



(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)



1-0032367

(51)⁸ C07D 233/38; A01N 43/50; A01N 43/76; C07D 263/26; C07D 207/27; A01N 43/36; C07D 207/26 (13) B

(21) 1-2018-00422

(22) 15/07/2016

(86) PCT/US2016/042448 15/07/2016

(87) WO2017/023515 09/02/2017

(30) 62/199,341 31/07/2015 US

(45) 25/06/2022 411

(43) 26/04/2018 361A

(73) E I DU PONT DE NEMOURS AND COMPANY (US)

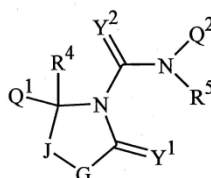
Chestnut Run Plaza 974 Centre Road, P.O. Box 2915 Wilmington, Delaware 19805, United States of America

(72) SATTERFIELD, Andrew Duncan (US); STEVENSON, Thomas Martin (US).

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

(54) HỢP CHẤT N-CARBOXAMIT VÒNG ĐƯỢC THỂ LÀM THUỐC DIỆT CỎ VÀ CHẾ PHẨM DIỆT CỎ CHỨA HỢP CHẤT NÀY

(57) Sáng chế đề cập đến hợp chất có công thức 1, bao gồm tất cả các chất đồng phân lập thể, N-oxit, và muối của nó:



1

trong đó, G, J, Q¹, R⁴, Y², Q², R⁵ và Y¹ là như được xác định trong phần mô tả.

Sáng chế cũng đề cập đến chế phẩm chứa hợp chất có công thức 1 và phương pháp phòng trừ thực vật không mong muốn bao gồm bước cho thực vật không mong muốn hoặc môi trường của nó tiếp xúc với lượng hữu hiệu của hợp chất hoặc chế phẩm theo sáng chế.

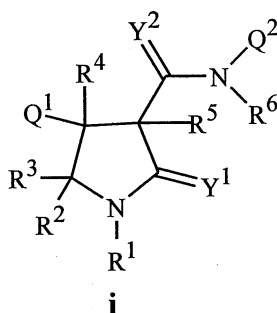
Lĩnh vực kỹ thuật được đề cập

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

Tình trạng kỹ thuật của sáng chế

Để đạt được năng suất thu hoạch cao thì việc phòng trừ thực vật không mong muốn là điều vô cùng quan trọng. Rất mong muốn đạt được mức phòng trừ chọn lọc sự sinh trưởng của cỏ dại, đặc biệt là cỏ dại mọc trong các cây trồng như lúa, đậu tương, củ cải đường, ngô, khoai tây, lúa mì, lúa mạch, cà chua và cây trồng đồn điền, trong số các cây trồng khác. Sự sinh trưởng ở cỏ dại không kiểm soát được mọc trong các cây trồng hữu ích này có thể làm giảm đáng kể năng suất và do đó dẫn đến việc làm tăng chi phí cho người tiêu dùng. Việc phòng trừ thực vật không mong muốn mọc trong các khu vực không trồng trọt cũng là rất quan trọng. Nhiều sản phẩm đáp ứng được các mục đích này hiện có bán trên thị trường, nhưng vẫn cần có các hợp chất mới có hiệu quả hơn, giá thành thấp hơn, độ độc thấp hơn, an toàn hơn với môi trường hoặc có các vị trí tác động khác nhau.

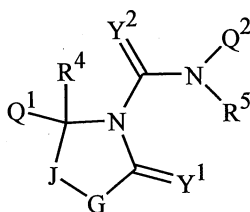
Công bố đơn quốc tế số WO2015/084796 mô tả một số hợp chất diệt cỏ có công thức i



trong đó, *không kể những nhóm khác*, Y^1 và Y^2 đều là O; R^1 là H hoặc C_1-C_6 alkyl; R^2, R^3, R^4, R^5 và R^6 đều là H; Q^1 và Q^2 độc lập là vòng phenyl tùy ý được thế bằng tối đa 5 phần tử thế độc lập được chọn từ R^{10} ; và R^{10} độc lập là halogen. Hợp chất N-carboxamit vòng theo sáng chế là không được bộc lộ trong Công bố này.

Bản chất kỹ thuật của sáng chế

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



1

trong đó,

Q^1 là vòng phenyl hoặc hệ vòng naphtalenyl, mỗi vòng hoặc hệ vòng này tùy ý được thế bằng tối đa 5 phần tử thế độc lập được chọn từ R^6 ; hoặc vòng dị vòng có từ 4 đến 7 cạnh hoặc hệ vòng hai vòng có từ 8 đến 10 cạnh, mỗi vòng hoặc hệ vòng này chứa các thành phần của vòng được chọn từ nguyên tử cacbon và 1 đến 4 nguyên tử khác loại độc lập được chọn từ tối đa 2 nguyên tử O, tối đa 2 nguyên tử S và tối đa 4 nguyên tử N, trong đó, tối đa 3 thành phần của vòng chứa cacbon độc lập được chọn từ $C(=O)$ và $C(=S)$, và thành phần của vòng chứa lưu huỳnh độc lập được chọn từ $S(=O)_u(=NR^7)_v$, mỗi vòng hoặc hệ vòng này tùy ý được thế bằng tối đa 5 phần tử thế độc lập được chọn từ R^6 trên các thành phần của vòng chứa nguyên tử cacbon và được chọn từ R^8 trên các thành phần của vòng chứa nguyên tử nitơ;

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

J là $-CR^2R^3-$ hoặc $-CR^2R^3-CR^{2a}R^{3a}-$ (trong đó liên kết nhô ra về phía trái được nối với);

G là $-O-$, $-N(R^1)-$ hoặc $-C(R^{18})(R^{19})-$;

Y^1 là O, S hoặc NR^{11} ;

Y^2 là O hoặc S;

R^1 là H, hydroxy, amino, xyano, formyl, C_3-C_8 alkylcarbonylalkyl, C_1-C_6 alkyl, C_1-C_6 haloalkyl, C_2-C_6 alkenyl, C_3-C_6 alkynyl, C_2-C_6 xyanoalkyl, C_3-C_6 xycloalkyl, C_4-C_8 xycloalkylalkyl, C_2-C_8 alkoxyalkyl, C_2-C_8 haloalkoxyalkyl, C_2-C_8 haloalkenylalkyl, C_2-C_8 alkylthioalkyl, C_2-C_8 alkylsulfinylalkyl, C_2-C_8 alkylsulfonylalkyl, C_2-C_8 alkylcarbonyl, C_2-C_8 haloalkylcarbonyl, C_4-C_{10} xycloalkylcarbonyl, C_5-C_{10} xycloalkylcarbonylalkyl, C_2-C_8 haloalkoxycarbonyl, C_4-C_{10} xycloalkoxycarbonyl, C_2-C_8 alkylaminocarbonyl, C_3-C_{10} dialkylaminocarbonyl, C_4-C_{10} xycloalkylaminocarbonyl, C_1-C_6 alkoxy, C_1-C_6

alkylthio, C₁–C₆ haloalkylthio, C₃–C₈ xycloalkylthio, C₁–C₆ alkylsulfinyl, C₁–C₆ haloalkylsulfinyl, C₃–C₈ xycloalkylsulfinyl, C₁–C₆ alkylsulfonyl, C₁–C₆ haloalkylsulfonyl, C₃–C₈ xycloalkylsulfonyl, C₁–C₆ alkylaminosulfonyl, C₂–C₈ dialkylaminosulfonyl hoặc C₃–C₁₀ trialkylsilyl; hoặc Q³; hoặc –W¹Q³;

mỗi R² và R³ độc lập là H, halogen, hydroxy, C₁–C₄ alkyl, C₁–C₄ haloalkyl hoặc C₁–C₄ alkoxy;

mỗi R^{2a} và R^{3a} độc lập là H, C₁–C₆ alkyl, C₂–C₆ alkenyl, C₃–C₆ alkynyl hoặc C₁–C₆ alkoxy;

R⁴ là H, halogen, hydroxy, C₁–C₄ alkoxy, C₁–C₄ haloalkyl hoặc C₁–C₄ alkyl;

R⁵ là H, hydroxy, amino, C₁–C₆ alkyl, C₁–C₆ haloalkyl, C₂–C₆ alkenyl, C₃–C₆ alkynyl, C₂–C₈ alkoxyalkyl, C₂–C₈ haloalkoxyalkyl, C₂–C₈ alkylthioalkyl, C₂–C₈ alkylsulfinylalkyl, C₂–C₈ alkylsulfonylalkyl, C₂–C₈ alkylcarbonyl, C₂–C₈ haloalkylcarbonyl, C₄–C₁₀ xycloalkylcarbonyl, C₂–C₈ alkoxycarbonyl, C₂–C₈ haloalkoxycarbonyl, C₄–C₁₀ xycloalkoxycarbonyl, C₂–C₈ alkylaminocarbonyl, C₃–C₁₀ dialkylaminocarbonyl, C₄–C₁₀ xycloalkylaminocarbonyl, C₁–C₆ alkoxy, C₁–C₆ alkylthio, C₁–C₆ haloalkylthio, C₃–C₈ xycloalkylthio, C₁–C₆ alkylsulfinyl, C₁–C₆ haloalkylsulfinyl, C₃–C₈ xycloalkylsulfinyl, C₁–C₆ alkylsulfonyl, C₁–C₆ haloalkylsulfonyl, C₃–C₈ xycloalkylsulfonyl, C₁–C₆ alkylaminosulfonyl, C₂–C₈ dialkylaminosulfonyl hoặc C₃–C₁₀ trialkylsilyl; hoặc Q⁴; hoặc –W²Q⁴;

mỗi R⁶ và R⁹ độc lập là halogen, hydroxy, xyano, nitro, amino, C₁–C₈ alkyl, C₁–C₈ xyanoalkyl, C₁–C₈ xyanoalkoxy, C₁–C₈ haloalkyl, C₁–C₈ nitroalkyl, C₂–C₈ alkenyl, C₂–C₈ haloalkenyl, C₂–C₈ nitroalkenyl, C₂–C₈ alkynyl, C₂–C₈

haloalkynyl, C₂–C₈ alkoxyalkyl, C₃–C₈ alkoxyalkoxyalkyl, C₂–C₈ haloalkoxyalkyl, C₂–C₈ haloalkoxyhaloalkoxy, C₄–C₁₀ xycloalkylalkyl, C₄–C₁₀ haloxyxycloalkylalkyl, C₅–C₁₂ alkylxycloalkylalkyl, C₅–C₁₂ xycloalkylalkenyl, C₅–C₁₂ xycloalkylalkynyl, C₃–C₈ xycloalkyl, C₃–C₈ haloxyxycloalkyl, C₄–C₁₀ alkylxycloalkyl, C₆–C₁₂ xycloalkylxycloalkyl, C₃–C₈ xycloalkenyl, C₃–C₈ haloxyxycloalkenyl, C₂–C₈ haloalkoxyalkoxy, C₂–C₈ alkoxyalkoxy, C₄–C₁₀ xycloalkoxyalkyl, C₂–C₈ alkylthioalkyl, C₂–C₈ alkylsulfinylalkyl, C₂–C₈ alkylsulfonylalkyl, C₂–C₈ alkylamino, C₂–C₈ dialkylamino, C₂–C₈ halodialkylamino, C₂–C₈ alkylaminoalkyl, C₂–C₈ haloalkylaminoalkyl, C₄–C₁₀ xycloalkylaminoalkyl, C₃–C₁₀ dialkylaminoalkyl, -CHO, C₂–C₈ alkylcarbonyl, C₂–C₈ haloalkylcarbonyl, C₄–C₁₀ xycloalkylcarbonyl, -C(=O)OH, C₂–C₈ alkoxycarbonyl, C₂–C₈ haloalkoxycarbonyl, C₄–C₁₀ xycloalkoxycarbonyl, C₅–C₁₂ xycloalkylalkoxycarbonyl, -C(=O)NH₂, C₂–C₈ alkylaminocarbonyl, C₄–C₁₀ xycloalkylaminocarbonyl, C₃–C₁₀ dialkylaminocarbonyl, C₁–C₈ alkoxy, C₁–C₈ haloalkoxy, C₂–C₈ alkoxyalkoxy, C₂–C₈ alkenyloxy, C₂–C₈ haloalkenyloxy, C₃–C₈ alkynyloxy, C₃–C₈ haloalkynyloxy, C₃–C₈ xycloalkoxy, C₃–C₈ haloxyxycloalkoxy, C₄–C₁₀ xycloalkylalkoxy, C₃–C₁₀ alkylcarbonylalkoxy, C₂–C₈ alkylcarbonyloxy, C₂–C₈ haloalkylcarbonyloxy, C₄–C₁₀ xycloalkylcarbonyloxy, C₁–C₈ alkylsulfonyloxy, C₁–C₈ haloalkylsulfonyloxy, C₁–C₈ alkylthio, C₁–C₈ haloalkylthio, C₃–C₈ xycloalkylthio, C₁–C₈ alkylsulfinyl, C₁–C₈ haloalkylsulfinyl, C₁–C₈ alkylsulfonyl, C₁–C₈ haloalkylsulfonyl, C₃–C₈ xycloalkylsulfonyl, formylamino, C₂–C₈ alkylcarbonylamino, C₂–C₈ haloalkylcarbonylamino, C₃–C₈ xycloalkylamino, C₂–C₈ alkoxycarbonylamino, C₁–C₆ alkylsulfonylamino, C₁–C₆ haloalkylsulfonylamino, -SF₅, -SCN, SO₂NH₂, C₃–C₁₂ trialkylsilyl, C₄–C₁₂ trialkylsilylalkyl hoặc C₄–C₁₂ trialkylsilylalkoxy; hoặc Q⁵; hoặc -W³Q⁵;

mỗi R^7 độc lập là H, xyano, C_2-C_3 alkylcarbonyl hoặc C_2-C_3 haloalkylcarbonyl;

mỗi R^8 và R^{10} độc lập là xyano, C_1-C_3 alkyl, C_2-C_3 alkenyl, C_2-C_3 alkynyl, C_3-C_6 xycloalkyl, C_2-C_3 alkoxyalkyl, C_1-C_3 alkoxy, C_2-C_3 alkylcarbonyl, C_2-C_3 alkoxycarbonyl, C_2-C_3 alkylaminoalkyl hoặc C_3-C_4 dialkylaminoalkyl;

mỗi R^{11} độc lập là H, xyano, hydroxy, CHO, C_1-C_4 alkyl, C_1-C_4 haloalkyl, C_1-C_4 alkoxy, C_2-C_6 alkylcarbonyl, C_2-C_6 haloalkylcarbonyl, $-(C=O)CH_3$ hoặc $-(C=O)CF_3$;

W^1 là $-O-$, $-OS(=O)_2-$, $-C(=O)-$, C_1-C_3 alkandiyl, C_2-C_3 alkendiyl, C_2-C_3 alkyndiyl, $-C(=O)(C_1-C_3 \text{ alkyl})-$, $-C(=O)(C_2-C_3 \text{ alkenyl})-$, $-C(=O)(C_1-C_4 \text{ alkynyl})-$;

W^2 là $-O-$, $-OS(=O)_2-$, $-C(=O)-$ hoặc C_1-C_3 alkandiyl;

W^3 là $-O-$, $-OS(=O)_2-$, $-C(=O)-$ hoặc C_1-C_3 alkandiyl;

mỗi Q^3 là $-CPh=N-O(C_1-C_4 \text{ alkyl})$ phenyl tùy ý được thế lên các thành phần của vòng bằng tối đa 5 phần tử thế độc lập được chọn từ R^{12} ; hoặc vòng dị vòng thơm có 5 hoặc 6 cạnh, mỗi nhóm tùy ý được thế lên các thành phần của vòng bằng tối đa 5 phần tử thế độc lập được chọn từ R^{12} và các thành phần của vòng chứa nitơ bằng tối đa 2 phần tử thế độc lập được chọn từ R^{15} ;

mỗi Q^4 là phenyl tùy ý được thế lên các thành phần của vòng bằng tối đa 5 phần tử thế độc lập được chọn từ R^{13} ; hoặc vòng dị vòng thơm có 5 hoặc 6 cạnh, mỗi nhóm này tùy ý được thế lên các thành phần của vòng bằng tối đa 5 phần tử thế độc

lập được chọn từ R^{13} và các thành phần của vòng chứa nitơ bằng tối đa 2 phần tử thể độc lập được chọn từ R^{16} ;

mỗi Q^5 là phenyl tùy ý được thế lên các thành phần của vòng bằng tối đa 5 phần tử thể độc lập được chọn từ R^{14} ; hoặc vòng dị vòng thơm có 5 hoặc 6 cạnh, mỗi nhóm này tùy ý được thế lên thành phần của vòng chứa cacbon bằng tối đa 5 phần tử thể độc lập được chọn từ R^{14} và các thành phần của vòng chứa nitơ bằng tối đa 2 phần tử thể độc lập được chọn từ R^{17} ;

mỗi R^{12} , R^{13} và R^{14} độc lập là halogen, xyano, hydroxy, amino, nitro, -CHO, -C(=O)OH, -C(=O)NH₂, -SO₂NH₂, C₁-C₆ alkyl, C₁-C₆ haloalkyl, C₂-C₆ alkenyl, C₂-C₆ alkynyl, C₂-C₈ alkylcarbonyl, C₂-C₈ haloalkylcarbonyl, C₂-C₈ alkoxy, C₄-C₁₀ xycloalkoxy, C₅-C₁₂ xycloalkylalkoxy, C₂-C₈ alkylaminocarbonyl, C₃-C₁₀ dialkylaminocarbonyl, C₁-C₆ alkoxy, C₁-C₆ haloalkoxy, C₂-C₈ alkylcarbonyloxy, C₁-C₆ alkylthio, C₁-C₆ haloalkylthio, C₁-C₆ alkylsulfinyl, C₁-C₆ haloalkylsulfinyl, C₁-C₆ alkylsulfonyl, C₁-C₆ haloalkylsulfonyl, C₁-C₆ alkylaminosulfonyl, C₂-C₈ dialkylaminosulfonyl, C₃-C₁₀ trialkylsilyl, C₁-C₆ alkylamino, C₂-C₈ dialkylamino, C₂-C₈ alkylcarbonylamino, C₁-C₆ alkylsulfonylamino, phenyl, pyridinyl hoặc thienyl;

mỗi R^{15} , R^{16} và R^{17} độc lập là H hoặc C₁-C₆ alkyl;

mỗi R^{18} và R^{19} độc lập là H, halogen, hydroxy, C₁-C₄ alkyl, C₁-C₄ haloalkyl hoặc C₁-C₄ alkoxy; và

mỗi u và v độc lập là 0, 1 hoặc 2 trong mỗi trường hợp của $S(=O)_u(=NR^7)_v$, với điều kiện là tổng của u và v là 0, 1 hoặc 2;

với điều kiện khi Q^1 là vòng phenyl được thế bằng R^6 ở vị trí 4, G là $-C(R^{18})(R^{19})-$, Y^1 là O, Y^2 là O, J là $-CR^2R^3-$, R^2 là H, R^3 là H, R^4 là H, R^5 là H, R^6 là Cl, R^{18} là H và R^{19} là H, thì Q^2 không phải là 2-flophenyl; và với điều kiện hợp chất có công thức 1 không phải là *trans-N*-(3-clophenyl)-5-(1-metyletyl)-2-oxo-4-phenyl-3-oxazolidincarboxamit (CA# 158323-70-7), 2-(5-metyl-1,3,4-oxadiazol-2-yl)-5-oxo-N-phenyl-1-pyrolidincarboxamit (CA# 182815-19-6), N-(4-clophenyl)-2-(5-metyl-1,3,4-oxadiazol-2-yl)-5-oxo-1-pyrolidincarboxamit (CA# 182815-21-0), N-(3,4-diclophenyl)-2-(5-metyl-1,3,4-oxadiazol-2-yl)-5-oxo-1-pyrolidincarboxamit (CA# 182815-22-1), 2-(5-metyl-1,3,4-oxadiazol-2-yl)-5-oxo-N-[3-(triflometyl)phenyl]-1-pyrolidincarboxamit (CA# 182815-23-2) hoặc 2-oxo-N,6-diphenyl-1-piperidincarboxamit (CA# 111422-82-3).

Cụ thể hơn, sáng chế đề xuất hợp chất có công thức 1 (bao gồm tất cả các chất đồng phân lập thể), N-oxit hoặc muối của chúng. Sáng chế cũng đề xuất chế phẩm diệt cỏ chứa hợp chất theo sáng chế (tức là với lượng hữu hiệu có tác dụng diệt cỏ) và ít nhất một thành phần được chọn từ nhóm bao gồm chất hoạt động bề mặt, chất pha loãng dạng rắn và chất pha loãng dạng lỏng, chế phẩm này tùy ý còn chứa ít nhất một hoạt chất bổ sung được chọn từ nhóm bao gồm thuốc diệt cỏ khác và chất an toàn diệt cỏ (safener). Sáng chế còn đề xuất phương pháp phòng trừ sự sinh trưởng của thực vật không mong muốn bao gồm bước cho thực vật hoặc môi trường của nó tiếp xúc với lượng hữu hiệu có tác dụng diệt cỏ của hợp chất theo sáng chế (ví dụ, dưới dạng chế phẩm được mô tả ở đây).

Sáng chế còn bao gồm hỗn hợp diệt cỏ chứa (a) hợp chất được chọn từ Công thức 1, N-oxit và muối của nó, và (b) ít nhất một hoạt chất bổ sung được chọn từ (b1) đến (b16); và muối của các hợp chất (b1) đến (b16), như được mô tả dưới đây.

Mô tả chi tiết sáng chế

Trong bản mô tả này, các thuật ngữ "bao gồm", "chứa", "có", "khác biệt ở chỗ" hoặc các biến thể bất kỳ của chúng, được dự định bao hàm đối tượng, nội dung không mang tính loại trừ trong giới hạn bất kỳ được biểu thị một cách rõ ràng. Ví dụ, chế phẩm, hỗn hợp, quy trình hoặc phương pháp bao gồm nhiều yếu tố thì nó không nhất thiết giới hạn chỉ ở các phần tử này mà có thể không được liệt kê rõ ràng hoặc vốn có đối với chế phẩm, hỗn hợp, quy trình hoặc phương pháp đó.

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

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

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

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

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

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

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

Trong các phần mô tả nêu trên, thuật ngữ "alkyl", được sử dụng riêng hoặc trong các từ kết hợp như "alkylthio" hoặc "haloalkyl" bao gồm alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh như methyl, ethyl, *n*-propyl, *i*-propyl, hoặc các chất đồng phân butyl, pentyl hoặc hexyl khác nhau. "Alkenyl" bao gồm alken mạch thẳng hoặc mạch nhánh như etenyl, 1-propenyl, 2-propenyl, và các chất đồng phân khác nhau butenyl, pentenyl và hexenyl. "Alkenyl" cũng bao gồm polyen như 1,2-propadienyl và 2,4-hexadienyl. "Alkynyl" bao gồm alkyn mạch thẳng hoặc mạch nhánh như etynyl, 1-propynyl, 2-propynyl và các chất đồng phân butynyl, pentynyl và hexynyl khác nhau. "Alkynyl" còn có thể bao gồm các nhóm chứa nhiều liên kết ba như 2,5-hexadiynyl.

“Alkoxy” bao gồm, ví dụ, metoxy, etoxy, *n*-propyloxy, isopropyloxy và các chất đồng phân butoxy, pentoxy và hexyloxy khác nhau. “Alkoxyalkyl” để chỉ việc thay thế alkoxy trên alkyl. Ví dụ về “alkoxyalkyl” bao gồm CH_3OCH_2 , $\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{CH}_2$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCH}_2$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_2$ và $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_2$.

“Alkoxyalkoxyalkyl” để chỉ ít nhất việc thế alkoxy lên nhóm alkoxy của nhóm alkoxyalkyl. Ví dụ về “alkoxyalkoxyalkyl” bao gồm $\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{OCH}_2$ -, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{O}(\text{CH}_3)\text{CHOCH}_2$ - và $(\text{CH}_3\text{O})_2\text{CHOCH}_2$ -. “Alkoxyalkoxy” để chỉ việc thế alkoxy lên alkoxy. “Alkenyloxy” bao gồm các nhóm alkenyloxy mạch thẳng hoặc mạch nhánh. Ví dụ về “alkenyloxy” bao gồm $\text{H}_2\text{C}=\text{CHCH}_2\text{O}$, $(\text{CH}_3)_2\text{C}=\text{CHCH}_2\text{O}$, $(\text{CH}_3)\text{CH}=\text{CHCH}_2\text{O}$, $(\text{CH}_3)\text{CH}=\text{C}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{O}$ và $\text{CH}_2=\text{CHCH}_2\text{CH}_2\text{O}$.

“Alkynyloxy” bao gồm các nhóm alkynyloxy mạch thẳng hoặc mạch nhánh. Ví dụ về “alkynyloxy” bao gồm $\text{HC}\equiv\text{CCH}_2\text{O}$, $\text{CH}_3\text{C}\equiv\text{CCH}_2\text{O}$ và $\text{CH}_3\text{C}\equiv\text{CCH}_2\text{CH}_2\text{O}$. Ví dụ về “alkylcarbonyloxy” bao gồm $\text{CH}_3\text{C}(\text{O})\text{O}$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{C}(\text{O})\text{O}$ và $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{C}(\text{O})\text{O}$.

“Alkylthio” bao gồm các nhóm alkylthio mạch thẳng hoặc mạch nhánh như metylthio, etylthio, và các chất đồng phân propylthio, butylthio, pentylthio và hexylthio khác nhau. “Alkylsulfinyl” bao gồm cả hai chất đồng phân đối ảnh của nhóm alkylsulfinyl. Ví dụ về “alkylsulfinyl” bao gồm $\text{CH}_3\text{S}(\text{O})$ -, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{S}(\text{O})$ -, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{S}(\text{O})$ -, $(\text{CH}_3)_2\text{CHS}(\text{O})$ - và các chất đồng phân butylsulfinyl, pentylsulfinyl và hexylsulfinyl khác nhau. Ví dụ về “alkylsulfonyl” bao gồm $\text{CH}_3\text{S}(\text{O})_2$ -, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{S}(\text{O})_2$ -, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{S}(\text{O})_2$ -, $(\text{CH}_3)_2\text{CHS}(\text{O})_2$ -, và chất đồng phân butylsulfonyl, pentylsulfonyl và hexylsulfonyl khác nhau. “Alkylthioalkyl” để chỉ việc thế alkylthio lên alkyl. Ví dụ về “alkylthioalkyl” bao gồm CH_3SCH_2 , $\text{CH}_3\text{SCH}_2\text{CH}_2$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{SCH}_2$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{SCH}_2$ và $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{SCH}_2\text{CH}_2$. “Alkylsulfinylalkyl” để chỉ việc thế alkylsulfinyl lên alkyl. Ví dụ về “alkylsulfinylalkyl” bao gồm $\text{CH}_3\text{S}(\text{O})\text{CH}_2$, $\text{CH}_3\text{S}(\text{O})\text{CH}_2\text{CH}_2$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{S}(\text{O})\text{CH}_2$ và $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{S}(\text{O})\text{CH}_2\text{CH}_2$. “Alkylsulfonylalkyl” để chỉ việc

thế alkylsulfinyl lên alkyl. Ví dụ về “alkylsulfinylalkyl” bao gồm $\text{CH}_3\text{S}(=\text{O})_2\text{CH}_2$, $\text{CH}_3\text{S}(=\text{O})_2\text{CH}_2\text{CH}_2$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{S}(=\text{O})_2\text{CH}_2$ và $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{S}(=\text{O})_2\text{CH}_2\text{CH}_2$.

“Alkylamino”, “dialkylamino”, “halodialkylamino” và các nhóm tương tự khác, được xác định tương tự với các ví dụ nêu trên. Ví dụ về “alkylsulfonylamino” bao gồm $\text{CH}_3\text{S}(=\text{O})\text{NH}-$ và $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{S}(=\text{O})\text{NH}-$. Ví dụ về “alkylaminoalkyl” bao gồm $\text{CH}_3\text{NHCH}_2-$, $(\text{CH}_3)_2\text{CHNHCH}_2-$ và $\text{CH}_3\text{NHCH}(\text{CH}_3)-$. Ví dụ về “dialkylaminoalkyl” bao gồm $(\text{CH}_3)_2\text{NCH}_2-$, $(\text{CH}_3)_2\text{NC}(\text{CH}_3)\text{H}-$ và $(\text{CH}_3)(\text{CH}_3)\text{NCH}_2-$. Ví dụ về “alkylaminocarbonyl” bao gồm $(\text{CH}_3)\text{NHC}(\text{O})-$ và $(\text{CH}_3\text{CH}_2)\text{NHC}(\text{O})-$. Ví dụ về “dialkylaminocarbonyl” là $(\text{CH}_3)_2\text{NC}(\text{O})-$. Ví dụ về “alkylaminosulfonyl” là $(\text{CH}_3)\text{NHS}(\text{O})_2-$ và ví dụ về “dialkylaminosulfonyl” là $(\text{CH}_3)_2\text{NS}(\text{O})_2-$. Thuật ngữ “alkylcarbonylamino” để chỉ nhóm alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh được liên kết với nhóm $\text{C}(=\text{O})$ của nhóm carbonylamino. Ví dụ về “alkylcarbonylamino” bao gồm $\text{CH}_3\text{C}(=\text{O})\text{NH}-$ và $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{C}(=\text{O})\text{NH}-$. Thuật ngữ “alkoxycarbonylamino” để chỉ nhóm alkoxy mạch thẳng hoặc mạch nhánh được liên kết với nhóm $\text{C}(=\text{O})$ của nhóm carbonylamino. Ví dụ về “alkoxycarbonylamino” bao gồm $\text{CH}_3\text{OC}(=\text{O})\text{NH}-$ và $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OC}(=\text{O})\text{NH}-$.

“Xycloalkyl” bao gồm, ví dụ, xyclopropyl, xyclobutyl, xyclopentyl và xyclohexyl. Thuật ngữ “alkylxycloalkyl” để chỉ việc thế alkyl lên nhóm xycloalkyl và bao gồm, ví dụ, etylxyclopropyl, *i*-propylxyclobutyl, 3-metyl xyclopentyl và 4-metyl xyclohexyl. Thuật ngữ “xycloalkylalkyl” để chỉ việc thế xycloalkyl lên nhóm alkyl. Ví dụ về “xycloalkylalkyl” bao gồm xyclopropylmetyl, xyclopentyletyl, và các nhóm xycloalkyl khác được liên kết với nhóm alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh. Ví dụ về thuật ngữ “alkylxycloalkylalkyl” là 1-metyl xyclopropylmetyl và 2-metyl xyclopentyletyl. Thuật ngữ “xycloalkylalkenyl” để chỉ xycloalkyl được liên kết với nhóm alkenyl. Thuật ngữ “xycloalkylxycloalkyl” để chỉ việc thế xycloalkyl lên nhóm xycloalkyl bằng liên kết đơn. Thuật ngữ “xycloalkylalkynyl” để chỉ xycloalkyl được liên kết với nhóm alkynyl. Thuật ngữ “xycloalkylamino” để chỉ xycloalkyl được

liên kết với nhóm amino. Thuật ngữ “xycloalkylaminocarbonyl” để chỉ xycloalkyl được liên kết với nhóm aminocarbonyl. Thuật ngữ “xycloalkylaminoalkyl” để chỉ xycloalkyl được liên kết với nhóm aminoalkyl. Thuật ngữ “xycloalkylcarbonyl” để chỉ xycloalkyl được liên kết với nhóm carbonyl. Thuật ngữ “xycloalkylcarbonylalkyl” để chỉ xycloalkyl được liên kết với nhóm carbonylalkyl. Thuật ngữ “xycloalkylcarbonyloxy” để chỉ xycloalkyl được liên kết với nguyên tử cacbon của nhóm carbonyloxy. Ví dụ về “xycloalkylalkyl” bao gồm xyclopropylmetyl, xyclopentyletyl, và các nhóm xycloalkyl khác được liên kết với nhóm alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh. Thuật ngữ “xycloalkoxy” để chỉ xycloalkyl được liên kết qua nguyên tử oxy như xyclopentyloxy và xyclohexyloxy. Thuật ngữ “xycloalkoxyalkyl” để chỉ xycloalkoxy được liên kết qua nhóm alkyl. Thuật ngữ “xycloalkylthio”, “xycloalkylsulfinyl” và “xycloalkylsulfonyl” để chỉ xycloalkyl được liên kết qua nguyên tử lưu huỳnh, nhóm sulfinyl hoặc sulfonyl, tương ứng.

Thuật ngữ “xycloalkoxycarbonyl” để chỉ xycloalkoxy được liên kết qua nhóm carbonyl. “Xycloalkylalkoxy” để chỉ xycloalkylalkyl được liên kết qua nguyên tử oxy được gắn vào mạch alkyl. Ví dụ về “xycloalkylalkoxy” bao gồm xyclopropylmetoxy, xyclopentyletoxy, và các nhóm xycloalkyl khác được liên kết với nhóm alkoxy mạch thẳng hoặc mạch nhánh. “Xycloalkenyl” bao gồm các nhóm như xyclopentenyl và xyclohexenyl cũng như các nhóm có nhiều hơn một liên kết đôi như 1,3- và 1,4-xyclohexadienyl. Thuật ngữ “haloxycloalkenyl” để chỉ việc thế halogen lên nhóm xycloalkenyl.

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

halogen có thể là giống nhau hoặc khác nhau. Ví dụ về “haloalkyl” hoặc “alkyl được thế bằng halogen” bao gồm F_3C , $ClCH_2$, CF_3CH_2 và CF_3CCl_2 . Thuật ngữ “haloxycloalkyl”, “haloxycloalkylalkyl”, “haloxycloalkoxy”, “haloalkoxy”, “haloalkoxyalkoxy”, “haloalkylthio”, “haloalkenyl”, “haloalkynyl”, “haloalkenyloxy”, “haloalkenylalkyl”, “haloalkylcarbonyl”, “haloalkylcarbonylamino”, “haloalkylsulfonylamino”, “haloalkoxyhaloalkoxy”, “haloalkylsulfonyloxy”, “haloalkoxyalkyl”, “haloalkylcarbonyloxy”, “haloalkylaminoalkyl” và các nhóm tương tự khác, được xác định tương tự với thuật ngữ “haloalkyl”. Ví dụ về “haloalkoxy” bao gồm CF_3O- , CCl_3CH_2O- , $HCF_2CH_2CH_2O-$ và CF_3CH_2O- . Ví dụ về “haloalkylthio” bao gồm CCl_3S- , CF_3S- , CCl_3CH_2S- và $ClCH_2CH_2CH_2S-$. Ví dụ về “alkylsulfinyl” bao gồm $CH_3S(O)-$ và $CH_3CH_2S(O)-$. Ví dụ về “haloalkylsulfinyl” bao gồm $CF_3S(O)-$, $CCl_3S(O)-$, $CF_3CH_2S(O)-$ và $CF_3CF_2S(O)-$. Ví dụ về “haloalkylsulfonyl” bao gồm $CF_3S(O)_2-$, $CCl_3S(O)_2-$, $CF_3CH_2S(O)_2-$ và $CF_3CF_2S(O)_2-$. Ví dụ về “alkylsulfonyloxy” bao gồm $CH_3S(O)_2O-$, $CH_3CH_2S(O)_2O-$ và $CH_3CH_2CH_2S(O)_2O-$. Ví dụ về “haloalkenyl” bao gồm $(Cl)_2C=CHCH_2-$ và $CF_3CH_2CH=CHCH_2-$. Ví dụ về “haloalkenyloxy” bao gồm $(Cl)_2C=CHCH_2O-$ và $CF_3CH_2CH=CHCH_2O-$. Ví dụ về “haloalkynyl” bao gồm $HC\equiv CCHCl-$, $CF_3C\equiv C-$, $CCl_3C\equiv C-$ và $FCH_2C\equiv CCH_2-$. Ví dụ về “haloalkynyloxy” bao gồm $HC\equiv CCHClO-$, $CCl_3C\equiv C-$ và $FCH_2C\equiv CCH_2O-$. Ví dụ về “haloalkoxyalkyl” bao gồm CF_3OCH_2- , $ClCH_2CH_2OCH_2CH_2-$, $Cl_3CCH_2OCH_2-$ cũng như dẫn xuất alkyl mạch nhánh. Ví dụ về “haloalkoxycarbonyl” bao gồm $CF_3OC(O)-$, $ClCH_2CH_2OCH_2CH_2-$, $Cl_3CCH_2OCH_2OC(O)-$ cũng như dẫn xuất alkyl mạch nhánh.

“Alkylcarbonyl” để chỉ nhóm alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh được liên kết với nhóm $C(=O)$. “Alkoxycarbonyl” để chỉ nhóm alkoxy mạch thẳng hoặc mạch nhánh được liên kết với nhóm $C(=O)$. Ví dụ về “alkylcarbonyl” bao gồm $CH_3C(=O)-$

, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{C}(=\text{O})-$ và $(\text{CH}_3)_2\text{CHC}(=\text{O})-$. Ví dụ về “alkoxycarbonyl” bao gồm $\text{CH}_3\text{OC}(=\text{O})-$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OC}(=\text{O})-$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OC}(=\text{O})-$, $(\text{CH}_3)_2\text{CHOC}(=\text{O})-$ và các chất đồng phân butoxy- hoặc pentoxycarbonyl khác nhau. “Xycloalkylalkoxycarbonyl” để chỉ các nhóm xycloalkylalkyl được liên kết với nguyên tử oxy của nhóm alkoxycarbonyl. Ví dụ về “xycloalkylalkoxycarbonyl” bao gồm xyclopropyl- $\text{CH}_2\text{OC}(=\text{O})-$, xyclopropyl- $\text{CH}(\text{CH}_3)\text{OC}(=\text{O})-$ và xyclopentyl- $\text{CH}_2\text{OC}(=\text{O})-$. “Alkylcarbonylalkyl” để chỉ nhóm alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh được liên kết với nguyên tử cacbon của nhóm carbonylalkyl. Ví dụ về “alkylcarbonylalkyl” bao gồm $(\text{CH}_3)\text{C}(=\text{O})\text{CH}_2-$ và $(\text{CH}_3\text{CH}_2)\text{C}(=\text{O})\text{CH}_2-$. “Alkylcarbonyloxy” để chỉ nhóm alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh được liên kết với nguyên tử cacbon của nhóm carbonyloxy. Ví dụ về “alkylcarbonyloxy” bao gồm $(\text{CH}_3)\text{C}(=\text{O})\text{O}-$ và $(\text{CH}_3\text{CH}_2)\text{C}(=\text{O})\text{O}-$.

Thuật ngữ “xyanoalkyl” hoặc “xyanoalkoxy” tức là nhóm xyano lần lượt được liên kết qua nhóm alkyl hoặc alkoxy. Nguyên tử cacbon trong nhóm xyano không được bao gồm trong tổng số nguyên tử cacbon đối với thuật ngữ này. Thuật ngữ “nitroalkyl” hoặc “nitroalkenyl” là nhóm nitro được liên kết tương ứng qua nhóm alkyl hoặc alkoxy. Thuật ngữ “trialkylsilyl” tức là 3 nhóm alkyl được liên kết qua silicon. Thuật ngữ “trialkylsilylalkyl” tức là 3 nhóm alkyl được liên kết qua nhóm silylalkyl. Thuật ngữ “trialkylsilylalkoxy” tức là 3 nhóm alkyl được liên kết qua nhóm silylalkoxy.

Tổng số nguyên tử cacbon trong phần tử thế được biểu thị bằng tiền tố “Ci-Cj”, trong đó i và j là các số từ 1 đến 12. Ví dụ, $\text{C}_1\text{-C}_4$ alkylsulfonyl bao gồm metylsulfonyl đến butyl. Ví dụ, $\text{C}_1\text{-C}_4$ alkyl bao gồm metyl đến butyl; C_2 alkoxyalkyl bao gồm CH_3OCH_2- ; C_3 alkoxyalkyl bao gồm, ví dụ, $\text{CH}_3\text{CH}(\text{OCH}_3)-$, $\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{CH}_2-$ hoặc $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCH}_2-$; và C_4 alkoxyalkyl bao gồm các chất đồng

phân khác nhau của nhóm alkyl được thế bằng nhóm alkoxy chứa tổng bốn nguyên tử cacbon, ví dụ, bao gồm $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_2-$ và $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_2-$.

Khi hợp chất được thế bằng phần tử thế mang chỉ số dưới biểu thị số phần tử thế có thể vượt quá 1, phần tử thế này (khi chúng vượt quá 1) độc lập được chọn từ nhóm các phần tử thế đã xác định, ví dụ, $[(\text{R}^6)_n]$, n bằng 0, 1, 2, 3, 4 hoặc 5. Khi nhóm biến thiên thể hiện được gắn tùy ý với một vị trí, ví dụ, $(\text{R}^6)_n$, trong đó có thể bằng 0, thì hydro có thể ở vị trí thậm chí không được đề cập trong xác định của nhóm biến thiên. Khi một hoặc nhiều vị trí trên nhóm là “không thể” hoặc “không được thế”, thì có nghĩa là nguyên tử hydro được gắn để mang hóa trị tự do bất kỳ.

Trừ khi có quy định khác, “vòng” hoặc “hệ vòng” dưới dạng thành phần có công thức 1 (ví dụ, phần tử thế Q^1 hoặc Q^2) là vòng cacbon hoặc dị vòng. Thuật ngữ “hệ vòng” dùng để chỉ hai hoặc nhiều vòng ngưng tụ. Thuật ngữ “hệ vòng hai vòng” và “hệ vòng hai vòng ngưng tụ” dùng để chỉ hệ vòng bao gồm hai vòng ngưng tụ, trong đó vòng có thể là bão hoà, chưa bão hoà hoàn toàn, hoặc chưa bão hoà hoàn toàn trừ khi có quy định khác. Thuật ngữ “hệ vòng dị hai vòng ngưng tụ” dùng để chỉ hệ vòng hai vòng ngưng tụ, trong đó ít nhất một nguyên tử vòng không phải là cacbon. “Hệ vòng hai vòng được liên kết cầu nối” được tạo ra bằng cách gắn kết một phần của một hoặc nhiều nguyên tử với các thành phần vòng không liền kề của vòng. Thuật ngữ “thành phần vòng” dùng để chỉ nguyên tử hoặc gốc khác, ví dụ, $\text{C}(=\text{O})$, $\text{C}(=\text{S})$, $\text{S}(\text{O})$ hoặc $\text{S}(\text{O})_2$) tạo ra khung của vòng hoặc hệ vòng.

Các thuật ngữ “nhân vòng cacbon”, “vòng cacbon” hoặc “hệ vòng vòng cacbon” dùng để chỉ vòng hoặc hệ vòng, trong đó nguyên tử tạo ra khung của vòng chỉ được chọn từ cacbon. Trừ khi có quy định khác, nhân vòng cacbon có thể là bão hoà, chưa bão hoà hoàn toàn, hoặc vòng chưa bão hoà hoàn toàn. Khi nhân vòng cacbon chưa bão hoà hoàn toàn thỏa mãn quy tắc Hückel, thì vòng này cũng được gọi là “nhân thơm”. “Vòng cacbon bão hoà” dùng để chỉ vòng có khung bao gồm nguyên

tử cacbon được liên kết với một nguyên tử khác bằng các liên kết đơn; trừ khi có quy định cụ thể khác, hóa trị cacbon còn lại được chiếm bởi nguyên tử hydro.

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

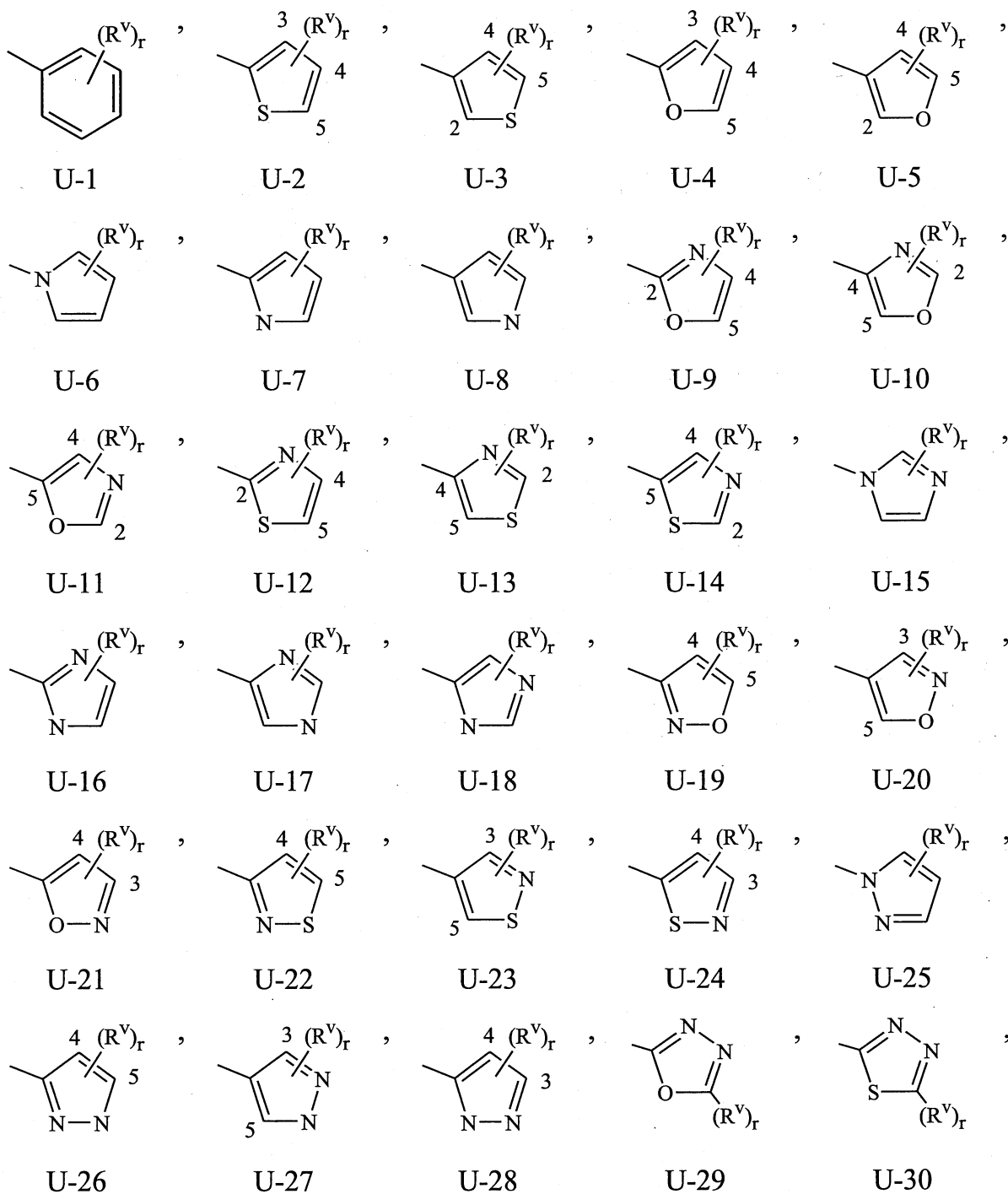
Thuật ngữ “thơm” chỉ ra rằng mỗi nguyên tử vòng về cơ bản trong cùng một mặt phẳng và có quỹ đạo p vuông góc với mặt phẳng của vòng, và các điện tử $(4n + 2) \pi$, trong đó n là số nguyên dương, đi liền với vòng phù hợp với quy tắc Hückel. Thuật ngữ “hệ vòng thơm” dùng để chỉ vòng cacbon hoặc hệ vòng dị vòng, trong đó ít nhất một vòng của hệ vòng là thơm. Thuật ngữ “hệ vòng cacbon vòng thơm” để chỉ hệ vòng cacbon trong đó ít nhất 1 vòng của hệ vòng này là thơm. Thuật ngữ “hệ vòng dị vòng thơm” để chỉ hệ vòng dị vòng trong đó ít nhất 1 vòng của hệ vòng này là thơm. Thuật ngữ “hệ vòng không thơm” để chỉ hệ vòng cacbon hoặc hệ vòng dị vòng mà có thể là bão hoà hoàn toàn, cũng như chưa bão hoà một phần hoặc hoàn toàn, với điều kiện là không vòng nào trong hệ vòng này là thơm. Thuật ngữ “hệ vòng cacbon vòng không thơm” trong đó không có vòng nào trong hệ vòng này là thơm. Thuật ngữ “hệ vòng dị vòng không thơm” để chỉ hệ vòng dị vòng trong đó không vòng nào trong hệ vòng này là thơm.

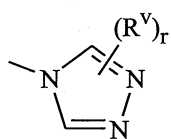
Thuật ngữ “tùy ý được thế” liên quan đến các nhân dị vòng dùng để chỉ các nhóm không được thế hoặc có ít nhất một phần tử thế không phải là hydro không triệt

tiêu hoạt tính sinh học đã có của chất tương tự không được thể. Như được sử dụng trong bản mô tả này, định nghĩa sau sẽ áp dụng trừ khi có quy định khác. Thuật ngữ "tùy ý được thể" được sử dụng hoán đổi với cụm từ "được thể hoặc không được thể" hoặc với thuật ngữ "(không) được thể." Trừ khi có quy định khác, nhóm tùy ý được thể có thể có phần tử thể ở mỗi vị trí thể của nhóm, và mỗi sự thay thế đều độc lập với nhau.

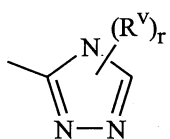
Khi Q^1 hoặc Q^2 là vòng dị vòng chứa nitơ có 5 hoặc 6 cạnh, nó có thể được gắn vào phần còn lại có công thức 1 qua nguyên tử trong vòng là cacbon hoặc nitơ có sẵn bất kỳ, trừ khi có quy định khác. Như nêu trên, Q^1 và Q^2 có thể là (không kể những nhóm khác) phenyl tùy ý được thể bằng một hoặc nhiều phần tử thể được chọn từ nhóm phần tử thể như được xác định trong phần Bản chất kỹ thuật của sáng chế. Ví dụ về phenyl tùy ý được thể bằng 1 đến 5 phần tử thể là vòng được minh họa dưới dạng U-1 trong Bảng thể hiện 1, trong đó, R^v là $[R^6$ hoặc $R^9]$ như được xác định trong phần Bản chất kỹ thuật của sáng chế cho Q^1 hoặc Q^2 , và r là số nguyên (từ 0 đến 5).

Như nêu trên, Q^1 và Q^2 có thể là (không kể những nhóm khác) vòng dị thơm có 5 hoặc 6 cạnh, tùy ý được thể bằng một hoặc nhiều phần tử thể được chọn từ nhóm phần tử thể như được xác định trong phần Bản chất kỹ thuật của sáng chế. Ví dụ về vòng dị thơm chưa bão hòa có 5 hoặc 6 cạnh tùy ý được thể bằng từ một hoặc nhiều phần tử thể bao gồm các vòng U-2 đến U-61 được minh họa trong Bảng thể hiện 1, trong đó R^v là phần tử thể bất kỳ như được xác định trong phần Bản chất kỹ thuật của sáng chế cho Q^1 và Q^2 (tức là R^6 hoặc R^9), và r là số nguyên nằm trong khoảng từ 0 đến 5, giới hạn bởi số các vị trí sẵn có trên mỗi nhóm U. Đối với U-29, U-30, U-36, U-37, U-38, U-39, U-40, U-41, U-42 và U-43 chỉ có một vị trí sẵn có, đối với các nhóm U này r được giới hạn ở các số nguyên 0 hoặc 1, và r là 0 có nghĩa là nhóm U là không được thể và hydro có mặt ở vị trí được chỉ ra bởi $(R^v)_r$.

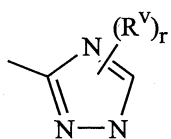
Bảng thể hiện 1



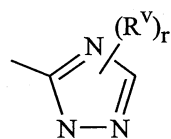
U-31



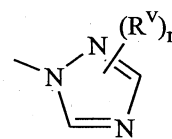
U-32



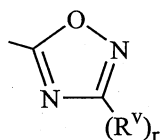
U-33



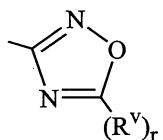
U-34



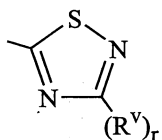
U-35



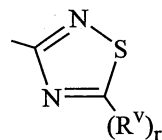
U-36



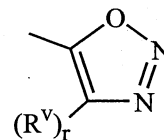
U-37



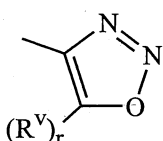
U-38



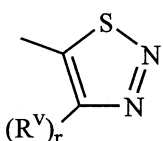
U-39



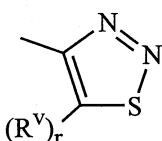
U-40



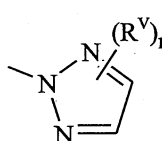
U-41



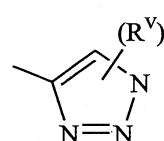
U-42



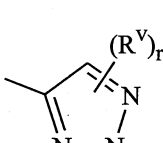
U-43



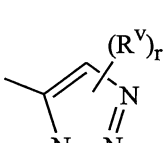
U-44



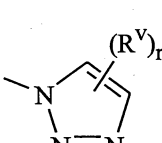
U-45



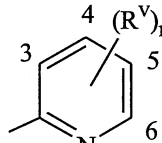
U-46



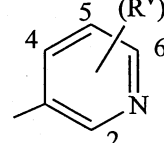
U-47



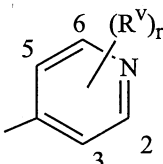
U-48



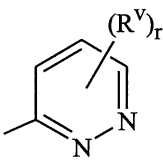
U-49



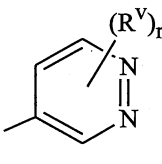
U-50



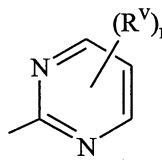
U-51



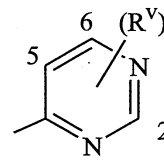
U-52



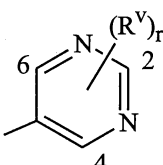
U-53



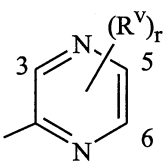
U-54



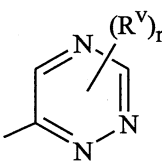
U-55



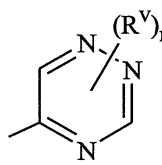
U-56



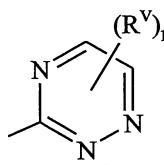
U-57



U-58

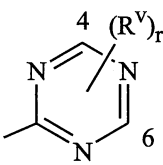


U-59



U-60

and



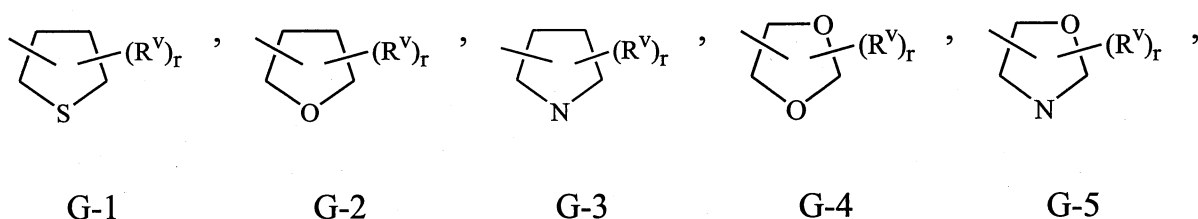
U-61

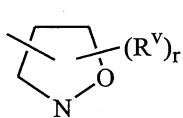
Cần lưu ý rằng, khi Q^1 hoặc Q^2 là vòng dị vòng không thơm bão hòa hoặc chưa bão hòa có 5 hoặc 6 cạnh tùy ý được thể bằng một hoặc nhiều phần tử thể được chọn từ nhóm phần tử thể như được xác định trong phần Bản chất kỹ thuật của sáng chế đối với Q^1 hoặc Q^2 , 1 hoặc 2 thành phần của vòng chứa cacbon của dị vòng có thể tùy ý ở dạng được oxy hóa của nhóm carbonyl.

Ví dụ về vòng dị vòng bão hòa hoặc không thơm chưa bão hòa có 5 hoặc 6 cạnh chứa các thành phần của vòng được chọn từ tối đa 2 nguyên tử O và tối đa 2 nguyên tử S, và tùy ý được thể trên các thành phần của vòng chứa nguyên tử cacbon bằng tối đa 5 nguyên tử halogen bao gồm các vòng G-1 đến G-35 như được minh họa trong Bảng thể hiện 2. Cần lưu ý rằng, khi điểm gắn trên nhóm G được minh họa như là phần nổi lên, nhóm G có thể được gắn vào phần còn lại có công thức 1 thông qua nguyên tử cacbon hoặc nitơ có sẵn bất kỳ của nhóm G bằng cách thay thế nguyên tử halogen. Phần tử thể tùy ý tương ứng với R^V có thể được gắn vào nguyên tử cacbon hoặc nitơ có sẵn bất kỳ bằng cách thay thế nguyên tử halogen. Đối với các vòng G này, r thường là số nguyên từ 0 đến 4, được giới hạn bằng số vị trí sẵn có trên mỗi nhóm G.

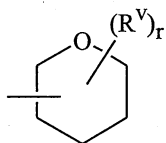
Cần lưu ý rằng, khi Q^1 hoặc Q^2 bao gồm vòng được chọn từ G-28 đến G-35, G^2 được chọn từ O, S hoặc N. Cần lưu ý rằng, khi G^2 là N, nguyên tử nitơ có thể hoàn thành hóa trị của nó bằng cách thể bằng H hoặc phần tử thể tương ứng với R^V như được xác định trong phần Bản chất kỹ thuật của sáng chế đối với Q^1 hoặc Q^2 .

Bảng thể hiện 2

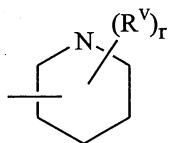




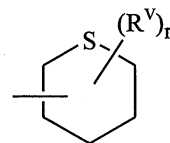
G-6



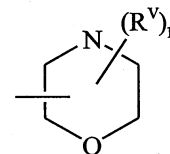
G-7



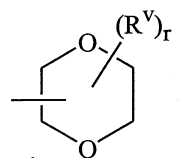
G-8



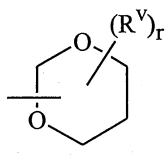
G-9



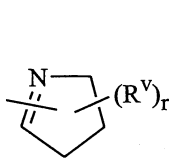
G-10



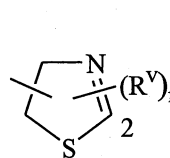
G-11



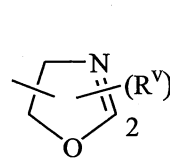
G-12



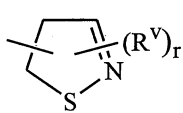
G-13



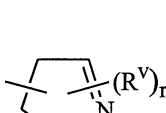
G-14



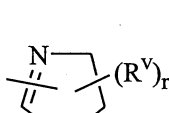
G-15



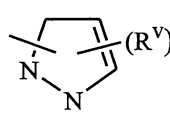
G-16



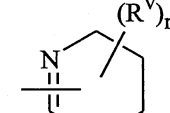
G-17



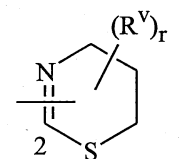
G-18



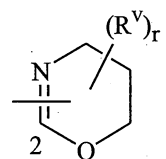
G-19



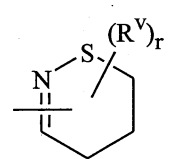
G-20



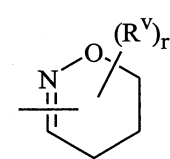
G-21



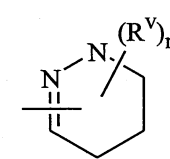
G-22



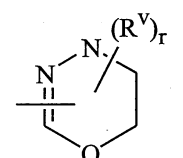
G-23



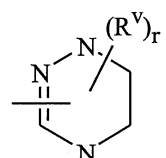
G-24



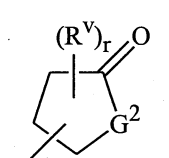
G-25



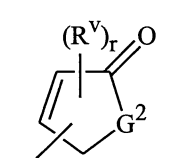
G-26



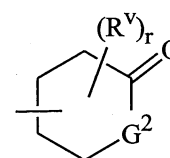
G-27



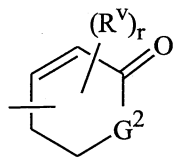
G-28



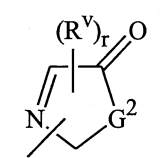
G-29



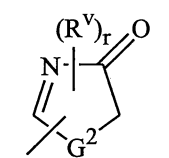
G-30



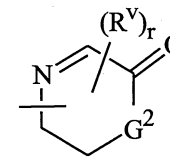
G-31



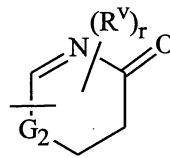
G-32



G-33



G-34

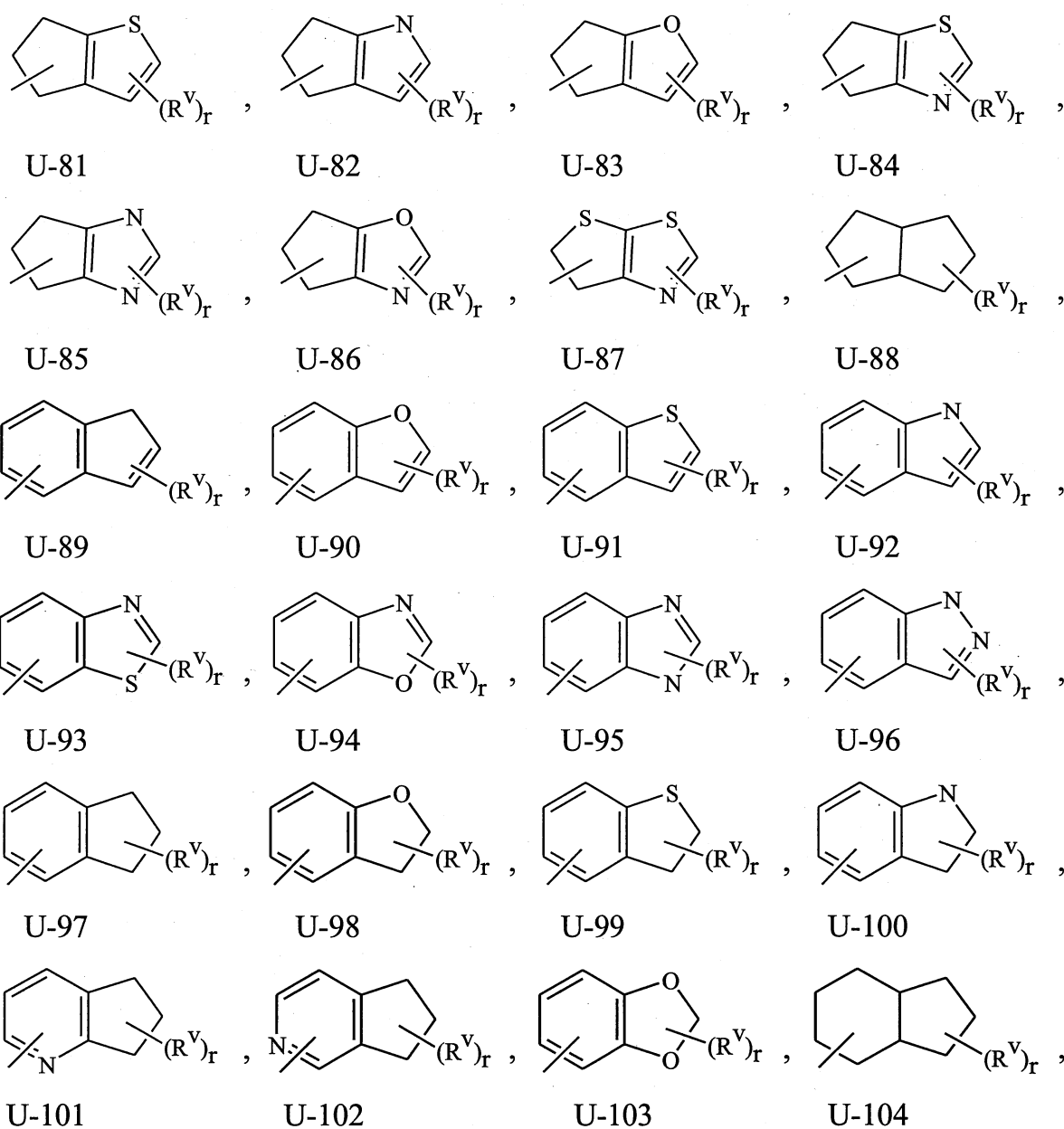


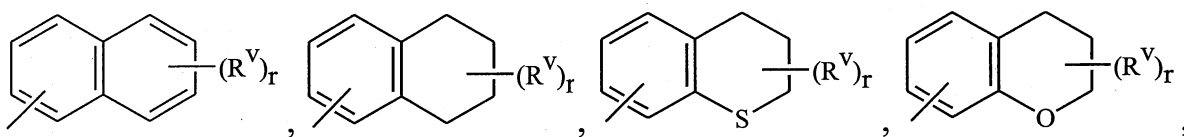
G-35

Như được nêu trên, Q^1 hoặc Q^2 có thể là (không kể những nhóm khác) hệ vòng hai vòng được ngưng tụ có 8, 9 hoặc 10 cạnh tùy ý được thế bằng một hoặc nhiều phần tử thế được chọn từ nhóm phần tử thế như được xác định trong phần Bản chất

kỹ thuật của sáng chế (tức là R^6 hoặc R^9). Ví dụ về hệ vòng hai vòng được ngưng tụ có 8, 9 hoặc 10 cạnh tùy ý được thể bằng một hoặc nhiều phần tử thể bao gồm các vòng U-81 đến U-123 như được minh họa trong Bảng thể hiện 3 trong đó, R^V là phần tử thể bất kỳ như được xác định trong phần Bản chất kỹ thuật của sáng chế đối với Q^1 hoặc Q^2 (tức là R^6 hoặc R^9), và r thường là số nguyên từ 0 đến 4.

Bảng thể hiện 3



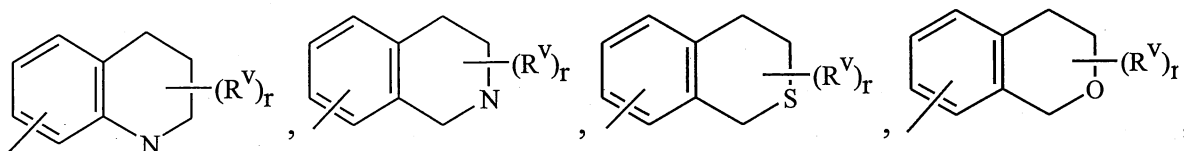


U-105

U-106

U-107

U-108

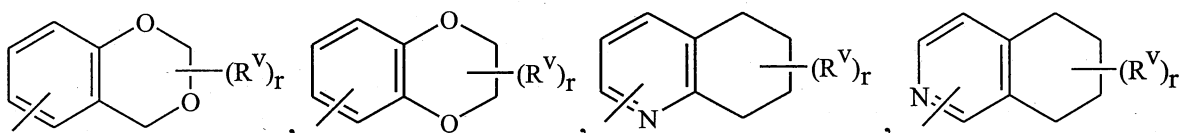


U-109

U-110

U-111

U-112

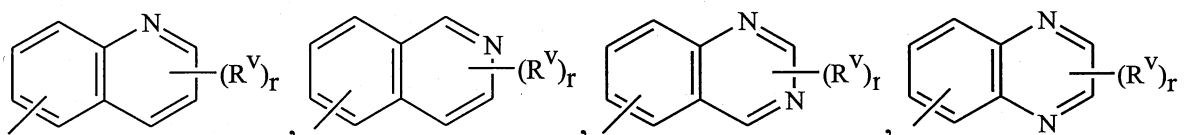


U-113

U-114

U-115

U-116

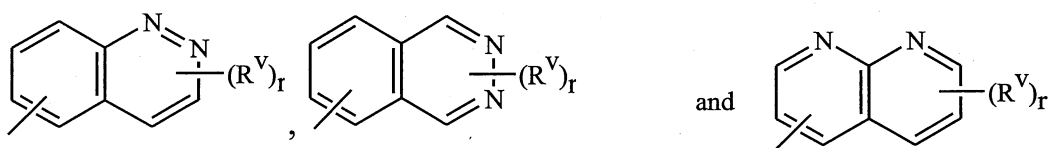


U-117

U-118

U-119

U-120



U-121

U-122

U-123

Mặc dù các nhóm R^V được chỉ ra trong các cấu trúc U-1 đến U-123, lưu ý rằng chúng không cần có mặt do chúng là phần tử thế tùy ý. Lưu ý rằng khi R^V là H khi được gắn vào nguyên tử, thì nó là giống nhau như thể nguyên tử này không được thế. Nguyên tử nitơ cần thay thế để đáp ứng hóa trị của chúng được thế bằng H hoặc R^V . Lưu ý rằng khi điểm gắn kết giữa $(R^V)_r$ và nhóm U được minh họa dưới dạng treo lơ lửng, $(R^V)_r$ có thể được gắn vào nguyên tử cacbon hoặc nitơ sẵn có bất kỳ của nhóm

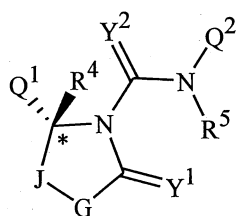
U. Lưu ý rằng khi điếm gắn kết trên nhóm U được minh họa dưới dạng treo lơ lửng, nhóm U có thể được gắn vào phần còn lại của công thức 1 thông qua nguyên tử cacbon hoặc nitơ sẵn có bất kỳ của nhóm U bằng cách thay thế nguyên tử hydro. Lưu ý rằng một số nhóm U chỉ có thể được thể bằng nhỏ hơn 4 nhóm R^V (ví dụ, U-2 đến U-5, U-7 đến U-48, và U-52 đến U-61).

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

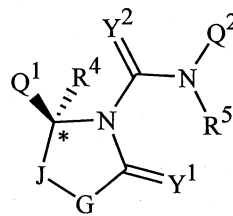
Hợp chất theo sáng chế có thể có mặt dưới dạng một hoặc nhiều chất đồng phân lập thể. Chất đồng phân lập thể khác nhau bao gồm các chất đồng phân đối ảnh, các chất đồng phân không đối quang, các chất đồng phân atropy và các chất đồng phân dị hình. Chất đồng phân lập thể là các chất đồng phân có cấu trúc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

Ví dụ, nguyên tử cacbon mà cả hai Q¹ và R⁴ đều liên kết vào đó có tâm bất đối. Để xem xét toàn diện về tất cả các khía cạnh của chất đồng phân lập thể, xem Ernest

L. Eliel và Samuel H. Wilen, *Stereochemistry of Organic Hợp chất*, John Wiley & Sons, 1994.



1'



1''

Người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực kỹ thuật này còn nhận biết rõ rằng, khi J là $-\text{CR}^2\text{R}^3-\text{CR}^{2a}\text{R}^{3a}-$, cả hai nguyên tử cacbon (tức là nguyên tử cacbon mà R^2 và R^3 đều gắn vào đó hoặc nguyên tử cacbon mà R^{2a} và R^{3a} đều gắn vào đó) có thể có tâm lập thể. Tâm lập thể (khi có mặt) sẽ được biểu thị bằng dấu hiệu (*).

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

Sáng chế cũng bao gồm các hỗn hợp raxemic, ví dụ, lượng bằng nhau của các chất đồng phân đối ảnh có các công thức 1' và 1''. Ngoài ra, sáng chế bao gồm hợp chất được làm giàu so với hỗn hợp raxemic trong chất đồng phân đối ảnh có công

thức 1. Sáng chế cũng bao gồm các chất đồng phân đối ảnh hầu như tinh khiết của hợp chất có công thức 1, ví dụ, Công thức 1' và Công thức 1''.

Khi được làm giàu về mức đồng phân đối ảnh, một chất đồng phân đối ảnh có mặt với lượng lớn hơn so với các chất đồng phân đối ảnh khác, và mức độ giàu này có thể được xác định bằng sự biểu thị của lượng dư đồng phân đối ảnh (*enantiomeric excess*: “ee”), lượng này được xác định là $(2x-1) \cdot 100\%$, trong đó x là tỷ lệ mol của chất đồng phân đối ảnh nổi trội trong hỗn hợp (ví dụ, ee là 20% tương ứng với tỷ lệ 60:40 của các chất đồng phân đối ảnh).

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

Hợp chất có công thức 1 có thể chứa các tâm không đối xứng bổ sung. Ví dụ, chính các phân tử thể và các hợp phân phân tử khác như R^6 và R^9 có thể chứa các tâm không đối xứng. Sáng chế bao hàm hỗn hợp racemic cũng như các cấu hình lập thể giàu và gần như tinh khiết ở các tâm không đối xứng bổ sung này.

Hợp chất theo sáng chế có thể có mặt dưới dạng một hoặc nhiều chất đồng phân cấu hình do sự quay giới hạn ở khoảng gắn kết amit (ví dụ $C(=Y^2)-N(R^5)Q^2$) trong Công thức 1. Sáng chế bao gồm hỗn hợp của chất đồng phân cấu hình. Ngoài ra, sáng chế bao gồm hợp chất được làm giàu ở conforme so với các hợp chất khác.

Hợp chất có công thức 1 thường tồn tại ở nhiều hơn một dạng, và do đó Công thức 1 bao gồm tất cả các dạng tinh thể và không tinh thể của các hợp chất chúng có mặt. Dạng không tinh thể bao gồm các phương án là chất rắn như sáp và gom cũng như các phương án là chất lỏng như dung dịch và chất nóng chảy. Dạng tinh thể bao

gồm các phương án về cơ bản là dạng tinh thể đơn và các phương án là hỗn hợp chứa chất đa hình (tức là các dạng tinh thể khác nhau). Thuật ngữ “dạng đa hình” được dùng để chỉ dạng tinh thể cụ thể của hợp chất hoá học có thể kết tinh ở các dạng tinh thể khác nhau, các dạng này có các phân tử trong mạng tinh thể có sự sắp xếp và/hoặc cấu hình khác nhau. Mặc dù chất đa hình có thể có thành phần hóa học giống nhau, chúng cũng có thể khác nhau về thành phần do sự có mặt hoặc không có mặt của nước đồng kết tinh hoặc các phân tử khác, có thể được liên kết yếu hoặc mạnh trong mạng này. Chất đa hình có thể khác về các đặc tính hóa học, vật lý và sinh học như hình dạng, tỷ trọng, độ cứng, màu sắc, độ ổn định hóa học, điểm nóng chảy, độ ẩm, độ nhạy, tốc độ hòa tan và tính sinh khả dụng của tinh thể. Người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực này cần hiểu rằng chất đa hình của hợp chất có công thức 1 có thể có các tác dụng có lợi (ví dụ, thích hợp để điều chế các chế phẩm hữu ích, đặc tính sinh học cải thiện) so với các chất đa hình khác hoặc hỗn hợp của chất đa hình của cùng hợp chất có công thức 1. Việc điều chế và tách chất đa hình cụ thể của hợp chất có công thức 1 có thể đạt được bằng các phương pháp đã biết đối với người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực này bao gồm, ví dụ, phương pháp kết tinh bằng cách sử dụng các dung môi và các nhiệt độ đã chọn. Để xem xét toàn diện về chất đa hình, xem R. Hilfiker, Ed., *Polymorphism In the Pharmaceutical Industrial*, Wiley-VCH, Weinheim, 2006.

Người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực này cần hiểu rằng không phải tất cả các dị vòng chứa nitơ có thể tạo thành các *N*-oxit vì nitơ cần một cặp đơn lẻ để oxy hoá thành oxit; người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực này cần hiểu rằng các dị vòng chứa nitơ này có thể tạo thành các *N*-oxit. Người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực cũng cần hiểu rằng các amin bậc ba có thể tạo thành *N*-oxit. Các phương pháp tổng hợp để điều chế các *N*-oxit của các dị vòng và amin bậc ba là đã biết đối với người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực này bao gồm phương pháp oxy hoá dị vòng và amin bậc ba bằng các axit peroxy như axit peraxetic và 3-cloperbenzoic (MCPBA), hydro peroxit, alkyl hydroperoxit như *t*-butyl hydroperoxit, natri perborat,

và dioxiran như dimetyldioxiran. Các phương pháp điều chế các *N*-oxit này được mô tả rộng rãi và xem xét trong tài liệu, ví dụ: T. L. Gilchrist in *Comprehensive Organic Synthesis*, vol. 7, pp 748–750, S. V. Ley, Ed., Pergamon Press; M. Tisler và B. Stanovnik in *Comprehensive Heterocyclic Chemistry*, vol. 3, pp 18–20, A. J. Boulton and A. McKillop, Eds., Pergamon Press; M. R. Grimmett và B. R. T. Keene in *Advances in Heterocyclic Chemistry*, vol. 43, pp 149–161, A. R. Katritzky, Ed., Academic Press; M. Tisler and B. Stanovnik in *Advances in Heterocyclic Chemistry*, vol. 9, pp 285–291, A. R. Katritzky and A. J. Boulton, Eds., Academic Press; và G. W. H. Cheeseman and E. S. G. Werstiuk in *Advances in Heterocyclic Chemistry*, vol. 22, pp 390–392, A. R. Katritzky và A. J. Boulton, Eds., Academic Press.

Người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực này cũng cần hiểu rằng do môi trường và các điều kiện sinh lý học, các muối của hợp chất hoá học ở trạng thái cân bằng với các dạng không muối tương ứng của chúng, các muối có tính hữu ích sinh học của các dạng không muối. Do đó, rất nhiều dạng muối của hợp chất có công thức 1 có thể dùng để diệt cỏ. Các muối của hợp chất có công thức 1 bao gồm các muối cộng axit với các axit vô cơ hoặc hữu cơ như axit bromhydric, axit clohydric, axit nitric, axit phosphoric, axit lưu huỳnhic, axit axetic, axit butyric, axit fumaric, axit lactic, axit maleic, axit malonic, axit oxalic, axit propionic, axit salixylic, axit tarttric, axit 4-toluensulfonic hoặc axit valeric. Khi hợp chất có công thức 1 chứa gốc axit như axit carboxylic hoặc phenol, muối cũng bao gồm các muối được tạo ra từ các bazơ vô cơ hoặc hữu cơ như pyridin, trietylamin hoặc amoniac, hoặc amin, hydrit, hydroxit hoặc carbonat của natri, kali, lithi, canxi, magie hoặc bari. Do đó, sáng chế bao gồm hợp chất được chọn từ hợp chất có công thức 1, *N*-oxit và các muối thích hợp của chúng.

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

Phương án 1. Hợp chất có công thức 1, bao gồm tất cả các chất đồng phân lập thể, N-oxit, và muối của nó, chế phẩm nông dụng chứa chúng và việc sử dụng chúng làm thuốc diệt cỏ như được mô tả trong phần Bản chất kỹ thuật của sáng chế.

Phương án 2. Hợp chất theo Phương án 1 trong đó, Q^1 là vòng phenyl hoặc hệ vòng naphthalenyl, mỗi vòng hoặc hệ vòng này tùy ý được thế bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R^6 ; hoặc vòng dị vòng có 5 đến 6 cạnh hoặc hệ vòng hai vòng có từ 8 đến 10 cạnh, mỗi vòng hoặc hệ vòng này chứa các thành phần của vòng được chọn từ nguyên tử cacbon và 1 đến 4 nguyên tử khác loại độc lập được chọn từ tối đa 2 nguyên tử O, tối đa 2 nguyên tử S và tối đa 4 nguyên tử N, trong đó, tối đa 2 thành phần của vòng chứa cacbon độc lập được chọn từ $C(=O)$ và $C(=S)$, và thành phần của vòng chứa lưu huỳnh độc lập được chọn từ $S(=O)_u(=NR^7)_v$, mỗi vòng hoặc hệ vòng này tùy ý được thế bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R^6 trên các thành phần của vòng chứa nguyên tử cacbon và được chọn từ R^8 trên các thành phần của vòng chứa nguyên tử nitơ.

Phương án 3. Hợp chất theo Phương án 2 trong đó, Q^1 là vòng phenyl tùy ý được thế bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R^6 ; hoặc vòng dị vòng có 5 đến 6 cạnh, mỗi vòng chứa các thành phần của vòng được chọn từ nguyên tử cacbon và 1 đến 4 nguyên tử khác loại độc lập được chọn từ tối đa 2 nguyên tử O, tối đa 2 nguyên tử S và tối đa 4 nguyên tử N, mỗi vòng tùy ý được thế bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R^6 trên các thành phần của vòng chứa nguyên tử cacbon và được chọn từ R^8 trên các thành phần của vòng chứa nguyên tử nitơ.

Phương án 4. Hợp chất theo Phương án 3 trong đó, Q^1 là vòng phenyl tùy ý được thế bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R^6 .

Phương án 5. Hợp chất theo Phương án 4 trong đó, Q^1 là vòng phenyl tùy ý được thế bằng tối đa 3 phần tử thế độc lập được chọn từ R^6 .

Phương án 6. Hợp chất theo Phương án 5 trong đó, Q^1 là vòng phenyl tùy ý được thế bằng tối đa 2 phần tử thế độc lập được chọn từ R^6 .

Phương án 7. Hợp chất theo Phương án 6 trong đó, khi Q^1 là vòng phenyl được thế bằng ít nhất 2 phần tử thế được chọn từ R^6 , thì 1 phần tử thế là ở vị trí para (4) và phần tử thế còn lại là ở vị trí meta (3) (của vòng phenyl).

Phương án 8. Hợp chất theo Phương án bất kỳ trong số các Phương án từ 1 đến 6 trong đó, Q^1 không phải là vòng phenyl (tức là không được thế bằng R^6).

Phương án 9. Hợp chất theo Phương án bất kỳ trong số các Phương án từ 1 đến 8 trong đó, Q^2 là vòng phenyl tùy ý được thế bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R^9 ; hoặc vòng dị vòng có 5 đến 6 cạnh hoặc hệ vòng hai vòng có từ 8 đến 10 cạnh, mỗi vòng hoặc hệ vòng này chứa các thành phần của vòng được chọn từ nguyên tử cacbon và 1 đến 4 nguyên tử khác loại độc lập được chọn từ tối đa 2 nguyên tử O, tối đa 2 nguyên tử S và tối đa 4 nguyên tử N, trong đó, tối đa 2 thành phần của vòng chứa cacbon độc lập được chọn từ $C(=O)$ và $C(=S)$, và thành phần của vòng chứa lưu huỳnh độc lập được chọn từ $S(=O)_u(=NR^7)_v$, mỗi vòng hoặc hệ vòng này tùy ý được thế bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R^9 trên các thành phần của vòng chứa nguyên tử cacbon và được chọn từ R^{10} trên các thành phần của vòng chứa nguyên tử nitơ.

Phương án 10. Hợp chất theo Phương án 9 trong đó, Q^2 là vòng phenyl tùy ý được thế bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R^9 ; hoặc vòng dị vòng có 5 đến 6 cạnh chứa các thành phần của vòng được chọn từ nguyên tử cacbon và 1 đến 4 nguyên tử khác loại độc lập được chọn từ tối đa 2 nguyên tử O, tối đa 2 nguyên tử S và tối đa 4 nguyên tử N, trong đó, tối đa 2 thành phần của vòng chứa cacbon độc lập được chọn từ $C(=O)$ và $C(=S)$, và thành phần của vòng chứa lưu huỳnh độc lập được chọn từ $S(=O)_u(=NR^7)_v$, mỗi vòng tùy ý được thế bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R^9 trên các thành phần của vòng chứa nguyên tử cacbon và được chọn từ R^{10} trên các thành phần của vòng chứa nguyên tử nitơ.

Phương án 11. Hợp chất theo Phương án 10 trong đó, Q^2 là vòng phenyl tùy ý được thế bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R^9 ; hoặc vòng dị vòng có 5 đến 6 cạnh chứa các thành phần của vòng được chọn từ nguyên tử cacbon và 1 đến 4 nguyên tử khác loại độc lập được chọn từ tối đa 4 nguyên tử N, trong đó, tối đa 2 thành phần của vòng chứa cacbon độc lập được chọn từ $C(=O)$ và $C(=S)$, mỗi vòng tùy ý được thế bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R^9 trên các thành phần của vòng chứa nguyên tử cacbon và được chọn từ R^{10} trên các thành phần của vòng chứa nguyên tử nitơ.

Phương án 12. Hợp chất theo Phương án 11 trong đó, Q^2 là vòng phenyl tùy ý được thế bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R^9 .

Phương án 13. Hợp chất theo Phương án 12 trong đó, Q^2 là vòng phenyl tùy ý được thế bằng tối đa 3 phần tử thế độc lập được chọn từ R^9 .

Phương án 14. Hợp chất theo Phương án 13 trong đó, Q^2 là vòng phenyl tùy ý được thế bằng tối đa 2 phần tử thế độc lập được chọn từ R^9 .

Phương án 15. Hợp chất theo Phương án 14 trong đó, Q^2 là vòng phenyl (tức là không được thế bằng R^9).

Phương án 16. Hợp chất theo Phương án 14 trong đó, khi Q^2 là vòng phenyl được thế bằng ít nhất 2 phần tử thế được chọn từ R^9 , thì 1 phần tử thế là ở vị trí metao (3) và ít nhất phần tử thế còn lại là ở vị trí ortho (2) (của vòng phenyl).

Phương án 17. Hợp chất theo Phương án bất kỳ trong số các Phương án từ 1 đến 16 trong đó, Q^2 không phải là vòng phenyl không được thế.

Phương án 18. Hợp chất theo Phương án bất kỳ trong số các Phương án từ 1 đến 17 trong đó, J là $-CR^2R^3-$.

Phương án 19. Hợp chất theo Phương án bất kỳ trong số các Phương án từ 1 đến 16 trong đó, J là $-CR^2R^3-CR^{2a}R^{3a}-$ (trong đó liên kết nhô ra về phía trái được nối với).

Phương án 20. Hợp chất theo Phương án bất kỳ trong số các Phương án từ 1 đến 19 trong đó, G là $-N(R^1)-$.

Phương án 21. Hợp chất theo Phương án bất kỳ trong số các Phương án từ 1 đến 19 trong đó, G là $-C(R^{18})(R^{19})-$.

Phương án 22. Hợp chất theo Phương án bất kỳ trong số các Phương án từ 1 đến 21 trong đó, Y^1 là O hoặc S.

Phương án 23. Hợp chất theo Phương án 22 trong đó, Y^1 là S.

Phương án 24. Hợp chất theo Phương án 22 trong đó, Y^1 là O.

Phương án 25. Hợp chất theo Phương án bất kỳ trong số các Phương án từ 1 đến 24 trong đó, Y^2 là S.

Phương án 26. Hợp chất theo Phương án bất kỳ trong số các Phương án từ 1 đến 24 trong đó, Y^2 là O.

Phương án 27. Hợp chất theo Phương án bất kỳ trong số các Phương án từ 1 đến 20 hoặc 22 đến 26 trong đó, R^1 là H, C_1-C_6 alkyl hoặc C_3-C_6 xycloalkyl; hoặc Q^3 ; hoặc $-W^1Q^3$.

Phương án 28. Hợp chất theo Phương án 27 trong đó, R^1 là H, C_1-C_6 alkyl.

Phương án 29. Hợp chất theo Phương án 28 trong đó, R^1 là H hoặc CH_3 .

Phương án 30. Hợp chất theo Phương án 29 trong đó, R^1 là H.

Phương án 31. Hợp chất theo Phương án bất kỳ trong số các Phương án từ 1 đến 30 trong đó, R^2 và R^3 mỗi độc lập là H, halogen, C_1-C_4 alkyl hoặc C_1-C_4 alkoxy.

Phương án 32. Hợp chất theo Phương án 31 trong đó, R^2 và R^3 mỗi độc lập là H hoặc C_1-C_4 alkyl.

Phương án 33. Hợp chất theo Phương án 32 trong đó, R^2 và R^3 mỗi độc lập là H hoặc CH_3 .

Phương án 34. Hợp chất theo Phương án 33 trong đó, R^2 và R^3 mỗi độc lập là H.

Phương án 35. Hợp chất theo Phương án bất kỳ trong số các Phương án từ 1 đến 17 hoặc 19 đến 34 trong đó, mỗi R^{2a} và R^{3a} độc lập là H, C_1-C_6 alkyl hoặc C_1-C_6 alkoxy.

Phương án 36. Hợp chất theo Phương án 35 trong đó, mỗi R^{2a} và R^{3a} độc lập là H hoặc C_1-C_6 alkyl.

Phương án 37. Hợp chất theo Phương án 36 trong đó, mỗi R^{2a} và R^{3a} độc lập là H hoặc CH_3 .

Phương án 38. Hợp chất theo Phương án 37 trong đó, mỗi R^{2a} và R^{3a} độc lập là H.

Phương án 39. Hợp chất theo Phương án bất kỳ trong số các Phương án từ 1 đến 38 trong đó, R^4 là H, halogen hoặc C_1-C_4 alkyl.

Phương án 40. Hợp chất theo Phương án 39 trong đó, R^4 là H, Cl, Br hoặc CH_3 .

Phương án 41. Hợp chất theo Phương án 40 trong đó, R^4 là H, Br hoặc CH_3 .

Phương án 42. Hợp chất theo Phương án 41 trong đó, R^4 là H hoặc Br.

Phương án 43. Hợp chất theo Phương án 42 trong đó, R^4 là H.

Phương án 44. Hợp chất theo Phương án bất kỳ trong số các Phương án từ 1 đến 43 trong đó, R^5 là H, C_1-C_6 alkyl, C_2-C_6 alkenyl, C_2-C_8 alkoxyalkyl, C_2-C_8 alkylthioalkyl, C_2-C_8 alkylsulfonylalkyl, C_2-C_8 alkylcarbonyl, C_4-C_{10} xycloalkylcarbonyl, C_2-C_8 alkoxycarbonyl, C_4-C_{10} xycloalkoxycarbonyl, C_2-C_8 alkylaminocarbonyl, C_4-C_{10} xycloalkylaminocarbonyl, C_1-C_6 alkoxy, C_1-C_6

alkylthio, C₃–C₈ xycloalkylthio, C₁–C₆ alkylsulfinyl, C₁–C₆ alkylsulfonyl, C₁–C₆ haloalkylsulfonyl, C₃–C₈ xycloalkylsulfonyl, C₁–C₆ alkylaminosulfonyl, C₂–C₈ dialkylaminosulfonyl; hoặc Q⁴; hoặc –W²Q⁴.

Phương án 45. Hợp chất theo Phương án 44 trong đó, R⁵ là H, C₁–C₆ alkyl, C₂–C₈ alkoxyalkyl, C₂–C₈ alkylthioalkyl, C₂–C₈ alkylcarbonyl, C₄–C₁₀ xycloalkylcarbonyl hoặc C₂–C₈ alkoxycarbonyl.

Phương án 46. Hợp chất theo Phương án 45 trong đó, R⁵ là H, C₁–C₆ alkyl, C₂–C₈ alkoxyalkyl hoặc C₂–C₈ alkylcarbonyl.

Phương án 47. Hợp chất theo Phương án 46 trong đó, R⁵ là H hoặc C₁–C₆.

Phương án 48. Hợp chất theo Phương án 47 trong đó, R⁵ là H.

Phương án 49. Hợp chất theo Phương án bất kỳ trong số các Phương án từ 1 đến 48 trong đó, mỗi R⁶ và R⁹ độc lập là halogen, nitro, C₁–C₈ alkyl, C₁–C₈ xyanoalkyl, C₁–C₈ xyanoalkoxy, C₁–C₈ haloalkyl, C₁–C₈ nitroalkyl, C₂–C₈ alkenyl, C₂–C₈ haloalkenyl, C₂–C₈ nitroalkenyl, C₂–C₈ alkoxyalkyl, C₃–C₈ alkoxyalkoxyalkyl, C₂–C₈ haloalkoxyalkyl, C₂–C₈ haloalkoxyhaloalkoxy, C₄–C₁₀ xycloalkylalkyl, C₄–C₁₀ haloalkylalkyl, C₅–C₁₂ alkylxycloalkylalkyl, C₅–C₁₂ xycloalkylalkenyl, C₃–C₈ xycloalkyl, C₃–C₈ haloalkyl, C₄–C₁₀ alkylxycloalkyl, C₆–C₁₂ xycloalkylxycloalkyl, C₃–C₈ xycloalkenyl, C₃–C₈ haloalkenyl, C₂–C₈ haloalkoxyalkoxy, C₂–C₈ alkoxyalkoxy, C₄–C₁₀ xycloalkoxyalkyl, C₂–C₈ alkylcarbonyl, C₂–C₈ haloalkylcarbonyl, C₄–C₁₀ xycloalkylcarbonyl, –C(=O)OH, C₂–C₈ alkoxycarbonyl, C₂–C₈ haloalkoxycarbonyl, C₄–C₁₀ xycloalkoxycarbonyl, C₅–C₁₂ xycloalkylalkoxycarbonyl, –C(=O)NH₂, C₁–

C₈ alkoxy, C₁–C₈ haloalkoxy, C₂–C₈ alkoxyalkoxy, C₂–C₈ alkenyloxy, C₂–C₈ haloalkenyloxy, C₃–C₈ xycloalkoxy, C₃–C₈ haloxycloalkoxy, C₄–C₁₀ xycloalkylalkoxy, C₃–C₁₀ alkylcarbonylalkoxy, C₂–C₈ alkylcarbonyloxy, C₂–C₈ haloalkylcarbonyloxy, C₄–C₁₀ xycloalkylcarbonyloxy, C₁–C₈ alkylsulfonyloxy, C₁–C₈ haloalkylsulfonyloxy, C₁–C₈ alkylsulfonyl, C₁–C₈ haloalkylsulfonyl, C₃–C₈ xycloalkylsulfonyl; hoặc Q⁵; hoặc –W³Q⁵.

Phương án 50. Hợp chất theo Phương án 49 trong đó, mỗi R⁶ và R⁹ độc lập là halogen, C₁–C₈ alkyl, C₁–C₈ haloalkyl, C₂–C₈ alkoxyalkyl, C₃–C₈ alkoxyalkoxyalkyl, C₄–C₁₀ xycloalkylalkyl, C₅–C₁₂ alkylxycloalkylalkyl, C₃–C₈ xycloalkyl, C₃–C₈ haloxycloalkyl, C₆–C₁₂ xycloalkylxycloalkyl, C₃–C₈ haloxycloalkenyl, C₂–C₈ haloalkoxyalkoxy, C₂–C₈ alkoxyalkoxy, C₄–C₁₀ xycloalkoxyalkyl, C₂–C₈ alkylcarbonyl, C₂–C₈ haloalkylcarbonyl, C₄–C₁₀ xycloalkylcarbonyl, C₂–C₈ alkoxycarbonyl, C₄–C₁₀ xycloalkoxycarbonyl, C₅–C₁₂ xycloalkylalkoxycarbonyl, –C(=O)NH₂, C₁–C₈ alkoxy, C₂–C₈ alkoxyalkoxy, C₂–C₈ haloalkenyloxy, C₃–C₈ xycloalkoxy, C₃–C₈ haloxycloalkoxy, C₄–C₁₀ xycloalkylalkoxy, C₃–C₁₀ alkylcarbonylalkoxy hoặc C₂–C₈ haloalkylcarbonyloxy.

Phương án 51. Hợp chất theo Phương án 50 trong đó, mỗi R⁶ và R⁹ độc lập là halogen, C₁–C₈ alkyl, C₁–C₈ haloalkyl, C₂–C₈ alkoxyalkyl, C₄–C₁₀ xycloalkylalkyl, C₅–C₁₂ alkylxycloalkylalkyl, C₃–C₈ xycloalkyl, C₃–C₈ haloxycloalkyl, C₂–C₈ haloalkoxyalkoxy hoặc C₂–C₈ alkoxyalkoxy.

Phương án 52. Hợp chất theo Phương án 51 trong đó, mỗi R⁶ và R⁹ độc lập là halogen, C₁–C₈ alkyl hoặc C₃–C₈ xycloalkyl.

Phương án 53. Hợp chất theo Phương án 52 trong đó, mỗi R^6 và R^9 độc lập là halogen, C_1 – C_8 alkyl hoặc C_3 – C_8 xycloalkyl.

Phương án 54. Hợp chất theo Phương án 53 trong đó, mỗi R^6 và R^9 độc lập là halogen.

Phương án 55. Hợp chất theo Phương án bất kỳ trong số các Phương án từ 1 đến 52 trong đó, R^7 độc lập là H, xyano hoặc C_2 alkylcarbonyl.

Phương án 56. Hợp chất theo Phương án 55 trong đó, R^7 độc lập là H hoặc xyano.

Phương án 57. Hợp chất theo Phương án bất kỳ trong số các Phương án từ 1 đến 56 trong đó, mỗi R^8 và R^{10} độc lập là xyano, C_1 – C_3 alkyl, C_3 – C_6 xycloalkyl, C_1 – C_3 alkoxy, C_2 – C_3 alkylcarbonyl, C_2 – C_3 alkoxycarbonyl hoặc C_2 – C_3 alkylaminoalkyl.

Phương án 58. Hợp chất theo Phương án 57 trong đó, mỗi R^8 và R^{10} độc lập là C_1 – C_3 alkyl, C_3 – C_6 xycloalkyl hoặc C_2 – C_3 alkoxycarbonyl.

Phương án 59. Hợp chất theo Phương án 58 trong đó, mỗi R^8 và R^{10} độc lập là C_2 – C_3 alkoxycarbonyl.

Phương án 60. Hợp chất theo Phương án 59 trong đó, mỗi R^8 và R^{10} độc lập là C_1 – C_3 alkyl hoặc C_3 – C_6 xycloalkyl.

Phương án 61. Hợp chất theo Phương án 60 trong đó, mỗi R^8 và R^{10} độc lập là C_1 – C_3 alkyl.

Phương án 62. Hợp chất theo Phương án 61 trong đó, mỗi R^8 và R^{10} độc lập là CH_3 .

Phương án 63. Hợp chất theo Phương án bất kỳ trong số các Phương án từ 1 đến 62 trong đó, mỗi R^{11} độc lập là H hoặc C_1-C_4 alkyl.

Phương án 64. Hợp chất theo Phương án 63 trong đó, mỗi R^{11} độc lập là H hoặc CH_3 .

Phương án 65. Hợp chất theo Phương án bất kỳ trong số các Phương án từ 1 đến 64 trong đó, W^1 là $-O-$, C_1-C_3 alkandiyl hoặc $-C(=O)(C_1-C_3 \text{ alkyl})-$.

Phương án 66. Hợp chất Phương án 65 trong đó, W^1 là $-O-$ hoặc $-CH_2-$.

Phương án 67. Hợp chất theo Phương án bất kỳ trong số các Phương án từ 1 đến 66 trong đó, W^2 là $-O-$ hoặc $-CH_2-$.

Phương án 68. Hợp chất theo Phương án bất kỳ trong số các Phương án từ 1 đến 65 trong đó, W^3 là $-O-$ hoặc $-CH_2-$.

Phương án 69. Hợp chất theo Phương án bất kỳ trong số các Phương án từ 1 đến 68 trong đó, mỗi Q^3 là phenyl; hoặc vòng dị vòng thơm có 5 hoặc 6 cạnh, mỗi nhóm này tùy ý được thế lên các thành phần của vòng bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R^{12} và các thành phần của vòng chứa nitơ bằng tối đa 2 phần tử thế độc lập được chọn từ R^{15} .

Phương án 70. Hợp chất theo Phương án 69 trong đó, mỗi Q^3 là phenyl tùy ý được thế lên các thành phần của vòng bằng tối đa 5 phần tử thế độc lập được chọn từ

R¹²; hoặc pyridinyl tùy ý được thế bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R¹⁵.

Phương án 71. Hợp chất theo Phương án bất kỳ trong số các Phương án từ 1 đến 70 trong đó, mỗi Q⁴ là phenyl tùy ý được thế bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R¹³; hoặc vòng dị vòng thơm có 5 hoặc 6 cạnh, mỗi nhóm này tùy ý được thế lên các thành phần của vòng bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R¹³ và các thành phần của vòng chứa nitơ bằng tối đa 2 phần tử thế độc lập được chọn từ R¹⁶.

Phương án 72. Hợp chất theo Phương án 71 trong đó, mỗi Q⁴ là phenyl tùy ý được thế bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R¹³; hoặc pyridinyl tùy ý được thế bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R¹³.

Phương án 73. Hợp chất theo Phương án bất kỳ trong số các Phương án từ 1 đến 72 trong đó, mỗi Q⁵ là phenyl tùy ý được thế lên các thành phần của vòng bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R¹⁴; hoặc vòng dị vòng thơm có 5 hoặc 6 cạnh, mỗi nhóm này tùy ý được thế lên thành phần của vòng chứa cacbon bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R¹⁴ và các thành phần của vòng chứa nitơ bằng tối đa 2 phần tử thế độc lập được chọn từ R¹⁷.

Phương án 74. Hợp chất theo Phương án 73 trong đó, mỗi Q⁵ là phenyl tùy ý được thế lên các thành phần của vòng bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R¹⁴; hoặc pyridinyl tùy ý được thế lên thành phần của vòng chứa cacbon bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R¹⁴.

Phương án 75. Hợp chất theo Phương án bất kỳ trong số các Phương án từ 1 đến 74 trong đó, mỗi R¹², R¹³ và R¹⁴ độc lập là halogen, xyano, hydroxy, amino, nitro,

-CHO, -C(=O)OH, -C(=O)NH₂, -SO₂NH₂, C₁-C₆ alkyl, C₁-C₆ haloalkyl, C₂-C₆ alkenyl, C₂-C₆ alkynyl, C₂-C₈ alkylcarbonyl, C₂-C₈ haloalkylcarbonyl, C₂-C₈ alkoxy carbonyl, C₄-C₁₀ xycloalkoxy carbonyl, C₅-C₁₂ xycloalkylalkoxy carbonyl, C₂-C₈ alkylaminocarbonyl, C₃-C₁₀ dialkylaminocarbonyl, C₁-C₆ alkoxy, C₁-C₆ haloalkoxy, C₂-C₈ alkylcarbonyloxy, C₁-C₆ alkylthio, C₁-C₆ haloalkylthio, C₁-C₆ alkylsulfinyl, C₁-C₆ haloalkylsulfinyl, C₁-C₆ alkylsulfonyl, C₁-C₆ haloalkylsulfonyl, C₁-C₆ alkylaminosulfonyl, C₂-C₈ dialkylaminosulfonyl, C₃-C₁₀ trialkylsilyl, C₁-C₆ alkylamino, C₂-C₈ dialkylamino, C₂-C₈ alkylcarbonylamino hoặc C₁-C₆ alkylsulfonylamino.

Phương án 76. Hợp chất theo Phương án 75 trong đó, mỗi R¹², R¹³ và R¹⁴ độc lập là halogen, xyano, hydroxy, amino, nitro, -CHO, -C(=O)OH, -C(=O)NH₂, -SO₂NH₂, C₁-C₆ alkyl, C₁-C₆ haloalkyl.

Phương án 77. Hợp chất theo Phương án 76 trong đó, mỗi R¹², R¹³ và R¹⁴ độc lập là halogen, nitro, C₁-C₆ alkyl hoặc C₁-C₆ haloalkyl.

Phương án 78. Hợp chất theo Phương án 77 trong đó, mỗi R¹², R¹³ và R¹⁴ độc lập là halogen, C₁-C₆ alkyl hoặc C₁-C₆ haloalkyl.

Phương án 79. Hợp chất theo Phương án 78 trong đó, mỗi R¹², R¹³ và R¹⁴ độc lập là halogen hoặc C₁-C₆ alkyl.

Phương án 80. Hợp chất theo Phương án 79 trong đó, mỗi R¹², R¹³ và R¹⁴ độc lập là halogen.

Phương án 81. Hợp chất theo Phương án 80 trong đó, mỗi R¹⁵, R¹⁶ và R¹⁷ độc lập là H, CH₃ hoặc CH₂CH₃.

Phương án 82. Hợp chất theo Phương án 81 trong đó, mỗi R^{15} , R^{16} và R^{17} độc lập là H hoặc CH_3 .

Phương án 83. Hợp chất theo Phương án bất kỳ trong số các Phương án từ 1 đến 82 trong đó, mỗi R^{18} và R^{19} độc lập là H, halogen, C_1 – C_4 alkyl hoặc C_1 – C_4 alkoxy.

Phương án 84. Hợp chất Phương án 83 trong đó, mỗi R^{18} và R^{19} độc lập là H, halogen hoặc C_1 – C_4 alkyl.

Phương án 85. Hợp chất Phương án 84 trong đó, mỗi R^{18} và R^{19} độc lập là H hoặc halogen.

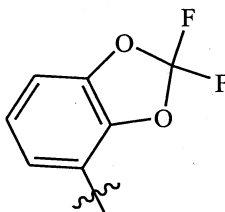
Phương án 86. Hợp chất Phương án 85 trong đó, mỗi R^{18} và R^{19} độc lập là H hoặc CH_3 .

Phương án 87. Hợp chất theo Phương án 2 trong đó, Q^1 là hệ vòng hai vòng có 8 đến 9 cạnh chứa các thành phần của vòng được chọn từ nguyên tử cacbon và 1 đến 4 nguyên tử khác loại độc lập được chọn từ tối đa 2 nguyên tử O, mỗi hệ vòng này tùy ý được thế bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R^6 trên các thành phần của vòng chứa nguyên tử cacbon.

Phương án 88. Hợp chất theo Phương án 87 trong đó, Q^1 is an 8-membered bicyclic ring hệ này chứa các thành phần của vòng được chọn từ nguyên tử cacbon và 1 đến 4 nguyên tử khác loại độc lập được chọn từ tối đa 2 nguyên tử O, mỗi hệ vòng này tùy ý được thế bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R^6 trên các thành phần của vòng chứa nguyên tử cacbon.

Phương án 89. Hợp chất theo Phương án 88 trong đó, Q^1 là hệ vòng hai vòng dị thom có 8 cạnh chứa các thành phần của vòng được chọn từ nguyên tử cacbon và 2 nguyên tử O, hệ này tùy ý được thế bằng tối đa 3 phần tử thế độc lập được chọn từ R^6 trên các thành phần của vòng chứa nguyên tử cacbon (tức là U-103 trong Bảng thể hiện 3).

Phương án 90. Hợp chất theo Phương án 89 trong đó, Q^1 là U-103A:



U-103A

Phương án 91. Hợp chất theo Phương án 6 trong đó, Q^1 là vòng phenyl được thế bằng ít nhất 1 phần tử thế được chọn từ R^6 ở vị trí meta (tức là vị trí 3) (của vòng phenyl).

Phương án 92. Hợp chất theo Phương án 1 trong đó, R^6 là Q^3 ; hoặc $-W^1Q^3$.

Phương án 93. Hợp chất theo Phương án 1 trong đó, R^6 là Q^3 .

Phương án 94. Hợp chất theo Phương án 1 trong đó, W^3 là $-O-$, $-CH_2-$ hoặc $-CH_2CH_2-$.

Phương án 95. Hợp chất theo Phương án 1 trong đó, Q^1 là vòng phenyl tùy ý được thế bằng 1 đến 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R^6 ; hoặc vòng dị thom có từ

5 đến 6 cạnh chứa các thành phần của vòng được chọn từ nguyên tử cacbon và 1 đến 4 nguyên tử khác loại độc lập được chọn từ tối đa 2 nguyên tử O, tối đa 2 nguyên tử S và tối đa 4 nguyên tử N, tùy ý được thế bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R^6 trên các thành phần của vòng chứa nguyên tử cacbon và được chọn từ R^8 trên các thành phần của vòng chứa nguyên tử nitơ.

Phương án 96. Hợp chất theo Phương án 1 trong đó, Q^2 là vòng phenyl tùy ý được thế bằng tối đa 5 phần tử thế độc lập được chọn từ R^9 ; hoặc vòng dị vòng chưa bão hòa đầy đủ có từ 5 đến 6 cạnh, mỗi vòng chứa các thành phần của vòng được chọn từ nguyên tử cacbon và 1 đến 4 nguyên tử khác loại độc lập được chọn từ tối đa 2 nguyên tử O, tối đa 2 nguyên tử S và tối đa 4 nguyên tử N, mỗi vòng hoặc hệ vòng này tùy ý được thế bằng tối đa 5 phần tử thế độc lập được chọn từ R^9 trên các thành phần của vòng chứa nguyên tử cacbon và được chọn từ R^{10} trên các thành phần của vòng chứa nguyên tử nitơ.

Phương án 97. Hợp chất theo Phương án 96 trong đó, Q^2 là vòng phenyl tùy ý được thế bằng tối đa 5 phần tử thế độc lập được chọn từ R^9 ; hoặc vòng dị vòng chưa bão hòa đầy đủ có 6 cạnh, mỗi vòng chứa các thành phần của vòng được chọn từ nguyên tử cacbon và 1 đến 4 nguyên tử khác loại độc lập được chọn từ tối đa 4 nguyên tử N, mỗi vòng hoặc hệ vòng này tùy ý được thế bằng tối đa 5 phần tử thế độc lập được chọn từ R^9 trên các thành phần của vòng chứa nguyên tử cacbon.

Phương án 98. Hợp chất theo Phương án 97 trong đó, Q^2 là vòng phenyl tùy ý được thế bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R^9 ; hoặc vòng pyridyl, tùy ý được thế bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R^9 trên các thành phần của vòng chứa nguyên tử cacbon.

Phương án 99. Hợp chất theo Phương án 98 trong đó, Q^2 là vòng 3-pyridyl tùy ý được thế bằng tối đa 3 phần tử thế độc lập được chọn từ R^9 trên các thành phần của vòng chứa nguyên tử cacbon.

Phương án 100. Hợp chất theo Phương án 99 trong đó, Q^2 là vòng 3-pyridyl tùy ý được thế bằng tối đa 3 phần tử thế độc lập được chọn từ C_1-C_8 alkyl hoặc C_1-C_8 haloalkyl.

Phương án 101. Hợp chất theo Phương án 1 trong đó, mỗi R^6 độc lập là halogen, C_1-C_8 alkyl hoặc C_1-C_8 haloalkyl.

Phương án 102. Hợp chất theo Phương án 101 trong đó, mỗi R^6 độc lập là Cl, F, CH_3 hoặc CF_3 .

Phương án 103. Hợp chất theo Phương án 102 trong đó, mỗi R^6 độc lập là CH_3 .

Phương án 104. Hợp chất theo Phương án 1 trong đó, mỗi R^9 độc lập là F, Cl, CH_3 hoặc CF_3 .

Các Phương án theo sáng chế, bao gồm Phương án 1 đến 104 ở trên cũng như các Phương án bất kỳ khác được mô tả ở đây, có thể được kết hợp với nhau theo cách bất kỳ, và phần mô tả các Phương án biến đổi này không chỉ đề cập đến các hợp chất có công thức có công thức 1 mà còn đề cập đến cả các hợp chất ban đầu và hợp chất trung gian được sử dụng để điều chế hợp chất có công thức 1. Ngoài ra, Phương án theo sáng chế, bao gồm các Phương án 1–104 ở trên cũng như các Phương án bất kỳ khác được mô tả ở đây, và sự kết hợp bất kỳ giữa các Phương án này, đề cập đến chế phẩm và phương pháp theo sáng chế.

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

Q^1 là vòng phenyl hoặc hệ vòng naphthalenyl, mỗi vòng hoặc hệ vòng này tùy ý được thế bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R^6 ; hoặc vòng dị vòng có 5 đến 6 cạnh hoặc hệ vòng hai vòng có từ 8 đến 10 cạnh, mỗi vòng hoặc hệ vòng này chứa các thành phần của vòng được chọn từ nguyên tử cacbon và 1 đến 4 nguyên tử khác loại độc lập được chọn từ tối đa 2 nguyên tử O, tối đa 2 nguyên tử S và tối đa 4 nguyên tử N, trong đó, tối đa 2 thành phần của vòng chứa cacbon độc lập được chọn từ $C(=O)$ và $C(=S)$, và thành phần của vòng chứa lưu huỳnh độc lập được chọn từ $S(=O)_u(=NR^7)_v$, mỗi vòng hoặc hệ vòng này tùy ý được thế bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R^6 trên các thành phần của vòng chứa nguyên tử cacbon và được chọn từ R^8 trên các thành phần của vòng chứa nguyên tử nitơ;

Q^2 là vòng phenyl tùy ý được thế bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R^9 ; hoặc vòng dị vòng có 5 đến 6 cạnh hoặc hệ vòng hai vòng có từ 8 đến 10 cạnh, mỗi vòng hoặc hệ vòng này chứa các thành phần của vòng được chọn từ nguyên tử cacbon và 1 đến 4 nguyên tử khác loại độc lập được chọn từ tối đa 2 nguyên tử O, tối đa 2 nguyên tử S và tối đa 4 nguyên tử N, trong đó, tối đa 2 thành phần của vòng chứa cacbon độc lập được chọn từ $C(=O)$ và $C(=S)$, và thành phần của vòng chứa lưu huỳnh độc lập được chọn từ $S(=O)_u(=NR^7)_v$, mỗi vòng hoặc hệ vòng này tùy ý được thế bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R^9 trên các thành phần của vòng chứa nguyên tử cacbon và được chọn từ R^{10} trên các thành phần của vòng chứa nguyên tử nitơ;

R^1 là H, C_1-C_6 alkyl hoặc C_3-C_6 xycloalkyl; hoặc Q^3 ; hoặc $-W^1Q^3$;

R^2 và R^3 mỗi độc lập là H, halogen, C_1-C_4 alkyl hoặc C_1-C_4 alkoxy;

R^{2a} và R^{3a} mỗi độc lập là H, C₁–C₆ alkyl hoặc C₁–C₆ alkoxy;

R⁴ là H, halogen hoặc C₁–C₄ alkyl;

R⁵ là H, C₁–C₆ alkyl, C₂–C₆ alkenyl, C₂–C₈ alkoxyalkyl, C₂–C₈ alkylthioalkyl, C₂–C₈ alkylsulfonylalkyl, C₂–C₈ alkylcarbonyl, C₄–C₁₀ xycloalkylcarbonyl, C₂–C₈ alkoxycarbonyl, C₄–C₁₀ xycloalkoxycarbonyl, C₂–C₈ alkylaminocarbonyl, C₄–C₁₀ xycloalkylaminocarbonyl, C₁–C₆ alkoxy, C₁–C₆ alkylthio, C₃–C₈ xycloalkylthio, C₁–C₆ alkylsulfinyl, C₁–C₆ alkylsulfonyl, C₁–C₆ haloalkylsulfonyl, C₃–C₈ xycloalkylsulfonyl, C₁–C₆ alkylaminosulfonyl, C₂–C₈ dialkylaminosulfonyl; hoặc Q⁴; hoặc –W²Q⁴;

mỗi R⁶ và R⁹ độc lập là halogen, nitro, C₁–C₈ alkyl, C₁–C₈ xyanoalkyl, C₁–C₈ xyanoalkoxy, C₁–C₈ haloalkyl, C₁–C₈ nitroalkyl, C₂–C₈ alkenyl, C₂–C₈ haloalkenyl, C₂–C₈ nitroalkenyl, C₂–C₈ alkoxyalkyl, C₃–C₈ alkoxyalkoxyalkyl, C₂–C₈ haloalkoxyalkyl, C₂–C₈ haloalkoxyhaloalkoxy, C₄–C₁₀ xycloalkylalkyl, C₄–C₁₀ haloxyaloalkylalkyl, C₅–C₁₂ alkylxycloalkylalkyl, C₅–C₁₂ xycloalkylalkenyl, C₃–C₈ xycloalkyl, C₃–C₈ haloxyaloalkyl, C₄–C₁₀ alkylxycloalkyl, C₆–C₁₂ xycloalkylxycloalkyl, C₃–C₈ xycloalkenyl, C₃–C₈ haloxyaloalkenyl, C₂–C₈ haloalkoxyalkoxy, C₂–C₈ alkoxyalkoxy, C₄–C₁₀ xycloalkoxyalkyl, C₂–C₈ alkylcarbonyl, C₂–C₈ haloalkylcarbonyl, C₄–C₁₀ xycloalkylcarbonyl, –C(=O)OH, C₂–C₈ alkoxycarbonyl, C₂–C₈ haloalkoxycarbonyl, C₄–C₁₀ xycloalkoxycarbonyl, C₅–C₁₂ xycloalkylalkoxycarbonyl, –C(=O)NH₂, C₁–C₈ alkoxy, C₁–C₈ haloalkoxy, C₂–C₈ alkoxyalkoxy, C₂–C₈ alkenyloxy, C₂–C₈ haloalkenyloxy, C₃–C₈ xycloalkoxy, C₃–C₈ haloxyaloalkoxy, C₄–C₁₀ xycloalkylalkoxy, C₃–C₁₀ alkylcarbonylalkoxy, C₂–C₈ alkylcarbonyloxy, C₂–C₈

haloalkylcarbonyloxy, C₄–C₁₀ xycloalkylcarbonyloxy, C₁–C₈ alkylsulfonyloxy, C₁–C₈ haloalkylsulfonyloxy, C₁–C₈ alkylsulfonyl, C₁–C₈ haloalkylsulfonyl, C₃–C₈ xycloalkylsulfonyl; hoặc Q⁵; hoặc –W³Q⁵;

R⁷ độc lập là H, xyano hoặc C₂ alkylcarbonyl;

mỗi R⁸ và R¹⁰ độc lập là xyano, C₁–C₃ alkyl, C₃–C₆ xycloalkyl, C₁–C₃ alkoxy, C₂–C₃ alkylcarbonyl, C₂–C₃ alkoxycarbonyl hoặc C₂–C₃ alkylaminoalkyl;

mỗi R¹¹ độc lập là H hoặc C₁–C₄ alkyl;

W¹ là –O–, C₁–C₃ alkandiyl hoặc –C(=O)(C₁–C₃ alkyl)–;

W² là –O– hoặc –CH₂–;

W³ là –O– hoặc –CH₂–;

mỗi Q³ là phenyl; hoặc vòng dị vòng thơm có 5 hoặc 6 cạnh, mỗi nhóm này tùy ý được thế lên các thành phần của vòng bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R¹² và các thành phần của vòng chứa nitơ bằng tối đa 2 phần tử thế độc lập được chọn từ R¹⁵;

mỗi Q⁴ là phenyl tùy ý được thế bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R¹³; hoặc vòng dị vòng thơm có 5 hoặc 6 cạnh, mỗi nhóm này tùy ý được thế lên các thành phần của vòng bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R¹³ và các thành phần của vòng chứa nitơ bằng tối đa 2 phần tử thế độc lập được chọn từ R¹⁶;

mỗi Q⁵ là phenyl tùy ý được thế lên các thành phần của vòng bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R¹⁴; hoặc vòng dị vòng thơm có 5 hoặc 6 cạnh, mỗi

nhóm này tùy ý được thế lên thành phần của vòng chứa cacbon bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R^{14} và các thành phần của vòng chứa nitơ bằng tối đa 2 phần tử thế độc lập được chọn từ R^{17} ;

mỗi R^{12} , R^{13} và R^{14} độc lập là halogen, xyano, hydroxy, amino, nitro, -CHO, -C(=O)OH, -C(=O)NH₂, -SO₂NH₂, C₁-C₆ alkyl, C₁-C₆ haloalkyl, C₂-C₆ alkenyl, C₂-C₆ alkynyl, C₂-C₈ alkylcarbonyl, C₂-C₈ haloalkylcarbonyl, C₂-C₈ alkoxy, C₄-C₁₀ xycloalkoxy, C₅-C₁₂ xycloalkylalkoxy, C₂-C₈ alkylaminocarbonyl, C₃-C₁₀ dialkylaminocarbonyl, C₁-C₆ alkoxy, C₁-C₆ haloalkoxy, C₂-C₈ alkylcarbonyloxy, C₁-C₆ alkylthio, C₁-C₆ haloalkylthio, C₁-C₆ alkylsulfinyl, C₁-C₆ haloalkylsulfinyl, C₁-C₆ alkylsulfonyl, C₁-C₆ haloalkylsulfonyl, C₁-C₆ alkylaminosulfonyl, C₂-C₈ dialkylaminosulfonyl, C₃-C₁₀ trialkylsilyl, C₁-C₆ alkylamino, C₂-C₈ dialkylamino, C₂-C₈ alkylcarbonylamino hoặc C₁-C₆ alkylsulfonylamino;

mỗi R^{15} , R^{16} và R^{17} độc lập là H, CH₃ hoặc CH₂CH₃; và

mỗi R^{18} và R^{19} độc lập là H, halogen, C₁-C₄ alkyl hoặc C₁-C₄ alkoxy.

Phương án B. Hợp chất theo Phương án A trong đó,

Q^1 là vòng phenyl tùy ý được thế bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R^6 ; hoặc vòng dị vòng có 5 đến 6 cạnh, mỗi vòng chứa các thành phần của vòng được chọn từ nguyên tử cacbon và 1 đến 4 nguyên tử khác loại độc lập được chọn từ tối đa 2 nguyên tử O, tối đa 2 nguyên tử S và tối đa 4 nguyên tử N, mỗi vòng tùy ý được thế bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R^6 trên các thành phần của vòng chứa nguyên tử cacbon và được chọn từ R^8 trên các thành phần của vòng chứa nguyên tử nitơ;

Q^2 là vòng phenyl tùy ý được thế bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R^9 ; hoặc vòng dị vòng có 5 đến 6 cạnh chứa các thành phần của vòng được chọn từ nguyên tử cacbon và 1 đến 4 nguyên tử khác loại độc lập được chọn từ tối đa 2 nguyên tử O, tối đa 2 nguyên tử S và tối đa 4 nguyên tử N, trong đó, tối đa 2 thành phần của vòng chứa cacbon độc lập được chọn từ $C(=O)$ và $C(=S)$, và thành phần của vòng chứa lưu huỳnh độc lập được chọn từ $S(=O)_u(=NR^7)_v$, mỗi vòng tùy ý được thế bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R^9 trên các thành phần của vòng chứa nguyên tử cacbon và được chọn từ R^{10} trên các thành phần của vòng chứa nguyên tử nitơ;

J là $-CR^2R^3-$;

Y^1 là O hoặc S;

R^1 là H, C_1-C_6 alkyl;

mỗi R^2 và R^3 độc lập là H hoặc C_1-C_4 alkyl;

R^4 là H, Cl, Br hoặc CH_3 ;

R^5 là H, C_1-C_6 alkyl, C_2-C_8 alkoxyalkyl, C_2-C_8 alkylthioalkyl, C_2-C_8 alkylcarbonyl, C_4-C_{10} xycloalkylcarbonyl hoặc C_2-C_8 alkoxycarbonyl;

mỗi R^6 và R^9 độc lập là halogen, C_1-C_8 alkyl, C_1-C_8 haloalkyl, C_2-C_8 alkoxyalkyl, C_3-C_8 alkoxyalkoxyalkyl, C_4-C_{10} xycloalkylalkyl, C_5-C_{12} alkylxycloalkylalkyl, C_3-C_8 xycloalkyl, C_3-C_8 haloalkyl, C_6-C_{12} xycloalkylxycloalkyl, C_3-C_8 haloalkyl, C_2-C_8 haloalkoxyalkoxy, C_2-C_8 alkoxyalkoxy, C_4-C_{10} xycloalkoxyalkyl, C_2-C_8 alkylcarbonyl, C_2-C_8

haloalkylcarbonyl, C₄–C₁₀ xycloalkylcarbonyl, C₂–C₈ alkoxycarbonyl, C₄–C₁₀ xycloalkoxycarbonyl, C₅–C₁₂ xycloalkylalkoxycarbonyl, -C(=O)NH₂, C₁–C₈ alkoxy, C₂–C₈ alkoxyalkoxy, C₂–C₈ haloalkenyloxy, C₃–C₈ xycloalkoxy, C₃–C₈ halo xycloalkoxy, C₄–C₁₀ xycloalkylalkoxy, C₃–C₁₀ alkylcarbonylalkoxy hoặc C₂–C₈ haloalkylcarbonyloxy;

R⁷ độc lập là H hoặc xyano;

mỗi R⁸ và R¹⁰ độc lập là C₁–C₃ alkyl, C₃–C₆ xycloalkyl hoặc C₂–C₃ alkoxycarbonyl; và

mỗi R¹¹ độc lập là H hoặc CH₃.

Phương án C. Hợp chất theo Phương án B, trong đó:

Q¹ là vòng phenyl tùy ý được thế bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R⁶;

Q² là vòng phenyl tùy ý được thế bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R⁹;

G là -N(R¹)-;

Y¹ là O;

Y² là O;

R¹ là H hoặc CH₃;

R² và R³ mỗi độc lập là H hoặc CH₃;

R^4 là H, Br hoặc CH_3 ;

R^5 là H, C_1-C_6 alkyl, C_2-C_8 alkoxyalkyl hoặc C_2-C_8 alkylcarbonyl; và

mỗi R^6 và R^9 độc lập là halogen, C_1-C_8 alkyl, C_1-C_8 haloalkyl, C_2-C_8 alkoxyalkyl, C_4-C_{10} xycloalkylalkyl, C_5-C_{12} alkylxycloalkylalkyl, C_3-C_8 xycloalkyl, C_3-C_8 haloalkyl, C_2-C_8 haloalkoxyalkoxy hoặc C_2-C_8 alkoxyalkoxy.

Phương án D. Hợp chất có công thức C, trong đó:

Q^1 là vòng phenyl tùy ý được thế bằng tối đa 3 phần tử thế độc lập được chọn từ R^6 ;

Q^2 là vòng phenyl tùy ý được thế bằng tối đa 3 phần tử thế độc lập được chọn từ R^9 ;

R^2 và R^3 mỗi độc lập là H;

R^4 là H hoặc Br; và

R^5 là H hoặc C_1-C_6 ; và

mỗi R^6 và R^9 độc lập là halogen, C_1-C_8 alkyl hoặc C_3-C_8 xycloalkyl.

Phương án E. Hợp chất có công thức D trong đó,

Q^1 là vòng phenyl tùy ý được thế bằng tối đa 2 phần tử thế độc lập được chọn từ R^6 ;

Q^2 là vòng phenyl tùy ý được thế bằng tối đa 2 phần tử thế độc lập được chọn từ R^9 ;

R^4 là H;

R^5 là H; và

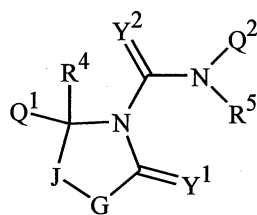
mỗi R^6 và R^9 độc lập là halogen.

Các phương án cụ thể của Sáng chế bao gồm hợp chất được nêu trong phần Bản chất kỹ thuật của sáng chế được chọn từ:

4-(3,4-diflophenyl)-*N*-(2-flophenyl)-2-oxo-3-oxazolidincarboxamit (Hợp chất 3); và

N-(2,3-diflophenyl)-2-oxo-5-phenyl-1-imidazolidincarboxamit (Hợp chất 12);

Phương án P. Hợp chất có công thức 1P (bao gồm tất cả các chất đồng phân lập thể), bao gồm N-oxit và muối của chúng, chế phẩm nông dụng chứa chúng và sử dụng chúng làm thuốc diệt cỏ:



1P

trong đó:

Q^1 là vòng phenyl hoặc hệ vòng naphtalenyl, mỗi vòng hoặc hệ vòng này tùy ý được thế bằng tối đa 5 phần tử thế độc lập được chọn từ R^6 ; hoặc vòng dị vòng có từ

4 đến 7 cạnh hoặc hệ vòng hai vòng có từ 8 đến 10 cạnh, mỗi vòng hoặc hệ vòng này chứa các thành phần của vòng được chọn từ nguyên tử cacbon và 1 đến 4 nguyên tử khác loại độc lập được chọn từ tối đa 2 nguyên tử O, tối đa 2 nguyên tử S và tối đa 4 nguyên tử N, trong đó, tối đa 3 thành phần của vòng chứa cacbon độc lập được chọn từ C(=O) và C(=S), và thành phần của vòng chứa lưu huỳnh độc lập được chọn từ $S(=O)_u(=NR^7)_v$, mỗi vòng hoặc hệ vòng này tùy ý được thế bằng tối đa 5 phần tử thế độc lập được chọn từ R^6 trên các thành phần của vòng chứa nguyên tử cacbon và được chọn từ R^8 trên các thành phần của vòng chứa nguyên tử nitơ;

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

J là $-CR^2R^3-$ hoặc $-CR^2R^3-CR^{2a}R^{3a}-$ (trong đó liên kết nhô ra về phía trái được nối với);

G là $-O-$, $-N(R^1)-$ hoặc $-C(R^{18})(R^{19})-$;

Y^1 là O, S hoặc NR^{11} ;

Y^2 là O hoặc S;

R^1 là H, hydroxy, amino, xyano, formyl, C₃–C₈ alkylcarbonylalkyl, C₁–C₆ alkyl, C₁–C₆ haloalkyl, C₂–C₆ alkenyl, C₃–C₆ alkynyl, C₂–C₆ xyanoalkyl, C₃–C₆ xycloalkyl, C₄–C₈ xycloalkylalkyl, C₂–C₈ alkoxyalkyl, C₂–C₈ haloalkoxyalkyl, C₂–C₈ haloalkenylalkyl, C₂–C₈ alkylthioalkyl, C₂–C₈ alkylsulfinylalkyl, C₂–C₈ alkylsulfonylalkyl, C₂–C₈ alkylcarbonyl, C₂–C₈ haloalkylcarbonyl, C₄–C₁₀ xycloalkylcarbonyl, C₅–C₁₀ xycloalkylcarbonylalkyl, C₂–C₈ haloalkoxycarbonyl, C₄–C₁₀ xycloalkoxycarbonyl, C₂–C₈ alkylaminocarbonyl, C₃–C₁₀ dialkylaminocarbonyl, C₄–C₁₀ xycloalkylaminocarbonyl, C₁–C₆ alkoxy, C₁–C₆ alkylthio, C₁–C₆ haloalkylthio, C₃–C₈ xycloalkylthio, C₁–C₆ alkylsulfinyl, C₁–C₆ haloalkylsulfinyl, C₃–C₈ xycloalkylsulfinyl, C₁–C₆ alkylsulfonyl, C₁–C₆ haloalkylsulfonyl, C₃–C₈ xycloalkylsulfonyl, C₁–C₆ alkylaminosulfonyl, C₂–C₈ dialkylaminosulfonyl hoặc C₃–C₁₀ trialkylsilyl; hoặc Q^1 ; hoặc $-W^1Q^1$;

mỗi R^2 và R^3 độc lập là H, halogen, hydroxy, C₁–C₄ alkyl, C₁–C₄ haloalkyl hoặc C₁–C₄ alkoxy;

mỗi R^{2a} và R^{3a} độc lập là H, C₁–C₆ alkyl, C₂–C₆ alkenyl, C₃–C₆ alkynyl hoặc C₁–C₆ alkoxy;

R^4 là H, halogen, hydroxy, C₁–C₄ alkoxy, C₁–C₄ haloalkyl hoặc C₁–C₄ alkyl;

R^5 là H, hydroxy, amino, C₁–C₆ alkyl, C₁–C₆ haloalkyl, C₂–C₆ alkenyl, C₃–C₆ alkynyl, C₂–C₈ alkoxyalkyl, C₂–C₈ haloalkoxyalkyl, C₂–C₈ alkylthioalkyl, C₂–C₈ alkylsulfinylalkyl, C₂–C₈ alkylsulfonylalkyl, C₂–C₈ alkylcarbonyl, C₂–C₈ haloalkylcarbonyl, C₄–C₁₀ xycloalkylcarbonyl, C₂–C₈ alkoxycarbonyl, C₂–C₈ haloalkoxycarbonyl, C₄–C₁₀ xycloalkoxycarbonyl, C₂–C₈ alkylaminocarbonyl, C₃–

C₁₀ dialkylaminocarbonyl, C₄–C₁₀ xycloalkylaminocarbonyl, C₁–C₆ alkoxy, C₁–C₆ alkylthio, C₁–C₆ haloalkylthio, C₃–C₈ xycloalkylthio, C₁–C₆ alkylsulfinyl, C₁–C₆ haloalkylsulfinyl, C₃–C₈ xycloalkylsulfinyl, C₁–C₆ alkylsulfonyl, C₁–C₆ haloalkylsulfonyl, C₃–C₈ xycloalkylsulfonyl, C₁–C₆ alkylaminosulfonyl, C₂–C₈ dialkylaminosulfonyl hoặc C₃–C₁₀ trialkylsilyl; hoặc Q²; hoặc –W²Q²;

mỗi R⁶ và R⁹ độc lập là halogen, hydroxy, xyano, nitro, amino, C₁–C₈ alkyl, C₁–C₈ xyanoalkyl, C₁–C₈ xyanoalkoxy, C₁–C₈ haloalkyl, C₁–C₈ nitroalkyl, C₂–C₈ alkenyl, C₂–C₈ haloalkenyl, C₂–C₈ nitroalkenyl, C₂–C₈ alkynyl, C₂–C₈ haloalkynyl, C₂–C₈ alkoxyalkyl, C₃–C₈ alkoxyalkoxyalkyl, C₂–C₈ haloalkoxyalkyl, C₂–C₈ haloalkoxyhaloalkoxy, C₄–C₁₀ xycloalkylalkyl, C₄–C₁₀ haloxycloalkylalkyl, C₅–C₁₂ alkylxycloalkylalkyl, C₅–C₁₂ xycloalkylalkenyl, C₅–C₁₂ xycloalkylalkynyl, C₃–C₈ xycloalkyl, C₃–C₈ haloxycloalkyl, C₄–C₁₀ alkylxycloalkyl, C₆–C₁₂ xycloalkylxycloalkyl, C₃–C₈ xycloalkenyl, C₃–C₈ haloxycloalkenyl, C₂–C₈ haloalkoxyalkoxy, C₂–C₈ alkoxyalkoxy, C₄–C₁₀ xycloalkoxyalkyl, C₂–C₈ alkylthioalkyl, C₂–C₈ alkylsulfinylalkyl, C₂–C₈ alkylsulfonylalkyl, C₂–C₈ alkylamino, C₂–C₈ dialkylamino, C₂–C₈ halodialkylamino, C₂–C₈ alkylaminoalkyl, C₂–C₈ haloalkylaminoalkyl, C₄–C₁₀ xycloalkylaminoalkyl, C₃–C₁₀ dialkylaminoalkyl, –CHO, C₂–C₈ alkylcarbonyl, C₂–C₈ haloalkylcarbonyl, C₄–C₁₀ xycloalkylcarbonyl, –C(=O)OH, C₂–C₈ alkoxycarbonyl, C₂–C₈ haloalkoxycarbonyl, C₄–C₁₀ xycloalkoxycarbonyl, C₅–C₁₂ xycloalkylalkoxycarbonyl, –C(=O)NH₂, C₂–C₈ alkylaminocarbonyl, C₄–C₁₀ xycloalkylaminocarbonyl, C₃–C₁₀ dialkylaminocarbonyl, C₁–C₈ alkoxy, C₁–C₈ haloalkoxy, C₂–C₈ alkoxyalkoxy, C₂–C₈ alkenyloxy, C₂–C₈ haloalkenyloxy, C₃–C₈ alkynyloxy, C₃–C₈ haloalkynyloxy, C₃–C₈ xycloalkoxy, C₃–C₈

haloxycloalkoxy, C₄–C₁₀ xycloalkylalkoxy, C₃–C₁₀ alkylcarbonylalkoxy, C₂–C₈ alkylcarbonyloxy, C₂–C₈ haloalkylcarbonyloxy, C₄–C₁₀ xycloalkylcarbonyloxy, C₁–C₈ alkylsulfonyloxy, C₁–C₈ haloalkylsulfonyloxy, C₁–C₈ alkylthio, C₁–C₈ haloalkylthio, C₃–C₈ xycloalkylthio, C₁–C₈ alkylsulfinyl, C₁–C₈ haloalkylsulfinyl, C₁–C₈ alkylsulfonyl, C₁–C₈ haloalkylsulfonyl, C₃–C₈ xycloalkylsulfonyl, formylamino, C₂–C₈ alkylcarbonylamino, C₂–C₈ haloalkylcarbonylamino, C₃–C₈ xycloalkylamino, C₂–C₈ alkoxy carbonylamino, C₁–C₆ alkylsulfonylamino, C₁–C₆ haloalkylsulfonylamino, -SF₅, -SCN, SO₂NH₂, C₃–C₁₂ trialkylsilyl, C₄–C₁₂ trialkylsilylalkyl hoặc C₄–C₁₂ trialkylsilylalkoxy; hoặc Q³; hoặc -W³Q³;

mỗi R⁷ độc lập là H, xyano, C₂–C₃ alkylcarbonyl hoặc C₂–C₃ haloalkylcarbonyl;

mỗi R⁸ và R¹⁰ độc lập là xyano, C₁–C₃ alkyl, C₂–C₃ alkenyl, C₂–C₃ alkynyl, C₃–C₆ xycloalkyl, C₂–C₃ alkoxyalkyl, C₁–C₃ alkoxy, C₂–C₃ alkylcarbonyl, C₂–C₃ alkoxy carbonyl, C₂–C₃ alkylaminoalkyl hoặc C₃–C₄ dialkylaminoalkyl;

mỗi R¹¹ độc lập là H, xyano, hydroxy, CHO, C₁–C₄ alkyl, C₁–C₄ haloalkyl, C₁–C₄ alkoxy, C₂–C₆ alkylcarbonyl, C₂–C₆ haloalkylcarbonyl, -(C=O)CH₃ hoặc -(C=O)CF₃;

W¹ là -O-, -OS(=O)₂-, -C(=O)-, C₁–C₃ alkandiyl, C₂–C₃ alkendiyl, C₂–C₃ alkyndiyl, -C(=O)(C₁–C₃ alkyl)-, -C(=O)(C₂–C₃ alkenyl)-, -C(=O)(C₁–C₄ alkynyl)-;

W² là -O-, -OS(=O)₂-, -C(=O)- hoặc C₁–C₃ alkandiyl;

W^3 là $-O-$, $-OS(=O)_2-$, $-C(=O)-$ hoặc C_1-C_3 alkandiyl;

mỗi Q^1 là $-CPh=N-O(C_1-C_4 \text{ alkyl})$ phenyl tùy ý được thế lên các thành phần của vòng bằng tối đa 5 phần tử thế độc lập được chọn từ R^{12} ; hoặc vòng dị vòng thơm có 5 hoặc 6 cạnh, mỗi nhóm này tùy ý được thế lên các thành phần của vòng bằng tối đa 5 phần tử thế độc lập được chọn từ R^{12} và các thành phần của vòng chứa nitơ bằng tối đa 2 phần tử thế độc lập được chọn từ R^{15} ;

mỗi Q^2 là phenyl tùy ý được thế lên các thành phần của vòng bằng tối đa 5 phần tử thế độc lập được chọn từ R^{13} ; hoặc vòng dị vòng thơm có 5 hoặc 6 cạnh, mỗi nhóm này tùy ý được thế lên các thành phần của vòng bằng tối đa 5 phần tử thế độc lập được chọn từ R^{13} và các thành phần của vòng chứa nitơ bằng tối đa 2 phần tử thế độc lập được chọn từ R^{16} ;

mỗi Q^3 là phenyl tùy ý được thế lên các thành phần của vòng bằng tối đa 5 phần tử thế độc lập được chọn từ R^{14} ; hoặc vòng dị vòng thơm có 5 hoặc 6 cạnh, mỗi nhóm này tùy ý được thế lên thành phần của vòng chứa cacbon bằng tối đa 5 phần tử thế độc lập được chọn từ R^{14} và các thành phần của vòng chứa nitơ bằng tối đa 2 phần tử thế độc lập được chọn từ R^{17} ;

mỗi R^{12} , R^{13} và R^{14} độc lập là halogen, xyano, hydroxy, amino, nitro, $-CHO$, $-C(=O)OH$, $-C(=O)NH_2$, $-SO_2NH_2$, C_1-C_6 alkyl, C_1-C_6 haloalkyl, C_2-C_6 alkenyl, C_2-C_6 alkynyl, C_2-C_8 alkylcarbonyl, C_2-C_8 haloalkylcarbonyl, C_2-C_8 alkoxy, C_2-C_8 alkoxy, C_4-C_{10} xycloalkoxy, C_5-C_{12} xycloalkylalkoxy, C_2-C_8 alkylaminocarbonyl, C_3-C_{10} dialkylaminocarbonyl, C_1-C_6 alkoxy, C_1-C_6 haloalkoxy, C_2-C_8 alkylcarbonyloxy, C_1-C_6 alkylthio, C_1-C_6 haloalkylthio, C_1-C_6 alkylsulfinyl, C_1-C_6 haloalkylsulfinyl, C_1-C_6 alkylsulfonyl, C_1-C_6

haloalkylsulfonyl, C₁–C₆ alkylaminosulfonyl, C₂–C₈ dialkylaminosulfonyl, C₃–C₁₀ trialkylsilyl, C₁–C₆ alkylamino, C₂–C₈ dialkylamino, C₂–C₈ alkylcarbonylamino, C₁–C₆ alkylsulfonylamino, phenyl, pyridinyl hoặc thienyl;

mỗi R¹⁵, R¹⁶ và R¹⁷ độc lập là H hoặc C₁–C₆ alkyl;

mỗi R¹⁸ và R¹⁹ độc lập là H, halogen, hydroxy, C₁–C₄ alkyl, C₁–C₄ haloalkyl hoặc C₁–C₄ alkoxy; và

mỗi u và v độc lập là 0, 1 hoặc 2 trong mỗi trường hợp của S(=O)_u(=NR⁷)_v, với điều kiện là tổng của u và v là 0, 1 hoặc 2;

với điều kiện khi Q¹ là vòng phenyl, Q² là vòng phenyl được thế bằng R¹⁰ ở vị trí 3, G là –O–, Y¹ là O, Y² là O, J là –CR²R³–, R² là H, R⁴ là H, R⁵ là H và R¹⁰ là Cl, thì R³ không phải là *i*-Pr (CA# 158323-70-7).

Sáng chế cũng đề cập đến phương pháp phòng trừ thực vật không mong muốn bao gồm bước đưa vào vị trí của thực vật lượng hữu hiệu có tác dụng diệt cỏ của hợp chất theo sáng chế (ví dụ, dưới dạng chế phẩm được mô tả ở đây). Được ưu tiên là các phương án đề cập đến các phương pháp sử dụng là các phương án bao gồm các hợp chất theo các phương án được mô tả trên đây. Hợp chất theo sáng chế đặc biệt hữu ích để phòng trừ chọn lọc cỏ dại ở lúa mì, lúa mạch, ngô, đậu tương, hoa hướng dương, bông, cải dầu và lúa, và cây trồng đặc sản như mía, cam quýt, cây ăn quả và cây lấy hạt.

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

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

“Chất ức chế quang hệ II” (b1) là các hợp chất hoá học gắn kết với protein D-1 ở vách gắn kết Q_B và do đó phong bế vận chuyển điện tử từ Q_A đến Q_B trong màng thylakoit lục lạp. Các điện tử bị phong bế đi qua quang hệ II được chuyển qua một loạt các phản ứng để tạo ra các hợp chất độc phá vỡ màng tế bào và gây hiện tượng phòng lục lạp, rò rỉ màng, và cuối cùng là phá vỡ cấu trúc tế bào. Vách gắn kết Q_B có ba vị trí gắn kết khác nhau: vị trí gắn kết A gắn kết triazin như atrazin, triazinon như hexazinon, và uraxil như bromaxil, vị trí gắn kết B gắn kết phenylure như điuiron, và vị trí gắn kết C gắn kết benzothiadiazol như bentazon, nitril như bromoxynil và phenyl-pyridazin như pyridat. Ví dụ về chất ức chế quang hệ II bao gồm ametryn, amicarbazon, atrazin, bentazon, bromaxil, bromofenoxim, bromoxynil, clobromuron, cloridazon, clotoluron, cloxuron, cumyluron, xyanazin, daimuron, desmedipham, desmetryn, dimefuron, dimetametryn, điuiron, ethidimuron, fenuron, fluometuron, hexazinon, ioxynil, isoproturon, isouron, lenaxil, linuron, metamitron,

metabenzthiazuron, metobromuron, metoxuron, metribuzin, monolinuron, neburon, pentanoclo, phenmedipham, prometon, prometryn, propanil, propazin, pyridafol, pyridat, siduron, simazin, simetryn, tebuthiuron, terbacil, terbumeton, terbutylazin, terbutryn và trietazin.

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

“Chất ức chế ACCaza” (b3) là các hợp chất hoá học ức chế enzym axetyl CoA carboxylaza, chịu trách nhiệm xúc tác bước sớm trong quá trình tổng hợp lipid và axit béo ở thực vật. Lipid là hợp phần thiết yếu của màng tế bào, và không có chúng thì các tế bào mới không thể tạo ra được. Việc ức chế axetyl CoA carboxylaza và việc mất quá trình tạo ra lipid sau đó dẫn đến việc làm mất tính nguyên vẹn màng tế bào, nhất là ở các khu vực sinh trưởng tích cực như mô phân sinh. Cuối cùng, sinh trưởng chồi và thân rễ ngừng, và mô phân sinh của chồi và chồi của thân rễ bắt đầu chết trở lại. Ví dụ về chất ức chế ACCaza bao gồm aloxydim, butroxydim, clethodim, clodinafop, xycloxydim, xyhalofop, diclofop, fenoxaprop, fluazifop, haloxyfop, pinoxaden, profoxydim, propaquizafop, quizalofop, setoxydim, tepraloxymid và tralkoxydim, bao gồm các dạng phân giải như fenoxaprop-P, fluazifop-P, haloxyfop-P và quizalofop-P và các dạng este như clodinafop-propargyl, xyhalofop-butyl, diclofop-metyl và fenoxaprop-P-etyl.

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

“Chất ức chế EPSP syntaza” (b5) là các hợp chất hoá học ức chế enzym, 5-enol-pyruvylshikimat-3-phosphat synthaza, liên quan đến quá trình tổng hợp axit

amin thơm như tyrosin, tryptophan và phenylalanin. Chất ức chế thuốc diệt cỏ EPSP được hấp thụ một cách dễ dàng qua tán lá cây và dịch chuyển trong li be đến các điểm sinh trưởng. Glyphosat là thuốc diệt cỏ sau này mầm tương đối không chọn lọc thuộc nhóm này. Glyphosat bao gồm các este và các muối như amoni, isopropylamoni, kali, natri (bao gồm sesquinati) và trimesium (được gọi theo cách khác là sulfosat).

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

“Chất ức chế PPO” (b7) là các hợp chất hoá học ức chế enzym protoporphyrinogen oxidaza, dẫn đến tạo ra một cách nhanh chóng các hợp chất có tính phản ứng cao ở thực vật làm phá vỡ màng tế bào, gây rò rỉ các chất lỏng của tế bào. Ví dụ về chất ức chế PPO bao gồm axiflofen-natri, azafenidin, benzfendizon, bifenox, butafenaxil, carfentrazon, carfentrazon-etyl, clometoxyfen, xinidon-etyl, fluazolat, flufenpyr-etyl, flumiclorac-pentyl, flumioxazin, floglycofen-etyl, fluthiaxet-metyl, fomesafen, halosafen, lactofen, oxadiargyl, oxadiazon, oxyfluorfen, pentoxazon, profluazol, pyraclonil, pyraflufen-etyl, saflufenacil, sulfentrazon, thidiazimin, trifludimoxazin (dihydro-1,5-dimetyl-6-thioxo-3-[2,2,7-triflo-3,4-dihydro-3-oxo-4-(2-propyn-1-yl)-2H-1,4-benzoxazin-6-yl]-1,3,5-triazin-2,4(1H,3H)-dion) và tiafenacil (metyl N-[2-[[2-clo-5-[3,6-dihydro-3-metyl-2,6-dioxo-4-(triflometyl)-1(2H)-pyrimidinyl]-4-flophenyl]thio]-1-oxopropyl]-β-alaninat).

“Chất ức chế GS” (b8) là các hợp chất hoá học ức chế hoạt tính của enzym glutamin synthetaza, mà thực vật sử dụng để chuyển hóa amoniac thành glutamin.

Tiếp theo, amoniac tích tụ và mức glutamin giảm. Hiện tượng tổn hại cho thực vật có lẽ xảy ra do tác dụng kết hợp của amoniac độc tính và sự thiếu hụt axit amin cần cho các quá trình trao đổi chất khác. Chất ức chế GS bao gồm glufosinat và các este và các muối của nó, như glufosinat-amoni và dẫn xuất phosphinothrixin khác, glufosinat-P ((2*S*)-2-amino-4-(axit hydroxymetylphosphinyl)butanoic) và bilanaphos.

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

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

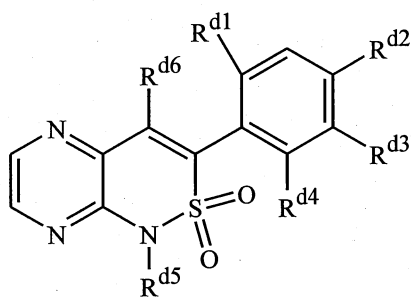
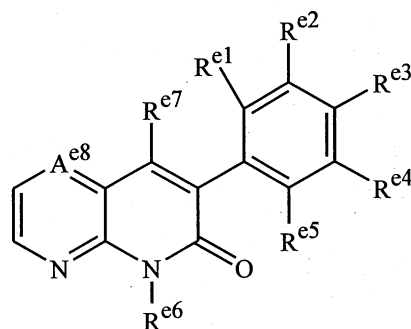
“Chất ức chế PDS” (b11) là các hợp chất hoá học ức chế sinh tổng hợp đường carotenoit ở bước phytoen desaturaza. Ví dụ về chất ức chế PDS bao gồm beflubutamit, dflufenican, fluridon, flocloidon, flurtamon norflurzon và picolinafen.

“Chất ức chế HPPD” (b12) là hóa chất ức chế sinh tổng hợp quá trình tổng hợp 4-hydroxyphenyl-pyruvat dioxyaza. Ví dụ về chất ức chế HPPD bao gồm

benzobixyclon, benzofenap, bixyclopyron (4-hydroxy-3-[[2-[(2-metoxietoxy)metyl]-6-(triflometyl)-3-pyridinyl]carbonyl]bixyclo[3,2,1]oct-3-en-2-on), fenquinotrión (2-[[8-clo-3,4-dihydro-4-(4-metoxiphenyl)-3-oxo-2-quinoxaliny]carbonyl]-1,3-xyclohexandion), isoxaclotol, isoxaflutol, mesotrión, pyrasulfotol, pyrazolynat, pyrazoxyfen, sulcotrión, tefuryltrion, tembotrión, tolpyralat (1-[[1-etyl-4-[3-(2-metoxietoxy)-2-metyl-4-(metylsulfonyl)benzoyl]-1H-pyrazol-5-yl]oxy]etyl metyl carbonat), topramezon, 5-clo-3-[(2-hydroxy-6-oxo-1-xyclohexen-1-yl)carbonyl]-1-(4-metoxiphenyl)-2(1*H*)-quinoxalinon, 4-(2,6-dietyl-4-metylphenyl)-5-hydroxy-2,6-dimetyl-3(2*H*)-pyridazinon, 4-(4-flophenyl)-6-[(2-hydroxy-6-oxo-1-xyclohexen-1-yl)carbonyl]-2-metyl-1,2,4-triazin-3,5(2*H*,4*H*)-dion, 5-[(2-hydroxy-6-oxo-1-xyclohexen-1-yl)carbonyl]-2-(3-metoxiphenyl)-3-(3-metoxipropyl)-4(3*H*)-pyrimidinon, 2-metyl-*N*-(4-metyl-1,2,5-oxadiazol-3-yl)-3-(metylsulfinyl)-4-(triflometyl)benzamid và 2-metyl-3-(metylsulfonyl)-*N*-(1-metyl-1*H*-tetrazol-5-yl)-4-(triflometyl)benzamid.

Chất ức chế HST (b13) phá vỡ khả năng của thực vật chuyển hóa homogentisat thành 2-metyl-6-solanyl-1,4-benzoquinon, nhờ đó phá vỡ quá trình sinh tổng hợp carotenoid. Ví dụ về chất ức chế HST bao gồm haloxydin, xyclopyrimorat (6-clo-3-(2-xyclopropyl-6-metylphenoxy)-4-pyridazinyl 4-morpholincarboxylat), pyriclor, 3-(2-clo-3,6-diflophenyl)-4-hydroxy-1-metyl-1,5-naphtyridin-2(1*H*)-on, 7-(3,5-diclo-4-pyridinyl)-5-(2,2-difloetyl)-8-hydroxypyrido[2,3-*b*]pyrazin-6(5*H*)-on và 4-(2,6-dietyl-4-metylphenyl)-5-hydroxy-2,6-dimetyl-3(2*H*)-pyridazinon.

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

**A****B**

trong đó R^{d1} là H, Cl hoặc CF_3 ; R^{d2} là H, Cl hoặc Br; R^{d3} là H hoặc Cl; R^{d4} là H, Cl hoặc CF_3 ; R^{d5} là CH_3 , CH_2CH_3 hoặc CH_2CHF_2 ; và R^{d6} là OH, hoặc $-OC(=O)-i-Pr$; và R^{e1} là H, F, Cl, CH_3 hoặc CH_2CH_3 ; R^{e2} là H hoặc CF_3 ; R^{e3} là H, CH_3 hoặc CH_2CH_3 ; R^{e4} là H, F hoặc Br; R^{e5} là Cl, CH_3 , CF_3 , OCF_3 hoặc CH_2CH_3 ; R^{e6} là H, CH_3 , CH_2CHF_2 hoặc $C\equiv CH$; R^{e7} là OH, $-OC(=O)Et$, $-OC(=O)-i-Pr$ hoặc $-OC(=O)-t-Bu$; và A^{e8} là N hoặc CH.

“Chất ức chế sinh tổng hợp xenluloza” (b14) ức chế quá trình sinh tổng hợp xenluloza ở các thực vật nhất định. Chúng hiệu quả nhất khi sử dụng trước phun hoặc sau phun giai đoạn sớm trên thực vật non hoặc thực vật sinh trưởng nhanh. Ví dụ về chất ức chế sinh tổng hợp xenluloza bao gồm clothiamit, diclobenil, flupoxam, indaziflam ($N^2-[(1R,2S)-2,3\text{-dihydro-2,6-dimethyl-1H-inden-1-yl}]-6-(1\text{-floetyl})-1,3,5\text{-triazin-2,4-di-amin}$), isoxaben và triaziflam.

“Thuốc diệt cỏ khác” (b15) bao gồm thuốc diệt cỏ tác động thông qua nhiều kiểu tác động khác nhau như chất phá vỡ quá trình nguyên phân (ví dụ, flamprop-M-metyl và flamprop-M-isopropyl), hợp chất asen hữu cơ (ví dụ, DSMA, và MSMA), chất ức chế 7,8-dihydropteroat synthaza, chất ức chế tổng hợp isoprenoit lục lạp và chất ức chế sinh tổng hợp thành tế bào. Thuốc diệt cỏ khác bao gồm các thuốc diệt cỏ có kiểu tác động chưa biết hoặc không nằm trong một tiêu chí cụ thể được liệt kê

trong (b1) đến (b14) hoặc tác động thông qua kết hợp các kiểu tác động nêu trên. Ví dụ về thuốc diệt cỏ khác bao gồm acclonifen, asulam, amitrol, bromobutit, xinmetylin, clomazon, cumyluron, daimuron, difenzoquat, etobenzanit, fluometuron, flurenol, fosamin, fosamin-amoni, dazomet, dymron, ipfencarbazon (1-(2,4-diclophenyl)-*N*-(2,4-diflophenyl)-1,5-dihydro-*N*-(1-metyletyl)-5-oxo-4*H*-1,2,4-triazol-4-carboxamit), metam, metyldymron, axit oleic, oxaziclomefon, axit pelargonic, pyributicarb và 5-[[[(2,6-diflophenyl)methoxy]metyl]-4,5-dihydro-5-metyl-3-(3-metyl-2-thienyl)isoxazol.

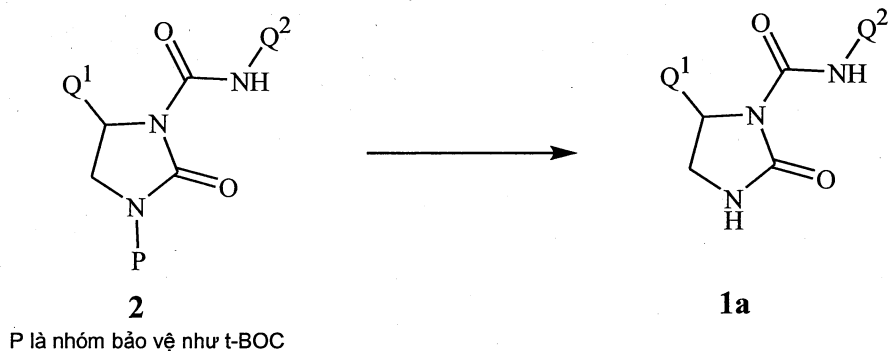
“Chất an toàn diệt cỏ (safener)” (b16) là các chất được bổ sung vào chế phẩm diệt cỏ để khử bỏ hoặc làm giảm tác dụng gây độc thực vật của thuốc diệt cỏ đối với các cây trồng nhất định. Các hợp chất này bảo vệ cây trồng khỏi tổn thương bởi thuốc diệt cỏ nhưng thường không ngăn ngừa được thuốc diệt cỏ phòng trừ thực vật không mong muốn. Ví dụ về chất an toàn diệt cỏ (safener) bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, benoxacor, cloquintocet-mexyl, cumyluron, xyometrinil, cyprosulfamit, daimuron, diclomit, dixyclonon, dimepiperat, fencloazol-etyl, fenclorim, flurazol, fluxofenim, furilazol, isoxadifen-etyl, mefenpyr-dietyl, mephenat, methoxyphenon, anhydrit naphtalic, oxabetrinil, *N*-(aminocarbonyl)-2-metylbenzensulfonamit và *N*-(aminocarbonyl)-2-flobenzensulfonamit, 1-bromo-4-[(clometyl)sulfonyl]benzen, 2-(diclometyl)-2-metyl-1,3-dioxolan (MG 191), 4-(dicloaxetyl)-1-oxa-4-azospiro-[4,5]đecan (MON 4660), 2,2-dicloo-1-(2,2,5-trimetyl-3-oxazolidinyl)-etanon và 2-metoxyl-*N*-[[4-[[[(metylamino)carbonyl]amino]phenyl]sulfonyl]-benzamit.

Hợp chất có công thức 1 có thể được điều chế bằng các phương pháp chung đã biết trong lĩnh vực hoá hữu cơ tổng hợp. Một hoặc nhiều phương pháp và biến thể của nó được mô tả sau đây trong các Sơ đồ 1–11 có thể được sử dụng để điều chế hợp chất có Công thức 1. Các định nghĩa về G, J, Q¹, R⁴, Y², Q², R⁵ và Y¹ trong hợp chất có Công thức 1 đến 17 dưới đây là như được xác định trên đây trong phần Bản chất kỹ thuật của sáng chế, trừ khi có quy định khác. Các công thức 1a, 1b, 1c và 1d là các nhóm công thức phụ khác nhau của hợp chất có công thức 1, và tất cả các phần

tử thể đối với Công thức 4a là như được xác định trên đây đối với Công thức 4 trừ khi có quy định khác.

Như được thể hiện trong Sơ đồ 1, hợp chất có công thức 2 có thể được khử bảo vệ trong các điều kiện tiêu chuẩn để tạo ra hợp chất có công thức 1a (tức là hợp chất có công thức 1 trong đó, G là $-N(R^1)-$ và R^1 là H). Bước khử bảo vệ thường được thực hiện bằng cách khuấy hợp chất với sự có mặt của axit, tùy ý sử dụng dung môi, ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ -20°C đến nhiệt độ hồi lưu của dung môi trong 0,5 đến 24 giờ. Các axit thông thường bao gồm axit trifloaxetic, axit clohydric và các axit hữu cơ và axit vô cơ khác. Dung môi thích hợp bao gồm diclometan, metanol, nước dioxan hoặc hỗn hợp của các dung môi. Về các điều kiện tiêu biểu, xem Công bố đơn quốc tế WO2012/143117 trang 29.

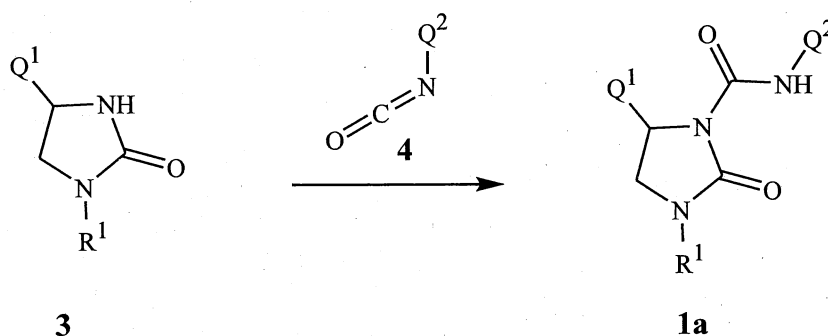
Sơ đồ 1



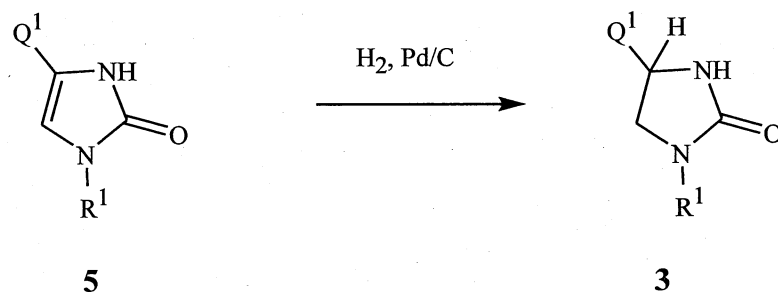
Hợp chất có công thức 1b (tức là hợp chất có công thức 1 trong đó, G là $-N(R^1)-$ và R^1 không phải là H) có thể được điều chế bằng cách cho hợp chất có công thức 3 phản ứng với isoxyanat có công thức 4 như được thể hiện trong Sơ đồ 2. Bước chuyển hóa này thường được thực hiện bằng cách khuấy hợp chất có công thức 3 với sự có mặt của isoxyanat có công thức 4 trong dung môi tùy ý với sự có mặt của bazơ, ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ -20°C đến nhiệt độ hồi lưu của dung môi trong 0,5 đến 48 giờ. Ví dụ về các bazơ mà có thể được sử dụng bao gồm *n*-butyl lithi, lithi

diisopropylamit, lithi hexametyldisilazit, trimetylamin, kali cacbonat và các bazơ hữu cơ, vô cơ và cơ kim khác. Dung môi thích hợp bao gồm toluen, diclometan, metanol, dioxan, tetrahydrofuran hoặc hỗn hợp của các dung môi. Về các điều kiện tiêu biểu, xem tài liệu *J. Chem. Soc. Perkin Trans* 22001, 1299.

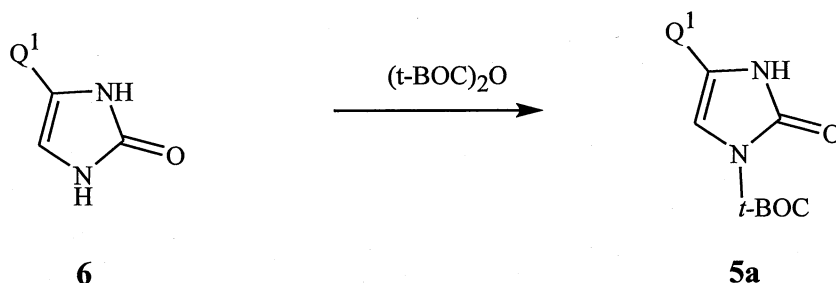
Sơ đồ 2



Như được thể hiện trong Sơ đồ 3, hợp chất có công thức 3 có thể được tạo ra bằng cách khử hợp chất có công thức 5. Bước khử thường được thực hiện bằng cách hydro hóa với sự có mặt của chất xúc tác kim loại trong dung môi, tùy ý với axit, ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ nhiệt độ môi trường đến nhiệt độ hồi lưu của dung môi trong từ 24 đến 72 giờ. Áp suất khí hydro nằm trong khoảng từ áp suất khí quyển đến 800 bar. Ví dụ về chất xúc tác kim loại mà có thể được sử dụng là paladi trên cacbon. Dung môi thích hợp bao gồm etyl axetat, etanol và metanol. Axit thích hợp bao gồm axit axetic và axit clohydric hoặc các axit hữu cơ hoặc vô cơ khác. Về quy trình tiêu biểu xem công bố đơn quốc tế WO2006/078554.

Sơ đồ 3

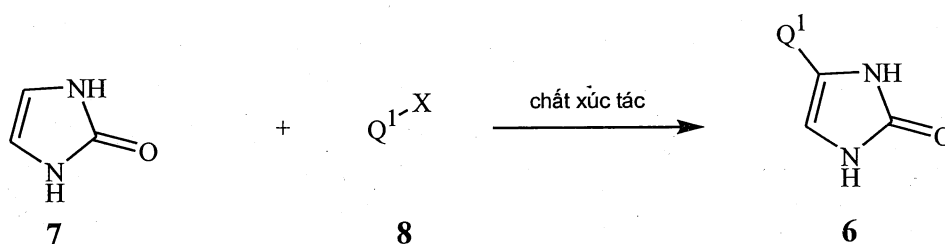
Hợp chất có công thức 5a có thể được điều chế bằng cách cho hợp chất có công thức 6 phản ứng với di-*tert*-butyl dicacbonat như được thể hiện trong Sơ đồ 4. Bước chuyển hóa này thường được thực hiện bằng cách khuấy hợp chất có công thức 6 với sự có mặt của di-*tert*-butyl dicacbonat trong dung môi tùy ý bằng cách sử dụng một hoặc nhiều bazơ, ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ -20°C đến nhiệt độ hồi lưu của dung môi trong 0,5 đến 48 giờ. Ví dụ về các bazơ mà có thể được sử dụng bao gồm trimetylamin, *N,N*-dimetylaminopyridin, kali cacbonat và bazơ hữu cơ và vô cơ khác hoặc hỗn hợp của chúng. Dung môi thích hợp bao gồm tetrahydrofuran, diclometan, metanol, toluen, axetonitril, *N,N*-dimetylformamit hoặc hỗn hợp của các dung môi. Về các điều kiện tiêu biểu, xem *J. Org. Chem.* 1995, 60, 1565 hoặc *Tetrahedron* 2006, 62, 5223.

Sơ đồ 4

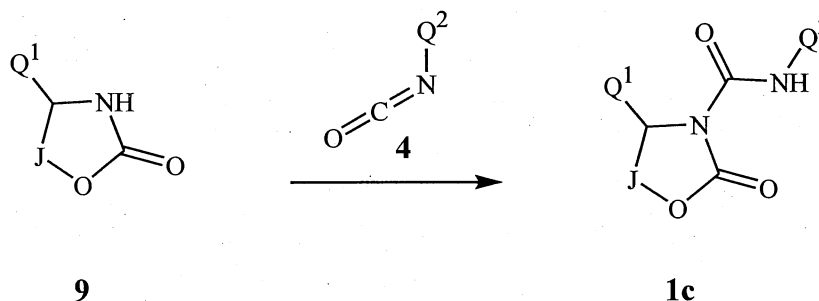
Như được thể hiện trong Sơ đồ 5, hợp chất có công thức 7 có thể được kết hợp với aryl halogenua có công thức 8 trong các điều kiện “hoạt hóa C-H” để thu được

hợp chất có công thức 6. Các bước kết hợp này thường được thực hiện với sự có mặt của chất xúc tác paladi, và bazơ ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ nhiệt độ môi trường đến nhiệt độ hồi lưu của dung môi trong 1 đến 72 giờ. Ví dụ về chất xúc tác paladi mà có thể được sử dụng là paladi diacetat. Bazơ thích hợp bao gồm natri axetat trihydrat, kali phosphat, kali cacbonat và xesi cacbonat. Dung môi thích hợp bao gồm dimetylsulfoxit, 1,4-dioxan, toluen hoặc *N,N*-dimetylformamit. Về các điều kiện tiêu biểu, xem *J. Am. Chem. Soc.* **2007**, 129, 7768. Chất trung gian halogenua có công thức 8 là sẵn có ở quy mô công nghiệp hoặc có thể được điều chế bằng các phương pháp đã biết trong lĩnh vực kỹ thuật này.

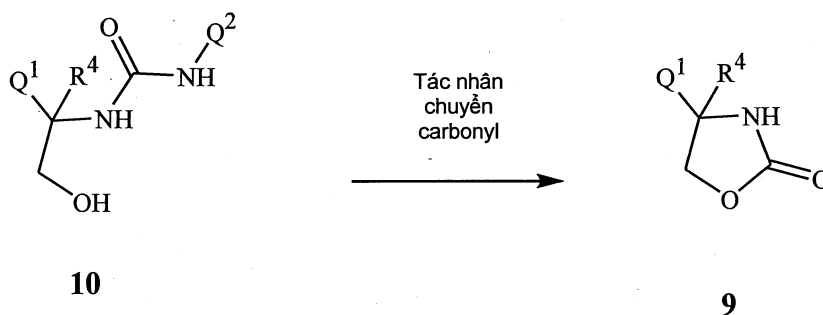
Sơ đồ 5



Hợp chất có công thức 1c (tức là hợp chất có công thức 1 trong đó, G là -O-) có thể được tạo ra nhờ phản ứng của Hợp chất có công thức 9 với isoxyanat có công thức 4 như được thể hiện trong Sơ đồ 6 bằng cách sử dụng các điều kiện được mô tả trên đây trong Sơ đồ 2 ở trên. Bước chuyển hóa này thường được thực hiện bằng cách khuấy hợp chất có công thức 9 với sự có mặt của isoxyanat có công thức 4 trong dung môi tùy ý với sự có mặt của bazơ, ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ -20°C đến nhiệt độ hồi lưu của dung môi trong 0,5 đến 48 giờ. Ví dụ về các bazơ mà có thể được sử dụng bao gồm *n*-butyl lithi, lithi diisopropylamit, lithi hexametyldisilazit, trietylamin, kali cacbonat và các bazơ hữu cơ, vô cơ và cơ kim khác. Dung môi thích hợp bao gồm toluen, diclometan, dioxan, tetrahydrofuran hoặc hỗn hợp của các dung môi. Về các điều kiện tiêu biểu, xem *J. Chem. Soc. Perkin Trans* 22001, 1299

Sơ đồ 6

Hợp chất có công thức 9 có thể được tổng hợp bằng cách cho chất phản ứng chuyển carbonyl phản ứng với aryl glyxinol có công thức 10 như được thể hiện trong Sơ đồ 7. Chất phản ứng chuyển carbonyl thích hợp bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, carbonyl diimidazol, phosgen, triphosgen, diphosgen, methyl Cloroformat, etyl Cloroformat, và phenyl Cloroformat. Phản ứng có thể được thực hiện ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ 0 đến 120°C. Dung môi mà không phản ứng với chất phản ứng chuyển carbonyl như diclometan, tetrahydrofuran, dioxan, toluen, và clobenzen là được ưu tiên. Sự có mặt của chất nhận axit có thể là hữu hiệu trong phản ứng này. Kali cacbonat, xesi cacbonat, và trietylamin, không kể các chất nhận axit hữu cơ và vô cơ khác, có thể được sử dụng hữu hiệu trong chuỗi phản ứng này.

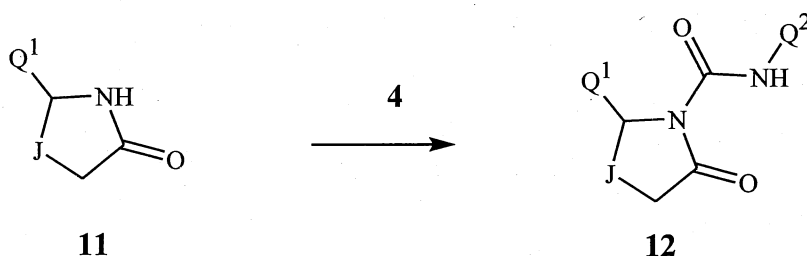
Sơ đồ 7

Arylglyxinol có công thức 10 là hợp chất đã biết trong lĩnh vực kỹ thuật này và có thể được tổng hợp bằng các phương pháp được nêu trong Công bố đơn quốc tế

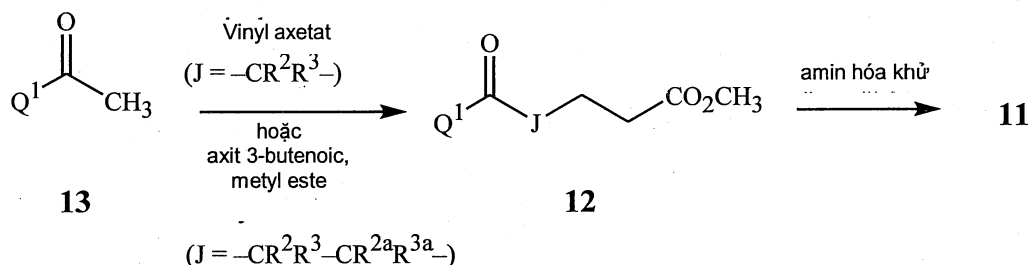
WO 1996/0022283 và các Patent Mỹ số U.S. Pat. Nos. 5,686,393 và 5,633,271 hoặc là sẵn có ở quy mô công nghiệp.

Hợp chất có công thức 12 (tức là hợp chất có công thức 1 trong đó, G là $-C(R^{18})(R^{19})-$) có thể được tổng hợp bằng cách cho hợp chất có công thức 11 phản ứng với isoxyanat thích hợp có công thức 4 như được thể hiện trong Sơ đồ 8. Các điều kiện thích hợp cho phản ứng này được bàn luận ở trên đối với Sơ đồ 2.

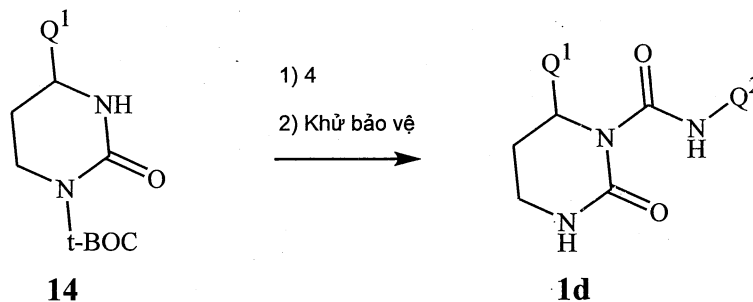
Sơ đồ 8



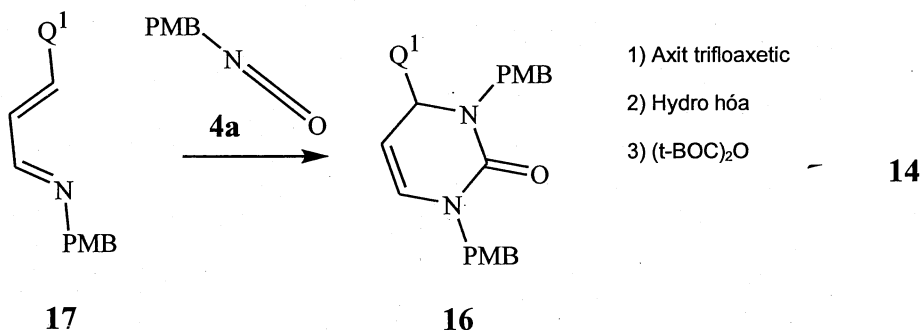
Hợp chất có công thức 11 có thể được tổng hợp bằng cách amin hóa khử và tiếp theo đóng vòng hợp chất có công thức 12 như được thể hiện trong Sơ đồ 9. Các điều kiện cho bước chuyển hóa này thường liên quan đến việc sử dụng tác nhân khử như natri bohydrua với sự có mặt của amoni axetat như được mô tả trong tài liệu *J. Med. Chem.* 2013, 56 (11), 4342–4342. Hợp chất có công thức 12 có thể được điều chế bằng cách cho benzaldehyt có công thức 13 phản ứng với vinyl axetat ($J = -CR^2R^3-$) hoặc axit 3-butenic, metyl este ($J = -CR^2R^3-CR^{2a}R^{3a}-$) với sự có mặt của lượng chất xúc tác rodi (I) iodua trong dung môi như toluen ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ 50 đến 150°C. Ví dụ tiêu biểu về bước chuyển hóa này có thể được tìm thấy trong tài liệu *Eur. J. Org. Chem.* 2006, 11, 2504–2507.

Sơ đồ 9

Hợp chất có công thức **1d** (tức là hợp chất có công thức 1 trong đó, J là $-\text{CR}^2\text{R}^3-\text{CR}^{2a}\text{R}^{3a}-$ và G là $-\text{N}(\text{H})-$) như được thể hiện trong Sơ đồ 10 bằng cách cho hợp chất có công thức 14 phản ứng với và isoxyanat có công thức 4 bằng cách sử dụng các điều kiện phản ứng được bàn luận ở trên đối với Sơ đồ 6 và 8. Tiếp theo, chất trung gian carboxamit tạo thành có thể được khử bảo vệ bằng axit trifloaxetic để thu được hợp chất có công thức **1d**.

Sơ đồ 10

Hợp chất có công thức 14 có thể được tổng hợp bằng cách đóng vòng hợp chất có công thức 17 cùng với isoxynat có Công thức 4a như được thể hiện trong Sơ đồ 11. Bước khử bảo vệ chất trung gian *bis-para*-metoxybenzyl có công thức 16 bằng axit trifloaxetic, tiếp theo hydro hóa xúc tác và bảo vệ một lần để thu được chất trung gian có công thức 14. Các điều kiện cho loại phản ứng này có thể được tìm thấy trong tài liệu *J.A.C.S.* 2011, 133(13), 4785–4787.

Sơ đồ 11

Người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực kỹ thuật này cần hiểu rằng các nhóm chức khác nhau có thể được chuyển hoá thành các nhóm chức khác để tạo ra các hợp chất khác nhau có công thức 1. Đối với các tài nguyên có giá trị cho thấy rằng sự hoán đổi của các nhóm chức theo kiểu dễ hiểu và đơn giản, xem Larock, R. C., *Comprehensive Organic Transformations: A Guide to Functional Group Preparations*, 2nd Ed., Wiley-VCH, New York, 1999. Ví dụ, các sản phẩm trung gian để điều chế hợp chất có công thức 1 có thể chứa nhóm nitro thơm, mà có thể được khử thành nhóm amin, và tiếp theo được chuyển hóa bằng các phản ứng đã biết rõ trong lĩnh vực kỹ thuật này như phản ứng Sandmeyer, thành các halogenua khác nhau, tạo ra hợp chất có công thức 1. Trong một số trường hợp, các phản ứng nêu trên cũng có thể được thực hiện theo trình tự xen kẽ.

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

trong các sơ đồ riêng rẽ, có thể cần thực hiện bước tổng hợp bổ sung không được mô tả chi tiết để hoàn thành quy trình tổng hợp hợp chất có công thức 1. Người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực này cũng cần hiểu rằng có thể cần thực hiện kết hợp các bước được minh họa trong các Sơ đồ trên đây theo một trình tự ngoài trình tự được thể hiện cụ thể để điều chế hợp chất có công thức 1.

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

Ví dụ thực hiện sáng chế

Không cần mô tả chi tiết hơn, tin rằng người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực này bằng cách sử dụng phần mô tả trên đây có thể sử dụng sáng chế ở phạm vi rộng nhất của nó. Vì vậy, các Ví dụ tổng hợp sau chỉ minh họa và không giới hạn phần mô tả theo cách bất kỳ. Các bước trong các Ví dụ tổng hợp minh họa quy trình cho mỗi bước trong toàn bộ một quá trình chuyển hóa, và nguyên liệu ban đầu cho mỗi bước có thể không nhất thiết được điều chế bằng con đường điều chế cụ thể có quy trình được mô tả trong các Ví dụ hoặc Bước khác. Tỷ lệ phần trăm là khối lượng chỉ khác là hỗn hợp dung môi sắc ký hoặc trừ khi có quy định khác. Các phần và tỷ lệ phần trăm của hỗn hợp dung môi sắc ký được tính theo thể tích, trừ khi có quy định khác. Phổ ^1H NMR được thông báo theo trường thấp ppm từ dung dịch tetrametylsilanin trong dimetylsulfoxit (d_6); “s” nghĩa là vạch đơn, “d” nghĩa là vạch đôi, “t” nghĩa là vạch ba, “m” nghĩa là đa vạch, “bm” nghĩa là đa vạch rộng, “dd” nghĩa là vạch đôi của vạch đôi, và “br s” nghĩa là vạch đơn rộng. Phổ khối (*Mass spectra*: MS) được báo cáo dưới dạng phân tử lượng của ion gốc có nhiều đồng vị nhất ($M+1$) được tạo ra bằng cách bổ sung H^+ (phân tử lượng bằng 1) vào phân tử này, hoặc ($M-1$) được tạo ra bằng cách làm mất H^+ (phân tử lượng bằng 1) ra khỏi phân tử này, quan sát được bằng cách sử dụng lồng sắc ký được liên hợp với quang phổ khối (LCMS) bằng cách sử dụng phương pháp ion hóa bằng hóa học tại áp suất khí quyển (AP^+), trong đó “amu” đại diện cho đơn vị khối lượng nguyên tử không xác định.

Ví dụ tổng hợp 1

Điều chế N-(2,3-diflophenyl)-5-(3,4-diflophenyl)-2-oxo-1-imidazolidincarboxamit
(Hợp chất 11)

Bước A: Tổng hợp (3,4-diflophenyl)-1,3-dihydro-2*H*-imidazol-2-on

Paladi(II) axetat (0,14g, 0,62mmol) và natri axetat trihydrat (3,07g, 37,5mmol) được thêm vào dung dịch đã được khử khí (argon) chứa 1,3-dihydro-2*H*-imidazol-2-*l* (1,75g, 18,75mmol) và 3,4-difloiodobenzen (3g, 12,5mmol) trong dimetylsulfoxit (20ml) ở nhiệt độ môi trường. Hỗn hợp phản ứng được khử khí tiếp bằng argon và được khuấy ở 80°C trong 16 giờ. Hỗn hợp phản ứng được làm nguội đến nhiệt độ môi trường, lọc qua chất trợ lọc đất tảo Celite® và được rửa bằng etyl axetat (2 × 50ml). Tiếp theo, dịch lọc được rửa bằng nước (2 × 25ml) và sản phẩm thô được tinh chế bằng phép sắc ký trên silicagel. Rửa giải bằng 5% metanol trong diclometan để thu được hợp chất nêu ở đề mục này dưới dạng chất rắn màu trắng (670mg).

¹H NMR (400MHz) δ 6,97 (s, 1H), 7,34–7,44 (m, 2H), 7,55–7,61 (m, 1H), 10,12 (s, 1H), 10,54 (s, 1H). MS(M+1) = 195,2.

Bước B: Tổng hợp 1,1-dimetyletyl 4-(3,4-diflophenyl)-2,3-dihydro-2-oxo-1*H*-imidazol-*l*-carboxylat

Di-*tert*-butyl dicacbonat (1,02ml, 4,46mmol) và *N,N*-dimetylaminopyridin (77mg, 0,63mmol) được thêm vào dung dịch được khuấy chứa (3,4-diflophenyl)-1,3-dihydro-2*H*-imidazol-2-*l* (tức là hợp chất thu được từ Bước A, 800mg, 4,06mmol) trong tetrahydrofuran (30ml) và hỗn hợp phản ứng được khuấy ở nhiệt độ môi trường trong 2 giờ. Hỗn hợp phản ứng được cô dưới áp suất giảm để thu được sản phẩm thô. Sản phẩm thô được tinh chế bằng phép sắc ký trên silicagel. Rửa giải bằng 60% etyl axetat trong ete dầu mỏ để thu được hợp chất nêu ở đề mục này dưới dạng chất rắn màu trắng (540mg).

¹H NMR (300MHz) δ 1,53 (s, 9H), 7,33 (d, 1H), 7,46–7,51 (m, 1H), 7,75–7,82 (m, 2H), 11,07 (s, 1H). MS(M+1) = 294,9.

Bước C: Tổng hợp 1,1-dimetyletyl 4-(3,4-diflophenyl)-2-oxo-1-imidazolidincarboxylat

10% paladi trên cacbon (200mg) được thêm vào dung dịch được khuấy chứa 1,1-dimetyletyl 4-(3,4-diflophenyl)-2,3-dihydro-2-oxo-1*H*-imidazol-1-carboxylat (tức là hợp chất thu được từ Bước B, 450mg, 1,51mmol) trong metanol (15ml) ở nhiệt độ môi trường và hỗn hợp phản ứng được khuấy trong môi trường H₂(g) trong 6 giờ. Hỗn hợp phản ứng được lọc qua chất trợ lọc đất tảo Celite® và dịch lọc được cô dưới áp suất giảm. Sản phẩm thô tạo thành được nghiền bằng hỗn hợp của dietyl ete và pentan (30ml) để thu được hợp chất nêu ở đề mục này dưới dạng chất rắn màu trắng (410mg).

¹H NMR (300MHz) δ 1,42 (s, 9H), 3,41 (dd, 1H), 4,13 (t, 1H), 4,73 (t, 1H), 7,19–7,22 (m, 1H), 7,41–7,50 (m, 2H), 7,9 (s, 1H). MS(M+1) = 299,2

Bước D: Tổng hợp 1,1-dimetyletyl 4-(3,4-diflophenyl)-3-[(2,3-diflophenyl)amino]carbonyl]-2-oxo-1-imidazolidincarboxylat

Hỗn hợp chứa 1,1-dimetyletyl 4-(3,4-diflophenyl)-2-oxo-1-imidazolidincarboxylat (tức là hợp chất thu được từ Bước C, 200mg, 0,66mmol) và 2,3-diflophenyl isoxyanat(200mg, 1,33mmol) trong toluen (5ml) được đun nóng đến 110 °C trong 18 giờ. Tiếp theo, hỗn hợp phản ứng được cô dưới áp suất giảm để thu được sản phẩm thô, sản phẩm này được tinh chế bằng phép sắc ký lỏng cao áp để thu được hợp chất nêu ở đề mục này dưới dạng chất rắn màu trắng (60mg).

Bước E: Tổng hợp N-(2,3-diflophenyl)-5-(3,4-diflophenyl)-2-oxo-1-imidazolidincarboxamit

Axit trifloaxetic (1ml) được thêm vào dung dịch được khuấy chứa 1,1-dimetyletyl 4-(3,4-diflophenyl)-3-[(2,3-diflophenyl)amino]carbonyl]-2-oxo-1-

imidazolidincarboxylat (tức là hợp chất thu được từ Bước D, 60mg, 0,13mmol) trong diclometan (6ml) ở 0°C và hỗn hợp phản ứng được khuấy trong 4 giờ. Tiếp theo, hỗn hợp phản ứng được cô dưới áp suất giảm. Cloroform được thêm vào phần cặn tạo thành, rồi được cô lại dưới áp suất giảm. Quá trình này được lặp lại cho đến khi axit trifloaxetic được loại bỏ hoàn toàn. Sản phẩm thô tạo thành được nghiền bằng hỗn hợp của dietyl ete và pentan để thu được hợp chất nêu ở đề mục này, hợp chất theo sáng chế, dưới dạng chất rắn màu trắng (30mg).

^1H NMR (300MHz) δ 3,15 (dd, 1H), 3,91 (t, 1H), 5,41 (dd, 1H), 7,07–7,19 (m, 3H), 7,37–7,45 (m, 2H), 7,79–7,85 (m, 1H). MS(M+1) = 354,1

Ví dụ tổng hợp 2

Điều chế N-(2,3-diflophenyl)-2-oxo-5-phenyl-1-imidazolidincarboxamit (Hợp chất 12)

Bước A: Tổng hợp 1,3-dihydro-4-phenyl-2H-imidazol-2-on

2-Hydroxy-1-phenyletanon (3,8g, 27,9mmol) được thêm vào ure đã được đun nóng sơ bộ (50,2g, 83,7mmol) ở 160 °C và hỗn hợp phản ứng được khuấy trong 15 phút. Tiếp theo, hỗn hợp phản ứng được làm nguội đến nhiệt độ môi trường và được pha loãng bằng nước (200ml). Huyền phù tạo thành được lọc qua phễu Buchner để gom chất rắn đã kết tủa. Chất rắn này được rửa bằng dietyl ete (100ml) để thu được hợp chất nêu ở đề mục này dưới dạng chất rắn màu vàng (2,6g).

^1H NMR (400Mz) δ 6,87 (t, 1H), 7,14–7,18 (m, 1H), 7,31 (t, 2H), 7,49 (d, 2H), 10,02 (s, 1H), 10,48 (s, 1H). MS(M+1) = 160,9

Bước B: Tổng hợp 1,1-dimetyletyl 2,3-dihydro-2-oxo-4-phenyl-1*H*-imidazol-1-carboxylat

Di-*tert*-butyl dicacbonat (3,2ml, 14,0mmol) và *N,N*-dimetylaminopyridin (77mg, 0,63mmol) được thêm vào dung dịch được khuấy chứa 1,3-dihydro-4-phenyl-2*H*-imidazol-2-1 (tức là hợp chất thu được từ Bước A, 2,5g, 12,75mmol) trong tetrahydrofuran (30ml) ở nhiệt độ môi trường và hỗn hợp tạo thành được khuấy trong 2 giờ. Hỗn hợp phản ứng được cô dưới áp suất giảm để thu được sản phẩm thô. Sản phẩm thô được tinh chế bằng cách sắc ký cột trên silicagel. Rửa giải bằng 30% etyl axetat trong ete dầu mỏ để thu được hợp chất nêu ở đề mục này dưới dạng chất rắn màu vàng (1,95g).

^1H NMR (300Mz) δ 1,54 (s, 9H), 7,22 (d, 1H), 7,26–7,32 (m, 1H), 7,37–7,42 (m, 2H), 7,63 (d, 2H), 11,03 (s, 1H). MS(M+1) = 261,0

Bước C: Tổng hợp 1,1-dimetyletyl 2-oxo-4-phenyl-imidazolidincarboxylat

10% paladi trên cacbon (400mg) được thêm vào dung dịch được khuấy chứa 1,1-dimetyletyl 2,3-dihydro-2-oxo-4-phenyl-1*H*-imidazol-1-carboxylat (tức là hợp chất thu được từ Bước B, 1g, 3,8mmol) trong metanol (15ml) ở nhiệt độ môi trường và hỗn hợp phản ứng được khuấy trong môi trường $\text{H}_2(\text{g})$ trong 6 giờ. Hỗn hợp phản ứng được lọc qua chất trợ lọc đất tảo Celite® và dịch lọc được cô dưới áp suất giảm để thu được sản phẩm thô. Sản phẩm thô được nghiền bằng hỗn hợp của dietyl ete và pentan (30ml) để thu được hợp chất nêu ở đề mục này dưới dạng chất rắn màu trắng (0,87g).

^1H NMR (300Mz) δ 1,42 (s, 9H), 3,4 (dd, 1H), 4,15 (t, 1H), 4,71 (t, 1H), 7,31–7,42 (m, 5H), 7,88 (s, 1H). MS(M+1) = 262,9.

Bước D: Tổng hợp 1,1-dimetyletyl 3-[[[(2,3-diflophenyl)amino]carbonyl]-2-oxo-4-phenyl-1-imidazolidincarboxylat (1,1-dimetyletyl 3-[[[(2,3-diflophenyl)amino]carbonyl]-2-oxo-4-phenyl-1-imidazolidincarboxylatete)

Hỗn hợp chứa 1,1-dimetyletyl 2-oxo-4-phenyl-imidazolidincarboxylat (tức là sản phẩm thu được từ Bước C, 800mg, 3,05mmol) và 2,3-diflophenyl isoxyanat (500mg, 3,2mmol) trong toluen (10ml) được đun nóng đến 110°C trong 18 giờ. Hỗn hợp phản ứng được cô dưới áp suất giảm để thu được sản phẩm thô, sản phẩm này được tinh chế bằng phép sắc ký lỏng cao áp điều chế để thu được hợp chất nêu ở đề mục này dưới dạng chất rắn màu trắng (140mg).

^1H NMR (400Mz) δ 1,48 (s, 9H), 3,48 (dd, 1H), 4,25 (t, 1H), 5,33 (dd, 1H), 7,13–7,16 (m, 2H), 7,31–7,41 (m, 5H), 7,78 (bm, 1H), 10,59 (s, 1H). MS(M+1) = 418,2

Bước E: Tổng hợp N-(2,3-diflophenyl)-2-oxo-5-phenyl-1-imidazolidincarboxamit

Axit trifloaxetic (1ml) được thêm vào dung dịch được khuấy chứa 1,1-dimetyletyl 3-[[[(2,3-diflophenyl)amino]carbonyl]-2-oxo-4-phenyl-1-imidazolidincarboxylat (tức là hợp chất thu được từ Bước D, 110mg, 0,233mmol) trong diclometan (5ml) ở 0°C và hỗn hợp phản ứng được khuấy trong 4 giờ. Hỗn hợp phản ứng được cô dưới áp suất giảm. Cloroform được thêm vào phần cặn tạo thành, rồi được cô lại dưới áp suất giảm. Quá trình này được lặp lại cho đến khi axit trifloaxetic được loại bỏ hoàn toàn. Sản phẩm thô tạo thành được nghiền bằng hỗn hợp của dietyl ete và pentan để thu được hợp chất nêu ở đề mục này, hợp chất theo sáng chế, dưới dạng chất rắn màu trắng (80mg).

^1H NMR (300Mz) δ 3,12 (dd, 1H), 3,91 (t, 1H), 5,40 (dd, 1H), 7,10–7,13 (m, 2H), 7,27–7,41 (m, 5H), 7,82–7,87 (m, 1H), 8,16 (s, 1H), 11,00 (d, 2H). MS(M+1) = 318,2

Ví dụ tổng hợp 3

Điều chế 4-(3,4-diflophenyl)-N-(2-flophenyl)-2-oxo-3-oxazolidincarboxamit
(Hợp chất 3)

Bước A: Điều chế 1,2-diflo-4-(iodoisoxyanatometyl)benzen

Bạc xyanat (2,0g, 13,3mmol) và iot (2,61g, 10,3mmol) được kết hợp trong diclometan (50ml) và được khuấy ở nhiệt độ môi trường trong 5 phút. 4-Etenyl-1,2-diflobenzen (1,43g, 10,3mmol) tiếp đó được thêm từng giọt vào trong 5 phút và hỗn hợp tạo thành được khuấy trong 16 giờ. Hỗn hợp phản ứng được lọc qua đệm chất trợ lọc đất tảo Celite® và được rửa bằng diclometan. Tiếp đó, dịch lọc hữu cơ được rửa bằng dung dịch natri bisulfit 10% trong nước cho đến khi dung dịch trở thành không màu. Lớp hữu cơ được tách ra khỏi lớp nước, làm khô trên MgSO₄ và được cô để thu được hợp chất nêu ở đề mục này dưới dạng dầu màu vàng, chất này được đưa vào bước tiếp theo mà không cần tinh chế thêm.

Bước B: Điều chế metyl N-[(3,4-diflophenyl)iodometyl]carbamate

1,2-Diflo-4-(iodoisoxyanatometyl)benzen (tức là sản phẩm của Bước A ở trên) được hòa tan trong 50ml metanol và 1ml natri methoxit (4,5N trong metanol) và được khuấy trong 1 giờ ở nhiệt độ môi trường. Dung dịch thu được được cô dưới áp suất giảm đến 50% thể tích ban đầu và được thêm vào dung dịch 50/50 nước đá và nước chứa 0,500g natri bisulfit. Hỗn hợp thu được này được để yên trong 30 phút ở nhiệt độ môi trường. Chất rắn màu trắng tạo thành được lọc để thu được hợp chất nêu ở đề mục này (2,97g). ¹H NMR (CDCl₃) δ 7,09–7,19 (m, 2H), 7,02 (m, 1H), 4,75–4,81 (m, 1H), 3,71 (s, 3H), 3,52 (m, 1H), 3,44 (m, 1H).

Bước C: Điều chế 4-(3,4-diflophenyl)-2-oxazolidinon

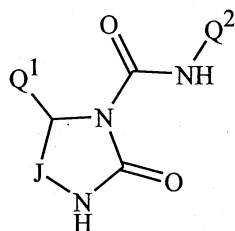
Metyl *N*-[(3,4-diflophenyl)iodometyl]carbamate tạo thành (tức là sản phẩm của Bước B ở trên, 1,0g) được đun nóng trong tetrachloetylen (20ml) ở nhiệt độ hồi lưu của dung môi trong 2 ngày. Dung dịch thu được được cô, hòa tan trong metylen clorua và được hấp thụ vào silicagel. Bước tinh chế được thực hiện bằng phép sắc ký trên silicagel bằng cách sử dụng gradien 10–100% etyl axetat trong hexan. Các phân đoạn đã được tách ra được kết hợp lại và dung môi được loại bỏ dưới áp suất giảm để thu được hợp chất nêu ở đề mục này (1,67g). ^1H NMR (CDCl_3) δ 7,17–7,24 (m, 2H), 7,07–7,11 (m, 1H), 5,66 (br s, 1H), 4,91–4,95 (m, 1H), 4,74 (m, 1H), 4,15 (m, 1H).

Bước D: Điều chế 4-(3,4-diflophenyl)-*N*-(2-flophenyl)-2-oxo-3-oxazolidinocarboxamit

4-(3,4-Diflophenyl)-2-oxazolidinon (tức là sản phẩm của Bước C, 0,71g, 0,85mmol), 2-flophenyl isoxyanat (0,115ml, 1,02mmol) và trimetylamin (0,237ml, 1,7mmol) được kết hợp trong diclometan (10ml) và được khuấy ở nhiệt độ môi trường trong 16 giờ. Dung dịch phản ứng được pha loãng bằng diclometan, được hấp thụ vào silicagel và được tinh chế bằng phép sắc ký trên silicagel bằng cách sử dụng gradien 0–100% etyl axetat trong hexan. Các phân đoạn đã được tách ra được kết hợp lại và dung môi được loại bỏ dưới áp suất giảm để tách hợp chất nêu ở đề mục này, hợp chất theo sáng chế, dưới dạng chất rắn màu trắng (0,130g). Xem Bảng phụ lục B đối với dữ liệu ^1H NMR.

Bằng các quy trình được mô tả ở đây cùng với các phương pháp đã biết trong lĩnh vực kỹ thuật này, có thể điều chế được các hợp chất của các Bảng 1 đến 250 sau. Các từ viết tắt sau được sử dụng trong các Bảng là như sau: Me nghĩa là metyl.

Bảng 1



J là $-\text{CH}_2-$; Q^2 là $\text{Ph}(2\text{-F})$; và Q^1 là

Q^1	Q^1	Q^1
Ph(3-Cl)	Ph(4-OCF ₂ H)	2-Pyridinyl(4-Me)
Ph(3-F)	Ph(4-OMe)	2-Pyridinyl(3-F)
Ph(3-Br)	Ph(4-OCF ₂ CF ₂ H)	2-Pyridinyl(3-CF ₃)
Ph(3-Me)	Ph(2,3-di-F)	2-Pyridinyl(3-Me)
Ph(3-CF ₃)	Ph(2,4-di-F)	3-Pyridinyl
Ph(3-OCF ₃)	Ph(2,5-di-F)	3-Pyridinyl(6-F)
Ph(3-OCF ₂ H)	Ph(2,6-di-F)	3-Pyridinyl(6-CF ₃)
Ph(3-OMe)	Ph(3,4-di-F)	3-Pyridinyl(6-Me)
Ph(3-OCF ₂ CF ₂ H)	Ph(3,5-di-F)	3-Pyridinyl(5-F)
Ph(2-Cl)	Ph(3-Me,4-F)	3-Pyridinyl(5-CF ₃)
Ph(2-F)	Ph(3-F,4-Me)	3-Pyridinyl(5-Me)
Ph(2-Br)	Ph(3-CF ₃ ,4-F)	3-Pyridinyl(4-F)
Ph(2-Me)	Ph(3-F,4-CF ₃)	3-Pyridinyl(4-CF ₃)
Ph(2-CF ₃)	Ph(2,3,4-tri-F)	3-Pyridinyl(4-Me)
Ph(2-OCF ₃)	Ph(3,4,5-tri-F)	3-Pyridinyl(2-F)
Ph(2-OCF ₂ H)	2-Pyridinyl	3-Pyridinyl(2-CF ₃)
Ph(2-OMe)	2-Pyridinyl(6-F)	3-Pyridinyl(2-Me)
Ph(2-OCF ₂ CF ₂ H)	2-Pyridinyl(6-CF ₃)	4-Pyridinyl
Ph(4-Cl)	2-Pyridinyl(6-Me)	4-Pyridinyl(6-F)
Ph(4-F)	2-Pyridinyl(5-F)	4-Pyridinyl(6-CF ₃)
Ph(4-Br)	2-Pyridinyl(5-CF ₃)	4-Pyridinyl(6-Me)
Ph(4-Me)	2-Pyridinyl(5-Me)	4-Pyridinyl(5-F)
Ph(4-CF ₃)	2-Pyridinyl(4-F)	4-Pyridinyl(5-CF ₃)
Ph(4-OCF ₃)	2-Pyridinyl(4-CF ₃)	4-Pyridinyl(5-Me)

Q ¹	Q ¹	Q ¹
4-Pyridinyl(3-F)	Triazol-2-yl(4-Me)	1,3,4-Oxadiazol-2-yl
4-Pyridinyl(3-CF ₃)	Triazol-1-yl(4-Me)	1,3,4-Thiadiazol-2-yl
4-Pyridinyl(3-Me)	Pyrazin-2-yl	1,2,4-Oxadiazol-3-yl
4-Pyridinyl(2-F)	Pyrazin-2-yl(5-CF ₃)	1,2,4-Thiadiazol-3-yl
4-Pyridinyl(2-CF ₃)	Pyrimidin-2-yl	Tetrahydropyran-2-yl
4-Pyridinyl(2-Me)	Pyrimidin-2-yl(5-CF ₃)	Tetrahydropyran-3-yl
2-Thienyl	Pyrimidin-5-yl	Tetrahydrofuran-2-yl
2-Thienyl(4-CF ₃)	Pyrimidin-5-yl(2-CF ₃)	Tetrahydrofuran-3-yl
2-Thienyl(5-CF ₃)	1,3,5-Triazin-2-yl	Oxetan-2-yl
3-Thienyl	Thiazol-2-yl	Oxetan-3-yl
3-Thienyl(4-CF ₃)	Thiazol-2-yl(5-CF ₃)	1,3-Dioxolan-4-yl
3-Thienyl(5-CF ₃)	Thiazol-5-yl	2,2-diflo-1,3-Dioxolan-4-yl
2-Furyl	Thiazol-5-yl(2-CF ₃)	1,3-Dithiolan-4-yl
2-Furyl(4-CF ₃)	Oxazol-2-yl	1,4-Dioxolan-2-yl
2-Furyl(5-CF ₃)	Oxazol-2-yl(5-CF ₃)	1,4-Dithiolan-2-yl
3-Furyl	Oxazol-5-yl	1-naphtyl
3-Furyl(4-CF ₃)	Oxazol-5-yl(2-CF ₃)	2-naphtyl
3-Furyl(5-CF ₃)	Isothiazol-5-yl	Benzofuran-2-yl
Pyrazol-1-yl	Isothiazol-5-yl(3-CF ₃)	Benzothiophen-2-yl
Pyrazol-1-yl(4-CF ₃)	Isothiazol-3-yl	1,3-Benzoxazol-2-yl
Imidazol-1-yl	Isothiazol-3-yl(5-CF ₃)	1,3-Benzothiazol-2-yl
Imidazol-1-yl(4-CF ₃)	Isoxazol-5-yl	7-quinolyl
Imidazol-1-yl(2-CF ₃)	Isoxazol-5-yl(3-CF ₃)	Indazol-1-yl
Imidazol-2-yl(1-Me)	Isoxazol-3-yl	Benzimidazol-1-yl
Imidazol-4-yl(1-Me)	Isoxazol-3-yl(5-CF ₃)	Indol-1-yl
Imidazol-4-yl(3-Me)	Tetrazol-1-yl	Pyrolo[2,3-c]pyridin-1-yl
Pyrazol-4-yl(1-Me)	Tetrazol-1-yl(5-Me)	
Triazol-4-yl(1-Me)	Tetrazol-5-yl(1-Me)	
Triazol-4-yl(2-Me)	1,2,4-Triazol-1-yl	

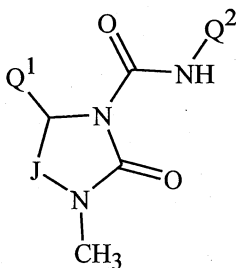
Bảng 2 được cấu trúc theo cách tương tự như vậy chỉ khác là Đề mục của hàng “J là -CH₂-; Q² is Ph(2-F); và Q¹ là” được thay thế bằng Đề mục của hàng được nêu cho Bảng 2 dưới đây (tức là “J là -CH₂-; Q² là Ph(2,3-di-F); và Q¹ là”). Vì vậy, mục

thứ nhất trong Bảng 2 là hợp chất có công thức 1 trong đó J là $-\text{CH}_2-$; Q^2 là Ph(2,3-di-F); Q^1 là Ph(3-Cl) (tức là 3-clophenyl); G là $-\text{NH}-$; Y^1 là O; Y^2 là O; R^4 là H và R^5 là H. Các Bảng từ 3 đến 25 được cấu trúc theo cách tương tự.

Bảng	Đề mục
2	J là $-\text{CH}_2-$; Q^2 là Ph(2,3-di-F); và Q^1 là
3	J là $-\text{CH}_2-$; Q^2 là Ph(2,4-di-F); và Q^1 là
4	J là $-\text{CH}_2-$; Q^2 là Ph(2,3,4-tri-F); và Q^1 là
5	J là $-\text{CH}_2-$; Q^2 là Ph(2- CF_3); và Q^1 là
6	J là $-\text{CH}_2-$; Q^2 là Ph(2-Me); và Q^1 là
7	J là $-\text{CH}_2-$; Q^2 là Ph(2- NO_2); và Q^1 là
8	J là $-\text{CH}_2-$; Q^2 là Ph(2-Cl); và Q^1 là
9	J là $-\text{CH}_2-$; Q^2 là Ph(2- SO_2Me); và Q^1 là
10	J là $-\text{CH}_2-$; Q^2 là Ph(2-F,3-Cl); và Q^1 là
11	J là $-\text{CH}_2-$; Q^2 là Ph(2-SOMe); và Q^1 là
12	J là $-\text{CH}_2-$; Q^2 là Ph(2-SMe); và Q^1 là
13	J là $-\text{CH}_2-$; Q^2 là Ph(2-Me,3-F); và Q^1 là
14	J là $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$; Q^2 là Ph(2,3-di-F); và Q^1 là
15	J là $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$; Q^2 là Ph(2,4-di-F); và Q^1 là
16	J là $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$; Q^2 là Ph(2,3,4-tri-F); và Q^1 là
17	J là $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$; Q^2 là Ph(2- CF_3); và Q^1 là
18	J là $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$; Q^2 là Ph(2-Me); và Q^1 là
19	J là $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$; Q^2 là Ph(2- NO_2); và Q^1 là
20	J là $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$; Q^2 là Ph(2-Cl); và Q^1 là
21	J là $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$; Q^2 là Ph(2- SO_2Me); và Q^1 là
22	J là $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$; Q^2 là Ph(2-F,3-Cl); và Q^1 là
23	J là $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$; Q^2 là Ph(2-SOMe); và Q^1 là
24	J là $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$; Q^2 là Ph(2-SMe); và Q^1 là
25	J là $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$; Q^2 là Ph(2-Me,3-F); và Q^1 là

Bảng 26

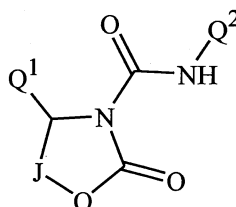
Bảng 26 được xây dựng theo cách tương tự như Bảng 1 ở trên, chỉ khác là công thức cấu trúc được thay thế bằng công thức sau đây:

Bảng 27 đến 50

Phần mô tả này còn bao gồm Bảng 27 đến 50, mỗi Bảng được xây dựng theo cách giống như Bảng 2 đến 25 ở trên, chỉ khác là công thức cấu trúc được thay thế bằng công thức cấu trúc trong Bảng 26 ở trên.

Bảng 51

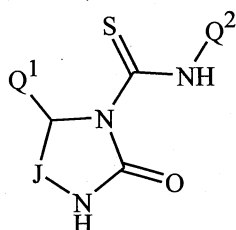
Bảng 51 được xây dựng theo cách tương tự như Bảng 1 ở trên, chỉ khác là công thức cấu trúc được thay thế bằng công thức sau đây:

Bảng 52 đến 75

Phần mô tả này còn bao gồm Bảng 52 đến 75, mỗi Bảng được xây dựng theo cách giống như Bảng 2 đến 25 ở trên, chỉ khác là công thức cấu trúc được thay thế bằng công thức cấu trúc trong Bảng 51 ở trên.

Bảng 76

Bảng 76 được xây dựng theo cách tương tự như Bảng 1 ở trên, chỉ khác là công thức cấu trúc được thay thế bằng công thức sau đây:

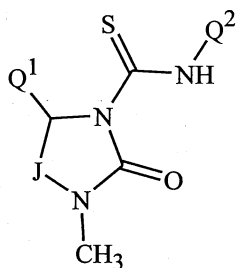


Bảng 77 đến 100

Phần mô tả này còn bao gồm Bảng 77 đến 100, mỗi Bảng được xây dựng theo cách giống như Bảng 2 đến 25 ở trên, chỉ khác là công thức cấu trúc được thay thế bằng công thức cấu trúc trong Bảng 76 ở trên.

Bảng 101

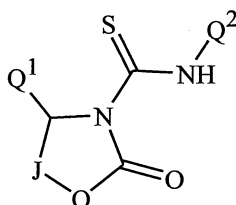
Bảng 101 được xây dựng theo cách tương tự như Bảng 1 ở trên, chỉ khác là công thức cấu trúc được thay thế bằng công thức sau đây:

Bảng 102 đến 125

Phần mô tả này còn bao gồm Bảng 102 đến 125, mỗi Bảng được xây dựng theo cách giống như Bảng 2 đến 25 ở trên, chỉ khác là công thức cấu trúc được thay thế bằng công thức cấu trúc trong Bảng 101 ở trên.

Bảng 126

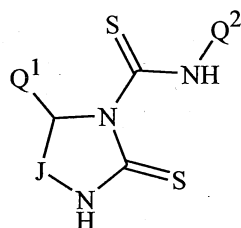
Bảng 126 được xây dựng theo cách tương tự như Bảng 1 ở trên, chỉ khác là công thức cấu trúc được thay thế bằng công thức sau đây:

Bảng 127 đến 150

Phần mô tả này còn bao gồm Bảng 127 đến 150, mỗi Bảng được xây dựng theo cách giống như Bảng 2 đến 25 ở trên, chỉ khác là công thức cấu trúc được thay thế bằng công thức cấu trúc trong Bảng 126 ở trên.

Bảng 151

Bảng 151 được xây dựng theo cách tương tự như Bảng 1 ở trên, chỉ khác là công thức cấu trúc được thay thế bằng công thức sau đây:

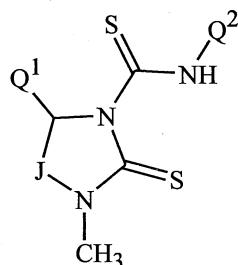


Bảng 151 đến 175

Phần mô tả này còn bao gồm Bảng 152 đến 175, mỗi Bảng được xây dựng theo cách giống như Bảng 2 đến 25 ở trên, chỉ khác là công thức cấu trúc được thay thế bằng công thức cấu trúc trong Bảng 151 ở trên.

Bảng 176

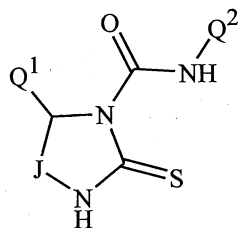
Bảng 176 được xây dựng theo cách tương tự như Bảng 1 ở trên, chỉ khác là công thức cấu trúc được thay thế bằng công thức sau đây:



Bảng 177 đến 200

Phần mô tả này còn bao gồm Bảng 177 đến 200, mỗi Bảng được xây dựng theo cách giống như Bảng 2 đến 25 ở trên, chỉ khác là công thức cấu trúc được thay thế bằng công thức cấu trúc trong Bảng 176 ở trên.

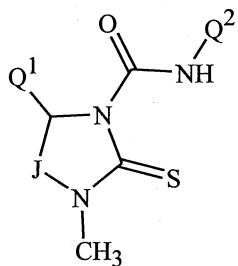
Bảng 201

Bảng 202 đến 225

Phần mô tả này còn bao gồm Bảng 202 đến 225, mỗi Bảng được xây dựng theo cách giống như Bảng 2 đến 25 ở trên, chỉ khác là công thức cấu trúc được thay thế bằng công thức cấu trúc trong Bảng 201 ở trên.

Bảng 226

Bảng 226 được xây dựng theo cách tương tự như Bảng 1 ở trên, chỉ khác là công thức cấu trúc được thay thế bằng công thức sau đây:

Bảng 227 đến 250

Phần mô tả này còn bao gồm Bảng 227 đến 250, mỗi Bảng được xây dựng theo cách giống như Bảng 2 đến 25 ở trên, chỉ khác là công thức cấu trúc được thay thế bằng công thức cấu trúc trong Bảng 226 ở trên.

Chế phẩm/Tính hữu ích

Hợp chất theo sáng chế thường được sử dụng làm hoạt chất diệt cỏ trong chế phẩm, tức là thành phần, với ít nhất một thành phần bổ sung được chọn từ nhóm bao

gồm chất hoạt động bề mặt, chất pha loãng dạng rắn và chất pha loãng dạng lỏng, dùng làm chất mang. Các thành phần của chế phẩm hoặc hỗn hợp được chọn phù hợp với các tính chất lý học của hoạt chất, kiểu dùng và các yếu tố môi trường như loại đất, độ ẩm và nhiệt độ.

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

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

Chế phẩm dạng phun thường được đưa vào môi trường thích hợp trước khi phun. Chế phẩm dạng lỏng và dạng rắn như vậy được pha chế để được pha loãng một cách dễ dàng trong môi trường phun, thường là nước, nhưng đôi khi là môi trường thích hợp khác như hydrocacbon thơm hoặc parafin hoặc dầu thực vật. Lượng dung dịch để phun có thể nằm trong khoảng từ một tới một vài nghìn lít cho một hecta,

nhưng thường là nằm trong khoảng từ mười tới vài trăm lít cho một hecta. Chế phẩm phun có thể được trộn sẵn trong thùng với nước hoặc môi trường thích hợp khác dùng để xử lý lá bằng cách phun lên không trung hoặc đưa vào đất, hoặc đưa vào môi trường sinh trưởng của thực vật. Chế phẩm dạng lỏng và dạng rắn có thể được định lượng trực tiếp trong hệ tưới phun hoặc được định lượng trong rãnh khi gieo trồng.

Chế phẩm thường chứa lượng hữu hiệu của hoạt chất, chất pha loãng và chất hoạt động bề mặt trong khoảng gần đúng sau đây để tổng lượng là 100 phần trăm khối lượng.

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

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

Chất pha loãng dạng lỏng bao gồm, ví dụ, nước, *N,N*-dimetylalkanamit (ví dụ, *N,N*-dimetylformamit), limonen, dimetyl sulfoxit, *N*-alkylpyroliton (ví dụ, *N*-metylpyrolitinon), etylen glycol, trietylen glycol, propylen glycol, dipropylen glycol, polypropylen glycol, propylen carbonat, butylen carbonat, parafin (ví dụ, dầu khoáng trắng, parafin thông thường, isoparafin), alkylbenzen, alkylnaphtalen, glyxerin, glyxerol triaxetat, sorbitol, triacetin, hydrocacbon thơm, chất béo đã được khử gốc thơm, alkylbenzen, alkylnaphtalen, keton như xyclohexanon, 2-heptanon, isophoron và 4-hydroxy-4-metyl-2-pentanon, axetat như isoamyl axetat, hexyl axetat, heptyl axetat, octyl axetat, nonyl axetat, tridexyl axetat và isobornyl axetat, các este khác như este lactat alkylat hóa, este dibazo và γ -butyrolacton, và các rượu, chúng có thể là mạch thẳng, mạch nhánh, bão hoà hoặc không bão hoà như metanol, etanol, *n*-propanol, rượu isopropylic, *n*-butanol, rượu isobutylic, *n*-hexanol, 2-etylhexanol, *n*-octanol, decanol, rượu isodexylic, isooctadecanol, rượu xetylic, rượu laurylic, rượu tridexylic, rượu oleylic, xyclohexanol, rượu tetrahydrofurfurylic, rượu diaxeton và rượu benzylic. Chất pha loãng dạng lỏng cũng bao gồm các este glyxerol của các axit béo bão hoà và không bão hoà (thường là có 6 đến 22 nguyên tử cacbon), như dầu thực vật từ hạt và quả (ví dụ, dầu ôliu, thầu dầu, hạt lanh, vừng, ngũ cốc (ngô), lạc, hướng dương, hạt nho, rum, hạt bông, đậu tương, hạt cải dầu, dừa và cọ), chất béo có nguồn gốc động vật (ví dụ, mỡ bò, mỡ lợn, dầu gan cá tuyết, dầu cá), và các hỗn hợp của chúng. Chất pha loãng dạng lỏng cũng bao gồm các axit béo được alkylat hóa (ví dụ, được metyl hóa, etyl hóa, butyl hóa) trong đó các axit béo có thể thu được bằng cách thủy phân các este glyxerol từ các nguồn thực vật và động vật, và có thể được tinh chế bằng cách chưng cất. Chất pha loãng dạng lỏng thông thường được mô tả trong Marsden, *Solvents Guit*, 2nd Ed., Interscience, New York, 1950.

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

chất hoạt động bề mặt làm chất thấm ướt, chất phân tán, chất nhũ hoá hoặc chất khử bọt.

Chất hoạt động bề mặt có thể được phân loại thành dạng không ion, anion hoặc cation. Chất hoạt động bề mặt không ion hữu dụng đối với các hỗn hợp này bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở: rượu alkoxylat như rượu alkoxylat trên cơ sở các rượu tự nhiên và tổng hợp (có thể là mạch nhánh hoặc mạch thẳng) và được điều chế từ các rượu và etylen-oxit, propylen-oxit, butylen-oxit hoặc hỗn hợp của chúng; etoxylat amin, alkanolamit và alkanolamit được etoxylat hóa; triglyxerit được alkoxylat hóa như đậu tương được etoxylat hóa, dầu thầu dầu và hạt cải dầu; alkylphenol alkoxylat như octylphenol etoxylat, nonylphenol etoxylat, đinonyl phenol etoxylat và dodexyl phenol etoxylat (được điều chế từ các phenol và etylen-oxit, propylen-oxit, butylen-oxit hoặc hỗn hợp của chúng); polyme khối được điều chế từ etylen-oxit hoặc propylen-oxit và các polyme khối nghịch, trong đó các khối ở cuối mạch được điều chế từ propylen-oxit; các axit béo etoxylat hóa; các este béo và các dầu được etoxylat hóa; các metyl este được etoxylat hóa; tristerylphenol được etoxylat hóa (bao gồm các dạng được điều chế từ etylen-oxit, propylen-oxit, butylen-oxit hoặc hỗn hợp của chúng); các este của axit béo, các este glyxerol, các dẫn xuất nền mỡ lông cừu, các este polyetoxylat như các este sorbitan axit béo được polyetoxi hoá, các este sorbitol axit béo được polyetoxi hoá và các este glyxerol axit béo được polyetoxi hoá; các dẫn xuất sorbitan khác như các este sorbitan; chất hoạt động bề mặt polyme như các copolyme ngẫu nhiên, các copolyme khối, nhựa peg alkyt (polyetylen glycol), các polyme ghép hoặc dạng lược và các polyme hình sao; polyetylen glycol (peg); các este polyetylen glycol axit béo; chất hoạt động bề mặt nền silic; và dẫn xuất của đường như este sucroza, alkyl polyglycosit và alkyl polysaccarit.

Chất hoạt động bề mặt anion hữu dụng bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở: các axit alkylaryl sulfonic và các muối của chúng; rượu được carboxylat hóa hoặc etoxylat alkylphenol; các dẫn xuất diphenyl sulfonat; lignin và các dẫn xuất của lignin như lignosulfonat; các axit maleic hoặc succinic hoặc các anhydrit của chúng;

olefin sulfonat; các este phosphat như các este phosphat của rượu alkoxylat, các este phosphat của alkylphenol alkoxylat và các este phosphat của styryl phenol etoxylat; chất hoạt động bề mặt nền protein; dẫn xuất sarcosin; styryl phenol ete sulfat; sulfat và sulfonat của các dầu và các axit béo; sulfat và sulfonat của alkylphenol được etoxylat hóa; sulfat của các rượu; sulfat của các rượu được etoxylat hóa; các sulfonat của amin và các amit như *N,N*-alkyltaurat; các sulfonat của benzen, cumen, toluen, xylen, và dodexyl và tridexylbenzen; các sulfonat của naphtalen ngưng tụ; các sulfonat của naphtalen và alkyl naphtalen; các sulfonat của dầu mỏ được cất phân đoạn; sulfosuccinamat; và sulfosuccinat và các dẫn xuất của chúng như muối dialkyl sulfosuccinat.

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

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

Chế phẩm theo sáng chế có thể còn chứa hỗn hợp chất bổ trợ và chất phụ gia, là đã biết đối với người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực dưới dạng chất trợ điều chế (một số chất trong số các chất này có thể được xem là hoạt động chức năng như chất pha loãng dạng rắn, chất pha loãng dạng lỏng và chất hoạt động bề mặt). Chất bổ trợ và chất phụ gia như vậy có thể kiểm soát được: độ pH (dung dịch đệm), hiện tượng tạo bọt trong quá trình xử lý (chất chống tạo bọt như polyorganosiloxan), hiện tượng lắng hoạt chất (chất tạo huyền phù), độ nhớt (chất làm đặc tạo sol-gel thuận nghịch), sự phát triển của vi khuẩn trong đồ chứa (chất kháng khuẩn), sự đông đặc của sản phẩm (chất chống đông), màu sắc (chất phân tán tạo màu/chất nhuộm), hiện tượng rửa trôi (chất tạo màng hoặc chất dính), sự bay hơi (chất làm chậm bay hơi), và các hiện tượng khác tương tự. Chất tạo màng bao gồm, ví dụ, polyvinyl axetat, copolyme polyvinyl axetat, copolyme polyvinylpyrroliton-vinyl axetat, rượu polyvinyllic, copolyme rượu polyvinyllic và sáp. Ví dụ về chất bổ trợ và chất phụ gia cho chế phẩm bao gồm chất được liệt kê trong *McCutcheon's Volume 2: Functional Materials*, các ấn phẩm hàng năm của thế giới và Bắc Mỹ do McCutcheon's Division xuất bản, The Manufacturing Confectioner Publishing Co.; và Công bố đơn PCT số WO 03/024222.

Hợp chất có công thức 1 và các hoạt chất khác bất kỳ thường được đưa vào các hỗn hợp này bằng cách hoà tan hoạt chất trong dung môi hoặc bằng cách nghiền trong chất pha loãng dạng lỏng hoặc khô. Các dung dịch, bao gồm dạng cô đặc dễ nhũ hóa, có thể được điều chế đơn giản bằng cách trộn các thành phần này với nhau. Nếu dung môi chứa hỗn hợp lỏng được dự định để sử dụng làm dạng cô đặc dễ nhũ hóa là không thể trộn lẫn với nước, thì chất nhũ hoá thường được bổ sung để nhũ hóa dung môi chứa hoạt chất khi pha loãng với nước. Huyền phù đặc chứa hoạt chất, với hạt có đường kính tới 2,000 μm có thể được nghiền ướt bằng cách sử dụng các thiết bị nghiền để thu được các hạt có đường kính trung bình dưới 3 μm . Dung dịch nước huyền phù đặc có thể được tạo thành hỗn dịch dạng cô đặc (ví dụ, xem, U.S. 3,060,084) hoặc được xử lý tiếp bằng cách sấy phun để thu được hạt phân tán trong

nước. Chế phẩm khô thường cần tới quy trình nghiền khô, quy trình này tạo ra đường kính hạt trung bình nằm trong khoảng từ 2 tới 10 μm . Bột mịn để rắc khô và bột có thể được điều chế bằng cách trộn và thường là nghiền như bằng máy nghiền búa hoặc máy nghiền dùng năng lượng lỏng. Các hạt và viên tròn có thể được tạo ra bằng cách phun hoạt chất lên chất mang dạng hạt đã được tạo ra trước hoặc bằng các kỹ thuật kết tụ. Xem, Browning, "Agglomeration", *Chemical Engineering*, December 4, 1967, pp 147–48, *Perry's Chemical Engineer's Handbook*, 4th Ed., McGraw-Hill, New York, 1963, các trang 8–57 và sau đó, và WO 91/13546. Dạng viên tròn có thể được bào chế như được mô tả trong U.S. 4,172,714. Hạt phân tán trong nước và tan trong nước có thể được điều chế như được mô tả trong U.S. 4,144,050, U.S. 3,920,442 và DE 3,246,493. Viên nén có thể được điều chế như được mô tả trong U.S. 5,180,587, U.S. 5,232,701 và U.S. 5,208,030. Các lớp màng có thể được điều chế như được mô tả trong GB 2,095,558 và U.S. 3,299,566.

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

Trong các ví dụ sau, tất cả các chế phẩm đều được điều chế theo cách thông thường. Số hợp chất dùng để chỉ các hợp chất trong Bảng phụ lục A. Không cần mô

tả kỹ hơn, các tác giả sáng chế cho rằng người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực kỹ thuật này có thể sử dụng phần mô tả trên của sáng chế với phạm vi rộng nhất. Do đó, các ví dụ sau chỉ nhằm mục đích minh họa sáng chế và không giới hạn phần mô tả theo bất kỳ cách nào. Phần trăm được tính theo khối lượng trừ khi có quy định khác.

Ví dụ A

Chế phẩm cô đặc có nồng độ cao

Hợp chất 17	98,5%
silic oxit aerogel	0,5%
silic oxit mịn vô định hình tổng hợp	1,0%

Ví dụ B

Bột thấm ướt

Hợp chất 791	65,0%
dodexylphenol polyetylen glycol ete	2,0%
natri ligninsulfonat	4,0%
natri silicoaluminat	6,0%
monmorilonit (nung)	23,0%

Ví dụ C

(1) Dạng hạt

Hợp chất 801	10,0%
hạt atapulgit (chất bay hơi thấp 0,71/0,30mm; hạt đi qua rây Mỹ cỡ số 25–50)	90,0%

Ví dụ D

Viên ép đùn

Hợp chất 51	25,0%
-------------	-------

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

Ví dụ EChế phẩm cô đặc dễ nhũ hóa

Hợp chất 17	10,0%
polyoxyetylen sorbitol hexoleat	20,0%
este của axit béo C6–C10 metyl	70,0%

Ví dụ FVi nhũ tương

Hợp chất 791	5,0%
polyvinylpyrroliton-vinyl axetat copolyme	30,0%
Alkylpolyglycosit	30,0%
glyxeryl monooleat	15,0%
nước	20,0%

Ví dụ GHuyền phù đặc

Hợp chất 801	35%
copolyme khối butyl polyoxyetylen/polypropylen	4,0%
copolyme axit stearic/polyetylen glycol	1,0%
polyme styren acrylic	1,0%
gôm xanthan	0,1%
propylen glycol	5,0%
chất khử bọt nền silic	0,1%
1,2-benzisothiazolin-3-on	0,1%
nước	53,7%

Ví dụ HNhũ tương trong nước

Hợp chất 51	10,0%
copolyme khối butyl polyoxyetylen/polypropylen	4,0%
copolyme axit stearic/polyetylen glycol	1,0%
polyme styren acrylic	1,0%
gôm xanthan	0,1%
propylen glycol	5,0%
chất khử bọt nền silic	0,1%
1,2-benzisothiazolin-3-on	0,1%
hydrocacbon nền dầu mỏ thơm	20,0
nước	58,7%

Ví dụ IChất phân tán dạng dầu

Hợp chất 17	25%
polyoxyetylen sorbitol hexaoleat	15%
Đất sét bentonit được cải biến bằng hữu cơ	2,5%
metyl este của axit béo	57,5%

Sáng chế cũng bao gồm các ví dụ điều chế A đến I nêu trên chỉ khác là “Hợp chất 1” trong từng ví dụ trong số các ví dụ từ A đến I được thay thế bằng “Hợp chất 2”, “Hợp chất 3”, “Hợp chất 4”, “Hợp chất 5”, “Hợp chất 6”, “Hợp chất 7”, “Hợp chất 8”, “Hợp chất 9”, “Hợp chất 10”, “Hợp chất 11”, “Hợp chất 12”, “Hợp chất 13”, “Hợp chất 14”, “Hợp chất 15”, “Hợp chất 16”, “Hợp chất 17”, “Hợp chất 18”, “Hợp chất 19”, “Hợp chất 20”, “Hợp chất 21”, “Hợp chất 22”, và “Hợp chất 23”.

Kết quả thử nghiệm chỉ ra rằng hợp chất theo sáng chế là các thuốc diệt cỏ và/hoặc chất điều hòa sinh trưởng thực vật trước nảy mầm và/hoặc sau nảy mầm có hoạt tính cao. Hợp chất theo sáng chế thường có cao nhất hoạt tính đối với việc

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

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

Lượng hữu hiệu có tác dụng diệt cỏ của hợp chất theo sáng chế được xác định bằng một số yếu tố. Các yếu tố này bao gồm: chế phẩm được chọn, phương pháp phun, số lượng và loại thực vật có mặt, các điều kiện sinh trưởng, v.v. Nói chung, lượng hữu hiệu có tác dụng diệt cỏ của hợp chất theo sáng chế nằm trong khoảng từ 0,001 đến 20 kg/ha với khoảng được ưu tiên là từ 0,004 đến 1 kg/ha. Người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực kỹ thuật này có thể xác định một cách dễ dàng lượng hữu hiệu có tác dụng diệt cỏ cần thiết cho mức phòng trừ cỏ dại mong muốn.

Theo một phương án chung, hợp chất theo sáng chế được phun, thông thường ở dạng chế phẩm đã chế hóa, vào vị trí có thực vật mong muốn (ví dụ, cây trồng) và thực vật không mong muốn (ví dụ, cỏ), cả hai loại này có thể là hạt giống, cây giống và/hoặc cây trồng lớn hơn, tiếp xúc với môi trường sinh trưởng (ví dụ, đất). Ở vị trí này, chế phẩm chứa hợp chất theo sáng chế có thể được phun trực tiếp vào thực vật hoặc bộ phận của thực vật, đặc biệt là thực vật không mong muốn, và/hoặc vào môi trường sinh trưởng khi tiếp xúc với thực vật.

Các giống thực vật và cây trồng của các loài thực vật mong muốn ở vị trí được xử lý bằng hợp chất theo sáng chế có thể thu được bằng phương pháp nhân giống và truyền giống thông thường hoặc bằng các phương pháp sử dụng kỹ thuật di truyền.

Cây trồng biến đổi gen (cây trồng chuyển gen) là các cây trồng trong đó gen khác loài (gen chuyển) đã được hợp nhất một cách ổn định vào bộ gen của cây trồng. Gen chuyển mà được xác định bằng vị trí cụ thể của nó trong bộ gen của cây trồng được gọi là gen biến nạp hoặc gen chuyển.

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

Các từ viết tắt sau, T1 đến T37, được sử dụng trong Bảng C cho tính trạng. A “-” nghĩa là mục nhập không có sẵn; “tol.” nghĩa là “chống chịu” và “res.” nghĩa là kháng.

Tính trạng	Mô tả	Tính trạng	Mô tả	Tính trạng	Mô tả
T1	Chống chịu Glyphosat	T15	Chống chịu lạnh	T27	Lượng tryptophan cao
T2	Lượng dầu axit lauric cao	T16	Chống chịu thuốc diệt cỏ imidazolinon	T28	Lá thẳng đứng cao hơn lùn
T3	Chống chịu Glufosinat	T17	Lượng alpha-amylaza cải biến	T29	Cao hơn lùn
T4	Phá vỡ phytat	T18	Kiểm soát quá trình thụ phấn	T30	Chống chịu kim loại thấp
T5	Chống chịu Oxynil	T19	Chống chịu 2,4-D	T31	Lượng dầu/axit béo cải biến
T6	Kháng bệnh	T20	Lượng lizin tăng	T32	Chống chịu HPPD
T7	Kháng sâu bọ	T21	Chống chịu khô hạn	T33	Lượng dầu cao
T9	Màu sắc hoa cải biến	T22	Làm chậm quá trình chín/già	T34	Chống chịu Aryloxyalkanoat
T11	Chống chịu thuốc diệt cỏ ALS	T23	Chất lượng sản phẩm cải biến	T35	Chống chịu Mesotrion
T12	Chống chịu Dicamba	T24	Lượng xenluloza cao	T36	Lượng nicotin giảm
T13	Chống dị ứng	T25	Lượng tinh bột/carbohydrat cải biến	T37	Cải biến sản phẩm
T14	Chống chịu muối	T26	Kháng sâu bọ và bệnh		

Bảng C

Cây trồng	Tên gen	Mã gen	Tính trạng	Gen
Cỏ linh lăng	J101	MON-00101-8	T1	cp4 epsps (aroA:CP4)
Cỏ linh lăng	J163	MON-ØØ163-7	T1	cp4 epsps (aroA:CP4)
Cây hạt cải dầu*	23-18-17 (Gen 18)	CGN-89465-2	T2	Te
Cây hạt cải dầu*	23-198 (Gen 23)	CGN-89465-2	T2	Te
Cây hạt cải dầu*	61061	DP-Ø61Ø61-7	T1	gat4621
Cây hạt cải dầu*	73496	DP-Ø73496-4	T1	gat4621
Cây hạt cải dầu*	GT200 (RT200)	MON-89249-2	T1	cp4 epsps (aroA:CP4); goxv247
Cây hạt cải dầu*	GT73 (RT73)	MON-ØØØ73-7	T1	cp4 epsps (aroA:CP4); goxv247
Cây hạt cải dầu*	HCN10 (Topas 19/2)	-	T3	Bar
Cây hạt cải dầu*	HCN28 (T45)	ACS-BNØØ8-2	T3	pat (syn)
Cây hạt cải	HCN92 (Topas 19/2)	ACS-	T3	bar

dầu*		BNØØ7-1		
Cây hạt cải dầu*	MON88302	MON-883Ø2-9	T1	cp4 epsps (aroA:CP4)
Cây hạt cải dầu*	MPS961	-	T4	phyA
Cây hạt cải dầu*	MPS962	-	T4	phyA
Cây hạt cải dầu*	MPS963	-	T4	phyA
Cây hạt cải dầu*	MPS964	-	T4	phyA
Cây hạt cải dầu*	MPS965	-	T4	phyA
Cây hạt cải dầu*	MS1 (B91-4)	ACS-BNØØ4-7	T3	bar
Cây hạt cải dầu*	MS8	ACS-BNØØ5-8	T3	bar
Cây hạt cải dầu*	OXY-235	ACS-BNØ11-5	T5	Bxn
Cây hạt cải dầu*	PHY14	-	T3	Bar
Cây hạt cải dầu*	PHY23	-	T3	Bar
Cây hạt cải dầu*	PHY35	-	T3	Bar
Cây hạt cải dầu*	PHY36	-	T3	Bar
Cây hạt cải dầu*	RF1 (B93-101)	ACS-BNØØ1-4	T3	Bar
Cây hạt cải dầu*	RF2 (B94-2)	ACS-BNØØ2-5	T3	Bar
Cây hạt cải dầu*	RF3	ACS-BNØØ3-6	T3	Bar
Cây đậu	EMBRAPA 5,1	EMB-PVØ51-1	T6	ac1 (có nghĩa và đối nghĩa)
Cà tím #	EE-1	-	T7	cry1Ac
Cây bông	19-51a	DD-Ø1951A-7	T11	S4-HrA
Cây bông	281-24-236	DAS-24236-5	T3,T7	pat (syn); cry1F
Cây bông	3006-210-23	DAS-21Ø23-5	T3,T7	pat (syn); cry1Ac
Cây bông	31707	-	T5,T7	bxn; cry1Ac
Cây bông	31803	-	T5,T7	bxn; cry1Ac
Cây bông	31807	-	T5,T7	bxn; cry1Ac
Cây bông	31808	-	T5,T7	bxn; cry1Ac
Cây bông	42317	-	T5,T7	bxn; cry1Ac
Cây bông	BNLA-601	-	T7	cry1Ac
Cây bông	BXN10211	BXN10211-9	T5	bxn; cry1Ac

Cây bông	BXN10215	BXN10215-4	T5	bxn; cry1Ac
Cây bông	BXN10222	BXN10222-2	T5	bxn; cry1Ac
Cây bông	BXN10224	BXN10224-4	T5	bxn; cry1Ac
Cây bông	COT102	SYN-IR102-7	T7	vip3A(a)
Cây bông	COT67B	SYN-IR67B-1	T7	cry1Ab
Cây bông	COT202	-	T7	vip3A
Cây bông	Event 1	-	T7	cry1Ac
Cây bông	GMF Cry1A	GTL- GMF311-7	T7	cry1Ab-Ac
Cây bông	GHB119	BCS-GH005- 8	T7	cry2Ae
Cây bông	GHB614	BCS-GH002- 5	T1	2mepsps
Cây bông	GK12	-	T7	cry1Ab-Ac
Cây bông	LLCotton25	ACS-GH001- 3	T3	Bar
Cây bông	MLS 9124	-	T7	cry1C
Cây bông	MON1076	MON-89924- 2	T7	cry1Ac
Cây bông	MON1445	MON-01445- 2	T1	Cp4 epsps (aroA:CP4)
Cây bông	MON15985	MON-15985- 7	T7	cry1Ac; cry2Ab2
Cây bông	MON1698	MON-89383- 1	T7	Cp4 epsps (aroA:CP4)
Cây bông	MON531	MON-00531- 6	T7	cry1Ac
Cây bông	MON757	MON-00757- 7	T7	cry1Ac
Cây bông	MON88913	MON-88913- 8	T1	cp4 epsps (aroA:CP4)
Cây bông	Nqwe Chi 6 Bt	-	T7	-
Cây bông	SKG321	-	T7	cry1A; CpTI
Cây bông	T303-3	BCS-GH003- 6	T3,T7	cry1Ab; bar
Cây bông	T304-40	BCS-GH004- 7	T3,T7	cry1Ab; bar
Cây bông	CE43-67B	-	T7	cry1Ab
Cây bông	CE46-02A	-	T7	cry1Ab
Cây bông	CE44-69D	-	T7	cry1Ab
Cây bông	1143-14A	-	T7	cry1Ab
Cây bông	1143-51B	-	T7	cry1Ab
Cây bông	T342-142	-	T7	cry1Ab
Cây bông	PV-GHGT07 (1445)	-	T1	cp4 epsps (aroA:CP4)
Cây bông	EE-GH3	-	T1	mepsps

Cây bông	EE-GH5	-	T7	cry1Ab
Cây bông	MON88701	MON-88701-3	T3,T12	dmo; bar cải biến
Cây bông	OsCr11	-	T13	Cry j cải biến
Cây lanh	FP967	CDC-FL001-2	T11	Als
Cây đậu lăng	RH44	-	T16	Als
Cây ngô	3272	SYN-E3272-5	T17	amy797E
Cây ngô	5307	SYN-05307-1	T7	ecry3,1Ab
Cây ngô	59122	DAS-59122-7	T3,T7	cry34Ab1; cry35Ab1; pat
Cây ngô	676	PH-000676-7	T3,T18	pat; dam
Cây ngô	678	PH-000678-9	T3,T18	pat; dam
Cây ngô	680	PH-000680-2	T3,T18	pat; dam
Cây ngô	98140	DP-098140-6	T1,T11	gat4621; zm-hra
Cây ngô	Bt10	-	T3,T7	cry1Ab; pat
Cây ngô	Bt176 (176)	SYN-EV176-9	T3,T7	cry1Ab; bar
Cây ngô	BVLA430101	-	T4	phyA2
Cây ngô	CBH-351	ACS-ZM004-3	T3,T7	cry9C; bar
Cây ngô	DAS40278-9	DAS40278-9	T19	aad-1
Cây ngô	DBT418	DKB-89614-9	T3,T7	cry1Ac; pinII; bar
Cây ngô	DLL25 (B16)	DKB-89790-5	T3	bar
Cây ngô	GA21	MON-00021-9	T1	mepsps
Cây ngô	GG25	-	T1	mepsps
Cây ngô	GJ11	-	T1	mepsps
Cây ngô	Fl117	-	T1	mepsps
Cây ngô	GAT-ZM1	-	T3	pat
Cây ngô	LY038	REN-00038-3	T20	cordapA
Cây ngô	MIR162	SYN-IR162-4	T7	vip3Aa20
Cây ngô	MIR604	SYN-IR604-5	T7	mcry3A
Cây ngô	MON801 (MON80100)	MON801	T1,T7	cry1Ab; cp4 epsps (aroA:CP4); goxv247
Cây ngô	MON802	MON-80200-7	T1,T7	cry1Ab; cp4 epsps (aroA:CP4); goxv247
Cây ngô	MON809	PH-MON-809-2	T1,T7	cry1Ab; cp4 epsps (aroA:CP4); goxv247
Cây ngô	MON810	MON-00810-6	T1,T7	cry1Ab; cp4 epsps (aroA:CP4); goxv247
Cây ngô	MON832	-	T1	cp4 epsps (aroA:CP4); goxv247

Cây ngô	MON863	MON-00863-5	T7	cry3Bb1
Cây ngô	MON87427	MON-87427-7	T1	cp4 epsps (aroA:CP4)
Cây ngô	MON87460	MON-87460-4	T21	cspB
Cây ngô	MON88017	MON-88017-3	T1,T7	cry3Bb1; cp4 epsps (aroA:CP4)
Cây ngô	MON89034	MON-89034-3	T7	cry2Ab2; cry1A.105
Cây ngô	MS3	ACS-ZM001-9	T3,T18	bar; barnaza
Cây ngô	MS6	ACS-ZM005-4	T3,T18	bar; barnaza
Cây ngô	NK603	MON-00603-6	T1	cp4 epsps (aroA:CP4)
Cây ngô	T14	ACS-ZM002-1	T3	pat (syn)
Cây ngô	T25	ACS-ZM003-2	T3	pat (syn)
Cây ngô	TC1507	DAS-01507-1	T3,T7	cry1Fa2; pat
Cây ngô	TC6275	DAS-06275-8	T3,T7	mocry1F; bar
Cây ngô	VIP1034	-	T3,T7	Vip3A; pat
Cây ngô	43A47	DP-043A47-3	T3,T7	cry1F; cry34Ab1; cry35Ab1; pat
Cây ngô	40416	DP-040416-8	T3,T7	cry1F; cry34Ab1; cry35Ab1; pat
Cây ngô	32316	DP-032316-8	T3,T7	cry1F; cry34Ab1; cry35Ab1; pat
Cây ngô	4114	DP-004114-3	T3,T7	cry1F; cry34Ab1; cry35Ab1; pat
Cây dưa	Melon A	-	T22	sam-k
Cây dưa	Melon B	-	T22	sam-k
Cây đu đủ	55-1	CUH-CP551-8	T6	prsv cp
Cây đu đủ	63-1	CUH-CP631-7	T6	prsv cp
Cây đu đủ	Huanong No. 1	-	T6	prsv rep
Cây đu đủ	X17-2	UFL-X17CP-6	T6	prsv cp
Cây mận	C-5	ARS-PLMC5-6	T6	ppv cp
Cây hạt cải dầu**	ZSR500	-	T1	cp4 epsps (aroA:CP4); goxv247
Cây hạt cải dầu**	ZSR502	-	T1	cp4 epsps (aroA:CP4); goxv247
Cây hạt cải dầu**	ZSR503	-	T1	cp4 epsps (aroA:CP4); goxv247
Cây lúa	7Cp#242-95-7	-	T13	7crp

Cây lúa	7Crp#10	-	T13	7crp
Cây lúa	GM Shanyou 63	-	T7	Cry1Ab; cry1Ac
Cây lúa	Huahui-1/TT51-1	-	T7	Cry1Ab; cry1Ac
Cây lúa	LLCÂY LÚA06	ACS-OS001-4	T3	Bar
Cây lúa	LLCÂY LÚA601	BCS-OS003-7	T3	Bar
Cây lúa	LLCÂY LÚA62	ACS-OS002-5	T3	Bar
Cây lúa	Tarom molaii + cry1Ab	-	T7	cry1Ab (cụt)
Cây lúa	GAT-OS2	-	T3	Bar
Cây lúa	GAT-OS3	-	T3	Bar
Cây lúa	PE-7	-	T7	Cry1Ac
Cây lúa	7Crp#10	-	T13	7crp
Cây lúa	KPD627-8	-	T27	OASA1D
Cây lúa	KPD722-4	-	T27	OASA1D
Cây lúa	KA317	-	T27	OASA1D
Cây lúa	HW5	-	T27	OASA1D
Cây lúa	HW1	-	T27	OASA1D
Cây lúa	B-4-1-18	-	T28	Δ OsBRI1
Cây lúa	G-3-3-22	-	T29	OSGA2ox1
Cây lúa	AD77	-	T6	DEF
Cây lúa	AD51	-	T6	DEF
Cây lúa	AD48	-	T6	DEF
Cây lúa	AD41	-	T6	DEF
Cây lúa	13pNasNa800725atAprt1	-	T30	HvNAS1; HvNAAT-A; APRT
Cây lúa	13pAprt1	-	T30	APRT
Cây lúa	gHvNAS1-gHvNAAT-1	-	T30	HvNAS1; HvNAAT-A; HvNAAT-B
Cây lúa	gHvIDS3-1	-	T30	HvIDS3
Cây lúa	gHvNAAT1	-	T30	HvNAAT-A; HvNAAT-B
Cây lúa	gHvNAS1-1	-	T30	HvNAS1
Cây lúa	NIA-OS006-4	-	T6	WRKY45
Cây lúa	NIA-OS005-3	-	T6	WRKY45
Cây lúa	NIA-OS004-2	-	T6	WRKY45
Cây lúa	NIA-OS003-1	-	T6	WRKY45
Cây lúa	NIA-OS002-9	-	T6	WRKY45
Cây lúa	NIA-OS001-8	-	T6	WRKY45
Cây lúa	OsCr11	-	T13	Cry j cải biến
Cây lúa	17053	-	T1	cp4 epsps (aroA:CP4)
Cây lúa	17314	-	T1	cp4 epsps (aroA:CP4)

Cây hoa hồng	WKS82 / 130-4-1	IFD-52401-4	T9	5AT; bp40 (f3'5'h)f3'5'h)
Cây hoa hồng	WKS92 / 130-9-1	IFD-52901-9	T9	5AT; bp40 (f3'5'h)
Cây đậu tương	260-05 (G94-1, G94-19, G168)	-	T9	gm-fad2-1 (locut câm)
Cây đậu tương	A2704-12	ACS-GM005-3	T3	Pat
Cây đậu tương	A2704-21	ACS-GM004-2	T3	Pat
Cây đậu tương	A5547-127	ACS-GM006-4	T3	Pat
Cây đậu tương	A5547-35	ACS-GM008-6	T3	Pat
Cây đậu tương	CV127	BPS-CV127-9	T16	csr1-2
Cây đậu tương	DAS68416-4	DAS68416-4	T3	Pat
Cây đậu tương	DP305423	DP-305423-1	T11,T31	gm-fad2-1 (locut câm); gm-hra
Cây đậu tương	DP356043	DP-356043-5	T1,T31	gm-fad2-1 (locut câm); gat4601
Cây đậu tương	FG72	MST-FG072-3	T32,T1	2mepsps; hppdPF W336
Cây đậu tương	GTS 40-3-2 (40-3-2)	MON-04032-6	T1	cp4 epsps (aroA:CP4)
Cây đậu tương	GU262	ACS-GM003-1	T3	Pat
Cây đậu tương	MON87701	MON-87701-2	T7	cry1Ac
Cây đậu tương	MON87705	MON-87705-6	T1,T31	fatb1-A (có nghĩa và đối nghĩa); fad2-1A (có nghĩa và đối nghĩa); cp4 epsps (aroA:CP4)
Cây đậu tương	MON87708	MON-87708-9	T1,T12	dmo; cp4 epsps (aroA:CP4)
Cây đậu tương	MON87769	MON-87769-7	T1,T31	Pj.D6D; Nc.Fad3; cp4 epsps (aroA:CP4)
Cây đậu tương	MON89788	MON-89788-1	T1	cp4 epsps (aroA:CP4)
Cây đậu tương	W62	ACS-GM002-9	T3	bar
Cây đậu tương	W98	ACS-GM001-8	T3	bar
Cây đậu tương	MON87754	MON-87754-1	T33	Dgat2A
Cây đậu tương	DAS21606	DAS-21606	T34,T3	aad-12; pat cải biến

Cây đậu tương	DAS44406	DAS-44406-6	T1,T3,T34	aad-12; 2mepsps; pat cải biến
Cây đậu tương	SYHT04R	SYN-0004R-8	T35	Avhppd cải biến
Cây đậu tương	9582,814,19,1	-	T3,T7	cry1Ac, cry1F, PAT
Cây bí	CZW3	SEM-ØCZW3-2	T6	cmv cp, zymv cp, wmv cp
Cây bí	ZW20	SEM-0ZW20-7	T6	zymv cp, wmv cp
Cây củ cải đường	GTSB77 (T9100152)	SY-GTSB77-8	T1	cp4 epsps (aroA:CP4); goxv247
Cây củ cải đường	H7-1	KM-000H71-4	T1	cp4 epsps (aroA:CP4)
Cây củ cải đường	T120-7	ACS-BV001-3	T3	pat
Cây củ cải đường	T227-1	-	T1	cp4 epsps (aroA:CP4)
Cây mía	NXI-1T	-	T21	EcbetA
Cây hoa hướng dương	X81359	-	T16	Als
Cây hạt tiêu	PK-SP01	-	T6	cmv cp
Cây thuốc lá	C/F/93/08-02	-	T5	bxn
Cây thuốc lá	Vật truyền 21-41	-	T36	NtQPT1 (đối nghĩa)
Cây hoa hướng dương	X81359	-	T16	Als
Cây lúa mì	MON71800	MON-718ØØ-3	T1	cp4 epsps (aroA:CP4)

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

Thông thường, mặc dù phần lớn hợp chất theo sáng chế được sử dụng để kiểm soát thực vật không mong muốn, cho thực vật không mong muốn ở vị trí cần xử lý tiếp xúc với hợp chất theo sáng chế có thể tạo ra tác dụng siêu cộng hợp hoặc tác dụng hiệp đồng với các tính trạng di truyền ở thực vật không mong muốn, bao gồm các tính trạng được đưa vào để biến đổi gen. Ví dụ, tính kháng sâu bọ gây bệnh thực vật hoặc các bệnh của thực vật, tính chống chịu các áp lực sinh học/phi sinh học hoặc độ ổn định bảo quản có thể dự định lớn hơn so với các tính trạng di truyền ở thực vật không mong muốn.

Hợp chất theo sáng chế cũng có thể được trộn với một hoặc nhiều hợp chất hoặc chất có hoạt tính sinh học bao gồm thuốc trừ sâu, thuốc diệt nấm, thuốc diệt giun tròn, thuốc diệt khuẩn, thuốc diệt ve bét, thuốc diệt cỏ, chất tăng cường độ tương thích của cây trồng cho thuốc diệt cỏ, chất điều hoà sinh trưởng như chất ức chế côn trùng lột xác và chất kích thích rễ, thuốc diệt dục, chất bán hoá học, chất xua đuổi, chất dẫn dụ côn trùng, pheromon, chất kích thích ăn, các hoạt chất sinh học hoặc vi khuẩn gây bệnh côn trùng, virus hoặc nấm để tạo ra thuốc trừ sâu nhiều thành phần có phổ sử dụng trong nông nghiệp và phi nông nghiệp rộng hơn. Do đó, sáng chế cũng đề xuất chế phẩm chứa lượng hữu hiệu sinh học của hợp chất có công thức 1 (với lượng hữu hiệu có tác dụng diệt cỏ), và ít nhất một hợp chất hoặc chất có hoạt tính sinh học khác (với lượng hữu hiệu sinh học) và có thể còn chứa ít nhất một chất hoạt động bề mặt, chất pha loãng dạng rắn hoặc chất pha loãng dạng lỏng. Hợp chất hoặc chất có hoạt tính sinh học khác có thể được pha chế ở dạng chế phẩm chứa ít nhất một chất hoạt động bề mặt, chất pha loãng dạng rắn hoặc chất pha loãng dạng lỏng. Đối với hỗn hợp theo sáng chế, các hợp chất hoặc chất có hoạt tính sinh học khác có thể được điều chế cùng với chế phẩm theo sáng chế, bao gồm hợp chất có công thức 1, để tạo ra hỗn hợp sơ chế, hoặc các hợp chất hoặc chất có hoạt tính sinh học khác có thể được điều chế riêng lẻ từ chế phẩm theo sáng chế, chứa hợp chất có công thức 1, và hai chế phẩm được kết hợp cùng nhau trước khi sử dụng (ví dụ, trong thùng phun) hoặc, theo một cách khác, được dùng liên tiếp.

Hỗn hợp chứa một hoặc nhiều thuốc diệt cỏ sau với hợp chất theo sáng chế có thể đặc biệt hữu ích để phòng trừ cỏ dại: axetoclo, axiflofen và muối natri của nó, aclonifen, acrolein (2-propenal), alaclo, aloxydim, ametryn, amicarbazon, amitosulfuron, aminoxyclopyrachlor và este của nó (ví dụ, metyl, etyl) và các muối (ví dụ, natri, kali), aminopyralit, amitrol, amoni sulfamat, anilofos, asulam, atrazin, azimsulfuron, beflubutamit, benazolin, benazolin-etyl, bencarbazon, benfluralin, benfuresat, bensulfuron-metyl, bensulit, bentazon, benzobixyclon, benzofenap, bixyclopyron, bifenox, bilanafos, bispyribac và muối natri của nó, bromaxil,

bromobutit, bromofenoxim, bromoxynil, bromoxynil octanoat, butaclo, butafenaxil, butamifos, butralin, butroxydim, butylat, cafenstrol, carbetamit, carfentrazone-ethyl, catechin, clometoxyfen, cloramben, clorbromuron, clorflurenol-methyl, cloridazon, clorimuron-ethyl, clotoluron, clorpropham, closulfuron, clorthal-dimethyl, clorthiamit, xinidon-ethyl, xinmetylin, xinosulfuron, clacyfos, clefoxydim, clethodim, xyclopyrimorat, clodinafop-propargyl, clomazon, clomeprop, clopyralit, clopyralit-olamin, cloransulam-methyl, cumyluron, xyanazin, xycloat, xyclopyrimorat, xyclosulfamuron, xycloxydim, xyhalofop-butyl, 2,4-D và butotyl của nó, butyl, isootyl và este isopropyl và dimethylamoni của nó, diolamin và muối trolamin, daimuron, dalapon, dalapon-natri, dazomet, 2,4-DB và dimethylamoni của nó, các muối kali và natri, desmedipham, desmetryn, dicamba và diglycolamoni của nó, dimethylamoni, các muối kali và natri, diclobenil, dicloprop, diclofop-methyl, diclosulam, difenzoquat metilsulfat, dflufenican, dflufenzopyr, dimefuron, dimepiperat, dimethaclor, dimethametryn, dimethenamit, dimethenamit-P, dimethipin, axit dimethylarsinic và muối natri của nó, đinitramin, dinoterb, diphenamit, diquat dibromua, dithiopyr, diuron, DNOC, endothal, EPTC, esprocarb, etalfluralin, etametsulfuron-methyl, ethiozin, ethofumesat, etoxyfen, etoxysulfuron, etobenzanil, fenoxaprop-ethyl, fenoxaprop-P-ethyl, fenoxasulfon, fenquinotriol, fentrazamit, fenuron, fenuron-TCA, flamprop-methyl, flamprop-M-isopropyl, flamprop-M-methyl, flazasulfuron, florasulam, fluazifop-butyl, fluazifop-P-butyl, fluazolat, flucarbazon, flucetosulfuron, flucloralin, flufenaxet, flufenpyr, flufenpyr-ethyl, flumetsulam, flumiclorac-pentyl, flumioxazin, fluometuron, floglycofen-ethyl, flupoxam, flupyrsulfuron-methyl và muối natri của nó, flurenol, flurenol-butyl, fluridon, flurocloridon, fluroxypyr, flurtamon, fluthiaket-methyl, fomesafen, foramsulfuron, fosamin-amoni, glufosinat, glufosinat-amoni, glufosinat-P, glyphosat và các muối của nó như amoni, isopropylamoni, kali, natri (bao gồm sesquinate) và trimesium (được gọi theo cách khác là sulfosat), halauxifen, halauxifen-methyl, halosulfuron-methyl, haloxyfop-etotyl, haloxyfop-methyl, hexazinon, imazametabenz-methyl, imazamox, imazapic, imazapyr, imazaquin, imazaquin-amoni, imazetapyr,

imazetapyr-amoni, imazosulfuron, indanofan, indaziflam, iofensulfuron, iodosulfuron-metyl, ioxynil, ioxynil octanoat, ioxynil-natri, ipfencarbazon, isoproturon, isouron, isoxaben, isoxaflutol, isoxaclortol, lactofen, lenaxil, linuron, maleic hydrazit, MCPA và các muối của nó (ví dụ, MCPA-dimethylamoni, MCPA-kali và MCPA-natri, este (ví dụ, MCPA-2-ethylhexyl, MCPA-butotyl) và thioeste (ví dụ, MCPA-thioetyl), MCPB và các muối của nó (ví dụ, MCPB-natri) và este (ví dụ, MCPB-etyl), mecoprop, mecoprop-P, mefenaxet, mefluidit, mesosulfuron-metyl, mesotrion, metam-natri, metamifop, metamitron, metazaclo, metazosulfuron, methabenzthiazuron, axit metylarsonic và canxi của nó, monoamoni, muối mononatri và dinatri, metyldymron, metobenzuron, metobromuron, metolaclo, S-metolaclo, metosulam, metoxuron, metribuzin, metsulfuron-metyl, molinat, monolinuron, naproanilit, napropamit, napropamit-M, naptalam, neburon, nicosulfuron, norflurazon, orbencarb, orthosulfamuron, oryzalin, oxadiargyl, oxadiazon, oxasulfuron, oxaziclomefon, oxyfluorfen, paraquat diclorua, pebulat, axit pelargonic, pendimetalin, penoxsulam, pentanoclor, pentoxazon, perfluidon, pethoxamit, petoxyamit, phenmedipham, picloram, picloram-kali, picolinafen, pinoxaden, piperophos, pretilaclo, primisulfuron-metyl, prodiamin, profoxydim, prometon, prometryn, propaclo, propanil, propaquizafop, propazin, propham, propisoclo, propoxycarbazon, propyrisulfuron, propyzamit, prosulfocarb, prosulfuron, pyraclonil, pyraflufen-etyl, pyrasulfotol, pyrazogyl, pyrazolynat, pyrazoxyfen, pyrazosulfuron-etyl, pyribenzoxim, pyributicarb, pyridat, pyriftalit, pyriminobac-metyl, pyrimisulfan, pyriithiobac, pyriithiobac-natri, pyroxasulfon, pyroxsulam, quinclorac, quinmerac, quinoclamín, quizalofop-etyl, quizalofop-P-etyl, quizalofop-P-tefuryl, rimsulfuron, saflufenacil, setoxydim, siduron, simazin, simetryn, sulcotrion, sulfentrazon, sulfometuron-metyl, sulfosulfuron, 2,3,6-TBA, TCA, TCA-natri, tebutam, tebuthiuron, tefuryltrion, tembotrion, tepraloxymid, terbacil, terbumeton, terbutylazin, terbutryn, thenylclo, thiazopyr, thiencarbazon, thifensulfuron-metyl, thiobencarb, tiafenacil, tiocarbazil, topramezon, tralkoxydim, tri-allat, triafamon, triasulfuron, triaziflam, tribenuron-metyl, triclopyr,

triclopyr-butotyl, triclopyr-triethylamoni, tridiphan, trietazin, trifloxysulfuron, trifluralin, triflusulfuron-metyl, tritosulfuron, vernolat, 3-(2-clo-3,6-điflophenyl)-4-hydroxy-1-metyl-1,5-naphthyridin-2(1H)-on, 5-clo-3-[(2-hydroxy-6-oxo-1-xyclohexen-1-yl)cacbonyl]-1-(4-metoxyphephenyl)-2(1H)-quinoxalinon, 2-clo-N-(1-metyl-1H-tetrazol-5-yl)-6-(triflometyl)-3-pyridincaboxamit, 7-(3,5-diclo-4-pyridinyl)-5-(2,2-đifloetyl)-8-hydroxypyrido[2,3-*b*]pyrazin-6(5H)-on, 4-(2,6-đietyl-4-metylphenyl)-5-hydroxy-2,6-dimetyl-3(2H)-pyridazinon, 5-[[[(2,6-điflophenyl)metoxy]metyl]-4,5-đihydro-5-metyl-3-(3-metyl-2-thienyl)isoxazol (previously methioxolin), 3-[7-flo-3,4-đihydro-3-oxo-4-(2-propyn-1-yl)-2H-1,4-benzoxazin-6-yl]đihydro-1,5-dimetyl-6-thioxo-1,3,5-triazin-2,4(1H,3H)-đion, 4-(4-flophenyl)-6-[(2-hydroxy-6-oxo-1-xyclohexen-1-yl)cacbonyl]-2-metyl-1,2,4-triazin-3,5(2H,4H)-đion, metyl 4-amino-3-clo-6-(4-clo-2-flo-3-metoxyphephenyl)-5-flo-2-pyridincaboxylat, 2-metyl-3-(metylsulfonyl)-N-(1-metyl-1H-tetrazol-5-yl)-4-(triflometyl)benzamid, và 2-metyl-N-(4-metyl-1,2,5-oxadiazol-3-yl)-3-(metylsulfinyl)-4-(triflometyl)benzamid. Thuốc diệt cỏ khác cũng bao gồm các thuốc diệt cỏ sinh học như *Alternaria destruens* Simmons, *Colletotrichum gloeosporioides* (Penz.) Penz. & Sacc., *Drechslera monoceras* (MTB-951), *Myrothecium verrucaria* (Albertini & Schweinitz) Ditmar: Fries, *Phytophthora palmivora* (Butl.) Butl. và *Puccinia thlaspeos* Schub.

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

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

Manual, 2nd Edition, L. G. Copping, Ed., British Crop Protection Council, Farnham, Surrey, U.K., 2001.

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

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

trường. Khi làm an toàn các thành phần có tác dụng diệt cỏ xảy ra đối với cây trồng, các hỗn hợp như vậy có thể có lợi để làm tăng sự bảo vệ mùa màng bằng cách làm giảm tính cạnh tranh cỏ dại.

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

Hợp chất theo sáng chế cũng có thể được sử dụng kết hợp với chất an toàn diệt cỏ (safener) như allidoclor, benoxacor, cloquintocet-mexyl, cumyluron, xyometrinil, cyprosulfonamid, daimuron, diclomit, dixyclonon, dietholat, dimepiperat, fenclorazol-etyl, fenclorim, flurazol, fluxofenim, furilazol, isoxadifen-etyl, mefenpyr-dietyl, mephenat, metoxyphenon anhydrit naphtalic (1,8-anhydrit naphtalic), oxabetrinil, *N*-(aminocarbonyl)-2-metylbenzensulfonamid, *N*-(aminocarbonyl)-2-flobenzensulfonamid, 1-bromo-4-[(clometyl)sulfonyl]benzen (BCS), 4-(dicloaxetyl)-1-oxa-4-azospiro[4,5]đecan (MON 4660), 2-(diclometyl)-2-metyl-1,3-đioxolan (MG 191), etyl 1,6-đihydro-1-(2-metoxypheyl)-6-oxo-2-phenyl-5-pyrimidincarboxylat, 2-hydroxy-*N,N*-dimetyl-6-(triflometyl)pyridin-3-carboxamid, và 3-oxo-1-xyclohexen-1-yl 1-(3,4-dimetylphenyl)-1,6-đihydro-6-oxo-2-phenyl-5-pyrimidincarboxylat, 2,2-diclo-1-(2,2,5-trimetyl-3-oxazolitiny)-etanon và 2-metoxi-*N*-[[4-[(metylamino)carbonyl]amino]phenyl]sulfonyl]-benzamid để làm tăng an toàn cho các cây trồng nhất định. Lượng hữu hiệu có tác dụng giải độc của chất an toàn diệt cỏ (safener) có thể được phun đồng thời dưới dạng hợp chất theo sáng chế, hoặc được phun dưới dạng chất xử lý hạt. Vì vậy, theo một khía cạnh, sáng chế đề xuất hỗn hợp diệt cỏ chứa hợp chất theo sáng chế và lượng hữu hiệu có tác dụng giải độc của chất an toàn diệt cỏ (safener). Việc xử lý hạt là đặc biệt hữu ích để phòng trừ cỏ

dại một cách chọn lọc, bởi vì nó giới hạn về mặt sinh lý việc giải độc cho cây trồng. Vì vậy, một phương án đặc biệt hữu ích theo sáng chế là phương pháp phòng trừ một cách có chọn lọc sự sinh trưởng của thực vật không mong muốn ở cây trồng bao gồm bước cho vị trí của cây trồng tiếp xúc với lượng hữu hiệu có tác dụng diệt cỏ của hợp chất theo sáng chế trong đó hạt mà từ đó cây trồng sinh trưởng được xử lý bằng lượng hữu hiệu có tác dụng giải độc của chất an toàn. Lượng hữu hiệu có tác dụng giải độc của chất an toàn có thể được xác định một cách dễ dàng bởi người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực kỹ thuật này thông qua thử nghiệm đơn giản.

Hợp chất theo sáng chế cũng có thể được trộn với: (1) polynucleotit bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, ADN, ARN, và/hoặc nucleotit được cải biến bằng hóa học tác động đến lượng đích cụ thể đến quá trình điều hòa dưới, sự can thiệp, ức chế hoặc làm câm sản phẩm phiên mã có nguồn gốc di truyền mà tạo ra hiệu quả diệt cỏ; hoặc (2) polynucleotit bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, ADN, ARN, và/hoặc nucleotit được cải biến bằng hóa học tác động đến lượng đích cụ thể đến quá trình điều hòa dưới, sự can thiệp, ức chế hoặc làm câm sản phẩm phiên mã có nguồn gốc di truyền mà tạo ra hiệu quả an toàn.

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

Bảng A1 liệt kê hỗn hợp cụ thể của thành phần (a) với thành phần (b) minh họa cho hỗn hợp của chế phẩm và phương pháp theo sáng chế. Hợp chất 1 trong cột Thành phần (a) được xác định trong Bảng chỉ số A. Cột thứ hai của Bảng A1 liệt kê hợp chất (ví dụ, “2,4-D” trong dòng thứ nhất) với Thành phần (b) cụ thể. Các cột thứ ba, thứ tư, thứ năm của Bảng A1 liệt kê khoảng tỷ lệ khối lượng cho các tỷ lệ mà tại đó hợp chất chứa thành phần (a) thường được phun lên cây trồng sinh trưởng trên cánh đồng so với thành phần (b) (tức là (a):(b)). Do vậy, ví dụ, dòng thứ nhất của

Bảng A1 thể hiện một cách rõ ràng tổ hợp của thành phần (a) (tức là Hợp chất 17 trong Bảng chỉ số A) với 2,4-D thường được phun với tỷ lệ khối lượng nằm trong khoảng từ 1:192 đến 6:1. Các dòng còn lại của Bảng A1 được cấu trúc theo cách tương tự.

Bảng A1

<u>Thành phần (a)</u> (Hợp chất #)	<u>Thành phần (b)</u>	Tỷ lệ khối lượng được ưu tiên	Tỷ lệ khối lượng được ưu tiên hơn	Tỷ lệ khối lượng được ưu tiên nhất
1	2,4-D	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	Axetoclor	1:768 – 2:1	1:256 – 1:2	1:96 – 1:11
1	Axifluorfen	1:96 – 12:1	1:32 – 4:1	1:12 – 1:2
1	Aclonifen	1:857 – 2:1	1:285 – 1:3	1:107 – 1:12
1	Alachlor	1:768 – 2:1	1:256 – 1:2	1:96 – 1:11
1	Ametryn	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Amicarbazone	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	Amidosulfuron	1:6 – 168:1	1:2 – 56:1	1:1 – 11:1
1	Aminoxyclopyrachlor	1:48 – 24:1	1:16 – 8:1	1:6 – 2:1
1	Aminopyralid	1:20 – 56:1	1:6 – 19:1	1:2 – 4:1
1	Amitrol	1:768 – 2:1	1:256 – 1:2	1:96 – 1:11
1	Anilofos	1:96 – 12:1	1:32 – 4:1	1:12 – 1:2
1	Asulam	1:960 – 2:1	1:320 – 1:3	1:120 – 1:14
1	Atrazin	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	Azimsulfuron	1:6 – 168:1	1:2 – 56:1	1:1 – 11:1
1	Beflubutamid	1:342 – 4:1	1:114 – 2:1	1:42 – 1:5
1	Benfuresat	1:617 – 2:1	1:205 – 1:2	1:77 – 1:9
1	Bensulfuron-methyl	1:25 – 45:1	1:8 – 15:1	1:3 – 3:1
1	Bentazon	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	Benzobicyclon	1:85 – 14:1	1:28 – 5:1	1:10 – 1:2
1	Benzofenap	1:257 – 5:1	1:85 – 2:1	1:32 – 1:4
1	Bixyclopyron	1:42 – 27:1	1:14 – 9:1	1:5 – 2:1
1	Bifenox	1:257 – 5:1	1:85 – 2:1	1:32 – 1:4
1	Bispyribac-natri	1:10 – 112:1	1:3 – 38:1	1:1 – 7:1
1	Bromaxil	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Bromobutit	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Bromoxynil	1:96 – 12:1	1:32 – 4:1	1:12 – 1:2
1	Butaclor	1:768 – 2:1	1:256 – 1:2	1:96 – 1:11
1	Butafenaxil	1:42 – 27:1	1:14 – 9:1	1:5 – 2:1
1	Butylat	1:1542 – 1:2	1:514 – 1:5	1:192 – 1:22
1	Carfenstrol	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	Carfentrazone-ethyl	1:128 – 9:1	1:42 – 3:1	1:16 – 1:2
1	Clorimuron-ethyl	1:8 – 135:1	1:2 – 45:1	1:1 – 9:1
1	Clorotoluron	1:768 – 2:1	1:256 – 1:2	1:96 – 1:11
1	Clorsulfuron	1:6 – 168:1	1:2 – 56:1	1:1 – 11:1
1	Xincosulfuron	1:17 – 68:1	1:5 – 23:1	1:2 – 5:1
1	Xinidon-ethyl	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Xinmethylin	1:34 – 34:1	1:11 – 12:1	1:4 – 3:1
1	Clacyfos	1:34 – 34:1	1:11 – 12:1	1:4 – 3:1

1	Clethodim	1:48 – 24:1	1:16 – 8:1	1:6 – 2:1
1	Clodinafop-propargyl	1:20 – 56:1	1:6 – 19:1	1:2 – 4:1
1	Clomazon	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Clomeprop	1:171 – 7:1	1:57 – 3:1	1:21 – 1:3
1	Clopyralid	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	Cloransulam-metyl	1:12 – 96:1	1:4 – 32:1	1:1 – 6:1
1	Cumyluron	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Xyanazin	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Xyclopyrimorat	1:17 – 68:1	1:5 – 23:1	1:2 – 5:1
1	Xyclosulfamuron	1:17 – 68:1	1:5 – 23:1	1:2 – 5:1
1	Xycloxydim	1:96 – 12:1	1:32 – 4:1	1:12 – 1:2
1	Xyhalofop	1:25 – 45:1	1:8 – 15:1	1:3 – 3:1
1	Daimuron	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	Desmedipham	1:322 – 4:1	1:107 – 2:1	1:40 – 1:5
1	Dicamba	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	Diclobenil	1:1371 – 1:2	1:457 – 1:4	1:171 – 1:20
1	Diclorprop	1:925 – 2:1	1:308 – 1:3	1:115 – 1:13
1	Diclofop-metyl	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Diclosulam	1:10 – 112:1	1:3 – 38:1	1:1 – 7:1
1	Difenzoquat	1:288 – 4:1	1:96 – 2:1	1:36 – 1:4
1	Diflufenican	1:857 – 2:1	1:285 – 1:3	1:107 – 1:12
1	Diflufenzopyr	1:12 – 96:1	1:4 – 32:1	1:1 – 6:1
1	Dimethachlor	1:768 – 2:1	1:256 – 1:2	1:96 – 1:11
1	Dimethametryn	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	Dimethenamid-P	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Dithiopyr	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	Diuron	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	EPTC	1:768 – 2:1	1:256 – 1:2	1:96 – 1:11
1	Esprocarb	1:1371 – 1:2	1:457 – 1:4	1:171 – 1:20
1	Ethalfuralin	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Ethametsulfuron-metyl	1:17 – 68:1	1:5 – 23:1	1:2 – 5:1
1	Ethoxyfen	1:8 – 135:1	1:2 – 45:1	1:1 – 9:1
1	Ethoxysulfuron	1:20 – 56:1	1:6 – 19:1	1:2 – 4:1
1	Etobenzanid	1:257 – 5:1	1:85 – 2:1	1:32 – 1:4
1	Fenoxaprop-etyl	1:120 – 10:1	1:40 – 4:1	1:15 – 1:2
1	Fenoxasulfon	1:85 – 14:1	1:28 – 5:1	1:10 – 1:2
1	Fenquino-trion	1:17 – 68:1	1:5 – 23:1	1:2 – 5:1
1	Fentrazamit	1:17 – 68:1	1:5 – 23:1	1:2 – 5:1
1	Flazasulfuron	1:17 – 68:1	1:5 – 23:1	1:2 – 5:1
1	Florasulam	1:2 – 420:1	1:1 – 140:1	2:1 – 27:1
1	Fluazifop-butyl	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	Flucarbazon	1:8 – 135:1	1:2 – 45:1	1:1 – 9:1
1	Fluxetosulfuron	1:8 – 135:1	1:2 – 45:1	1:1 – 9:1
1	Flufenaxet	1:257 – 5:1	1:85 – 2:1	1:32 – 1:4
1	Flumetsulam	1:24 – 48:1	1:8 – 16:1	1:3 – 3:1
1	Flumiclorac-pentyl	1:10 – 112:1	1:3 – 38:1	1:1 – 7:1
1	Flumioxazin	1:25 – 45:1	1:8 – 15:1	1:3 – 3:1
1	Fluometuron	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Flupyr-sulfuron-metyl	1:3 – 336:1	1:1 – 112:1	2:1 – 21:1
1	Fluridon	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Fluroxypyr	1:96 – 12:1	1:32 – 4:1	1:12 – 1:2
1	Flurtamon	1:857 – 2:1	1:285 – 1:3	1:107 – 1:12
1	Fluthiaxet-metyl	1:48 – 42:1	1:16 – 14:1	1:3 – 3:1

1	Fomesafen	1:96 – 12:1	1:32 – 4:1	1:12 – 1:2
1	Foramsulfuron	1:13 – 84:1	1:4 – 28:1	1:1 – 6:1
1	Glufosinat	1:288 – 4:1	1:96 – 2:1	1:36 – 1:4
1	Glyphosat	1:288 – 4:1	1:96 – 2:1	1:36 – 1:4
1	Halosulfuron-metyl	1:17 – 68:1	1:5 – 23:1	1:2 – 5:1
1	Halauxifen	1:20 – 56:1	1:6 – 19:1	1:2 – 4:1
1	Halauxifen-metyl	1:20 – 56:1	1:6 – 19:1	1:2 – 4:1
1	Haloxypop-metyl	1:34 – 34:1	1:11 – 12:1	1:4 – 3:1
1	Hexazinon	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	Hydantocidin	1:1100 – 16:1	1:385 – 8:1	1:144 – 4:1
1	Imazamox	1:13 – 84:1	1:4 – 28:1	1:1 – 6:1
1	Imazapic	1:20 – 56:1	1:6 – 19:1	1:2 – 4:1
1	Imazapyr	1:85 – 14:1	1:28 – 5:1	1:10 – 1:2
1	Imazaquin	1:34 – 34:1	1:11 – 12:1	1:4 – 3:1
1	Imazethabenz-metyl	1:171 – 7:1	1:57 – 3:1	1:21 – 1:3
1	Imazethapyr	1:24 – 48:1	1:8 – 16:1	1:3 – 3:1
1	Imazosulfuron	1:27 – 42:1	1:9 – 14:1	1:3 – 3:1
1	Indanofan	1:342 – 4:1	1:114 – 2:1	1:42 – 1:5
1	Indaziflam	1:25 – 45:1	1:8 – 15:1	1:3 – 3:1
1	Iodosulfuron-metyl	1:3 – 336:1	1:1 – 112:1	2:1 – 21:1
1	Ioxynil	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	Ipfencarbazon	1:85 – 14:1	1:28 – 5:1	1:10 – 1:2
1	Isoproturon	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Isoxaben	1:288 – 4:1	1:96 – 2:1	1:36 – 1:4
1	Isoxaflutol	1:60 – 20:1	1:20 – 7:1	1:7 – 2:1
1	Lactofen	1:42 – 27:1	1:14 – 9:1	1:5 – 2:1
1	Lenaxil	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Linuron	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	MCPA	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	MCPB	1:288 – 4:1	1:96 – 2:1	1:36 – 1:4
1	Mecoprop	1:768 – 2:1	1:256 – 1:2	1:96 – 1:11
1	Mefenaxet	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Mefluidit	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	Mesosulfuron-metyl	1:5 – 224:1	1:1 – 75:1	1:1 – 14:1
1	Mesotrion	1:42 – 27:1	1:14 – 9:1	1:5 – 2:1
1	Metamifop	1:42 – 27:1	1:14 – 9:1	1:5 – 2:1
1	Metazaclor	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Metazosulfuron	1:25 – 45:1	1:8 – 15:1	1:3 – 3:1
1	Methabenzthiazuron	1:768 – 2:1	1:256 – 1:2	1:96 – 1:11
1	Metolacior	1:768 – 2:1	1:256 – 1:2	1:96 – 1:11
1	Metosulam	1:8 – 135:1	1:2 – 45:1	1:1 – 9:1
1	Metribuzin	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	Metsulfuron-metyl	1:2 – 560:1	1:1 – 187:1	3:1 – 35:1
1	Molinat	1:1028 – 2:1	1:342 – 1:3	1:128 – 1:15
1	Napropamit	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Napropamit-M	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	Naptalam	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	Nicosulfuron	1:12 – 96:1	1:4 – 32:1	1:1 – 6:1
1	Norflurazon	1:1152 – 1:1	1:384 – 1:3	1:144 – 1:16
1	Orbencarb	1:1371 – 1:2	1:457 – 1:4	1:171 – 1:20
1	Orthosulfamuron	1:20 – 56:1	1:6 – 19:1	1:2 – 4:1
1	Oryzalin	1:514 – 3:1	1:171 – 1:2	1:64 – 1:8
1	Oxadiargyl	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6

1	Oxadiazon	1:548 – 3:1	1:182 – 1:2	1:68 – 1:8
1	Oxasulfuron	1:27 – 42:1	1:9 – 14:1	1:3 – 3:1
1	Oxaziclomefon	1:42 – 27:1	1:14 – 9:1	1:5 – 2:1
1	Oxyfluorfen	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Paraquat	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	Pendimethalin	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Penoxsulam	1:10 – 112:1	1:3 – 38:1	1:1 – 7:1
1	Pentoxamid	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Pentoxazon	1:102 – 12:1	1:34 – 4:1	1:12 – 1:2
1	Phenmedipham	1:102 – 12:1	1:34 – 4:1	1:12 – 1:2
1	Picloram	1:96 – 12:1	1:32 – 4:1	1:12 – 1:2
1	Picolinafen	1:34 – 34:1	1:11 – 12:1	1:4 – 3:1
1	Pinoxaden	1:25 – 45:1	1:8 – 15:1	1:3 – 3:1
1	Pretilaclor	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	Primisulfuron-metyl	1:8 – 135:1	1:2 – 45:1	1:1 – 9:1
1	Prodiamin	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Profoxydim	1:42 – 27:1	1:14 – 9:1	1:5 – 2:1
1	Prometryn	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Propaclor	1:1152 – 1:1	1:384 – 1:3	1:144 – 1:16
1	Propanil	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Propaquizafop	1:48 – 24:1	1:16 – 8:1	1:6 – 2:1
1	Propoxycarbazon	1:17 – 68:1	1:5 – 23:1	1:2 – 5:1
1	Propyrisulfuron	1:17 – 68:1	1:5 – 23:1	1:2 – 5:1
1	Propyzamit	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Prosulfocarb	1:1200 – 1:2	1:400 – 1:4	1:150 – 1:17
1	Prosulfuron	1:6 – 168:1	1:2 – 56:1	1:1 – 11:1
1	Pyraclonil	1:42 – 27:1	1:14 – 9:1	1:5 – 2:1
1	Pyraflufen-etyl	1:5 – 224:1	1:1 – 75:1	1:1 – 14:1
1	Pyrasulfotol	1:13 – 84:1	1:4 – 28:1	1:1 – 6:1
1	Pyrazolynat	1:857 – 2:1	1:285 – 1:3	1:107 – 1:12
1	Pyrazosulfuron-etyl	1:10 – 112:1	1:3 – 38:1	1:1 – 7:1
1	Pyrazoxyfen	1:5 – 224:1	1:1 – 75:1	1:1 – 14:1
1	Pyribenzoxim	1:10 – 112:1	1:3 – 38:1	1:1 – 7:1
1	Pyributicarb	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Pyridat	1:288 – 4:1	1:96 – 2:1	1:36 – 1:4
1	Pyriftalid	1:10 – 112:1	1:3 – 38:1	1:1 – 7:1
1	Pyriminobac-metyl	1:20 – 56:1	1:6 – 19:1	1:2 – 4:1
1	Pyrimisulfan	1:17 – 68:1	1:5 – 23:1	1:2 – 5:1
1	Pyriothiobac	1:24 – 48:1	1:8 – 16:1	1:3 – 3:1
1	Pyroxasulfon	1:85 – 14:1	1:28 – 5:1	1:10 – 1:2
1	Pyroxsulam	1:5 – 224:1	1:1 – 75:1	1:1 – 14:1
1	Quinclorac	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	Quizalofop-etyl	1:42 – 27:1	1:14 – 9:1	1:5 – 2:1
1	Rimsulfuron	1:13 – 84:1	1:4 – 28:1	1:1 – 6:1
1	Saflufenaxil	1:25 – 45:1	1:8 – 15:1	1:3 – 3:1
1	Sethoxydim	1:96 – 12:1	1:32 – 4:1	1:12 – 1:2
1	Simazin	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Sulcotrion	1:120 – 10:1	1:40 – 4:1	1:15 – 1:2
1	Sulfentrazon	1:147 – 8:1	1:49 – 3:1	1:18 – 1:3
1	Sulfometuron-metyl	1:34 – 34:1	1:11 – 12:1	1:4 – 3:1
1	Sulfosulfuron	1:8 – 135:1	1:2 – 45:1	1:1 – 9:1
1	Tebuthiuron	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Tefuryltrion	1:42 – 27:1	1:14 – 9:1	1:5 – 2:1

1	Tembotrion	1:31 – 37:1	1:10 – 13:1	1:3 – 3:1
1	Tepraloxymid	1:25 – 45:1	1:8 – 15:1	1:3 – 3:1
1	Terbaxil	1:288 – 4:1	1:96 – 2:1	1:36 – 1:4
1	Terbutylazin	1:857 – 2:1	1:285 – 1:3	1:107 – 1:12
1	Terbutryn	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	Thenylclor	1:85 – 14:1	1:28 – 5:1	1:10 – 1:2
1	Thiazopyr	1:384 – 3:1	1:128 – 1:1	1:48 – 1:6
1	Thiencarbazon	1:3 – 336:1	1:1 – 112:1	2:1 – 21:1
1	Thifensulfuron-metyl	1:5 – 224:1	1:1 – 75:1	1:1 – 14:1
1	Tiafenaxil	1:17 – 68:1	1:5 – 23:1	1:2 – 5:1
1	Thiobencarb	1:768 – 2:1	1:256 – 1:2	1:96 – 1:11
1	Tolpyralat	1:31 – 37:1	1:10 – 13:1	1:3 – 3:1
1	Topramzon	1:6 – 168:1	1:2 – 56:1	1:1 – 11:1
1	Tralkoxydim	1:68 – 17:1	1:22 – 6:1	1:8 – 2:1
1	Triafamon	1:2 – 420:1	1:1 – 140:1	2:1 – 27:1
1	Triallat	1:768 – 2:1	1:256 – 1:2	1:96 – 1:11
1	Triasulfuron	1:5 – 224:1	1:1 – 75:1	1:1 – 14:1
1	Triaziflam	1:171 – 7:1	1:57 – 3:1	1:21 – 1:3
1	Tribenuron-metyl	1:3 – 336:1	1:1 – 112:1	2:1 – 21:1
1	Triclopyr	1:192 – 6:1	1:64 – 2:1	1:24 – 1:3
1	Trifloxysulfuron	1:2 – 420:1	1:1 – 140:1	2:1 – 27:1
1	Trifludimoxazin	1:25 – 45:1	1:8 – 15:1	1:3 – 3:1
1	Trifluralin	1:288 – 4:1	1:96 – 2:1	1:36 – 1:4
1	Triflusulfuron-metyl	1:17 – 68:1	1:5 – 23:1	1:2 – 5:1
1	Tritosulfuron	1:13 – 84:1	1:4 – 28:1	1:1 – 6:1

Bảng A2 được cấu trúc giống như Bảng A1 nêu trên chỉ khác là các mục nằm dưới đề mục của cột “Thành phần (a)” được thay thế bằng mục cột Thành phần (a) tương ứng được thể hiện dưới đây. Hợp chất 1 trong cột Thành phần (a) được xác định trong Bảng chỉ số A. Do vậy, ví dụ, trong Bảng A2 các mục nằm dưới đề mục của cột “Thành phần (a)” đều để chỉ “Hợp chất 2” (tức là Hợp chất 2 được xác định trong Bảng chỉ số A), và dòng thứ nhất của các đề mục của cột trong Bảng A2 dưới đây đề cập một cách rõ ràng hỗn hợp chứa Hợp chất 2 với 2,4-D. Các Bảng A3 đến A7 được cấu trúc theo cách tương tự.

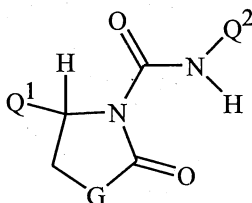
<u>Bảng số</u>	<u>Mục nhập của cột Thành</u>	<u>Bảng số</u>	<u>Mục nhập của cột Thành</u>
	<u>phần (a)</u>		<u>phần (a)</u>
A2	Hợp chất 2	A13	Hợp chất 13
A3	Hợp chất 3	A14	Hợp chất 14
A4	Hợp chất 4	A15	Hợp chất 15
A5	Hợp chất 5	A16	Hợp chất 16
A6	Hợp chất 6	A17	Hợp chất 17
A7	Hợp chất 7	A18	Hợp chất 18
A8	Hợp chất 8	A19	Hợp chất 19
A9	Hợp chất 9	A20	Hợp chất 20
A10	Hợp chất 10	A21	Hợp chất 21
A11	Hợp chất 11	A22	Hợp chất 22
A12	Hợp chất 12	A23	Hợp chất 23

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

Các thử nghiệm dưới đây chứng minh hiệu quả phòng trừ của hợp chất theo sáng chế đối với các loài cỏ cụ thể. Tuy nhiên, việc bảo vệ bằng cách phòng trừ cỏ dại được bằng các hợp chất không bị giới hạn ở các loài này. Xem Bảng chỉ số A về phần mô tả hợp chất. Từ viết tắt “Hợp chất số” đại diện cho “Hợp chất số”, “td” là vạch ba của vạch đôi. Từ viết tắt “Ex.” đại diện cho “Ví dụ” và tiếp theo là số chỉ hợp chất ví dụ được điều chế. Phổ khối được báo cáo với độ chính xác ước lượng trong khoảng $\pm 0,5$ Da dưới dạng phân tử lượng của ion gốc có nhiều đồng vị nhất (M+1) được tạo ra bằng cách bổ sung H^+ (phân tử lượng bằng 1) vào phân tử này, quan sát

được bằng cách sử dụng phương pháp ion hóa bằng hóa học tại áp suất khí quyển (AP⁺).

Bảng chỉ số A



1

Hợp chất số	Q ¹	Q ²	G	m.p. °C
1	Ph(3,4-di-F)	Ph(2-CF ₃)	O	*
2	Ph(3,4-di-F)	Ph(2-Cl)	O	*
3 (Ví dụ 3)	Ph(3,4-di-F)	Ph(2-F)	O	*
4	Ph(4-Cl)	Ph(2-F)	O	*
5	Ph	Ph(2-F)	NH	219–221
6	Ph	Ph	NH	219–221
7	Ph(3,4-di-F)	Ph	NH	232–234
8	Ph(3,4-di-F)	Ph(2-F)	NH	211–215
9	Ph(3,4-di-F)	Ph(2-Cl)	NH	189–193
10	Ph(3,4-di-F)	Ph(2-CF ₃)	NH	130–136
11 (Ví dụ 1)	Ph(3,4-di-F)	Ph(2,3-di-F)	NH	209–213 **
12 (Ví dụ 2)	Ph	Ph(2,3-di-F)	NH	233–235 **
13	Ph(4-CF ₃)	Ph(2-F)	NMe	114–117
14	Ph(4-CF ₃)	Ph(2,3-di-F)	NMe	140–143
15	Ph(4-CF ₃)	Ph(2,4-di-F)	NMe	174–178
16	Ph(3-CF ₃)	Ph(2-F)	NMe	155–159
17	Ph(3-CF ₃)	Ph(2,4-di-F)	NMe	152–156
18	Ph(3-CF ₃)	Ph(2,3-di-F)	NMe	143–147
19	Ph(4-CH ₃)	Ph(2-F)	CH ₂	110,9–112,5
20	Ph(4-CH ₃)	Ph(2-CF ₃)	CH ₂	113–116
21	Ph(4-CH ₃)	Ph(2,3,4-tri-F)	CH ₂	152,3–155,5
22	Ph(4-Cl)	Ph(2,3,4-tri-F)	CH ₂	149,5–152,3
23	Ph(4-Cl)	Ph(2-CF ₃)	CH ₂	113,2–114,5

* Xem Bảng chỉ số B đối với dữ liệu ¹H NMR.

** Xem Ví dụ tổng hợp đối với dữ liệu ^1H NMR.

Bảng chỉ số B

Hợp chất số	Dữ liệu ^1H NMR (dung dịch CDCl_3 ở 500MHz trừ khi quy định khác) ^a
1	δ 1,56 (s, 3H), 4,34 (m, 1H), 4,81 (m, 1H), 5,48 (m, 1H), 7,05–7,15 (m, 1H), 7,18–7,24 (m, 2H), 7,51 (m, 1H), 7,63 (m, 1H), 7,97 (m, 1H), 10,24 (s, 1H).
2	δ 4,35 (m, 1H), 4,81 (m, 1H), 5,49 (m, 1H), 7,04 (td, $J = 7,7, 1,4$ Hz, 1H), 7,12–7,25 (m, 4H), 7,39 (dd, $J = 8,0, 1,4$ Hz, 1H), 8,13 (dd, $J = 8,3, 1,5$ Hz, 1H), 10,44 (s, 1H).
3	δ 4,34 (m, 1H), 4,80 (m, 1H), 5,50 (dd, $J = 8,9, 3,9$ Hz, 1H), 7,01–7,12 (m, 3H), 7,30–7,34 (m, 2H), 7,37–7,42 (m, 2H), 8,04 (m, 1H), 10,16 (br s, 1H).
4	δ 4,34 (m, 1H), 4,80 (m, 1H), 5,49 (m, 1H), 7,03–7,15 (m, 4H), 7,19–7,26 (m, 2H), 8,03 (m, 1H), 10,14 (br s, 1H).

Dữ liệu ^1H NMR ở phần triệu (ppm) giảm từ tetrametylsilan. Việc kết hợp được ký hiệu bằng: vạch đơn (s), vạch đa (m), vạch đôi của vạch đôi (dd), vạch đơn rộng (br s).

Thử nghiệm sinh học

Thử nghiệm A

Hạt của loài thực vật được chọn từ cỏ lồng vược (*Echinochloa crus-galli*), cỏ cua lớn (cỏ cua lớn, *Digitaria sanguinalis*), địa phu tử (Cây vắn vương scoparia), cỏ phấn hương (cỏ phấn hương thường, *Ambrosia elatior*), Cỏ mạch đen (Italian ryegrass, *Lolium multiflorum*), Cỏ cua lớn (large crabgrass *Digitaria sanguinalis*), giant foxtail (*Setaria faberii*), cây bìm bìm hoa tía (*Ipomoea* spp.), Rau dền (*Amaranthus retroflexus*), cây cối xay (*Abutilon theophrasti*), cỏ mạch đen (cỏ mạch đen Ý, *Lolium multiflorum*), cỏ đuôi cáo (cỏ đuôi cáo không lông, *Setaria faberii*), cây lúa mì (*Triticum aestivum*), and cây ngô (*Zea mays*), và rau dền (*Amaranthus retroflexus*), được trồng vào hỗn hợp đất mùn và cát và được xử lý ở giai đoạn trước nảy mầm bằng cách phun trực tiếp vào đất sử dụng các hóa chất thử nghiệm được điều chế trong hỗn hợp dung môi không gây độc thực vật mà có chứa chất hoạt động bề mặt.

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

Bảng A	Hợp chất
1000g ai/ha	3 6 14 19 20 21
Sau nảy mầm	
Cỏ lồng vực	20 0 0 0 0 0
Cỏ đen	- - 0 0 0 0
Ngô	0 0 0 0 0 0
Cỏ cua lớn	80 0 - - - -
Cỏ đuôi cáo khổng lồ	40 0 0 0 0 0
Cây đông sữa	- - 0 0 0 0
Cây vắn vương	- - 0 0 0 0
Cây bìm bìm hoa tía	- 0 - - - -
Rau dền	0 0 0 0 0 0
Cỏ phấn hương	- - 0 0 0 0
Cỏ mạch đen	- - 0 0 0 0
Cây cối xay	0 0 - - - -
Cây lúa mì	0 0 0 0 0 0

Bảng A	Hợp chất
500g ai/ha	1 2 4 5 7 8 9 10 11 12
Sau nảy mầm	

Cỏ lồng vực	0 0 0 0 0 0 0 0 20 90
Cỏ đen	- - - 0 0 0 0 0 0 0
Ngô	0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
Cỏ cua lớn	20 0 0 - - - - - - -
Cỏ đuôi cáo khổng lồ	0 0 0 0 0 0 0 0 40 30 80
Cây đồng sữa	- - - 0 0 0 0 0 0 0
Cây vắn vương	- - - 0 0 0 0 0 0 0
Cây bìm bìm hoa tía	0 0 0 - - - - - - -
Rau dền	0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
Cỏ phần hương	- - - 0 0 0 0 0 0 0 0
Cỏ mạch đen	- - - 0 0 0 0 0 0 0 0
Cây cối xay	0 0 0 - - - - - - -
Cây lúa mì	0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0

Bảng A Hợp chất

125g ai/ha	1 2 4 5 7 8 9 10 11 12 13 15 16 17
------------	------------------------------------

Sau này mầm

Cỏ lồng vực	0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 60 0 0 10 10
Cỏ đen	- - - 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
Ngô	0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
Cỏ cua lớn	0 0 0 - - - - - - - - - -
Cỏ đuôi cáo khổng lồ	0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 80 0 0 10 10
Cây đồng sữa	- - - 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
Cây vắn vương	- - - 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
Cây bìm bìm hoa tía	0 0 0 - - - - - - - - - -
Rau dền	0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
Cỏ phần hương	- - - 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
Cỏ mạch đen	- - - 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
Cây cối xay	0 0 0 - - - - - - - - - -
Cây lúa mì	0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0

Bảng A Hợp chất

125g ai/ha 18 22 23

Sau này mầm

Cỏ lồng vực 30 0 0

Cỏ đen 0 0 0

Ngô 0 0 0

Bảng A Hợp chất

31g ai/ha 13 15 16 17 18 22 23

Sau này mầm

Cỏ lồng vực 0 0 0 0 10 0 0

Cỏ đen 0 0 0 0 0 0 0

Ngô 0 0 0 0 0 0 0

Cỏ cua lớn - - -	Cỏ đuôi cáo không lồ 0 0 0 0 10 0 0
Cỏ đuôi cáo không lồ 50 0 0	Cây đồng sữa 0 0 0 0 0 0 0
Cây đồng sữa 0 0 0	Cây vắn vương 0 0 0 0 0 0 0
Cây vắn vương 0 0 0	Rau dền 0 0 0 0 0 0 0
Cây bìm bìm hoa tía - - -	Cỏ phần hương 0 0 0 0 0 0 0
Rau dền 0 0 0	Cỏ mạch đen 0 0 0 0 0 0 0
Cỏ phần hương 0 0 0	Cây lúa mì 0 0 0 0 0 0 0
Cỏ mạch đen 0 0 0	
Cây cối xay - - -	
Cây lúa mì 0 0 0	

Table A Hợp chất

1000g ai/ha	3 6 14 19 20 21
Trước này mầm	
Cỏ lồng vực	0 0 20 40 0 20
Ngô	0 0 - - - -
Cỏ cua lớn	90 50 - - - -
Cỏ đuôi cáo không lồ	50 0 70 40 20 70
Cây vắn vương	- - 0 20 0 0
Cây bìm bìm hoa tía	0 0 - - - -
Rau dền	0 0 0 70 0 0
Cỏ phần hương	- - 0 0 0 0
Cỏ mạch đen	- - 0 0 0 0
Cây cối xay	0 0 - - - -
Cây lúa mì	0 0 - - - -

Bảng A Hợp chất

500g ai/ha	1 2 4 5 7 8 9 10 11 12
Trước này mầm	
Cỏ lồng vực	0 0 0 0 0 0 0 0 40 50
Ngô	0 0 0 - - - - - -
Cỏ cua lớn	70 80 20 - - - - - -
Cỏ đuôi cáo không lồ	0 30 0 0 0 0 0 0 60 80 90
Cây vắn vương	- - - 0 0 0 0 0 30 20
Cây bìm bìm hoa tía	0 0 0 - - - - - -
Rau dền	0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
Cỏ phần hương	- - - 0 0 0 0 0 0 0

Cỏ mạch đen - - - 0 0 0 0 0 30 0

Cây cối xay 0 0 0 - - - - - -

Cây lúa mì 0 0 0 - - - - - -

Bảng A Hợp chất

125g ai/ha 1 2 4 5 7 8 9 10 11 12 13 15 16 17

Trước này mầm

Cỏ lồng vực 0 0 0 0 0 0 0 0 0 20 0 0 30 50

Ngô 0 0 0 - - - - - - - - -

Cỏ cua lớn 30 40 0 - - - - - - - - -

Cỏ đuôi cáo không lồ 0 0 0 0 0 0 0 20 0 60 0 0 70 80

Cây vắn vương - - - 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 20

Cây bìm bìm hoa tía 0 0 0 - - - - - - - - -

Rau dền 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0

Cỏ phấn hương - - - 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0

Cỏ mạch đen - - - 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0

Cây cối xay 0 0 0 - - - - - - - - -

Cây lúa mì 0 0 0 - - - - - - - - -

Bảng A Hợp chất

125g ai/ha 18 22 23

Trước này mầm

Cỏ lồng vực 70 0 0

Ngô - - -

Cỏ cua lớn - - -

Cỏ đuôi cáo không lồ 80 0 0

Cây vắn vương 0 0 0

Cây bìm bìm hoa tía - - -

Rau dền 0 0 0

Cỏ phấn hương 0 0 0

Cỏ mạch đen 0 0 0

Cây cối xay - - -

Cây lúa mì - - -

Bảng A Hợp chất

31g ai/ha 13 15 16 17 18 22 23

Trước này mầm

Cỏ lồng vực 0 0 0 0 20 0 0

Cỏ đuôi cáo không lồ 0 0 30 50 70 0 0

Cây vắn vương 0 0 0 0 0 0 0

Rau dền 0 0 0 0 0 0 0

Cỏ phấn hương 0 0 0 0 0 0 0

Cỏ mạch đen 0 0 0 0 0 0 0

1. Thử nghiệm B

Các cây trồng trong thử nghiệm ngập nước được chọn từ cây lúa (*Oryza sativa*), cây lách, cây cháo (cỏ cháo hoa nhỏ, *Cyperus difformis*), cỏ lười vệt (*Heteranthera limosa*), và cỏ lồng vực (*Echinochloa crus-galli*) được để sinh trưởng đến giai đoạn 2 lá để thử nghiệm. Vào thời điểm xử lý, các chậu thử nghiệm được cho ngập đến 3 cm trên bề mặt của đất, được xử lý bằng cách phun các hợp chất thử nghiệm trực tiếp lên nước ngập, và sau đó duy trì ở độ sâu nước đó trong quá trình thử nghiệm. Cây xử lý và cây kiểm chứng được duy trì trong nhà kính trong 13 đến 15 ngày, sau thời gian đó tất cả các loài được so sánh với mẫu kiểm chứng và được đánh giá bằng trực quan. Các đánh giá mức đáp ứng của cây trồng, được tóm tắt trong Bảng B, trên cơ sở thang đo từ 0 đến 100 trong đó 0 là không có hiệu quả và 100 là phòng trừ hoàn toàn. Nét (–) nghĩa là không có kết quả thử nghiệm.

Bảng B Hợp chất

1000g ai/ha 5 7 12

Ngập nước

Cỏ lồng vực 0 0 0

Cỏ lười vệt 90 0 90

Cây lúa 0 0 0

Cỏ cháo 0 0 0

Bảng B Hợp chất

500g ai/ha 8 9 10 11

Ngập nước

Cỏ lồng vực 0 0 0 0

Cỏ lười vệt 40 0 0 60

Cây lúa 0 0 0 0

Cỏ cháo 0 0 0 0

Bảng B Hợp chất

250g ai/ha 1 2 4 13 15 16 17 18 22 23

Ngập nước

Cỏ lồng vực 0 0 0 10 10 0 0 0 0 0

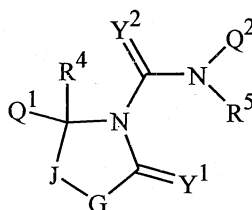
Cỏ lười vệt 0 0 0 70 60 0 40 65 0 0

Cây lúa 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0

Cỏ cháo 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0

Yêu cầu bảo hộ

1. Hợp chất được chọn từ Công thức 1, *N*-oxit và muối của nó,



1

trong đó:

Q^1 là vòng phenyl tùy ý được thế bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R^6 ; hoặc vòng dị vòng có 5 đến 6 cạnh, mỗi vòng chứa các thành phần của vòng được chọn từ nguyên tử cacbon và 1 đến 4 nguyên tử khác loại độc lập được chọn từ tối đa 2 nguyên tử O, tối đa 2 nguyên tử S và tối đa 4 nguyên tử N, mỗi vòng tùy ý được thế bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R^6 trên các thành phần của vòng chứa nguyên tử cacbon và được chọn từ R^8 trên các thành phần của vòng chứa nguyên tử nito;

Q^2 là vòng phenyl tùy ý được thế bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R^9 ; hoặc vòng dị vòng có 5 đến 6 cạnh chứa các thành phần của vòng được chọn từ nguyên tử cacbon và 1 đến 4 nguyên tử khác loại độc lập được chọn từ tối đa 2 nguyên tử O, tối đa 2 nguyên tử S và tối đa 4 nguyên tử N, trong đó, tối đa 2 thành phần của vòng chứa cacbon độc lập được chọn từ $C(=O)$ và $C(=S)$, và thành phần của vòng chứa lưu huỳnh độc lập được chọn từ $S(=O)_u(=NR^7)_v$, mỗi vòng tùy ý được thế bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R^9 trên các thành phần của vòng chứa nguyên tử cacbon và được chọn từ R^{10} trên các thành phần của vòng chứa nguyên tử nito;

J là $-\text{CR}^2\text{R}^3-$;

G là $-\text{O}-$, $-\text{N}(\text{R}^1)-$ hoặc $-\text{C}(\text{R}^{18})(\text{R}^{19})-$

Y^1 là O hoặc S;

R^1 là H, C_1-C_6 alkyl;

R^2 và R^3 mỗi độc lập là H hoặc C_1-C_4 alkyl;

R^4 là H, Cl, Br hoặc CH_3 ;

R^5 là H, C_1-C_6 alkyl, C_2-C_8 alkoxyalkyl, C_2-C_8 alkylthioalkyl, C_2-C_8 alkylcarbonyl, C_4-C_{10} xycloalkylcarbonyl hoặc C_2-C_8 alkoxycarbonyl;

mỗi R^6 và R^9 độc lập là halogen, C_1-C_8 alkyl, C_1-C_8 haloalkyl, C_2-C_8 alkoxyalkyl, C_3-C_8 alkoxyalkoxyalkyl, C_4-C_{10} xycloalkylalkyl, C_5-C_{12} alkylxycloalkylalkyl, C_3-C_8 xycloalkyl, C_3-C_8 haloalkyl, C_6-C_{12} xycloalkylxycloalkyl, C_3-C_8 haloalkoxyalkoxy, C_2-C_8 alkoxyalkoxy, C_4-C_{10} xycloalkoxyalkyl, C_2-C_8 alkylcarbonyl, C_2-C_8 haloalkylcarbonyl, C_4-C_{10} xycloalkylcarbonyl, C_2-C_8 alkoxycarbonyl, C_4-C_{10} xycloalkoxycarbonyl, C_5-C_{12} xycloalkylalkoxycarbonyl, $-\text{C}(=\text{O})\text{NH}_2$, C_1-C_8 alkoxy, C_2-C_8 alkoxyalkoxy, C_2-C_8 haloalkenyloxy, C_3-C_8 xycloalkoxy, C_3-C_8 haloalkoxy, C_4-C_{10} xycloalkylalkoxy, C_3-C_{10} alkylcarbonylalkoxy hoặc C_2-C_8 haloalkylcarbonyloxy;

R^7 độc lập là H hoặc xyano;

mỗi R^8 và R^{10} độc lập là C_1-C_3 alkyl, C_3-C_6 xycloalkyl hoặc C_2-C_3 alkoxy carbonyl; và

mỗi u và v độc lập là 0, 1 hoặc 2 trong mỗi trường hợp của $S(=O)_u(=NR^7)_v$, với điều kiện là tổng của u và v là 0, 1 hoặc 2;

R^{18} và R^{19} độc lập là H hoặc CH_3 ,

với điều kiện khi Q^1 là vòng phenyl được thế bằng R^6 ở vị trí 4, G là $-C(R^{18})(R^{19})-$, Y^1 là O, Y^2 là O, J là $-CR^2R^3-$, R^2 là H, R^3 là H, R^4 là H, R^5 là H, R^6 là Cl,

R^{18} là H và R^{19} là H, thì Q^2 không phải là 2-flophenyl; và với điều kiện hợp chất có công thức 1 không phải là *trans*-*N*-(3-clophenyl)-5-(1-metyletyl)-2-oxo-4-phenyl-3-oxazolidincarboxamit (CA# 158323-70-7), 2-(5-metyl-1,3,4-oxadiazol-2-yl)-5-oxo-*N*-phenyl-1-pyrolidincarboxamit (CA# 182815-19-6), *N*-(4-clophenyl)-2-(5-metyl-1,3,4-oxadiazol-2-yl)-5-oxo-1-pyrolidincarboxamit (CA# 182815-21-0), *N*-(3,4-diclophenyl)-2-(5-metyl-1,3,4-oxadiazol-2-yl)-5-oxo-1-pyrolidincarboxamit (CA# 182815-22-1), hoặc 2-(5-metyl-1,3,4-oxadiazol-2-yl)-5-oxo-*N*-[3-(triflometyl)phenyl]-1-pyrolidincarboxamit (CA# 182815-23-2).

2. Hợp chất theo điểm 1, trong đó:

Q^1 là vòng phenyl tùy ý được thế bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R^6 ;

Q^2 là vòng phenyl tùy ý được thế bằng tối đa 4 phần tử thế độc lập được chọn từ R^9 ;

G là $-N(R^1)-$;

Y^1 là O;

Y^2 là O;

R^1 là H hoặc CH_3 ;

R^2 và R^3 mỗi độc lập là H hoặc CH_3 ;

R^4 là H, Br hoặc CH_3 ;

R^5 là H, C_1-C_6 alkyl, C_2-C_8 alkoxyalkyl hoặc C_2-C_8 alkylcarbonyl; và

mỗi R^6 và R^9 độc lập là halogen, C_1-C_8 alkyl, C_1-C_8 haloalkyl, C_2-C_8 alkoxyalkyl, C_4-C_{10} xycloalkylalkyl, C_5-C_{12} alkylxycloalkylalkyl, C_3-C_8 xycloalkyl, C_3-C_8 haloxycloalkyl, C_2-C_8 haloalkoxyalkoxy hoặc C_2-C_8 alkoxyalkoxy.

3. Hợp chất theo điểm 2, trong đó:

Q^1 là vòng phenyl tùy ý được thế bằng tối đa 3 phần tử thế độc lập được chọn từ R^6 ;

Q^2 là vòng phenyl tùy ý được thế bằng tối đa 3 phần tử thế độc lập được chọn từ R^9 ;

R^2 và R^3 mỗi độc lập là H;

R^4 là H hoặc Br; và

R^5 là H hoặc C_1-C_6 ; và

mỗi R⁶ và R⁹ độc lập là halogen, C₁–C₈ alkyl hoặc C₃–C₈ xycloalkyl.

4. Hợp chất theo điểm 3, trong đó:

Q¹ là vòng phenyl tùy ý được thế bằng tối đa 2 phần tử thế độc lập được chọn từ R⁶;

Q² là vòng phenyl tùy ý được thế bằng tối đa 2 phần tử thế độc lập được chọn từ R⁹;

R⁴ là H;

R⁵ là H; và

mỗi R⁶ và R⁹ độc lập là halogen.

5. Hợp chất theo điểm 4, trong đó hợp chất này được chọn từ nhóm bao gồm 4-(3,4-diflophenyl)-*N*-(2-flophenyl)-2-oxo-3-oxazolidincarboxamit; và *N*-(2,3-diflophenyl)-2-oxo-5-phenyl-1-imidazolidincarboxamit.

6. Chế phẩm diệt cỏ chứa hợp chất theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 5 và ít nhất một thành phần được chọn từ nhóm bao gồm chất hoạt động bề mặt, chất pha loãng dạng rắn và chất pha loãng dạng lỏng.

7. Chế phẩm diệt cỏ chứa hợp chất theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 5, ít nhất một hoạt chất bổ sung được chọn từ nhóm bao gồm thuốc diệt cỏ khác và chất an toàn diệt cỏ (safener), và ít nhất một thành phần được chọn từ nhóm bao gồm chất hoạt động bề mặt, chất pha loãng dạng rắn và chất pha loãng dạng lỏng

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

9. Phương pháp phòng trừ sự sinh trưởng của thực vật không mong muốn bao gồm việc cho thực vật hoặc môi trường của nó tiếp xúc với lượng hữu hiệu có tác dụng diệt cỏ của hợp chất theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 5.