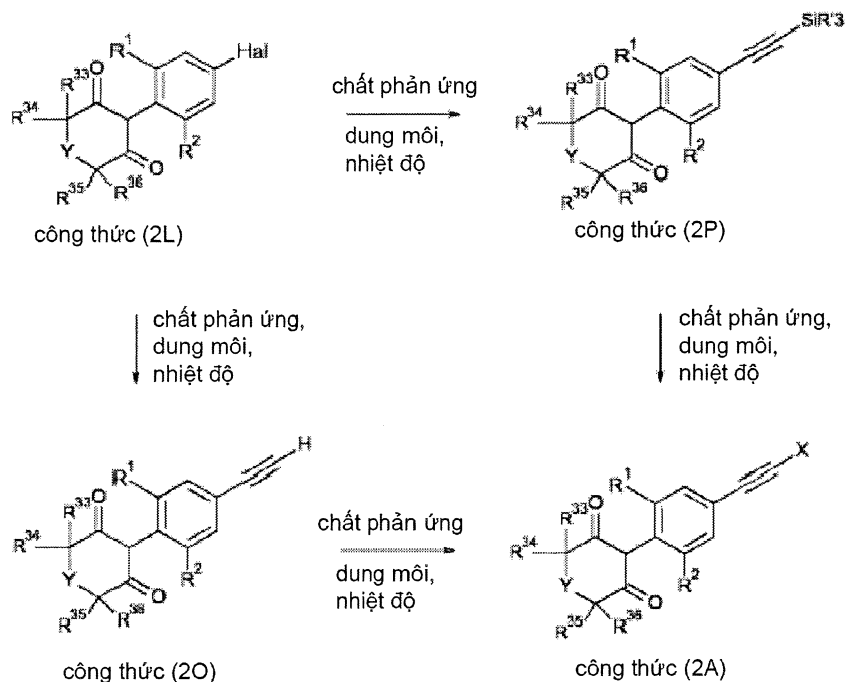
Theo phương án khác hợp chất có công thức (2A), trong đó X là metyl, có thể được điều chế trực tiếp từ hợp chất có công thức (2L), trong các điều kiện tương tự được mô tả từ trước để biến đổi hợp chất có công thức (2G) thành hợp chất có công thức (2D).



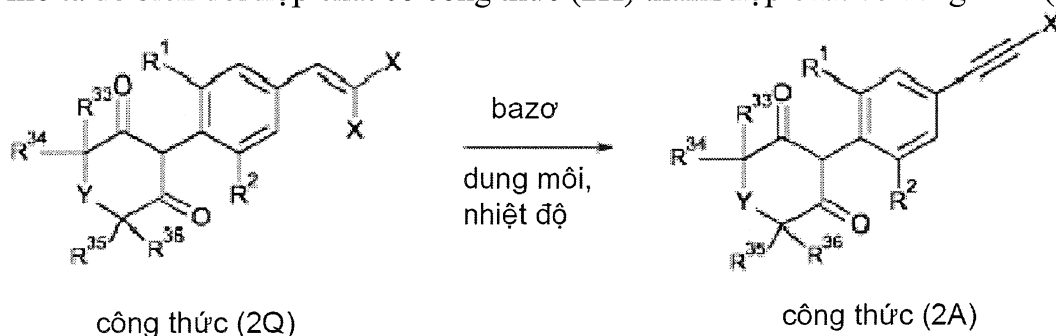
Hợp chất có công thức (2L) có thể được điều chế từ hợp chất có công thức (2G) sử dụng các quy trình tương tự với các quy trình đã được chỉ ra trước đó.



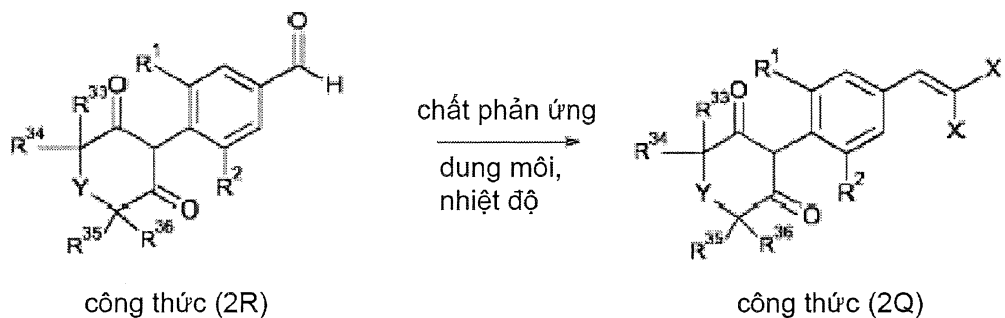
Hợp chất có công thức (2A), trong đó X là clo, có thể được điều chế từ hợp chất có công thức (2L), qua hoặc là hợp chất có công thức (2O) hoặc hợp chất có công thức (2P) (trong đó R' là C₁-C₄alkyl), ví dụ trong các điều kiện tương tự với các điều kiện được mô tả từ trước.



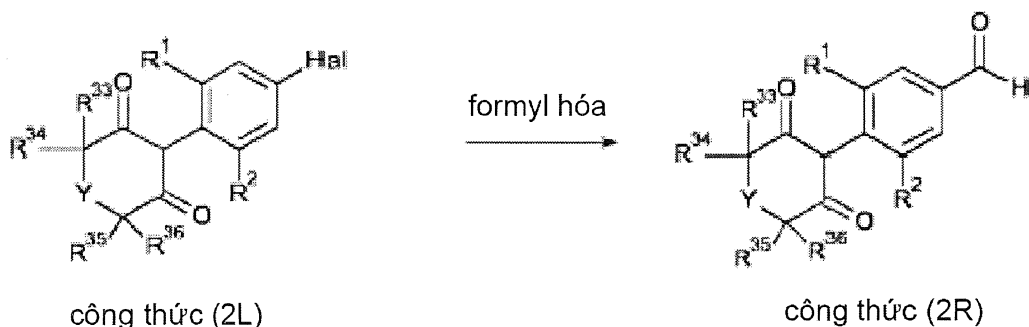
Hợp chất có công thức (2A), trong đó X là clo, cũng có thể được điều chế từ hợp chất có công thức (2Q), ví dụ trong các điều kiện tương tự với các điều kiện đã được mô tả để biến đổi hợp chất có công thức (2K) thành hợp chất có công thức (2D).



Hợp chất có công thức (2Q), trong đó X là clo có thể được điều chế từ aldehyt có công thức (2R) bằng cách xử lý với triphenylphosphin với sự có mặt của cacbon tetraclorea trong dung môi thích hợp ở nhiệt độ thích hợp. Cacbon tetraclorea được chọn để tạo ra dicloalken yêu cầu, và các phản ứng tương tự được biết trong tài liệu (ví dụ xem A. Poloukhtine, V. V. Popik, Journal of the American Chemical Society (2007), 129(40), 12062-12063; L. N. Michaelides, B. Darses, D. J. Dixon, Organic Letters (2011), 13(4), 664-667 và F. Gavina, S. V. Luis, P. Ferrer, A. M. Costero, J. A. Marco, Journal of Chemical Research, Synopses (1986), (9), 330-1).

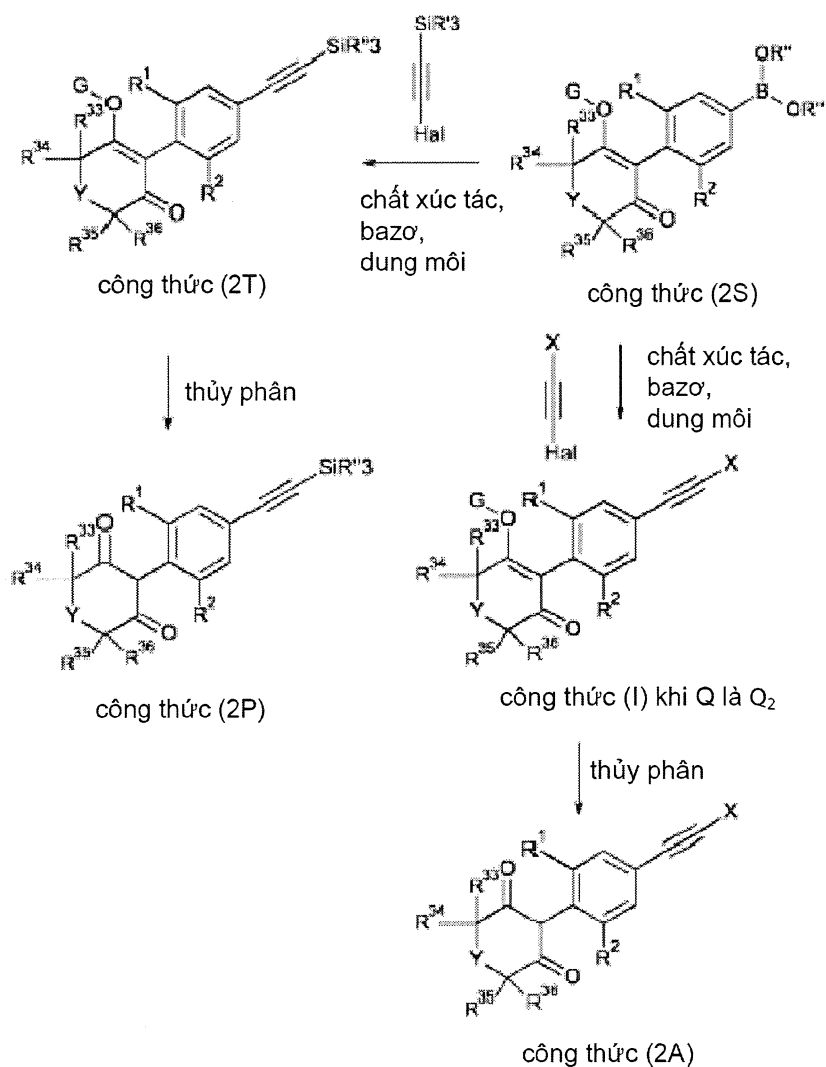


Hợp chất có công thức (2R) có thể được điều chế bằng cách formyl hóa hợp chất có công thức (2L) (trong đó Hal là clo, brom hoặc iot, ưu tiên là brom hoặc iot). Các điều kiện thích hợp để tác động việc formyl hóa các aryl halogenua là đã biết, và gồm có, ví dụ, xử lý aryl halogenua với chất phản ứng kim loại hữu cơ thích hợp, như isopropyl magie clorua, n-butyllithi, sec-butyllithi hoặc tert-butyllithi, hoặc bằng cách xử lý với kim loại kiềm hoặc kim loại kiềm thổ thích hợp như lithi hoặc magie trong dung môi thích hợp, như dietyl ete, dimetoxietan hoặc tetrahydrofuran. Các chất aryl kim loại thu được sau đó được phản ứng với chất formyl hóa thích hợp như N,N-dimetylformamit hoặc N-formylmorpholin. Tùy ý hợp chất có công thức (2R) có thể được điều chế từ hợp chất có công thức (2L) (trong đó Hal cũng có thể là giả halogen như triflat) bằng cách xử lý với chất carbonyl hóa (như cacbon monoxit với sự có mặt của hệ xúc tác, bazơ, và chất khử thích hợp (ví dụ xem L. Ashfield và C. Barnard, Org. Process Res. Dev., 11 (1), 39 -43, 2007)).



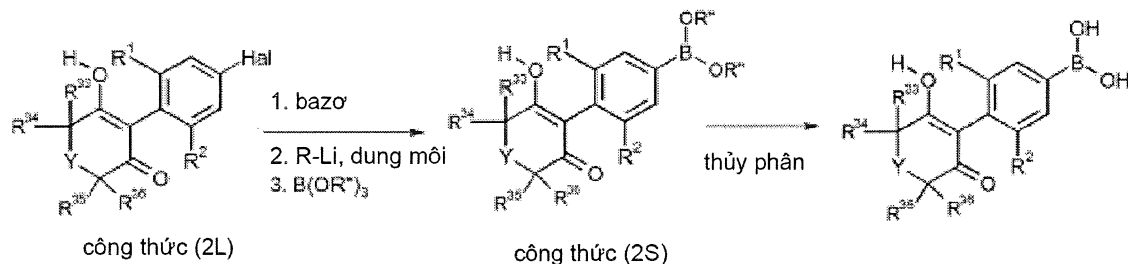
Theo một phương án khác, hợp chất có công thức I, trong đó Q là Q2, X là metyl, và trong đó G được ưu tiên là alkyl được thế (ví dụ phenyl được thế tùy ý-CH₂- hoặc heteroaryl-CH₂-), hoặc hydro, hoặc metyl hoặc etyl (hai chất sau không có mặt trong công thức I nhưng có thể được biến đổi thành G = H sau đó), có thể được điều chế từ axit boronic hoặc este boronic có công thức (2S) bằng cách xử lý với hoặc là 1-bromo-1-propyn hoặc 1-iodo-1-propyn, ưu tiên là với sự có mặt của hệ xúc tác thích hợp thích hợp, bazơ thích hợp và/hoặc dung môi thích hợp và/hoặc ở nhiệt độ thích hợp. Các phản ứng tương tự là đã biết đến trong lĩnh vực, và các điều kiện được ưu

tiên gồm có cho hợp chất có công thức (2S) phản ứng với 1-iodo-propyn với sự có mặt của 0,005-25% mol paladi(II) clorua (đối với hợp chất có công thức (2S)) và 1-10 đương lượng (tức là đương lượng mol) kali cacbonat, ưu tiên là trong hỗn hợp toluen, nước và metanol ở nhiệt độ nằm trong khoảng 50°C-150°C, như được mô tả bởi Y. Shi, X. Li, J. Liu, W. Jiang, L. Sun, Tetrahedron Letters (2010), 51(28), 3626-3628. Hợp chất có công thức (2T), trong đó G được ưu tiên là metyl hoặc etyl và R'' là C₁-C₄alkyl, có thể được điều chế trong các điều kiện tương tự sử dụng hoặc là 1-bromo-2-(trimetylsilyl)axetylen hoặc 1-iodo-2-(trimetylsilyl)axetylen như các thành phần ghép nối. Hợp chất có công thức (2A) và (2P) có thể được điều chế từ hợp chất có công thức I, trong đó Q là Q₂, và (2T) tương ứng, bằng cách thủy phân ete enol.

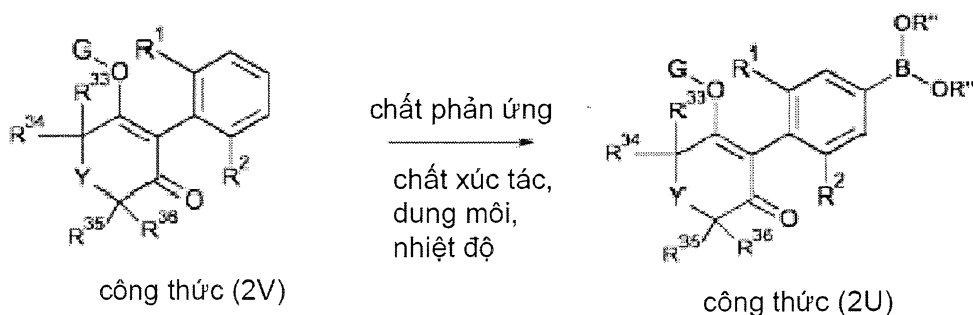


Theo một phương án, hợp chất có công thức (2S) có thể được điều chế từ hợp chất có công thức (2L) (trong đó Hal được ưu tiên là iot hoặc brom), ưu tiên bằng cách xử lý với bazơ thích hợp, chẳng hạn như natri hydrua, kali hydrua hoặc isopropyl magie clorua, trong dung môi thích hợp, như tetrahydrofuran hoặc dietyl ete, tiếp sau

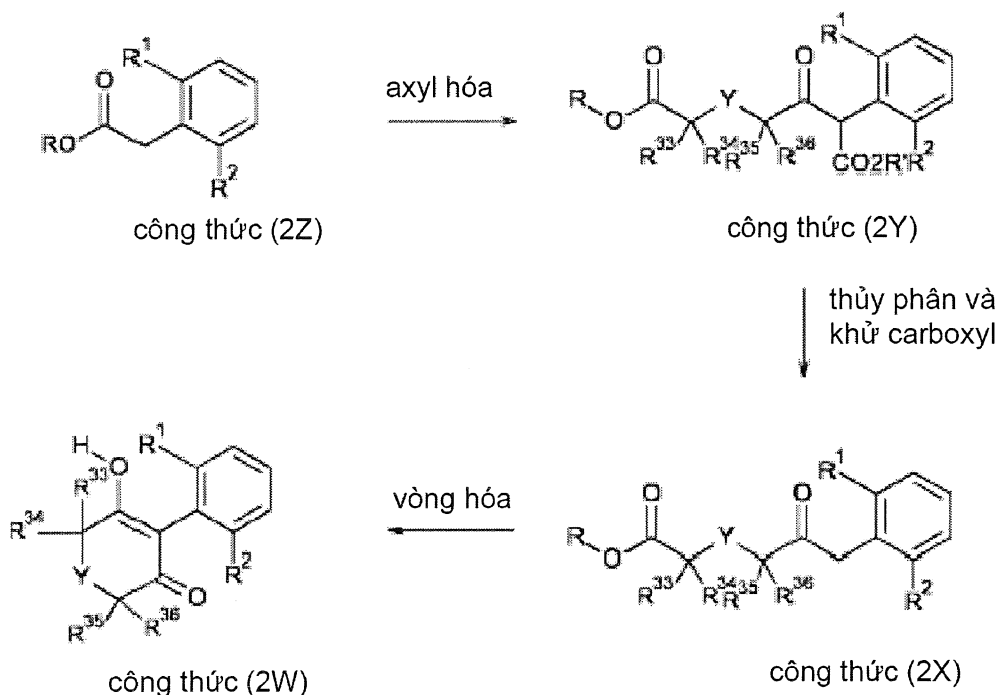
là phản ứng trao đổi halogen kim loại, ưu tiên là bằng cách xử lý với chất phản ứng alkyllithi như n-butyllithi, sec-butyllithi hoặc tert-butyllithi, hoặc chất phản ứng magie hữu cơ chẳng hạn như isopropyl magie clorua, và tiếp theo xử lý với trialkylborat, $B(OR'')_3$, ưu tiên là trimetylborat, để tạo ra este boronat thích hợp có công thức (2S).



Theo một phương án khác, hợp chất có công thức (2U) có thể được điều chế từ hợp chất có công thức (2V), trong đó G được ưu tiên là alkyl được thế (ví dụ phenyl được thế tùy ý -CH₂- hoặc heteroaryl-CH₂-), hoặc metyl hoặc etyl (hai chất sau không có mặt trong G xác định trước trong công thức I nhưng có thể biến đổi thành G = H sau đó), bằng cách boryl hóa C-H với chất boryl hóa thích hợp, hệ xúc tác thích hợp, trong dung môi thích hợp ở nhiệt độ thích hợp. Các chất xúc tác thích hợp bao gồm 1,5-xyclooctadien)(metoxy)iridi(I) dime kết hợp với 4,4'-di-tert-butyl-2,2'-dipyridyl, tác nhân boryl hóa thích hợp bao gồm bis(pinacolato)diboron hoặc pinacol boran, và các dung môi thích hợp bao gồm hexan, octan, tetrahydrofuran và metyl tert-butyl etc. Các ví dụ tương tự được biết trong tài liệu (ví dụ xem J. F. Hartwig, Chemical Society Reviews (2011), 40(4), 1992-2002 và T. Ishiyama, N. Miyaura, Pure and Applied Chemistry (2006), 78(7), 1369-1375). Các điều kiện được ưu tiên gồm có xử lý hợp chất có công thức (2V) bởi 0,05-10% mol 1,5-xyclooctadien)(metoxy)iridi (I) dime (đối với hợp chất có công thức (2V)), 0,05-10% mol 4,4'-di-tert-butyl-2,2'-dipyridyl (đối với hợp chất có công thức (2V)), và 1-2 đương lượng (tức là đương lượng mol) của bis(pinacolato)diboron (đối với hợp chất có công thức (2V)) trong ete metyl tert-butyl ở nhiệt độ nằm trong khoảng 50°C -150°C, cùng với việc chiếu xạ vi sóng một cách tùy ý, như được mô tả bởi P. Harrison, J. Morris, T. B. Marder, P. G. Steel, Organic Letters (2009), 11(16), 3586-3589.



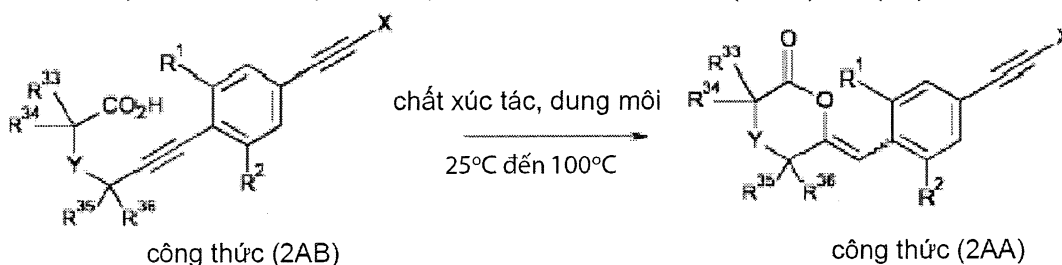
Hợp chất có công thức (2W) có thể được điều chế từ hợp chất có công thức (2X) sử dụng các quy trình tương tự được mô tả từ trước, bắt đầu từ hợp chất có công thức (2Z) là hợp chất đã biết.



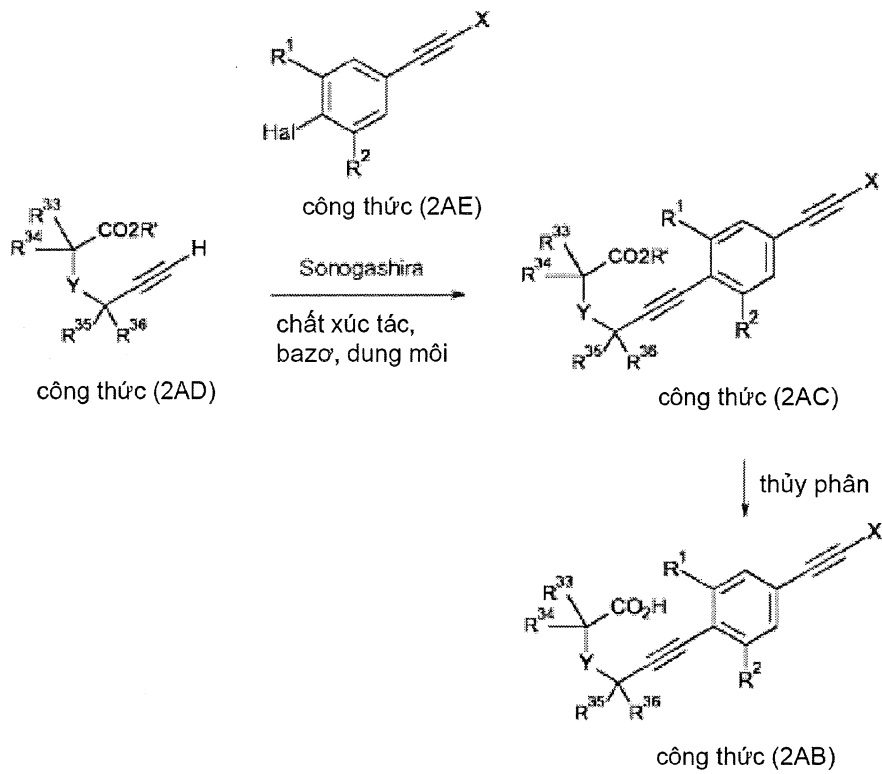
Theo phương án khác của hợp chất theo sáng chế, hợp chất có công thức (2A), trong đó X là methyl, có thể được điều chế thông qua việc sắp xếp lại hợp chất có công thức (2AA), với sự có mặt của chất phản ứng thúc đẩy sự sắp xếp lại. Ưu tiên là, chất phản ứng thúc đẩy sự sắp xếp lại là (i) kim loại alkoxit (ví dụ natri hoặc kali metoxit), ưu tiên là với lượng tương đương hoặc lớn hơn 100% mol đối với hợp chất có công thức (2AA), hoặc là (ii) anion xyanua, ví dụ 0,001-25% mol kali xyanua hoặc 0,001-25% mol natri xyanua đối với hợp chất có công thức (2AA), hoặc là (iii) xyanohydrin, ưu tiên là 0,001-25% mol axeton xyanohydrin đối với hợp chất có công thức (2AA). Phản ứng này được ưu tiên được thực hiện trong dung môi thích hợp (ví dụ dung môi hữu cơ, ví dụ N, N-dimetylformamit) và/hoặc ở nhiệt độ thích hợp (thường nằm trong khoảng từ 25 đến 150°C). Ưu tiên hơn là, hợp chất có công thức (2A) trong đó X là methyl được điều chế bằng cách xử lý hợp chất có công thức (2AA) với 1-3 đương lượng (tức là đương lượng mol) natri metoxit trong N, N-dimetylformamit ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ 50°C đến 100°C.



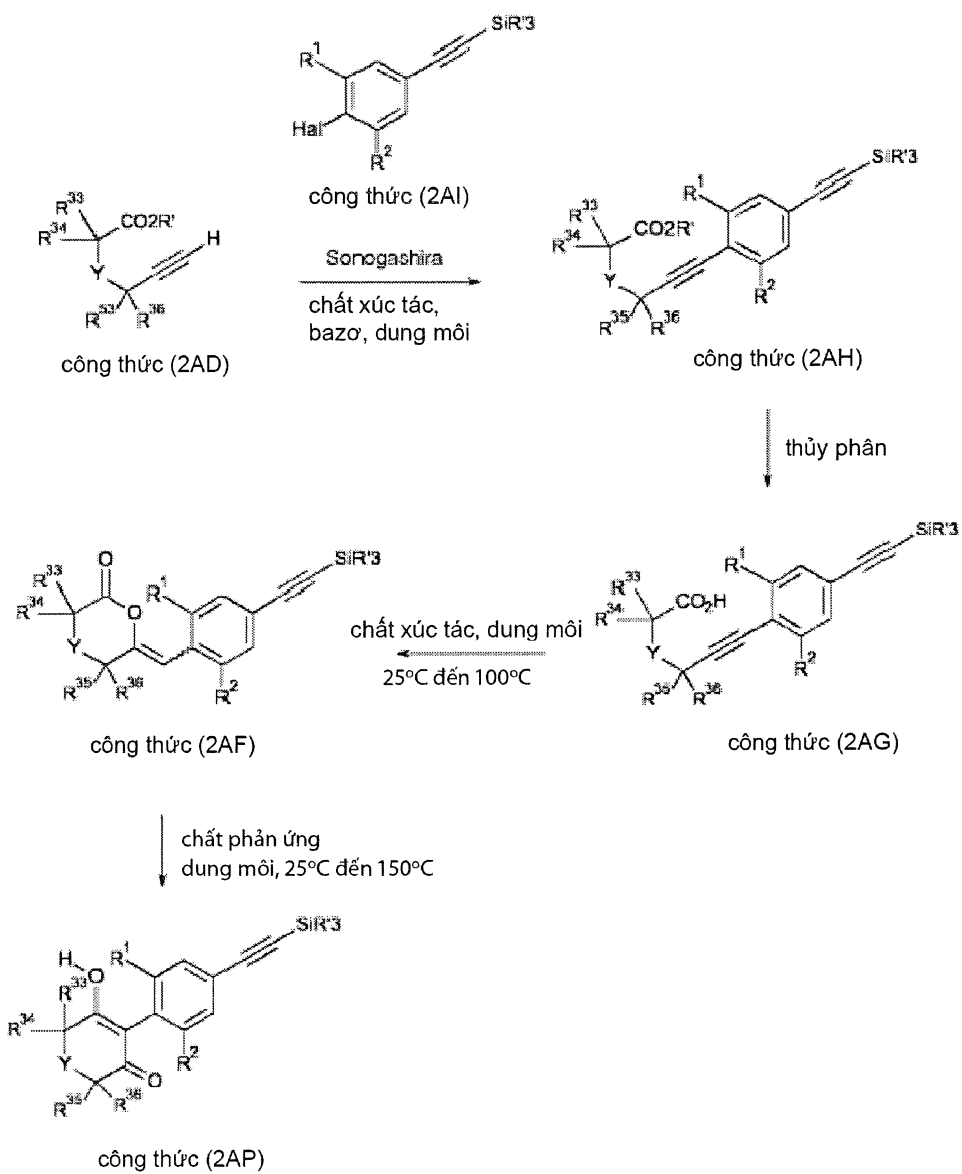
Theo một phương án để hợp chất có công thức (2AA), hợp chất có công thức (2AA), trong đó X là methyl, có thể được điều chế từ hợp chất có công thức (2AB) bằng cách xử lý với hệ xúc tác thúc đẩy sự lactoza hóa, như paladi(II) diclorua, vàng(I) clorua hoặc bạc cacbonat, ưu tiên là 0,001-50% mol bạc cacbonat đối với hợp chất có công thức (2AB), với sự có mặt của dung môi thích hợp, ví dụ axetonitril, ở nhiệt độ thích hợp (thường nằm trong khoảng từ 25°C đến 150°C), và được chiếu xạ vi sóng một cách tùy ý. Quá trình lactoza hóa tương tự được biết trong tài liệu (ví dụ xem WO 2008/071405, P. Huang và W. Zhou, *Tetrahedron Asymmetry* (1991), 2 (9), 875-878; và H. Harkat, J-M. Weibel, P. Pale, *Tetrahedron Letters* (2006), 47(35), 6273-6276).



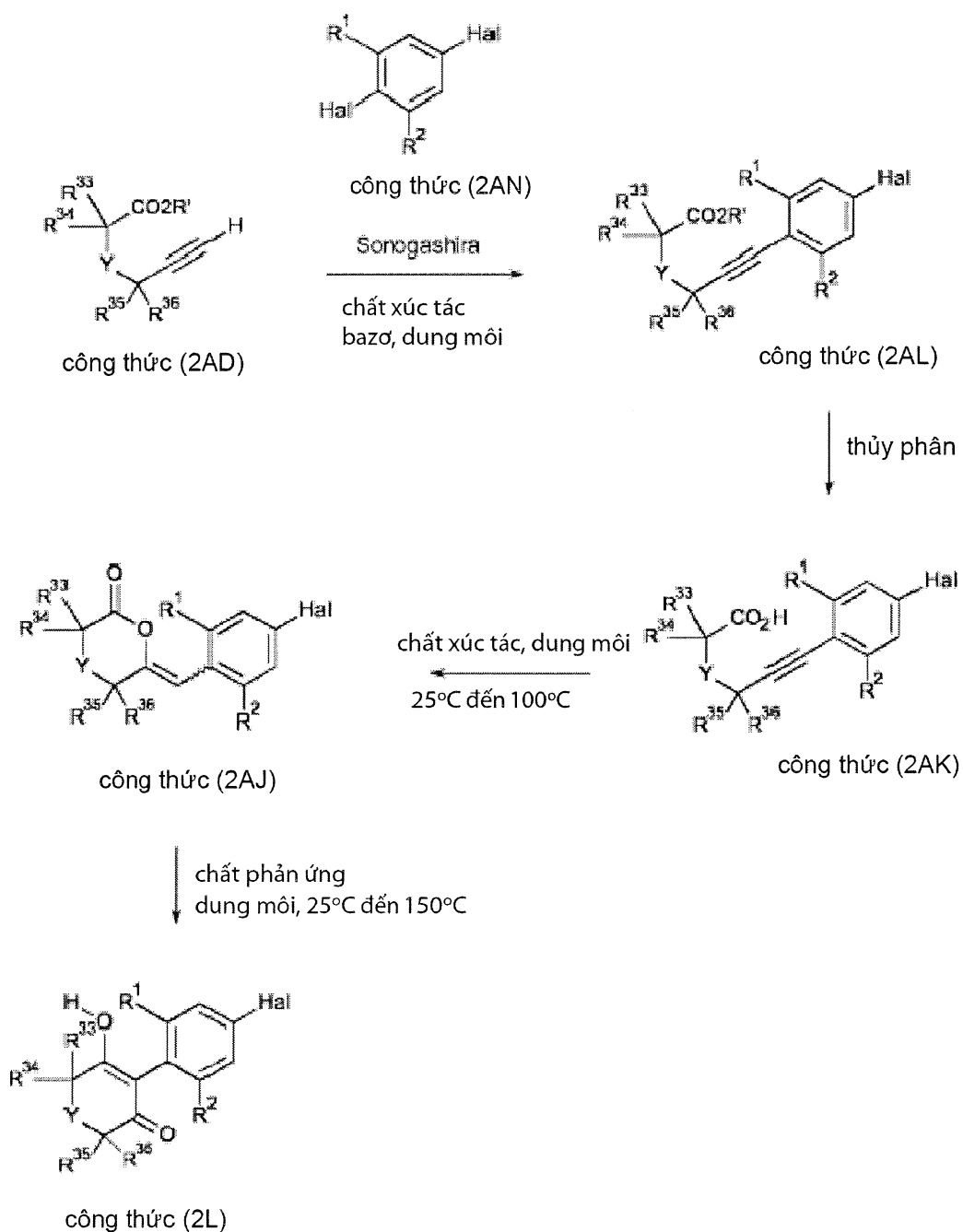
Hợp chất có công thức (2AB) có thể được điều chế từ hợp chất có công thức (2AD) và hợp chất có công thức (2AE) (trong đó R' được ưu tiên là C₁-C₄alkyl), thông qua hợp chất có công thức (2AC), bằng các phương pháp tương tự với các phương pháp được mô tả trong tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2008/071405. Các alkyl có công thức (2AD) là đã biết hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết (ví dụ xem tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2008/071405 và viện dẫn ở đây, và J. P. Burke, M. Sabat, D. A. Iovan, W. H. Myers, J. J. Chruma, *Organic Letters* (2010), 12(14), 3192-3195). Hợp chất có công thức (2AE) hoặc là hợp chất đã biết hoặc có thể được điều chế từ các chất phản ứng đã biết sử dụng các phương pháp đã biết.



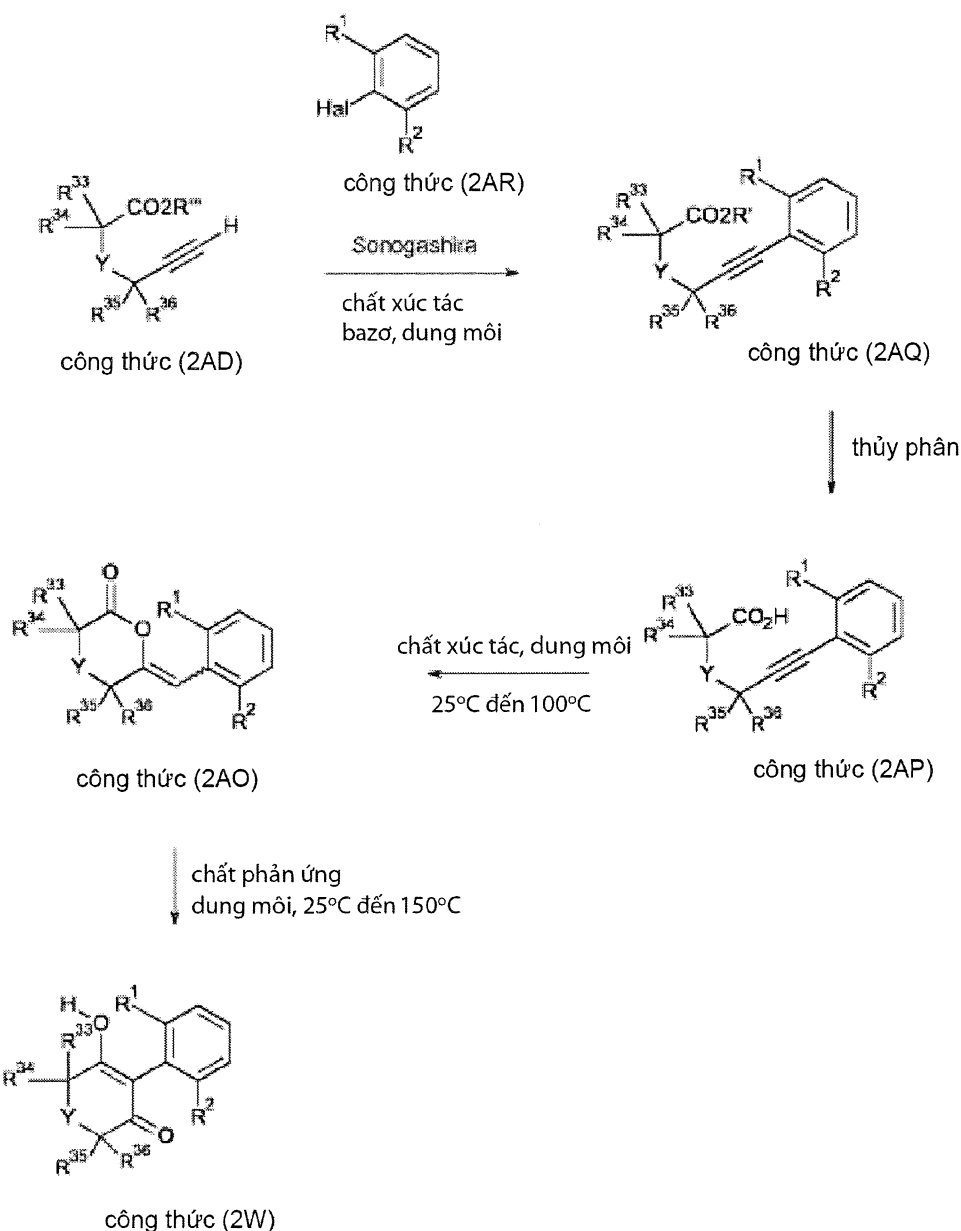
Hợp chất có công thức (2P), trong đó R' là C₁-C₄alkyl, cũng có thể được điều chế sử dụng các hóa chất tương tự với các hóa chất được mô tả từ trước, bắt đầu với hợp chất có công thức (2AD) và hợp chất có công thức (2AI) mà cả hai hợp chất này đều đã biết đến trong tài liệu hoặc có thể được điều chế sử dụng các phương pháp đã biết và các chất phản ứng đã biết.



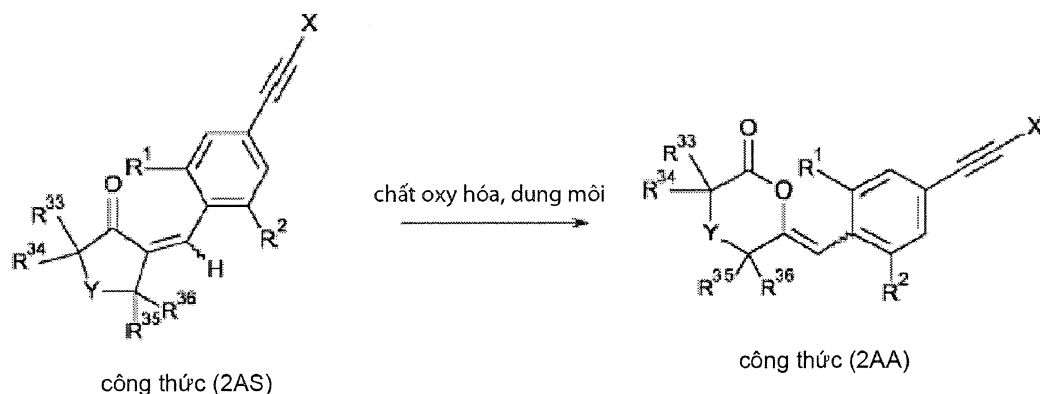
Tương tự như vậy, hợp chất có công thức (2L) có thể được điều chế từ hợp chất có công thức (2AJ) sử dụng hóa chất tương tự với các hóa chất được mô tả từ trước.



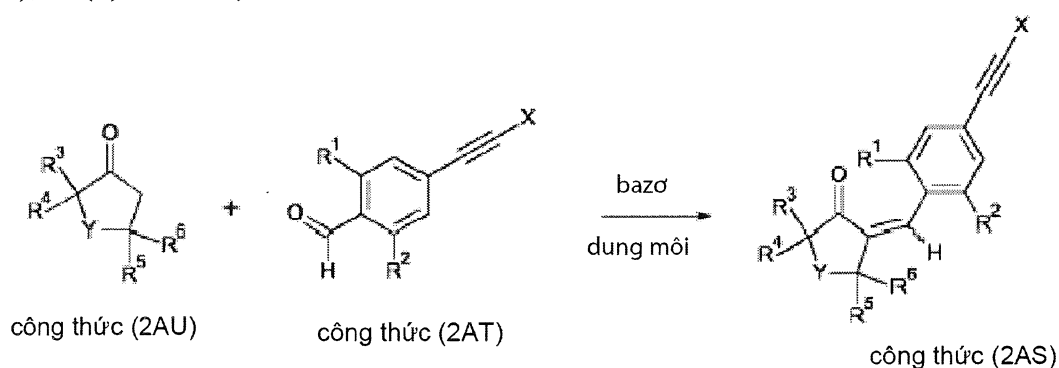
Tương tự như vậy, hợp chất có công thức (2W) có thể được điều chế từ hợp chất có công thức (2AO) sử dụng hóa chất tương tự với hóa chất được mô tả từ trước.



Theo phương án thứ hai, hợp chất có công thức (2AA), trong đó X là metyl, có thể được điều chế thông qua việc oxy hóa Baeyer-Villiger hợp chất có công thức (2AS), ưu tiên là trong dung môi thích hợp và/hoặc ở nhiệt độ thích hợp (cụ thể là nằm trong khoảng từ 0°C đến 100°C), và với sự có mặt của hệ xúc tác thích hợp một cách tùy ý (như selen dioxid). Thích hợp là, chất oxy hóa chứa axit peraxetic hoặc hydro peroxit được sử dụng. Các điều kiện được ưu tiên gồm có là hydro peroxit và selen dioxid xúc tác (0,001-25% mol) trong tert-butanol ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ 0°C đến 100°C , như được mô tả bởi J. A. Guzman, V. Mendoza, E. Garcia, C. F. Garibay, L. Z. Olivares, L. A. Maldonado, *Synthetic Communications* (1995), 25(14), 2121-33.



Hợp chất có công thức (2AS), trong đó X là methyl, có thể được điều chế từ hợp chất có công thức (2AU) bằng cách cô đặc benzaldehyt có công thức (2AT), với sự có mặt của bazơ thích hợp và với sự có mặt của dung môi thích hợp một cách tùy ý (ví dụ tương tự xem tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2010/136431; A. Lagrange, S. Forestier, G. Lang và B. Luppi, EP368717 A1; D. C. Rowlands, US2776239; E. Tamate, Journal of the Chemical Society of Japan, (1957), 78, 1293-7; R. Hernandez, D. Melian, T. Prange, E. Suarez, Heteroxycles (1995), 41(3), 439-54; và J. Sotiropoulos, N. El Batouti, A. M. Lamazouere, Journal of Heterocyclic Chemistry (1987), 24(4), 907-12).



Tốt hơn là bazơ là hydroxit kim loại, chẳng hạn như natri hydroxit hoặc kali hydroxit, alkoxit kim loại như natri metoxit, natri etoxit hoặc kali tert-butoxit, hoặc amit kim loại như natri amit. Ưu tiên là dung môi là dimetoxetan, dioxan, tetrahydrofuran, diethyl ete hoặc rượu alkyl, như metanol, etanol, isopropanol hoặc tert-butanol.

Hợp chất có công thức (2AU), trong đó Y là O và hoặc CR³⁸R³⁹, là hợp chất đã biết (ví dụ xem X. Ye, M. D. Johnson, T. Diao, M. H. Yates, S. S. Stahl, Green Chemistry (2010), 12(7), 1180-1186; M. Newman và W. Reichle, Org. Synth. Coll. Tập V., (1973), 1024; Y. Zal'kind, E. Venus-Danilova và V. Ryabtseva, Russian Journal of General Chemistry, (1950), 20, 2222-9; M. Bertrand, J. Dulcere, G. Gil, J.

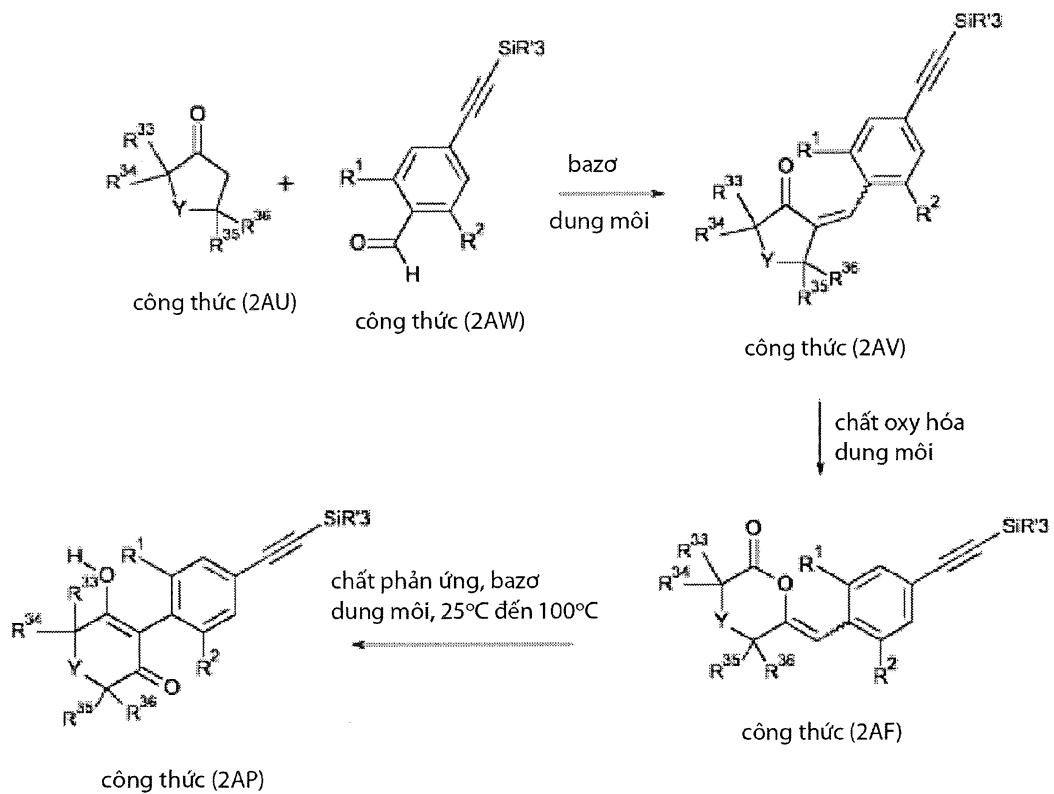
Grimaldi và P. Sylvestre-Panhet, *Tetrahedron Letters* (1976), (18), 1507-8), hoặc có thể được điều chế từ hợp chất đã biết bằng các phương pháp đã biết.

Hợp chất có công thức (2AU), trong đó Y là C(O), là hợp chất đã biết (ví dụ xem N. J. Turro, D. R. Morton, E. Hedaya, M. E. Kent, P. D'Angelo, P. Schissel, *Tetrahedron Letters* (1971), (27), 2535-8; P. A. Krapcho, D. R. Rao, M. P. Silvon, B. Abegaz, *Journal of Organic Chemistry* (1971), 36(25), 3885-90; S. N. Crane, T. J. Jenkins, D. J. Burnell, *Journal of Organic Chemistry* (1997), 62(25), 8722-8729; S. N. Crane, D. J. Burnell, *Journal of Organic Chemistry* (1998), 63(4), 1352-1355; S. N. Crane, D. J. Burnell, *Journal of Organic Chemistry* (1998), 63(16), 5708-5710; C. E. Elliott, D. O. Miller, D. J. Burnell, *Journal of the Chemical Society, Perkin Transactions 1* (2002), (2), 217-226), hoặc có thể được điều chế từ hợp chất đã biết bằng các phương pháp đã biết.

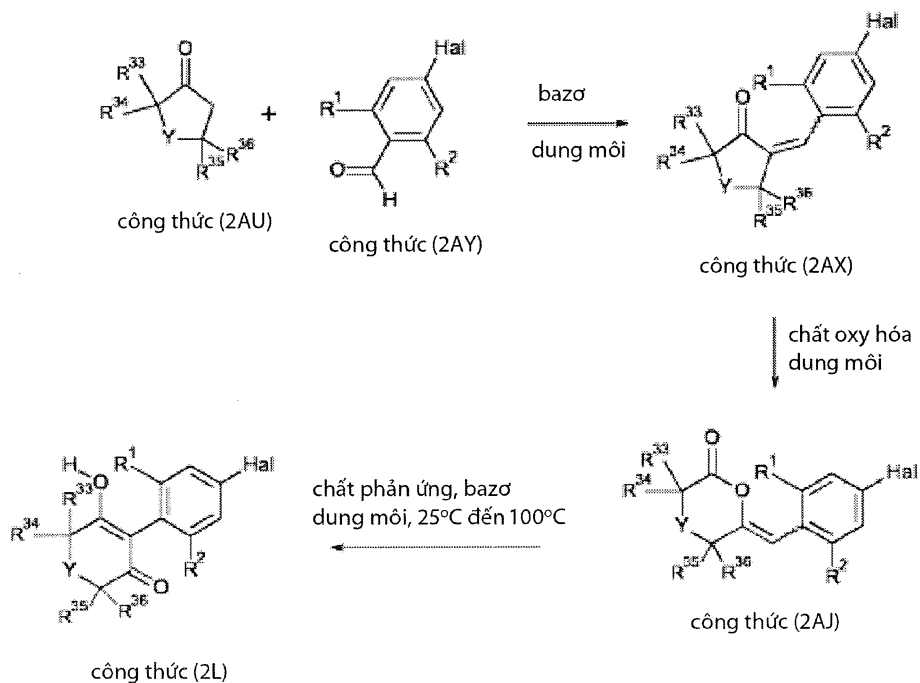
Hợp chất có công thức (2AU), trong đó Y là S, S(O) hoặc S(O)₂ là hợp chất đã biết (ví dụ xem E. R. Buchman, H. Cohen, *Journal of the American Chemical Society* (1944), 66, 847-8; A. W. D. Avison, F. Bergel, J. W. Haworth, US2408519; K. G. Mason, M. A. Smith, E. S. Stern, E. J. A. Elvidge, *Journal of the Chemical Society [Section] C: Organic* (1967), (21), 2171-6; T. A. Magee, Thomas A. DE 2033454; I. Tabushi, Y. Tamaru, Z. Yoshida, T. Sugimoto, *Journal of the American Chemical Society* (1975), 97(10), 2886-91; P. E. Aldrich, G. H. Berezin, B. I. Dittmar, I. Bruce, DE 2516554; I. Tabushi, Y. Tamaru, Z. Yoshida, *Bulletin of the Chemical Society of Japan* (1978), 51(4), 1178-82; D. N. Reinhoudt, J. Geevers, W. P. Trompenaars, S. Harkema, G. J. Van Hummel, *Journal of Organic Chemistry* (1981), 46(2), 424-34; F. Duus, *Synthesis* (1985), (6-7), 672-4; J. Schatz, *Science of Synthesis* (2002), 9, 287-422), hoặc có thể được điều chế từ các hợp chất đã biết bởi các phương pháp đã biết.

Hợp chất có công thức (2AT), trong đó X là metyl, có thể được điều chế từ hợp chất đã biết bằng các phương pháp đã biết.

Hợp chất có công thức (2P), trong đó R' là C₁-C₄alkyl, cũng có thể được điều chế từ hợp chất có công thức (2AF), bằng cách sắp xếp lại trong các điều kiện tương tự với các điều kiện đã được mô tả để biến đổi hợp chất có công thức (2AA) thành hợp chất có công thức (2A). Hợp chất có công thức (2AW) được biết, hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết sử dụng các chất phản ứng đã biết.

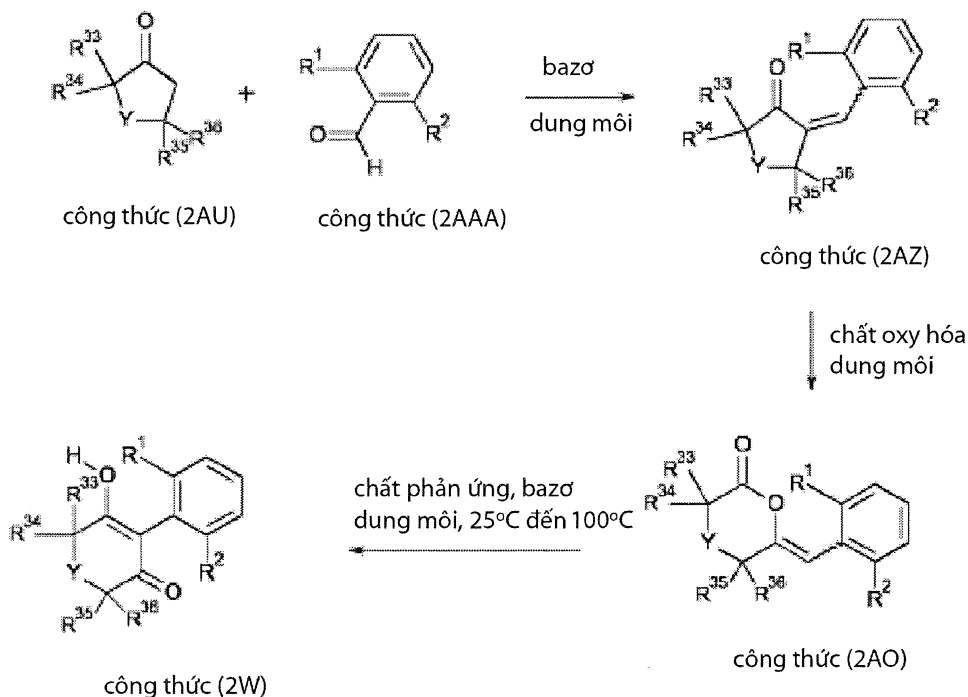


Tương tự như vậy, hợp chất có công thức (2L) cũng có thể được điều chế từ hợp chất có công thức (2AJ) bằng cách sắp xếp lại trong các điều kiện tương tự. Hợp chất có công thức (2AY) là hợp chất đã biết, hoặc có thể được điều chế từ các chất phản ứng đã biết sử dụng các phương pháp đã biết.

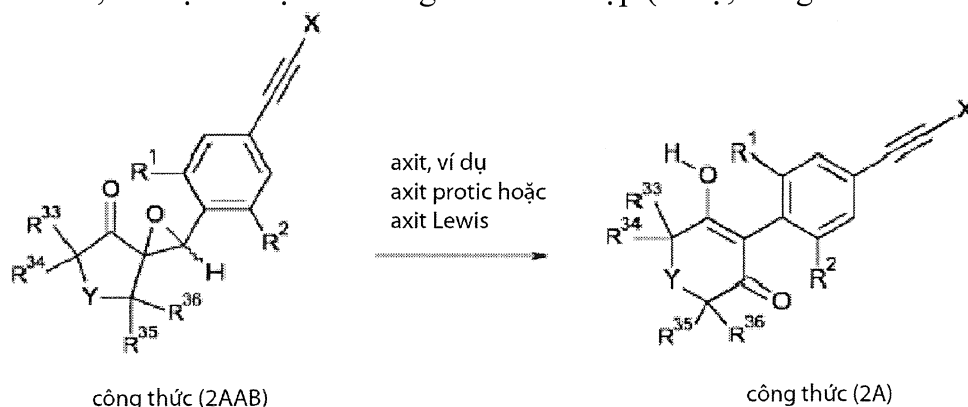


Tương tự như vậy, hợp chất có công thức (2W) cũng có thể được điều chế từ hợp chất có công thức (2AO) bằng cách sắp xếp lại trong các điều kiện tương tự. Hợp

chất có công thức (2AAA) là hợp chất đã biết, hoặc có thể được điều chế từ các chất phản ứng đã biết sử dụng các phương pháp đã biết.



Theo phương án khác, hợp chất có công thức (2A), trong đó X là metyl, có thể được điều chế bằng cách sắp xếp lại epoxit có công thức (2AAB) được xúc tác bởi sự có mặt của axit, với sự có mặt của dung môi thích hợp (ví dụ, dung môi hữu cơ).

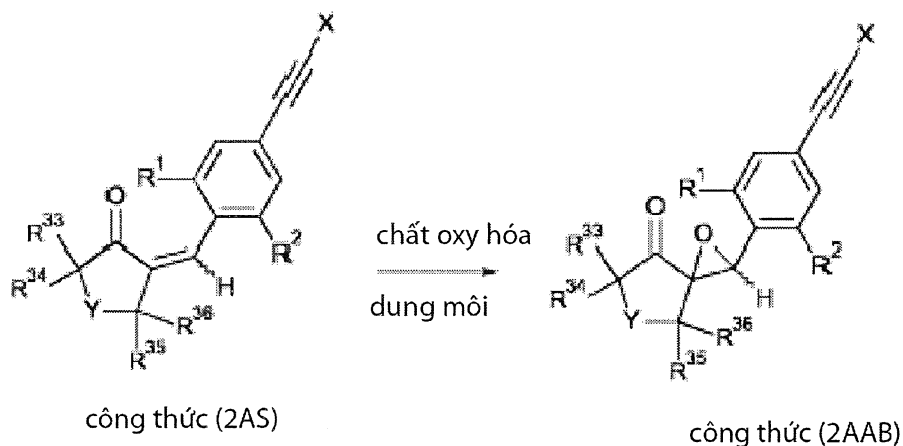


Để sắp xếp (2AAB) thành (2A), các axit thích hợp gồm có axit Brønsted (axit protic), như axit khoáng hoặc axit hữu cơ, ví dụ axit sulfuric, axit clohydric, hydro clorua, axit p-toluensulfonic, axit metansulfonic, axit axetic hoặc axit formic, hoặc axit Lewis, như halogenua kim loại, ví dụ boron triflorua, nhôm clorua, sắt clorua, thiếc(IV) clorua, kẽm clorua, kẽm bromua, hoặc lithi perchlorat, hoặc triflat kim loại như scandium triflat hoặc ytterbium triflat. Hỗn hợp của các axit này cũng có thể được sử dụng. Việc biến đổi hợp chất có công thức (2AAB) thành hợp chất có công thức (2A) này có thể được coi là ví dụ sắp xếp lại bán-Pinacol (ví dụ xem tài liệu công bố

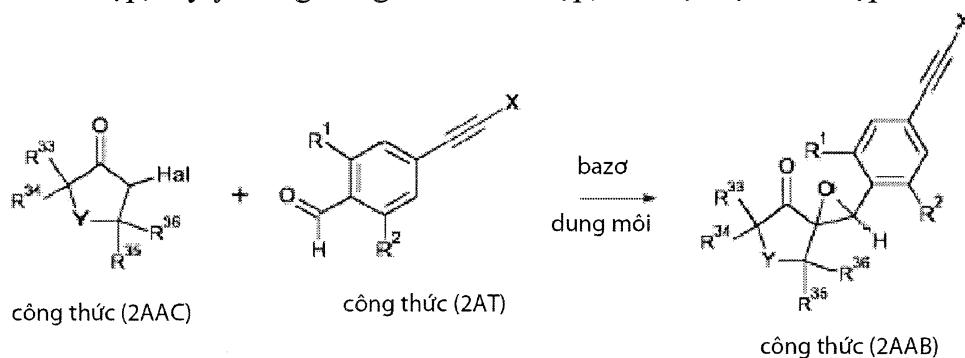
đơn quốc tế số WO 2010/136431 A1 (Syngenta Limited); M. Paulson, M. Daliya và C. Asokan, Synth. Commun. (2007), 37(5), 661-665; S. Sankararaman và J. Nesakumar, J. Chem. Soc, Perkin Trans. 1, (1999), (21), 3173-3175; K. Rehse và R. Bienfait, Archiv der Pharmazie, (1984), 317(5), 385-93; H. Kamath, A. Sahasrabudhe, B. Bapat và S. Kulkarni, Indian J. Chem., Section B: (1981), 20B(12), 1094-6; G. Buchanan và D. Jhaveri, J. Org. Chem. (1961), 26 4295-9; và H. House, Richard L. Wasson, J. Am. Chem. Soc., (1956), 78, 4394-400). Để sắp xếp lại (2AAB) thành (2A), dung môi (ví dụ dung môi hữu cơ) thích hợp ưu tiên được chọn để thích hợp với axit được sử dụng, và có thể gồm có hydrocacbon clo hóa, rượu, ete, dung môi thơm hoặc axit hữu cơ, ví dụ diclometan, dicloetan, dietyl ete, axit axetic, axit formic, toluen, benzen, metanol, etanol, isopropanol hoặc tetrahydrofuran. Ưu tiên là phản ứng, tức là sự sắp xếp lại (2AAB) thành (2A), được thực hiện sử dụng axit metansulfonic trong toluen ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ 25°C đến 150°C.

Hợp chất có công thức (2AAB) có thể được điều chế bằng cách epoxy hóa hợp chất có công thức (2AS). Epoxy hóa có thể được thực hiện bằng cách xử lý hợp chất có công thức (2AS) với tác nhân oxy hóa thích hợp như peroxit hữu cơ hoặc hyperclorit kim loại, ví dụ dimetyldioxiran, natri hypoclorit, hydro peroxit, tert-butyl peroxit hoặc axit trifloperaxetic, tùy ý kết hợp với bazơ thích hợp, như hydroxit kim loại kiềm hoặc cacbonat, hydroxit kim loại kiềm thổ hoặc cacbonat, hoặc bazơ amin như 1,8-diazabicyclo[5.4.0]-undec-7-en, tùy ý trong dung môi thích hợp, như rượu hoặc hydrocacbon halogen hóa, ví dụ metanol, etanol hoặc diclometan, và ở nhiệt độ thích hợp. Phản ứng còn có thể được thực hiện trong các điều kiện hai pha, trong đó chất phản ứng chuyển pha cũng thường được dùng ở 0,001-50% mol. Chất phản ứng chuyển pha được ưu tiên là muối amoni bậc bốn, ete vòng hoa, polyetylen glycol, hoặc muối phosphoni. Các phản ứng tương tự là đã biết đến trong các tài liệu (ví dụ xem tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2010/136431 A1 (Syngenta Limited); I. K. Korobitsyna, O. P. Studzinskii, The Russian Journal of Organic Chemistry (1969), 5(8), 1493-5; A. Halasz, Z. Jambor, A. Levai, C. Nemes, T. Patonay và G. Toth, J. Chem. Soc, Perkin Trans. 1, (1996), (4), 395-400; N. Yousif, F. Gad, A. Fahmy, M. Amin và H. Sayed, Phosphorus, Sulfur and Silicon and the Related Elements (1996), 117, 11-19; T. Ooi, D. Ohara, M. Tamura và K. Maruoka, J. Am. Chem. Soc., (2004), 126(22), 6844-6845; A. Amr, H. Hayam và M. Abdulla, Archiv der Pharmazie, (2005), 338(9), 433-440; K. Drauz, S. M. Roberts, T. Geller và A. Dhanda, US6538105 B1; và L. S. Chagonda và B. A. Marples, J. Chem. Soc. Perkin 1, 1988,

875-879). Ưu tiên là, epoxy hóa được thực hiện sử dụng hydro peroxit và hydroxit kim loại (đặc biệt là lithi hydroxit hoặc natri hydroxit), trong metanol ở nhiệt độ từ -10°C đến 60°C .



Tùy ý hợp chất có công thức (2AAB), trong đó X là methyl, có thể được điều chế bằng cách cho hợp chất có công thức (2AAC) (trong đó halogen là clo, brom hoặc iot, ưu tiên là clo hoặc brom) phản ứng với hợp chất có công thức (2AT), với sự có mặt của bazơ thích hợp, tùy ý trong dung môi thích hợp, ở nhiệt độ thích hợp.

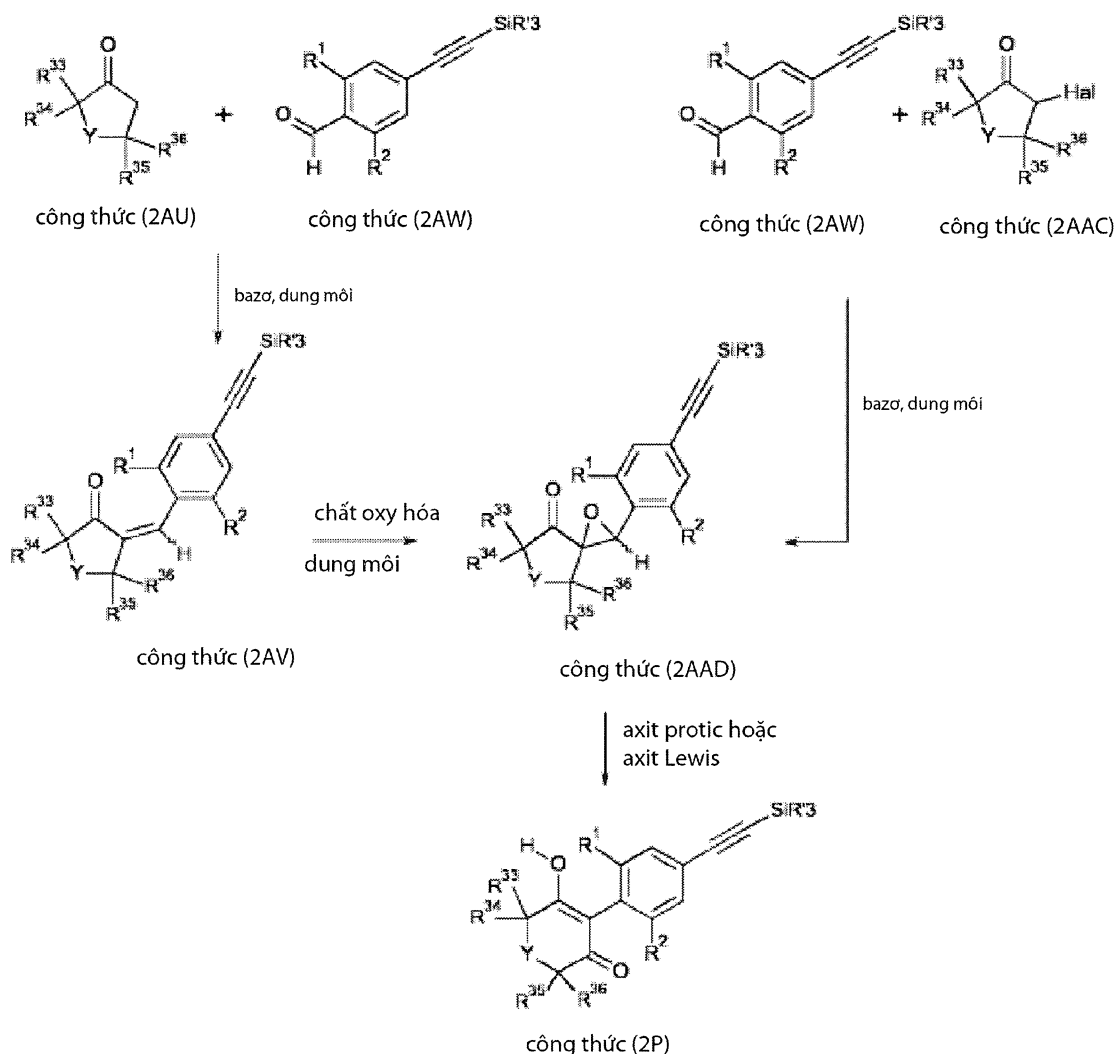


Bazơ thích hợp gồm có hydroxit kim loại kiềm hoặc kiềm thổ, như natri hydroxit, lithi hydroxit hoặc kali hydroxit, alkoxit kim loại kiềm hoặc kiềm thổ, như natri metoxit, natri etoxit, kali tert-butoxit hoặc natri tert-butoxit, cacbonat kim loại kiềm hoặc kiềm thổ như kali cacbonat hoặc natri cacbonat, hoặc natri bicacbonat, amit kim loại như lithi diisopropylamit, lithi hexametyldisilazit hoặc lithi 2,2,6,6-tetrametylpiperidit, hợp chất hữu cơ kim loại như butyl lithi hoặc etylmagie bromua, hoặc hydrua kim loại như natri hydrua hoặc kali hydrua. Các dung môi thích hợp bao gồm hydrocacbon được clo hóa, ete, rượu, các chất thơm và các dung môi aprotic phân cực các nhau, ví dụ 1,2-dimetoxyetan, tetrahydrofuran, 1,4-dioxan, dietyl ete, dibutyl ete, diclometan, dicloetan, axetonitril, dimetyl sulfoxit, N, N-dimetylformamit, benzen, toluen, metanol, etanol, isopropanol hoặc tert-butanol, và được chọn để tương hợp với bazơ trong các điều kiện phản ứng. Phản ứng còn có thể được thực hiện trong các điều

kiện hai pha, trong đó chất phản ứng chuyển pha còn thường được dùng ở 0,001-50% mol. Chất phản ứng chuyển pha được ưu tiên là muối amoni bậc bốn, ete vòng hoa, polyetylen glycol, hoặc muối phosphoni. Ưu tiên nhất là, phản ứng được thực hiện khi dùng lithi diisopropylamit trong tetrahydrofuran ở dải nhiệt độ từ -100°C đến 60°C. Chuyển đổi hợp chất có công thức (2AAC) thành hợp chất có công thức (2AAB) có thể được xem là ví dụ ngưng tụ Darzens (ví dụ xem tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2010/136431 A1 (Syngenta Limited); W. N. Wassef, M. M. El-Barky, *Journal of Chemical Research, Synopses* (1990), (12), 402-3; J. Li, X. Liu, X. Li, *Youji Huaxue* (2007), 27(11), 1428-1431; Y. Tong, Y. Cheng, X. Guo, S. Wu, *Hecheng Huaxue* (2007), 15(1), 102-104; C. Parmenon, J. Guillard, D. Caignard, N. Hennuyer, B. Staels, V. Audinot-Bouchez, J. Boutin, C. Dacquet, A. Ktorza, M. Viaud-Massuard, *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters* (2008), 18(5), 1617-1622; H. Xiao, X. Han, J. Xiong, *Faming Zhuanli Shenqing Gongkai Shuomingshu* (2007), p11; J. M. Concellon, E. Bardales, R. Llavona, *Journal of Organic Chemistry* (2003), 68(4), 1585-1588).

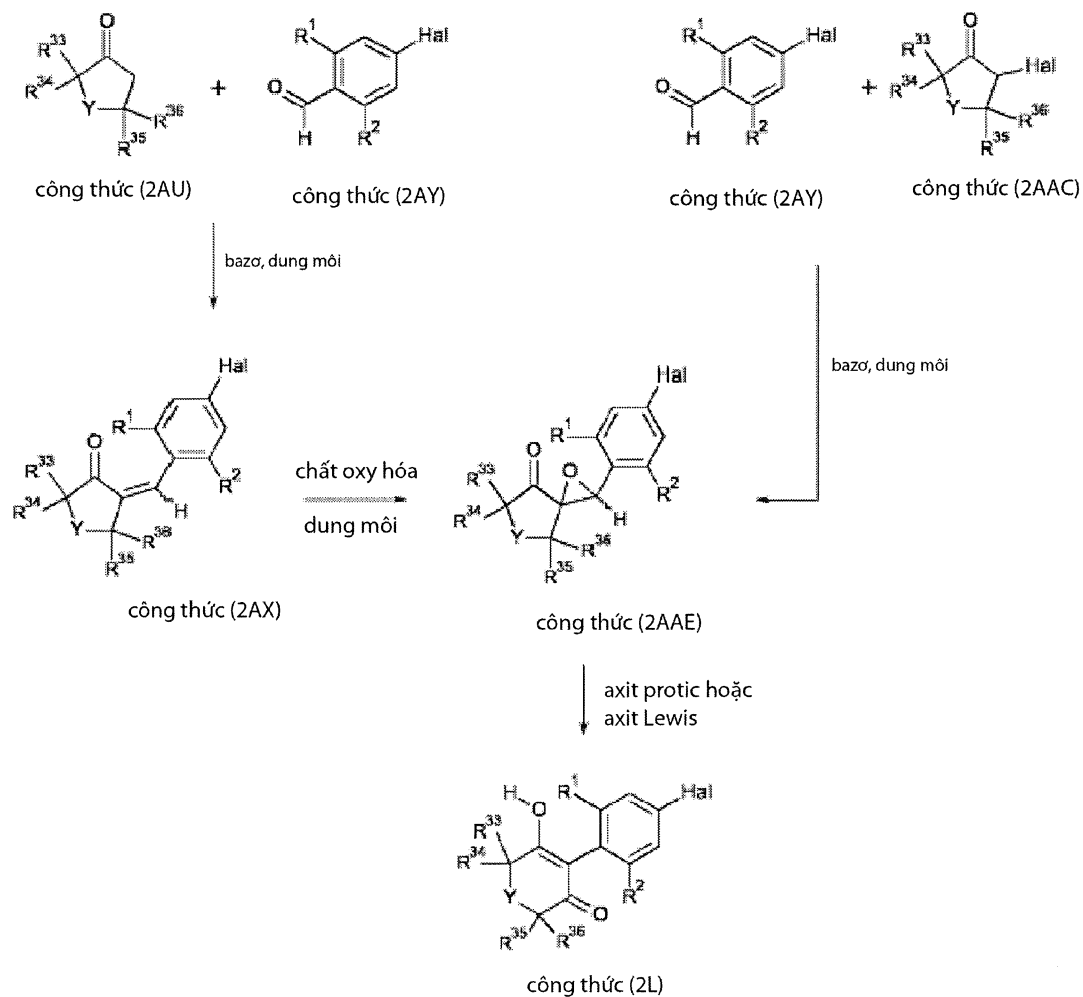
Hợp chất có công thức (2AAC), trong đó Y là O hoặc CR³⁸R³⁹ hoặc là hợp chất đã biết (ví dụ xem tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2010136431; B. Sreedhar, P. S. Reddy, M. Madhavi, *Synthetic Communications* (2007), 37(23), 4149-4156; R. R. Agarwal, S. S. Deshapande, *Journal of the Indian Chemical Society* (1949), 26, 483-6; H. Richet, R. Dulou, R., G. Dupont, *Bulletin de la Societe Chimique de France* (1947), 693-9; H. Richet, *Ann. Chim. [12]* (1948), 3 317-54; I. K. Korobitsyna, Yu. K. Yur'ev, Yu. A. Cheburkov, E. M. Lukina, *Russian Journal of General Chemistry* (1955), 25, 734-8; I. K. Korobitsyna, Yu. K. Yur'ev, Yu. A. Cheburkov, E. M. Lukina, *Russian Journal of General Chemistry* (1955), 25, 690-702; F. Leonard, A. Wajngurt, H. Horn, *Journal of Organic Chemistry* (1956), 21, 1400-4; I. K. Korobitsyna, I. G. Zhukova, V. A. Kuvshinova, N. N. Gaidamovich, Yu. K. Yur'ev, *Doklady Akademii Nauk SSSR* (1957), 114, 327-30; I. K. Korobitsyna, I. G. Zhukova, I. G., Yu. K. Yur'ev, *Russian Journal of General Chemistry* (1959), 29, 2190-6; I. K. Korobitsyna, L. L. Rodina, L. M. Stashkova, *Chemistry of Heterocyclic Compounds* (1966), (6), 843-7; G. Hoehne, F. Marschner, K. Praefcke, P. Weyerstahl, *Chem. Ber.* (1975), 108(2), 673-82; H. Saimoto, T. Hiyama, H. Nozaki, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, (1983), 56(10), 3078-87; A. M. Zvonok, N. M. Kuz'menok, I. G. Tishchenko, L. S. Stanishevskii, *Russian Journal of General Chemistry* (1985), 21(6), 1330-4) hoặc có thể được điều chế từ hợp chất có công thức (2AU) trong các điều kiện đã biết.

Hợp chất có công thức (2AAC), trong đó Y là S, S(O) và S(O)₂, hoặc là hợp chất đã biết (ví dụ xem M. Polievka, L. Uhlar, V. Patek, *Petrochemia* (1973), 13(5-6), 156-60; N. N. Novitskaya, B. V. Flekhter, G. M. Prokhorov, A. S. Lukmanova, G. A. Tolstikov, G. V. Leplyanin, S. A. Lange, M. V. Strashnov, SU 468920 A1; P. H. McCabe, W. Routledge, *Tetrahedron Letters* (1976), (1), 85-6; T. S. Chou, C. Y. Tsai, *Tetrahedron Letters* (1992), 33(29), 4201-4), hoặc có thể được điều chế từ hợp chất có công thức (2AU) trong các điều kiện đã biết. Hợp chất có công thức (2AAC), trong đó Y là C(O), có thể được điều chế từ hợp chất có công thức (2AU) trong các điều kiện halogen hóa tương tự.

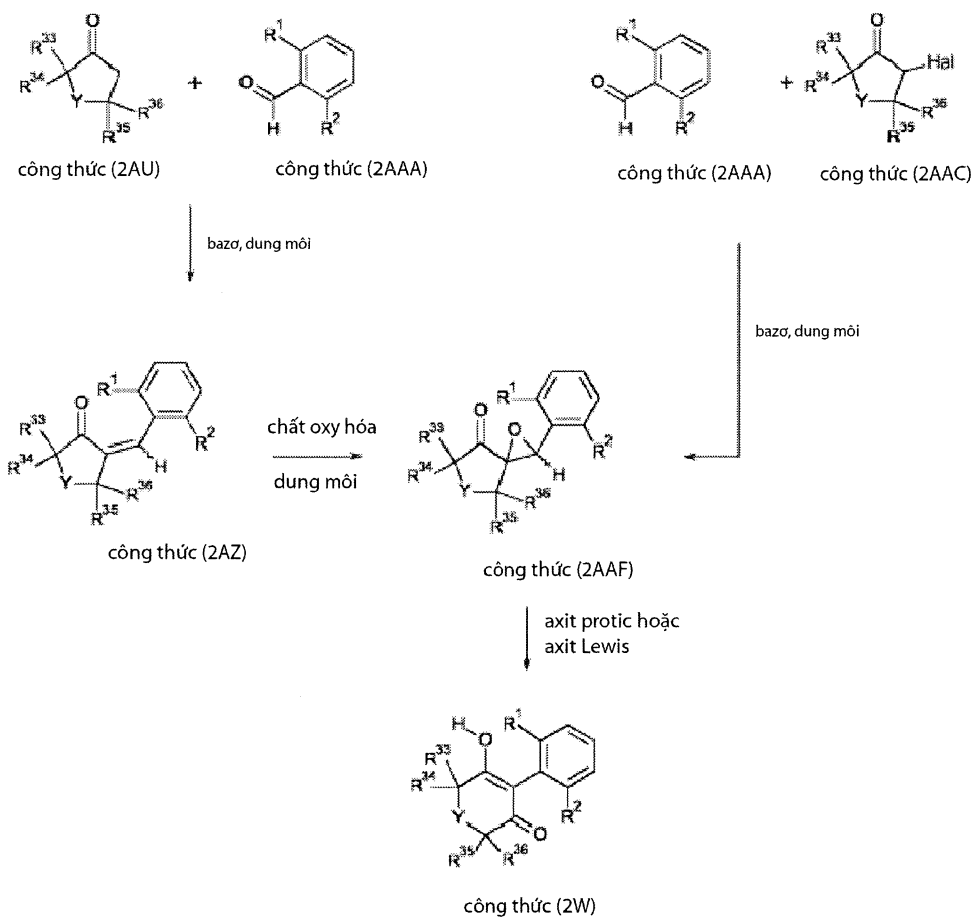


Hợp chất có công thức (2P), trong đó R' là C₁-C₄alkyl, cũng có thể được điều chế từ hợp chất có công thức (2AAD), sử dụng các quy trình tương tự và các điều kiện được mô tả từ trước. Hợp chất có công thức (2AAD) có thể hoặc là được điều chế từ hợp chất có công thức (2AU) và (2AW), thông qua hợp chất có công thức (2AV), hoặc từ hợp chất có công thức (2AAC) và (2AW).

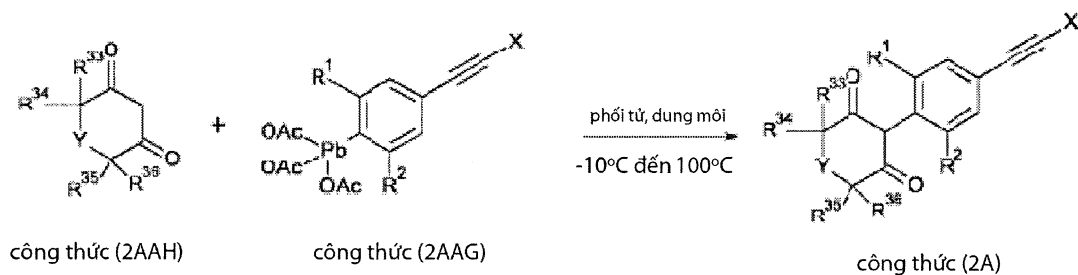
Tương tự như vậy, hợp chất có công thức (2L) cũng có thể được điều chế từ hợp chất có công thức (2AAE). Hợp chất có công thức (2AY) được biết trong tài liệu hoặc có thể được điều chế từ các chất phản ứng đã biết sử dụng các phương pháp đã biết.



Tương tự như vậy, hợp chất có công thức (2W) cũng có thể được điều chế từ hợp chất có công thức (2AAF), có thể được điều chế sử dụng hóa chất tương tự với hóa chất được mô tả từ trước.



Theo phương án khác, hợp chất có công thức (2A), trong đó X là metyl, có thể được điều chế bằng cách cho hợp chất có công thức (2AAH) phản ứng với aryl chì tricarboxylat, với sự có mặt của phối tử thích hợp và trong dung môi thích hợp. Các phản ứng tương tự được mô tả trong các tài liệu (ví dụ xem M. Muehlebach và cộng sự, WO08/071405; J. Pinhey, B. Rowe, Aust. J. Chem., (1979), 32, 1561-6; J. Morgan, J. Pinhey, J. Chem. Soc. Perkin Trans. 1, (1990), 3, 715-20). Ưu tiên là aryl chì tricarboxylat là aryl chì triaxetat có công thức (2AAG). Ưu tiên là phối tử là nitơ chứa dị vòng như N,N-dimetylaminopyridin, 1,10-phenanthrolin pyridin, bipyridin, hoặc imidazol, và một đến mười đương lượng (tức là đương lượng mol) phối tử đối với hợp chất có công thức (2AAG) được ưu tiên sử dụng. Tốt nhất là phối tử là N,N-dimetylaminopyridin. Dung môi được ưu tiên là cloform, diclometan hoặc toluen, ưu tiên nhất là cloform, hoặc hỗn hợp cloform và toluen. Ưu tiên là phản ứng được thực hiện ở nhiệt độ trong khoảng -10°C đến 100°C , ưu tiên nhất là trong khoảng $40-90^{\circ}\text{C}$.



Hợp chất có công thức (2AAH), trong đó Y là O, là hợp chất đã biết hoặc có thể được điều chế bằng các quy trình tương tự với các quy trình đã được mô tả trong các tài liệu (xem, ví dụ, M. Muehlebach và cộng sự, WO08/071405; M. Morgan và E. Heyningen, J. Am. Chem Soc., (1957), 79, 422-424; I. Korobitsyna và K. Pivnitskii, Russian Journal of General Chemistry, (1960), 30, 4016-4023; T. Terasawa, và T. Okada, J. Org. Chem., (1977), 42 (7), 1163-1169; R. Anderson và cộng sự US5089046; R. Altenbach, K. Agrios, I. Drizin và W. Carroll, Synth. Commun., (2004), 34 (4) 557-565; R. Beaudegnies và cộng sự, WO2005/123667; W. Li, G. Wayne, J. Lallaman, S. Chang, và S. Wittenberger, J. Org. Chem. (2006), 71, 1725-1727; R. Altenbach, M. Brune, S. Buckner, M. Coghlan, A. Daza, A. Fabiyi, M. Gopalakrishnan, R. Henry, A. Khilevich, M. Kort, I. Milicic, V. Scott, J. Smith, K. Whiteaker, và W. Carroll, J. Med. Chem, (2006), 49(23), 6869-6887; Carroll và cộng sự, WO 2001/083484 A1; J. K. Crandall, W. W. Conover, J. Org. Chem. (1978), 43(18), 3533-5; I. K. Korobitsyna, O. P. Studzinskii, Chemistry of Heterocyclic Compounds (1966), (6), 848-854).

Hợp chất có công thức (2AAH), trong đó Y là S, là hợp chất đã biết hoặc có thể được điều chế bằng các quy trình tương tự với các quy trình đã được mô tả trong các tài liệu (xem, ví dụ, E. Fehnel và A. Paul, J. Am. Chem Soc., (1955), 77, 4241-4244; E. Er và P. Margaretha, Helvetica Chimica Acta (1992), 75(7), 2265-69; H. Gayer và cộng sự, DE 3318648 A1).

Hợp chất có công thức (2AAH), trong đó Y là C(O), là hợp chất đã biết hoặc có thể được điều chế bằng các quy trình tương tự với các quy trình đã được mô tả trong các tài liệu (xem, ví dụ, R. Götz và N. Götz, WO2001/060776 R. Götz và cộng sự WO 2000/075095; M. Benbakkar và cộng sự, Synth. Commun. (1989) 19(18) 3241-3247; A. Jain và T. Seshadri, Proc. Indian Acad. Sci. Sect. A, (1955), 42, 279); N. Ahmad và cộng sự, J. Org. Chem., (2007), 72(13), 4803-4815); F. Effenberger và cộng sự, Chem. Ber., (1986), 119, 3394-3404 và các tài liệu tham khảo trong đó).

Hợp chất có công thức (2AAH), trong đó Y là CR³⁸R³⁹ là hợp chất đã biết có thể được điều chế bằng quy trình tương tự với các quy trình đã được mô tả trong các

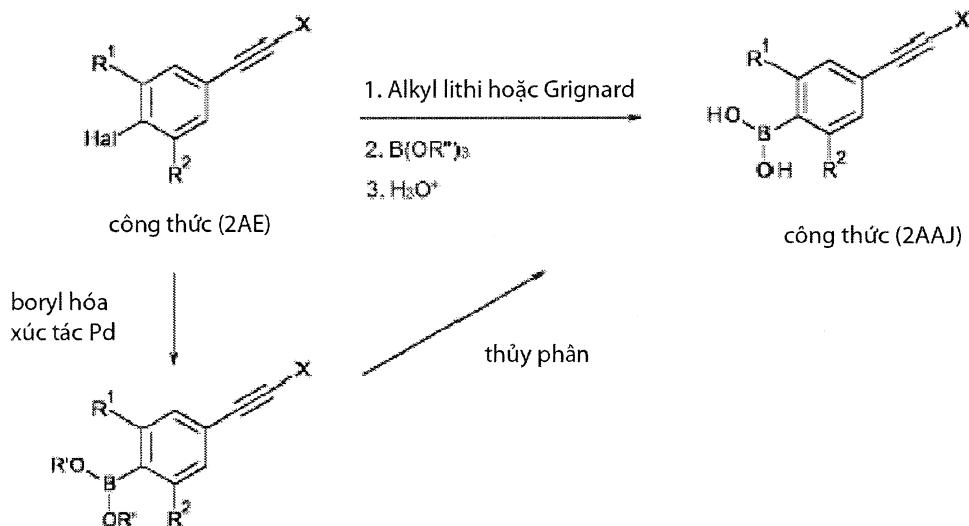
tài liệu (xem ví dụ, M. Muehlebach và cộng sự, WO08/110307; M. Muehlebach và cộng sự, WO08/110308; S. Spessard và B. Stoltz, *Organic Letters*, (2002), Tập 4, No. 11, 1943-1946; F. Effenberger và cộng sự, *Chem. Ber.*, (1984), 117, 3280-3296; W. Childers và cộng sự, *Tetrahedron Lett.*, (2006), 2217-2218; W. Childers và cộng sự, US2006/0004108; H. Schneider và C. Luethy, EP1352890; D. Jackson, A. Edmunds, M. Bowden và B. Brockbank, WO2005/105745 và WO2005/105717; R. Beaudegnies, C. Luethy, A. Edmunds, J. Schaetzer và S. Wendeborn, WO2005/123667; J-C. Beloeil, J-Y. Lallemand, T. Prange, *Tetrahedron*, (1986), Tập 42. No. 13, 3491-3502; G. Stork và R. Danheiser, *J. Org. Chem.*, (1973), 38 (9), 1775-1776; H. Favre và cộng sự, *Can. J. Chem.* (1956), 34 1329-39; R. Shriner và H. Todd, *Org. Synth. Coll. Tập II*, (1943), 200-202).

Hợp chất có công thức (2AAI), trong đó X là metyl, có thể được điều chế từ hợp chất có công thức (2AAJ) bằng cách xử lý với chì tetraaxetat trong dung môi thích hợp (ví dụ cloform) ở 25°C đến 100°C (ưu tiên là 25-50°C), và tùy ý với sự có mặt của chất xúc tác như mercury diaxetat, theo các quy trình được mô tả trong các tài liệu (ví dụ xem, K. Shimi, G. Boyer, J-P. Finet và J-P. Galy, *Letters in Organic Chemistry*, (2005), 2, 407-409; J. Morgan và J. Pinhey, *J. Chem. Soc. Perkin Trans. 1*; (1990), 3, 715-720).

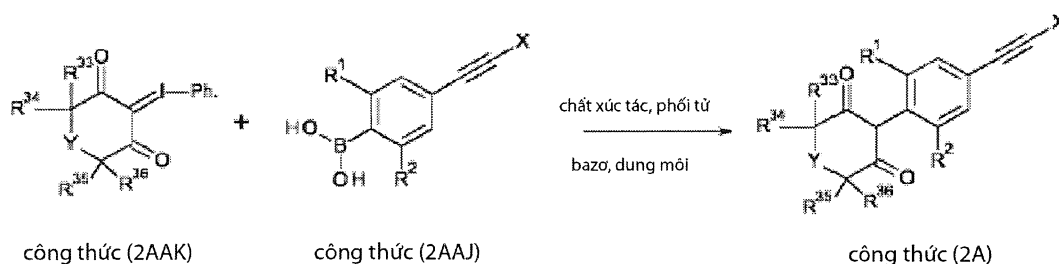


Axit aryl boronic có công thức (2AAJ), trong đó X là metyl, có thể được điều chế từ aryl halogenua có công thức (2AE), trong đó Hal là brom hoặc iot bằng các phương pháp đã biết (xem, ví dụ, W. Thompson và J. Gaudino, *J. Org. Chem.*, (1984), 49, 5237-5243 và R. Hawkins và cộng sự, *J. Am. Chem. Soc.*, (1960), 82, 3053-3059). Do đó aryl halogenua có công thức (2AE) có thể được xử lý với alkyl lithi hoặc alkyl magie halogenua ở nhiệt độ thấp, và chất phản ứng aryl magie hoặc aryl lithi thu được được cho phản ứng với trialkyl borat, $\text{B}(\text{OR}'')_3$, ưu tiên là trimethylborat, để tạo ra aryl dialkylboronat mà có thể được thủy phân axit boronic mong muốn có công thức (2AAJ), khi X là metyl, trong các điều kiện axit. Tùy ý với cùng toàn bộ sự chuyển dạng hợp chất (2AE) thành hợp chất (2AAJ), trong đó X là metyl, có thể đạt được

thông qua phản ứng boryl hóa xúc tác paladi trong các điều kiện đã biết sử dụng các chất phản ứng đã biết (ví dụ xem T. Ishiyama, M. Murata, N. Miyaura, J. Org. Chem. (1995), 60, 7508-7501; và K. L. Billingsley, T. E. Barder, S. L. Buchwald, Angew. Chem. Int. Ed. (2007), 46, 5359-5363), theo sau là quá trình thủy phân este boronate trung gian.



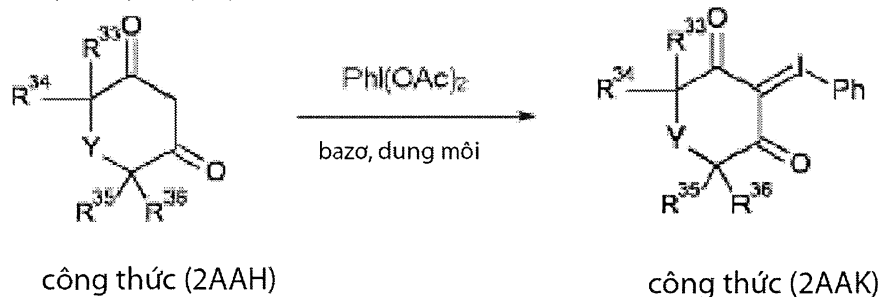
Theo một phương án khác, hợp chất có công thức (2A), trong đó X là metyl, có thể được điều chế bằng cách phản ứng của hợp chất có công thức (2AAK), trong đó AR là gốc aryl (ưu tiên là phenyl) với axit arylboronic có công thức (2AAJ), trong đó X là metyl, với sự có mặt của chất xúc tác paladin thích hợp, bazơ thích hợp, với sự có mặt của phối tử hoặc chất bổ sung thích hợp tùy ý, và trong dung môi thích hợp.



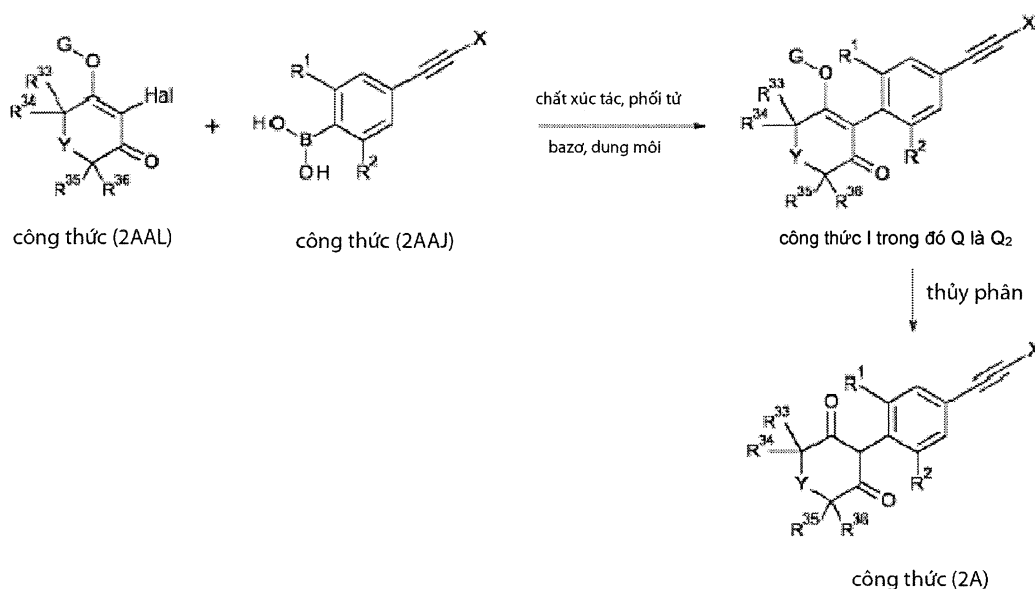
Các chất xúc tác paladi thích hợp bao gồm, ví dụ paladi(II) dihalua, paladi(II) axetat và paladi(II) sulfat, và tốt hơn là paladi(II) axetat. Các phối tử thích hợp bao gồm triphenylphosphin, trixyclopentylphosphin, trixyclohexylphosphin, 2-dixyclohexylphosphino-2',6'-dimetoxibiphenyl, 2-dixyclohexylphosphino-2',4',6'-triisopropyl-biphenyl, 1,1'-bis(diphenylphosphino)feroxen và 1,2-bis(diphenylphosphino)etan. Phản ứng này cũng có thể được tiến hành với sự có mặt của các chất phụ gia khác, như muối tetralkylamoni, ví dụ, tetrabutylamoni bromua.

Các bazơ thích hợp bao gồm hydroxit kim loại kiềm, đặc biệt là lithi hydroxit. Dung môi thích hợp là 1,2-dimetoxyetan trong nước.

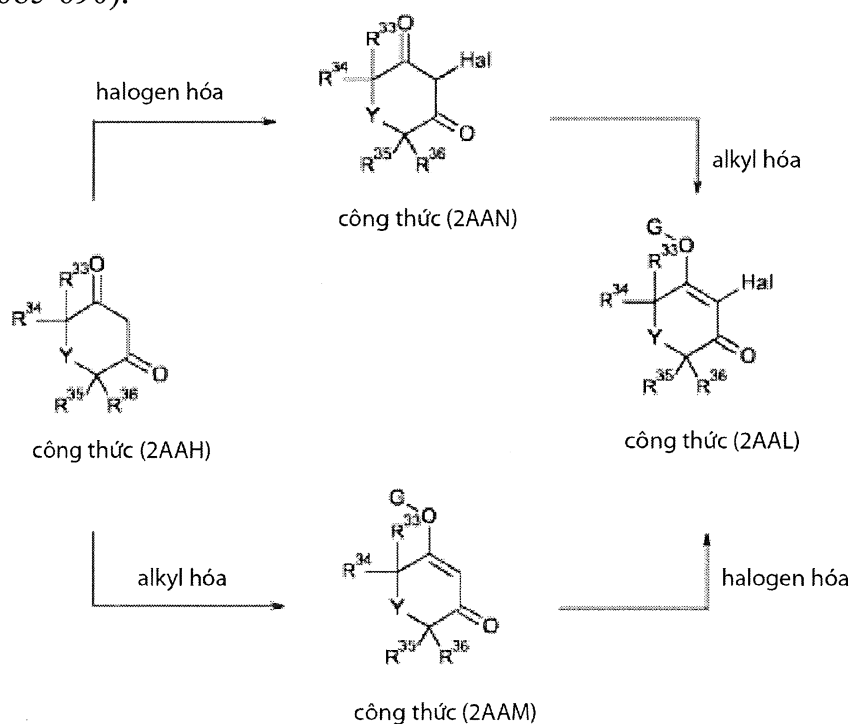
Hợp chất có công thức (2AAK) có thể được điều chế từ hợp chất có công thức (2AAH) bằng cách xử lý với chất phản ứng hypervalent iot như (diacetoxi)iodobenzen hoặc iodosylbenzen, và bazơ như dung dịch natri cacbonat, lithi hydroxit hoặc natri hydroxit, trong dung môi như nước hoặc dung dịch rượu như dung dịch etanol theo quy trình của K. Schank và C. Lick, *Synthesis* (1983), 392; R. Moriarty và cộng sự, *J. Am. Chem. Soc.*, (1985), 107, 1375, hoặc của Z. Yang và cộng sự, *Org. Lett.*, (2002), 4 (19), 3333:



Theo phương án khác, hợp chất có công thức I, trong đó Q là Q2 và X là metyl, có thể được điều chế bằng cách cho phản ứng với hợp chất có công thức (2AAL) (trong đó G được ưu tiên là C₁₋₄ alkyl, và Hal là halogen, ưu tiên là brom hoặc iot), với axit arylboronic có công thức (2AAJ) với sự có mặt của chất xúc tác paladin thích hợp, ví dụ 0,001-50% mol paladi(II) axetat đối với hợp chất (2AAL), và bazơ, ví dụ 1 đến 10 đương lượng (tức là đương lượng mol) của kali phosphat đối với hợp chất (2AAL), và ưu tiên là với sự có mặt của phối tử thích hợp ví dụ 0,001-50% mol (2-dicyclohexylphosphino)-2',6'-dimetoxybiphenyl đối với hợp chất (2AAL), và trong dung môi thích hợp, ví dụ toluen, ưu tiên là nhiệt độ nằm trong khoảng từ 25°C đến 200°C. Chất ghép nối tương tự là đã biết đến trong tài liệu (xem ví dụ, Y. Song, B. Kim và J.-N. Heo, *Tetrahedron Letters* (2005), 46 (36), 5987-5990). Hợp chất có công thức I, trong đó Q là Q2 và X được ưu tiên là metyl, có thể được chuyển đổi thành hợp chất có công thức (2A) bằng cách thủy phân enol ete trong các điều kiện đã biết.



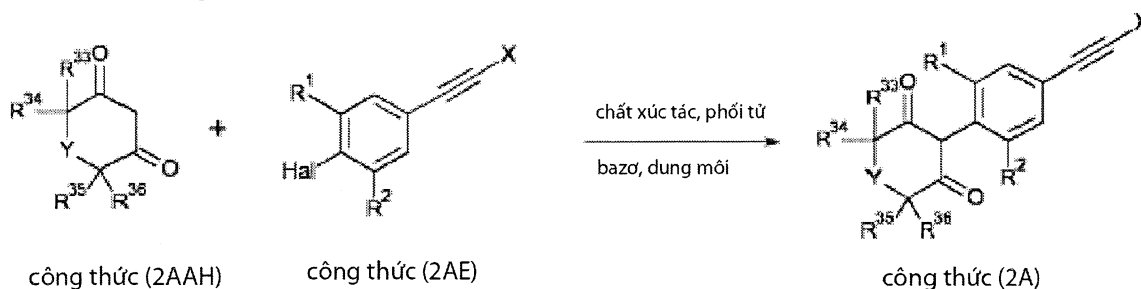
Hợp chất có công thức (2AAL) có thể được điều chế bằng cách halogen hóa hợp chất có công thức (2AAH), sau đó cho halogenua thu được có công thức (2AAN) phản ứng với C₁-C₄alkyl halogenua hoặc tri-C₁-C₄-alkylorthoformat trong các điều kiện đã biết, ví dụ bằng các quy trình của R. Shepherd và A. White (J. Chem. Soc. Perkin Trans. 1 (1987), 2153-2155) và Y.-L. Lin và cộng sự (Bioorg. Med. Chem. (2002), 10, 685-690).



Tùy ý, hợp chất có công thức (2AAL) có thể được điều chế bằng cách cho hợp chất có công thức (2AAH) phản ứng với C₁-C₄alkyl halogenua hoặc tri-C₁-C₄-alkylorthoformat, và halogen hóa enol ete thu được có công thức (2AAM) trong các

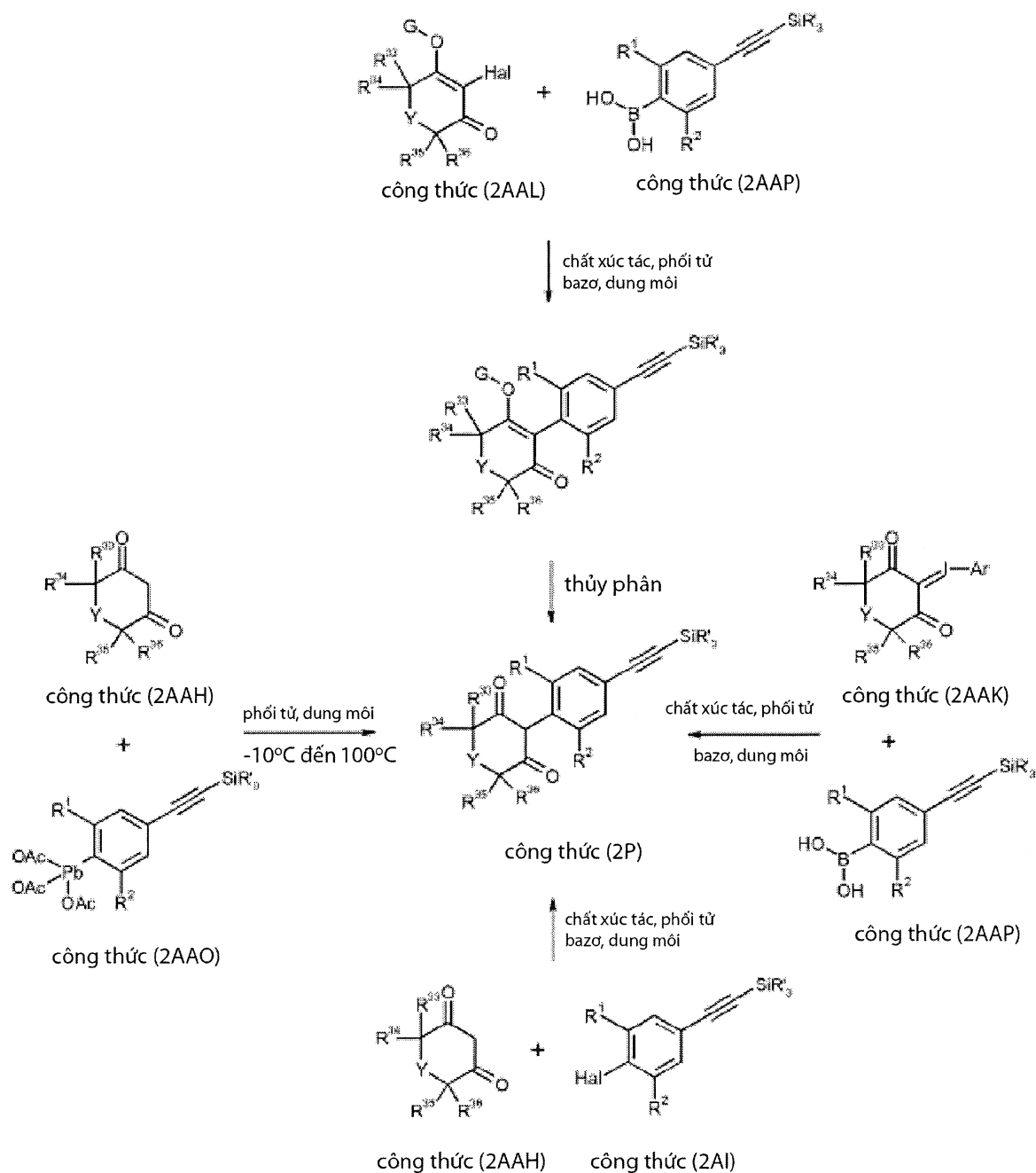
điều kiện đã biết (ví dụ xem Y. Song, B. Kim và J.-N. Heo, *Tetrahedron Letters* (2005), 46(36), 5987-5990).

Theo phương án khác, hợp chất có công thức (2A), trong đó X là metyl, có thể được điều chế bằng cách cho hợp chất có công thức (2AAH) phản ứng với hợp chất có công thức (2AE) với sự có mặt của chất xúc tác paladi thích hợp, ví dụ 0,001-50% mol paladi(II) axetat đối với hợp chất (2AAH), và bazơ, ví dụ từ 1 đến 10 đương lượng (tức là đương lượng mol) kali phosphat đối với hợp chất (2AAH), và ưu tiên là với sự có mặt của phối tử thích hợp, ví dụ 0,001-50% mol (2-dixyclohexylphosphino)-2',4',6'-triisopropylbiphenyl đối với hợp chất (2AAH), và trong dung môi thích hợp, ví dụ dioxan, ưu tiên là nằm trong khoảng từ 25°C đến 200°C và tùy ý trong điều kiện gia nhiệt vi sóng.

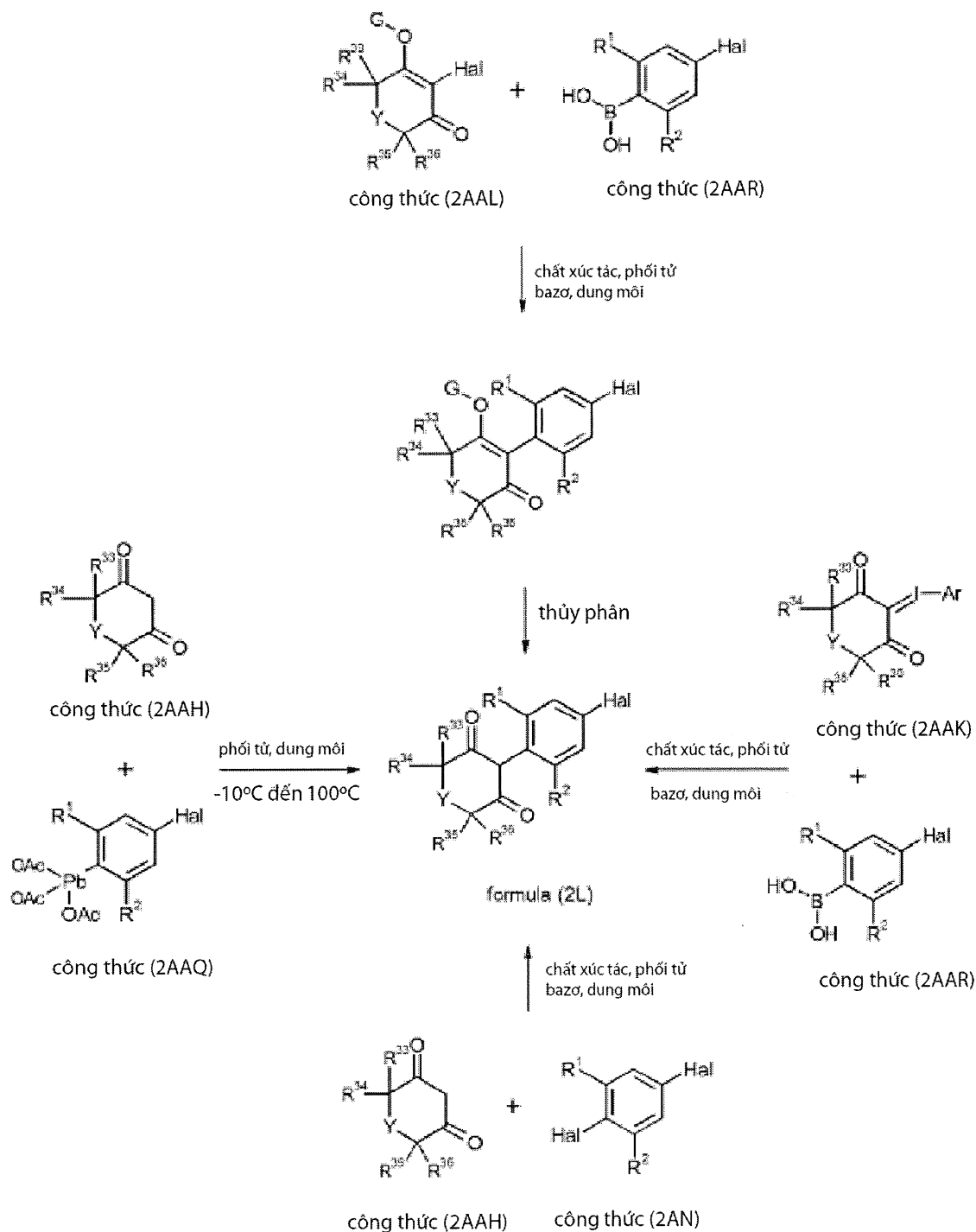


Các chất ghép nối tương tự được biết trong tài liệu (ví dụ xem, S. Buchwald và cộng sự, *J. Am. Chem. Soc.* (2000), 122, 1360-1370; B. Hong và cộng sự, WO 2005/000233). Tùy ý, hợp chất có công thức (2A) có thể được điều chế bằng cách cho hợp chất có công thức (2AAH) phản ứng với hợp chất có công thức (2AE) với sự có mặt của chất xúc tác đồng thích hợp, ví dụ 0,001-50% mol đồng(I) iodua đối với hợp chất (2AAH), và bazơ, ví dụ từ 1 đến 10 đương lượng (tức là đương lượng mol) xesi cacbonat đối với hợp chất (2AAH), và ưu tiên là với sự có mặt của phối tử thích hợp, ví dụ 0,001-50% mol L-prolin đối với hợp chất (2AAH), và trong dung môi thích hợp, ví dụ dimetylsulfoxit, ưu tiên là nằm trong khoảng từ 25°C đến 200°C. Chất ghép nối tương tự được biết đến trong tài liệu (xem ví dụ, Y. Jiang và cộng sự, *Synlett*, (2005), 18, 2731-2734, và X. Xie và cộng sự, *Organic Letters* (2005), 7(21), 4693-4695).

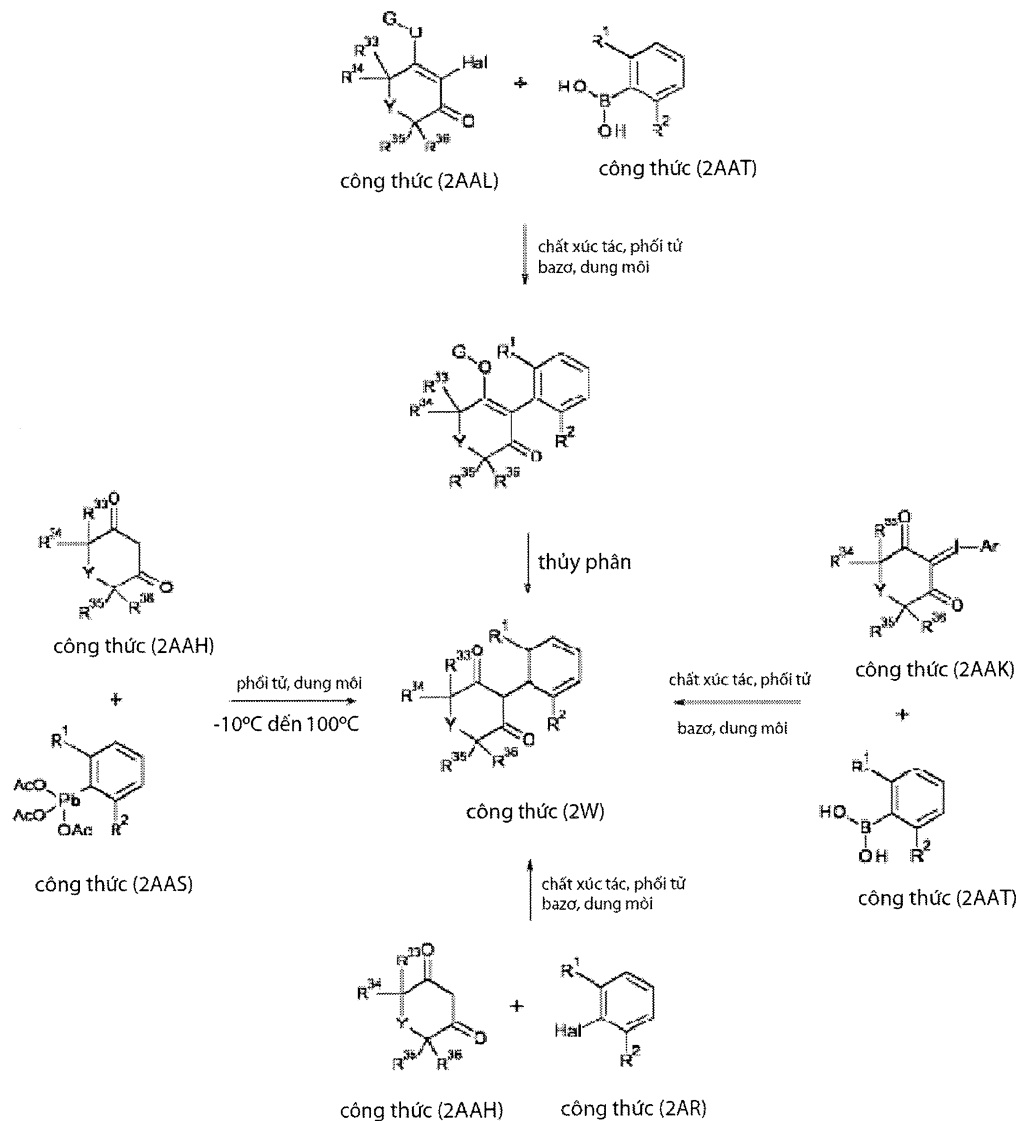
Hợp chất có công thức (2P), trong đó R⁴⁴ là C₁-C₄alkyl, cũng có thể được điều chế sử dụng các phương pháp tương tự được mô tả từ trước, bắt đầu từ tiền chất silyl hóa (2AAO), (2AAP) và (2AAI). Hợp chất (2AAO), (2AAP) và (2AAI) là hợp chất đã biết, hoặc có thể được điều chế sử dụng các phương pháp tương tự với các phương pháp được mô tả từ trước.



Tương tự, hợp chất có công thức (2L) cũng có thể được điều chế từ tiền chất halogen hóa thích hợp, sử dụng các phương pháp tương tự với các phương pháp được mô tả từ trước.



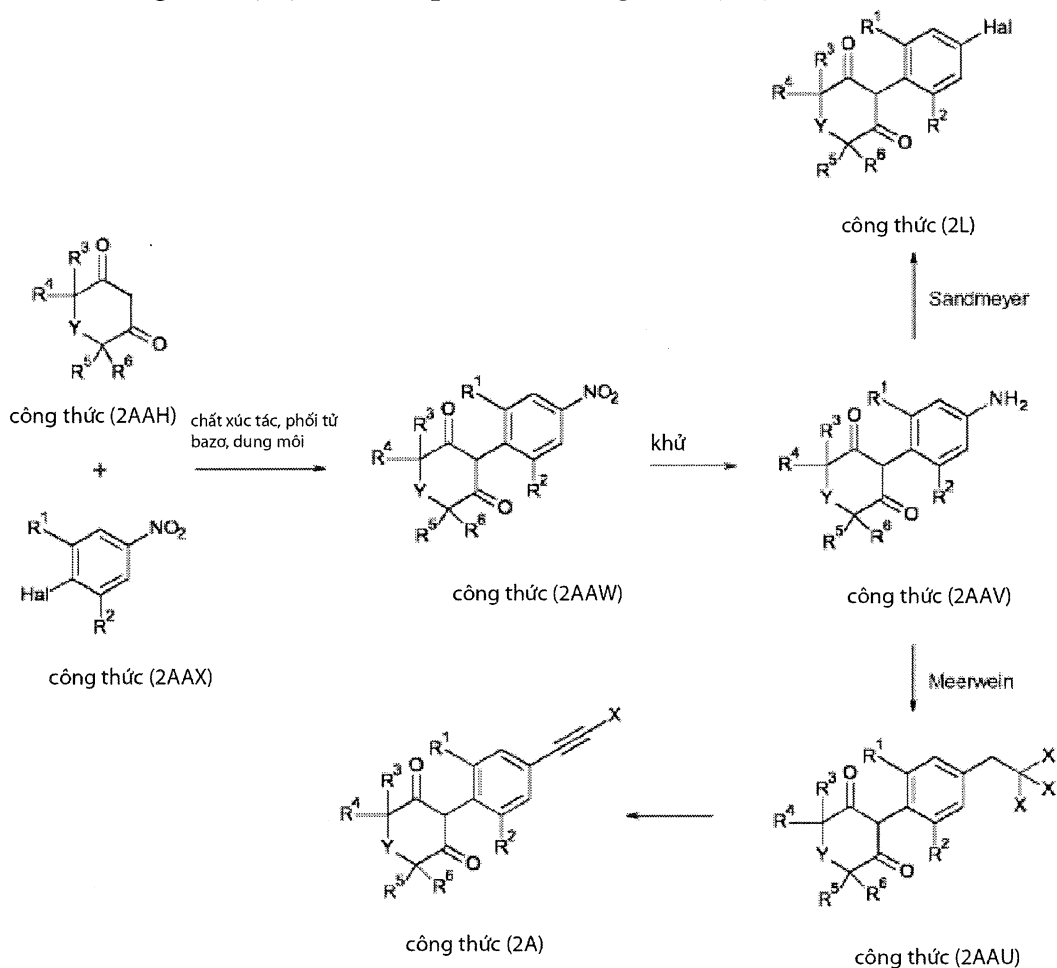
Tương tự, hợp chất có công thức (2W) cũng có thể được điều chế từ tiền chất thích hợp, sử dụng các phương pháp tương tự với các phương pháp được mô tả từ trước.



Ngoài ra, hợp chất có công thức (2L) có thể được điều chế bằng cách cho hợp chất có công thức (2AAH) phản ứng với halonitrobenzen có công thức (2AAX) (trong các điều kiện tương tự với các điều kiện được mô tả để ghép nối hợp chất có công thức (2AAH) và hợp chất có công thức (2AE) để tạo ra hợp chất có công thức (2A)), để tạo ra hợp chất có công thức (2AAW) mà sau đó khử trong các điều kiện chuẩn (ví dụ tương tự xem T. N. Wheeler, CA1113959). Sau đó anilin (2AAV) được chuyển đổi thành aryl halogenua (2L) trong các điều kiện Sandmeyer (ví dụ tương tự xem T. N. Wheeler, CA1113959). Tùy ý, hợp chất có công thức (2AAU), trong đó X là clo, có thể được điều chế bằng cách cho anilin có công thức (2AAV) phản ứng với 1,1-dicloetylen, muối kim loại thích hợp như đồng(II) clorua, kim loại thích hợp hoặc alkyl nitrit trong dung môi thích hợp ở nhiệt độ thích hợp. Phản ứng này là ví dụ của quá trình aryl hóa Meerwein, và các ví dụ được biết trong tài liệu (ví dụ xem T. Himmler, US 20100234651 và J-P. A. M. Bongartz, J. T. M. Linders, L. Meerpoel, G. S. E. Van Lommen, E. Coesemans, M. Braeken, C. F. R. N. Buyck, M. J. M. Berwaer,

K. A. G. J. M. De Waepenaert, P. W. M. Roevens, G. M. Boeckx, P. V. Davidenko, WO 2008148868).

Hợp chất có công thức (2A) có thể được điều chế từ hợp chất có công thức (2AAU) trong các điều kiện tương tự với các điều kiện được mô tả từ trước để biến đổi hợp chất có công thức (2J) thành hợp chất có công thức (2D).



Các chế phẩm diệt cỏ

Theo khía cạnh khác, sáng chế đề xuất chế phẩm diệt cỏ, ví dụ để sử dụng trong phương pháp kiểm soát cỏ dại (ví dụ một lá mầm chẳng hạn như cỏ dại) ở cây trồng thuộc cây có ích, chế phẩm bao gồm hợp chất có công thức (I) như được xác định ở đây (ví dụ lượng có hiệu quả diệt cỏ của chúng), và chất nông hóa học cơ bản trợ (ví dụ chất mang, chất pha loãng và/hoặc dung môi nông hóa học, chất hỗ trợ nông hóa học, chất nhũ hóa/chất bề mặt/chất hoạt động bề mặt nông hóa học, và/hoặc phụ gia nông hóa học khác).

Theo khía cạnh khác, sáng chế đề xuất chế phẩm diệt cỏ, ví dụ, để sử dụng trong phương pháp kiểm soát cỏ dại (ví dụ, cỏ dại một lá mầm như cỏ) ở cây trồng thuộc cây có ích, chứa hợp chất có công thức (I) như được định nghĩa ở đây (ví dụ,

lượng có tác dụng diệt cỏ của chúng), và chất mang, chất pha loãng và/hoặc dung môi nông hóa học.

Theo tất cả các khía cạnh của sáng chế, hợp chất có công thức (I) tùy ý có mặt (ví dụ, nếu có thể về mặt hóa học) dưới dạng muối nông hóa học của nó.

Các hợp chất có công thức (I) theo sáng chế có thể được sử dụng làm tác nhân bảo vệ mùa màng ở dạng không biến đổi, như thu được bằng cách tổng hợp, nhưng, để sử dụng làm chất diệt cỏ, chúng thường được điều chế thành các chế phẩm (các dạng điều chế) diệt cỏ, ví dụ, theo nhiều cách khác nhau, chứa một hoặc nhiều chất nông hóa học gần như trơ (ví dụ, chất mang, chất pha loãng và/hoặc dung môi nông hóa học, chất hỗ trợ nông hóa học, chất nhũ hóa/chất hoạt động bề mặt/chất có hoạt tính bề mặt nông hóa học, và/hoặc chất phụ gia nông hóa học khác).

Chế phẩm (chế phẩm diệt cỏ) có thể là dưới các dạng vật lý khác nhau, ví dụ dưới dạng bột phun bụi, gel, bột thấm ướt được, viên nang được bao hoặc thấm đầy để phân bổ bằng tay hoặc bằng máy lên các vị trí đích, hạt phân tán được trong nước, hạt tan trong nước, hạt nhũ hóa được, viên nén phân tán được trong nước, viên nén sủi bọt, băng tan được trong nước, dịch đặc nhũ hóa được, dịch đặc vi nhũ hóa, nhũ tương dầu trong nước (EW) hoặc nước trong dầu (WO), các hệ đa pha khác như các sản phẩm dầu/nước/dầu và nước/dầu/nước, dịch chảy dầu, chất phân tán nước, chất phân tán dầu, huyền phù nhũ, huyền phù nang, chất lỏng tan được, dịch đặc tan trong nước (với nước hoặc dung môi hữu cơ trộn lẫn được với nước làm chất mang), màng polyme thấm đầy hoặc ở các dạng khác đã biết, ví dụ, từ Manual on Development and Use of FAO Specifications for Plant Protection Products, tái bản lần thứ 5, 1999. Thành phần hoạt tính có thể được đưa vào các vi sợi hoặc các vi que làm bằng polyme hoặc monome có thể polyme hóa và có đường kính nằm trong khoảng từ 0,1 đến 50micron và tỷ lệ các mặt là nằm trong khoảng giữa 10 và 1000.

Các dạng điều chế này có thể được sử dụng trực tiếp hoặc được pha loãng trước khi sử dụng. Sau đó chúng có thể được dùng nhờ dụng cụ xịt lên đất hoặc khí thích hợp hoặc dụng cụ dùng vào đất khác chẳng hạn như hệ tưới trực trung tâm hoặc phương tiện tưới nhỏ giọt/tia nhỏ. Các dạng điều chế pha loãng có thể được điều chế, ví dụ, với nước, phân bón lỏng, vi chất dinh dưỡng, vi sinh vật, dầu hoặc dung môi.

Các dạng điều chế có thể được điều chế, ví dụ, bằng cách trộn thành phần hoạt tính với chất hỗ trợ trong công thức nhằm thu được các chế phẩm ở dạng rắn, cốm, dung dịch, huyền phù hoặc nhũ tương được chia nhỏ. Các thành phần hoạt tính cũng có thể được chứa trong các vi nang mịn gồm có lõi và vỏ polyme. Vi nang thường có

đường kính từ 0,1 đến 500 micromet. Chúng chứa các thành phần hoạt tính với lượng nằm trong khoảng từ 25 đến 95% khối lượng của viên nang. Các thành phần hoạt tính có thể có mặt dưới dạng chất lỏng kỹ thuật, dưới dạng dung dịch thích hợp, dưới dạng hạt mịn ở dạng phân tán rắn hoặc lỏng hoặc ở dạng rắn nguyên khối. Màng bao nang bao gồm, ví dụ, gồm tự nhiên và tổng hợp, xenluloza, copolyme styren-butadien hoặc vật liệu tạo màng tương tự thích hợp khác, polyacrylonitril, polyacrylat, polyeste, polyamit, polyure, polyuretan, nhựa aminoplast hoặc tinh bột biến tính hóa học hoặc các polyme khác mà được biết bởi người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực liên quan.

Theo cách khác, “các vi nang” mịn có thể được tạo ra trong đó thành phần hoạt tính có mặt dưới dạng hạt được chia nhỏ trong nền chất bazơ rắn, nhưng trong trường hợp đó vi nang này không được bao nang bằng màng hạn chế khuếch tán như nêu ở đoạn trên.

Các thành phần hoạt tính có thể được hấp thu trên chất mang xốp. Điều này giúp cho các thành phần hoạt tính được giải phóng ra xung quanh ở lượng được kiểm soát (ví dụ, giải phóng chậm). Các dạng chế phẩm giải phóng có kiểm soát khác là cốm và bột trong đó thành phần hoạt tính được phân tán hoặc hòa tan trong nền rắn chứa polyme, sáp hoặc chất rắn thích hợp có khối lượng phân tử thấp. Các polyme thích hợp là polyvinyl axetat, polystyren, polyolefin, polyvinyl rượu, polyvinyl pyrrolidon, alkylated polyvinyl pyrrolidon, copolyme của polyvinyl pyrrolidon và maleic anhydrit và các este và nửa-este của chúng, xenluloza este biến đổi hóa học như carboxymetyl xenluloza, metyl xenluloza, hydroxyetyl xenluloza, các ví dụ về sáp thích hợp là sáp polyetylen, sáp polyetylen oxy hóa, sáp este như sáp montan, sáp có nguồn gốc tự nhiên như sáp cacauba, sáp candelilla, sáp ong v.v. Các vật liệu nền thích hợp khác cho chế phẩm giải phóng chậm là tinh bột, stearin, lignin.

Các thành phần của dạng điều chế (ví dụ, các thành phần tro) thích hợp để điều chế chế phẩm theo sáng chế thường tự được biết.

Như là chất mang và/hoặc dung môi lỏng (ví dụ dung môi hữu cơ), ví dụ, để dùng trong chế phẩm diệt cỏ theo sáng chế, chúng có thể được sử dụng: nước, dung môi thơm như toluen, m-xylene, o-xylene, p-xylene hoặc hỗn hợp của chúng, cumen, hydrocacbon thơm trộn với nhiệt độ sôi nằm trong khoảng từ 140 đến 320 °C (ví dụ đã biết dưới nhiều nhãn hiệu khác nhau như Solvesso®, Shellsol A®, Caromax®, Hydrosol®), các chất mang parafin hoặc isoparafin chẳng hạn như dầu parafin, dầu khoáng, dung môi hydrocacbon khử thơm với nhiệt độ sôi nằm trong khoảng từ 50 đến

320°C (ví dụ đã biết dưới nhãn hiệu Exxsol®), dung môi hydrocacbon không khử thơm với nhiệt độ sôi nằm trong khoảng từ 100 đến 320°C (ví dụ đã biết đến dưới tên Varsol®), dung môi isoparafin với nhiệt độ sôi nằm trong khoảng từ 100 đến 320°C (ví dụ đã biết với các nhãn hiệu như Isopar® hoặc Shellsol T®), hydrocacbon như xyclohexan, tetrahydronaphtalen (tetralin), decahydronaphtalen, alpha-pinen, d-limonen, hexadexan, isooctan; dung môi este như etyl axetat, n- hoặc iso- butyl axetat, amyl axetat, i-bornyl axetat, 2-ethylhexyl axetat, este C₆ – C₁₈ alkyl của axit axetic (ví dụ đã biết đến dưới tên Exxate®), etyleste của axit lactic, propyleste của axit lactic, butyleste của axit lactic, benzyl benzoat, benzyl lactat, dipropylenglycol dibenzoat, hoặc dialkyl este của axit succinic, axit maleic hoặc axit fumaric; dung môi phân cực chẳng hạn như N-metyl pyrrolidon, N-etyl pyrrolidon, C₃-C₁₈-alkyl pyrrolidon, gamma-butyrolacton, dimetylsulfoxit, N,N-dimetylformamit, N,N-dimetylxetamit, N,N-dimetyllactamit, axit béo của C₄–C₁₈ dimetylamit, axit dimetylamit benzoic, axetonitril, axeton, metyl etyl keton, metyl-isobutyl keton, isoamyl keton, 2-heptanon, xyclohexanon, isophoron, metyl isobutenyl keton (mesityl oxit), axetophenon, etylen cacbonat, propylen cacbonat, hoặc butylen cacbonat; chất dung môi hoặc chất pha loãng còn chẳng hạn như metanol, etanol, propanol, n- hoặc iso- butanol, n- hoặc isopentanol, 2-etyl hexanol, n-octanol, tetrahydrofurfuryl rượu, 2-metyl-2,4-pentandiol, 4-hydroxy-4-metyl-2-pentanon, xyclohexanol, rượu benzyl, etylen glycol, ete etylen glycol butyl, ete etylen glycol metyl, dietylen glycol, ete dietylen glycol butyl, ete dietylen glycol monoetyl, ete dietylen glycol monometyl, propylen glycol, dipropylen glycol, ete dipropylen glycol monometyl, hoặc dung môi glycol monoete tương tự khác dựa trên nguyên liệu là etylen glycol, propylen glycol hoặc butylen glycol, trietylen glycol, polyetylen glycol (ví dụ PEG 400), polypropylenglycol với khối lượng phân tử nằm trong khoảng từ 400 đến 4000, hoặc glyxerol; glyxerol axetat, glyxerol diaxetat, glyxerol triaxetat, 1,4-dioxan, dietylen glycol abietat, clobenzen, clotoluen; este axit béo như metyl octanoat, isopropyl myristat, metyl laurat, metyl oleat, hỗn hợp của metyl este của axit béo C₈-C₁₀, metyl este của dầu hạt cải dầu, etyl este của dầu hạt cải dầu, metyl este dầu đậu nành, etyl este dầu đậu nành, dầu thực vật (ví dụ, dầu hạt cải dầu hoặc dầu đậu nành); axit béo như axit oleic, axit linoleic, hoặc axit linolenic; hoặc este của axit phosphoric hoặc axit phosphonic như trietyl phosphat, C₃-C₁₈-tris-alkyl phosphat, alkylaryl phosphat, hoặc bis-octyl-octyl phosphonat.

Nước thường là chất mang lỏng được chọn để pha loãng các chất cô đặc.

Các chất mang rắn thích hợp là, ví dụ, bột talc, titan dioxit, đất sét pyrophyli, silic oxit (silic oxit thăng hoa hoặc kết tủa và tùy ý được tạo chức hoặc xử lý, ví dụ silan hóa), đất sét atapulgit, tảo cát, đá vôi, canxi cacbonat, bentonit, canxi montomorilonit, vỏ hạt bông, bột lúa mì thô, bột đậu nành, đá bột, bột gỗ, vỏ óc chó nghiền, lignin và các vật liệu tương tự, như được mô tả, ví dụ, trong EPA CFR 180.1001. (c) & (d). Phân bón được tạo hạt hoặc nghiền bột cũng có thể được sử dụng làm chất mang rắn.

Số lượng lớn các chất hoạt động bề mặt có thể được sử dụng hữu ích trong cả chế phẩm dạng rắn và lỏng (chế phẩm diệt cỏ), đặc biệt là trong các chế phẩm (chế phẩm diệt cỏ) có thể được pha loãng với các chất mang trước khi sử dụng. Chất có hoạt tính bề mặt có thể là anion, cation, lưỡng tính, không ion hoặc polyme và chúng có thể được sử dụng làm chất nhũ hóa, làm ướt, phân tán hoặc huyền phù hoặc cho các mục đích khác. Chất có hoạt tính bề mặt tiêu biểu bao gồm, ví dụ, muối của alkyl sulfat, như dietanolamoni lauryl sulfat; natri lauryl sulfat, muối của alkylarylsulfonat, như canxi hoặc natri dodexylbenzensulfonat; sản phẩm cộng alkylphenol-alkylen oxit, như nonylphenol etoxylat; sản phẩm cộng rượu-alkylen oxit, chẳng hạn như tridexyl rượu etoxylat; xà phòng, chẳng hạn như natri stearat; muối của alkylnaphtalensulfonat, chẳng hạn như natri dibutylnaphtalensulfonat; dialkyl este của muối sulfosuccinat, chẳng hạn như natri di(2-etylhexyl)sulfosuccinat; sorbitol este, chẳng hạn như sorbitol oleat; amin bậc bốn, chẳng hạn như lauryl trimetylamoni clorua, polyetylen glycol este của axit béo, chẳng hạn như polyetylen glycol stearat; copolyme khối của etylen oxit và propylen oxit; và muối của mono- và di-alkyl phosphat este; và cũng như các chất khác được mô tả, ví dụ, trong "McCutcheon's Detergents and Emulsifiers Annual", MC Publishing Corp., Ridgewood, New Jersey, 1981.

Các thành phần khác của chế phẩm (ví dụ các thành phần trợ) thông thường có thể được sử dụng trong các công thức (chế phẩm diệt cỏ) gồm có chất ức chế sự kết tinh, các chất biến đổi độ nhớt, các chất treo, thuốc nhuộm, chất chống oxy hóa, các chất tạo bọt, các chất hấp thụ ánh sáng, hỗn hợp chất trợ, chất chống tạo bọt, các chất tạo phức, các chất biến đổi hoặc trung hòa độ pH và/hoặc chất đệm, chất ức chế sự ăn mòn, hương liệu, chất tạo độ ẩm, chất tăng cường sự hấp thụ, các vi chất dinh dưỡng, chất dẻo, chất chảy, chất bôi trơn, chất phân tán, chất làm đặc, chất chống đóng băng, vi sinh vật, các chất phù hợp và/hoặc các chất hòa tan; và/hoặc phân bón dạng lỏng hoặc rắn.

Chế phẩm (các chế phẩm) cũng có thể bao gồm các chất hoạt hóa bổ sung, ví dụ chất diệt cỏ khác, chất an toàn diệt cỏ, chất điều chỉnh tăng trưởng thực vật, chất diệt nấm hoặc chất diệt côn trùng.

Các chế phẩm theo sáng chế có thể được bổ sung gồm có chất phụ gia (thường được gọi là chất hỗ trợ), chứa dầu khoáng, dầu hữu cơ thực vật hoặc động vật, các este alkyl của các dầu này hoặc hỗn hợp của các dầu này và dẫn xuất dầu/este dầu. Khối lượng của chất phụ gia dầu (chất hỗ trợ dầu) được sử dụng trong chế phẩm theo sáng chế thường nằm trong khoảng từ từ 0,01 đến 10% của hỗn hợp phun. Ví dụ, chất phụ gia dầu (chất hỗ trợ dầu) có thể được thêm vào thùng phun với độ cô đặc mong muốn sau khi hỗn hợp phun được điều chế. Chất phụ gia dầu được ưu tiên (các chất hỗ trợ dầu) bao gồm dầu khoáng hoặc dầu hữu cơ thực vật, ví dụ dầu hạt cải, dầu oliu hoặc dầu hoa hướng dương, dầu thực vật có khả năng tạo nhũ, như AMIGO® (Loveland Products Inc.), các este C₁-C₆alkyl của các dầu hữu cơ thực vật, ví dụ như các este metyl, hoặc dầu hữu cơ động vật, như dầu cá hoặc mỡ bò. Chất phụ gia dầu được ưu tiên (chất hỗ trợ dầu) chứa dầu hạt cải dầu được metyl hóa (este metyl dầu hạt cải dầu). Chất phụ gia dầu được ưu tiên khác (chất hỗ trợ dầu) chứa, ví dụ, như các thành phần hoạt tính chiếm 80 % theo khối lượng các este alkyl của dầu cá và 15% theo khối lượng dầu hạt cải dầu được metyl hóa (este metyl của dầu hạt cải dầu), và còn 5% theo khối lượng của các chất nhũ hóa thông thường và chất biến đổi độ pH. Chất phụ gia dầu được ưu tiên đặc biệt (các chất hỗ trợ dầu) bao gồm este C₁-C₆alkyl của axit béo C₈-C₂₂, đặc biệt là este metyl của C₈-C₂₂ (đặc biệt là axit béo C₁₂-C₁₈); ưu tiên là este metyl của axit lauric, axit palmitic, hoặc axit oleic. Các este này lần lượt được biết là metyl laurat (CAS-111-82-0), metyl palmitat (CAS-112-39-0) và metyl oleat (CAS-112-62-9). Dẫn xuất metyl este của axit béo là AGNIQUE ME 18 RD-F® (ví dụ, có sẵn từ hãng Cognis). Các dẫn xuất dầu này và dẫn xuất dầu khác cũng đã biết từ Compendium of Herbicide Adjuvants, xuất bản lần thứ 5, Southern Illinois University, 2000.

Các áp dụng và hoạt động của các chất phụ gia dầu (các chất hỗ trợ dầu) đã được đề cập ở trên còn có thể được cải tiến bằng cách kết hợp chúng với các chất hoạt động bề mặt, chẳng hạn như các chất hoạt động bề mặt không ion, anion, cation hoặc lưỡng tính. Các ví dụ về các chất hoạt động bề mặt anion, không ion, cation hoặc lưỡng tính thích hợp đã được liệt kê ở các trang 7 và 8 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO97/34485. Các chất hoạt động bề mặt được ưu tiên là chất hoạt động bề mặt anion thuộc loại dodexylbenzylsulfonat, đặc biệt là muối canxi của chúng, và cả chất

hoạt động bề mặt không ion thuộc loại etoxylat rượu béo. Như chất hoạt động bề mặt không ion, sự ưu tiên đặc biệt được dành cho các rượu béo có C_{12} - C_{22} được etoxylat hóa ưu tiên là có độ etoxylat hóa nằm trong khoảng từ 5 đến 40. Ví dụ về các chất hoạt động bề mặt có bán trên thị trường là loại Genapol (Clariant). Cũng được ưu tiên là các chất hoạt động bề mặt silicon, đặc biệt là heptametyltrisiloxan được biến đổi bởi polyalkyl-oxit, mà được bán trên thị trường, ví dụ, dưới tên SILWET L-77®, và cả chất hoạt động bề mặt được perflu hóa. Nồng độ của các chất hoạt động bề mặt liên quan đến tổng khối lượng của chất phụ gia dầu (chất hỗ trợ dầu) thường từ 1 đến 50% theo khối lượng của chất phụ gia dầu (chất hỗ trợ dầu). Các ví dụ về chất phụ gia dầu (chất hỗ trợ dầu) bao gồm hỗn hợp dầu và/hoặc dầu khoáng và/hoặc các dẫn xuất của chúng với các chất hoạt động bề mặt là TURBOCHARGE®, ADIGOR® (cả hai đều của (Syngenta Crop Protection AG), ACTIPRON® (BP Oil UK Limited), AGRI-DEX® (Helena Chemical Company).

Các chất có hoạt tính bề mặt nêu trên cũng có thể được sử dụng riêng rẽ trong các dạng điều chế, tức là không có chất phụ gia dầu (chất hỗ trợ dầu).

Hơn thế nữa, việc bổ sung dung môi hữu cơ vào hỗn hợp chất phụ gia dầu (chất hỗ trợ dầu)/chất hoạt động bề mặt có thể góp phần cải thiện thêm hoạt tính. Các dung môi thích hợp là, ví dụ, các dung môi SOLVESSO® và AROMATIC® (Exxon Corporation). Sự cô đặc các dung môi này có thể là từ 10 đến 80% theo khối lượng của tổng khối lượng. Chất phụ gia dầu này có thể là trong hỗn hợp các chất phụ gia với các dung môi, được mô tả, ví dụ, trong tài liệu đơn sáng chế số US 4 834 908. Chất phụ gia dầu có bán trên thị trường được mô tả ở đây được biết dưới tên MERGE® (BASF). Chất phụ gia dầu (chất hỗ trợ dầu) khác mà được ưu tiên theo sáng chế là SCORE® và ADIGOR® (cả hai đều của hãng Syngenta Crop Protection AG).

Ngoài chất phụ gia dầu (chất hỗ trợ dầu) liệt kê ở trên, để cải thiện hoạt tính của các chế phẩm theo sáng chế, cũng có thể bổ sung các dạng chế phẩm chứa alkylpyrrolidon, (ví dụ, AGRIMAX® từ ISP) vào hỗn hợp phun. Các dạng chế phẩm chứa latic tổng hợp, như, ví dụ, các hợp chất polyacrylamit, polyvinyl hoặc poly-1-p-menten (ví dụ, BOND®, COURIER® hoặc EMERALD®) cũng có thể được sử dụng.

Chất hỗ trợ dầu (chất phụ gia dầu) được đặc biệt ưu tiên, ví dụ, để sử dụng trong chế phẩm diệt cỏ theo sáng chế, là chất cô đặc nhũ hóa mà chứa:

(i) rượu được etoxyl hóa, mà tốt hơn là bao gồm rượu béo C_{12} - C_{22} được etoxyl hóa (tốt hơn là có độ etoxyl nằm trong khoảng từ 5 đến 40); và

(ii) hỗn hợp của hydrocacbon nặng thơm, mà tốt hơn là bao gồm (hoặc tốt hơn là bao gồm 50% hoặc nhiều hơn khối lượng hydrocacbon nặng thơm của) hỗn hợp của naphtalen, mỗi chất được thế bởi một hoặc nhiều alkyl trong đó alkyl này có tổng cộng từ 1 đến 4 nguyên tử cacbon trên mỗi phân tử naphtalen (ví dụ, Solvesso 200 ND TM); và

(iii) dầu hạt cải dầu được metyl hóa (metyl este của dầu hạt cải dầu) (ví dụ, Agnique ME 18 RD-F TM), làm chất bổ trợ; tốt hơn là có mặt ở lượng khoảng 47% khối lượng và/hoặc 45% khối lượng chất bổ trợ dầu/chất phụ gia dầu/chất cô đặc nhũ hóa. Một ví dụ của chất cô đặc nhũ hóa làm chất bổ trợ dầu (chất phụ gia dầu) là ADIGOR TM, hiện được bán ở nhiều nước bởi hãng Syngenta.

Khi chất cô đặc nhũ hóa làm chất bổ trợ dầu nêu trên được sử dụng, tốt hơn là nó được bổ sung vào chế phẩm diệt cỏ sau khi pha loãng (ví dụ, bằng nước và/hoặc trong thùng phun), phổ biến là trước khi dùng cho cỏ và/hoặc cây trồng có ích và/hoặc cho khu vực trồng chúng. Theo một phương án cụ thể, chế phẩm diệt cỏ, ví dụ, sau khi pha loãng (ví dụ, bằng nước và/hoặc trong thùng phun), chứa chất cô đặc nhũ hóa làm chất bổ trợ dầu nêu trên, và thêm amoni sulphat và/hoặc rượu isopropylic.

Các dầu bổ trợ như được mô tả ở đoạn trước có thể được dùng làm hoặc chất lỏng mang trong đó hoạt chất được hòa tan, nhũ tương hóa hoặc phân tán thích hợp với dạng vật lý của hoạt chất.

Theo một phương án cụ thể khác, chế phẩm diệt cỏ theo sáng chế chứa chất bổ trợ nông hóa học chứa di-isononyl este của axit 1,2-xyclohexan dicarboxylic (ví dụ, số đăng ký CAS 166412-78-8), ví dụ, như được bán bởi BASF dưới tên Hexamoll TM DINCH TM. “Isononyl” trong ngữ cảnh này có nghĩa là một hoặc nhiều, tốt hơn là hỗn hợp của hai hoặc nhiều, đồng phân phân nhánh của C₉H₁₉. Theo một phương án cụ thể, chế phẩm diệt cỏ, ví dụ, sau khi pha loãng (ví dụ, bằng nước và/hoặc trong thùng phun), chứa di-isononyl este của axit 1,2-xyclohexan dicarboxylic, và thêm amoni sulphat và/hoặc rượu isopropylic.

Theo một phương án cụ thể khác, chế phẩm diệt cỏ theo sáng chế chứa chất bổ trợ nông hóa học là chất bổ trợ phosphat hữu cơ và/hoặc phosphonat hữu cơ. Tốt hơn là, chất bổ trợ phosphat là tris-[C₄-C₁₂alkyl hoặc 2-(C₂-C₆alkoxy)etyl-] este của axit phosphoric, hoặc tốt hơn là tris-(2-ethylhexyl) phosphat, tris-n-octyl phosphat và/hoặc tris-[2-(n-butoxy)etyl] phosphat, hoặc tốt nhất là tris-(2-ethylhexyl) phosphat. Tốt hơn là, chất bổ trợ phosphonat là bis-(C₃-C₁₂alkyl) este của axit C₃-C₁₂alkyl-phosphonic,

hoặc tốt hơn là bis-(2-ethylhexyl) (2-ethylhexyl)phosphonat, bis-(2-ethylhexyl) (n-octyl)phosphonat và/hoặc di-n-butyl (n-butyl)phosphonat.

Chế phẩm (chế phẩm diệt cỏ) thường chứa từ 0,1 đến 99% theo khối lượng, đặc biệt là từ 0,1 đến 95% theo khối lượng, hợp chất có công thức I và từ 1 đến 99,9% theo khối lượng chất nông hóa học cơ bản trợ, mà ưu tiên là bao gồm chất hỗ trợ chế phẩm và/hoặc từ 0 đến 30% hoặc từ 0 đến 25% (ví dụ từ 0,5 đến 30% hoặc từ 0,5 đến 25%) theo khối lượng chất hoạt động bề mặt. Trong khi đó chế phẩm diệt cỏ (đặc biệt là các sản phẩm bán trên thị trường) sẽ ưu tiên là được phối chế dưới dạng dịch đặc, người dùng cuối sẽ thường sử dụng chế phẩm pha loãng (chế phẩm), ví dụ chế phẩm (chế phẩm) được pha loãng với nước, cụ thể là khi bón chế phẩm diệt cỏ lên cỏ dại và/hoặc cây trồng thuộc cây có ích và/hoặc lên khu vực trồng của chúng.

Tỷ lệ sử dụng các hợp chất có công thức I có thể thay đổi trong giới hạn rộng và tùy thuộc vào bản chất của đất, phương pháp sử dụng (trước hoặc sau nảy mầm; xử lý hạt; dùng vào luống hạt; không dùng cho đất trồng, v.v.), cây trồng, cỏ dại hoặc cỏ cần kiểm soát, điều kiện khí hậu phổ biến, và các yếu tố khác bị ảnh hưởng bởi phương pháp bón, thời gian bón và cây trồng đích. Hợp chất có công thức I theo sáng chế thường được bón (ưu tiên là sau nảy mầm) ở tỷ lệ từ 1 đến 2000g/ha, ưu tiên là từ 1 đến 1000g/ha và ưu tiên nhất là từ 1 đến 500g/ha hoặc từ 5 đến 500g/ha.

Công thức/chế phẩm ưu tiên đặc biệt là có thành phần tiêu biểu sau (% = phần trăm khối lượng của chế phẩm):

Dịch cô đặc nhũ hóa được:

thành phần hoạt tính:	từ 0,3 đến 95%, tốt hơn là từ 0,5 đến 60% chẳng hạn như từ 1 đến 40%
chất có hoạt tính bề mặt:	từ 1 đến 30%, tốt hơn là từ 3 đến 20% chẳng hạn như từ 5 đến 15%
dung môi làm chất mang lỏng:	từ 1 đến 80%, tốt hơn là từ 1 đến 60% chẳng hạn như từ 1 đến 40%

Bụi:

thành phần hoạt tính:	từ 0,1 đến 10%, tốt hơn là từ 0,1 đến 5%
chất mang rắn:	từ 99,9 đến 90%, tốt hơn là từ 99,9 đến 99 %

Dịch đặc huyền phù:

thành phần hoạt tính:	từ 1 đến 75%, tốt hơn là từ 3 đến 50% hoặc từ 10 đến 50%
nước:	từ 98 đến 24%, tốt hơn là từ 95 đến 30% hoặc từ 88

đến 30%

chất có hoạt tính bề mặt: từ 1 đến 40%, tốt hơn là từ 2 đến 30%

Bột thấm ướt được:

thành phần hoạt tính: từ 0,5 đến 90%, tốt hơn là từ 1 đến 80%

chất có hoạt tính bề mặt: từ 0,5 đến 20%, tốt hơn là từ 1 đến 15%

chất mang rắn: từ 5 đến 95%, tốt hơn là từ 15 đến 90%

Hạt:

thành phần hoạt tính: từ 0,1 đến 30%, tốt hơn là từ 0,1 đến 15%

chất mang rắn: từ 99,5 đến 70%, tốt hơn là từ 97 đến 85%

Hạt phân tán được trong nước:

thành phần hoạt tính: từ 1 đến 90%, tốt hơn là từ 10 đến 80%

chất có hoạt tính bề mặt: từ 0,5 đến 80%, tốt hơn là từ 5 đến 30%

chất mang rắn: từ 90 đến 10%, tốt hơn là từ 70 đến 30%

Các ví dụ sau minh họa thêm, nhưng không làm giới hạn sáng chế.

F1. Dịch đặc nhũ hóa được	a)	b)	c)	d)
thành phần hoạt tính	5 %	10 %	25 %	50 %
canxi dodecylbenzen-sulfonat	6 %	8 %	6 %	8 %
polyglycol ete dầu thầu dầu (36mol etylen oxit)	4 %	-	4 %	4 %
octylphenol polyglycol ete (7-8mol etylen oxit)	-	4 %	-	2 %
NMP (N-metyl-2-pyrrolidon)	-	10 %	-	20 %
hỗn hợp hydrocacbon thơm C ₉ -C ₁₂	85 %	68 %	65 %	16 %

Nhũ tương có nồng độ mong muốn có thể được điều chế từ dịch đặc này bằng cách pha loãng với nước.

F2. Dung dịch	a)	b)	c)	d)
thành phần hoạt tính	5 %	10 %	50 %	90 %
1-metoxi-3-(3-metoxi-propoxy)-propan	40 %	50 %	-	-
polyetylen glycol MW 400	20 %	10 %	-	-
NMP (N-metyl-2-pyrrolidon)	-	-	50 %	10 %
hỗn hợp hydrocacbon thơm C ₉ -C ₁₂	35 %	30 %	-	-

Dung dịch này thích hợp để dùng không pha loãng hoặc sau khi pha loãng bằng nước.

F3. Bột thấm ướt được	a)	b)	c)	d)
thành phần hoạt tính	5 %	25 %	50 %	80 %
natri lignosulfonat	4 %	-	3 %	-

natri lauryl sulfat	2 %	3 %	-	4 %
natri diisobutylnaphtalen-sulfonat	-	6 %	5 %	6 %
octylphenol polyglycol ete (7-8mol etylen oxit)	-	1 %	2 %	-
axit silic phân tán cao	1 %	3 %	5 %	10 %
kaolin	88 %	62 %	35 %	-

Thành phần hoạt tính được trộn kỹ với chất bổ trợ và hỗn hợp này được nghiền kỹ trong máy nghiền thích hợp, tạo ra bột để làm ướt mà có thể được pha loãng bằng nước để tạo ra huyền phù có nồng độ mong muốn bất kỳ.

F4. Hạt bao	a)	b)	c)
thành phần hoạt tính	0,1 %	5 %	15 %
silic oxit phân tán cao	0,9 %	2 %	2 %
chất mang vô cơ (đường kính 0,1 - 1mm) ví dụ, CaCO ₃ hoặc SiO ₂	99,0 %	93 %	83 %

Thành phần hoạt tính được hòa tan trong metylen clorua, dung dịch này được phun lên chất mang và dung môi sau đó được làm bay hơi trong chân không.

F5. Hạt bao	a)	b)	c)
thành phần hoạt tính	0,1 %	5 %	15 %
polyetylen glycol MW 200	1,0 %	2 %	3 %
silic oxit phân tán cao	0,9 %	1 %	2 %
chất mang vô cơ (đường kính 0,1 - 1 mm) ví dụ, CaCO ₃ hoặc SiO ₂	98,0 %	92 %	80 %

Thành phần hoạt tính nghiền mịn được trộn một cách đồng nhất, trong máy trộn, với chất mang được làm ẩm bằng polyetylen glycol. Cốm được phủ không có bụi được thu theo cách này.

F6. Các hạt được đùn	a)	b)	c)	d)
thành phần hoạt tính	0,1 %	3 %	5 %	15 %
natri lignosulfonat	1,5 %	2 %	3 %	4 %
carboxymetylxenluloza	1,4 %	2 %	2 %	2 %
kaolin	97,0 %	93 %	90 %	79 %

Thành phần hoạt tính được trộn và nghiền với chất bổ trợ và hỗn hợp được làm ẩm bằng nước. Hỗn hợp thu được được ép đùn và sau đó làm khô trong dòng không khí.

F7. Hạt phân tán được trong nước	a)	b)	c)	d)
thành phần hoạt tính	5 %	10 %	40 %	90 %
natri lignosulfonat	20 %	20 %	15 %	7 %
đibutyl naphtalen sulfonat	5 %	5 %	4 %	2 %
gôm arabic	2 %	1 %	1 %	1 %
đất tảo cát	20 %	30 %	5 %	-
natri sulfat	-	4 %	5 %	-
kaolin	48 %	30 %	30 %	-

Thành phần hoạt tính được trộn và nghiền với chất bổ trợ và hỗn hợp được làm ẩm bằng nước. Hỗn hợp thu được được ép đùn và sau đó làm khô trong dòng không khí.

F8. Bụi	a)	b)	c)
thành phần hoạt tính	0,1 %	1 %	5 %
bột talc	39,9 %	49 %	35 %
kaolin	60,0 %	50 %	60 %

Bụi dùng liền thu được bằng cách trộn thành phần hoạt tính với chất mang và nghiền hỗn hợp trong máy nghiền thích hợp.

F9. Huyền phù đặc	a)	b)	c)	d)
thành phần hoạt tính	3 %	10 %	25 %	50 %
propylen glycol	5 %	5 %	5 %	5 %
nonylphenol polyglycol ete (15mol etylen oxit)	-	1 %	2 %	-
natri lignosulfonat	3 %	3 %	7 %	6 %
heteropolysacarit (xanthan)	0,2 %	0,2 %	0,2 %	0,2 %
1,2-benzisothiazolin-3-on	0,1 %	0,1 %	0,1 %	0,1 %
nhũ tương dầu silicon	0,7 %	0,7 %	0,7 %	0,7 %
nước	88 %	80 %	60 %	38 %

Thành phần hoạt tính được nghiền mịn ban đầu được trộn với chất bổ trợ, tạo ra huyền dịch cô đặc từ đó huyền dịch có nồng độ mong muốn bất kỳ có thể được điều chế bằng cách pha loãng bằng nước.

Các hợp chất được sử dụng để diệt cỏ - cây trồng có ích, cỏ dại, tỷ lệ dùng và các yếu tố khác.

Theo khía cạnh khác, sáng chế đề xuất phương pháp kiểm soát cỏ dại (ưu tiên là cỏ dại một lá mầm chẳng hạn như ưu tiên hơn là cỏ dại một lá mầm) ở cây trồng thuộc cây có ích, trong đó phương pháp này bao gồm việc bón hợp chất có công thức (I),

hoặc chế phẩm diệt cỏ chứa hợp chất này, lên cỏ dại và/hoặc lên cây và/hoặc lên khu vực trồng của chúng. (Ưu tiên là, theo khía cạnh khác này, chế phẩm diệt cỏ có thể là như được mô tả trên đây hoặc dưới đây, ví dụ như được mô tả trong “chế phẩm diệt cỏ”, “tổ hợp và hỗn hợp” và/hoặc phần yêu cầu bảo hộ trên đây hoặc dưới đây.)

Theo khía cạnh khác, sáng chế đề xuất chế phẩm diệt cỏ, cụ thể là để dùng trong phương pháp kiểm soát cỏ dại (ưu tiên là cỏ dại một lá mầm chẳng hạn như ưu tiên hơn là cỏ dại một lá mầm) ở cây trồng thuộc cây có ích, chứa hợp chất có công thức (I) như được xác định ở đây (ví dụ lượng có hiệu quả diệt cỏ của chúng), và chất mang, chất pha loãng và/hoặc dung môi nông hóa học.

Theo tất cả các khía cạnh của sáng chế, hợp chất có công thức (I) tùy ý có mặt (ví dụ khi có thể về mặt hóa học) là muối nông hóa học (ví dụ muối kim loại, muối sulfoni hoặc muối amoni nông hóa học) của chúng.

Theo một phương án, chế phẩm diệt cỏ cũng có thể chứa một hoặc nhiều chất diệt cỏ khác, ví dụ, dưới dạng hỗn hợp kết hợp đối với hợp chất có công thức (I), và/hoặc chất an toàn. Xem phần các tổ hợp và hỗn hợp trong bản mô tả này để biết thêm chi tiết của các ví dụ về các dạng này.

Theo tất cả các khía cạnh của sáng chế (ví dụ các phương pháp sử dụng theo sáng chế), cây trồng thuộc cây có ích, ví dụ trên hoặc trong đó hoặc tại khu vực trồng của chúng hợp chất hoặc chế phẩm theo sáng chế có thể được sử dụng, bao gồm (ví dụ là), cụ thể là: ngũ cốc (ví dụ ngũ cốc không yến mạch, cụ thể là ngũ cốc không yến mạch không lúa miến không kê, cụ thể hơn là lúa mì, lúa mạch, lúa mạch đen và/hoặc lúa mì lai lúa mạch đen), lúa, ngô (bắp), mía đường, cây họ đậu [ưu tiên là đậu nành, lạc, và/hoặc cây đậu lăng; ưu tiên hơn là đậu nành; trong đó thường cây đậu lăng bao gồm đậu khô (ví dụ đậu lửa hoặc đậu tây hoặc đậu Ấn Độ mà là *Phaseolus vulgaris*, hoặc đậu xanh mà là *Vigna radiata*), đậu gà, đậu trắng (tức là đậu có đốm đen, *Vigna unguiculata*), đậu lăng, đậu khô rộng, và/hoặc đậu hạt khô như đậu Hà Lan], bông, cây cải (cụ thể là cây hạt cải dầu hoặc cây cải dầu), hoa hướng dương, hạt lanh, củ cải đường, củ cải đường dùng cho chăn nuôi, khoai tây, rau (ưu tiên là rau hai lá mầm), cây lanh, thuốc lá, cây trồng đồn điền (như cây họ tùng bách, ô liu và/hoặc cây ô liu, cây cọ dầu, cà phê, hoặc nho), và/hoặc cây ăn quả (cụ thể là cây ăn quả hai lá mầm và/hoặc tán rộng, và/hoặc cụ thể là cây họ táo, cây quả hạch, cây ăn quả mọc bụi, cây họ cam, dừa, chuối, và/hoặc dâu tây); và/hoặc thảm cỏ và/hoặc cỏ đồng.

Ưu tiên là, theo tất cả các khía cạnh của sáng chế, cây trồng thuộc cây có ích, ví dụ trên hoặc trong hoặc tại khu vực trồng của chúng hợp chất hoặc chế phẩm theo sáng

chế có thể được sử dụng, bao gồm (ví dụ là) ngũ cốc (cụ thể là ngũ cốc không yến mạch, cụ thể hơn là ngũ cốc không yến mạch không lúa miến không kê, còn cụ thể hơn là lúa mỳ, lúa mạch, lúa mạch đen và/hoặc lúa mỳ lai lúa mạch đen), lúa, mía đường, cây họ đậu [ưu tiên là đậu nành, lạc, và/hoặc cây đậu lăng (ưu tiên hơn là đậu nành)], bông, cải (cụ thể là cây hạt cải dầu hoặc cây cải dầu), hoa hướng dương, hạt lanh, củ cải đường, củ cải đường dùng cho chăn nuôi, khoai tây, và/hoặc rau (ưu tiên là rau hai lá mầm).

Ưu tiên hơn là, theo tất cả các khía cạnh của sáng chế, cây trồng thuộc cây có ích, ví dụ trên hoặc trong hoặc tại khu vực trồng của chúng hợp chất hoặc chế phẩm theo sáng chế có thể được sử dụng, bao gồm (ví dụ là): lúa mỳ (ví dụ lúa mỳ mùa đông, lúa mỳ mùa xuân, hoặc lúa mỳ cứng), lúa mạch (ví dụ lúa mạch mùa đông hoặc lúa mạch mùa xuân), lúa mạch đen, lúa mỳ lai lúa mạch đen, mía đường, cây họ đậu [ưu tiên là đậu nành, lạc, và/hoặc cây đậu lăng (ưu tiên hơn là đậu nành)], bông, cây cải (cụ thể là cây hạt cải dầu hoặc cây cải dầu), hoa hướng dương, hạt lanh, củ cải đường, củ cải đường dùng cho chăn nuôi, khoai tây, và/hoặc rau (ưu tiên là rau hai lá mầm).

Còn ưu tiên hơn là, theo tất cả các khía cạnh của sáng chế, cây trồng thuộc cây có ích, ví dụ trên hoặc trong hoặc tại khu vực trồng của chúng hợp chất hoặc chế phẩm theo sáng chế có thể được sử dụng, bao gồm (ví dụ là): cây họ đậu [ưu tiên là đậu nành, lạc, và/hoặc cây đậu lăng; ưu tiên hơn là đậu nành; trong đó thường cây đậu lăng bao gồm đậu khô (ví dụ đậu lửa hoặc đậu tây hoặc đậu Ấn Độ mà là *Phaseolus vulgaris*, hoặc đậu xanh mà là *Vigna radiata*), đậu gà, đậu trắng (tức là đậu có đốm đen, *Vigna unguiculata*), đậu lăng, đậu khô rộng, và/hoặc đậu hạt khô như đậu Hà Lan], bông, cây cải (cụ thể là cây hạt cải dầu hoặc cây cải dầu), hoa hướng dương, củ cải đường, củ cải đường dùng cho chăn nuôi, khoai tây, và/hoặc rau (ưu tiên là rau hai lá mầm).

Một số hợp chất có công thức (I) theo sáng chế đặc biệt có hiệu quả đối với cỏ dại một lá mầm và thể hiện được lựa chọn cho kiểm soát cỏ một lá mầm (ví dụ cỏ dại khí hậu ẩm) trong cây trồng trong số đậu nành hoặc củ cải đường (ví dụ xem ví dụ sinh học 2 và 3 ở đây).

Thuật ngữ "cây trồng" được hiểu là còn bao gồm các cây trồng mà kháng chất diệt cỏ hoặc nhóm chất diệt cỏ (ví dụ chất ức chế ALS, GS, EPSPS, PPO và HPPD, và/hoặc 2,4-D hoặc dicamba) do các phương pháp lai giống hoặc kỹ thuật gen thông thường. Ví dụ về các cây trồng kháng ví dụ imidazolinon (mà là chất ức chế ALS),

chẳng hạn như imazamox, bằng các phương pháp lai giống thông thường bao gồm cải dầu mùa hè Clearfield® (cây cải dầu) và/hoặc lúa mì Clearfield® và/hoặc lúa Clearfield® (tất cả từ BASF). Ví dụ về các cây trồng chịu được chất diệt cỏ bởi các phương pháp kỹ thuật gen thông thường bao gồm, ví dụ, các giống ngô hoặc đậu nành kháng glyphosat hoặc kháng glufosinat, cụ thể là các giống bán trên thị trường dưới nhãn hiệu RoundupReady® hoặc RoundupReady® 2 (cả hai từ Monsanto, cả hai đều kháng glyphosat) hoặc LibertyLink® (từ Bayerb, kháng glufosinat). Lúa kháng glufosinat (LibertyLink®) cũng đã được công bố.

Các cây trồng có ích khác bao gồm đậu nành chịu 2,4-D, ví dụ, đậu nành được biến đổi di truyền để chịu chất diệt cỏ 2,4-D, hoặc đậu nành chịu dicamba, ví dụ, đậu nành được biến đổi di truyền để chịu chất diệt cỏ dicamba. Đậu nành chịu 2,4-D hoặc dicamba này cũng có thể, cụ thể là, chịu glyphosat hoặc glufosinat. Ví dụ, cây trồng có ích bao gồm đậu nành có đặc điểm chịu dicamba được kết hợp (được ghép vào) với đặc điểm chịu glyphosat, sao cho đậu nành này có khả năng chịu được với chất diệt cỏ glyphosat và dicamba (ví dụ đậu nành Genuity® Roundup Ready® 2 Xtend, đang được phát triển bởi hãng Monsanto).

Cây trồng còn được hiểu là cây trồng mà có khả năng chịu kháng côn trùng gây hại nhờ các phương pháp kỹ thuật gen, ví dụ ngô Bt (kháng sâu đục thân ngô châu Âu), bông Bt (kháng sâu đục quả bông) và cả khoai tây Bt (kháng rệp khoai tây Colorado). Ví dụ về ngô Bt là ngô lai Bt-176 của NK® (Syngenta Seeds). Độc tố Bt là protein được tạo ra một cách tự nhiên bởi vi khuẩn trong đất *Bacillus thuringiensis*. Ví dụ về độc tố và cây chuyển gen có khả năng tổng hợp độc tố như vậy được mô tả trong các tài liệu công bố đơn số EP-A-451 878, EP-A-374 753, WO 93/07278, WO 95/34656, WO 03/052073 và EP-A-427 529. Ví dụ về cây chuyển gen mà chứa một hoặc nhiều gen mã hóa cho khả năng kháng thuốc diệt côn trùng và biểu hiện một hoặc nhiều độc tố là KnockOut® (ngô), Yield Gard® (ngô), NuCOTIN33B® (bông), Bollgard® (bông), NewLeaf® (khoai tây), NatureGard® và Protexcta®. Cây trồng và vật liệu hạt của chúng có thể kháng chất diệt cỏ và có cùng thời điểm có thể cũng kháng với việc ăn của côn trùng (đặc điểm chuyển gen "ghép vào"). Hạt có thể, ví dụ, có khả năng biểu hiện protein Cry3 hoạt động làm chất diệt côn trùng và ở cùng thời điểm có thể chịu glyphosat. Thuật ngữ "cây trồng" cần được hiểu là cũng bao gồm cây trồng thu được từ các phương pháp gây giống hoặc kỹ thuật di truyền thông thường mà còn chứa các đặc điểm về sản lượng (ví dụ, tăng hương vị, khả năng bảo quản, hàm lượng dinh dưỡng).

Theo tất cả các khía cạnh của sáng chế, cỏ dại, ví dụ, cần được kiểm soát và/hoặc ức chế sự sinh trưởng, có thể là cỏ dại một lá mầm (ví dụ, cỏ) và/hoặc hai lá mầm. Tốt hơn là cỏ, ví dụ, cần được kiểm soát và/hoặc ức chế sự sinh trưởng, bao gồm hoặc là cỏ dại một lá mầm, tốt hơn là cỏ một lá mầm.

Theo tất cả các khía cạnh của sáng chế, thông thường, cỏ một lá mầm (ưu tiên là cỏ dại), ví dụ bị kiểm soát và/hoặc bị ức chế tăng trưởng, bao gồm (ví dụ là) cỏ dại từ giống *Agrostis*, *Alopecurus*, *Apera*, *Avena*, *Brachiaria*, *Bromus*, *Cenchrus*, *Cyperus* (chi cói túi), *Digitaria*, *Echinochloa*, *Eleusine*, *Eriochloa*, *Fimbristylis* (chi cói túi), *Juncus* (chi bấc), *Leptochloa*, *Lolium*, *Monochoria*, *Ottochloa*, *Panicum*, *Pennisetum*, *Phalaris*, *Poa*, *Rottboellia*, *Sagittaria*, *Scirpus* (chi cói túi), *Setaria* và/hoặc *Sorghum*; cụ thể là: *Alopecurus myosuroides* (ALOMY, tên tiếng Anh “cỏ đen”), *Apera spica-venti*, *Avena fatua* (AVEFA, tên tiếng Anh “yến mạch dại”), *Avena ludoviciana*, *Avena sterilis*, *Avena sativa* (tên tiếng Anh “yến mạch” (mọc tự nhiên)), *Brachiaria decumbens*, *Brachiaria plantaginea*, *Bromus tectorum*, *Digitaria horizontalis*, *Digitaria insularis*, *Digitaria sanguinalis* (DIGSA), *Echinochloa crus-galli* (tên tiếng Anh “cỏ lồng vực nước thông thường”, ECHCG), *Echinochloa oryzoides*, *Echinochloa colona* hoặc *colonum*, *Eleusine indica*, *Eriochloa villosa* (tên tiếng Anh “cỏ chén có lông”), *Leptochloa chinensis*, *Leptochloa panicoides*, *Lolium perenne* (LOLPE, tên tiếng Anh “rom rạ lâu năm”), *Lolium multiflorum* (LOLMU, Tên tiếng Anh “rom rạ Ý”), *Lolium persicum* (tên tiếng Anh “cỏ lòng Ba Tư”), *Lolium rigidum*, *Panicum miliaceum* (tên tiếng Anh “kê lóp dại”), *Phalaris minor*, *Phalaris paradoxa*, *Poa annua* (POAAN, tên tiếng Anh “cỏ xanh hàng năm”), *Scirpus maritimus*, *Scirpus juncooides*, *Setaria viridis* (SETVI, tên tiếng Anh “cỏ đuôi chồn xanh lá”), *Setaria faberi* (SETFA, tên tiếng Anh “cỏ đuôi chồn khổng lồ”), *Setaria glauca*, *Setaria lutescens* (tên tiếng Anh “cỏ đuôi chồn vàng”), *Sorghum bicolor*, và/hoặc *Sorghum halepense* (tên tiếng Anh “cỏ Johnson”); và/hoặc cụ thể là: *Brachiaria platyphylla* (BRAPP), *Panicum dichotomiflorum* (PANDI), và/hoặc *Sorghum vulgare*. Theo cách khác hoặc ngoài ra, cỏ dại một lá mầm (tốt hơn là cỏ dại), ví dụ, cần được kiểm soát và/hoặc ức chế sự sinh trưởng, bao gồm cỏ bấp mọc tự nhiên (ngô mọc tự nhiên) .

Theo một phương án được ưu tiên của tất cả các khía cạnh của sáng chế, cỏ dại một lá mầm, ví dụ bị kiểm soát và/hoặc bị ức chế tăng trưởng, là cỏ dại một lá mầm; trong trường hợp chúng thường bao gồm (ví dụ là): cỏ dại từ giống *Agrostis*, *Alopecurus*, *Apera*, *Avena*, *Brachiaria*, *Bromus*, *Cenchrus*, *Digitaria*, *Echinochloa*, *Eleusine*, *Eriochloa*, *Leptochloa*, *Lolium*, *Ottochloa*, *Panicum*, *Pennisetum*, *Phalaris*,

Poa, Rottboellia, Setaria và/hoặc Sorghum; cụ thể là: cỏ dại từ giống Agrostis, Alopecurus, Apera, Avena, Brachiaria, Bromus, Digitaria, Echinochloa, Eriochloa, Leptochloa, Lolium, Panicum, Phalaris, Poa, Rottboellia, Setaria và/hoặc Sorghum. Theo cách khác hoặc ngoài ra, cỏ dại một lá mầm (tốt hơn là cỏ dại), ví dụ, cần được kiểm soát và/hoặc ức chế sự sinh trưởng, bao gồm cỏ bắp mọc tự nhiên (ngô mọc tự nhiên) .

Theo một phương án được đặc biệt ưu tiên của tất cả các khía cạnh theo sáng chế, cỏ dại một lá mầm, ví dụ bị kiểm soát và/hoặc bị ức chế tăng trưởng, là cỏ dại “mùa ẩm” (khí hậu ẩm); trong trường hợp chúng ưu tiên là bao gồm (ví dụ là): cỏ dại từ giống Brachiaria, Cenchrus, Digitaria, Echinochloa, Eleusine, Eriochloa, Leptochloa, Ottochloa, Panicum, Pennisetum, Phalaris, Rottboellia, Setaria và/hoặc Sorghum; cụ thể hơn là: cỏ dại từ giống Brachiaria, Digitaria, Echinochloa, Eriochloa, Leptochloa, Panicum, Setaria và/hoặc Sorghum. Theo cách khác hoặc ngoài ra, cỏ một lá mầm, ví dụ, cần được kiểm soát và/hoặc ức chế sự sinh trưởng, bao gồm cỏ bắp mọc tự nhiên (ngô mọc tự nhiên). Tốt hơn là, cỏ một lá mầm, ví dụ, cần được kiểm soát và/hoặc ức chế sự sinh trưởng, là cỏ “mùa ẩm” (khí hậu ẩm) bao gồm (ví dụ, là) cỏ thuộc giống Brachiaria, Cenchrus, Digitaria, Echinochloa, Eleusine, Eriochloa, Panicum, Setaria và/hoặc Sorghum; và/hoặc cỏ một lá mầm, ví dụ, cần được kiểm soát và/hoặc ức chế sự sinh trưởng, bao gồm cỏ bắp mọc tự nhiên (ngô mọc tự nhiên).

Theo phương án cụ thể của tất cả các khía cạnh theo sáng chế, cỏ dại một lá mầm, ví dụ bị kiểm soát và/hoặc bị ức chế tăng trưởng, là cỏ dại “mùa mát” (khí hậu mát); trong trường hợp chúng thường bao gồm (ví dụ là) cỏ dại từ giống Agrostis, Alopecurus, Apera, Avena, Bromus, Lolium và/hoặc Poa.

Ở cây trồng ngũ cốc không yến mạch như lúa mỳ và/hoặc lúa mạch, kiểm soát và/hoặc ức chế tăng trưởng của cỏ dại từ giống Alopecurus, Apera, Avena, đặc biệt là *Avena fatua*, Bromus, Lolium, Phalaris, và/hoặc Setaria được ưu tiên; cụ thể là Alopecurus, Avena (đặc biệt là *Avena fatua*), Lolium và/hoặc Setaria (đặc biệt là *Setaria viridis*, *Setaria lutescens*, *Setaria faberi* và/hoặc *Setaria glauca*).

Theo tất cả các khía cạnh của sáng chế, theo phương án cụ thể, cỏ dại, ví dụ bị kiểm soát và/hoặc bị ức chế tăng trưởng ví dụ bằng cách sử dụng hợp chất có công thức (I), có thể là cỏ dại một lá mầm (cụ thể là: cỏ dại Agrostis, Alopecurus, Apera, Avena, Brachiaria, Bromus, Cenchrus, Digitaria, Echinochloa, Eleusine, Eriochloa, Leptochloa, Lolium, Ottochloa, Panicum, Pennisetum, Phalaris, Poa, Rottboellia, Setaria và/hoặc Sorghum; cụ thể hơn là cỏ dại Alopecurus, Apera, Avena, Brachiaria,

Bromus, Digitaria, Echinochloa, Eriochloa, Lolium, Panicum, Phalaris, Poa, Setaria và/hoặc Sorghum),

- mà kháng một hoặc nhiều chất diệt cỏ ức chế ACCaza (ACCaza = axetyl-coenzyme A carboxylaza) được chọn từ nhóm bao gồm pinoxaden, clodinafop-propargyl, fenoxaprop-P-etyl, diclofop-metyl, fluazifop-P-butyl, haloxyfop-P-metyl, quizalofop-P-etyl, propaquizafop, xyhalofop-butyl, clethodim, setoxydim, xycloxydim, tralkoxydim và butroxydim;

- và/hoặc mà kháng glyphosat;

- và/hoặc mà kháng một hoặc nhiều chất diệt cỏ ức chế ALS (ALS = axetolactat synthaza), như một hoặc nhiều chất diệt cỏ sulfonyl urea (ví dụ iodosulfuron-metyl, mesosulfuron-metyl, tribenuron-metyl, triasulfuron, prosulfuron, sulfosulfuron, pyrazosulfuron-etyl, bensulfuron-metyl, nicosulfuron, flazasulfuron, iofensulfuron, metsulfuron-metyl, hoặc chất diệt cỏ sulfonyl urea bất kỳ khác được bộc lộ trong The Pesticide Manual, tái bản lần thứ 15 (2009) hoặc tái bản lần thứ 16 (2012), ed. C.D.S. Tomlin, British Crop Protection Council) và/hoặc một hoặc nhiều chất diệt cỏ triazolopyrimidin (ví dụ florasulam, pyroxsulam hoặc penoxsulam) và/hoặc một hoặc nhiều chất diệt cỏ pyrimidinyl-(thio hoặc oxy)-benzoat (ví dụ bispyribac-natri hoặc pyriftalid) và/hoặc một hoặc nhiều chất diệt cỏ sulfonylamino-carbonyl-triazolinon (ví dụ thiencarbazon-metyl, propoxycarbazon-natri hoặc flucarbazon-natri) và/hoặc một hoặc nhiều chất diệt cỏ imidazolinon (ví dụ imazamox).

Cỏ dại kháng (cụ thể là kháng chất ức chế ACCaza, kháng glyphosat, và/hoặc kháng chất ức chế ALS) này có thể đặc biệt bao gồm *Alopecurus myosuroides*, *Apera spica-venti*, *Avena fatua*, *Avena sterilis*, *Brachiaria decumbens*, *Brachiaria plantaginea*, *Digitaria horizontalis*, *Digitaria insularis*, *Digitaria sanguinalis*, *Echinochloa colona*, *Echinochloa crus-galli*, *Eleusine indica*, *Lolium multiflorum*, *Lolium rigidum*, *Lolium perenne*, *Phalaris minor*, *Phalaris paradoxa*, *Setaria viridis*, *Setaria faberi*, *Setaria glauca*, và/hoặc *Sorghum halepense*; hoặc có thể đặc biệt hơn bao gồm *Alopecurus myosuroides*, *Apera spica-venti*, *Avena fatua*, *Avena sterilis*, *Digitaria sanguinalis*, *Echinochloa colona*, *Echinochloa crus-galli*, *Lolium multiflorum*, *Lolium rigidum*, *Lolium perenne*, *Phalaris minor*, *Phalaris paradoxa*, *Setaria viridis*, *Setaria faberi* và/hoặc *Sorghum halepense*.

Theo một phương án cụ thể hơn của sáng chế, hợp chất có công thức (I) có thể được dùng cho cỏ một lá mầm (ví dụ, được chọn từ một trong số các danh sách cỏ dại nêu trên):

(a1) mà kháng với một hoặc nhiều chất diệt cỏ ức chế ACCaza (ví dụ, được chọn từ danh sách chất diệt cỏ ức chế ACCaza nêu trên) ít nhất một phần nhờ đột biến (ví dụ, thay thế) một hoặc nhiều axit amin trên điểm đích ACCaza ở cỏ dại (ví dụ, xem S.B. Powles và Qin Yu, “Evolution in Action: Plants Resistant to Herbicides”, *Annu. Rev. Plant Biol.*, 2010, 61, pp. 317-347, ví dụ, xem trang 325-327, cụ thể là bảng 3, ví dụ về cỏ dại kháng và/hoặc các nhóm thể axit amin này); và/hoặc

(a2) mà kháng với glyphosat ít nhất một phần nhờ đột biến (ví dụ, thay thế) một hoặc nhiều axit amin trên điểm đích EPSPS ở cỏ dại được hưởng đích bởi glyphosat (ví dụ, xem bài báo S.B. Powles và Qin Yu, pp. 327-329 nêu trên); và/hoặc

(a3) mà kháng với một hoặc nhiều chất diệt cỏ ức chế ALS (ví dụ, được chọn từ danh sách chất diệt cỏ ức chế ALS nêu trên) ít nhất một phần nhờ đột biến (ví dụ, thế) một hoặc nhiều axit amin trên điểm đích ALS ở cỏ dại (ví dụ, xem S.B. Powles và Qin Yu, “Evolution in Action: Plants Resistant to Herbicides”, *Annu. Rev. Plant Biol.*, 2010, 61, pp. 317-347, ví dụ, xem trang 322-324, cụ thể là bảng 2, ví dụ về cỏ dại kháng và/hoặc các nhóm thể axit amin này); và/hoặc

(b) mà kháng với: một hoặc nhiều chất diệt cỏ ức chế ACCaza (ví dụ, được chọn từ danh sách nêu trên), và/hoặc glyphosat, và/hoặc một hoặc nhiều chất diệt cỏ ức chế ALS (ví dụ, được chọn từ danh sách nêu trên); ít nhất một phần nhờ sự kháng chất diệt cỏ loại chuyển hóa, ví dụ, ít nhất một phần nhờ sự chuyển hóa chất diệt cỏ do sắc tố tế bào P450 gây ra (ví dụ, xem S.B. Powles và Qin Yu, “Evolution in Action: Plants Resistant to Herbicides”, *Annu. Rev. Plant Biol.*, 2010, 61, pp. 317-347, ví dụ, xem bảng 4 ở trang 328, ví dụ về cỏ dại kháng này).

Thông thường, cỏ dại hai lá mầm, ví dụ, bị kiểm soát, bao gồm (ví dụ là) *Abutilon*, *Amaranthus*, *Chenopodium*, *Chrysanthemum*, *Galium*, *Ipomoea*, *Kochia*, *Nasturtium*, *Polygonum*, *Sida*, *Sinapsis*, *Solanum*, *Stellaria*, *Viola*, *Veronica* và/hoặc *Xanthium*.

Các vùng canh tác, và/hoặc khu vực trồng (ví dụ, của cỏ dại và/hoặc của cây trồng có ích), được hiểu là bao gồm vùng đất nơi cây trồng đã sinh trưởng cũng như vùng đất dự tính canh tác các loại cây trồng đó.

Theo tất cả các khía cạnh của sáng chế, tỷ lệ sử dụng (thường lên cỏ dại và/hoặc lên cây trồng thuộc cây có ích và/hoặc lên khu vực trồng của chúng) của hợp chất có công thức (I) (mà tùy ý có thể là muối nông nghiệp của chúng) thường từ 1 đến 2000g hợp chất có công thức (I) mỗi hecta (ha) (được đo là hợp chất không muối, tức là không bao gồm khối lượng của (các) counterion của muối liên quan bất kỳ), cụ thể là

từ 5 đến 1000g/ha hoặc từ 5 đến 500g/ha hoặc từ 10 đến 500g/ha, ưu tiên là từ 10 đến 400g/ha hoặc từ 20 đến 300g/ha, hợp chất có công thức (I) (được đo là hợp chất không muối, tức là không bao gồm khối lượng của (các) counterion của muối liên quan bất kỳ). Theo phương án ưu tiên, tỷ lệ dùng nêu trên là dùng sau khi nảy mầm hợp chất có công thức (I) (mà tùy ý có thể là muối nông hóa học của chúng).

Theo tất cả các khía cạnh của sáng chế, hợp chất có công thức (I) có thể được bón (thường lên cỏ dại và/hoặc lên cây trồng thuộc cây có ích và/hoặc lên khu vực trồng của chúng) trước và/hoặc sau nảy mầm, nhưng ưu tiên là được bón sau nảy mầm. Các ứng dụng có thể có khác – ví dụ, sử dụng diệt côn trùng và/hoặc diệt ve bét

Ứng dụng và mục đích chính của các hợp chất có công thức (I) theo sáng chế là ứng dụng làm chất diệt cỏ của chúng. Tuy nhiên, ít nhất một số trong số các hợp chất có công thức (I) có thể có hoạt tính kháng một hoặc nhiều loài gây hại (cụ thể là loài gây hại cho nông nghiệp và/hoặc bảo quản thực phẩm). Ví dụ, ít nhất một số trong số các hợp chất có công thức (I) có thể có ít nhất một số hoạt tính diệt côn trùng, diệt ve bét, diệt động vật thân mềm và/hoặc diệt giun tròn.

Ít nhất một số các hợp chất có công thức (I) có thể có hoạt tính chống (và/hoặc có thể giúp kiểm soát và/hoặc diệt trừ) côn trùng gây hại, như một hoặc nhiều loại trong số: Coleoptera, Dictyoptera, Diptera, Hemiptera (bao gồm Homoptera), Hymenoptera, Isoptera, Lepidoptera, Orthoptera, Siphonaptera và/hoặc Thysanoptera.

Ít nhất một số trong số các hợp chất có công thức (I) có thể có hoạt tính kháng (và/hoặc có thể giúp kiểm soát và/hoặc diệt trừ) ve bét gây hại và/hoặc các loài gây hại thuộc loại *Acarina* khác, chẳng hạn như một hoặc nhiều loại trong số: *Acalitus* spp., *Aculus* spp., *Acaricalus* spp., *Aceria* spp., *Acarus siro*, *Amblyomma* spp., *Argas* spp., *Boophilus* spp., *Brevipalpus* spp., *Bryobia* spp., *Calipitimerus* spp., *Chorioptes* spp., *Dermanyssus gallinae*, *Dermatophagoides* spp., *Eotetranychus* spp., *Eriophyes* spp., *Hemitarsonemus* spp., *Hyalomma* spp., *Ixodes* spp., *Olygonychus* spp., *Ornithodoros* spp., *Polyphagotarsonus latus*, *Panonychus* spp., *Phyllocoptruta oleivora*, *Phytonemus* spp., *Polyphagotarsonemus* spp., *Psoroptes* spp., *Rhipicephalus* spp., *Rhizoglyphus* spp., *Sarcoptes* spp., *Steneotarsonemus* spp., *Tarsonemus* spp. và/hoặc *Tetranychus* spp.

Ít nhất một vài trong số các hợp chất có công thức (I) có thể có hoạt tính chống (và/hoặc có thể giúp kiểm soát và/hoặc diệt trừ) các loài gây hại (tức là không phải côn trùng, không phải ve bét) không xương sống khác, ví dụ, các loài gây hại giun tròn và/hoặc động vật thân mềm.

Côn trùng, ve bét, giun tròn và/hoặc động vật thân mềm dưới đây nhìn chung nói đến động vật gây hại.

Ví dụ về các loài gây hại, mà các hợp chất có công thức (I) có thể được thử và/hoặc dùng lên và/hoặc cho chúng, bao gồm một hoặc nhiều loại trong số: *Myzus* spp. như *Myzus persicae* (rệp), *Aphis* spp. như *Aphis gossypii* (rệp) hoặc *Aphis fabae* (rệp), *Lygus* spp. (bọ cánh cứng), *Dysdercus* spp. (bọ cánh cứng), *Nilaparvata lugens* (rầy nâu), *Nephotettix inciticeps* (rầy lá), *Nezara* spp. (bọ rầy), *Euschistus* spp. (bọ rầy), *Leptocoris* spp. (bọ rầy), *Frankliniella occidentalis* (bọ trĩ), *Thrips* spp. (bọ trĩ), *Leptinotarsa decemlineata* (xén tóc khoai tây Colorado), *Anthonomus grandis* (bọ rùa hai bông), *Aonidiella* spp. (côn trùng rệp vảy), *Trialeurodes* spp. (ruồi trắng), *Bemisia tabaci* (ruồi trắng), *Ostrinia nubilalis* (bọ rầy ngô châu Âu), *Spodoptera littoralis* (sâu lá cây bông), *Heliothis virescens* (sâu chồi cà chua), *Helicoverpa armigera* (sâu quả cây bông), *Helicoverpa zea* (sâu quả cây bông), *Sylepta derogata* (sâu cuốn lá cây bông), *Pieris brassicae* (bướm trắng), *Plutella maculipennis* (sâu tơ cải bắp), *Agrotis* spp. (sâu bướm), *Chilo suppressalis* (sâu đục thân lúa), *Locusta migratoria* (cào cào), *Chortiocetesterminifera* (cào cào), *Diabrotica* spp. (sâu đục rễ), *Panonychus ulmi* (rệp đỏ châu Âu), *Panonychus citri* (rệp đỏ trên cây có múi), *Tetranychus* spp. như *Tetranychus urticae* (nhện hai chấm) hoặc *Tetranychus cinnabarinus* (nhện carmin), *Phyllocoptruta oleivora* (rệp gi trên cây có múi), *Polyphagotarsonemus latus* (rệp bản rộng), *Brevipalpus* spp. (rệp dẹp), *Boophilus microplus* (bọ gia súc), *Dermacentor variabilis* (bọ chó Mỹ), *Ctenocephalides felis* (ve ở mèo), *Liriomyza* spp. (sâu ăn lá), *Musca domestica* (ruồi), *Aedes aegypti* (muỗi), *Anopheles* spp. (muỗi), *Culex* spp. (muỗi), *Lucilia* spp. (nhặng), *Blattella germanica* (gián), *Periplaneta americana* (gián), *Blattella orientalis* (gián), mỗi thuộc loài Mastotermitidae (ví dụ *Mastotermes* spp.), thuộc loài Kalotermitidae (ví dụ *Neotermes* spp.), thuộc loài Rhinotermitidae (ví dụ *Coptotermes formosanus*, *Reticulitermes flavipes*, *R. speratus*, *R. virginicus*, *R. hesperus*, hoặc *R. santonensis*) hoặc thuộc loài Termitidae (ví dụ *Globitermes sulphureus*), *Solenopsis geminata* (kiến lửa), *Monomorium pharaonis* (kiến Pharaoh), *Damalima* spp. hoặc *Linognathus* spp. (chấy rận), *Meloidogyne* spp. (giun tròn nốt sần vùng rễ), *Globodera* spp. hoặc *Heterodera* spp. (giun tròn nang), *Pratylenchus* spp. (giun tròn gây tổn thương), *Rhodopholus* spp. (giun tròn đục chuối), *Tylenchulus* spp. (giun tròn trên cây có múi), *Haemonchus contortus* (giun xoắn), *Caenorhabditis elegans* (trùn giấm), *Trichostrongylus* spp. (giun tròn đường tiêu hóa) và/hoặc *Deroceras reticulatum* (sên).

Tổ hợp và hỗn hợp

Theo khía cạnh khác, sáng chế đề xuất chế phẩm diệt cỏ, ví dụ để sử dụng trong phương pháp kiểm soát cỏ dại (ví dụ chẳng hạn như cỏ dại một lá mầm) ở cây trồng thuộc cây có ích, chứa hợp chất có công thức (I) như được xác định ở đây (ví dụ lượng có hiệu quả diệt cỏ của chúng), và chất mang, chất pha loãng và/hoặc dung môi nông nghiệp, và còn chứa một hoặc nhiều chất diệt cỏ, và/hoặc chất an toàn khác.

Theo tất cả các khía cạnh của sáng chế, hợp chất có công thức (I) tùy ý có mặt (ví dụ, nếu có thể về mặt hóa học) dưới dạng muối nông hóa học của nó.

Ví dụ về các hỗn hợp/tổ hợp này, chứa một hoặc nhiều chất diệt cỏ khác và/hoặc chất an toàn, sẽ đưa ra dưới đây sau.

Các hợp chất có công thức (I) theo sáng chế có thể được sử dụng kết hợp với một hoặc nhiều chất diệt cỏ khác, ví dụ, dưới dạng thành phần kết hợp trong hỗn hợp đối với hợp chất có công thức (I). Ưu tiên là, trong các hỗn hợp này (cụ thể là trong các hỗn hợp cụ thể được bộc lộ dưới đây), hợp chất có công thức (I) là một trong các hợp chất được liệt kê trong các bảng 1, 2, 3, 4, 5 hoặc 6, và/hoặc một trong các hợp chất ví dụ (cụ thể là một trong các hợp chất A1 đến A7, A8, hoặc P1 đến P5), như được bộc lộ ở đây ví dụ dưới đây, tùy ý có mặt (ví dụ khi có thể về mặt hóa học) là muối nông hóa học của chúng.

Cụ thể là, các hỗn hợp sau của hợp chất có công thức (I) với một hoặc nhiều chất diệt cỏ khác được bộc lộ một cách cụ thể:

hợp chất có công thức I + axetochlor, hợp chất có công thức I + acifluorfen, hợp chất có công thức I + acifluorfen-natri, hợp chất có công thức I + aclonifen, hợp chất có công thức I + acrolein, hợp chất có công thức I +alachlor, hợp chất có công thức I + alloxydim, hợp chất có công thức I + allyl rượu, hợp chất có công thức I + ametryn, hợp chất có công thức I + amicarbazon, hợp chất có công thức I + amidosulfuron, hợp chất có công thức I + aminopyralid, hợp chất có công thức I + amitrol, hợp chất có công thức I + amoni sulfamat, hợp chất có công thức I + anilofos, hợp chất có công thức I + asulam, hợp chất có công thức I + atraton, hợp chất có công thức I + atrazin, hợp chất có công thức I + azimsulfuron, hợp chất có công thức I + BCPC, hợp chất có công thức I + beflubutamid, hợp chất có công thức I + benazolin, hợp chất có công thức I + benfluralin, hợp chất có công thức I + benfuresat, hợp chất có công thức I + bensulfuron, hợp chất có công thức I + bensulfuron-metyl, hợp chất có công thức I + bensulit, hợp chất có công thức I + bentazon, hợp chất có công thức I + benzfendizon, hợp chất có công thức I + benzobixyclon, hợp chất có công thức I + benzofenap, hợp

chất có công thức I + bifenox, hợp chất có công thức I + bilanafos, hợp chất có công thức I + bispyribac, hợp chất có công thức I + natri bispyribac, hợp chất có công thức I + borax, hợp chất có công thức I + bromacil, hợp chất có công thức I + bromobutit, hợp chất có công thức I + bromoxynil, hợp chất có công thức I + bromoxynil heptanoat, hợp chất có công thức I + bromoxynil octanoat, hợp chất có công thức I + bromoxynil heptanoat + bromoxynil octanoat, hợp chất có công thức I + butachlor, hợp chất có công thức I + butafenacil, hợp chất có công thức I + butamifos, hợp chất có công thức I + butralin, hợp chất có công thức I + butroxydim, hợp chất có công thức I + butylat, hợp chất có công thức I + axit cacodylic, hợp chất có công thức I + canxi chlorat, hợp chất có công thức I + cafenstrol, hợp chất có công thức I + carbetamit, hợp chất có công thức I + carfentrazon, hợp chất có công thức I + carfentrazon-etyl, hợp chất có công thức I + CDEA, hợp chất có công thức I + CEPC, hợp chất có công thức I + chloransulam, hợp chất có công thức I + chloransulam-metyl, hợp chất có công thức I + chlorflurenol, hợp chất có công thức I + chlorflurenol-metyl, hợp chất có công thức I + chloridazon, hợp chất có công thức I + chlorimuron, hợp chất có công thức I + chlorimuron-etyl, hợp chất có công thức I + axit cloaxetic, hợp chất có công thức I + clotoluron, hợp chất có công thức I + chlorpropham, hợp chất có công thức I + chlorsulfuron, hợp chất có công thức I + chlorthal, hợp chất có công thức I + chlorthal-dimetyl, hợp chất có công thức I + cinidon-etyl, hợp chất có công thức I + cinmetylin, hợp chất có công thức I + cinosulfuron, hợp chất có công thức I + cisanilit, hợp chất có công thức I + clethodim, hợp chất có công thức I + clodinafop, hợp chất có công thức I + clodinafop-propargyl, hợp chất có công thức I + clomazon, hợp chất có công thức I + clomeprop, hợp chất có công thức I + clopyralid, hợp chất có công thức I + cloransulam, hợp chất có công thức I + cloransulam-metyl, hợp chất có công thức I + CMA, hợp chất có công thức I + 4-CPB, hợp chất có công thức I + CPMF, hợp chất có công thức I + 4-CPP, hợp chất có công thức I + CPPC, hợp chất có công thức I + cresol, hợp chất có công thức I + cumyluron, hợp chất có công thức I + xyanamit, hợp chất có công thức I + xyanazin, hợp chất có công thức I + xycloat, hợp chất có công thức I + xyclosulfamuron, hợp chất có công thức I + xycloxydim, hợp chất có công thức I + cyhalofop, hợp chất có công thức I + cyhalofop-butyl, hợp chất có công thức I + 2,4-D, hợp chất có công thức I + 2,4-D-dimethylamoni, hợp chất có công thức I + 2,4-D-2-ethylhexyl, hợp chất có công thức I + muối cholin của 2,4-D (xem các ví dụ minh họa 2 và 3 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO2010/123871A1), hợp chất có công thức I + 2,4-D + glyphosat,

hợp chất có công thức I + 2,4-D-dimetylamoni + glyphosat, hợp chất có công thức I + 2,4-D-2-ethylhexyl + glyphosat, hợp chất có công thức I + muối cholin của 2,4-D + glyphosat (xem các ví dụ minh họa 2 và 3 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO2010/123871A1), hợp chất có công thức I + 3,4-DA, hợp chất có công thức I + daimuron, hợp chất có công thức I + dalapon, hợp chất có công thức I + dazomet, hợp chất có công thức I + 2,4-DB, hợp chất có công thức I + 3,4-DB, hợp chất có công thức I + 2,4-DEB, hợp chất có công thức I + desmedipham, hợp chất có công thức I + dicamba, hợp chất có công thức I + dicamba-dimetylamoni, hợp chất có công thức I + dicamba-kali, hợp chất có công thức I + dicamba-natri, hợp chất có công thức I + dicamba-diglycolamin, hợp chất có công thức I + muối N,N-bis-[aminopropyl]metylamin của dicamba (ví dụ xem tài liệu công bố đơn số US2012/0184434A1), hợp chất có công thức I + dicamba + glyphosat, hợp chất có công thức I + dicamba-dimetylamoni + glyphosat, hợp chất có công thức I + dicamba-kali + glyphosat, hợp chất có công thức I + dicamba-natri + glyphosat, hợp chất có công thức I + dicamba-diglycolamin + glyphosat, hợp chất có công thức I + muối N,N-bis-[aminopropyl]metylamin của dicamba + glyphosat (ví dụ xem tài liệu công bố đơn số US2012/0184434A1), hợp chất có công thức I + dichlobenil, hợp chất có công thức I + ortho-diclobenzen, hợp chất có công thức I + para-diclobenzen, hợp chất có công thức I + dichlorprop, hợp chất có công thức I + dichlorprop-P, hợp chất có công thức I + diclofop, hợp chất có công thức I + diclofop-metyl, hợp chất có công thức I + diclosulam, hợp chất có công thức I + difenzoquat, hợp chất có công thức I + difenzoquat metilsulfat, hợp chất có công thức I + diflufenican, hợp chất có công thức I + diflufenzopyr, hợp chất có công thức I + dimefuron, hợp chất có công thức I + dimepiperat, hợp chất có công thức I + dimethachlor, hợp chất có công thức I + dimethametryn, hợp chất có công thức I + dimethenamid, hợp chất có công thức I + dimethenamid-P, hợp chất có công thức I + dimethipin, hợp chất có công thức I + axit dimetylsarinic, hợp chất có công thức I + dinitramin, hợp chất có công thức I + dinoterb, hợp chất có công thức I + diphenamid, hợp chất có công thức I + diquat, hợp chất có công thức I + diquat dibromua, hợp chất có công thức I + dithiopyr, hợp chất có công thức I + diuron, hợp chất có công thức I + DNOC, hợp chất có công thức I + 3,4-DP, hợp chất có công thức I + DSMA, hợp chất có công thức I + EBEP, hợp chất có công thức I + endotal, hợp chất có công thức I + EPTC, hợp chất có công thức I + esprocarb, hợp chất có công thức I + ethalfluralin, hợp chất có công thức I + ethametsulfuron, hợp chất có công thức I + ethametsulfuron-metyl, hợp chất có công

thức I + ethofumesat, hợp chất có công thức I + etoxyfen, hợp chất có công thức I + etoxysulfuron, hợp chất có công thức I + etobenzanid, hợp chất có công thức (I) + fenoxaprop, hợp chất có công thức (I) + fenoxaprop-ethyl, hợp chất có công thức I + fenoxaprop-P, hợp chất có công thức I + fenoxaprop-P-ethyl, hợp chất có công thức I + fenoxasulfon (đăng ký CAS số 639826-16-7), hợp chất có công thức I + fentrazamit, hợp chất có công thức I + ferrous sulfat, hợp chất có công thức I + flamprop-M, hợp chất có công thức I + flazasulfuron, hợp chất có công thức I + florasulam, hợp chất có công thức I + fluazifop, hợp chất có công thức I + fluazifop-butyl, hợp chất có công thức I + fluazifop-P, hợp chất có công thức I + fluazifop-P-butyl, hợp chất có công thức I + flucarbazon, hợp chất có công thức I + natri flucarbazon, hợp chất có công thức I + flucetosulfuron, hợp chất có công thức I + fluchloralin, hợp chất có công thức I + flufenaxet, hợp chất có công thức I + flufenpyr, hợp chất có công thức I + flufenpyr-ethyl, hợp chất có công thức I + flumetsulam, hợp chất có công thức I + flumiclorac, hợp chất có công thức I + flumiclorac-pentyl, hợp chất có công thức I + flumioxazin, hợp chất có công thức I + fluometuron, hợp chất có công thức I + floglycofen, hợp chất có công thức I + floglycofen-ethyl, hợp chất có công thức I + flupropanat, hợp chất có công thức I + flupyrsulfuron, hợp chất có công thức I + flupyrsulfuron-metyl-natri, hợp chất có công thức I + flurenol, hợp chất có công thức I + fluridon, hợp chất có công thức I + flurochloridon, hợp chất có công thức I + fluroxypyr, hợp chất có công thức I + fluroxypyr-meptyl, hợp chất có công thức I + fluroxypyr-butometyl, hợp chất có công thức I + flurtamon, hợp chất có công thức I + fluthiaxet, hợp chất có công thức I + fluthiaxet-metyl, hợp chất có công thức I + fomesafen, hợp chất có công thức I + foramsulfuron, hợp chất có công thức I + fosamin, hợp chất có công thức I + glufosinat, hợp chất có công thức I + glufosinat-amoni, hợp chất có công thức I + glufosinat-P, hợp chất có công thức I + glyphosat, hợp chất có công thức I + glyphosat-diamoni, hợp chất có công thức I + glyphosat-isopropylamoni, hợp chất có công thức I + glyphosat-kali, hợp chất có công thức I + halosulfuron, hợp chất có công thức I + halosulfuron-metyl, hợp chất có công thức I + haloxyfop, hợp chất có công thức I + haloxyfop-P, hợp chất có công thức (I) + haloxyfop-metyl, hợp chất có công thức (I) + haloxyfop-P-metyl, hợp chất có công thức I + HC-252, hợp chất có công thức I + hexazinon, hợp chất có công thức I + imazamethabenz, hợp chất có công thức I + imazamethabenz-metyl, hợp chất có công thức I + imazamox, hợp chất có công thức I + imazapic, hợp chất có công thức I + imazapyr, hợp chất có công thức I + imazaquin, hợp chất có công thức I +

imazethapyr, hợp chất có công thức I + imazosulfuron, hợp chất có công thức I + indanofan, hợp chất có công thức I + iodometan, hợp chất có công thức I + iodosulfuron, hợp chất có công thức I + iodosulfuron-metyl-natri, hợp chất có công thức I + ioxynil, hợp chất có công thức I + ipfencarbazon (đăng ký CAS số 212201-70-2), hợp chất có công thức I + isoproturon, hợp chất có công thức I + isouron, hợp chất có công thức I + isoxaben, hợp chất có công thức I + isoxachlortol, hợp chất có công thức I + isoxaflutol, hợp chất có công thức I + karbutilat, hợp chất có công thức I + lactofen, hợp chất có công thức I + lenacil, hợp chất có công thức I + linuron, hợp chất có công thức I + MAA, hợp chất có công thức I + MAMA, hợp chất có công thức I + MCPA, hợp chất có công thức I + MCPA-thioetyl, hợp chất có công thức I + MCPB, hợp chất có công thức I + mecoprop, hợp chất có công thức I + mecoprop-P, hợp chất có công thức I + mefenaxet, hợp chất có công thức I + mefluidit, hợp chất có công thức I + mesosulfuron, hợp chất có công thức I + mesosulfuron-metyl, hợp chất có công thức I + mesotrion, hợp chất có công thức I + metam, hợp chất có công thức I + metamifop, hợp chất có công thức I + metamitron, hợp chất có công thức I + metazachlor, hợp chất có công thức I + metazosulfuron (NC-620, đăng ký CAS số 868680-84-6), hợp chất có công thức I + methabenzthiazuron, hợp chất có công thức I + axit metylarsonic, hợp chất có công thức I + metyldymron, hợp chất có công thức I + metyl isothioxyanat, hợp chất có công thức I + metobenzuron, hợp chất có công thức I + metolachlor, hợp chất có công thức I + S-metolachlor, hợp chất có công thức I + metosulam, hợp chất có công thức I + metoxuron, hợp chất có công thức I + metribuzin, hợp chất có công thức I + metsulfuron, hợp chất có công thức I + metsulfuron-metyl, hợp chất có công thức I + MK-616, hợp chất có công thức I + molinat, hợp chất có công thức I + monolinuron, hợp chất có công thức I + MSMA, hợp chất có công thức I + naproanilit, hợp chất có công thức I + napropamit, hợp chất có công thức I + naptalam, hợp chất có công thức I + neburon, hợp chất có công thức I + nicosulfuron, hợp chất có công thức I + axit nonanoic, hợp chất có công thức I + norflurazon, hợp chất có công thức I + axit oleic (axit béo), hợp chất có công thức I + orbencarb, hợp chất có công thức I + orthosulfamuron, hợp chất có công thức I + oryzalin, hợp chất có công thức I + oxadiargyl, hợp chất có công thức I + oxadiazon, hợp chất có công thức I + oxasulfuron, hợp chất có công thức I + oxaziclomefon, hợp chất có công thức I + oxyfluorfen, hợp chất có công thức I + paraquat, hợp chất có công thức I + paraquat diclorua, hợp chất có công thức I + pebulat, hợp chất có công thức I + pendimethalin, hợp chất có công thức I + penoxsulam, hợp chất có công thức I

+ pentaclophenol, hợp chất có công thức I + pentanochlor, hợp chất có công thức I + pentoxazon, hợp chất có công thức I + pethoxamid, hợp chất có công thức I + petroleum oils, hợp chất có công thức I + phenmedipham, hợp chất có công thức I + phenmedipham-etyl, hợp chất có công thức I + picloram, hợp chất có công thức I + picolinafen, hợp chất có công thức I + pinoxaden, hợp chất có công thức I + piperophos, hợp chất có công thức I + kali arsenit, hợp chất có công thức I + kali azit, hợp chất có công thức I + pretilachlor, hợp chất có công thức I + primisulfuron, hợp chất có công thức I + primisulfuron-metyl, hợp chất có công thức I + prodiamin, hợp chất có công thức I + profluazol, hợp chất có công thức I + profoxydim, hợp chất có công thức I + prometon, hợp chất có công thức I + prometryn, hợp chất có công thức I + propachlor, hợp chất có công thức I + propanil, hợp chất có công thức I + propaquizafop, hợp chất có công thức I + propazin, hợp chất có công thức I + propham, hợp chất có công thức I + propisochlor, hợp chất có công thức I + propoxycarbazon, hợp chất có công thức I + natri propoxycarbazon, hợp chất có công thức I + propyrisulfuron (TH-547, đăng ký CAS số 570415-88-2), hợp chất có công thức I + propyzamit, hợp chất có công thức I + prosulfocarb, hợp chất có công thức I + prosulfuron, hợp chất có công thức I + pyraclonil, hợp chất có công thức I + pyraflufen, hợp chất có công thức I + pyraflufen-etyl, hợp chất có công thức I + pyrazolynat, hợp chất có công thức I + pyrazosulfuron, hợp chất có công thức I + pyrazosulfuron-etyl, hợp chất có công thức I + pyrazoxyfen, hợp chất có công thức I + pyribenzoxim, hợp chất có công thức I + pyributicarb, hợp chất có công thức I + pyridafol, hợp chất có công thức I + pyridat, hợp chất có công thức I + pyriftalid, hợp chất có công thức I + pyriminobac, hợp chất có công thức I + pyriminobac-metyl, hợp chất có công thức I + pyrimisulfan, hợp chất có công thức I + pyriothiobac, hợp chất có công thức I + natri pyriothiobac, hợp chất có công thức I + quinclorac, hợp chất có công thức I + quinmerac, hợp chất có công thức I + quinoclamín, hợp chất có công thức I + quizalofop, hợp chất có công thức I + quizalofop-etyl, hợp chất có công thức I + quizalofop-P, hợp chất có công thức I + quizalofop-P-etyl, hợp chất có công thức I + quizalofop-P-tefuryl, hợp chất có công thức I + rimsulfuron, hợp chất có công thức I + setoxydim, hợp chất có công thức I + siduron, hợp chất có công thức I + simazin, hợp chất có công thức I + simetryn, hợp chất có công thức I + SMA, hợp chất có công thức I + natri arsenit, hợp chất có công thức I + natri azit, hợp chất có công thức I + natri chlorat, hợp chất có công thức I + sulcotrion, hợp chất có công thức I + sulfentrazon, hợp chất có công thức I + sulfometuron, hợp chất có công thức I + sulfometuron-

metyl, hợp chất có công thức I + sulfosat, hợp chất có công thức I + sulfosulfuron, hợp chất có công thức I + axit sulfuric, hợp chất có công thức I + tar oils, hợp chất có công thức I + 2,3,6-TBA, hợp chất có công thức I + TCA, hợp chất có công thức I + natri TCA, hợp chất có công thức I + tebuthiuron, hợp chất có công thức I + tepraloxym, hợp chất có công thức I + terbacil, hợp chất có công thức I + terbutometon, hợp chất có công thức I + terbuthylazin, hợp chất có công thức I + terbutryn, hợp chất có công thức I + thenylchlor, hợp chất có công thức I + thiazopyr, hợp chất có công thức I + thifensulfuron, hợp chất có công thức I + thifensulfuron-metyl, hợp chất có công thức I + thiobencarb, hợp chất có công thức I + tiocarbazil, hợp chất có công thức I + topamezon, hợp chất có công thức I + tralkoxydim, hợp chất có công thức I + tri-allat, hợp chất có công thức I + triasulfuron, hợp chất có công thức I + triaziflam, hợp chất có công thức I + tribenuron, hợp chất có công thức I + tribenuron-metyl, hợp chất có công thức I + tricamba, hợp chất có công thức I + triclopyr, hợp chất có công thức I + trietazin, hợp chất có công thức I + trifloxysulfuron, hợp chất có công thức I + natri trifloxysulfuron, hợp chất có công thức I + trifluralin, hợp chất có công thức I + triflusulfuron, hợp chất có công thức I + triflusulfuron-metyl, hợp chất có công thức I + trihydroxytriazin, hợp chất có công thức I + tritosulfuron, hợp chất có công thức I + etyl este của axit [3-[2-clo-4-flo-5-(1-metyl-6-triflometyl-2,4-dioxo-1,2,3,4-tetrahydropyrimidin-3-yl)phenoxy]-2-pyridyloxy]axetic (đăng ký CAS số 353292-31-6), hợp chất có công thức I + axit 4-[(4,5-dihydro-3-metoxi-4-metyl-5-oxo)-1H-1,2,4-triazol-1-ylcarbonylsulfamoyl]-5-metylthiophen-3-carboxylic (BAY636), hợp chất có công thức I + BAY747 (đăng ký CAS số 335104-84-2), hợp chất có công thức I + topamezon (đăng ký CAS số 210631-68-8), hợp chất có công thức I + 4-hydroxy-3-[[2-[(2-metoxietoxy)metyl]-6-(triflometyl)-3-pyridinyl]carbonyl]-bixyclo[3.2.1]oct-3-en-2-on (mà là bixyclopyron, đăng ký CAS số 352010-68-5), hợp chất có công thức I + 4-hydroxy-3-[[2-(3-metoxipropyl)-6-(diflometyl)-3-pyridinyl]carbonyl]-bixyclo[3.2.1]oct-3-en-2-on, hợp chất có công thức (I) + 4-(4'-clo-4-xyclopropyl-2'-flobiphenyl-3-yl)-2,2,6,6-tetrametyl-2H-pyran-3,5(4H,6H)-dion (mà là hợp chất của ví dụ P8 được bộc lộ ở các trang 31-32 và 35-36 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2010/136431 A9 (Syngenta Limited), và mà còn là hợp chất A-13 được bộc lộ ở các trang 4, 5, 7 và 11 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2011/073616 A2 (Syngenta Limited), hợp chất có công thức (I) + 4-(2',4'-diclo-4-xyclopropylbiphenyl-3-yl)-2,2,6,6-tetrametyl-2H-pyran-3,5(4H,6H)-dion (mà là hợp chất của ví dụ P9 được bộc lộ ở các trang 36-37 và 40-41 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2010/136431 A9

(Syngenta Limited), và mà còn là hợp chất A-12 được bộc lộ ở trang 10 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2011/073616 A2 (Syngenta Limited), hợp chất có công thức (I) + 4-(4'-clo-4-etyl-2'-flobiphenyl-3-yl)-2,2,6,6-tetrametyl-2H-pyran-3,5(4H,6H)-dion (mà là hợp chất A-66 được bộc lộ ở trang 95 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2008/071405 A1 (Syngenta Participations AG và Syngenta Limited), và mà còn là hợp chất A-4 được bộc lộ ở trang 7 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2011/073615 A2 (Syngenta Limited), hợp chất có công thức (I) + 4-(2',4'-diclo-4-etylbiiphenyl-3-yl)-2,2,6,6-tetrametyl-2H-pyran-3,5(4H,6H)-dion (mà là hợp chất A-45 được bộc lộ ở trang 93 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2008/071405 A1 (Syngenta Participations AG và Syngenta Limited), và mà còn là hợp chất của ví dụ P10 được bộc lộ ở các trang 41 và 45 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2010/136431 A9 (Syngenta Limited), và mà còn là hợp chất A-7 được bộc lộ ở trang 7 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2011/073615 A2 (Syngenta Limited), hợp chất có công thức (I) + 4-(2',4'-diclo-4-etylbiiphenyl-3-yl)-5-(metoxycarbonyloxy)-2,2,6,6-tetrametyl-2H-pyran-3(6H)-on (mà là hợp chất D-26 được bộc lộ ở trang 231 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2008/071405 A1 (Syngenta Participations AG và Syngenta Limited), và mà còn là hợp chất A-9 được bộc lộ ở trang 8 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2011/073615 A2 (Syngenta Limited), hợp chất có công thức (I) + một trong các hợp chất diệt cỏ cụ thể được bộc lộ trong tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2010/059676 (Dow, ví dụ như được xác định ở một trong các ví dụ ở đây và/hoặc ví dụ có thể được cộng với cloquintoxet-mexyl là chất an toàn) hợp chất có công thức (I) + một trong các hợp chất diệt cỏ cụ thể được bộc lộ trong tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2010/059680 (Dow, ví dụ như được xác định ở một trong các ví dụ ở đây và/hoặc ví dụ có thể được cộng với cloquintoxet-mexyl hoặc chất an toàn khác) và hợp chất có công thức (I) + một trong các hợp chất diệt cỏ cụ thể được bộc lộ trong tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2010/059671 (Dow, ví dụ như được xác định ở một trong các ví dụ ở đây và/hoặc ví dụ có thể được cộng với chất an toàn) hợp chất có công thức I + halauxifen (mà là axit 4-amino-3-clo-6-(4-clo-2-flo-3-metoxyphenyl)pyridin-2-carboxylic, đăng ký CAS số 943832-60-8), hợp chất có công thức I + halauxifen-metyl (mà là metyl 4-amino-3-clo-6-(4-clo-2-flo-3-metoxyphenyl)pyridin-2-carboxylat, đăng ký CAS số 943831-98-9), hợp chất có công thức I + aminoxyclopyrachlor (mà là axit 6-amino-5-clo-2-xyclopropylpyrimidin-4-carboxylic, đăng ký CAS số 858956-08-8), hợp chất có công thức I + aminoxyclopyrachlor-metyl (mà là metyl 6-amino-5-clo-2-xyclopropylpyrimidin-4-

carboxylat, đăng ký CAS số 858954-83-3), hợp chất có công thức I + aminoxyclopyrachlor-kali (mà là kali 6-amino-5-clo-2-xyclopropylpyrimidin-4-carboxylat, đăng ký CAS số 858956-35-1), hợp chất có công thức I + saflufenacil (mà là N'-{2-clo-4-flo-5-[1,2,3,6-tetrahydro-3-metyl-2,6-dioxo-4-(triflometyl)pyrimidin-1-yl]benzoyl}-N-isopropyl-N-metylsulfamit, đăng ký CAS số 372137-35-4), hợp chất có công thức I + iofensulfuron (mà là 1-(2-iodophenylsulfonyl)-3-(4-metoxi-6-metyl-1,3,5-triazin-2-yl)ure, đăng ký CAS số 1144097-22-2), hợp chất có công thức I + natri iofensulfuron (mà là natri N-(2-iodophenylsulfonyl)-N'-(4-metoxi-6-metyl-1,3,5-triazin-2-yl)carbamidat, đăng ký CAS số 1144097-30-2), hợp chất có công thức I + clacyfos (mà là dimetyl [(1RS)-1-(2,4-diclophenoxyaxetoxi)etyl]phosphonat, còn gọi là lvxiancaolin hoặc lüxiancaolin, đăng ký CAS số 215655-76-8), hợp chất có công thức I + xyclopyrimorat (mà là 6-clo-3-(2-xyclopropyl-6-metylphenoxy)pyridazin-4-yl morpholin-4-carboxylat, đăng ký CAS số 499231-24-2), hoặc hợp chất có công thức I + triafamon (mà là N-[2-[(4,6-dimetoxi-1,3,5-triazin-2-yl)carbonyl]-6-flophenyl]-N-metyl-1,1-diflometansulfonamit, đăng ký CAS số 874195-61-6).

Thành phần kết hợp trong hỗn hợp đối với hợp chất có công thức (I) tùy ý ở dạng este (cụ thể là este nông hóa học) hoặc muối (cụ thể là muối nông hóa học) của chúng (ví dụ, nếu có thể về mặt hóa học). Các chất kết hợp trong hỗn hợp được đề cập ở trên cho hợp chất có công thức (I), thường được đề cập ví dụ trong The Pesticide Manual, tái bản lần thứ 15 (2009) hoặc tái bản lần thứ 16 (2012), ed. C.D.S. Tomlin, British Crop Production Council.

Trong bản mô tả này, “đăng ký CAS số” hoặc “CAS RN” nghĩa là số đăng ký dịch vụ đăng ký hóa chất của hợp chất được đề cập.

Để dùng trong ngũ cốc, các hỗn hợp sau được ưu tiên: hợp chất có công thức I + aclonifen, hợp chất có công thức I + amidosulfuron, hợp chất có công thức I + aminopyralid, hợp chất có công thức I + beflubutamid, hợp chất có công thức I + benfluralin, hợp chất có công thức I + bifenox, hợp chất có công thức I + bromoxynil, hợp chất có công thức I + bromoxynil heptanoat, hợp chất có công thức I + bromoxynil octanoat, hợp chất có công thức I + bromoxynil heptanoat + bromoxynil octanoat, hợp chất có công thức I + butafenaxil, hợp chất có công thức I + carbetamit, hợp chất có công thức I + carfentrazon, hợp chất có công thức I + carfentrazon-etyl, hợp chất có công thức I + clotoluron, hợp chất có công thức I + chlorpropham, hợp chất có công thức I + chlorsulfuron, hợp chất có công thức I + cinidon-etyl, hợp chất có công thức I + clodinafop, hợp chất có công thức I + clodinafop-propargyl, hợp chất

có công thức I + clopyralid, hợp chất có công thức I + 2,4-D, hợp chất có công thức I + 2,4-D-dimethylamoni, hợp chất có công thức I + 2,4-D-2-ethylhexyl, hợp chất có công thức I + muối cholin của 2,4-D (xem các ví dụ minh họa 2 và 3 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO2010/123871A1), hợp chất có công thức I + dicamba, hợp chất có công thức I + dicamba-dimethylamoni, hợp chất có công thức I + dicamba-kali, hợp chất có công thức I + natri dicamba, hợp chất có công thức I + dicamba-diglycolamin, hợp chất có công thức I + muối N,N-bis-[aminopropyl]methylamin của dicamba (ví dụ xem tài liệu công bố đơn số US2012/0184434A1), hợp chất có công thức I + dichlobenil, hợp chất có công thức I + dichlorprop, hợp chất có công thức I + diclofop, hợp chất có công thức I + diclofop-metyl, hợp chất có công thức I + difenzoquat, hợp chất có công thức I + difenzoquat metilsulfat, hợp chất có công thức I + diflufenican, hợp chất có công thức I + diquat, hợp chất có công thức I + diquat dibromua, hợp chất có công thức (I) + fenoxaprop, hợp chất có công thức (I) + fenoxaprop-etyl, hợp chất có công thức I + fenoxaprop-P, hợp chất có công thức I + fenoxaprop-P-etyl, hợp chất có công thức I + flamprop-M, hợp chất có công thức I + florasulam, hợp chất có công thức I + fluazifop-P-butyl, hợp chất có công thức I + flucarbazon, hợp chất có công thức I + natri flucarbazon, hợp chất có công thức I + flufenaxet, hợp chất có công thức I + flupyr-sulfuron, hợp chất có công thức I + natri flupyr-sulfuron-metyl, hợp chất có công thức I + flurochloridon, hợp chất có công thức I + fluroxypyr, hợp chất có công thức I + fluroxypyr-meptyl, hợp chất có công thức I + fluroxypyr-butometyl, hợp chất có công thức I + flurtamon, hợp chất có công thức I + imazamethabenz-metyl, hợp chất có công thức I + imazamox, hợp chất có công thức I + iodosulfuron, hợp chất có công thức I + natri iodosulfuron-metyl, hợp chất có công thức I + ioxynil, hợp chất có công thức I + isoproturon, hợp chất có công thức I + linuron, hợp chất có công thức I + MCPA, hợp chất có công thức I + mecoprop, hợp chất có công thức I + mecoprop-P, hợp chất có công thức I + mesosulfuron, hợp chất có công thức I + mesosulfuron-metyl, hợp chất có công thức I + mesotrion, hợp chất có công thức I + metribuzin, hợp chất có công thức I + metsulfuron, hợp chất có công thức I + metsulfuron-metyl, hợp chất có công thức I + pendimetalin, hợp chất có công thức I + picolinafen, hợp chất có công thức I + pinoxaden, hợp chất có công thức I + prodiamin, hợp chất có công thức I + propanil, hợp chất có công thức I + propoxycarbazon, hợp chất có công thức I + natri propoxycarbazon, hợp chất có công thức I + prosulfocarb, hợp chất có công thức I + pyrasulfotol, hợp chất có công thức I + pyridat, hợp chất có công thức I + pyroxasulfon (KIH-485), hợp chất có công thức I + pyroxsulam, hợp chất có công thức

I + sulfosulfuron, hợp chất có công thức I + tembotrion, hợp chất có công thức I + terbutryn, hợp chất có công thức I + thifensulfuron, hợp chất có công thức I + thiencarbazon, hợp chất có công thức I + thifensulfuron-metyl, hợp chất có công thức I + topramezon, hợp chất có công thức I + tralkoxydim, hợp chất có công thức I + triallat, hợp chất có công thức I + triasulfuron, hợp chất có công thức I + tribenuron, hợp chất có công thức I + tribenuron-metyl, hợp chất có công thức I + trifluralin, hợp chất có công thức I + trinexapac-etyl và hợp chất có công thức I + tritosulfuron, hợp chất có công thức I + 4-hydroxy-3-[[2-[(2-metoxymethoxy)methyl]-6-(trifluoromethyl)-3-pyridinyl]carbonyl]-bicyclo[3.2.1]oct-3-en-2-on (mà là bixyclopyron, đăng ký CAS số 352010-68-5), hợp chất có công thức (I) + một trong các hợp chất diệt cỏ cụ thể được bộc lộ trong tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2010/059676 (Dow, ví dụ như được xác định ở một trong các ví dụ ở đây và/hoặc ví dụ có thể được cộng với cloquintoxet-mexyl là chất an toàn) hợp chất có công thức (I) + một trong các hợp chất diệt cỏ cụ thể được bộc lộ trong tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2010/059680 (Dow, ví dụ như được xác định ở một trong các ví dụ ở đây và/hoặc ví dụ có thể được cộng với cloquintoxet-mexyl hoặc chất an toàn khác) hợp chất có công thức I + halauxifen (mà là axit 4-amino-3-clo-6-(4-clo-2-flo-3-metoxymethyl)pyridin-2-carboxylic, đăng ký CAS số 943832-60-8), hợp chất có công thức I + halauxifen-metyl (mà là metyl 4-amino-3-clo-6-(4-clo-2-flo-3-metoxymethyl)pyridin-2-carboxylat, đăng ký CAS số 943831-98-9), hợp chất có công thức I + iofensulfuron (mà là 1-(2-iodophenylsulfonyl)-3-(4-methoxy-6-methyl-1,3,5-triazin-2-yl)ure, đăng ký CAS số 1144097-22-2), hoặc hợp chất có công thức I + natri iofensulfuron (mà là natri N-(2-iodophenylsulfonyl)-N'-(4-methoxy-6-methyl-1,3,5-triazin-2-yl)carbamimidat, đăng ký CAS số 1144097-30-2);

trong đó thành phần kết hợp trong hỗn hợp đối với hợp chất có công thức (I) có thể tùy ý ở dạng este (cụ thể là este nông hóa học) hoặc muối (cụ thể là muối nông hóa học) của chúng (ví dụ, nếu có thể về mặt hóa học).

Để sử dụng ở ngũ cốc, ưu tiên hơn là hỗn hợp chứa: hợp chất có công thức (I) + amidosulfuron, hợp chất có công thức (I) + aminopyralid, hợp chất có công thức (I) + beflubutamid, hợp chất có công thức (I) + bromoxynil, hợp chất có công thức (I) + bromoxynil heptanoat, hợp chất có công thức (I) + bromoxynil octanoat, hợp chất có công thức (I) + bromoxynil heptanoat + bromoxynil octanoat, hợp chất có công thức (I) + carfentrazone, hợp chất có công thức (I) + carfentrazone-etyl, hợp chất có công thức (I) + clotoluron, hợp chất có công thức (I) + chlorsulfuron, hợp chất có công thức (I) +

clodinafop, hợp chất có công thức (I) + clodinafop-propargyl, hợp chất có công thức (I) + clopyralid, hợp chất có công thức (I) + 2,4-D, hợp chất có công thức (I) + 2,4-D-dimethylamoni, hợp chất có công thức (I) + 2,4-D-2-ethylhexyl, hợp chất có công thức (I) + muối cholin của 2,4-D (xem các ví dụ minh họa 2 và 3 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO2010/123871A1), hợp chất có công thức (I) + dicamba, hợp chất có công thức (I) + dicamba-dimethylamoni, hợp chất có công thức (I) + dicamba-kali, hợp chất có công thức (I) + dicamba-natri, hợp chất có công thức (I) + dicamba-diglycolamin, hợp chất có công thức (I) + muối N,N-bis-[aminopropyl]metylamin của dicamba (ví dụ xem tài liệu công bố đơn số US2012/0184434A1), hợp chất có công thức (I) + difenzoquat, hợp chất có công thức (I) + difenzoquat metilsulfat, hợp chất có công thức (I) + diflufenican, hợp chất có công thức (I) + fenoxaprop-P, hợp chất có công thức (I) + fenoxaprop-P-etyl, hợp chất có công thức (I) + florasulam, hợp chất có công thức (I) + flucarbazon, hợp chất có công thức (I) + natri flucarbazon, hợp chất có công thức (I) + flufenaxet, hợp chất có công thức (I) + flupyrsulfuron, hợp chất có công thức (I) + natri flupyrsulfuron-metyl, hợp chất có công thức (I) + fluroxypyr, hợp chất có công thức I + fluroxypyr-meptyl, hợp chất có công thức I + fluroxypyr-butometyl, hợp chất có công thức (I) + flurtamon, hợp chất có công thức (I) + iodosulfuron, hợp chất có công thức (I) + natri iodosulfuron-metyl, hợp chất có công thức (I) + MCPA, hợp chất có công thức (I) + mesosulfuron, hợp chất có công thức (I) + mesosulfuron-metyl, hợp chất có công thức (I) + metsulfuron, hợp chất có công thức (I) + metsulfuron-metyl, hợp chất có công thức (I) + pendimetalin, hợp chất có công thức (I) + picolinafen, hợp chất có công thức (I) + pinoxaden, hợp chất có công thức (I) + prosulfocarb, hợp chất có công thức (I) + pyrasulfotol, hợp chất có công thức (I) + pyroxasulfon (KIH-485), hợp chất có công thức (I) + pyroxsulam, hợp chất có công thức (I) + sulfosulfuron, hợp chất có công thức (I) + thifensulfuron, hợp chất có công thức (I) + thifensulfuron-metyl, hợp chất có công thức I + topramezon, hợp chất có công thức (I) + tralkoxydim, hợp chất có công thức (I) + triasulfuron, hợp chất có công thức (I) + tribenuron, hợp chất có công thức (I) + tribenuron-metyl, hợp chất có công thức (I) + trifluralin, hợp chất có công thức (I) + trinexapac-etyl, hợp chất có công thức (I) + tritosulfuron, hợp chất có công thức I + 4-hydroxy-3-[[2-[(2-metoxietoxy)metyl]-6-(triflometyl)-3-pyridinyl]carbonyl]-bixyclo[3.2.1]oct-3-en-2-on (mà là bixyclopyron, đăng ký CAS số 352010-68-5), hợp chất có công thức (I) + một trong các hợp chất diệt cỏ cụ thể được bộc lộ trong tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2010/059676 (Dow, ví dụ như được xác định ở một trong các ví dụ ở đây và/hoặc ví

dụ có thể được cộng với cloquintoxet-mexyl là chất an toàn) hợp chất có công thức (I) + một trong các hợp chất diệt cỏ cụ thể được bộc lộ trong tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2010/059680 (Dow, ví dụ như được xác định ở một trong các ví dụ ở đây và/hoặc ví dụ có thể được cộng với cloquintoxet-mexyl hoặc chất an toàn khác) hợp chất có công thức I + halauxifen (mà là axit 4-amino-3-clo-6-(4-clo-2-flo-3-metoxypheyl)pyridin-2-carboxylic, đăng ký CAS số 943832-60-8), hợp chất có công thức I + halauxifen-metyl (mà là metyl 4-amino-3-clo-6-(4-clo-2-flo-3-metoxypheyl)pyridin-2-carboxylat, đăng ký CAS số 943831-98-9), hợp chất có công thức I + iofensulfuron (mà là 1-(2-iodophenylsulfonyl)-3-(4-metoxi-6-metyl-1,3,5-triazin-2-yl)ure, đăng ký CAS số 1144097-22-2), hoặc hợp chất có công thức I + natri iofensulfuron (mà là natri N-(2-iodophenylsulfonyl)-N'-(4-metoxi-6-metyl-1,3,5-triazin-2-yl)carbamimidat, đăng ký CAS số 1144097-30-2);

trong đó thành phần kết hợp trong hỗn hợp đối với hợp chất có công thức (I) có thể tùy ý ở dạng este (cụ thể là este nông hóa học) hoặc muối (cụ thể là muối nông hóa học) của chúng (ví dụ, nếu có thể về mặt hóa học).

Để dùng ở lúa, các hỗn hợp sau được ưu tiên: hợp chất có công thức (I) + azimsulfuron, hợp chất có công thức (I) + bensulfuron, hợp chất có công thức (I) + bensulfuron-metyl, hợp chất có công thức (I) + benzobixyclon, hợp chất có công thức (I) + benzofenap, hợp chất có công thức (I) + bispyribac, hợp chất có công thức (I) + natri bispyribac, hợp chất có công thức (I) + butachlor, hợp chất có công thức (I) + cafenstrol, hợp chất có công thức (I) + cinosulfuron, hợp chất có công thức (I) + clomazon, hợp chất có công thức (I) + clomeprop, hợp chất có công thức (I) + xyclosulfamuron, hợp chất có công thức (I) + cyhalofop, hợp chất có công thức (I) + cyhalofop-butyl, hợp chất có công thức (I) + 2,4-D, hợp chất có công thức (I) + 2,4-D-dimethylamoni, hợp chất có công thức (I) + 2,4-D-2-etylhexyl, hợp chất có công thức (I) + muối cholin của 2,4-D (xem các ví dụ minh họa 2 và 3 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO2010/123871A1), hợp chất có công thức (I) + daimuron, hợp chất có công thức (I) + dicamba, hợp chất có công thức (I) + dicamba-dimethylamoni, hợp chất có công thức (I) + dicamba-kali, hợp chất có công thức (I) + dicamba-natri, hợp chất có công thức (I) + dicamba-diglycolamin, hợp chất có công thức (I) + muối N,N-bis-[aminopropyl]metylamin của dicamba (ví dụ xem tài liệu công bố đơn số US2012/0184434A1), hợp chất có công thức (I) + diquat, hợp chất có công thức (I) + diquat dibromua, hợp chất có công thức (I) + esprocarb, hợp chất có công thức (I) + etoxysulfuron, hợp chất có công thức (I) + fenoxaprop, hợp chất có công thức (I) +

fenoxaprop-ethyl, hợp chất có công thức (I) + fenoxaprop-P, hợp chất có công thức (I) + fenoxaprop-P-ethyl, hợp chất có công thức I + fenoxasulfon (đăng ký CAS số 639826-16-7), hợp chất có công thức (I) + fentrazamit, hợp chất có công thức (I) + florasulam, hợp chất có công thức (I) + glufosinate-amoni, hợp chất có công thức (I) + glyphosat, hợp chất có công thức (I) + glyphosat-diamoni, hợp chất có công thức (I) + glyphosat-isopropylamoni, hợp chất có công thức (I) + glyphosat-kali, hợp chất có công thức (I) + halosulfuron, hợp chất có công thức (I) + halosulfuron-metyl, hợp chất có công thức (I) + imazosulfuron, hợp chất có công thức I + ipfencarbazon (đăng ký CAS số 212201-70-2), hợp chất có công thức (I) + MCPA, hợp chất có công thức (I) + mefenaxet, hợp chất có công thức (I) + mesotrion, hợp chất có công thức (I) + metamifop, hợp chất có công thức I + metazosulfuron (NC-620, đăng ký CAS số 868680-84-6), hợp chất có công thức (I) + metsulfuron, hợp chất có công thức (I) + metsulfuron-metyl, hợp chất có công thức (I) + n-metyl glyphosat, hợp chất có công thức (I) + orthosulfamuron, hợp chất có công thức (I) + oryzalin, hợp chất có công thức (I) + oxadiargyl, hợp chất có công thức (I) + oxadiazon, hợp chất có công thức (I) + paraquat diclorua, hợp chất có công thức (I) + pendimethalin, hợp chất có công thức (I) + penoxsulam, hợp chất có công thức (I) + pretilachlor, hợp chất có công thức (I) + profoxydim, hợp chất có công thức (I) + propanil, hợp chất có công thức I + propyrisulfuron (TH-547, đăng ký CAS số 570415-88-2), hợp chất có công thức (I) + pyrazolynate, hợp chất có công thức (I) + pyrazosulfuron, hợp chất có công thức (I) + pyrazosulfuron-ethyl, hợp chất có công thức (I) + pyrazoxyfen, hợp chất có công thức (I) + pyribenzoxim, hợp chất có công thức (I) + pyriftalid, hợp chất có công thức (I) + pyriminobac, hợp chất có công thức (I) + pyriminobac-metyl, hợp chất có công thức (I) + pyrimisulfan, hợp chất có công thức (I) + quinclorac, hợp chất có công thức (I) + tefuryltrion, hợp chất có công thức (I) + triasulfuron và hợp chất có công thức (I) + trinexapac-ethyl, hợp chất có công thức (I) + 4-(4'-clo-4-xyclopropyl-2'-flobiphenyl-3-yl)-2,2,6,6-tetrametyl-2H-pyran-3,5(4H,6H)-dion (mà là hợp chất của ví dụ P8 được bộc lộ ở các trang 31-32 và 35-36 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2010/136431 A9 (Syngenta Limited), và mà còn là hợp chất A-13 được bộc lộ ở các trang 4, 5, 7 và 11 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2011/073616 A2 (Syngenta Limited), hợp chất có công thức (I) + 4-(2',4'-diclo-4-xyclopropylbiphenyl-3-yl)-2,2,6,6-tetrametyl-2H-pyran-3,5(4H,6H)-dion (mà là hợp chất của ví dụ P9 được bộc lộ ở các trang 36-37 và 40-41 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2010/136431 A9 (Syngenta Limited), và mà còn là hợp chất A-12 được bộc lộ ở trang 10 của tài liệu

công bố đơn quốc tế số WO 2011/073616 A2 (Syngenta Limited), hợp chất có công thức (I) + 4-(4'-clo-4-etyl-2'-flobiphenyl-3-yl)-2,2,6,6-tetrametyl-2H-pyran-3,5(4H,6H)-dion (mà là hợp chất A-66 được bộc lộ ở trang 95 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2008/071405 A1 (Syngenta Participations AG và Syngenta Limited), và mà còn là hợp chất A-4 được bộc lộ ở trang 7 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2011/073615 A2 (Syngenta Limited), hợp chất có công thức (I) + 4-(2',4'-diclo-4-etylbiphenyl-3-yl)-2,2,6,6-tetrametyl-2H-pyran-3,5(4H,6H)-dion (mà là hợp chất A-45 được bộc lộ ở trang 93 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2008/071405 A1 (Syngenta Participations AG và Syngenta Limited), và mà còn là hợp chất của ví dụ P10 được bộc lộ ở các trang 41 và 45 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2010/136431 A9 (Syngenta Limited), và mà còn là hợp chất A-7 được bộc lộ ở trang 7 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2011/073615 A2 (Syngenta Limited), hợp chất có công thức (I) + 4-(2',4'-diclo-4-etylbiphenyl-3-yl)-5-(metoxycarbonyloxy)-2,2,6,6-tetrametyl-2H-pyran-3(6H)-on (mà là hợp chất D-26 được bộc lộ ở trang 231 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2008/071405 A1 (Syngenta Participations AG và Syngenta Limited), và mà còn là hợp chất A-9 được bộc lộ ở trang 8 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2011/073615 A2 (Syngenta Limited), hợp chất có công thức (I) + một trong các hợp chất diệt cỏ cụ thể được bộc lộ trong tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2010/059671 (Dow, ví dụ như được xác định ở một trong các ví dụ ở đây và/hoặc ví dụ có thể được cộng với chất an toàn) hợp chất có công thức I + halauxifen (mà là axit 4-amino-3-clo-6-(4-clo-2-flo-3-metoxyphenyl)pyridin-2-carboxylic, đăng ký CAS số 943832-60-8), hợp chất có công thức I + halauxifen-metyl (mà là metyl 4-amino-3-clo-6-(4-clo-2-flo-3-metoxyphenyl)pyridin-2-carboxylat, đăng ký CAS số 943831-98-9), hợp chất có công thức I + iofensulfuron (mà là 1-(2-iodophenylsulfonyl)-3-(4-metoxy-6-metyl-1,3,5-triazin-2-yl)ure, đăng ký CAS số 1144097-22-2), hợp chất có công thức I + natri iofensulfuron (mà là natri N-(2-iodophenylsulfonyl)-N'-(4-metoxy-6-metyl-1,3,5-triazin-2-yl)carbamidat, đăng ký CAS số 1144097-30-2), hoặc hợp chất có công thức I + triafamon (mà là N-[2-[(4,6-dimethoxy-1,3,5-triazin-2-yl)carbonyl]-6-flophenyl]-N-metyl-1,1-diflometansulfonamit, đăng ký CAS số 874195-61-6);

trong đó thành phần kết hợp trong hỗn hợp đối với hợp chất có công thức (I) có thể tùy ý ở dạng este (cụ thể là este nông hóa học) hoặc muối (cụ thể là muối nông hóa học) của chúng (ví dụ, nếu có thể về mặt hóa học).

Để sử dụng trên lúa, được ưu tiên hơn là hỗn hợp chứa: hợp chất có công thức (I) + azimsulfuron, hợp chất có công thức (I) + bensulfuron, hợp chất có công thức (I) + bensulfuron-metyl, hợp chất có công thức (I) + benzobixyclon, hợp chất có công thức (I) + benzenofenap, hợp chất có công thức (I) + bispyribac, hợp chất có công thức (I) + natri bispyribac, hợp chất có công thức (I) + clomazon, hợp chất có công thức (I) + clomeprop, hợp chất có công thức (I) + cyhalofop, hợp chất có công thức (I) + cyhalofop-butyl, hợp chất có công thức (I) + 2,4-D, hợp chất có công thức (I) + 2,4-D-dimethylamoni, hợp chất có công thức (I) + 2,4-D-2-ethylhexyl, hợp chất có công thức (I) + muối cholin của 2,4-D (xem các ví dụ minh họa 2 và 3 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO2010/123871A1), hợp chất có công thức (I) + daimuron, hợp chất có công thức (I) + dicamba, hợp chất có công thức (I) + dicamba-dimethylamoni, hợp chất có công thức (I) + dicamba-kali, hợp chất có công thức (I) + natri dicamba, hợp chất có công thức (I) + dicamba-diglycolamin, hợp chất có công thức (I) + muối N,N-bis-[aminopropyl]metylamin của dicamba (ví dụ xem tài liệu công bố đơn số US2012/0184434A1), hợp chất có công thức (I) + esprocarb, hợp chất có công thức (I) + etoxysulfuron, hợp chất có công thức (I) + fenoxaprop-P, hợp chất có công thức (I) + fenoxaprop-P-etyl, hợp chất có công thức I + fenoxasulfon (đăng ký CAS số 639826-16-7), hợp chất có công thức (I) + fentrazamit, hợp chất có công thức (I) + florasulam, hợp chất có công thức (I) + halosulfuron, hợp chất có công thức (I) + halosulfuron-metyl, hợp chất có công thức (I) + imazosulfuron, hợp chất có công thức I + ipfencarbazon (đăng ký CAS số 212201-70-2), hợp chất có công thức (I) + MCPA, hợp chất có công thức (I) + mefenaxet, hợp chất có công thức (I) + mesotrion, hợp chất có công thức I + metazosulfuron (NC-620, đăng ký CAS số 868680-84-6), hợp chất có công thức (I) + metsulfuron, hợp chất có công thức (I) + metsulfuron-metyl, hợp chất có công thức (I) + orthosulfamuron, hợp chất có công thức (I) + oxadiargyl, hợp chất có công thức (I) + oxadiazon, hợp chất có công thức (I) + pendimethalin, hợp chất có công thức (I) + penoxsulam, hợp chất có công thức (I) + pretilachlor, hợp chất có công thức I + propyrisulfuron (TH-547, đăng ký CAS số 570415-88-2), hợp chất có công thức (I) + pyrazolynat, hợp chất có công thức (I) + pyrazosulfuron, hợp chất có công thức (I) + pyrazosulfuron-etyl, hợp chất có công thức (I) + pyrazoxyfen, hợp chất có công thức (I) + pyribenzoxim, hợp chất có công thức (I) + pyriftalid, hợp chất có công thức (I) + pyriminobac, hợp chất có công thức (I) + pyriminobac-metyl, hợp chất có công thức (I) + pyrimisulfan, hợp chất có công thức (I) + quinclorac, hợp chất có công thức (I) + tefuryltrion, hợp chất có công thức (I) + triasulfuron và hợp chất có

công thức (I) + trinexapac-etyl, hợp chất có công thức (I) + 4-(4'-clo-4-xyclopropyl-2'-flobiphenyl-3-yl)-2,2,6,6-tetrametyl-2H-pyran-3,5(4H,6H)-dion (mà là hợp chất của ví dụ P8 được bộc lộ ở các trang 31-32 và 35-36 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2010/136431 A9 (Syngenta Limited), và mà còn là hợp chất A-13 được bộc lộ ở các trang 4, 5, 7 và 11 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2011/073616 A2 (Syngenta Limited), hợp chất có công thức (I) + 4-(2',4'-diclo-4-xyclopropylbiphenyl-3-yl)-2,2,6,6-tetrametyl-2H-pyran-3,5(4H,6H)-dion (mà là hợp chất của ví dụ P9 được bộc lộ ở các trang 36-37 và 40-41 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2010/136431 A9 (Syngenta Limited), và mà còn là hợp chất A-12 được bộc lộ ở trang 10 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2011/073616 A2 (Syngenta Limited), hợp chất có công thức (I) + 4-(4'-clo-4-etyl-2'-flobiphenyl-3-yl)-2,2,6,6-tetrametyl-2H-pyran-3,5(4H,6H)-dion (mà là hợp chất A-66 được bộc lộ ở trang 95 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2008/071405 A1 (Syngenta Participations AG và Syngenta Limited), và mà còn là hợp chất A-4 được bộc lộ ở trang 7 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2011/073615 A2 (Syngenta Limited), hợp chất có công thức (I) + 4-(2',4'-diclo-4-etyl-2'-flobiphenyl-3-yl)-2,2,6,6-tetrametyl-2H-pyran-3,5(4H,6H)-dion (mà là hợp chất A-45 được bộc lộ ở trang 93 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2008/071405 A1 (Syngenta Participations AG và Syngenta Limited), và mà còn là hợp chất của ví dụ P10 được bộc lộ ở các trang 41 và 45 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2010/136431 A9 (Syngenta Limited), và mà còn là hợp chất A-7 được bộc lộ ở trang 7 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2011/073615 A2 (Syngenta Limited), hợp chất có công thức (I) + 4-(2',4'-diclo-4-etyl-2'-flobiphenyl-3-yl)-5-(metoxycarbonyloxy)-2,2,6,6-tetrametyl-2H-pyran-3(6H)-on (mà là hợp chất D-26 được bộc lộ ở trang 231 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2008/071405 A1 (Syngenta Participations AG và Syngenta Limited), và mà còn là hợp chất A-9 được bộc lộ ở trang 8 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2011/073615 A2 (Syngenta Limited), hợp chất có công thức (I) + một trong các hợp chất diệt cỏ cụ thể được bộc lộ trong tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2010/059671 (Dow, ví dụ như được xác định ở một trong các ví dụ ở đây và/hoặc ví dụ có thể được cộng với chất an toàn) hợp chất có công thức I + halauxifen (mà là axit 4-amino-3-clo-6-(4-clo-2-flo-3-metoxyphenyl)pyridin-2-carboxylic, đăng ký CAS số 943832-60-8), hợp chất có công thức I + halauxifen-metyl (mà là metyl 4-amino-3-clo-6-(4-clo-2-flo-3-metoxyphenyl)pyridin-2-carboxylat, đăng ký CAS số 943831-98-9), hợp chất có công thức I + iofensulfuron (mà là 1-(2-iodophenylsulfonyl)-3-(4-metoxy-6-metyl-1,3,5-triazin-2-yl)ure, đăng ký CAS số

1144097-22-2), hợp chất có công thức I + natri iofensulfuron (mà là natri N-(2-iodophenylsulfonyl)-N'-(4-metoxi-6-metyl-1,3,5-triazin-2-yl)carbamimidat, đăng ký CAS số 1144097-30-2), hoặc hợp chất có công thức I + triafamon (mà là N-[2-[(4,6-dimetoxi-1,3,5-triazin-2-yl)carbonyl]-6-flophenyl]-N-metyl-1,1-diflometansulfonamit, đăng ký CAS số 874195-61-6);

trong đó thành phần kết hợp trong hỗn hợp đối với hợp chất có công thức (I) có thể tùy ý ở dạng este (cụ thể là este nông hóa học) hoặc muối (cụ thể là muối nông hóa học) của chúng (ví dụ, nếu có thể về mặt hóa học).

Để dùng ở đậu nành, các hỗn hợp sau được ưu tiên:

hợp chất có công thức (I) + acifluorfen, hợp chất có công thức (I) + natri acifluorfen, hợp chất có công thức (I) + ametryn, hợp chất có công thức (I) + atrazin, hợp chất có công thức (I) + bentazon, hợp chất có công thức (I) + bixyclopyron, hợp chất có công thức (I) + bromoxynil, hợp chất có công thức (I) + bromoxynil heptanoat, hợp chất có công thức (I) + bromoxynil octanoat, hợp chất có công thức (I) + bromoxynil heptanoat + bromoxynil octanoat, hợp chất có công thức (I) + carfentrazon, hợp chất có công thức (I) + carfentrazon-etyl, hợp chất có công thức (I) + chloransulam, hợp chất có công thức (I) + chloransulam-metyl, hợp chất có công thức (I) + chlorimuron, hợp chất có công thức (I) + chlorimuron-etyl, hợp chất có công thức (I) + clethodim, hợp chất có công thức (I) + clomazon, hợp chất có công thức (I) + xyanazin, hợp chất có công thức (I) + 2,4-D (đặc biệt là để sử dụng cho đậu nành kháng 2,4-D, ví dụ cải biến thông thường), hợp chất có công thức (I) + 2,4-D-dimetylamoni (đặc biệt là để sử dụng cho đậu nành kháng 2,4-D, ví dụ cải biến di truyền), hợp chất có công thức (I) + 2,4-D-2-etylhexyl (đặc biệt là để sử dụng cho đậu nành kháng 2,4-D, ví dụ cải biến di truyền), hợp chất có công thức (I) + muối cholin của 2,4-D (xem các ví dụ minh họa 2 và 3 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO2010/123871A1) (đặc biệt là để sử dụng cho đậu nành kháng 2,4-D, ví dụ cải biến di truyền), hợp chất có công thức (I) + 2,4-D + glyphosat (đặc biệt là để sử dụng cho đậu nành kháng 2,4-D và/hoặc kháng glyphosat, ví dụ cải biến di truyền), hợp chất có công thức (I) + 2,4-D-dimetylamoni + glyphosat (đặc biệt là để sử dụng cho đậu nành kháng 2,4-D và/hoặc kháng glyphosat, ví dụ cải biến di truyền), hợp chất có công thức (I) + 2,4-D-2-etylhexyl + glyphosat (đặc biệt là để sử dụng cho đậu nành kháng 2,4-D và/hoặc kháng glyphosat, ví dụ cải biến di truyền), hợp chất có công thức I + muối cholin của 2,4-D + glyphosat (xem các ví dụ minh họa 2 và 3 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO2010/123871A1) (đặc biệt là để sử dụng cho đậu nành kháng dicamba

và/hoặc kháng glyphosat, ví dụ cải biến di truyền), hợp chất có công thức (I) + dicamba (đặc biệt là để sử dụng cho đậu nành kháng dicamba, ví dụ cải biến di truyền), hợp chất có công thức (I) + dicamba-dimethylamoni (đặc biệt là để sử dụng cho đậu nành kháng dicamba, ví dụ cải biến di truyền), hợp chất có công thức (I) + dicamba-kali (đặc biệt là để sử dụng cho đậu nành kháng dicamba, ví dụ cải biến di truyền), hợp chất có công thức (I) + dicamba-natri (đặc biệt là để sử dụng cho đậu nành kháng dicamba, ví dụ cải biến di truyền), hợp chất có công thức (I) + dicamba-diglycolamin (đặc biệt là để sử dụng cho đậu nành kháng dicamba, ví dụ cải biến di truyền), hợp chất có công thức (I) + muối N,N-bis-[aminopropyl]metylamin của dicamba (ví dụ xem tài liệu công bố đơn số US2012/0184434A1) (đặc biệt là để sử dụng cho đậu nành kháng dicamba, ví dụ cải biến di truyền), hợp chất có công thức (I) + dicamba + glyphosat (đặc biệt là để sử dụng cho đậu nành kháng dicamba và/hoặc kháng glyphosat, ví dụ cải biến di truyền), hợp chất có công thức (I) + dicamba-dimethylamoni + glyphosat (đặc biệt là để sử dụng cho đậu nành kháng dicamba và/hoặc kháng glyphosat, ví dụ cải biến di truyền), hợp chất có công thức (I) + dicamba-kali + glyphosat (đặc biệt là để sử dụng cho đậu nành kháng dicamba và/hoặc kháng glyphosat, ví dụ cải biến di truyền), hợp chất có công thức (I) + dicamba-natri + glyphosat (đặc biệt là để sử dụng cho đậu nành kháng dicamba và/hoặc kháng glyphosat, ví dụ cải biến di truyền), hợp chất có công thức (I) + dicamba-diglycolamin + glyphosat (đặc biệt là để sử dụng cho đậu nành kháng dicamba và/hoặc kháng glyphosat, ví dụ cải biến di truyền), hợp chất có công thức (I) + muối N,N-bis-[aminopropyl]metylamin của dicamba + glyphosat (đặc biệt là để sử dụng cho đậu nành kháng dicamba và/hoặc kháng glyphosat, ví dụ cải biến di truyền), hợp chất có công thức (I) + diclosulam, hợp chất có công thức (I) + dimethenamid, hợp chất có công thức (I) + dimethenamid-P, hợp chất có công thức (I) + diquat, hợp chất có công thức (I) + diquat dibromua, hợp chất có công thức (I) + diuron, hợp chất có công thức (I) + fenoxaprop, hợp chất có công thức (I) + fenoxaprop-etyl, hợp chất có công thức (I) + fenoxaprop-P, hợp chất có công thức (I) + fenoxaprop-P-etyl, hợp chất có công thức (I) + fluazifop, hợp chất có công thức (I) + fluazifop-butyl, hợp chất có công thức (I) + fluazifop-P, hợp chất có công thức (I) + fluazifop-P-butyl, hợp chất có công thức (I) + flufenaxet, hợp chất có công thức (I) + flumetsulam, hợp chất có công thức (I) + flumioxazin, hợp chất có công thức (I) + fluthiaxet, hợp chất có công thức (I) + fluthiaxet-metyl, hợp chất có công thức (I) + fomesafen, hợp chất có công thức (I) + glufosinat, hợp chất có công thức (I) + glufosinat-amoni, hợp chất có công thức (I) +

glyphosat, hợp chất có công thức (I) + glyphosat-diamoni, hợp chất có công thức (I) + glyphosat-isopropylamoni, hợp chất có công thức (I) + kali glyphosat, hợp chất có công thức (I) + imazethapyr, hợp chất có công thức (I) + lactofen, hợp chất có công thức (I) + mesotrion, hợp chất có công thức (I) + metolachlor, hợp chất có công thức (I) + S-metolachlor, hợp chất có công thức (I) + metribuzin, hợp chất có công thức (I) + oxyfluorfen, hợp chất có công thức (I) + paraquat, hợp chất có công thức (I) + paraquat diclorua, hợp chất có công thức (I) + pendimetalin, hợp chất có công thức (I) + pyroxasulfon, hợp chất có công thức I + quizalofop, hợp chất có công thức I + quizalofop-etyl, hợp chất có công thức I + quizalofop-P, hợp chất có công thức I + quizalofop-P-etyl, hợp chất có công thức I + quizalofop-P-tefuryl, hợp chất có công thức (I) + saflufenaxil, hợp chất có công thức (I) + setoxydim, hợp chất có công thức (I) + sulfentrazon, hợp chất có công thức (I) + thifensulfuron, hợp chất có công thức (I) + thifensulfuron-metyl, hợp chất có công thức (I) + tribenuron, hợp chất có công thức (I) + tribenuron-metyl, hợp chất có công thức (I) + trifluralin, hợp chất có công thức (I) + 4-(4'-clo-4-xyclopropyl-2'-flobiphenyl-3-yl)-2,2,6,6-tetrametyl-2H-pyran-3,5(4H,6H)-dion (mà là hợp chất của ví dụ P8 được bộc lộ ở các trang 31-32 và 35-36 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2010/136431 A9 (Syngenta Limited), và mà còn là hợp chất A-13 được bộc lộ ở các trang 4, 5, 7 và 11 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2011/073616 A2 (Syngenta Limited), hợp chất có công thức (I) + 4-(2',4'-diclo-4-xyclopropylbiphenyl-3-yl)-2,2,6,6-tetrametyl-2H-pyran-3,5(4H,6H)-dion (mà là hợp chất của ví dụ P9 được bộc lộ ở các trang 36-37 và 40-41 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2010/136431 A9 (Syngenta Limited), và mà còn là hợp chất A-12 được bộc lộ ở trang 10 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2011/073616 A2 (Syngenta Limited), hợp chất có công thức (I) + 4-(4'-clo-4-etyl-2'-flobiphenyl-3-yl)-2,2,6,6-tetrametyl-2H-pyran-3,5(4H,6H)-dion (mà là hợp chất A-66 được bộc lộ ở trang 95 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2008/071405 A1 (Syngenta Participations AG và Syngenta Limited), và mà còn là hợp chất A-4 được bộc lộ ở trang 7 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2011/073615 A2 (Syngenta Limited), hợp chất có công thức (I) + 4-(2',4'-diclo-4-etyl-2'-flobiphenyl-3-yl)-2,2,6,6-tetrametyl-2H-pyran-3,5(4H,6H)-dion (mà là hợp chất A-45 được bộc lộ ở trang 93 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2008/071405 A1 (Syngenta Participations AG và Syngenta Limited), và mà còn là hợp chất của ví dụ P10 được bộc lộ ở các trang 41 và 45 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2010/136431 A9 (Syngenta Limited), và mà còn là hợp chất A-7 được bộc lộ ở trang 7 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO

2011/073615 A2 (Syngenta Limited), hoặc hợp chất có công thức (I) + 4-(2',4'-diclo-4-ethylbiphenyl-3-yl)-5-(metoxycarbonyloxy)-2,2,6,6-tetrametyl-2H-pyran-3(6H)-on (mà là hợp chất D-26 được bộc lộ ở trang 231 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2008/071405 A1 (Syngenta Participations AG và Syngenta Limited), và mà còn là hợp chất A-9 được bộc lộ ở trang 8 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2011/073615 A2 (Syngenta Limited),

trong đó thành phần kết hợp trong hỗn hợp đối với hợp chất có công thức (I) có thể tùy ý ở dạng este (cụ thể là este nông hóa học) hoặc muối (cụ thể là muối nông hóa học) của chúng (ví dụ, nếu có thể về mặt hóa học).

Trong chế phẩm được đề cập ở trên hoặc hỗn hợp chứa hợp chất có công thức (I) (cụ thể là hợp chất từ các bảng 1, 2, 3, 4, 5 hoặc 6, và/hoặc một trong các hợp chất A1 đến A7, A8, hoặc P1 đến P5 ở đây, tùy ý có mặt (ví dụ khi có thể về mặt hóa học) là muối nông nghiệp của chúng) và một hoặc nhiều chất diệt cỏ khác, tỷ lệ khối lượng của hợp chất có công thức (I) so với mỗi chất diệt cỏ khác có thể thay đổi trên khoảng rộng và là, thông thường, từ 500:1 đến 1:500 hoặc từ 300:1 đến 1:500 hoặc từ 500:1 đến 1:200, đặc biệt là từ 200:1 đến 1:200 hoặc từ 150:1 đến 1:200 hoặc từ 200:1 đến 1:100, đặc biệt hơn là từ 100:1 đến 1:100 hoặc từ 100:1 đến 1:50, đặc biệt hơn nữa là từ 30:1 đến 1:30. Phổ biến là, tỷ lệ khối lượng này được đo dưới dạng hợp chất tự do, tức là loại trừ khối lượng của phần tử trái dấu kết hợp của muối.

Hợp chất có công thức I theo sáng chế có thể được sử dụng trong tổ hợp với chất an toàn. Ưu tiên là, trong các hỗn hợp này, hợp chất có công thức I là một trong các hợp chất được liệt kê (được bộc lộ) trong các bảng 1, 2, 3, 4, 5 hoặc 6, và/hoặc một trong các hợp chất ví dụ (cụ thể là một trong các hợp chất A1 đến A7, A8, hoặc P1 đến P5) ở đây ví dụ dưới đây, tùy ý có mặt (ví dụ khi có thể về mặt hóa học) là muối nông nghiệp của chúng. Các hỗn hợp sau với các chất an toàn, đặc biệt là, được xem xét:

hợp chất có công thức I + cloquintoxet-mexyl, hợp chất có công thức I + axit cloquintoxet hoặc muối nông nghiệp của chúng, hợp chất có công thức I + fenclorazol-etyl, hợp chất có công thức I + axit fenclorazol hoặc muối nông nghiệp của chúng, hợp chất có công thức I + mefenpyr-dietyl, hợp chất có công thức I + mefenpyr diaxit, hợp chất có công thức I + isoxadifen-etyl, hợp chất có công thức I + axit isoxadifen, hợp chất có công thức I + furilazol, hợp chất có công thức I + chất đồng phân R furilazol, hợp chất có công thức (I) + N-(2-metoxybenzoyl)-4-[(metylaminocarbonyl)amino]benzensulfonamid, hợp chất có công thức I + benoxacor, hợp chất có công thức I + dichlormid, hợp chất có công thức I + AD-67, hợp chất có

công thức I + oxabetrinil, hợp chất có công thức I + xyometrinil, hợp chất có công thức I + chất đồng phân Z xyometrinil, hợp chất có công thức I + fenclorim, hợp chất có công thức I + xyprosulfamit, hợp chất có công thức I + naphthalic anhydrit, hợp chất có công thức I + flurazol, hợp chất có công thức I + CL 304,415, hợp chất có công thức I + dixyclonon, hợp chất có công thức I + fluxofenim, hợp chất có công thức I + DKA-24, hợp chất có công thức I + R-29148 và hợp chất có công thức I + PPG-1292.

Ưu tiên là, trong chế phẩm hoặc hỗn hợp chứa hợp chất có công thức (I) (cụ thể là, hợp chất từ các bảng 1, 2, 3, 4, 5 hoặc 6, và/hoặc một trong các hợp chất A1 đến A7, A8, hoặc P1 đến P5 ở đây, tùy ý có mặt (ví dụ khi có thể về mặt hóa học) là muối nông hóa học của chúng) và chất an toàn, chất an toàn bao gồm (ví dụ là) benoxacor, axit cloquintoxet hoặc muối nông hóa học của chúng, cloquintoxet-mexyl, xyprosulfamit, mefenpyr-dietyl, isoxadifen-etyl và/hoặc N-(2-metoxybenzoyl)-4-[(metylaminocarbonyl)amino]benzensulfonamit. Theo một phương án cụ thể, chất an toàn bao gồm (ví dụ là) axit cloquintoxet hoặc muối nông hóa học của chúng, cloquintoxet-mexyl, mefenpyr-dietyl và/hoặc isoxadifen-etyl; cụ thể là để dùng trên ngũ cốc không yếm mạch như lúa mì, lúa mạch, lúa mạch đen và/hoặc lúa mì lai lúa mạch đen. Cloquintoxet-mexyl là đặc biệt có giá trị và là chất an toàn được ưu tiên nhất, đặc biệt là để dùng trên ngũ cốc không yếm mạch như lúa mì, lúa mạch, lúa mạch đen và/hoặc lúa mì lai lúa mạch đen.

Tỷ lệ chất an toàn so với chất diệt cỏ phụ thuộc lớn vào cách sử dụng. Tuy nhiên, thông thường, tỷ lệ khối lượng của hợp chất có công thức (I) so với chất an toàn có thể thay đổi trên khoảng rộng và là, thông thường, từ 200:1 đến 1:200, đặc biệt là từ 50:1 đến 1:50 như từ 50:1 đến 1:20, đặc biệt hơn là từ 20:1 đến 1:20, đặc biệt hơn nữa là từ 20:1 đến 1:10. Như xác định ở trên, ưu tiên là, chất an toàn bao gồm (ví dụ là) benoxacor, cloquintoxet-mexyl, axit cloquintoxet hoặc muối nông hóa học của chúng, xyprosulfamit, mefenpyr-dietyl, isoxadifen-etyl và/hoặc N-(2-metoxybenzoyl)-4-[(metylaminocarbonyl)amino]benzensulfonamit; trong trường hợp, ưu tiên hơn là, tỷ lệ khối lượng của hợp chất có công thức (I) so với chất an toàn là từ 50:1 đến 1:20 hoặc từ 20:1 đến 1:10, còn ưu tiên hơn là từ 15:1 đến 1:2. Phổ biến là, tỷ lệ khối lượng này được đo dưới dạng (các) hợp chất tự do, tức là loại trừ khối lượng của (các) phần tử trái dấu kết hợp của muối. Theo các phương án thông thường nêu trên hoặc được ưu tiên, ưu tiên là, hợp chất có công thức (I) là hợp chất từ các bảng 1, 2, 3, 4, 5 hoặc 6,

và/hoặc một trong các hợp chất A1 đến A7, A8, hoặc P1 đến P5 ở đây, tùy ý có mặt (ví dụ khi có thể về mặt hóa học) là muối nông nghiệp của chúng.

Tỷ lệ sử dụng chất diệt cỏ (cụ thể là hợp chất có công thức (I)) và/hoặc chất an toàn: tỷ lệ sử dụng của chất an toàn so với chất diệt cỏ (cụ thể là hợp chất có công thức (I)) phụ thuộc lớn vào cách bón. Trong trường hợp xử lý trên cánh đồng và/hoặc đất và/hoặc cây (ví dụ trên cánh đồng hoặc nhà kính): ví dụ từ 0,001 đến 5,0kg (ví dụ từ 1 đến 1000g) chất an toàn mỗi ha, ưu tiên là từ 0,001 đến 0,5kg (cụ thể là từ 1 đến 250g hoặc từ 2 đến 200g hoặc từ 5 đến 200g) chất an toàn mỗi ha, được bón; và/hoặc thường từ 0,001 đến 2kg chất diệt cỏ (ví dụ hợp chất có công thức (I)) mỗi ha, nhưng ưu tiên là từ 0,005 đến 1kg (ưu tiên hơn là từ 5 đến 500g hoặc từ 10 đến 400g hoặc từ 10 đến 300g hoặc từ 20 đến 200g) chất diệt cỏ (cụ thể là hợp chất có công thức (I)) mỗi ha, được bón. ha = hecta. Phổ biến là, tỷ lệ khối lượng này được đo dưới dạng (các) hợp chất tự do, tức là loại trừ khối lượng của (các) phần tử trái dấu kết hợp của muối. Trong khi xử lý trên cánh đồng và/hoặc cây, bón chất diệt cỏ (cụ thể là hợp chất có công thức (I)) ưu tiên là sau nảy mầm.

Chất an toàn và chất diệt cỏ được đề cập ở trên được mô tả, ví dụ, trong The Pesticide Manual, tái bản lần thứ mười hai, British Crop Protection Council, 2000; hoặc The Pesticide Manual, tái bản lần thứ 15 (2009) hoặc tái bản lần thứ 16 (2012), ed. C.D.S. Tomlin, British Crop Production Council. R-29148 được mô tả, ví dụ bởi P.B. Goldsbrough và cộng sự, Plant Physiology, (2002), Tập 130 trang 1497-1505 và viện dẫn ở đây. PPG-1292 được biết từ tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 2009/211761.

N-(2-metoxycarbonyl)-4-[(metylaminocarbonyl)amino]-benzensulfonamid được biết ví dụ từ EP365484.

Theo một phương án cụ thể, chế phẩm hoặc hỗn hợp chứa hợp chất có công thức (I) và một hoặc nhiều chất diệt cỏ khác (ví dụ như được đề cập trên đây) có thể được bón cùng với một trong số các chất an toàn được đề cập ở đây, ví dụ trên đây.

Các hợp chất và/hoặc các chế phẩm diệt cỏ theo sáng chế là thích hợp cho tất cả các phương pháp sử dụng thông thường trong nông nghiệp, như, ví dụ, dùng trước nảy mầm, dùng sau nảy mầm và xử lý hạt. Dùng sau nảy mầm được ưu tiên. Tùy thuộc vào dự tính sử dụng, chất an toàn có thể được sử dụng để tiền xử lý vật liệu hạt của cây trồng (xử lý hạt hoặc cây giống) hoặc được đưa vào đất trước hoặc sau khi gieo hạt, sau đó sử dụng hợp chất (không chọn lọc) có công thức (I), tùy ý kết hợp với chất đồng diệt cỏ. Tuy nhiên, có thể dùng riêng rẽ hoặc kết hợp với chất diệt cỏ trước hoặc sau khi cây nảy mầm. Do đó, việc xử lý cây hoặc vật liệu hạt bằng chất an toàn có thể

diễn ra một cách độc lập với thời gian dùng chất diệt cỏ. Việc xử lý cây bằng cách dùng đồng thời chất diệt cỏ và chất an toàn (ví dụ, dưới dạng hỗn hợp trong thùng) thường được ưu tiên. Tỷ lệ dùng chất an toàn so với chất diệt cỏ phụ thuộc rất lớn vào cách dùng. Trong trường hợp xử lý trên cánh đồng và/hoặc đất và/hoặc cây (ví dụ trên cánh đồng hoặc nhà kính), thường từ 0,001 đến 5,0kg chất an toàn/ha, ưu tiên là từ 0,001 đến 0,5kg chất an toàn/ha, được bón. Trong trường hợp xử lý hạt, thường là từ 0,001 đến 10g chất an toàn/kg hạt, tốt hơn là từ 0,05 đến 2g chất an toàn/kg hạt, được dùng. Nếu chất an toàn được dùng ở dạng lỏng, bằng cách ngâm hạt, ngay trước khi gieo, thuận lợi là dùng dung dịch chất an toàn mà chứa thành phần hoạt tính ở nồng độ từ 1 đến 10 000ppm, tốt hơn là từ 100 đến 1000ppm.

Theo sáng chế, trong trường hợp xử lý trên cánh đồng và/hoặc đất và/hoặc cây (ví dụ bón sau nảy mầm), thường từ 1 đến 2000g chất diệt cỏ (cụ thể là hợp chất có công thức (I))/ha, nhưng ưu tiên là từ 5 đến 1000g chất diệt cỏ (cụ thể là hợp chất có công thức (I))/ha, ưu tiên hơn là từ 10 đến 400g chất diệt cỏ (cụ thể là hợp chất có công thức (I))/ha, được bón. Nếu chất an toàn được sử dụng, trong trường hợp xử lý trên cánh đồng và/hoặc đất và/hoặc cây (ví dụ bón sau nảy mầm), thường từ 0,5 đến 1000g chất an toàn/ha, ưu tiên là từ 2 đến 500g chất an toàn/ha, ưu tiên hơn là từ 5 đến 200g chất an toàn/ha, được bón.

Ví dụ thực hiện sáng chế

Các ví dụ dưới đây minh họa thêm nhưng không làm giới hạn sáng chế.

Ví dụ điều chế

Người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực sẽ hiểu rằng một số hợp chất được mô tả ở đây, ví dụ dưới đây, là β -ketoenol, và do đó có thể tồn tại dưới dạng chất hỗ biến hoặc dưới dạng hỗn hợp keto-enol và các chất hỗ biến diketon như được mô tả, ví dụ, by J. March, Advanced Organic Chemistry, tái bản lần thứ ba, John Wiley và Sons. Hợp chất được thể hiện dưới đây, và trong các bảng T1, T2 và P1 dưới đây, cũng như các hợp chất được thể hiện trên đây trong các bảng 1, 2, 3, 4, 5 hoặc 6, được thiết kế là chất hỗ biến enol đơn tùy ý, nhưng hàm ý rằng mô tả này bao hàm cả dạng diketon và enol có thể bất kỳ mà có thể phát sinh qua cơ chế hỗ biến. Khi hơn một chất hỗ biến được thấy trong proton (^1H) NMR, dữ liệu được thể hiện là cho hỗn hợp của các chất hỗ biến. Hơn nữa, một số hợp chất được thể hiện dưới đây có thể được thiết kế dưới dạng chất đồng phân đối hình đơn nhằm mục đích đơn giản hóa, nhưng trừ khi được quy định cụ thể là các chất đồng phân đối hình đơn, các cấu trúc này cần được hiểu là thể hiện hỗn hợp các chất đồng phân đối hình (ví dụ hỗn hợp racemic). Ngoài ra, một

số hợp chất có thể tồn tại dưới dạng các chất đồng phân không đối quang, và nên suy ra rằng các hợp chất này có thể có mặt dưới dạng hỗn hợp của các chất đồng phân không đối quang hoặc dưới dạng một chất đồng phân không đối quang có thể có bất kỳ. Trong phần ví dụ chi tiết chất hỗ biến diketon được chọn để gọi tên, ngay cả khi chất hỗ biến chủ yếu (hoặc cấu trúc được thiết kế) là dạng enol.

Các chữ viết tắt được sử dụng ở đây:

s = đơn; brs = đơn rộng; d = đôi; m = đa.

NMR cộng hưởng từ hạt nhân

LC-MS sắc ký lỏng – phép ghi khối phổ

RT nhiệt độ phòng (trong bối cảnh thí nghiệm và/hoặc nhiệt độ)

RT thời gian lưu (trong bối cảnh LCMS)

Phân tích LC-MS

Ghi chú: hợp chất đặc trưng bởi HPLC-MS được phân tích sử dụng Agilent 1100 Series HPLC được trang bị cột WatersAtlantis dC18 (chiều dài cột 20mm, đường kính bên trong cột 3mm, kích thước hạt 3micron, nhiệt độ 40°C), màn quang diot Waters và Micromass ZQ2000. Thực hiện phân tích sử dụng thời gian chạy ba phút, theo bảng gradien dưới đây:

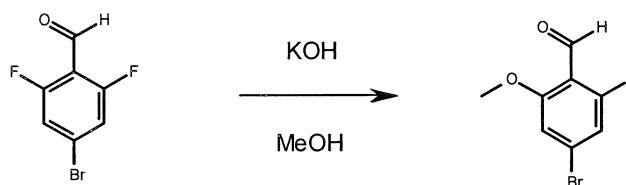
Thời gian (phút)	Dung môi A (%)	Dung môi B (%)	Lưu lượng (ml/mn)
0,00	90,0	10,0	2,00
0,25	90,0	10,0	2,00
2,00	10,0	90,0	2,00
2,50	10,0	90,0	2,00
2,6	90,0	10,0	2,00
3,0	90,0	10,0	2,00

Dung môi A: H₂O với 0,1% HCOOH

Dung môi B: 0,1% HCOOH trong CH₃CN

Các giá trị đặc trưng thu được cho mỗi hợp chất là thời gian lưu (RT, được ghi mỗi phút) và ion phân tử, thông thường là cation MH⁺.

Ví dụ 1: Điều chế 4-bromo-2-flo-6-metoxi-benzaldehyt



Kali hydroxit nỏ (59,575g) được thêm nhỏ giọt từng phần vào metanol (600mL) khuấy và nguội (bể nước đá) giữ nhiệt độ dưới 20°C. Dung dịch được chuyển sang phễu nhỏ giọt. Vật liệu khởi đầu, 4-bromo-2,6-diflo-benzaldehyt (bán trên thị trường, CAS 537013-51-7, 200g), được hòa tan trong metanol (1210mL) ở 25°C. Hỗn hợp được làm ấm đến 40°C và dung dịch kali metoxit được thêm từ phễu nhỏ giọt qua 20 phút kèm khuấy. Tỏa nhiệt ban đầu quan sát được mà được kiểm soát bằng làm nguội bên ngoài. Nhiệt độ phản ứng được tăng đến 55°C và tiếp tục gia nhiệt trong 1 giờ.

Hỗn hợp phản ứng được làm nguội đến nhiệt độ phòng và metanol được loại dưới chân không. Cặn thu được đặc tách phần giữa nước (1,6L) và etyl axetat (1,6L). Các pha được tách và lớp nước được chiết với etyl axetat khác (2 x 0,5L). Các pha hữu cơ kết hợp được rửa với nước (0,5L) và được cô dưới chân không tạo ra chất rắn màu vàng.

Chất rắn này được tán bột với iso-hexan lạnh, được lọc và được làm khô trong chân không để tạo ra chất rắn màu vàng là hỗn hợp 4:1 của hợp chất 4-bromo-2-flo-6-metoxxy-benzaldehyt mong muốn [¹H-NMR (400MHz, CDCl₃) 10,36 (s, 1H), 6,94-6,97 (m, 2H), 3,94 (s, 3H)] và 4-bromo-2,6-dimetoxxy-benzaldehyt.

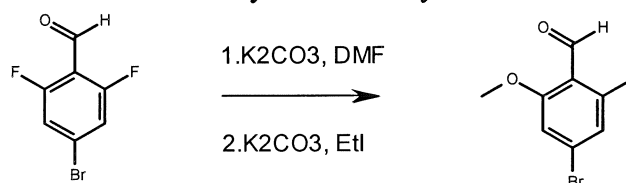
Các hợp chất dưới đây có thể được điều chế sử dụng cùng phương pháp:

4-bromo-2-flo-6-(2-metoxxy-etoxy)-benzaldehyt được điều chế sử dụng 2-metoxxyetanol. ¹H-NMR (400MHz, CDCl₃) 10,39 (d, 1H), 6,93-6,99 (m, 2H), 4,18-4,26 (m, 2H), 3,73-3,84 (m, 2H), 3,45 (s, 3H).

4-bromo-2-flo-6-(2,2,2-triflo-etoxy)-benzaldehyt. ¹H-NMR (400MHz, CDCl₃) 10,37 (d, 1H), 7,09 (dd, 1H), 6,95 (s, 1H), 4,47 (q, 2H).

2,4-dibromo-6-metoxxy-benzaldehyt. ¹H-NMR (400MHz, CDCl₃) 10,34 (s, 1H), 7,44 (s, 1H), 7,11 (s, 1H), 3,92 (s, 3H).

Ví dụ 2: Điều chế 4-bromo-2-flo-6-metoxxy-benzaldehyt



Dung dịch khuấy của 4-bromo-2,6-diflo-benzaldehyt (bán trên thị trường, CAS 537013-51-7, 1,00g) trong N,N- dimetylformamit (5mL) ở nhiệt độ môi trường được

thêm kali cacbonat (1,10g) sau đó thêm nước (0,408g). Huyền phù thu được được gia nhiệt ở 90°C. Sau 1 giờ nước (0,08mL) nữa được thêm và tiếp tục gia nhiệt thêm 1 giờ.

Hỗn hợp phản ứng được làm nguội đến nhiệt độ môi trường và kali cacbonat (0,595g) được thêm kèm khuấy sau đó thêm iometan (1,4mL). Hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ môi trường qua đêm.

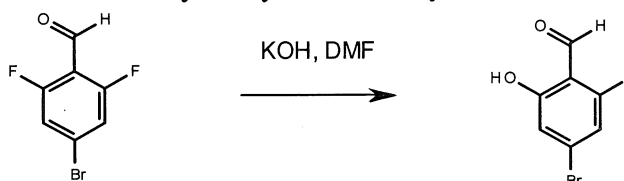
Hỗn hợp phản ứng được tách phân giữa nước và dietyl ete và được chiết lớp nước bằng dietyl ete khác (2x). Các lớp hữu cơ kết hợp được rửa với nước, nước muối và được làm khô với magie sulfat khan. Hỗn hợp này được lọc và được cô dưới chân không để thu được chất rắn màu cam đỏ. Chất rắn này được hòa tan trong diclometan, được đi qua đệm silica và được cô để tạo ra 4-bromo-2-flo-6-metoxi-benzaldehyt là chất rắn màu cam.

$^1\text{H-NMR}$ (400MHz, CDCl_3) δ (delta) 10,37 (s, 1H), 6,94-6,97 (m, 2H), 3,94 (s, 3H).

Các hợp chất dưới đây có thể được điều chế sử dụng cùng phương pháp:

4-bromo-2-etoxy-6-flo-benzaldehyt được điều chế sử dụng etyl iodua. $^1\text{H-NMR}$ (400MHz, CDCl_3) δ (delta) 10,38 (d, 1H), 6,85 - 6,96 (m, 2H), 4,15 (q, 2H), 1,49 (t, 3H).

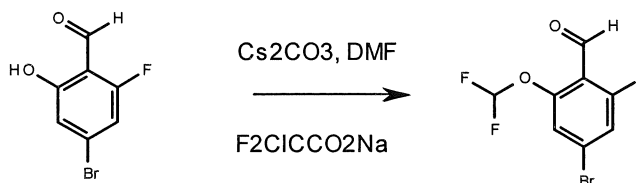
Ví dụ 3: Điều chế 4-bromo-2-flo-6-hydroxy-benzaldehyt



Dung dịch khuấy của 4-bromo-2,6-diflo-benzaldehyt (bán trên thị trường, CAS 537013-51-7, 2,000 g) trong N,N- dimetylformamit (10mL) được thêm dung dịch của kali hydroxit (1,015g) trong nước (4mL) ở nhiệt độ môi trường. Dung dịch màu vàng được gia nhiệt ở 60°C trong 2 giờ. Hỗn hợp phản ứng được làm nguội và được rót lên nước đá và được chiết bằng dietylete. Lớp nước được tách và lấy đến pH 2 bằng cách thêm axit clohydric đậm đặc. Ngạc nhiên là không có chất rắn vỡ ra từ nước ngay cả khi được làm nguội.

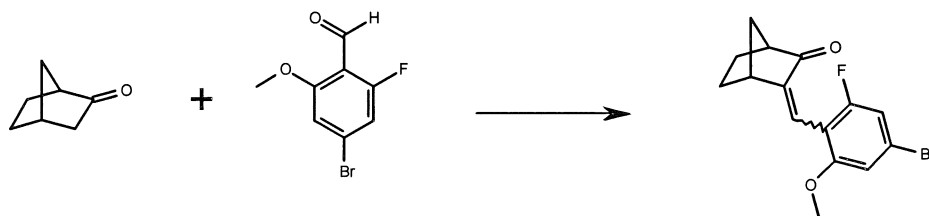
Lưu ý rằng khi giữ nguyên chất rắn màu vàng bị vỡ ra khỏi pha hữu cơ. Chất rắn này được gom bằng cách lọc và được hòa tan trong nước. Dịch lọc nước được lấy đến pH 2 bằng cách thêm axit clohydric đậm đặc và chất rắn màu vàng nhợt thu được được lọc và được làm khô để tạo ra 4-bromo-2-flo-6-hydroxy-benzaldehyt. $^1\text{H-NMR}$ (400MHz, CDCl_3) δ (delta) 11,57 (s, 1H), 10,20 (s, 1H), 6,99 (s, 1H), 6,86 (dd, 1H).

Ví dụ 4: Điều chế 4-Bromo-2-diflometoxy-6-flo-benzaldehyt



Dung dịch của 4-bromo-2-fluoro-6-hydroxy-benzaldehyt (ví dụ xem ví dụ 3, 1,451 g) trong N,N- dimetylformamit (4,7mL) ở nhiệt độ môi trường được thêm xesi cacbonat (3,022g) tạo ra huyền phù màu vàng mà được khuấy trong 5 phút. axit natri 2-clo-2,2-diflo-axetic (2,339g) được thêm vào huyền phù sao đó thêm nước (0,86mL). Hỗn hợp này được gia nhiệt ở 85°C trong 2,5 giờ. Hỗn hợp phản ứng được làm nguội, được rót vào nước đá và được chiết với dietyl ete (x2). Các lớp hữu cơ kết hợp được rửa với nước, được làm khô với magie sulfat và được cô đặc trong chân không để tạo ra chất dầu màu nâu. Chất dầu màu nâu được tinh chế bằng sắc ký cột trên silica rửa giải với 0-15% etyl axetat trong iso-hexan để tạo ra 4-bromo-2-(difluoromethoxy)-6-fluorobenzaldehyt là chất dầu màu vàng. $^1\text{H-NMR}$ δ (delta) (400MHz, CDCl_3) 10,31 (s, 1H), 7,27-7,33 (m, 1H), 6,44-6,83 (m, 1H).

Ví dụ 5: Điều chế 3-(4-bromo-2-fluoro-6-methoxy-benzyliden)-bicyclo[2.2.1]heptan-2-on



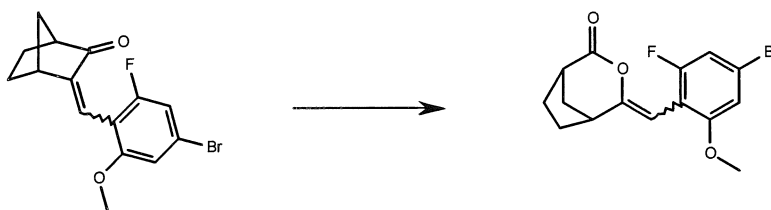
Dưới khí quyển nitơ 4-bromo-2-fluoro-6-methoxy-benzaldehyt (ví dụ xem minh họa 1, 126,924g) và norbornan-2-on (bán trên thị trường, CAS 497-38-1, 44,996g) được hòa tan trong rượu tert-butyl (1634mL) và hỗn hợp được khuấy và được làm ấm đến 40°C. Dung dịch này được thêm nhỏ giọt từng phần kali tert-butoxit (61,118g) duy trì nhiệt độ dưới 43°C. Khi thêm xong hỗn hợp được gia nhiệt đến 80°C trong 1 giờ.

Hỗn hợp phản ứng được làm nguội đến nhiệt độ phòng và dung môi được loại dưới chân không. Cặn thu được được tách phần giữa nước (1L) và etyl axetat (1L) và lớp nước được chiết với etyl axetat khác (2 x 0,5L). Các pha hữu cơ kết hợp được rửa với nước (0,5L). Pha hữu cơ cô dưới chân không để tạo ra chất rắn màu vàng mà được tinh chế bằng sắc ký cột trên silica rửa giải với 0-25% etyl axetat trong iso-hexan để tạo ra 3-(4-bromo-2-fluoro-6-methoxy-benzyliden)-bicyclo[2.2.1]heptan-2-on là chất rắn màu vàng sáng.

$^1\text{H-NMR}$ (400MHz, CDCl_3) δ (delta) 7,00 (s, 1H), 6,91-6,94 (m, 1H), 6,84 (m, 1H), 3,84 (s, 3H), 3,11 (brs, 1H), 2,78 (brs, 1H), 1,91-1,94 (m, 2H), 1,61-1,75 (m, 4H).

Ví dụ 6: Điều chế 4-(4-bromo-2-fluoro-6-methoxy-benzyliden)-3-oxa-bicyclo[3.2.1]octan-

2-on



Dung dịch khuấy của 3-(4-bromo-2-fluoro-6-methoxybenzyliden)-bixyclo[2.2.1]heptan-2-on (ví dụ xem minh họa 5, 5,658g) trong rượu tert-butyl (18,80mL) được thêm selen dioxid (0,0696g) sau đó thêm hydro peroxit (5mL) trong một phần. Dung dịch màu vàng thu được được khuấy ở nhiệt độ phòng trong 3 ngày.

Hỗn hợp phản ứng được pha loãng với etyl axetat (20mL) và nước (10mL) và được làm nguội trong bể nước đá. Natri metabisulfit (dung dịch nước 2%, 50mL) được thêm thành các phần 10mL kèm khuấy. Natri metabisulfit (dung dịch nước 10%) nữa được thêm nhỏ giọt từng phần, duy trì nhiệt độ bên trong ở $<20^{\circ}\text{C}$, đến khi hỗn hợp được thử âm tính đối với peroxit. Trong tổng số 60mL, dung dịch natri metabisulfit 10% được thêm.

Etyl axetat (20mL) nữa được thêm và các pha được tách. Lớp nước được chiết thêm với etyl axetat (1 x 20mL). Các lớp hữu cơ kết hợp được rửa với hỗn hợp nước/nước muối 50%, sau đó rửa nước muối và được làm khô với magie sulfat. Sự cô đặc của lớp hữu cơ khô tạo ra gôm màu vàng mà được tinh chế bằng sắc ký cột trên silica rửa giải với 0-15% etyl axetat trong iso-hexan để tạo ra 4-(4-bromo-2-fluoro-6-methoxybenzyliden)-3-oxa-bixyclo[3.2.1]octan-2-on là gôm màu vàng.

$^1\text{H-NMR}$ (400MHz, CDCl_3) 6,90-6,93 (m, 1H), 6,83 (s, 1H), 5,66 (s, 1H), 3,83 (s, 3H), 3,07-3,10 (m, 1H), 3,02 (m, 1H), 1,97-2,07 (m, 5H), 1,62-1,67 (m, 1H).

LC-MS RT 1,06 phút MH^+ 341

Duy trì kéo dài ở nhiệt độ phòng (2 tuần) vật liệu tạo ra chất rắn màu vàng.

Ví dụ 7: Điều chế 3-(4-bromo-2-fluoro-6-methoxyphenyl)-bixyclo[3.2.1]octan-2,4-dion



Dung dịch của 4-(4-bromo-2-fluoro-6-methoxybenzyliden)-3-oxa-bixyclo[3.2.1]octan-2-on (ví dụ xem minh họa 6, 38,956g) trong toluen (320mL) được tẩy sạch với nitơ. Dung dịch khuấy ở 21°C được thêm nhỏ giọt, qua 13 phút, chất phản ứng Eaton (bán trên thị trường, CAS 39394-84-8, 7,7% theo khối lượng phosphorus

pentoxit trong axit metansulfonic, 150mL). Hỗn hợp được gia nhiệt kèm khuấy đến 70°C và được gia nhiệt ở nhiệt độ này trong 80 phút.

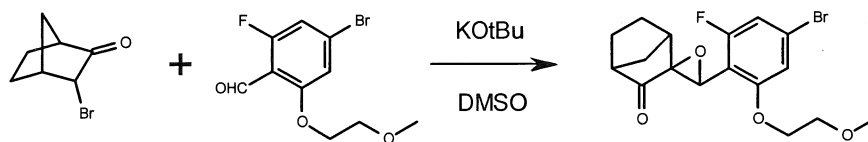
Hỗn hợp phản ứng được làm nguội đến 10°C và nước (50mL) được thêm nhỏ giọt duy trì nhiệt độ bên trong nằm trong khoảng từ 10 đến 16°C. Hỗn hợp này, lại duy trì nhiệt độ bên trong nằm trong khoảng từ 10 đến 16°C, được thêm natri hydroxit dạng nước 1,5 M (100mL) sau đó thêm natri hydroxit dạng nước 3M (1,5L) để thu được pH đến 14. Khi ở pH 14, hỗn hợp được làm ấm đến 24°C và được khuấy trong 30 phút.

Nước (750mL) và etyl axetat (400mL) được thêm và hỗn hợp được tách. Pha nước được rửa với etyl axetat (400mL) nữa. Pha nước được axit hóa đến pH 1 bằng cách thêm axit clohydric đậm đặc (khoảng 100mL) kèm khuấy. Chất rắn kết tủa thu được được lọc bỏ dưới chân không, được rửa với nước và được làm khô trong chân không để tạo ra 3-(4-bromo-2-flo-6-metoxy-phenyl)-bixyclo[3.2.1]octan-2,4-dion là chất rắn màu trắng.

$^1\text{H-NMR}$ (400MHz, CDCl_3) (các chất đồng phân đối hình quay có mặt) δ (delta) 6,93-6,98 (m, 1H), 6,88 (s, 1H), 6,18 (brs, 0,5H), 5,93 (brs, 0,5H), 3,79 (m, 3H), 3,00-3,02 (m, 2H), 2,07-2,27 (m, 3H), 1,91-2,00 (m, 1H), 1,72-1,83 (m, 1H), 1,61-1,69 (m, 1H).

LC-MS RT 0,65 phút MH^+ 341.

Ví dụ 8: Điều chế 3'-[4-bromo-2-flo-6-(2-metoxietoxy)-phenyl]spiro[norbornan-3,2'-oxiran]-2-on



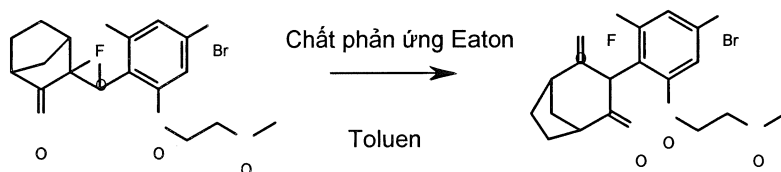
Kali tert-butoxit (dung dịch 1M trong tetrahydrofuran, 4,57ml) được thêm nhỏ giọt dung dịch khuấy của 4-bromo-2-flo-6-(2-metoxietoxy)benzaldehyt (ví dụ xem minh họa 1, 1,055g) và 3-bromonorbornan-2-on (0,864g) trong dimetylsulfoxit khan (19ml) ở nhiệt độ môi trường. Phản ứng được khuấy trong 1 giờ. Phản ứng được ngừng bằng amoni clorua dạng nước bão hòa và được chiết hai lần với etyl axetat. Các lớp hữu cơ kết hợp được làm khô với magie sulfat, được lọc và được cô dưới chân không.

3'-[4-bromo-2-flo-6-(2-metoxietoxy)phenyl]spiro[norbornan-3,2'-oxiran]-2-on được dùng thô trong bước tiếp theo mà không cần tinh chế.

Các hợp chất dưới đây có thể được điều chế sử dụng cùng phương pháp:

3'-[4-bromo-2-(diflometoxy)-6-flo-phenyl]spiro[norbornan-3,2'-oxiran]-2-on
 3'-(4-bromo-2-etoxy-6-flo-phenyl)spiro[norbornan-3,2'-oxiran]-2-on
 3'-(2,4-dibromo-6-metoxy-phenyl)spiro[norbornan-3,2'-oxiran]-2-on
 3'-(4-bromo-2-flo-6-metoxy-phenyl)-1,7,7-trimetyl-spiro[norbornan-3,2'-oxiran]-2-on
 3'-[4-bromo-2-flo-6-(2,2,2-trifloetoxy)phenyl]spiro[norbornan-3,2'-oxiran]-2-on.

Ví dụ 9: Điều chế 3-[4-bromo-2-flo-6-(2-metoxietoxy)phenyl]-bicyclo[3.2.1]octan-2,4-dion



3'-[4-bromo-2-flo-6-(2-metoxietoxy)phenyl]spiro[norbornan-3,2'-oxiran]-2-on thô (ví dụ xem minh họa 8) được khuấy trong toluen (19mL) và chất phản ứng Eaton (2,665mL) được thêm. Phản ứng được gia nhiệt đến 70°C trong 2 giờ.

Hỗn hợp phản ứng được làm nguội và được làm bazơ đến pH 14 sử dụng kali hydroxit 2M và được rửa hai lần với diclometan. Lớp nước được axit hóa đến pH 1 với axit clohydric đậm đặc và được chiết hai lần với diclometan. Các lớp hữu cơ kết hợp được làm khô với magie sulfat, được lọc và được cô dưới chân không chất rắn màu trắng nhạt. Phần lớn vật liệu này được sử dụng trong các phản ứng liên hợp chéo sau và một phần vật liệu (70mg) được tinh chế bằng sắc ký cột trên silica rửa giải với từ 0-80% etyl axetat trong iso-hexan để tạo ra 3-[4-bromo-2-flo-6-(2-metoxietoxy)phenyl]bicyclo[3.2.1]octan-2,4-dion là chất rắn màu trắng.

$^1\text{H-NMR}$ (400MHz, CD_3OD) δ (delta) 6,90-7,00 (m, 2H), 4,00-4,10 (m, 2H), 3,60-3,69 (m, 2H), 3,35-3,41 (m, 3H), 2,95-3,02 (m, 2H), 2,14-2,23 (m, 3H), 1,86-1,92 (m, 1H), 1,78-1,85 (m, 1H), 1,65-1,73 (m, 1H).

Các hợp chất sau đây có thể được điều chế sử dụng cùng phương pháp:

3-[4-bromo-2-(diflometoxy)-6-flo-phenyl]bicyclo[3.2.1]octan-2,4-dion. $^1\text{H-NMR}$ (400MHz, CDCl_3) δ (delta) 7,16-7,21 (m, 2H), 6,12-6,54 (m, 1H), 3,02-3,04 (m, 2H), 2,09-2,29 (m, 4H), 1,79-2,02 (m, 2H), 1,63-1,68 (m, 1H).

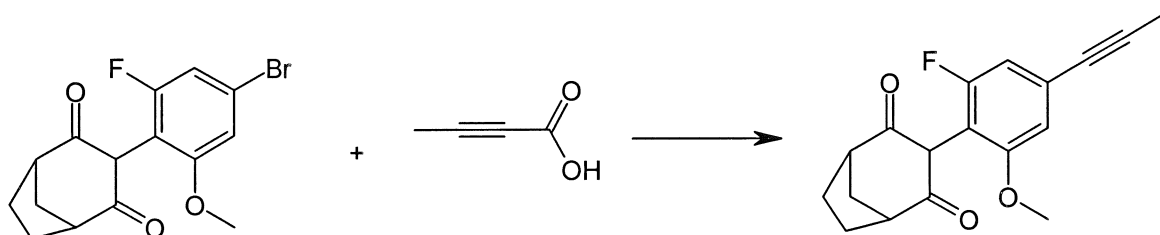
3-(4-bromo-2-etoxy-6-flo-phenyl)bicyclo[3.2.1]octan-2,4-dion $^1\text{H-NMR}$ (400MHz, CD_3OD) δ (delta) 6,93-6,99 (m, 1H), 6,87 (d, 1H), 6,04 (s, 1H), 3,90-4,07 (m, 2H), 3,02 (d, 2H), 2,08-2,24 (m, 3H), 1,92 (s, 1H), 1,59-1,77 (m, 2H), 1,29-1,37 (m, 3H).

3-(2,4-dibromo-6-methoxy-phenyl)bicyclo[3.2.1]octan-2,4-dion ¹H-NMR (400MHz, CD₃OD) δ (delta) 7,34-7,35 (m, 1H), 7,07-7,10 (m, 1H), 3,69-3,73 (m, 3H), 2,94-2,97 (m, 2H), 2,15-2,25 (m, 3H), 1,80-1,92 (m, 2H), 1,64-1,70 (m, 1H).

3-(4-bromo-2-flo-6-methoxy-phenyl)-5,8,8-trimetyl-bicyclo[3.2.1]octan-2,4-dion ¹H-NMR (400MHz, CD₃OD) δ (delta) 6,90-6,97 (m, 2H), 3,74-3,76 (m, 3H), 2,53-2,55 (m, 1H), 2,30-2,37 (m, 1H), 1,93-2,01 (m, 1H), 1,70-1,84 (m, 2H), 1,09-1,15 (m, 6H), 1,02 (s, 3H).

3-[4-bromo-2-flo-6-(2,2,2-trifloetoxy)phenyl]bicyclo[3.2.1]octan-2,4-dion ¹H-NMR (400MHz, CD₃OD) δ (delta) 7,03-7,24 (m, 2H), 4,42-4,53 (m, 2H), 3,00 (brs, 2H), 2,13-2,23 (m, 3H), 1,76-1,88 (m, 2H), 1,66-1,74 (m, 1H).

Ví dụ 10: Điều chế 3-(2-flo-6-methoxy-4-prop-1-ynyl-phenyl)-bicyclo[3.2.1]octan-2,4-dion (bảng T1, hợp chất A1)



Lọ vi sóng 5ml được thêm 3-(4-bromo-2-flo-6-methoxy-phenyl)bicyclo[3.2.1]octan-2,4-dion (ví dụ xem minh họa 9, 0,15g), axit 2-butynoic (bán trên thị trường, CAS 590-93-2, 0,0407g), bis(triphenylphosphin)paladi(II) diclorua (bán trên thị trường, CAS 13965-03-2, 0,0156g) và 1,4-bis-(diphenylphosphino)butan (bán trên thị trường, CAS 7688-25-7, 0,0187g). Lọ được hút chân không và được tẩy sạch với nitơ (x3). Metyl sulfoxit (2mL) được thêm sau đó thêm tetrabutylamoni florua (bán trên thị trường, CAS 429-41-4, 1mol/L trong THF, 1,32mL) và hỗn hợp được gia nhiệt trong lò phản ứng vi sóng ở 110°C trong 40 phút.

Hỗn hợp phản ứng được tách phần giữa nước và etyl axetat. Pha nước được chiết tiếp với etyl axetat (x2). Các lớp hữu cơ kết hợp được rửa với nước muối và được làm khô với magie sulfat. Cô đặc lớp hữu cơ khô tạo ra gồm màu vàng mà được tinh chế bằng sắc ký cột trên silica rửa giải với 0-100% etyl axetat trong iso-hexan để tạo ra 3-(2-flo-6-methoxy-4-prop-1-ynyl-phenyl)-bicyclo[3.2.1]octan-2,4-dion là chất rắn màu trắng nhạt.

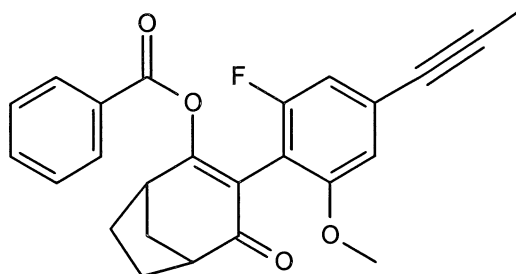
¹H-NMR (400MHz, CDCl₃) δ (delta) 6,70-6,81 (m, 2H), 3,71-3,77 (m, 3H), 3,19-3,22 (m, 1H), 3,02 (m, 1H), 2,08-2,28 (m, 4H), 2,04-2,05 (m, 3H), 1,92-1,97 (m, 1H), 1,60-1,67 (m, 1H).

LC-MS RT các chất đồng phân đối hình quay có mặt: hai đỉnh của bộ dò UV

thể hiện RT 0,67 và 0,68 phút, một đỉnh Corona ở 0,69 phút, MH+ 301.

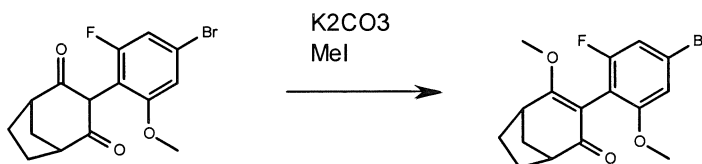
Hợp chất A2 đến A7 trong bảng T1 có thể được điều chế sử dụng phương pháp này hoặc phương pháp tương tự.

Ví dụ 11: Điều chế [3-(2-flo-6-metoxi-4-prop-1-ynyl-phenyl)-4-oxo-2-bixyclo[3.2.1]oct-2-enyl]benzoat



Dung dịch của 3-(2-flo-6-metoxi-4-prop-1-ynyl-phenyl)bixyclo[3.2.1]octan-2,4-dion (0,100g) và 4-(dimethylamino)pyridin (0,002g) trong diclometan (3,33mL) được thêm pyridin (0,054mL) và benzoyl clorua (0,058mL). Phản ứng được khuấy ở nhiệt độ phòng trong 1 giờ, và sau đó được cô đặc và được tinh chế bằng sắc ký cột trên silica rửa giải với 5-55% etyl axetat trong iso-hexan để tạo ra [3-(2-flo-6-metoxi-4-prop-1-ynyl-phenyl)-4-oxo-2-bixyclo[3.2.1]oct-2-enyl]benzoat (0,118 g).

Ví dụ 12: Điều chế 3-(4-bromo-2-flo-6-metoxi-phenyl)-2-metoxi-bixyclo[3.2.1]oct-2-en-4-on

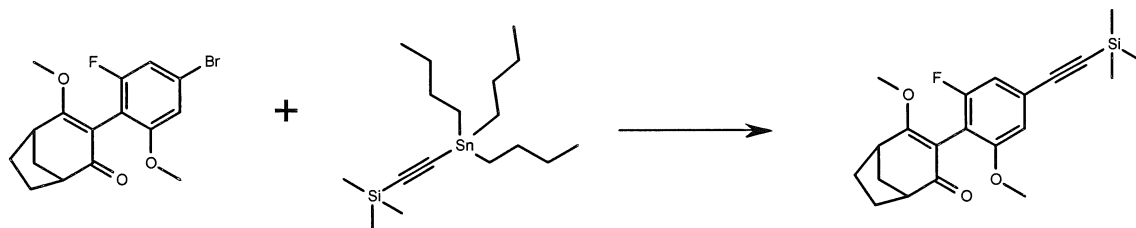


Dung dịch của 3-(4-bromo-2-flo-6-metoxi-phenyl)bixyclo[3.2.1]octan-2,4-dion (1 g, ví dụ như được điều chế trong ví dụ 7) trong axeton (29,31mL) được thêm kali cacbonat (1,02292g), iodometan (0,365mL) và nước (0,1466mL). Hỗn hợp phản ứng được khuấy ở nhiệt độ phòng trong 4 giờ. Ở điểm này một số giọt nước được thêm và phản ứng để khuấy ở thêm 3 giờ và sau đó giữ nguyên qua đêm.

Phản ứng được ngừng bằng nước và được chiết với diclometan (3x). Pha hữu cơ được kết hợp, được làm khô với magie sulfat và được cô đặc dưới áp suất giảm để tạo ra 3-(4-bromo-2-flo-6-metoxi-phenyl)-2-metoxi-bixyclo[3.2.1]oct-2-en-4-on (0,818g) là gồm màu nâu.

^1H NMR (500MHz, CDCl_3) δ (delta) 6,87 (ddd, 1H), 6,81 (d, 1H), 3,74 (d, 3H), 3,70 (d, 3H), 3,25 (t, 1H), 3,02 (d, 1H), 2,22 (dd, 1H), 2,16-2,08 (m, 2H), 1,95-1,88 (m, 1H), 1,84-1,76 (m, 1H), 1,67 (qd, 1H).

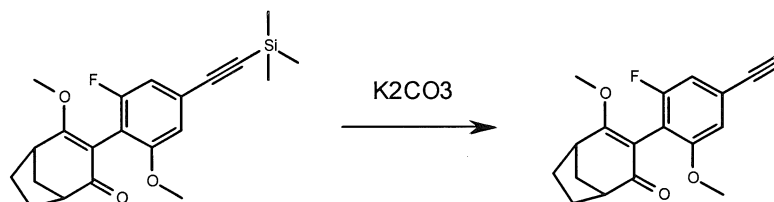
Ví dụ 13: Điều chế 3-[2-flo-6-metoxi-4-(2-trimetylsilyletynyl)phenyl]-2-metoxi-bixyclo[3.2.1]oct-2-en-4-on



Dung dịch của 3-(4-bromo-2-flo-6-metoxi-phenyl)-2-metoxi-bixyclo[3.2.1]oct-2-en-4-on (0,8g) trong toluen (40mL) được thêm [1,1'-bis(diphenylphosphino)feroxen]-diclopaladi (II) (0,08g, CAS 72287-26-4) và trimetyl(2-tributylstannyletynyl)silan (1 g) và phản ứng được khuấy ở 160 °C trong không khí trong 1,25 giờ. Phản ứng được để nguội đến nhiệt độ phòng và được lọc qua xêlit. Dịch lọc được tách phần giữa nước và etyl axetat và pha nước được chiết với etyl axetat nữa (3x). Các lớp hữu cơ kết hợp được rửa với nước muối, được làm khô với magie sulphat, được cô đặc dưới áp suất giảm và được tinh chế bằng sắc ký trên silica rửa giải với etyl axetat trong iso-hexan để tạo ra 3-[2-flo-6-metoxi-4-(2-trimetylsilyletynyl)phenyl]-2-metoxi-bixyclo[3.2.1]oct-2-en-4-on (0,609 g) là gồm màu nâu.

^1H NMR (500MHz, CDCl_3) δ (delta) = 6,80 (ddd, 1H), 6,75 (d, 1H), 3,77-3,72 (m, 3H), 3,66 (d, 3H), 3,21 (t, 1H), 3,04-3,00 (m, 1H), 2,22 (dd, 1H), 2,16-2,08 (m, 2H), 1,95-1,89 (m, 1H), 1,84-1,76 (m, 1H), 1,66 (qd, 1H), 0,24 (s, 9H).

Ví dụ 14: Điều chế 3-(4-etynyl-2-flo-6-metoxi-phenyl)-2-metoxi-bixyclo[3.2.1]oct-2-en-4-one

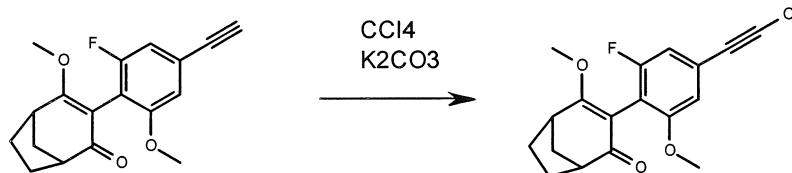


Dung dịch của 3-[2-flo-6-metoxi-4-(2-trimetylsilyletynyl)phenyl]-2-metoxi-bixyclo[3.2.1]oct-2-en-4-on (0,600g) trong metanol (16,1mL) được thêm kali cacbonat (0,452g) và hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ phòng trong 2 giờ.

Phản ứng được pha loãng với nước và được axit hóa với axit clohydric 2M và được chiết với diclometan (3x). Pha hữu cơ được kết hợp, được làm khô với magie sulfat và được cô đặc dưới áp suất giảm để tạo ra 3-(4-etynyl-2-flo-6-metoxi-phenyl)-2-metoxi-bixyclo[3.2.1]oct-2-en-4-on (415mg) là gồm màu nâu.

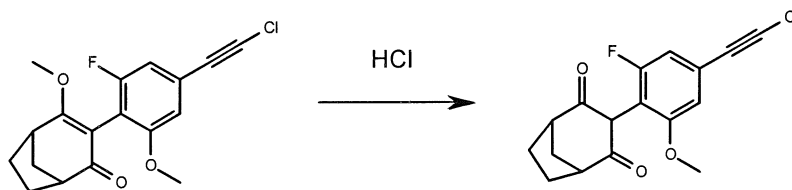
^1H NMR (400MHz, CDCl_3) δ () = 6,83 (ddd, 1H), 6,78 (d, 1H), 3,77-3,72 (m, 3H), 3,71-3,67 (m, 3H), 3,23 (brs, 1H), 3,06 (s, 1H), 3,02 (brs, 1H), 2,23 (d, 1H), 2,16-2,09 (m, 2H), 1,96-1,89 (m, 1H), 1,85-1,77 (m, 1H), 1,70-1,64 (m, 1H).

Ví dụ 15: Điều chế 3-[4-(2-cloetynyl)-2-flo-6-metoxi-phenyl]-2-metoxi-bixyclo[3.2.1]oct-2-en-4-on



Dung dịch của 3-(4-etylnyl-2-flo-6-metoxi-phenyl)-2-metoxi-bixyclo[3.2.1]oct-2-en-4-on (0,100g) trong cacbon tetraclorea (0,999mL) được thêm kali cacbonat (0,0514g) và tetrabutylamoni florua trihydrat (0,158g) và phản ứng được khuấy ở nhiệt độ phòng trong 1 giờ 45 phút. Hỗn hợp phản ứng được cô đặc và được sử dụng thô trong bước tiếp theo.

Ví dụ 16: Điều chế 3-[4-(2-cloetynyl)-2-flo-6-metoxi-phenyl]bixyclo[3.2.1]octan-2,4-dion



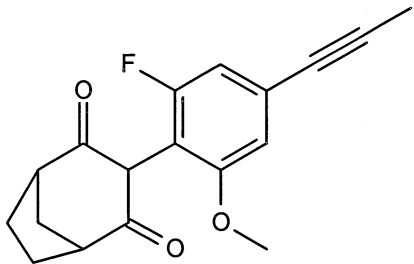
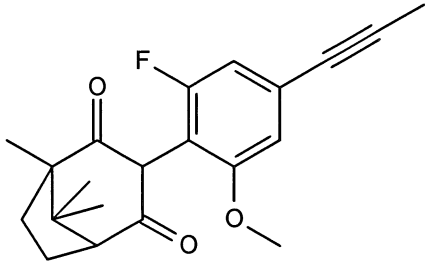
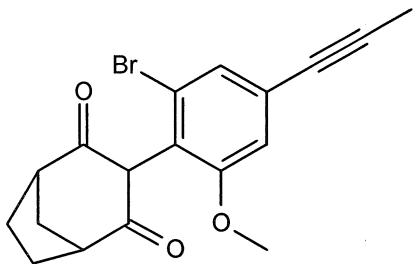
3-[4-(2-cloetynyl)-2-flo-6-metoxi-phenyl]-2-metoxi-bixyclo[3.2.1]oct-2-en-4-on thô được hòa tan trong axeton (1,99mL) và axit clohydric (2M) (1,99mL) được thêm và phản ứng được gia nhiệt ở 60°C trong 1 giờ.

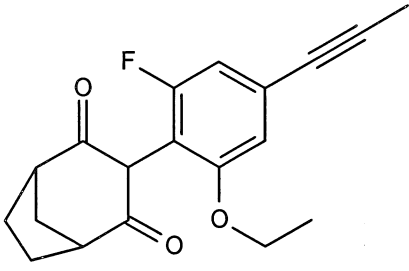
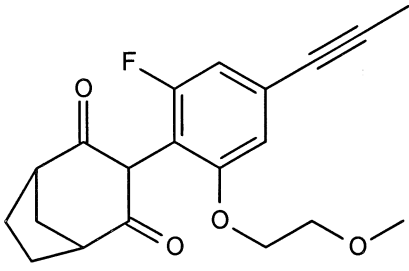
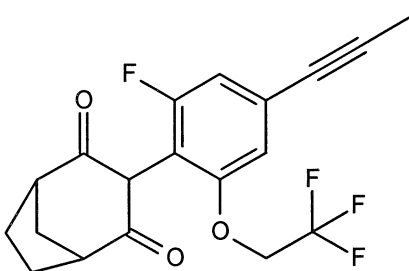
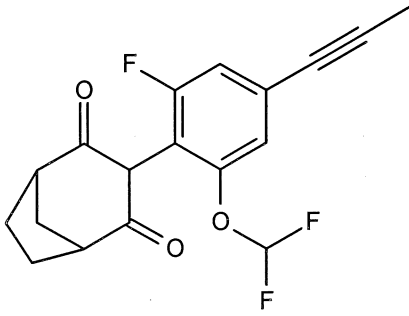
Phản ứng được cô đặc và được tinh chế bằng sắc ký trên silica rửa giải với etyl axetat trong iso-hexan để tạo ra 3-[4-(2-cloetynyl)-2-flo-6-metoxi-phenyl]bixyclo[3.2.1]octan-2,4-dion (25mg) là gồm không màu.

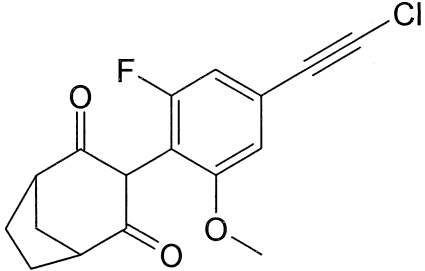
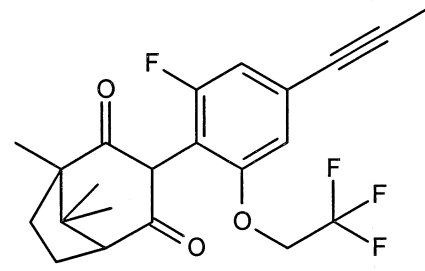
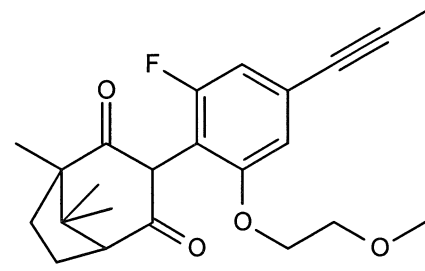
^1H NMR (400MHz, CDCl_3) δ (delta) = 6,85-6,72 (m, 2H), 3,77-3,69 (m, 3H), 2,99 (brs, 2H), 2,25-2,14 (m, 2H), 2,13-2,04 (m, 2H), 1,82 (t, 2H).

Các hợp chất bổ sung trong bảng T1 và bảng P1 dưới đây minh họa sáng chế, và là các phương án cụ thể và/hoặc được ưu tiên của các hợp chất có công thức (I) theo sáng chế. Phần lớn, các hợp chất này có thể thường được điều chế bởi (các) phương pháp tương tự với các phương pháp được bộc lộ trong các ví dụ trên đây và/hoặc được bộc lộ trong phần “quy trình điều chế hợp chất” trên đây sử dụng vật liệu ban đầu thích hợp, và/hoặc theo cách tương đồng.

Bảng T1

Hợp chất số	Cấu trúc	^1H NMR δ (delta) (CDCl_3 trừ khi có chỉ định), hoặc dữ liệu vật lý khác
A1		^1H NMR δ : 6,70-6,81 (m, 2H), 3,71-3,77 (m, 3H), 3,19-3,22 (m, 1H), 3,02 (m, 1H), 2,08-2,28 (m, 4H), 2,04-2,05 (m, 3H), 1,92-1,97 (m, 1H), 1,60-1,67 (m, 1H). Thiếu 1H do trao đổi proton của dion vòng.
A2		^1H NMR (d_4 -metanol) δ : 6,76-6,78 (m, 1H), 6,68-6,72 (m, 1H), 3,72-3,74 (m, 3H), 2,52-2,54 (m, 1H), 2,32-2,35 (m, 1H), 2,04 (s, 3H), 1,93-2,00 (m, 1H), 1,73-1,85 (m, 2H), 1,09-1,15 (m, 6H), 1,02 (s, 3H). Thiếu 1H do trao đổi proton của dion vòng.
A3		^1H NMR δ : 7,26-7,29 (m, 1H), 6,86-6,87 (m, 1H), 5,59-5,67 (m, 1H), 3,70-3,74 (m, 3H), 3,01-3,02 (m, 2H), 2,24-2,30 (m, 1H), 2,09-2,13 (m, 2H), 2,05 (s, 3H), 1,78-1,96 (m, 2H), 1,62-1,69 (m, 1H)

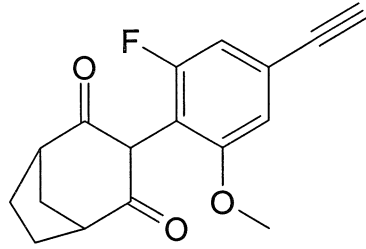
Hợp chất số	Cấu trúc	^1H NMR δ (delta) (CDCl_3 trừ khi có chỉ định), hoặc dữ liệu vật lý khác
A4		^1H NMR (d_4 -metanol) δ : 6,72-6,74 (m, 1H), 6,65-6,69 (m, 1H), 3,91-4,01 (m, 2H), 2,97-2,99 (m, 2H), 2,15-2,20 (m, 3H), 2,03 (s, 3H), 1,80-1,86 (m, 2H), 1,66-1,72 (m, 1H), 1,26-1,33 (m, 3H). Thiếu 1H do trao đổi proton của dion vòng.
A5		^1H NMR (d_4 -metanol) δ : 6,75-6,79 (m, 1H), 6,69-6,71 (m, 1H), 3,99-4,07 (m, 2H), 3,62-3,68 (m, 2H), 3,36-3,40 (m, 3H), 2,97-2,99 (m, 2H), 2,14-2,23 (m, 3H), 2,03 (s, 3H), 1,80-1,90 (m, 2H), 1,67-1,72 (m, 1H). Thiếu 1H do trao đổi proton của dion vòng.
A6		^1H NMR (d_4 -metanol) δ : 6,76-6,88 (m, 2H), 4,37-4,47 (m, 2H), 2,99 (brs, 2H), 2,14-2,22 (m, 3H), 2,03-2,05 (m, 3H), 1,83-1,85 (m, 2H), 1,68-1,72 (m, 1H). Thiếu 1H do trao đổi proton của dion vòng.
A7		^1H NMR (d_4 -metanol) δ : 6,94 - 7,01 (m, 2H), 6,34 - 6,77 (m, 1H), 3,01 (m, 2H), 2,18-2,21 (m, 3H), 2,05 (s, 3H), 1,80 - 1,88 (m, 2H), 1,69-1,74 (m, 1H). Thiếu 1H do trao đổi proton của dion vòng.

Hợp chất số	Cấu trúc	^1H NMR δ (delta) (CDCl_3 trừ khi có chỉ định), hoặc dữ liệu vật lý khác
A8		^1H NMR δ : 6,85-6,72 (m, 2H), 3,77-3,69 (m, 3H), 2,99 (brs, 2H), 2,25-2,14 (m, 2H), 2,13-2,04 (m, 2H), 1,82 (t, 2H).
A9		^1H NMR (d_4 -metanol) δ : 6,77-6,86 (m, 2H) 4,38-4,49 (m, 2H) 3,37 (brs, 1H) 2,51-2,57 (m, 1H) 2,34 (d, 1H) 2,03 (d, 3H) 1,91-1,99 (m, 1H) 1,73-1,84 (m, 1H) 1,07-1,16 (m, 6H) 1,02 (d, 3H). Thiếu 1H do trao đổi proton của dion vòng.
A10		^1H NMR (d_4 -metanol) δ : 6,77 (d, 1H) 6,70 (t, 1H) 3,98-4,08 (m, 2H) 3,63 (t, 2H) 3,35-3,36 (m, 3H) 3,24-3,26 (m, 1H) 2,50-2,55 (m, 1H) 2,31 (d, 1H) 2,03 (d, 3H) 1,71-2,01 (m, 2H) 1,07-1,14 (m, 6H) 1,03 (s, 3H). Thiếu 1H do trao đổi proton của dion vòng.

Cần lưu ý rằng một số hợp chất theo sáng chế có thể tồn tại dưới dạng hỗn hợp các chất đồng phân, đôi khi bao gồm các chất đồng phân đối hình quay, trong các điều kiện được sử dụng để thu được dữ liệu ^1H NMR. Khi xảy ra, dữ liệu mô tả được thông báo cho tất cả các đồng phân có mặt ở nhiệt độ môi trường trong dung môi xác định. Trừ khi có quy định khác, phổ (^1H) NMR proton được bộc lộ ở đây được ghi nhận ở nhiệt độ môi trường.

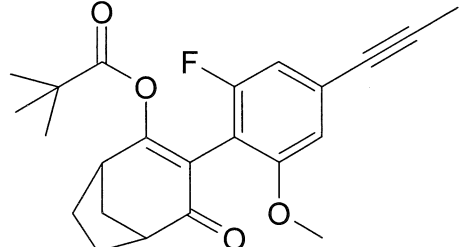
Bảng T2

Hợp chất B1 sau đây không phải là hợp chất có công thức (I) theo sáng chế. Tuy nhiên, khía cạnh khác của sáng chế mà không là phần sáng chế được bảo hộ đề xuất hợp chất B1, tùy ý có mặt là muối nông hóa học (ví dụ muối kim loại, muối sulfoni hoặc muối amoni) của chúng:

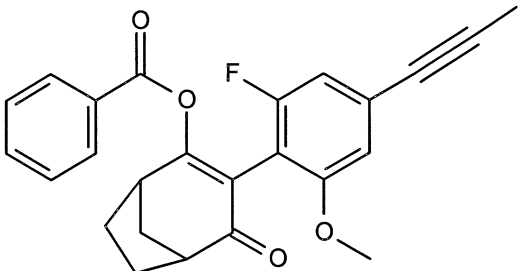
Hợp chất số	Cấu trúc	^1H NMR δ (delta) (CDCl_3 trừ khi có chỉ định), hoặc dữ liệu vật lý khác
B1		Hợp chất được tổng hợp và được thử (xem các Ví dụ sinh học)

Bảng P1

Các hợp chất bổ sung trong bảng P1 dưới đây minh họa sáng chế, và là các phương án được ưu tiên của các hợp chất có công thức (I) theo sáng chế.

Hợp chất số	Cấu trúc	^1H NMR δ (delta) (CDCl_3 trừ khi có chỉ định), hoặc dữ liệu vật lý khác
P1		^1H NMR (400MHz, CDCl_3) 6,64-6,74 (m, 2H), 3,70 (d, 3H), 3,03-3,14 (m, 2H), 2,39 (d, 1H), 2,11-2,24 (m, 2H), 2,01-2,09 (m, 1H), 2,04 (s, 3H), 1,75-1,88 (m, 1H), 1,71 (m, 1H), 1,02-1,09 (m, 9H)

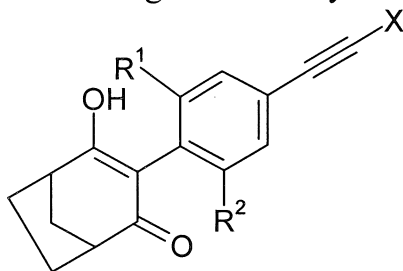
Hợp chất số	Cấu trúc	^1H NMR δ (delta) (CDCl_3 trừ khi có chỉ định), hoặc dữ liệu vật lý khác
P2		^1H NMR (400MHz, CDCl_3) 6,66-6,75 (m, 2H), 4,13-4,23 (m, 2H), 3,71 (d, 3H), 3,16-3,26 (m, 1H), 3,07-3,15 (m, 1H), 2,37 (d, 1H), 2,17 (m, 3H), 2,04 (s, 3H), 1,83 (m, 1H), 1,68-1,77 (m, 1H), 1,21-1,31 (m, 3H)
P3		^1H NMR (400MHz, CDCl_3) 6,65-6,75 (m, 2H), 4,77-4,89 (m, 1H), 3,68-3,74 (m, 3H), 3,20 (d, 1H), 3,06-3,15 (m, 1H), 2,36 (d, 1H), 2,11-2,23 (m, 2H), 2,01-2,11 (m, 4H), 1,83 (m, 1H), 1,73 (m, 1H), 1,20-1,29 (m, 6H)
P4		^1H NMR (400MHz, CDCl_3) 6,65-6,77 (m, 2H), 3,71 (d, 3H), 3,07-3,24 (m, 2H), 2,77-2,86 (m, 2H), 2,36 (m, 1H), 2,01-2,25 (m, 6H), 1,76-1,88 (m, 1H), 1,66-1,75 (m, 1H), 1,25 (m, 3H)

Hợp chất số	Cấu trúc	^1H NMR δ (delta) (CDCl_3 trừ khi có chỉ định), hoặc dữ liệu vật lý khác
P5		^1H NMR (400MHz, CDCl_3) 7,82-7,88 (m, 2H), 7,57 (m, 1H), 7,36-7,44 (m, 2H), 6,55-6,74 (m, 2H), 3,55-3,68 (m, 3H), 3,26-3,41 (m, 1H), 3,13-3,20 (m, 1H), 2,33-2,51 (m, 1H), 2,06-2,27 (m, 3H), 2,01 (s, 3H), 1,82-1,94 (m, 1H), 1,72-1,81 (m, 1H)

Các hợp chất của các bảng 1 đến 6 dưới đây cũng là các phương án cụ thể và/hoặc được ưu tiên của các hợp chất có công thức (I) theo sáng chế.

Phần lớn, các hợp chất này thường có thể được điều chế bằng (các) phương pháp tương tự với các phương pháp được bộc lộ trong các ví dụ trên đây và/hoặc được bộc lộ trong phần “quy trình điều chế hợp chất” trên đây sử dụng các vật liệu ban đầu thích hợp, và/hoặc theo cách tương đồng.

Bảng 1 bao gồm 28 hợp chất có công thức sau đây:



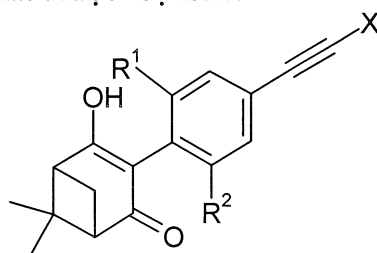
trong đó X, R^1 và R^2 là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 1

Hợp chất số	R^1	R^2	X
1.01	flo	metoxy	metyl
1.02	flo	etox	metyl
1.03	flo	triflometoxy	metyl
1.04	flo	diflometoxy	metyl
1.05	flo	2,2,2-trifloetox	metyl

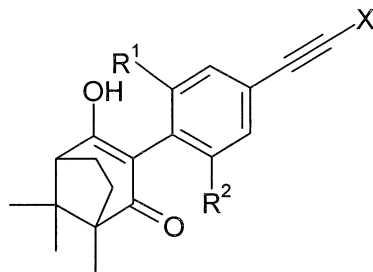
Hợp chất số	R ¹	R ²	X
1.06	flo	2-metoxyetoxy	metyl
1.07	flo	etynyl	metyl
1.08	flo	metoxy	clo
1.09	flo	etoxy	clo
1.10	flo	triflometoxy	clo
1.11	flo	diflometoxy	clo
1.12	flo	2,2,2-trifloetoxy	clo
1.13	flo	2-metoxyetoxy	clo
1.14	flo	etynyl	clo
1.15	brom	metoxy	metyl
1.16	brom	etoxy	metyl
1.17	brom	triflometoxy	metyl
1.18	brom	diflometoxy	metyl
1.19	brom	2,2,2-trifloetoxy	metyl
1.20	brom	2-metoxyetoxy	metyl
1.21	brom	etynyl	metyl
1.22	brom	metoxy	clo
1.23	brom	etoxy	clo
1.24	brom	triflometoxy	clo
1.25	brom	diflometoxy	clo
1.26	brom	2,2,2-trifloetoxy	clo
1.27	brom	2-metoxyetoxy	clo
1.28	brom	etynyl	clo

Bảng 2 bao gồm 28 hợp chất thuộc loại sau:



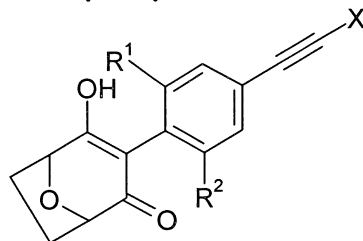
trong đó R¹, R² và X là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 3 bao gồm 28 hợp chất thuộc loại sau:



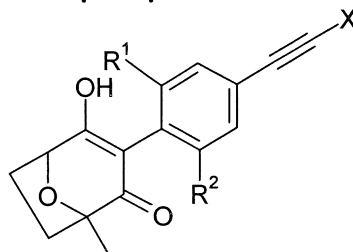
trong đó R^1 , R^2 và X là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 4 bao gồm 28 hợp chất thuộc loại sau:



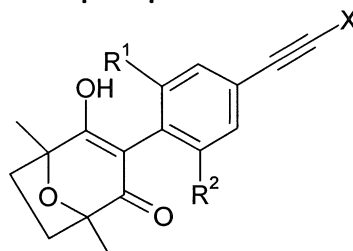
trong đó R^1 , R^2 và X là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 5 bao gồm 28 hợp chất thuộc loại sau:



trong đó R^1 , R^2 và X là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 6 bao gồm 28 hợp chất thuộc loại sau:



trong đó R^1 , R^2 và X là như được xác định trong bảng 1.

Ví dụ sinh học

Ví dụ sinh học 1: Thử nghiệm nhà kính đối với hoạt tính diệt cỏ

Hạt của nhiều loại cây thử nghiệm được gieo trong đất chuẩn ** trong các chậu. Sau khi trồng trong một ngày (trước nảy mầm) hoặc sau 8 ngày trồng (sau nảy mầm) trong các điều kiện được kiểm soát trong nhà kính (ở 24/16°C, ngày/đêm; 14 giờ sáng; 65% độ ẩm), cây được phun với dung dịch phun nước chiết xuất từ chế phẩm của dung dịch thành phần hoạt tính kỹ thuật (chất diệt cỏ thử) trong axeton/nước (50:50) chứa Tween 20 0,5% (polyoxyetylen sorbitan monolaurat, đăng ký CAS số 9005-64-5). Cây

thử nghiệm sau đó được trồng trong các điều kiện được kiểm soát trong nhà kính (ở 24/16°C, ngày/đêm; 14 giờ sáng; 65% độ ẩm) và tưới nước hai lần mỗi ngày. 13 ngày sau áp dụng chất diệt cỏ thử, đối với trước và sau nảy mầm, thử nghiệm được đánh giá bằng mắt đối với phần trăm tính độc đối với thực vật lên mỗi cây (khi 100% = tổn hại toàn bộ cho cây; 0% = không có tổn hại cho cây). Thông thường, mỗi chất diệt cỏ thử nghiệm chỉ được thử trên 1 cây trong mỗi loài đối với mỗi tỷ lệ áp dụng được thử và đối với mỗi thời gian áp dụng.

** “Đất chuẩn” trong ví dụ sinh học 1 thường là loại đất “cát” hoặc “đất sét có chứa cát”.

Ví dụ sinh học 1A: Áp dụng sau nảy mầm - Kết quả hoạt tính diệt cỏ (phần trăm tính độc đối với thực vật)

Cỏ dại thử nghiệm:

Cỏ dại hai lá mầm: ABUTH = *Abutilon theophrasti*; AMARE = *Amaranthus retroflexus*.

Cỏ dại một lá mầm: SETFA = *Setaria faberi*; ALOMY = *Alopecurus myosuroides*; ECHCG = *Echinochloa crus-galli*; ZEAMX = *Zea mays* (ngô, bắp, ví dụ ngô mọc tự nhiên).

Hợp chất số	Tỷ lệ áp dụng (g/ha)	ABUTH	AMARE	SETFA	ALOMY	ECHCG	ZEAMX
A1 (thử nghiệm 1)	250	80	30	100	100	100	100
A1 (thử nghiệm 1)	30	30	20	100	100	100	100
A1 (thử nghiệm 1)	8	0	0	80	80	100	100
A1 (thử nghiệm 2) *	250	20	30	90	-	100	100
A1 (thử nghiệm 2) *	30	0	0	70	-	90	90
A1 (thử nghiệm 2) *	8	0	0	50	-	70	80
A2	250	0	0	90	90	100	100
A2	30	0	0	90	80	100	100
A3	250	10	20	100	100	100	100
A3	30	0	0	80	70	90	90
A4	250	30	50	100	90	100	100
A4	30	10	20	70	80	90	100
A5	250	30	30	80	70	100	100
A6	250	20	50	80	80	100	100
A7	250	70	60	90	90	100	100
A7	30	0	50	70	60	90	80

A8	250	0	10	70	70	70	50
A9	250	0	0	20	10	10	20
A10	250	0	0	0	0	0	40
P1	250	80	40	100	100	100	100
P1	30	0	10	80	90	100	100
P1	8	0	0	70	60	80	100
P2	250	80	40	100	90	100	100
P2	30	30	20	90	90	100	100
P2	8	10	20	60	70	90	90
P3	250	80	40	100	100	100	100
P3	30	10	0	80	80	100	100
P3	8	10	0	60	60	80	90
P4	250	80	20	100	90	100	100
P4	30	20	30	80	90	100	100
P4	8	10	20	70	80	90	100
P5	250	80	20	90	90	100	100
P5	30	10	0	80	90	100	100
P5	8	0	0	60	70	90	100
B1	250	70	20	90	80	100	100
B1	30	50	0	70	20	70	90
B1	8	50	0	70	0	20	80

Ghi chú: A [-] trong bảng trên chỉ ra rằng hợp chất không được thử trên cây đó.

*Trong thử nghiệm 2 về hợp chất A1, hoạt tính diệt cỏ sau nảy mầm chống LOLPE (*Lolium perenne*) là 100%, 90% và 60%, ở 250, 30 và 8g/ha tương ứng.

Có thể thấy rằng hợp chất A1, có gốc 2-flo-6-metoxi-4-(prop-1-ynyl)-phenyl, thể hiện là chất diệt cỏ tiềm năng hơn (trong các thử nghiệm 1 và 2), đối với cỏ dại một lá mầm ALOMY và ECHCG, so với hợp chất B1 mà có gốc 2-flo-6-metoxi-4-etylnyl-phenyl, khi được áp dụng sau khi nảy mầm ở 30 và 8g/ha trong các điều kiện được quy định.

Ví dụ sinh học 1B: Áp dụng trước nảy mầm - Kết quả hoạt tính diệt cỏ (phần trăm tính độc đối với thực vật)

Cỏ dại thử nghiệm:

Cỏ dại hai lá mầm: ABUTH = *Abutilon theophrasti*; AMARE = *Amaranthus retroflexus*.

Cỏ dại một lá mầm: SETFA = *Setaria faberi*; ALOMY = *Alopecurus myosuroides*; ECHCG = *Echinochloa crus-galli*; ZEAMX = *Zea mays* (ngô, bắp, ví dụ ngô mọc tự nhiên).

Hợp chất số	Tỷ lệ áp dụng (g/ha)	ABUTH	AMARE	SETFA	ALOMY	ECHCG	ZEAMX
A1 (thử nghiệm 1)	250	20	20	100	100	100	100
A1 (thử nghiệm 1)	30	0	0	80	100	100	100
A1 (thử nghiệm 1)	8	0	0	50	70	100	60
A1 (thử nghiệm 2) *	250	0	30	80	-	100	100
A1 (thử nghiệm 2) *	30	0	0	40	-	30	90
A1 (thử nghiệm 2) *	8	0	0	40	-	30	70
A2	250	60	40	100	90	100	100
A2	30	60	10	70	70	90	60
A3	250	10	20	100	100	100	100
A4	250	30	50	70	90	100	100
A4	30	20	40	50	70	90	80
A5	250	20	50	60	40	80	90
A6	250	30	60	70	60	80	80
A7	250	30	70	70	100	100	100
A7	30	20	40	50	60	60	80
A8	250	0	40	60	60	60	70
A8	30	10	50	60	40	30	60
P1	250	30	70	80	100	100	100
P1	30	10	50	40	70	90	90
P2	250	60	70	90	100	100	100
P2	30	20	40	50	80	80	90
P3	250	10	60	80	100	100	100
P3	30	0	30	20	70	80	80
P4	250	40	60	90	100	100	100
P4	30	0	30	60	80	100	90
P5	250	60	70	80	100	100	100

P5	30	0	20	60	70	80	80
B1	250	0	30	100	90	90	100
B1	30	20	50	60	10	50	70
B1	8	10	30	40	0	50	0

Ghi chú: A [-] trong bảng trên chỉ ra rằng hợp chất không được thử trên cây đó.

*Trong thử nghiệm 2 cho hợp chất A1, hoạt tính diệt cỏ trước nảy mầm chống LOLPE (*Lolium perenne*) là 100%, 80% và 60%, ở 250, 30 và 8g/ha tương ứng.

Có thể thấy rằng hợp chất A1, có gốc 2-flo-6-metoxi-4-(prop-1-ynyl)-phenyl, thể hiện là chất diệt cỏ tiềm năng hơn (trong các thử nghiệm 1 và 2), đối với cỏ dại một lá mầm/cây ALOMY và ZEAMX, so với hợp chất B1 mà có gốc 2-flo-6-metoxi-4-etylnyl-phenyl, khi được áp dụng trước nảy mầm ở 30 và 8g/ha trong các điều kiện được quy định.

Ví dụ sinh học 2: Thử nghiệm nhà kính đối với hoạt tính diệt cỏ

Các hạt của các loài cây thử nghiệm một lá mầm và hai lá mầm khác nhau được gieo trong đất chuẩn trong chậu. Cây được trồng trong một ngày (đối với trước nảy mầm) hoặc trong khoảng 12 ngày (khoảng = 10-13 ngày) (đối với sau nảy mầm) trong các điều kiện được kiểm soát trong nhà kính (các loài khí hậu ấm ở 24/18°C, các loài khí hậu mát ở 20/16°C, cả ở ngày/đêm; 16 giờ sáng; 65 % độ ẩm).

“Chế phẩm dùng ngay”, được gọi là “IF50“, chứa 50g/lít (tức là 5% khối lượng/thể tích) thành phần hoạt tính “kỹ thuật” (tức là không có công thức) được điều chế bằng cách hòa tan thành phần hoạt tính trong hỗn hợp của dung môi hữu cơ và chất nhũ hóa, chi tiết của chúng được đưa ra trong bảng dưới đây. Sau đó IF50 này được trộn với lượng nhỏ thay đổi của axeton để giúp hòa tan, trước khi bổ sung 2% thể tích/thể tích dung dịch trong nước của chất hỗ trợ X-77 (mà là hỗn hợp của alkyl aryl polyoxyetylen glycol và axit béo tự do trong isopropanol, đăng ký CAS số 11097-66-8), làm chất pha loãng trong nước, để tạo ra dung dịch phun trong nước mà chứa nồng độ định trước của thành phần hoạt tính (mà thay đổi phụ thuộc vào tỷ lệ dùng thành phần hoạt tính cho cây) và 0,2% thể tích/thể tích chất hỗ trợ X-77. Dung dịch phun trong nước này sau đó được phun lên cây, sau một ngày trồng (đối với trước nảy mầm) hoặc sau 12 ngày trồng (đối với sau nảy mầm).

Bảng: Chế phẩm hỗn hợp gồm các dung môi hữu cơ và chất nhũ hóa được sử dụng làm bazơ cho chế phẩm dùng ngay (IF50).

Thành phần	Nhà cung cấp	Mô tả hóa học	Đăng ký CAS số	Lượng/% khối lượng/khối lượng
Emulsogen EL360 TM	Clariant	Etoxylat của dầu thầu dầu (làm chất nhũ hóa)	61791-12-6	11,12
N-metylpyrrolidon	được bán rộng rãi	1-metyl-2-pyrrolidon	872-50-4	44,44
Dowanol DPM TM glycol ete	Dow	dipropylen glycol monometyl ete	34590-94-8	44,44

Sau đó cây thử nghiệm được trồng, trong nhà kính trong các điều kiện được kiểm soát (ở 24/18°C hoặc 20/16°C (ngày/đêm) như được đề cập ở trên; ánh sáng 16 giờ; độ ẩm 65%) và tưới nước hai lần một ngày. Hoặc là 14 hoặc 15 ngày sau áp dụng chất diệt cỏ (14 hoặc 15 DAA) (đối với sau nảy mầm), hoặc 20 ngày sau áp dụng chất diệt cỏ (20 DAA) (đối với trước nảy mầm), cây thử nghiệm được đánh giá bằng mắt, và điểm phần trăm tính độc đối với thực vật được đánh giá được cho đối với mỗi áp dụng diệt cỏ trên mỗi loài cây (khi 100% = tổn hại toàn bộ cho cây; 0% = không có tổn hại cho cây).

Một số trong các cây thử nghiệm chính là như sau:

Cây trồng khí hậu mát: *Triticum aestivum* (TRZAW, lúa mì mùa đông), *Brassica napus* (BRSNN, cải dầu, cũng được gọi là dầu hạt cải dầu hoặc hạt cải dầu), *Beta vulgaris* (BEAVA, củ cải đường).

Cây trồng khí hậu ấm: *Glycine max* (GLXMA, đậu nành).

Cỏ một lá mầm khí hậu mát (“mùa mát”): *Alopecurus myosuroides* (ALOMY), *Avena fatua* (AVEFA), *Lolium perenne* (LOLPE), *Poa annua* (POAAN), *Bromus tectorum* (BROTE).

Cỏ một lá mầm khí hậu ấm (“mùa ấm”): *Setaria faberi* (SETFA), SORVU (*Sorghum bicolor* (L.) Moench ssp. *Bicolor*, hoặc *Sorghum vulgare* Pers.), *Digitaria sanguinalis* (DIGSA), *Echinochloa crus-galli* (ECHCG), *Brachiaria plantaginea* (BRAPL); *Zea mays* (ZEAMX, ngô, bắp, ví dụ ngô mọc tự nhiên).

Ví dụ sinh học 2: Kết quả hoạt tính diệt cỏ sau nảy mầm

Hợp chất Số	Tỷ lệ áp dụng (g/ha)	TRZAW	ZEAMX	GLXMA	BRNN	BEAVA	ALOMY	AVEFA	LOLPE	SETFA	SORVU	DIGSA	ECHCG	BRAPL
A1 (thử thử nghiệm 1)	250 g/ha	100	100	60	80	30	100	100	100	100	100	100	100	-
A1 * (thử thử nghiệm 1)	30 g/ha	80	100	20	40	10	90	80	80	70	100	100	100	-
A1 (thử thử nghiệm 2)	250 g/ha	90	100	10	80	20	90	100	100	100	100	100	100	100
A1 * (thử thử nghiệm 2)	30 g/ha	70	90	0	40	0	80	90	90	90	90	100	100	90
A2	250 g/ha	0	90	20	10	0	60	0	0	80	90	80	90	-
A7	250 g/ha	70	100	20	60	10	70	40	40	90	100	100	100	100
A7	125 g/ha	70	90	20	50	0	70	30	30	90	90	100	100	100
A7	30 g/ha	30	80	20	30	0	30	10	0	60	50	90	90	90
P1	250 g/ha	90	100	20	80	0	90	90	100	90	100	100	100	90
P1 *	30 g/ha	60	100	0	10	0	80	80	100	80	100	90	100	100
P3	250 g/ha	90	100	0	80	0	90	90	100	100	100	100	100	100
P3 *	30 g/ha	80	100	0	10	0	70	90	90	100	100	100	100	100

P4	250 g/ha	100	100	20	80	0	100	100	100	100	100	100	100	100
P4 *	30 g/ha	80	100	10	50	0	80	90	90	90	100	80	90	100
P5	250 g/ha	-	100	0	80	0	90	90	100	90	100	100	100	100
P5 *	30 g/ha	50	90	0	50	0	70	80	80	80	80	100	100	90
X9 (đối chiếu)	30 g/ha	0	-	0	0	-	0	0	0	70	-	30	20	70
X10 (đối chiếu) (thử nghiệm 1)	30 g/ha	0	-	0	0	-	80	30	70	100	- ***	100	50	80
X10 ** (đối chiếu) (thử nghiệm 2)	30 g/ha	30	80	0	0	0	70	80	70	90	60	90	90	90
Hợp chất Số	Tỷ lệ áp dụng (g/ha)	TRZAW	ZEAMX	GLXMA	BRSNN	BEAVA	ALOMY	AVEFA	LOLPE	SETFA	SORVU	DIGSA	ECHCG	BRAPL

Lưu ý 1: A [-] trong bảng trên chỉ ra rằng hợp chất không được thử trên cây đó.

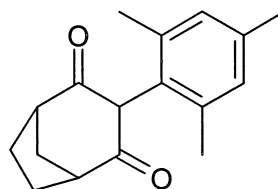
Lưu ý 2: Dữ liệu khác từ ví dụ sinh học 2 được thể hiện trong *, **, và *** dưới đây:

*Hợp chất A1 (thử nghiệm 1), A1 (thử nghiệm 2), P1, P3, P4 và P5 của sáng chế thể hiện tính độc đối với thực vật đối với *Poa annua* (POAAN) bằng 70%, 70%, 80%, 80%, 90% và 80% tương ứng, khi được áp dụng sau khi nảy mầm ở 30g/ha. Hợp chất A1 (thử nghiệm 1), A1 (thử nghiệm 2), P1, P3, P4 và P5 của sáng chế thể hiện

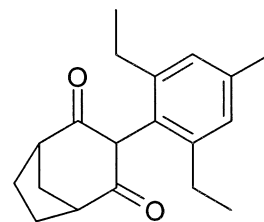
tính độc đối với thực vật đối với *Bromus tectorum* (BROTE) bằng 70%, 70%, 70%, 70%, 90% và 50% tương ứng, khi được áp dụng sau khi nảy mầm ở 30 g/ha.

**Hợp chất đối chiếu (hợp chất so sánh) X10 (thử nghiệm 2) thể hiện 0% tính độc đối với thực vật đối với *Poa annua* (POAAN) và 40% tính độc đối với thực vật đối với *Bromus tectorum* (BROTE), khi được áp dụng sau khi nảy mầm ở 30g/ha.

***Hợp chất đối chiếu (hợp chất so sánh) X10 (thử nghiệm 1) thể hiện 70% tính độc đối với thực vật đối với các loài *Sorghum* không xác định khi được áp dụng sau khi nảy mầm ở 30g/ha.



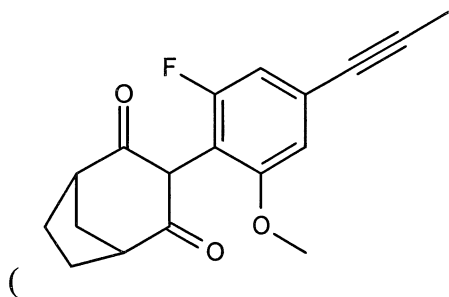
Lưu ý 3: Hợp chất đối chiếu X9 là



Lưu ý 4: Hợp chất đối chiếu (hợp chất so sánh) X10 là ; đây là hợp chất 21.115 được bộc lộ ở trang 105 của tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 01/17972 A2.

Lưu ý 5: Dữ liệu hoạt tính diệt cỏ (ví dụ sau nảy mầm) được thể hiện ở trên trong ví dụ sinh học 2 đối với hợp chất đối chiếu/ hợp chất so sánh X9 và X10 (thử nghiệm 1) được xem như đã đo một số năm trước (khoảng năm 2003), có thể sử dụng biến thể của phương pháp thử nghiệm được mô tả trên đây. Tương tự, đối với hoạt tính sau nảy mầm của X9 và X10 (thử nghiệm 1), hiện không biết chính xác bao nhiêu ngày sau áp dụng chất diệt cỏ thì tính độc đối với thực vật trên cây được đo. Do đó, đối với hợp chất đối chiếu X10, dữ liệu đối với X10 (thử nghiệm 2) (được thực hiện khoảng năm 2014 ở cùng thời điểm với thời điểm của hợp chất A1, thử nghiệm 2) có khả năng tương thích hơn với dữ liệu trong ví dụ sinh học 2 cho các hợp chất của sáng chế, cụ thể là hợp chất A1, hơn dữ liệu đối với X10 (thử nghiệm 1).

Từ các kết quả được thể hiện ở trên trong ví dụ sinh học 2, hợp chất A1



hơn ở 30g/ha chống cỏ dại một lá mầm *Lolium perenne* (LOLPE), *Poa annua* (POAAN), *Bromus tectorum* (BROTE) và SORVU (*Sorghum bicolor* (L.) Moench ssp. *Bicolor*, hoặc *Sorghum vulgare* Pers.), hơn hoạt tính của hợp chất đối chiếu (hợp chất so sánh) X10 được bộc lộ là hợp chất 21.115 trong tài liệu công bố đơn quốc tế số WO 01/17972 A2.

Ví dụ sinh học 3

Thử nghiệm đối với ví dụ sinh học 3: Thử nghiệm trong nhà kính về hoạt tính diệt cỏ, nhờ sử dụng các hệ hỗ trợ khác nhau

Vật liệu và phương pháp

Áp dụng thuốc diệt cỏ: dùng phun lên lá sau nảy mầm, 200L/ha, thường là một hoặc hai lần lặp đối với cỏ dại (tùy thuộc vào tỷ lệ dùng), và hai lần lặp lại với đậu nành.

Khí hậu: điều kiện ẩm chuẩn (nhiệt đới), trong nhà kính. Đặc biệt là, điều kiện trong nhà kính là 24 °C / 18°C ngày/đêm; 16/8 giờ sáng/tối; độ ẩm 65%.

Cây: áp dụng diệt cỏ được thực hiện ở các giai đoạn phát triển sau đây đối với các cây mà bao gồm, không kể những cây khác, một hoặc nhiều cây sau đây (thường áp dụng diệt cỏ được thực hiện trên ít nhất các cây sau đây: DIGSA, ELEIN, SETFA, ZEAMX, GLXMA Nikko, và GLXMA TMG133, và thường còn hoặc là BRADC hoặc BRAPP):

Brachiaria decumbens (BRADC) – giai đoạn phát triển (GS) 12 hoặc 13 (hoặc GS 12) – hoặc, nếu BRADC không được sử dụng, sau đó thường là *Brachiaria platyphylla* (BRAPP) – giai đoạn phát triển 12 hoặc 13

Digitaria sanguinalis (DIGSA) – giai đoạn phát triển 12 hoặc 13

Eleusine indica (ELEIN) – giai đoạn phát triển 12 hoặc 13

Setaria faberi (SETFA) – giai đoạn phát triển 12 hoặc 13

Echinochloa crus-galli (ECHCG) – giai đoạn phát triển 12 hoặc 13

Sorghum halepense (annual) (SORHA) – giai đoạn phát triển 12 hoặc 13

Panicum dichotomiflorum (PANDI) – giai đoạn phát triển 12 hoặc 13

cây trồng *Zea mays* (ZEAMX, bắp/ngô, ví dụ có thể xảy ra là ngô mọc tự nhiên) “Garland” – giai đoạn phát triển 12 hoặc 13

cây trồng *Glycine max* (GLXMA, đậu nành) “Nikko” – giai đoạn phát triển: ba lá chết thứ nhất

cây trồng *Glycine max* (GLXMA, đậu nành) “TMG133” – mà là cây trồng đậu nành kháng glyphosat Roundup Ready™ TMG133 (thường có từ Monsanto ở Brazil) – giai đoạn phát triển: ba lá chết thứ nhất.

Chế phẩm diệt cỏ được thử:

Mỗi hợp chất thử nghiệm được áp dụng với một trong các hệ hỗ trợ sau đây (tất cả tỷ lệ phần trăm là nồng độ cuối trong hỗn hợp phun dạng nước):

Hệ hỗ trợ 1: 0,5% thể tích/thể tích Adigor™ *, 1,0% thể tích/thể tích AMS (amoni sulphat) và 12,5% thể tích/thể tích IPA (rượu isopropylic).

Hệ hỗ trợ 2: 0,5% thể tích/thể tích Hexamoll™ DINCH **, 1,0% thể tích/thể tích AMS (amoni sulphat) và 12,5% thể tích/thể tích IPA (rượu isopropylic).

Hệ hỗ trợ 3: 0,5% thể tích/thể tích tris-(2-ethylhexyl) phosphat (“TEHP”), 1,0% thể tích/thể tích AMS (amoni sulphat) và 12,5% thể tích/thể tích IPA (rượu isopropyl).

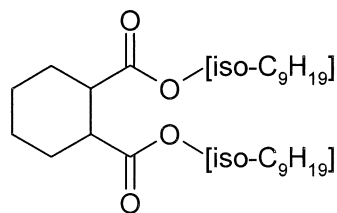
*Adigor™ (hiện bán sẵn ở nhiều nước từ hãng Syngenta) là chế phẩm cô đặc nhũ hóa bao gồm:

(i) rượu được etoxyl hóa, phổ biến là bao gồm rượu bậc cao được etoxyl (ví dụ, etoxylat của rượu trong đó rượu này là rượu nằm trong khoảng C₁₂-C₂₂); và

(ii) hỗn hợp của hydrocacbon nặng thơm, phổ biến là bao gồm (ví dụ, bao gồm 50% hoặc nhiều hơn hydrocacbon nặng thơm của) hỗn hợp của naphtalen mà mỗi trong số đó được thế bởi một hoặc nhiều alkyl trong đó (các) alkyl này có tổng cộng 1-4 nguyên tử cacbon trên mỗi phân tử naphtalen (ví dụ, Solvesso 200 ND™); và

(iii) khoảng 47% khối lượng và/hoặc 45% khối lượng/thể tích (đối với chế phẩm cô đặc nhũ hóa) của dầu hạt cải dầu metyl hóa (metyl este của dầu hạt cải dầu) (ví dụ, Agnique ME 18 RD-F™), làm chất hỗ trợ.

**Hexamoll™ DINCH™ là di-isononyl este của axit 1,2-cyclohexan



dicarboxylic (, đăng ký CAS số 166412-78-8), và thường được bán từ hãng BASF. “Isononyl” trong ngữ cảnh này được hiểu là hỗn hợp của hai hoặc nhiều chất đồng phân phân nhánh của C₉H₁₉.

Phương pháp:

Hạt của cây cỏ (bao gồm mọc tự nhiên), thường bao gồm, trong số khác, *Digitaria sanguinalis* (DIGSA), *Eleusine indica* (ELEIN), *Setaria faberi* (SETFA), *Zea mays* (ZEAMX, ngô), và đôi khi cả [hoặc là *Brachiaria decumbens* (BRADC) hoặc *Brachiaria platyphylla* (BRAPP)], được gieo trong các khay hạt (máng) chứa đất sét pha (pH 7,0, 2,2% chất hữu cơ, “máng trộn A”); và hạt đậu nành được gieo trong các chậu chứa cùng loại đất với 3 cây đậu nành non mỗi chậu. Các cây được phun chất diệt cỏ thử nghiệm khi chúng đạt các giai đoạn sinh trưởng nêu trên.

Dung dịch diệt cỏ thử nghiệm được điều chế bằng cách trộn các phân ước thích hợp của (các) chất thử nghiệm và một trong các hệ hỗ trợ được chỉ ra ở trên *** trong nước khử ion để tạo ra nồng độ xử lý mong muốn.

Áp dụng diệt cỏ được thực hiện dưới dạng phun lên lá, nhờ sử dụng xe phun. Sau khi áp dụng diệt cỏ, cây được tưới nước hai lần mỗi ngày suốt quá trình thử nghiệm.

Đánh giá bằng mắt % thiệt hại diệt cỏ được thực hiện 7 và 14 ngày sau khi áp dụng diệt cỏ (DAA) (hoặc, trong một số ít trường hợp, 7 và 15 DAA), và kết quả được ghi nhận dưới dạng % thiệt hại diệt cỏ biểu kiến trong đó 0% = không có thiệt hại cho cây và 100% = toàn bộ cây bị tiêu diệt.

***Hệ hỗ trợ = hoặc là AdigorTM hoặc Hexamoll DINCHTM hoặc tris-(2-ethylhexyl) phosphat ở 0,5% thể tích/thể tích, và 12,5% thể tích/thể tích IPA (rượu isopropyl), và 1,0% thể tích/thể tích AMS (amoni sulphat); tất cả tỷ lệ phần trăm là nồng độ cuối trong hỗn hợp phun nước.

Ví dụ sinh học 3: Hoạt tính sau nảy mầm – kết quả ở 14 hoặc 15 ngày sau khi áp dụng diệt cỏ

Hợp chất A1, A3, A4, A5, A6, A7, A8, P1, P2 và P4, mà là hợp chất có công thức (I) theo sáng chế, được thử trong phương pháp thử nghiệm cơ bản như được mô tả ở trên.

Hợp chất A3, A4, A5, A6 và A7 được thử sử dụng 0,5% thể tích/thể tích tris-(2-ethylhexyl) phosphat + 1,0% thể tích/thể tích AMS + 12,5% thể tích/thể tích hệ hỗ trợ IPA. Hợp chất A8, P1, P2 và P4 được thử sử dụng 0,5% thể tích/thể tích AdigorTM + 1,0% thể tích/thể tích AMS + 12,5% thể tích/thể tích hệ hỗ trợ IPA. Hợp chất A1 được thử sử dụng 0,5% thể tích/thể tích Hexamol DinchTM + 1,0% thể tích/thể tích AMS + 12,5% thể tích/thể tích hệ hỗ trợ IPA.

Phần trăm thiệt hại do diệt cỏ/kiểm soát cây, ở 14 ngày sau khi áp dụng diệt cỏ (Days After herbicide Application - DAA) (hoặc, trong một số ít trường hợp, ở 15 DAA), đối với các hợp chất thử nghiệm và đối với một số cây thử nghiệm, là nằm trong khoảng sau.

Kiểm soát *Brachiaria decumbens* (BRADC), cỏ dại khí hậu ẩm (mùa ẩm)

Ở 14 DAA, một số hợp chất thử nghiệm (hợp chất A1 hoặc A7) thể hiện phần trăm kiểm soát (phần trăm tính độc đối với thực vật trên) *Brachiaria decumbens* (BRADC) trong khoảng từ 90% đến 97%, khi được áp dụng sau khi nảy mầm ở tỷ lệ áp dụng bằng 8g/ha.

Ở 14 hoặc 15 DAA, một số hợp chất thử nghiệm (hợp chất P1, P2 hoặc P4) thể hiện phần trăm kiểm soát *Brachiaria decumbens* (BRADC) trong khoảng từ 70% đến 80%, khi được áp dụng sau khi nảy mầm ở tỷ lệ áp dụng bằng 8g/ha.

Ở 14 DAA, hợp chất A8 thể hiện phần trăm kiểm soát *Brachiaria decumbens* (BRADC) bằng 15%, khi được áp dụng sau khi nảy mầm ở tỷ lệ áp dụng bằng 8g/ha.

Kiểm soát *Digitaria sanguinalis* (DIGSA), cỏ dại khí hậu ẩm (mùa ẩm)

Ở 14 hoặc 15 DAA, một số hợp chất thử nghiệm (hợp chất A1, A3, A4, A7, P2 hoặc P4) thể hiện phần trăm kiểm soát (phần trăm tính độc đối với thực vật trên) *Digitaria sanguinalis* (DIGSA) trong khoảng từ 85% đến 98%, khi được áp dụng sau khi nảy mầm ở tỷ lệ áp dụng bằng 8g/ha.

Ở 14 hoặc 15 DAA, hợp chất P1 thể hiện phần trăm kiểm soát *Digitaria sanguinalis* (DIGSA) bằng 70%, khi được áp dụng sau khi nảy mầm ở tỷ lệ áp dụng bằng 8g/ha.

Ở 14 DAA, hợp chất A8 thể hiện phần trăm kiểm soát *Digitaria sanguinalis* (DIGSA) bằng 30%, khi được áp dụng sau khi nảy mầm ở tỷ lệ áp dụng bằng 8g/ha.

Ở 14 hoặc 15 DAA, hợp chất A6 thể hiện phần trăm kiểm soát *Digitaria sanguinalis* (DIGSA) bằng 5%, khi được áp dụng sau khi nảy mầm ở tỷ lệ áp dụng bằng 8g/ha.

Ở 14 hoặc 15 DAA, hợp chất A5 thể hiện phần trăm kiểm soát *Digitaria sanguinalis* (DIGSA) bằng 0%, khi được áp dụng sau khi nảy mầm ở tỷ lệ áp dụng bằng 8g/ha.

Kiểm soát *Eleusine indica* (ELEIN), cỏ dại khí hậu ẩm (mùa ẩm)

Ở 14 hoặc 15 DAA, một số hợp chất thử nghiệm (hợp chất A1, A7, P2 hoặc P4) thể hiện phần trăm kiểm soát (phần trăm tính độc đối với thực vật trên) *Eleusine indica*

(ELEIN) trong khoảng từ 90% đến 98%, khi được áp dụng sau khi nảy mầm ở tỷ lệ áp dụng bằng 8g/ha.

Ở 14 hoặc 15 DAA, một số hợp chất thử nghiệm (hợp chất A4 hoặc P1) thể hiện phần trăm kiểm soát *Eleusine indica* (ELEIN) trong khoảng từ 75% đến 85%, khi được áp dụng sau khi nảy mầm ở tỷ lệ áp dụng bằng 8g/ha.

Ở 15 DAA, hợp chất A3 thể hiện phần trăm kiểm soát *Eleusine indica* (ELEIN) bằng 55%, khi được áp dụng sau khi nảy mầm ở tỷ lệ áp dụng bằng 8g/ha.

Ở 14 hoặc 15 DAA, một số hợp chất thử nghiệm (hợp chất A6 hoặc A8) thể hiện phần trăm kiểm soát *Eleusine indica* (ELEIN) bằng 5%, khi được áp dụng sau khi nảy mầm ở tỷ lệ áp dụng bằng 8g/ha.

Ở 14 hoặc 15 DAA, hợp chất A5 thể hiện phần trăm kiểm soát *Eleusine indica* (ELEIN) bằng 0%, khi được áp dụng sau khi nảy mầm ở tỷ lệ áp dụng bằng 8g/ha.

Kiểm soát *Setaria faberi* (SETFA), cỏ dại khí hậu ẩm (mùa ẩm)

Ở 14 hoặc 15 DAA, một số hợp chất thử nghiệm (hợp chất A1, A3, A4 hoặc A7) thể hiện phần trăm kiểm soát (phần trăm tính độc đối với thực vật trên) *Setaria faberi* (SETFA) trong khoảng từ 85% đến 90%, khi được áp dụng sau khi nảy mầm ở tỷ lệ áp dụng bằng 8g/ha.

Ở 14 hoặc 15 DAA, một số hợp chất thử nghiệm (hợp chất P1, P2 hoặc P4) thể hiện phần trăm kiểm soát *Setaria faberi* (SETFA) trong khoảng từ 65% đến 75%, khi được áp dụng sau khi nảy mầm ở tỷ lệ áp dụng bằng 8g/ha.

Ở 14 hoặc 15 DAA, một số hợp chất thử nghiệm (hợp chất A5 hoặc A6) thể hiện phần trăm kiểm soát *Setaria faberi* (SETFA) bằng 25%, khi được áp dụng sau khi nảy mầm ở tỷ lệ áp dụng bằng 8g/ha.

Ở 14 DAA, hợp chất A8 thể hiện phần trăm kiểm soát *Setaria faberi* (SETFA) bằng 10%, khi được áp dụng sau khi nảy mầm ở tỷ lệ áp dụng bằng 8g/ha.

Kiểm soát *Zea mays* (ZEAMX, ngô), cây cỏ dại khí hậu ẩm (mùa ẩm)

Zea mays (ZEAMX, bắp/ngô) thường thể hiện là cỏ dại “mọc tự nhiên” (ngô “mọc tự nhiên”) trong ruộng khi chúng được trồng làm cây trong ruộng mùa vụ phát triển trước và khi cây trên cánh đồng hiện không phải là ngô.

Ở 14 hoặc 15 DAA, một số hợp chất thử nghiệm (hợp chất A1, A3, A4, A7, P1, P2 hoặc P4) thể hiện phần trăm kiểm soát (phần trăm tính độc đối với thực vật trên) *Zea mays* (ZEAMX, corn) trong khoảng từ 90% đến 100%, khi được áp dụng sau khi nảy mầm ở tỷ lệ áp dụng bằng 8g/ha.

Ở 14 hoặc 15 DAA, một số hợp chất thử nghiệm (hợp chất A5 hoặc A8) thể hiện phần trăm kiểm soát *Zea mays* (ZEAMX, ngô) trong khoảng từ 15% đến 30%, khi được áp dụng sau khi nảy mầm ở tỷ lệ áp dụng bằng 8g/ha.

Ở 14 hoặc 15 DAA, hợp chất A6 thể hiện phần trăm kiểm soát *Zea mays* (ZEAMX, ngô) bằng 0%, khi được áp dụng sau khi nảy mầm ở tỷ lệ áp dụng bằng 8g/ha.

Độc tính thực vật trên cây *Glycine max* (GLXMA, đậu nành) “Nikko”

Ở 14 hoặc 15 DAA, hợp chất thử nghiệm (hợp chất A1, A3, A4, A5, A6, A7, A8, P1, P2 hoặc P4) thể hiện phần trăm tính độc đối với thực vật trên cây *Glycine max* (GLXMA, đậu nành) “Nikko” trong khoảng từ 2% đến 15%, khi được áp dụng sau khi nảy mầm ở tỷ lệ áp dụng bằng 120g/ha.

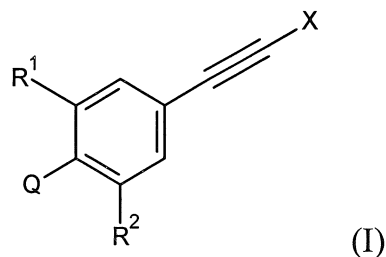
Độc tính thực vật trên cây *Glycine max* (GLXMA, đậu nành) “TMG133”

Cây *Glycine max* (GLXMA, đậu nành) “TMG133” là cây đậu nành kháng glyphosat Roundup ReadyTM TMG133, và thường có từ Monsanto ở Brazil.

Ở 14 hoặc 15 DAA, hợp chất thử nghiệm (hợp chất A1, A3, A4, A5, A6, A7, A8, P1, P2 hoặc P4) thể hiện phần trăm tính độc đối với thực vật trên cây *Glycine max* (GLXMA, đậu nành) “TMG133” trong khoảng từ 1% đến 10%, khi được áp dụng sau khi nảy mầm ở tỷ lệ áp dụng bằng 120g/ha.

YÊU CẦU BẢO HỘ

1. Hợp chất có công thức (I) :



trong đó:

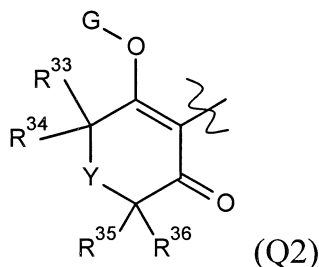
X là metyl hoặc clo;

R¹ là flo hoặc brom;

R² là etynyl, C₁-C₃alkoxy-, C₁-C₃haloalkoxy-, hoặc C₁-C₃alkoxy-C₁-C₃alkoxy-;

và

Q là nhóm có công thức Q2:



trong đó trong Q2:

R³³ và R³⁶, độc lập với nhau, là hydro, C₁-C₅alkyl, C₂-C₄alkenyl, C₂-C₄alkynyl, C₁-C₂floalkyl, C₁-C₃alkoxyC₁-C₃alkyl, C₁-C₃alkylthioC₁-C₃alkyl, C₁-C₃alkylsulfinylC₁-C₃alkyl, C₁-C₃alkylsulfonylC₁-C₃alkyl, C₃-C₄xycloalkyl, hoặc heteroxyclyl đơn vòng có 4, 5 hoặc 6 cạnh không được thể có một nguyên tử khác loại trên vòng độc lập được chọn từ oxy, lưu huỳnh và nitơ, heteroxyclyl này được gắn ở nguyên tử cacbon trên vòng trong heteroxyclyl ;

với điều kiện là không nhiều hơn một trong số R³³ và R³⁶ là alkenyl, alkynyl, alkoxyalkyl, alkylthioalkyl, alkylsulfinylalkyl, alkylsulfonylalkyl, xycloalkyl hoặc heteroxyclyl; và

R³⁴ và R³⁵ đều là -(CH₂)_{n34}- hoặc -(CH₂)_{n35}-C(R^{37a})(R^{37b})-(CH₂)_{n36}-;

trong đó R^{37a} là C₁-C₂alkyl; R^{37b} là hydro hoặc C₁-C₂alkyl;

n₃₄ là 1, 2 hoặc 3; và

n₃₅ và n₃₆ độc lập là 0, 1 hoặc 2 với điều kiện là n₃₅ + n₃₆ là 0, 1 hoặc 2; và

Y là O, S, S(O), S(O)₂, N(C₁-C₂alkyl), N(C₁-C₂alkoxy), C(O), CR³⁸R³⁹ hoặc -CR³¹⁰R³¹¹CR³¹²R³¹³-; và

R³⁸ và R³⁹ độc lập với nhau là hydro, C₁-C₆alkyl, C₂-C₄alkenyl, C₂-C₄alkynyl, C₁-C₂floalkyl, C₁-C₃alkoxyC₁-C₃alkyl, C₁-C₃alkylthioC₁-C₃alkyl, C₁-C₃alkylsulfinylC₁-C₃alkyl, hoặc C₁-C₃alkylsulfonylC₁-C₃alkyl; C₃-C₆xycloalkyl hoặc C₃-C₆xycloalkyl được thế bởi một hoặc hai nhóm thế mà độc lập là C₁-C₃alkyl hoặc C₁-C₂floalkyl, và trong đó một gốc CH₂ trên vòng của C₄-C₆xycloalkyl tùy ý được thay thế bởi nguyên tử oxy hoặc lưu huỳnh hoặc bởi gốc S(O), S(O)₂, NH, N(C₁-C₃alkyl), N(C₁-C₂floalkyl), N[C(O)C₁-C₃alkyl], N[C(O)C₁-C₂floalkyl] hoặc N(C₁-C₂alkoxy); C₃-C₆xycloalkyl được thế bởi một nhóm thế là C₁-C₃alkoxy và tùy ý còn được thế bởi một nhóm thế là C₁-C₂alkyl; C₅-C₆xycloalkenyl hoặc C₅-C₆xycloalkenyl được thế bởi một hoặc hai nhóm thế C₁-C₃alkyl; C₃-C₆xycloalkylC₁-C₂alkyl- hoặc C₃-C₆xycloalkylC₁-C₂alkyl- được thế bởi một hoặc hai nhóm thế trên vòng mà độc lập là C₁-C₃alkyl hoặc C₁-C₂floalkyl, và trong đó một gốc CH₂ trên vòng của C₄-C₆xycloalkylC₁-C₂alkyl- tùy ý được thay thế bởi nguyên tử oxy hoặc lưu huỳnh hoặc bởi gốc S(O), S(O)₂, NH, N(C₁-C₂alkyl), N(C₁-C₂floalkyl), N[C(O)C₁-C₃alkyl], N[C(O)C₁-C₂floalkyl] hoặc N(C₁-C₂alkoxy); C₃-C₆xycloalkylC₁-C₂alkyl- được thế bởi một nhóm thế trên vòng là C₁-C₃alkoxy và tùy ý còn được thế bởi một nhóm thế trên vòng là C₁-C₂alkyl; hoặc HetA hoặc HetA-CH₂-;

trong đó HetA là heteroaryl, được gắn ở cacbon trên vòng, mà tùy ý được thế bởi 1, 2 hoặc 3 nhóm thế cacbon trên vòng độc lập là C₁-C₃alkyl, C₁-C₂floalkyl, C₁-C₃alkyl-C(O)-, C₁-C₂floalkyl-C(O)-, -C(O)-N(R^{6H})(R^{6J}), SR^{6E}, S(O)R^{6E}, -S(O)₂-R^{6E}, -N(R^{6F})(R^{6G}), hydroxy, C₂-C₃alkenyl, -C(R^{6BB})=C(R^{6C1})(R^{6C2}), C₂-C₃alkynyl, -C≡C-R^{6AA}, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₂floalkoxy, xyclopropyloxy, CH₂=CH-CH₂-O-, HC≡C-CH₂-O-, halogen, xyano hoặc nitro; và/hoặc, trong trường hợp vòng heteroaryl có 5 cạnh chứa nguyên tử nitơ trên vòng không cùng trong liên kết đôi trên vòng C=N, heteroaryl tùy ý được thế trên nguyên tử nitơ của vòng không cùng trong liên kết đôi trên vòng C=N bởi một nhóm thế C₁-C₃alkyl, C₁-C₂floalkyl, C₁-C₃alkyl-C(O)-, C₁-C₂floalkyl-C(O)- hoặc C₁-C₂alkyl-S(O)₂-;

với điều kiện là không nhiều hơn một trong số R³⁸ và R³⁹ là xycloalkyl được thế tùy ý, xycloalkyl được thế tùy ý trong đó một gốc CH₂ trên vòng được thay thế bởi nguyên tử oxy hoặc lưu huỳnh hoặc bởi gốc S(O), S(O)₂, NH, N(C₁-C₃alkyl), N(C₁-C₂floalkyl), N[C(O)C₁-C₃alkyl], N[C(O)C₁-C₂floalkyl] hoặc N(C₁-C₂alkoxy); xycloalkenyl được thế tùy ý, xycloalkyl-alkyl- được thế tùy ý, xycloalkyl-alkyl- được

thể tùy ý trong đó một gốc CH_2 trên vòng được thay thế bởi nguyên tử oxy hoặc lưu huỳnh hoặc bởi gốc S(O) , S(O)_2 , NH , $\text{N(C}_1\text{-C}_2\text{alkyl)}$, $\text{N(C}_1\text{-C}_2\text{floalkyl)}$, $\text{N[C(O)C}_1\text{-C}_3\text{alkyl]}$, $\text{N[C(O)C}_1\text{-C}_2\text{floalkyl]}$ hoặc $\text{N(C}_1\text{-C}_2\text{alkoxy)}$, hoặc HetA hoặc HetA- CH_2 -;

hoặc R^{38} là hydro hoặc $\text{C}_1\text{-C}_2\text{alkyl}$, và R^{39} là $\text{C}_1\text{-C}_2\text{alkoxy}$;

hoặc R^{38} và R^{39} đều là $-(\text{CH}_2)_{n37}-$ hoặc $-(\text{CH}_2)_{n38}-\text{X}^{32}-(\text{CH}_2)_{n39}-$;

trong đó X^{32} là O , S , S(O) , S(O)_2 , NH , $\text{N(C}_1\text{-C}_3\text{alkyl)}$, $\text{N(C}_1\text{-C}_2\text{floalkyl)}$, $\text{N[C(O)C}_1\text{-C}_3\text{alkyl]}$, $\text{N[C(O)C}_1\text{-C}_2\text{floalkyl]}$, $\text{N(C}_1\text{-C}_2\text{alkoxy)}$, $\text{C(H)(C}_1\text{-C}_3\text{alkyl)}$, $\text{C(C}_1\text{-C}_2\text{alkyl)}_2$ hoặc $\text{C(H)(C}_1\text{-C}_3\text{alkoxy)}$;

$n37$ là 2, 3, 4, 5 hoặc 6; và

$n38$ và $n39$ độc lập là 0, 1, 2 hoặc 3 với điều kiện là $n38 + n39$ là 2, 3, 4 hoặc 5;

và

R^{310} , R^{311} , R^{312} và R^{313} độc lập với nhau là hydro hoặc $\text{C}_1\text{-C}_4\text{alkyl}$ với điều kiện là không nhiều hơn một trong số R^{310} , R^{311} , R^{312} và R^{313} là $\text{C}_3\text{-C}_4\text{alkyl}$;

và trong đó:

$\text{R}^{6\text{AA}}$ là $\text{C}_1\text{floalkyl}$, flo, clo hoặc brom;

$\text{R}^{6\text{BB}}$, $\text{R}^{6\text{C1}}$ và $\text{R}^{6\text{C2}}$ độc lập là hydro, methyl, $\text{C}_1\text{floalkyl}$, flo hoặc clo; với điều kiện là $\text{R}^{6\text{BB}}$, $\text{R}^{6\text{C1}}$ và $\text{R}^{6\text{C2}}$ tổng số chứa không nhiều hơn một nguyên tử cacbon, và $\text{R}^{6\text{BB}}$, $\text{R}^{6\text{C1}}$ và $\text{R}^{6\text{C2}}$ tổng số bao gồm không nhiều hơn một clo; và với điều kiện là $-\text{C(R}^{6\text{BB}})=\text{C(R}^{6\text{C1}})(\text{R}^{6\text{C2}})$ không phải là $\text{C}_2\text{-C}_3\text{alkenyl}$;

$\text{R}^{6\text{E}}$ là $\text{C}_1\text{-C}_3\text{alkyl}$, $\text{C}_1\text{floalkyl}$, hoặc $-\text{N(R}^{6\text{H}})(\text{R}^{6\text{J}})$;

$\text{R}^{6\text{F}}$ là $-\text{C(O)-C}_1\text{-C}_2\text{alkyl}$, $-\text{C(O)-C}_1\text{floalkyl}$, $-\text{S(O)}_2\text{-C}_1\text{-C}_2\text{alkyl}$, $-\text{S(O)}_2\text{-C}_1\text{floalkyl}$, $\text{C}_1\text{-C}_2\text{alkyl}$, hoặc $\text{C}_1\text{floalkyl}$;

$\text{R}^{6\text{G}}$ và $\text{R}^{6\text{J}}$ độc lập là hydro, methyl hoặc $\text{C}_1\text{floalkyl}$;

$\text{R}^{6\text{H}}$ là hydro, $\text{C}_1\text{-C}_2\text{alkyl}$, hoặc $\text{C}_1\text{floalkyl}$;

và trong đó:

G là hydro, kim loại nông nghiệp, hoặc nhóm sulfoni hoặc nhóm amoni nông nghiệp; hoặc

G là $-\text{C(X}^{\text{a}})-\text{R}^{\text{a}}$, $-\text{C(X}^{\text{b}})-\text{X}^{\text{c}}-\text{R}^{\text{b}}$, $-\text{C(X}^{\text{d}})-\text{N(R}^{\text{c}})-\text{R}^{\text{d}}$, $-\text{SO}_2-\text{R}^{\text{e}}$, $-\text{P(X}^{\text{e}})(\text{R}^{\text{f}})-\text{R}^{\text{g}}$, $-\text{CH}_2-\text{X}^{\text{f}}-\text{R}^{\text{h}}$; hoặc phenyl- CH_2- hoặc phenyl- $\text{CH(C}_1\text{-C}_2\text{alkyl)-}$ (ở mỗi nhóm phenyl tùy ý được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, $\text{C}_1\text{-C}_2\text{alkyl}$, $\text{C}_1\text{floalkyl}$, $\text{C}_1\text{-C}_2\text{alkoxy}$, $\text{C}_1\text{floalkoxy}$, flo, clo, brom, xyano hoặc nitro), hoặc heteroaryl- CH_2- hoặc heteroaryl- $\text{CH(C}_1\text{-C}_2\text{alkyl)-}$ (ở mỗi nhóm heteroaryl này tùy ý được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, $\text{C}_1\text{-C}_2\text{alkyl}$, $\text{C}_1\text{floalkyl}$, $\text{C}_1\text{-C}_2\text{alkoxy}$, $\text{C}_1\text{floalkoxy}$, flo, clo, brom, xyano hoặc nitro), hoặc phenyl- C(O)-CH_2- (trong đó phenyl tùy ý được thế bởi 1, 2 hoặc 3

trong số, độc lập là, C₁-C₂alkyl, C₁floalkyl, C₁-C₂alkoxy, C₁floalkoxy, flo, clo, brom, xyano hoặc nitro); hoặc C₁-C₆alkoxy-C(O)-CH₂-, C₁-C₆alkoxy-C(O)-CH=CH-, C₂-C₇alken-1-yl-CH₂-, C₂-C₇alken-1-yl-CH(C₁-C₂alkyl)-, C₂-C₄floalken-1-yl-CH₂-, C₂-C₇alkyn-1-yl-CH₂-, hoặc C₂-C₇alkyn-1-yl-CH(C₁-C₂alkyl)-;

X^a, X^b, X^c, X^d, X^e và X^f độc lập với nhau là oxy hoặc lưu huỳnh;

R^a là H, C₁-C₂₁alkyl, C₂-C₂₁alkenyl, C₂-C₁₈alkynyl, C₁-C₁₀floalkyl, C₁-C₁₀xyanoalkyl, C₁-C₁₀nitroalkyl, C₁-C₁₀aminoalkyl, C₁-C₅alkylamino(C₁-C₅)alkyl, C₂-C₈dialkylamino(C₁-C₅)alkyl, C₃-C₇xycloalkyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkoxy(C₁-C₅)alkyl, C₃-C₅alkenyloxy(C₁-C₅)alkyl, C₃-C₅alkynyloxy(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylthio(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylsulfinyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylsulfonyl(C₁-C₅)alkyl, C₂-C₈alkylidenaminoxy(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylcarbonyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkoxycarbonyl(C₁-C₅)alkyl, aminocarbonyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylaminocarbonyl(C₁-C₅)alkyl, C₂-C₈dialkylaminocarbonyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylcarbonylamino(C₁-C₅)alkyl, N-(C₁-C₅)alkylcarbonyl-N-(C₁-C₅)alkylamino(C₁-C₅)alkyl, C₃-C₆trialkylsilyl(C₁-C₅)alkyl, phenyl(C₁-C₅)alkyl (trong đó phenyl tùy ý được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano, hoặc nitro), heteroaryl(C₁-C₅)alkyl (trong đó heteroaryl tùy ý được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano, hoặc nitro), C₂-C₅floalkenyl, C₃-C₈xycloalkyl; phenyl hoặc phenyl được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; hoặc heteroaryl hoặc heteroaryl được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro;

R^b là C₁-C₁₈alkyl, C₃-C₁₈alkenyl, C₃-C₁₈alkynyl, C₂-C₁₀floalkyl, C₁-C₁₀xyanoalkyl, C₁-C₁₀nitroalkyl, C₁-C₁₀aminoalkyl, C₁-C₅alkylamino(C₁-C₅)alkyl, C₂-C₈dialkylamino(C₁-C₅)alkyl, C₃-C₇xycloalkyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkoxy(C₁-C₅)alkyl, C₃-C₅alkenyloxy(C₁-C₅)alkyl, C₃-C₅alkynyloxy(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylthio(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylsulfinyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylsulfonyl(C₁-C₅)alkyl, C₂-C₈alkylidenaminoxy(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylcarbonyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkoxycarbonyl(C₁-C₅)alkyl, aminocarbonyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylaminocarbonyl(C₁-C₅)alkyl, C₂-C₈dialkylaminocarbonyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylcarbonylamino(C₁-C₅)alkyl, N-(C₁-C₅)alkylcarbonyl-N-(C₁-C₅)alkylamino(C₁-C₅)alkyl, C₃-C₆trialkylsilyl(C₁-C₅)alkyl, phenyl(C₁-C₅)alkyl (trong đó phenyl tùy ý

được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano, hoặc nitro), heteroarylC₁-C₅alkyl (trong đó heteroaryl tùy ý được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano, hoặc nitro), C₃-C₅floalkenyl, C₃-C₈xycloalkyl; phenyl hoặc phenyl được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; hoặc heteroaryl hoặc heteroaryl được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; và

mỗi R^c và R^d độc lập với nhau là hydro, C₁-C₁₀alkyl, C₃-C₁₀alkenyl, C₃-C₁₀alkynyl, C₁-C₁₀floalkyl, C₁-C₁₀xyanoalkyl, C₁-C₁₀nitroalkyl, C₁-C₁₀aminoalkyl, C₁-C₅alkylamino(C₁-C₅)alkyl, C₂-C₈dialkylamino(C₁-C₅)alkyl, C₃-C₇xycloalkyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkoxy(C₁-C₅)alkyl, C₃-C₅alkenyloxy(C₁-C₅)alkyl, C₃-C₅alkynyloxy(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylthio(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylsulfinyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylsulfonyl(C₁-C₅)alkyl, C₂-C₈alkylidenaminoxy(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylcarbonyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkoxycarbonyl(C₁-C₅)alkyl, aminocarbonyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylaminocarbonyl(C₁-C₅)alkyl, C₂-C₈dialkylaminocarbonyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylcarbonylamino(C₁-C₅)alkyl, N-(C₁-C₅)alkylcarbonyl-N-(C₂-C₅)alkylaminoalkyl, C₃-C₆trialkylsilyl(C₁-C₅)alkyl, phenyl(C₁-C₅)alkyl (trong đó phenyl tùy ý được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano, hoặc nitro), heteroaryl(C₁-C₅)alkyl (trong đó heteroaryl tùy ý được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano, hoặc nitro), C₂-C₅floalkenyl, C₃-C₈xycloalkyl; phenyl hoặc phenyl được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; heteroaryl hoặc heteroaryl được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; heteroaryl-amino hoặc heteroaryl-amino được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; diheteroaryl-amino hoặc diheteroaryl-amino được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; phenyl-amino hoặc phenyl-amino được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập

là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc bởi nitro; diphenylamino hoặc diphenylamino được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; hoặc C₃-C₇xycloalkylamino, di(C₃-C₇xycloalkyl)amino hoặc C₃-C₇xycloalkoxy;

hoặc R^c và R^d, cùng với nitơ mà chúng liên kết với, tạo thành vòng có 4, 5, 6 hoặc 7 cạnh không được thế, tùy ý chứa một nguyên tử khác loại được chọn từ O hoặc S; và

R^e là C₁-C₁₀alkyl, C₂-C₁₀alkenyl, C₂-C₁₀alkynyl, C₁-C₁₀floalkyl, C₁-C₁₀xyanoalkyl, C₁-C₁₀nitroalkyl, C₁-C₁₀aminoalkyl, C₁-C₅alkylamino(C₁-C₅)alkyl, C₂-C₈dialkylamino(C₁-C₅)alkyl, C₃-C₇xycloalkyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkoxy(C₁-C₅)alkyl, C₃-C₅alkenyloxy(C₁-C₅)alkyl, C₃-C₅alkynyloxy(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylthio(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylsulfinyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylsulfonyl(C₁-C₅)alkyl, C₂-C₈alkylidenaminoxy(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylcarbonyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkoxycarbonyl(C₁-C₅)alkyl, aminocarbonyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylaminocarbonyl(C₁-C₅)alkyl, C₂-C₈dialkylaminocarbonyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylcarbonylamino(C₁-C₅)alkyl, N-(C₁-C₅)alkylcarbonyl-N-(C₁-C₅)alkylamino(C₁-C₅)alkyl, C₃-C₆trialkylsilyl(C₁-C₅)alkyl, phenyl(C₁-C₅)alkyl (trong đó phenyl tùy ý được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano, hoặc nitro), heteroaryl(C₁-C₅)alkyl (trong đó heteroaryl tùy ý được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano, hoặc nitro), C₂-C₅floalkenyl, C₃-C₈xycloalkyl; phenyl hoặc phenyl được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; heteroaryl hoặc heteroaryl được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; heteroarylamino hoặc heteroarylamino được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; diheteroarylamino hoặc diheteroarylamino được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; phenylamino hoặc phenylamino được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; diphenylamino hoặc diphenylamino được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; hoặc

C₃-C₇xycloalkylamino, di(C₃-C₇xycloalkyl)amino, C₃-C₇xycloalkoxy, C₁-C₁₀alkoxy, C₁-C₁₀floalkoxy, C₁-C₅alkylamino hoặc di(C₁-C₄alkyl)amino;

R^f và R^g độc lập với nhau là C₁-C₁₀alkyl, C₂-C₁₀alkenyl, C₂-C₁₀alkynyl, C₁-C₁₀alkoxy, C₁-C₁₀floalkyl, C₁-C₁₀xyanoalkyl, C₁-C₁₀nitroalkyl, C₁-C₁₀aminoalkyl, C₁-C₅alkylamino(C₁-C₅)alkyl, C₂-C₈dialkylamino(C₁-C₅)alkyl, C₃-C₇xycloalkyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkoxy(C₁-C₅)alkyl, C₃-C₅alkenyloxy(C₁-C₅)alkyl, C₃-C₅alkynyloxy(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylthio(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylsulfinyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylsulfonyl(C₁-C₅)alkyl, C₂-C₈alkylidenaminoxy(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylcarbonyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkoxycarbonyl(C₁-C₅)alkyl, aminocarbonyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylaminocarbonyl(C₁-C₅)alkyl, C₂-C₈dialkylaminocarbonyl(C₁-C₅)alkyl, C₁-C₅alkylcarbonylamino(C₁-C₅)alkyl, N-(C₁-C₅)alkylcarbonyl-N-(C₂-C₅)alkylaminoalkyl, C₃-C₆trialkylsilyl(C₁-C₅)alkyl, phenyl(C₁-C₅)alkyl (trong đó phenyl tùy ý được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano, hoặc nitro), heteroaryl(C₁-C₅)alkyl (trong đó heteroaryl tùy ý được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano, hoặc nitro), C₂-C₅floalkenyl, C₃-C₈xycloalkyl; phenyl hoặc phenyl được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; heteroaryl hoặc heteroaryl được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; heteroarylamino hoặc heteroarylamino được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; diheteroarylamino hoặc diheteroarylamino được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; phenylamino hoặc phenylamino được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; diphenylamino hoặc diphenylamino được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; hoặc C₃-C₇xycloalkylamino, di(C₃-C₇xycloalkyl)amino, C₃-C₇xycloalkoxy, C₁-C₁₀floalkoxy, C₁-C₅alkylamino hoặc di(C₁-C₄alkyl)amino; hoặc benzyloxy hoặc phenoxy, trong đó nhóm benzyl và phenyl đến lượt mình tùy ý được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C₁-C₃alkyl, C₁-C₃floalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; và

R^h là C_1 - C_{10} alkyl, C_3 - C_{10} alkenyl, C_3 - C_{10} alkynyl, C_1 - C_{10} floalkyl, C_1 - C_{10} xyanoalkyl, C_1 - C_{10} nitroalkyl, C_1 - C_{10} aminoalkyl, C_1 - C_5 alkylamino(C_1 - C_5)alkyl, C_2 - C_8 dialkylamino(C_1 - C_5)alkyl, C_3 - C_7 xycloalkyl(C_1 - C_5)alkyl, C_1 - C_5 alkoxy(C_1 - C_5)alkyl, C_3 - C_5 alkenyloxy(C_1 - C_5)alkyl, C_3 - C_5 alkynyloxy(C_1 - C_5)alkyl, C_1 - C_5 alkylthio(C_1 - C_5)alkyl, C_1 - C_5 alkylsulfinyl(C_1 - C_5)alkyl, C_1 - C_5 alkylsulfonyl(C_1 - C_5)alkyl, C_2 - C_8 alkylidenaminoxy(C_1 - C_5)alkyl, C_1 - C_5 alkylcarbonyl(C_1 - C_5)alkyl, C_1 - C_5 alkoxycarbonyl(C_1 - C_5)alkyl, aminocarbonyl(C_1 - C_5)alkyl, C_1 - C_5 alkylaminocarbonyl(C_1 - C_5)alkyl, C_2 - C_8 dialkylaminocarbonyl(C_1 - C_5)alkyl, C_1 - C_5 alkylcarbonylamino(C_1 - C_5)alkyl, N-(C_1 - C_5)alkylcarbonyl-N-(C_1 - C_5)alkylamino(C_1 - C_5)alkyl, C_3 - C_6 trialkylsilyl(C_1 - C_5)alkyl, phenyl(C_1 - C_5)alkyl (trong đó phenyl tùy ý được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 floalkyl, C_1 - C_3 alkoxy, C_1 - C_3 floalkoxy, C_1 - C_3 alkylthio, C_1 - C_3 alkylsulfinyl, C_1 - C_3 alkylsulfonyl, halogen, xyano hoặc nitro), heteroaryl(C_1 - C_5)alkyl (trong đó heteroaryl tùy ý được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 floalkyl, C_1 - C_3 alkoxy, C_1 - C_3 floalkoxy, C_1 - C_3 alkylthio, C_1 - C_3 alkylsulfinyl, C_1 - C_3 alkylsulfonyl, halogen, xyano hoặc nitro), phenoxy(C_1 - C_5)alkyl (trong đó phenyl tùy ý được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 floalkyl, C_1 - C_3 alkoxy, C_1 - C_3 floalkoxy, C_1 - C_3 alkylthio, C_1 - C_3 alkylsulfinyl, C_1 - C_3 alkylsulfonyl, halogen, xyano hoặc nitro), heteroaryloxy(C_1 - C_5)alkyl (trong đó heteroaryl tùy ý được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 floalkyl, C_1 - C_3 alkoxy, C_1 - C_3 floalkoxy, C_1 - C_3 alkylthio, C_1 - C_3 alkylsulfinyl, C_1 - C_3 alkylsulfonyl, halogen, xyano hoặc nitro), C_3 - C_5 floalkenyl, C_3 - C_8 xycloalkyl; phenyl hoặc phenyl được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 floalkyl, C_1 - C_3 alkoxy, C_1 - C_3 floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; heteroaryl hoặc heteroaryl được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 floalkyl, C_1 - C_3 alkoxy, C_1 - C_3 floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; C_1 - C_6 alkyl-C(O)-; hoặc phenyl-C(O)- trong đó phenyl tùy ý được thế bởi 1 hoặc 2 trong số, độc lập là, C_1 - C_2 alkyl, C_1 floalkyl, C_1 - C_2 alkoxy, C_1 floalkoxy, flo, clo, brom, xyano hoặc nitro;

và trong đó "heteroaryl" nghĩa là hệ vòng thơm chứa ít nhất một nguyên tử khác loại trên vòng và gồm hoặc là vòng đơn hoặc hai vòng dung hợp;

và trong đó hợp chất có công thức (I) có mặt tùy ý là muối nông hóa học của chúng.

2. Hợp chất theo điểm 1 trong đó X là metyl.

3. Hợp chất theo điểm 1 hoặc điểm 2 trong đó R^1 là flo.

4. Hợp chất theo điểm 1, 2, hoặc 3, trong đó R^2 là $-O-R^{2A}$, và trong đó R^{2A} là methyl, etyl, triflometyl, diflometyl, trifloetyl, hoặc $-CH_2CH_2OCH_3$.

5. Hợp chất theo điểm 1, 2 hoặc 3, trong đó R^2 là $-O-R^{2A}$, và trong đó R^{2A} là methyl.

6. Hợp chất theo một điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 5, trong đó G là hydro; kim loại nông nghiệp, hoặc nhóm sulfoni hoặc nhóm amoni nông nghiệp; hoặc G là $-C(X^a)-R^a$ hoặc $-C(X^b)-X^c-R^b$.

7. Hợp chất theo điểm 6, trong đó:

X^a và X^b là oxy, và X^c là oxy hoặc lưu huỳnh;

R^a là C_1-C_{10} alkyl, C_2-C_6 alkenyl, C_2-C_6 alkynyl, C_3-C_6 xycloalkyl, C_1-C_4 alkoxy C_1-C_4 alkyl, C_3-C_7 xycloalkyl C_1 alkyl; hoặc phenyl hoặc phenyl được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C_1-C_3 alkyl, C_1-C_3 floalkyl, C_1-C_3 alkoxy, C_1-C_3 floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; hoặc heteroaryl hoặc heteroaryl được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C_1-C_3 alkyl, C_1-C_3 floalkyl, C_1-C_3 alkoxy, C_1-C_3 floalkoxy, halogen, hoặc xyano; và

R^b là C_1-C_{10} alkyl, C_2-C_5 alkenyl- CH_2- , C_2-C_4 alkenyl- $CH(Me)-$, C_2-C_5 alkynyl- CH_2- , C_2-C_4 alkynyl- $CH(Me)-$, C_3-C_6 xycloalkyl, C_1-C_4 alkoxy C_1-C_4 alkyl, C_3-C_7 xycloalkyl C_1 alkyl; hoặc phenyl hoặc phenyl được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C_1-C_3 alkyl, C_1-C_3 floalkyl, C_1-C_3 alkoxy, C_1-C_3 floalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro; hoặc heteroaryl hoặc heteroaryl được thế bởi 1, 2 hoặc 3 trong số, độc lập là, C_1-C_3 alkyl, C_1-C_3 floalkyl, C_1-C_3 alkoxy, C_1-C_3 floalkoxy, halogen, hoặc xyano.

8. Hợp chất theo một điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 7, trong đó:

R^{33} và R^{36} , độc lập với nhau, là hydro hoặc C_1-C_2 alkyl; và

R^{34} và R^{35} đều là $-(CH_2)_{n34}-$ trong đó $n34$ là 2 hoặc 3.

9. Hợp chất theo một điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 8, trong đó:

Y là $CR^{38}R^{39}$; và

R^{34} và R^{35} đều là $-(CH_2)_{n34}-$ hoặc $-(CH_2)_{n35}-C(R^{37a})(R^{37b})-(CH_2)_{n36}-$; trong đó R^{37a} là C_1-C_2 alkyl; R^{37b} là hydro hoặc C_1-C_2 alkyl;

$n34$ là 2 hoặc 3; và

$n35$ và $n36$ độc lập là 0, 1 hoặc 2 với điều kiện là $n35 + n36$ là 1 hoặc 2.

10. Hợp chất theo một điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 9, trong đó Y là CH_2 .

11. Hợp chất theo điểm 9 hoặc điểm 10, trong đó:

R^{33} và R^{36} , độc lập với nhau, là hydro hoặc C_1-C_2 alkyl; và

R^{34} và R^{35} đều là $-(CH_2)_{n34}-$ trong đó $n34$ là 2 hoặc 3.

12. Hợp chất theo điểm 1, 5, 6, 7, 8, 9, 10 hoặc 11, trong đó:

R^1 là flo,

X là metyl,

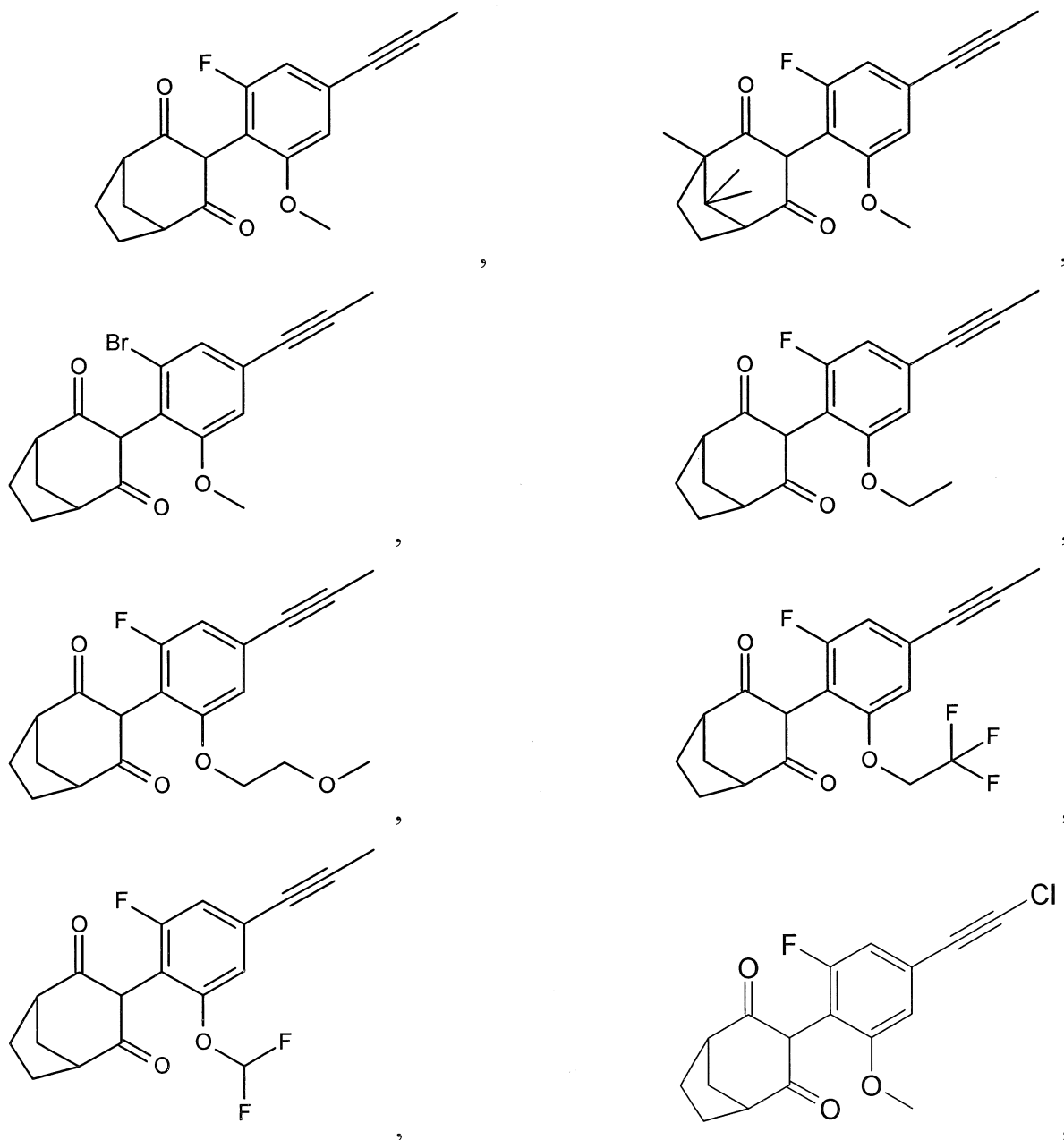
R^2 là OR^{2A} , trong đó R^{2A} được chọn từ metyl, etyl và diflometyl,

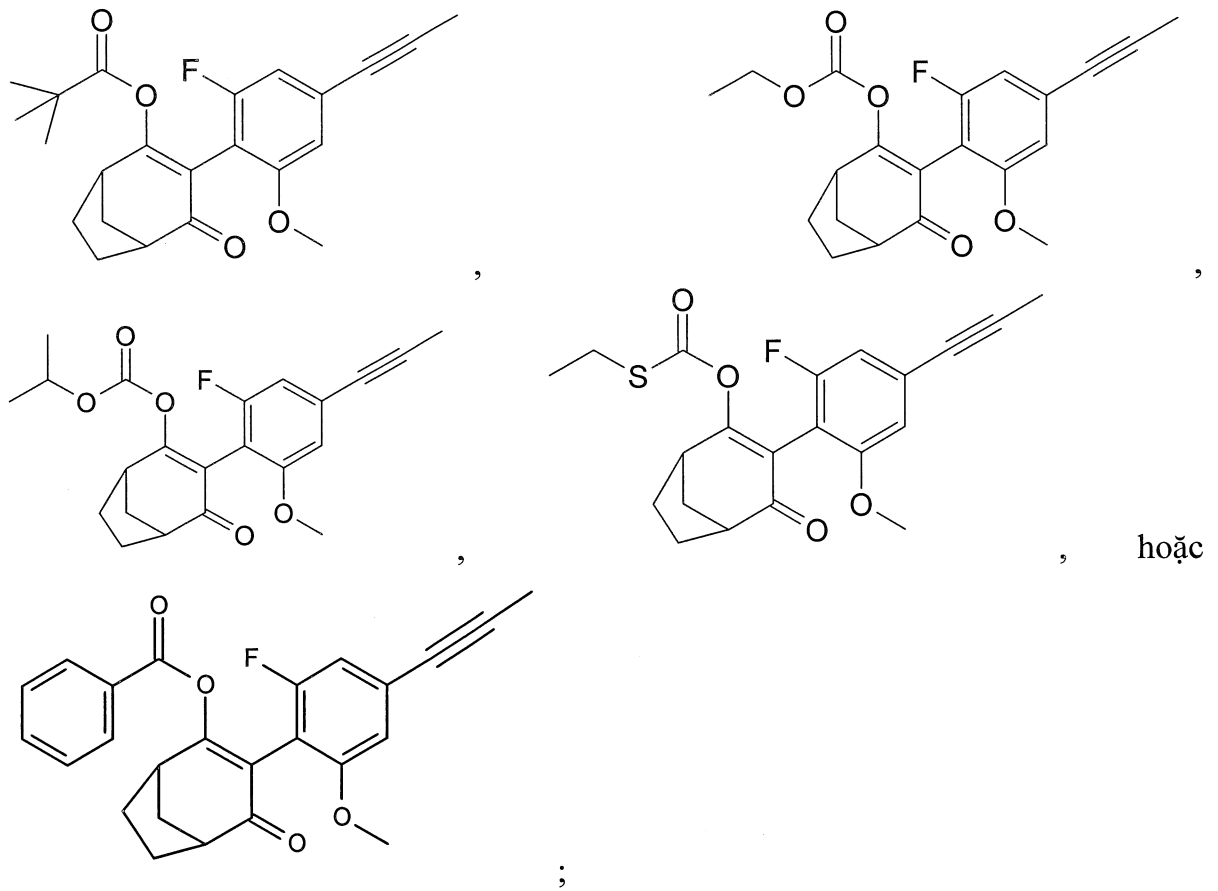
và Q là Q2 trong đó:

Y là $CR^{38}R^{39}$, và mỗi R^{38} và R^{39} độc lập là hydro hoặc metyl, và

R^{34} và R^{35} đều là $-(CH_2)_{n34}-$ hoặc $-(CH_2)_{n35}-C(R^{37a})(R^{37b})-(CH_2)_{n36}$ trong đó $n34, n35, n36, R^{37a}$ và R^{37b} là như được xác định theo điểm 1, 8, 9 hoặc 11.

13. Hợp chất theo điểm bất kỳ trong số các điểm trên, mà là hợp chất A1, A2, A3, A4, A5, A6, A7, A8, P1, P2, P3, P4 hoặc P5:





trong mỗi trường hợp có mặt tùy ý là muối nông hóa học của chúng.

14. Chế phẩm diệt cỏ chứa:

(i) hợp chất có công thức (I), như được xác định theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 13, và

(ii) chất mang, chất pha loãng và/hoặc dung môi nông hóa học; và

(iii) tùy ý một hoặc nhiều chất diệt cỏ khác và/hoặc tùy ý chất an toàn.

15. Phương pháp kiểm soát cỏ dại một lá mầm ở cây trồng thuộc cây có ích, bao gồm việc bón hợp chất có công thức (I), như được xác định theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 13, hoặc chế phẩm diệt cỏ theo điểm 14, lên cỏ dại và/hoặc lên cây và/hoặc lên khu vực trồng của chúng.