



(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) 
1-0020050

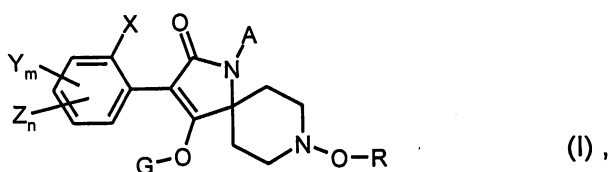
(51)⁷ **A01N 43/90, C07D 211/94, 471/10**

(13) **B**

- (21) 1-2011-01816 (22) 09.12.2009
(86) PCT/EP2009/066710 09.12.2009 (87) WO2010/066780 17.06.2010
(30) 0822748.0 12.12.2008 GB
0905237.4 26.03.2009 GB
(45) 26.11.2018 368 (43) 25.10.2011 283
(73) 1. SYNGENTA PARTICIPATIONS AG (CH)
Schwarzwaldallee 215, CH-4058 Basel, Switzerland
2. SYNGENTA LIMITED (GB)
European Regional Centre, Priestley Road, Surrey Research Park, Guildford Surrey
GU2 7YH, United Kingdom
(72) MUEHLEBACH, Michel (CH), PITTERNA, Thomas (AT), CASSAYRE, Jérôme
Yves (FR), EDMUNDS, Andrew (GB), CORSI, Camilla (IT), EL QACEMI,
Myriem (FR), HALL, Roger Graham (GB), JEANGUENAT, André (CH),
STOLLER, André (CH), GODFREY, Christopher, Richard (GB), SCHAEZTER,
Jurgen Harry (DE), LOISELEUR, Olivier (CH), MAIENFISCH, Peter (CH),
CARTER, Neil Brian (GB)
(74) Công ty TNHH Ban Ca (BANCA)

(54) **N-OXYPIPERIDIN DỊ VÒNG XOẮN, QUY TRÌNH ĐIỀU CHẾ HỢP CHẤT
NÀY, CHẾ PHẨM DIỆT SINH VẬT GÂY HẠI CHỨA HỢP CHẤT NÀY VÀ
PHƯƠNG PHÁP DIỆT VÀ PHÒNG TRỪ SINH VẬT GÂY HẠI**

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



trong đó phân tử thế là như được xác định theo điểm 1, hữu ích làm chất diệt sinh vật gây hại. Ngoài ra, sáng chế còn đề cập đến quy trình điều chế hợp chất này, chế phẩm diệt sinh vật gây hại chứa hợp chất này, và phương pháp diệt và phòng trừ sinh vật gây hại.

Lĩnh vực kỹ thuật được đề cập

Sáng chế đề cập đến dẫn xuất pyrrolidin dion dị vòng xoắn được thế N-alkyl amit, quy trình điều chế chúng, chế phẩm diệt sinh vật gây hại, cụ thể là chế phẩm diệt côn trùng, ve bét, nhuyễn thể và giun tròn chứa hợp chất này và phương pháp diệt trừ sinh vật gây hại như côn trùng, ve bét, nhuyễn thể và giun tròn gây hại có sử dụng chế phẩm diệt sinh vật gây hại

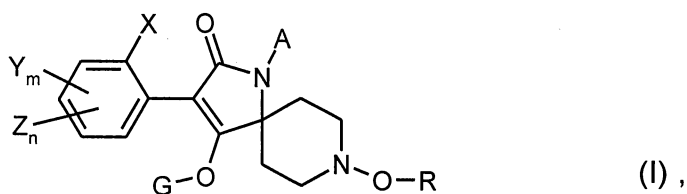
Tình trạng kỹ thuật của sáng chế

Hợp chất dị vòng xoắn pyrrolidin dion được bộc lộ, ví dụ, trong các tài liệu sáng chế US 6555567, US 6479489, US 6774133, EP 596298, WO 98/05638 và WO 99/48869. Hơn nữa, hợp chất pyrrolidin dion dị vòng xoắn là đã biết, ví dụ, từ WO 09/049851.

Đáng ngạc nhiên, người ta phát hiện ra rằng một số hợp chất dị vòng xoắn pyrrolidin dion được thế N-alkyl amit có đặc tính diệt côn trùng tốt.

Bản chất kỹ thuật của sáng chế

Do đó, sáng chế đề xuất hợp chất có công thức I



trong đó

X, Y và Z độc lập với nhau là C₁₋₄alkyl, C₃₋₆cycloalkyl, C₁₋₄haloalkyl, C₁₋₄alkoxy, halogen, phenyl hoặc phenyl được thế bằng C₁₋₄alkyl, C₁₋₄haloalkyl, halogen hoặc xyano;

m và n độc lập với nhau là 0, 1, 2 hoặc 3 và m+n là 0, 1, 2 hoặc 3;

G là hydro, kim loại, amoni, sulfoni hoặc nhóm an;

R là hydro, C₁₋₆alkyl, C₁₋₆haloalkyl, C₁₋₆xyanoalkyl, benzyl, C₁₋₄alkoxy(C₁₋₄)alkyl, C₁₋₄alkoxy(C₁₋₄)alkoxy(C₁₋₄)alkyl hoặc nhóm được chọn từ G; và

A là C₁₋₆alkyl, C₁₋₆haloalkyl, C₃₋₆xycloalkyl, C₃₋₆xycloalkyl(C₁₋₄)alkyl, hoặc C₃₋₆xycloalkyl(C₁₋₄)alkyl trong đó gốc xyloalkyl nhóm metylen được thế bằng O, S hoặc NR₀, trong đó R₀ là C₁₋₆alkyl hoặc C₁₋₆alkoxy, hoặc A là C₂₋₆alkenyl, C₂₋₆haloalkenyl, C₃₋₆alkynyl, C₁₋₆xyanoalkyl, benzyl, C₁₋₄alkoxy(C₁₋₄)alkyl, C₁₋₄alkoxy(C₁₋₄)alkoxy(C₁₋₄)alkyl, oxetanyl, tetrahydrofuranyl, tetrahydropyranyl, C₁₋₆alkylcarbonyl, C₁₋₆alkoxycarbonyl, C₃₋₆xyloalkylcarbonyl, N-di(C₁₋₆alkyl)carbamoyl, benzoyl, C₁₋₆alkylsulfonyl, phenylsulfonyl, C₁₋₄alkylthio(C₁₋₄)alkyl, C₁₋₄alkylsulfinyl(C₁₋₄)alkyl hoặc C₁₋₄alkylsulfonyl(C₁₋₄)alkyl;

hoặc muối khả dụng nông hoá hoặc oxit nitơ của chúng.

Trong các hợp chất có công thức I, trong mỗi gốc alkyl độc lập hoặc là một phần của nhóm lớn hơn là mạch thẳng hoặc mạch nhánh và là, ví dụ, metyl, etyl, n-propyl, n-butyl, iso-propyl, sec-butyl, iso-butyl, tert-butyl, n-pentyl, iso-pentyl và n-hexyl.

Nhóm alkoxy tốt hơn là có chiều dài chuỗi được ưu tiên từ 1 đến 4 nguyên tử cacbon. Alkoxy là, ví dụ, metoxy, etoxy, propoxy, i-propoxy, n-butoxy, isobutoxy, sec-butoxy và tert-butoxy.

Các nhóm này có thể là một phần của nhóm lớn hơn như alkoxyalkyl và alkoxyalkoxyalkyl. Nhóm alkoxyalkyl tốt hơn là có chiều dài chuỗi từ 1 đến 4 nguyên tử cacbon. Alkoxyalkyl là, ví dụ, metoxymetyl, metoxyetyl, etoxymetyl, etoxyetyl, n-propoxymetyl, n-propoxyetyl hoặc isopropoxymetyl.

Halogen nói chung là flo, clo, brom hoặc iot. Điều này cũng áp dụng với halogen kết hợp theo nhiều nghĩa khác tương ứng, như haloalkyl.

Nhóm haloalkyl tốt hơn là có chiều dài chuỗi từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon. Haloalkyl là, ví dụ, flometyl, diflometyl, triflometyl, clometyl, diclometyl, triclometyl, 2,2,2-trifloetyl, 2-floetyl, 2-cloetyl, pentaflloetyl, 1,1-diflo-2,2,2-tricloetyl, 2,2,3,3-tetraflloetyl và 2,2,2-tricloetyl; tốt hơn là triclometyl, diflocloetyl, diflometyl, triflometyl và dicloflometyl.

Nhóm xycloalkyl tốt hơn là có từ 3 đến 6 nguyên tử cacbon vòng, ví dụ xyclopropyl, xyclobutyl, xyclopentyl và xyclohexyl. Trong các vòng này, nhóm metylen có thể được thay thế bằng nguyên tử oxy và/hoặc lưu huỳnh, nguyên tử này dẫn đến, ví dụ, oxetanyl, tetrahydrofuranyl, tetrahydropyranyl, furanyl, tetrahydrothiofuranyl và vòng tetrahydro-thiopyranyl.

Phenyl, cũng là một phần của phần tử thế như benzyl, có thể được thế, tốt hơn là bằng các nhóm alkyl, haloalkyl hoặc halogen. Trong trường hợp này, các phần tử thế có thể ở vị trí ortho, meta và/hoặc para. Vị trí nhóm thế được ưu tiên là các vị trí ortho và para với điểm gắn kết của vòng.

Nhóm ản G được chọn để cho phép sự loại bỏ của nó bằng một hoặc sự kết hợp của các quy trình sinh học, hoá học hoặc vật lý để tạo ra hợp chất có công thức I trong đó G là hydro trước đó, trong khi hoặc áp dụng sau khi áp dụng đối với vùng hoặc thực vật được xử lý. Ví dụ các quy trình này bao gồm phân cắt enzym, thủy phân hoá học và quang phân. Các hợp chất mang nhóm này có thể tạo ra một số ưu điểm, như cải thiện sự thấm qua của màng ngoài cây trồng được xử lý, tăng sự dung nạp của cây trồng, tăng khả năng tương thích hoặc ổn định trong hỗn hợp chế phẩm chứa thuốc diệt cỏ, chất bảo vệ thuốc diệt cỏ, chất điều hoà sự sinh trưởng thực vật, thuốc diệt nấm, hoặc diệt côn trùng, hoặc giảm ngấm chiết trong đất.

Nhóm ản G tốt hơn là được chọn từ các nhóm C_1 - C_8 alkyl, C_2 - C_8 haloalkyl, phenyl C_1 - C_8 alkyl (trong đó phenyl có thể tùy ý được thế bằng C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 haloalkyl, C_1 - C_3 alkoxy, C_1 - C_3 haloalkoxy, C_1 - C_3 alkylthio, C_1 - C_3 alkylsulfinyl, C_1 - C_3 alkylsulfonyl, halogen, xyano hoặc bằng nitro), heteroaryl C_1 - C_8 alkyl (trong đó heteroaryl có thể tùy ý được thế bằng C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 haloalkyl, C_1 - C_3 alkoxy, C_1 - C_3 haloalkoxy, C_1 - C_3 alkylthio, C_1 - C_3 alkylsulfinyl, C_1 - C_3 alkylsulfonyl, halogen, xyano hoặc bằng nitro), C_3 - C_8 alkenyl, C_3 - C_8 haloalkenyl, C_3 - C_8 alkynyl, $C(X^a)$ - R^a , $C(X^b)$ - X^c - R^b , $C(X^d)$ - $N(R^c)$ - R^d , $-SO_2$ - R^e , $-P(X^e)(R^f)$ - R^g hoặc CH_2 - X^f - R^h trong đó X^a , X^b , X^c , X^d , X^e và X^f độc lập với nhau là oxy hoặc lưu huỳnh;

R^a là H, C_1 - C_{18} alkyl, C_2 - C_{18} alkenyl, C_2 - C_{18} alkynyl, C_1 - C_{10} haloalkyl, C_1 - C_{10} xyanoalkyl, C_1 - C_{10} nitroalkyl, C_1 - C_{10} aminalkyl, C_1 - C_5 alkylamin C_1 - C_5 alkyl, C_2 - C_8 dialkylamin C_1 - C_5 alkyl, C_3 - C_7 xycloalkyl C_1 - C_5 alkyl, C_1 - C_5 alkoxy C_1 - C_5 alkyl, C_3 - C_5 alkenyloxy C_1 - C_5 alkyl, C_3 - C_5 alkynyl C_1 - C_5 oxyalkyl, C_1 - C_5 alkylthio C_1 - C_5 alkyl, C_1 -

C₅alkylsulfinylC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylsulfonylC₁-C₅alkyl, C₂-C₈alkylidenaminxyC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylcarbonylC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkoxycarbonylC₁-C₅alkyl, amincarbonylC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylamincarbonylC₁-C₅alkyl, C₂-C₈dialkylamincarbonylC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylcarbonylaminC₁-C₅alkyl, *N*-C₁-C₅alkylcarbonyl-*N*-C₁-C₅alkylaminC₁-C₅alkyl, C₃-C₆trialkylsilylC₁-C₅alkyl, phenylC₁-C₅alkyl (trong đó phenyl có thể tùy ý được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano, hoặc bằng nitro), heteroarylC₁-C₅alkyl, (trong đó heteroaryl có thể tùy ý được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano, hoặc bằng nitro), C₂-C₅haloalkenyl, C₃-C₈xycloalkyl, phenyl hoặc phenyl được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro, heteroaryl hoặc heteroaryl được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro,

R^b là C₁-C₁₈alkyl, C₃-C₁₈alkenyl, C₃-C₁₈alkynyl, C₂-C₁₀haloalkyl, C₁-C₁₀xyanoalkyl, C₁-C₁₀nitroalkyl, C₂-C₁₀aminalkyl, C₁-C₅alkylaminC₁-C₅alkyl, C₂-C₈dialkylaminC₁-C₅alkyl, C₃-C₇xycloalkylC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkoxyC₁-C₅alkyl, C₃-C₅alkenyloxyC₁-C₅alkyl, C₃-C₅alkynyloxyC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylthioC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylsulfinylC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylsulfonylC₁-C₅alkyl, C₂-C₈alkylidenaminxyC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylcarbonylC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkoxycarbonylC₁-C₅alkyl, amincarbonylC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylamincarbonylC₁-C₅alkyl, C₂-C₈dialkylamincarbonylC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylcarbonylaminC₁-C₅alkyl, *N*-C₁-C₅alkylcarbonyl-*N*-C₁-C₅alkylaminC₁-C₅alkyl, C₃-C₆trialkylsilylC₁-C₅alkyl, phenylC₁-C₅alkyl (trong đó phenyl có thể tùy ý được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano, hoặc bằng nitro), heteroarylC₁-C₅alkyl, (trong đó heteroaryl có thể tùy ý được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, C₁-C₃alkyl-thio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano, hoặc bằng nitro), C₃-C₅haloalkenyl, C₃-C₈xycloalkyl, phenyl hoặc phenyl được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro, heteroaryl hoặc heteroaryl được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro,

R^c và R^d độc lập với nhau là hydro, C_1 - C_{10} alkyl, C_3 - C_{10} alkenyl, C_3 - C_{10} alkynyl, C_2 - C_{10} haloalkyl, C_1 - C_{10} xyanoalkyl, C_1 - C_{10} nitroalkyl, C_1 - C_{10} aminalkyl, C_1 - C_5 alkylamin C_1 - C_5 alkyl, C_2 - C_8 dialkylamin C_1 - C_5 alkyl, C_3 - C_7 xycloalkyl C_1 - C_5 alkyl, C_1 - C_5 alkoxy C_1 - C_5 alkyl, C_3 - C_5 alkenyloxy C_1 - C_5 alkyl, C_3 - C_5 alkynyloxy C_1 - C_5 alkyl, C_1 - C_5 alkylthio C_1 - C_5 alkyl, C_1 - C_5 alkylsulfinyl C_1 - C_5 alkyl, C_1 - C_5 alkylsulfonyl C_1 - C_5 alkyl, C_2 - C_8 alkylidenaminxy C_1 - C_5 alkyl, C_1 - C_5 alkylcarbonyl C_1 - C_5 alkyl, C_1 - C_5 alkoxycarbonyl C_1 - C_5 alkyl, amincarbonyl C_1 - C_5 alkyl, C_1 - C_5 alkylamincarbonyl C_1 - C_5 alkyl, C_2 - C_8 dialkylamincarbonyl C_1 - C_5 alkyl, C_1 - C_5 alkylcarbonylamin C_1 - C_5 alkyl, N - C_1 - C_5 alkylcarbonyl- N - C_2 - C_5 alkylaminalkyl, C_3 - C_6 trialkylsilyl C_1 - C_5 alkyl, phenyl C_1 - C_5 alkyl (trong đó phenyl có thể tùy ý được thế bằng C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 haloalkyl, C_1 - C_3 alkoxy, C_1 - C_3 haloalkoxy, C_1 - C_3 alkylthio, C_1 - C_3 alkylsulfinyl, C_1 - C_3 alkylsulfonyl, halogen, xyano, hoặc bằng nitro), heteroaryl C_1 - C_5 alkyl, (trong đó heteroaryl có thể tùy ý được thế bằng C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 haloalkyl, C_1 - C_3 alkoxy, C_1 - C_3 haloalkoxy, C_1 - C_3 alkylthio, C_1 - C_3 alkylsulfinyl, C_1 - C_3 alkylsulfonyl, halogen, xyano, hoặc bằng nitro), C_2 - C_5 haloalkenyl, C_3 - C_8 xycloalkyl, phenyl hoặc phenyl được thế bằng C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 haloalkyl, C_1 - C_3 alkoxy, C_1 - C_3 haloalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro, heteroaryl hoặc heteroaryl được thế bằng C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 haloalkyl, C_1 - C_3 alkoxy, C_1 - C_3 haloalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro, heteroarylamin hoặc heteroarylamin được thế bằng C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 haloalkyl, C_1 - C_3 alkoxy, C_1 - C_3 haloalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro, diheteroarylamin hoặc diheteroarylamin được thế bằng C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 haloalkyl, C_1 - C_3 alkoxy, C_1 - C_3 haloalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro, phenylamin hoặc phenylamin được thế bằng C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 haloalkyl, C_1 - C_3 alkoxy, C_1 - C_3 haloalkoxy, halogen, xyano hoặc bằng nitro, diphenylamin hoặc diphenylamin được thế bằng C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 haloalkyl, C_1 - C_3 alkoxy, C_1 - C_3 haloalkoxy, halogen, xyano hoặc bằng nitro hoặc C_3 - C_7 xycloalkylamin, di- C_3 - C_7 xycloalkylamin hoặc C_3 - C_7 xycloalkoxy hoặc R^c và R^d có thể cùng kết hợp tạo thành vòng có từ 3 đến 7 cạnh, chứa tùy ý một nguyên tử khác loại được chọn từ O hoặc S,

R^e là C_1 - C_{10} alkyl, C_2 - C_{10} alkenyl, C_2 - C_{10} alkynyl, C_1 - C_{10} haloalkyl, C_1 - C_{10} xyanoalkyl, C_1 - C_{10} nitroalkyl, C_1 - C_{10} aminalkyl, C_1 - C_5 alkylamin C_1 - C_5 alkyl, C_2 - C_8 dialkylamin C_1 - C_5 alkyl, C_3 - C_7 xycloalkyl C_1 - C_5 alkyl, C_1 - C_5 alkoxy C_1 - C_5 alkyl, C_3 - C_5 alkenyloxy C_1 - C_5 alkyl, C_3 - C_5 alkynyloxy C_1 - C_5 alkyl, C_1 - C_5 alkylthio C_1 - C_5 alkyl, C_1 - C_5 alkylsulfinyl C_1 - C_5 alkyl, C_1 - C_5 alkylsulfonyl C_1 - C_5 alkyl, C_2 - C_8 alkylidenaminxy C_1 -

C_3 alkyl, C_1 - C_5 alkylcarbonyl C_1 - C_5 alkyl, C_1 - C_5 alkoxycarbonyl C_1 - C_5 alkyl, aminocarbonyl C_1 - C_5 alkyl, C_1 - C_5 alkylaminocarbonyl C_1 - C_5 alkyl, C_2 - C_8 dialkylaminocarbonyl C_1 - C_5 alkyl, C_1 - C_5 alkylcarbonylamin C_1 - C_5 alkyl, N - C_1 - C_5 alkylcarbonyl- N - C_1 - C_5 alkylamin C_1 - C_5 alkyl, C_3 - C_6 trialkylsilyl C_1 - C_5 alkyl, phenyl C_1 - C_5 alkyl (trong đó phenyl có thể tùy ý được thế bằng C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 haloalkyl, C_1 - C_3 alkoxy, C_1 - C_3 haloalkoxy, C_1 - C_3 alkylthio, C_1 - C_3 alkylsulfinyl, C_1 - C_3 alkylsulfonyl, halogen, xyano, hoặc bằng nitro), heteroaryl C_1 - C_5 alkyl (trong đó heteroaryl có thể tùy ý được thế bằng C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 haloalkyl, C_1 - C_3 alkoxy, C_1 - C_3 haloalkoxy, C_1 - C_3 alkylthio, C_1 - C_3 alkylsulfinyl, C_1 - C_3 alkylsulfonyl, halogen, xyano, hoặc bằng nitro), C_2 - C_5 haloalkenyl, C_3 - C_8 xycloalkyl, phenyl hoặc phenyl được thế bằng C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 haloalkyl, C_1 - C_3 alkoxy, C_1 - C_3 haloalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro, heteroaryl hoặc heteroaryl được thế bằng C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 haloalkyl, C_1 - C_3 alkoxy, C_1 - C_3 haloalkoxy, halogen, xyano hoặc bằng nitro, heteroarylamin hoặc heteroarylamin được thế bằng C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 haloalkyl, C_1 - C_3 alkoxy, C_1 - C_3 haloalkoxy, halogen, xyano hoặc bằng nitro, diheteroarylamin hoặc diheteroarylamin được thế bằng C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 haloalkyl, C_1 - C_3 alkoxy, C_1 - C_3 haloalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro, phenylamin hoặc phenylamin được thế bằng C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 haloalkyl, C_1 - C_3 alkoxy, C_1 - C_3 haloalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro, diphenylamin, hoặc diphenylamin được thế bằng C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 haloalkyl, C_1 - C_3 alkoxy, C_1 - C_3 haloalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro, hoặc C_3 - C_7 xycloalkylamin, di C_3 - C_7 xycloalkylamin hoặc C_3 - C_7 xycloalkoxy, C_1 - C_{10} alkoxy, C_1 - C_{10} haloalkoxy, C_1 - C_5 alkylamin hoặc C_2 - C_8 dialkylamin,

R^f và R^g độc lập với nhau là C_1 - C_{10} alkyl, C_2 - C_{10} alkenyl, C_2 - C_{10} alkynyl, C_1 - C_{10} alkoxy, C_1 - C_{10} haloalkyl, C_1 - C_{10} xyanoalkyl, C_1 - C_{10} nitroalkyl, C_1 - C_{10} aminalkyl, C_1 - C_5 alkylamin C_1 - C_5 alkyl, C_2 - C_8 dialkylamin C_1 - C_5 alkyl, C_3 - C_7 xycloalkyl C_1 - C_5 alkyl, C_1 - C_5 alkoxy C_1 - C_5 alkyl, C_3 - C_5 alkenyloxy C_1 - C_5 alkyl, C_3 - C_5 alkynyloxy C_1 - C_5 alkyl, C_1 - C_5 alkylthio C_1 - C_5 alkyl, C_1 - C_5 alkylsulfinyl C_1 - C_5 alkyl, C_1 - C_5 alkylsulfonyl C_1 - C_5 alkyl, C_2 - C_8 alkylidenaminxy C_1 - C_5 alkyl, C_1 - C_5 alkylcarbonyl C_1 - C_5 alkyl, C_1 - C_5 alkoxycarbonyl C_1 - C_5 alkyl, aminocarbonyl C_1 - C_5 alkyl, C_1 - C_5 alkylaminocarbonyl C_1 - C_5 alkyl, C_2 - C_8 dialkylaminocarbonyl C_1 - C_5 alkyl, C_1 - C_5 alkylcarbonylamin C_1 - C_5 alkyl, N - C_1 - C_5 alkylcarbonyl- N - C_2 - C_5 alkylaminalkyl, C_3 - C_6 trialkylsilyl C_1 - C_5 alkyl, phenyl C_1 - C_5 alkyl (trong đó phenyl có thể tùy ý được thế bằng C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 haloalkyl, C_1 -

C₃alkoxyl, C₁-C₃haloalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano, hoặc bằng nitro), heteroarylC₁-C₅alkyl (trong đó heteroaryl có thể tùy ý được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano, hoặc bằng nitro), C₂-C₅haloalkenyl, C₃-C₈xycloalkyl, phenyl hoặc phenyl được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro, heteroaryl hoặc heteroaryl được thế bằng C₁-C₃ alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, halogen, xyano hoặc bằng nitro, heteroarylamin hoặc heteroarylamin được thế bằng C₁-C₃ alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, halogen, xyano hoặc bằng nitro, diheteroarylamin hoặc diheteroarylamin được thế bằng C₁-C₃ alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro, phenylamin hoặc phenylamin được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro, diphenylamin, hoặc diphenylamin được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro, hoặc C₃-C₇xycloalkylamin, diC₃-C₇xycloalkylamin hoặc C₃-C₇xycloalkoxy, C₁-C₁₀haloalkoxy, C₁-C₅alkylamin hoặc C₂-C₈dialkylamin, benzyloxy hoặc phenoxy, trong đó nhóm benzyl và phenyl có thể được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro, và

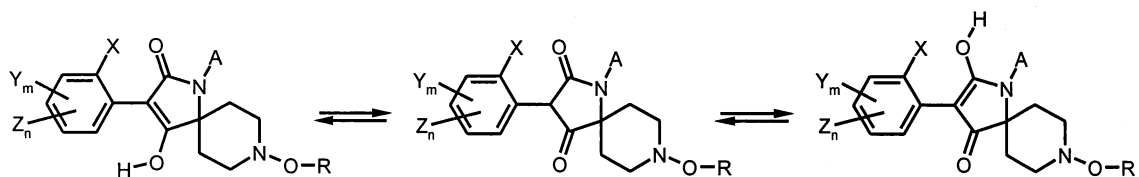
R^h là C₁-C₁₀alkyl, C₃-C₁₀alkenyl, C₃-C₁₀alkynyl, C₁-C₁₀haloalkyl, C₁-C₁₀xyanoalkyl, C₁-C₁₀nitroalkyl, C₂-C₁₀aminalkyl, C₁-C₅alkylaminC₁-C₅alkyl, C₂-C₈dialkylaminC₁-C₅alkyl, C₃-C₇xycloalkylC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkoxyC₁-C₅alkyl, C₃-C₅alkenyloxyC₁-C₅alkyl, C₃-C₅alkynyloxyC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylthioC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylsulfinylC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylsulfonylC₁-C₅alkyl, C₂-C₈alkylidenaminxyC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylcarbonylC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkoxycarbonylC₁-C₅alkyl, amincarbonylC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylamincarbonylC₁-C₅alkyl, C₂-C₈dialkylamincarbonylC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylcarbonylaminC₁-C₅alkyl, *N*-C₁-C₅alkylcarbonyl-*N*-C₁-C₅alkylaminC₁-C₅alkyl, C₃-C₆trialkylsilylC₁-C₅alkyl, phenylC₁-C₅alkyl (trong đó trong đó phenyl có thể tùy ý được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃ alkylsulfonyl, halogen, xyano hoặc bằng nitro), heteroarylC₁-C₅alkyl (trong đó heteroaryl có thể tùy ý được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃ alkylsulfonyl, halogen, xyano hoặc bằng nitro), phenoxyC₁-C₅alkyl (trong đó trong đó

phenyl có thể tùy ý được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃ alkylsulfonyl, halogen, xyano hoặc bằng nitro), heteroaryloxyC₁-C₅alkyl (trong đó heteroaryl có thể tùy ý được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃ alkylsulfonyl, halogen, xyano hoặc bằng nitro), C₃-C₅haloalkenyl, C₃-C₈xycloalkyl, phenyl hoặc phenyl được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, halogen hoặc bằng nitro, hoặc heteroaryl, hoặc heteroaryl được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, halogen, xyano hoặc bằng nitro.

Cụ thể là, nhóm ản G là nhóm -C(X^a)-R^a hoặc -C(X^b)-X^c-R^b, và nghĩa là X^a, R^a, X^b, X^c và R^b như được xác định trên đây.

Ưu tiên G là hydro, kim loại kiềm hoặc kim loại kiềm thổ, hoặc nhóm amoni hoặc sulfoni, trong đó hydro là đặc biệt ưu tiên.

Phụ thuộc vào bản chất của phần tử thế, hợp chất có công thức I có thể tồn tại ở dạng chất đồng phân khác nhau. Khi G là hydro, ví dụ, hợp chất có công thức I có thể tồn tại ở dạng hổ biến khác nhau



Sáng chế này bao gồm toàn bộ chất đồng phân và hổ biến, và hỗn hợp của nó trong tất cả các phần. Ngoài ra, khi các phần tử thế chứa liên kết đôi có thể tồn tại chất đồng phân *cis* và *trans*. Các chất đồng phân này cũng nằm trong phạm vi của các hợp chất có công thức I yêu cầu bảo hộ.

Sáng chế cũng đề cập đến muối nông dụng mà hợp chất có công thức I có thể tạo thành bằng sự chuyển tiếp kim loại bazơ kim loại kiềm và kim loại kiềm thổ, amin, bazơ amoni bậc bốn hoặc bazơ sulfoni bậc ba.

Trong số kim loại chuyển tiếp, chất tạo thành muối kim loại kiềm và kim loại kiềm thổ, đặc biệt là các kim loại nói trên được tạo thành từ hydroxit đồng, sắt, liti, natri, kali, magie và canxi, và tốt hơn là hydroxit, bicarbonat và carbonat của natri và kali.

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

Bazơ amoni bậc bốn ưu tiên thích hợp cho sự tạo thành muối tương ứng, ví dụ, để tạo thành chế phẩm [N(R_a R_b R_c R_d)]OH, trong đó R_a, R_b, R_c và R_d thích hợp cho sự tạo thành muối tương ứng là hydro hoặc C₁-C₄alkyl. Các bazơ tetraalkylamoni khác thích hợp với anion có thể thu được, ví dụ, bằng phản ứng trao đổi anion.

Bazơ sulfoni bậc ba được ưu tiên thích hợp cho sự tạo thành muối tương ứng, ví dụ, thành công thức [SR_eR_fR_g]OH, trong đó R_e, R_f và R_g thích hợp cho sự tạo thành muối tương ứng C₁-C₄ alkyl. Trimetylsulfoni hydroxit là đặc biệt ưu tiên. Bazơ sulfoni thích hợp có thể thu được từ phản ứng của thioete, cụ thể là dialkylsulfite, với alkyl halogenua, sau đó là sự biến đổi thành bazơ thích hợp, ví dụ hydroxit, bằng phản ứng trao đổi anion.

Có thể hiểu rằng trong hợp chất có công thức I này, trong đó G là kim loại, amoni hoặc sulfoni như được đề cập trên đây và có nghĩa là cation, tích điện âm tương ứng được phần lớn được thay đổi qua khối O-C=C-C=O.

Hợp chất có công thức I theo sáng chế cũng bao gồm hydrat có thể được tạo thành trong quá trình tạo thành muối.

Tốt hơn là, trong hợp chất có công thức I, phần tử thế R là hydro, C₁₋₆alkyl, C₁₋₆haloalkyl, C₂₋₆alkenyl, C₃₋₆alkynyl, benzyl hoặc C₁₋₄alkoxy(C₁₋₄)alkyl, cụ thể là hydro, metyl, etyl, triflometyl, allyl, propargyl, benzyl, metoxymetyl, etoxymetyl hoặc metoxyetyl.

Tốt hơn là, X, Y và Z là C₁₋₄alkyl, C₃₋₆xycloalkyl, C₁₋₄alkoxy hoặc halogen, cụ thể là metyl, etyl, xyclopropyl, metoxy, flo, brom hoặc clo, khi m+n là 1-3, cụ thể là, khi m+n là 1-2.

Theo cách khác, Y và Z, độc lập với nhau, là C₁₋₄alkyl, C₃₋₆xycloalkyl, C₁₋₄alkoxy, halogen, phenyl hoặc phenyl được thế bằng C₁₋₄alkyl hoặc halogen, cụ thể là metyl, etyl, xyclopropyl, metoxy, flo, clo, brom, phenyl hoặc phenyl được thế bằng halogen, cụ thể là flo hoặc clo, cụ thể là ở vị trí 4, khi m+n là 1-3, Cụ thể là, khi m+n là 1-2.

Trong hợp chất có công thức I, phần tử thế A là tốt hơn là C₁₋₆alkyl, C₁₋₆haloalkyl, C₃₋₆xycloalkyl, C₃₋₆xycloalkyl(C₁₋₄)alkyl, hoặc C₃₋₆xycloalkyl(C₁₋₄)alkyl trong đó gốc xycloalkyl nhóm metylen được thế bằng O,S hoặc NR₀, trong đó R₀ là C₁₋₆alkyl hoặc C₁₋₆alkoxy, hoặc A là C₂₋₆alkenyl, C₃₋₆alkynyl, benzyl, C₁₋₄alkoxy(C₁₋₄)alkyl, C₁₋₄alkoxy(C₁₋₄)alkoxy(C₁₋₄)alkyl hoặc C₁₋₄alkylthio(C₁₋₄)alkyl, cụ thể là metyl, etyl, isopropyl, triflometyl, 2,2,2-trifloetyl, 2,2-difloetyl, 2-floetyl, xyclopropyl, xyclobutyl, xyclopentyl, xyclohexyl, xyclopropylmetyl, xyclobutylmetyl, xyclopentylmetyl, xyclohexylmetyl, oxetan-3-ylmetyl, tetrahydrofuran-2-ylmetyl, tetrahydropyran-2-ylmetyl, tetrahydrofuran-3-ylmetyl, tetrahydropyran-3-ylmetyl, tetrahydropyran-4-ylmetyl, allyl, propargyl, benzyl, metoxymetyl, etoxymetyl, metoxyetyl, metoxypropyl, metoxyetoxymetyl, metoxymetoxetyl, oxetanyl-3-yl, tetrahydropyran-4-yl hoặc metylthioetyl.

Trong nhóm hợp chất được ưu tiên khác có công thức (I), R là hydro, metyl, etyl, triflometyl, allyl, propargyl, benzyl, metoxymetyl, etoxymetyl hoặc metoxyetyl, X là metyl, etyl, xyclopropyl, metoxy, flo, brom hoặc clo, Y và Z, độc lập với nhau, là metyl, etyl, xyclopropyl, metoxy, flo, clo, brom, phenyl hoặc phenyl được thế bằng halogen hoặc C₁₋₂alkyl, G là hydro và A có nghĩa như được xác định trên đây.

Trong nhóm hợp chất có công thức (I) được ưu tiên đặc biệt, R là metyl, etyl, allyl, propargyl, metoxymetyl, X là metyl, etyl, xyclopropyl, metoxy, flo, brom hoặc clo, Y và Z, độc lập với nhau, là metyl, etyl, xyclopropyl, metoxy, flo, clo, brom, phenyl hoặc phenyl được thế bằng halogen hoặc C₁-C₂alkyl, G là hydro và A có nghĩa như được xác định trên đây.

Trong nhóm hợp chất có công thức (I) được ưu tiên hơn, R là metyl, etyl, metoxymetyl, X là metyl, etyl, xyclopropyl, metoxy, flo, brom hoặc clo, Y và Z, độc lập với nhau, là metyl, etyl, xyclopropyl, metoxy, flo, clo, brom, phenyl hoặc phenyl được thế bằng halogen hoặc C₁-C₂alkyl, G là hydro và A là metyl, etyl, isopropyl, triflometyl, 2,2,2-trifloetyl, 2,2-difloetyl, 2-floetyl, xyclopropyl, xyclobutyl, xyclopentyl, xyclohexyl, xyclopropylmetyl, xyclobutylmetyl, xyclopentylmetyl, xyclohexylmetyl, oxetan-3-ylmetyl, tetrahydrofuran-2-ylmetyl, tetrahydropyran-2-ylmetyl, tetrahydrofuran-3-ylmetyl, tetrahydropyran-3-ylmetyl, tetrahydropyran-4-ylmetyl, allyl, propargyl, benzyl, metoxymetyl, etoxymetyl, metoxyetyl, metoxypropyl, metoxyetoxymetyl, metoxymetoxetyl, oxetanyl-3-yl, tetrahydropyran-4-yl hoặc methylthioetyl.

Trong nhóm hợp chất có công thức (I) được ưu tiên đặc biệt, R là metyl, etyl, metoxymetyl, X là metyl, etyl, xyclopropyl, metoxy, flo, brom hoặc clo, Y và Z, độc lập với nhau, là metyl, etyl, xyclopropyl, metoxy, flo, clo, brom, phenyl hoặc phenyl được thế bằng halogen hoặc C₁-C₂alkyl, G là hydro và A là metyl, etyl, isopropyl, triflometyl, 2,2,2-trifloetyl, 2,2-difloetyl, 2-floetyl, xyclopropyl, xyclohexyl, xyclopropylmetyl, allyl, propargyl, benzyl, metoxymetyl, etoxymetyl, metoxyetyl, metoxyetoxymetyl, metoxymetoxetyl, oxetanylyl.

Mô tả chi tiết sáng chế

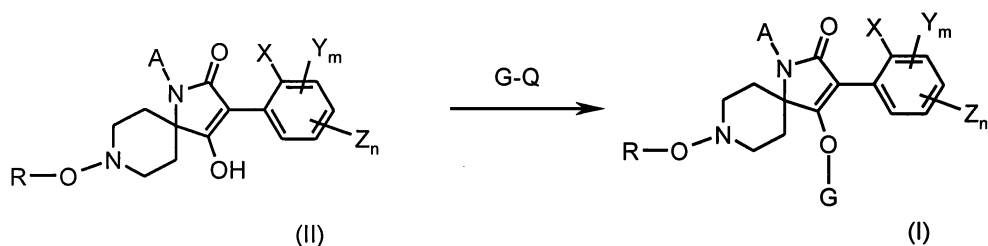
Sáng chế cũng bao gồm muối của các hợp chất có công thức I với amin, kim loại kiềm và bazơ kim loại kiềm thổ hoặc bazơ amoni bậc bốn.

Trong số kim loại kiềm và hydroxit kim loại kiềm thổ khi tạo thành muối, đề cập đặc biệt được tạo thành từ hydroxit của liti, natri, kali, magie và canxi, nhưng đặc biệt là hydroxit của natri và kali. hợp chất có công thức I theo sáng chế cũng bao gồm hydrat có thể được tạo thành trong quá trình tạo thành muối.

Ví dụ amin thích hợp cho sự tạo thành muối amoni bao gồm amoniac cũng như C_1 - C_{18} alkylamin, C_1 - C_4 hydroxyalkylamin và C_2 - C_4 alkoxyalkylamin bậc một, bậc hai và bậc ba, ví dụ metylamin, etylamin, n-propylamin, isopropylamin, bốn chất đồng phân butylamin, n-amylamin, isoamylamin, hexylamin, heptylamin, octylamin, nonylamin, dexylamin, pentadexylamin, hexadexylamin, heptadexylamin, octadexylamin, metyletylamin, metylisopropylamin, metylhexylamin, metyl-nonylamin, metylpentadexylamin, metyloctadexylamin, etylbutylamin, etylheptylamin, etyloctylamin, hexylheptylamin, hexyloctylamin, dimetylamin, dietylamin, di-n-propylamin, diisopropylamin, di-n-butylamin, di-n-amylamin, diisoamylamin, dihexylamin, diheptylamin, dioctylamin, etanolamin, n-propanolamin, isopropanolamin, N,N-dietanolamin, N-etylpropanolamin, N-butyletanolamin, allylamin, n-but-2-enylamin, n-pent-2-enylamin, 2,3-dimetylbut-2-enylamin, dibut-2-enylamin, n-hex-2-enylamin, propylendiamin, trimetylamin, trietylamin, tri-n-propylamin, triisopropylamin, tri-n-butylamin, triisobutylamin, tri-sec-butylamin, tri-n-amylamin, metoxyetylamin và etoxyetylamin; amin dị vòng, ví dụ pyridin, quinolin, isoquinolin, morpholin, piperidin, pyrrolidin, indolin, quinuclidin và azepin; primary arylamin, ví dụ anilin, metoxyanilin, etoxyanilin, o-, m- và p-toluidin, phenylenediamin, benzidin, naphthylamin và o-, m- và p-cloanilin; nhưng đặc biệt là trietylamin, isopropylamin và diisopropylamin.

Bazơ amoni bậc bốn được ưu tiên thích hợp cho sự tạo thành muối tương ứng, ví dụ, để tạo thành $[N(R_a R_b R_c R_d)]OH$ trong đó R_a , R_b , R_c và R_d thích hợp cho sự tạo thành muối tương ứng C_1 - C_4 alkyl. Bazơ tetraalkylamoni thích hợp khác với anion khác có thể thu được, ví dụ, bằng phản ứng trao đổi anion.

Hợp chất theo sáng chế có thể được tạo thành bằng các phương pháp khác nhau. Ví dụ, hợp chất có công thức I, trong đó phần tử thế có nghĩa nêu trên, có thể được điều chế bằng các quy trình đã biết, ví dụ bằng cách xử lý hợp chất có công thức II với chất alkyl hoá, axyl hoá, phosphoryl hoá hoặc sulfonyl hoá G-Q với sự có mặt của ít nhất một đương lượng bazơ, trong đó G là nhóm alkyl, axyl, phosphoryl hoặc sulfonyl được kết hợp và Q là nucleofuge:



Hợp chất có công thức I, trong đó G là nhóm ắn có công thức $-C(X^a)-R^a$, $C(X^b)-X^c-R^b$ hoặc $-C(X^d)-NR^cR^d$ có thể được điều chế bằng quy trình đã biết trong lĩnh vực, được mô tả, ví dụ, trong WO 09/049851. Hợp chất có công thức II thường được xử lý với chất axyl hoá như axit halogenua (cụ thể là axit clorua), axit anhydrit, haloformat (cụ thể là cloroformat), halothioformat (cụ thể là clothioformat), isoxyanat, isothioxyanat, carbamoyl halogenua (cụ thể là carbamoyl clorua) hoặc thiocarbamoyl halogenua (cụ thể là thiocarbamoyl clorua) với sự có mặt của ít nhất một đương lượng bazơ thích hợp, với sự có mặt tùy ý của dung môi thích hợp. Bazơ có thể là vô cơ như kim loại kiềm carbonat hoặc hydroxit hoặc kim loại hydrua, hoặc bazơ hữu cơ như amin bậc ba hoặc alkoxit kim loại. Ví dụ bazơ hữu cơ thích hợp bao gồm natri carbonat, natri hoặc kali hydroxit, natri hydrua, và bazơ hữu cơ thích hợp bao gồm trialkylamin như trimetylamin và trietylamin, pyridin hoặc bazơ amin khác như 1,4-diazobicyclo[2.2.2]octan và 1,8-diazabicyclo[5.4.0]undec-7-en. Bazơ được ưu tiên bao gồm trietylamin và pyridin. Dung môi thích hợp cho phản ứng này được chọn thích hợp với chất phản ứng và bao gồm ete như tetrahydrofuran và 1,2-dimetoxyetan và dung môi halogen hoá như diclometan và cloroform. Một số bazơ, như pyridin và trietylamin, có thể được sử dụng thành công làm bazơ và dung môi. Trong trường hợp này, trong đó chất axyl hoá axit cacboxylic, axyl hoá tốt hơn là có hiệu quả với sự có mặt của chất tạo cặp đôi như 2-clo-1-metylpyridinium iodua, N,N' -dixyclohexycarbodiimit, 1-(3-dimetylaminpropyl)-3-ethylcarbodiimit và N,N' -carbodiimidazol, và bazơ như trietylamin hoặc pyridin trong dung môi thích hợp như tetrahydrofuran, diclometan và axetonitril.

Hợp chất có công thức I, trong đó G là nhóm ắn có công thức $C(X^b)-X^c-R^b$ hoặc $-C(X^d)-NR^cR^d$, cũng có thể được điều chế bằng cách xử lý hợp chất có công thức II bằng phosgen hoặc đương lượng phosgen, với sự có mặt tùy ý của dung môi như toluen hoặc etyl axetat, và bazơ và phản ứng với cloroformat tạo thành, hoặc tương

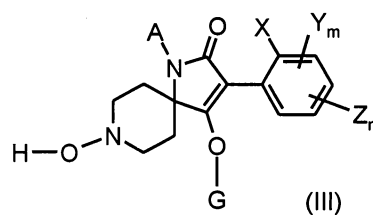
đương, với rượu, thiol hoặc amin trong điều kiện đã biết, như được mô tả, ví dụ, trong các tài liệu sáng chế US 6774133, US 6555567 và US 6479489.

Hợp chất có công thức I, trong đó G là nhóm ản có công thức $-P(X^e)R^fR^g$ có thể được điều chế từ hợp chất có công thức II bằng cách sử dụng quy trình được mô tả, ví dụ, trong các tài liệu sáng chế US 6774133, US 6555567 và US 6479489.

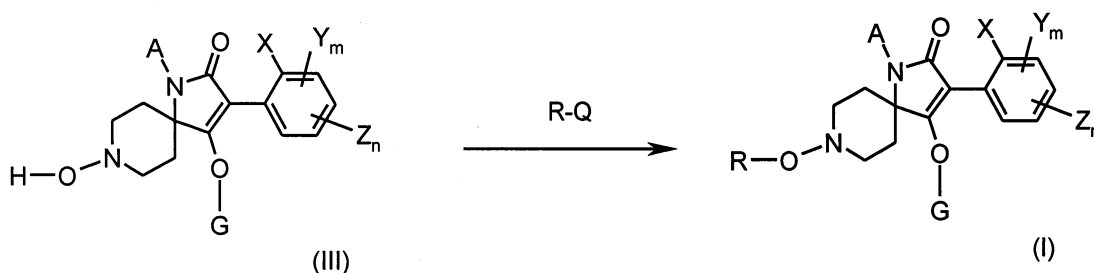
Hợp chất có công thức I, trong đó G là nhóm ản có công thức $-SO_2R^e$, có thể được điều chế bằng cách hợp chất có công thức II phản ứng với alkyl hoặc aryl sulfonyl halogenua, tốt hơn là với sự có mặt của ít nhất một đương lượng bazơ.

Hợp chất có công thức I, trong đó G là C_1 - C_6 alkyl, C_2 - C_6 alkenyl, C_3 - C_6 alkynyl hoặc nhóm ản có công thức $CH_2-X^f-R^h$, có thể được điều chế bằng cách xử lý hợp chất có công thức II với hợp chất có công thức G-Y trong đó Y là halogen (cụ thể là brom hoặc iot), sulfonat (cụ thể là mesylat hoặc tosylat) hoặc sulfat tốt hơn là dưới sự có mặt của bazơ, trong các điều kiện đã biết.

Hợp chất có công thức III



có thể thu được bằng hydro hoá bằng xúc tác hợp chất có công thức I, trong đó R được đại diện bằng nhóm benzyl.



Hợp chất có công thức I, trong đó là $-C(X^a)-R^a$, $C(X^b)-X^c-R^b$ hoặc $-C(X^d)-NR^cR^d$ SO_2R^e , $P(X^e)R^fR^g$ hoặc $CH_2-X^f-R^h$, có thể thu được bằng cách xử lý hợp chất có công thức III với chất alkyl hoá, axyl hoá, phosphoryl hoá hoặc sulfonyl hoá R-Q, trong đó Q là nucleofuge, với sự có mặt của ít nhất một đương lượng bazơ.

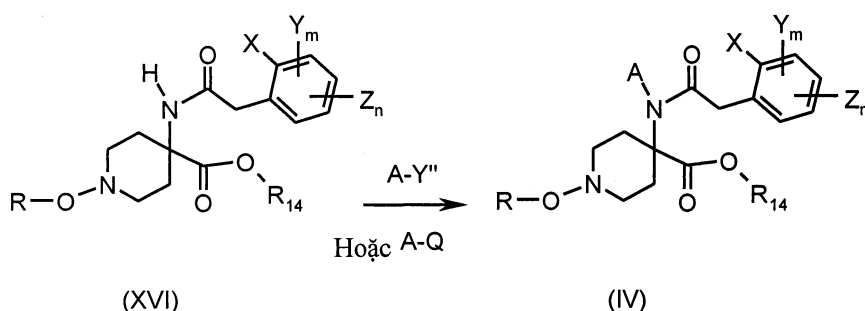
Điều kiện thích hợp là giống như được mô tả trên đây để biến đổi hợp chất có công thức II thành hợp chất có công thức I.

Hợp chất có công thức II có thể được điều chế qua sự đóng vòng của hợp chất có công thức IV,



trong đó R_{14} là C_{1-6} alkyl, tốt hơn là với sự có mặt của bazơ, và với sự có mặt tùy ý của dung môi thích hợp, bằng phương pháp đã biết tương tự phương pháp được mô tả, ví dụ, trong WO 09/049851.

Hợp chất có công thức IV, trong đó R_{14} được xác định trên đây và trong đó A là C_{1-6} alkyl, C_{1-6} haloalkyl, C_{3-6} cycloalkyl, C_{3-6} cycloalkyl(C_{1-4})alkyl, hoặc C_{3-6} cycloalkyl(C_{1-4})alkyl trong đó gốc cycloalkyl nhóm metylen được thế bằng O, S hoặc NR_0 , trong đó R_0 là C_{1-6} alkyl hoặc C_{1-6} alkoxy, hoặc A là C_{2-6} alkenyl, C_{2-6} haloalkenyl, C_{3-6} alkynyl, C_{1-6} xyanoalkyl, benzyl, C_{1-4} alkoxy(C_{1-4})alkyl, C_{1-4} alkoxy(C_{1-4})alkoxy(C_{1-4})alkyl, oxetanyl, tetrahydrofuranyl, tetrahydropyranyl hoặc C_{1-4} alkylthio(C_{1-4})alkyl, có thể được điều chế bằng cách xử lý hợp chất có công thức XVI với chất alkyl hoá có công thức $A-Y''$, trong đó A là nhóm alkyl được kết hợp và Y'' là halogen (cụ thể là brom hoặc iot), sulfonat (cụ thể là mesylat hoặc tosylat) hoặc sulfat, tốt hơn là dưới sự có mặt của bazơ, trong các điều kiện đã biết.



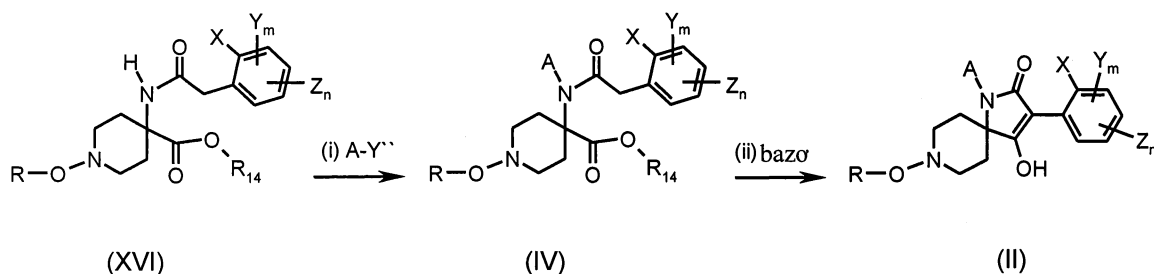
Hợp chất có công thức IV, trong đó R_{14} được xác định trên đây và trong đó A là C_{1-6} alkylcarbonyl, C_{1-6} alkoxycarbonyl, C_{3-6} cycloalkylcarbonyl, N-di(C_{1-6} alkyl)carbamoyl, benzoyl, C_{1-6} alkylsulfonyl hoặc phenylsulfonyl, có thể thu được

bằng cách xử lý hợp chất có công thức XVI với chất axyl hoá hoặc sulfonyl hoá A-Q, trong đó A là nhóm axyl hoặc sulfonyl được kết hợp và Q là nucleofuge, với sự có mặt của ít nhất một đương lượng bazơ, trong các điều kiện đã biết, được mô tả ví dụ bởi S.M.B. Fraga et al., Eur. J. Org. Chem. (2004), (8), 1750-1760.

Hợp chất có công thức IV, trong đó R_{14} được xác định trên đây và trong đó A là C_{1-6} alkylcarbonyl, C_{1-6} alkoxycarbonyl, C_{3-6} xycloalkylcarbonyl hoặc N-di(C_{1-6} alkyl)carbamoyl, cũng có thể được điều chế bằng cách xử lý hợp chất có công thức XVI với phosgen hoặc đương lượng phosgen, với sự có mặt tùy ý của dung môi như toluen hoặc etyl axetat, và bazơ và cho cloroformat thu được, hoặc tương đương, phản ứng với rượu hoặc amin, trong các điều kiện đã biết.

Hợp chất có công thức IV, trong đó R_{14} được xác định trên đây và trong đó A là C_{1-6} alkylsulfonyl hoặc phenylsulfonyl, có thể được điều chế bằng cách hợp chất có công thức XVI phản ứng với alkyl hoặc phenyl sulfonyl halogenua, tốt hơn là với sự có mặt của ít nhất một đương lượng bazơ, trong các điều kiện đã biết.

Điều kiện thích hợp giống như được mô tả trên đây để biến đổi hợp chất có công thức II thành hợp chất có công thức I. Hợp chất có công thức XVI đã biết và được mô tả, ví dụ, trong WO 09/049851.

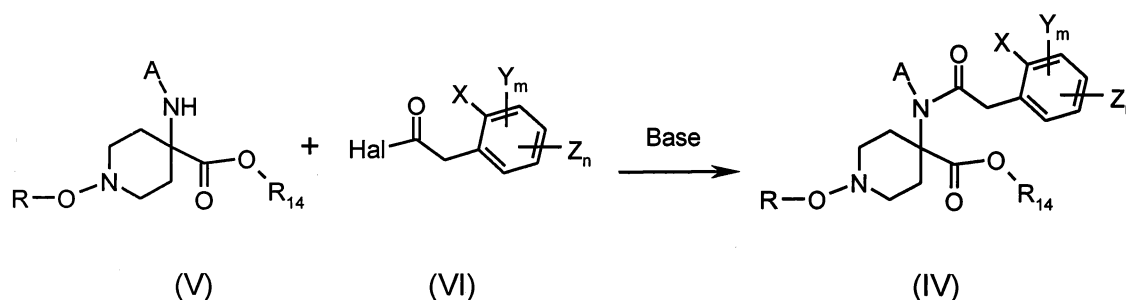


Hợp chất có công thức II, trong đó A là C_{1-6} alkyl, C_{1-6} haloalkyl, C_{3-6} xycloalkyl, C_{3-6} xycloalkyl(C_{1-4})alkyl, hoặc C_{3-6} xycloalkyl(C_{1-4})alkyl trong đó gốc xycloalkyl nhóm metylen được thế bằng O, S hoặc NR_0 , trong đó R_0 là C_{1-6} alkyl hoặc C_{1-6} alkoxy, hoặc A là C_{2-6} alkenyl, C_{2-6} haloalkenyl, C_{3-6} alkynyl, C_{1-6} xyanoalkyl, benzyl, C_{1-4} alkoxy(C_{1-4})alkyl, C_{1-4} alkoxy(C_{1-4})alkoxy(C_{1-4})alkyl, oxetanyl, tetrahydrofuranyl, tetrahydropyranyl hoặc C_{1-4} alkylthio(C_{1-4})alkyl, cũng có thể được điều chế ở quy trình một bình phản ứng hai giai đoạn bao gồm

(i) amit N-alkyl hoá hợp chất có công thức XVI bằng chất A-Y'', trong đó A là nhóm alkyl được kết hợp và trong đó Y'' là nucleofuge như được xác định trên đây, với sự có mặt của ít nhất một đương lượng bazơ, và

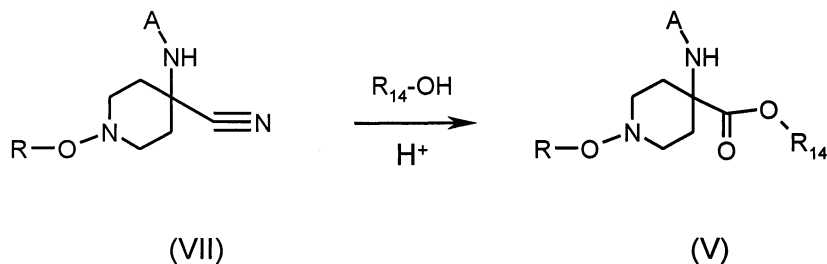
(ii) sự đóng vòng của hợp chất trung gian có công thức IV, tốt hơn là với sự có mặt của bazơ bổ sung, ít nhất hơn một đương lượng, và với sự có mặt tùy ý của dung môi thích hợp, bằng phương pháp được mô tả trên đây.

R₁₄ thường là C₁-C₆alkyl. Bazơ cho các bước (i) và (ii) có thể giống nhau hoặc khác nhau.

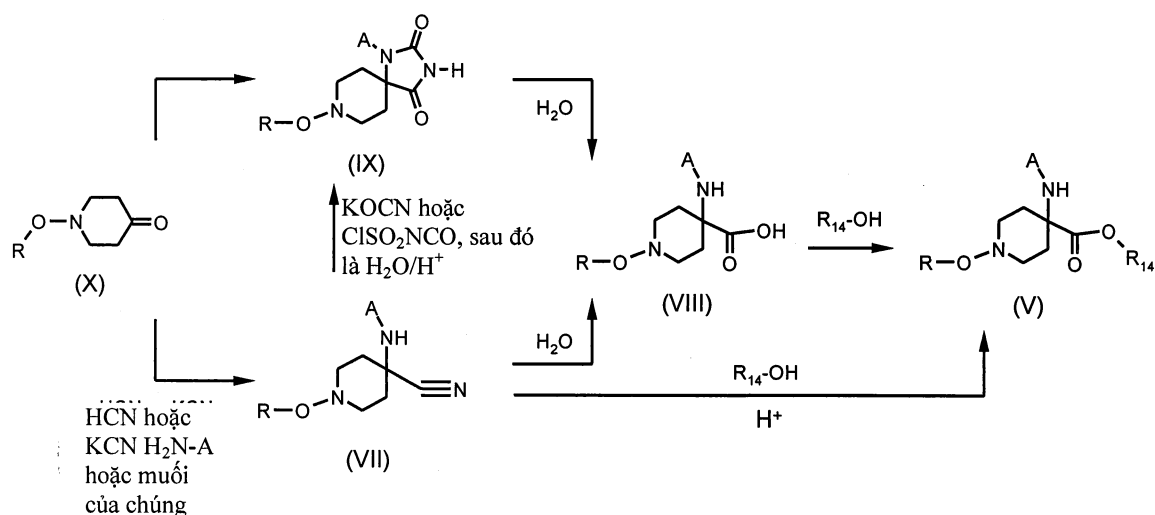


Hợp chất có công thức IV có thể được điều chế bằng cách cho hợp chất amin axit được thế N có công thức V phản ứng với phenylacetate halogenua có công thức VI, tốt hơn là dưới sự có mặt của bazơ trong dung môi thích hợp, bằng phương pháp đã biết tương tự phương pháp được mô tả, ví dụ, trong WO 09/049851. Bazơ có thể là vô cơ như kim loại kiềm carbonat hoặc hydroxit hoặc kim loại hydrua, hoặc bazơ hữu cơ như amin bậc ba hoặc alkoxit kim loại. Ví dụ bazơ hữu cơ thích hợp bao gồm natri carbonat, natri hoặc kali hydroxit, natri hydrua, và bazơ hữu cơ thích hợp bao gồm trialkylamin như trimetylamin và trietylamin, pyridin hoặc bazơ amin khác như 1,4-diazobicyclo[2.2.2]octan và 1,8-diazabicyclo[5.4.0]undec-7-en. Bazơ được ưu tiên bao gồm trietylamin và pyridin. Dung môi thích hợp cho phản ứng này được chọn thích hợp với chất phản ứng và bao gồm ete như tetrahydrofuran và 1,2-dimethoxyetan và dung môi halogen hoá như diclometan và cloroform. Một số bazơ, như pyridin và trietylamin, có thể được sử dụng thành công làm bazơ và dung môi.

Phenylacetate halogenua có công thức VI, trong đó Hal là Cl hoặc Br, là các hợp chất đã biết hoặc có thể được điều chế bằng phương pháp đã biết, được mô tả, ví dụ, trong WO 09/049851.



Este của axit amin được thế N có công thức V, trong đó R_{14} là C_1 - C_6 alkyl, có thể được điều chế bằng cách cho nitril amin được thế N có công thức VII phản ứng với rượu có công thức $R_{14}OH$, tốt hơn là với sự có mặt của axit mạnh (cụ thể là axit sulfuric hoặc axit clohydric), trong các điều kiện đã biết. Este của axit amin được thế N có công thức V, trong đó R_{14} là C_1 - C_6 alkyl, cũng có thể được điều chế bằng phương pháp đã biết từ axit amin được thế N có công thức VIII. Este hoá VIII bằng rượu có công thức $R_{14}OH$ dưới hoạt tính thionyl clorua thường là ví dụ để điều chế este V, như được mô tả, ví dụ, trong WO09/049851, nhưng các phương pháp este hoá đã biết khác cũng có thể được áp dụng, như ví dụ điều trị của hợp chất có công thức VIII với rượu có công thức $R_{14}OH$ trong điều kiện axit (thường là H_2SO_4 hoặc HCl). Trong trường hợp cụ thể trong đó R_{14} là metyl, hợp chất có công thức VIII cũng có thể được xử lý bằng diazometan hoặc trimetylsilyldiazometan, hoặc bằng axetyl clorua trong metanol. Hợp chất VIII, VII và V có thể được phản ứng và/hoặc tách thành amin tự do hoặc muối amin (ví dụ, muối hydrohalogenua, cụ thể hơn là muối hydroclorua hoặc hydrobomua, hoặc muối tương đương khác bất kỳ).



Axit amin được thể N có công thức VIII bản thân chúng có thể được điều chế bằng phương pháp đã biết, thường dưới các điều kiện thủy phân thường là axit hoặc bazơ, từ nitril amin được thể N có công thức VII. Ví dụ đại diện cho thủy phân nitril trong chức axit carboxylic tương ứng của nó trong điều kiện H_2SO_4 hoặc HCl chứa nước có thể được phát hiện, ví dụ, trong E.F.G. Duynstee et al., *Recueil Trav. Chim. Pays-Bas* 84, 1442-1451, (1965) hoặc trong B. Wang et al., *Eur. J. Org. Chem.* (2008), (2), 350-355.

Cuối cùng, axit amin được thể N có công thức VIII có thể được điều chế từ keton có công thức X bằng cách tổng hợp kiểu Strecker thông qua nitril amin được thể N có công thức VII. Sự biến đổi keton X thành nitril amin được thể N VII (phản ứng Strecker) được mô tả kỹ ba thành phần tạo cặp đôi trong một bình chứa bao gồm, ngoài keton X, hydro xyanua HCN hoặc alkali xyanua khác nhau (ví dụ, KCN , NaCN , ...) trong môi trường nước chứa được đệm hoặc trimetylsilyl xyanua TMSCN , với sự có mặt tùy ý của lượng xúc tác của axit Lewit, ví dụ ZnI_2 , và amin được thể N có công thức $\text{H}_2\text{N-A}$ là amin tự do hoặc muối amin (ví dụ, muối hydrohalogenua, đặc biệt hơn là muối hydroclorua hoặc hydrobomua, hoặc muối tương đương khác bất kỳ của amin $\text{H}_2\text{N-A}$). Nguồn xyanua (ví dụ, HCN) thích hợp cũng có thể được thêm vào ketimin được thực hiện (hoặc muối imini) giữa keton X và $\text{H}_2\text{N-A}$ amin được thể N, hoặc muối của nó. Tóm tắt trên phạm vi của phản ứng Strecker có thể được thấy, ví dụ, trong L. Kürti, B. Czakó, 'Strategic Applications of Named Reactions in Organic Synthesis', Elsevier Academic Press, 2005, pp. 446-447 và 690-691. Điều kiện phản ứng điển hình đối với phản ứng Strecker cũng có thể được thấy, ví dụ, trong M.M. Mehrotra et al., *J. Med. Chem.* (2004), 47, 2037-2061, hoặc B.J. Mavunkel et al., *J. Med. Chem.* (1996), 39, 3169-3173, hoặc P.L. Feldman et al., *J. Org. Chem.* (1990), 55, 4207-4209, hoặc trong J.L. Marco et al., *Tetrahedron* (1999), 55, 7625-7644.

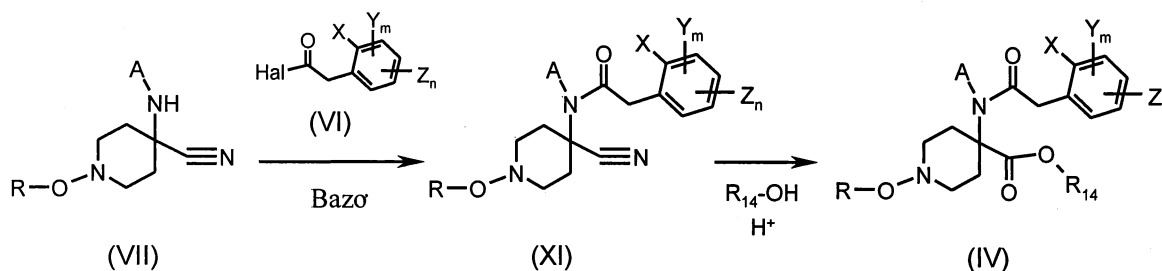
Theo cách khác, axit amin có công thức VIII cũng có thể được điều chế từ keton có công thức X bằng phương pháp phản ứng Bucherer Berge, được mô tả, ví dụ, trong Th. Wieland et al., *Methoden Org. Chem. (Houben-Weyl)* (1959), Bd. XI/2, 305-306, qua hydantoin được thể N1 có công thức IX. Sự biến đổi keton X thành hydantoin IX có thể đạt được, ví dụ, trong tương tự như L. Tang et al., *Heterocycles* (2007), 74, 999-1008. Hydantoin được thể N-1 IX cũng có thể được điều chế thuận tiện từ Nitril amin được thể N VII bằng cách xử lý với alkali xyanat (ví dụ, kali xyanat KOCN), sau

đó là thủy phân trong nước có tính axit giống với, ví dụ, G.M. Carrera et al., J. Heterocyclic Chem. (1992), 29, 847-850 hoặc I.M. Bell et al., Bioorg. Med. Chem. Lett. (2006), 16, 6165-6169. Nhưng tùy chọn khác cho sự đóng vòng của Nitril amin được thế N VII trong spirohydantoin IX là phản ứng với closulfonyl isoxyanat ClSO₂NCO trong, ví dụ, diclometan, sau đó là thủy phân trong nước có tính axit giống với, ví dụ, P.L. Feldman et al., J. Org. Chem. (1990), 55, 4207-4209 hoặc M.W. Rowbottom, Bioorg. Med. Chem. Lett. (2007), 17, 2171-2178.

Axit amin được thế N có công thức VIII có thể được điều chế bằng phương pháp đã biết, thường dưới điều kiện thủy phân nhiệt thường là axit hoặc bazơ, từ hydantoin được thế N1 IX. Ví dụ đại diện cho thủy phân hydantoin thành chức axit amin tương ứng dưới điều kiện NaOH trong nước có thể được thấy, ví dụ, trong P.L. Feldman et al., J. Org. Chem. (1990), 55, 4207-4209.

Các hợp chất VIII, VII và V có thể được phản ứng và/hoặc tách thành amin tự do hoặc muối amin (ví dụ, muối hydrohalogenua, đặc biệt hơn là muối hydroclorua hoặc hydrobomua, hoặc muối tương đương khác bất kỳ).

Hợp chất có công thức X, trong đó R là C₁₋₆alkyl, C₁₋₆haloalkyl, C₂₋₆alkenyl, C₃₋₆alkynyl, C₁₋₆xyanoalkyl, benzyl, C₁₋₄alkoxy(C₁₋₄)alkyl hoặc C₁₋₄alkoxy(C₁₋₄)alkoxy(C₁₋₄)alkyl đã biết hoặc có thể thu được, ví dụ, theo Major và Dursch, Journal of Organic Chemistry (1961), 26, 1867-74.

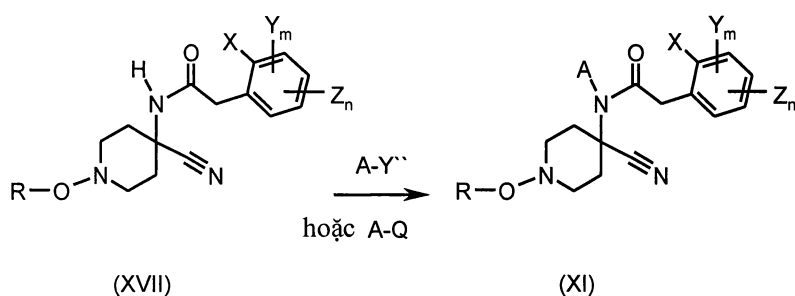


Theo cách khác, hợp chất có công thức IV có thể được điều chế bằng cách xử lý hợp chất có công thức XI để rượu phân với R₁₄OH, tốt hơn là trong môi trường axit mạnh (cụ thể là axit sulfuric hoặc axit clohydric) bằng phương pháp đã biết tương tự phương pháp được mô tả, ví dụ, trong WO 09/049851.

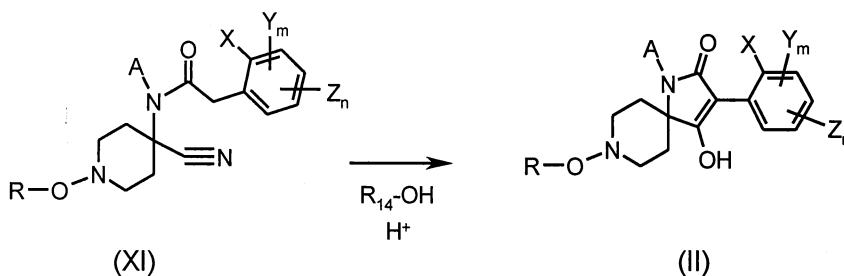
Hợp chất có công thức XI bản thân chúng có thể được điều chế bằng cách cho nitril amin được thế N có công thức VII phản ứng với phenylacetate halogenua có công thức VI, tốt hơn là với sự có mặt của bazơ trong dung môi thích hợp, bằng phương

pháp đã biết tương tự phương pháp được mô tả, ví dụ, trong WO 09/049851. Bazơ có thể là vô cơ như kim loại kiềm carbonat hoặc hydroxit hoặc kim loại hydrua, hoặc bazơ hữu cơ như amin bậc ba hoặc alkoxit kim loại. Ví dụ bazơ hữu cơ thích hợp bao gồm natri carbonat, natri hoặc kali hydroxit, natri hydrua, và bazơ hữu cơ thích hợp bao gồm trialkylamin như trimetylamin và trietylamin, pyridin hoặc bazơ amin khác như 1,4-diazobicyclo[2.2.2]octan và 1,8-diazabicyclo[5.4.0]undec-7-en. Bazơ được ưu tiên bao gồm trietylamin và pyridin. Dung môi thích hợp cho phản ứng này được chọn thích hợp với chất phản ứng và bao gồm ete như tetrahydrofuran và 1,2-dimetoxyetan và dung môi halogen hoá như diclometan và cloroform. Một số bazơ, như pyridin và trietylamin, có thể được sử dụng thành công làm bazơ và dung môi.

Hợp chất có công thức XI cũng có thể được điều chế bằng cách xử lý hợp chất có công thức XVII với chất alkyl hoá có công thức A-Y'', trong đó A là nhóm alkyl được kết hợp và Y'' là halogen (cụ thể là brom hoặc iot), sulfonat (cụ thể là mesylat hoặc tosylat) hoặc sulfat, hoặc với chất axyl hoá hoặc sulfonyl hoá A-Q, trong đó A là nhóm axyl hoặc sulfonyl được kết hợp và Q là nucleofuge, tốt hơn là dưới sự có mặt của bazơ, trong các điều kiện đã biết.



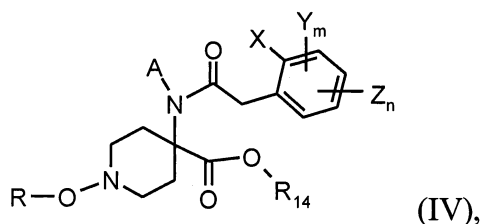
Điều kiện thích hợp giống như được mô tả trên đây để biến đổi hợp chất có công thức XVI thành hợp chất có công thức IV. Hợp chất có công thức XVII là đã biết và được mô tả, ví dụ, trong WO 09/049851.



Hợp chất có công thức II cũng có thể được điều chế bằng cách cho hợp chất nitril có công thức XI phản ứng với $R_{14}OH$ trong môi trường axit mạnh (cụ thể là axit sulfuric hoặc axit clohydric), với sự có mặt tùy ý của dung môi, tốt hơn là ở nhiệt độ cao hơn, ví dụ, nằm trong khoảng từ 50 đến 150°C, sau đó là điều kiện thủy phân, ví dụ, bằng cách rót hỗn hợp phản ứng thô trên đá, trong tình tự đóng vòng trực tiếp.

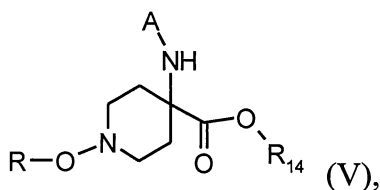
Các hợp chất được thể hiện dưới đây có công thức IV, V, VII, VIII, IX và XI, và muối của nó là mới và đặc biệt hơn được chỉ định để tổng hợp các hợp chất có công thức I:

các hợp chất có công thức IV



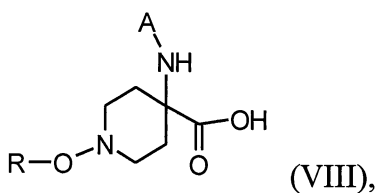
và muối của nó, trong đó X, Y, Z, m, n, R và A có nghĩa nêu trên và R_{14} là C_{1-6} alkyl;

các hợp chất có công thức V



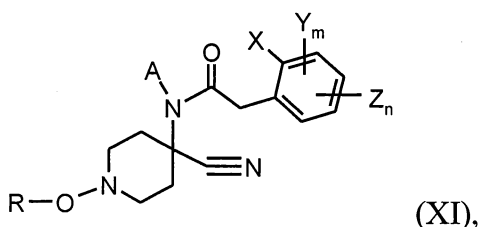
và muối của nó, trong đó R và A có nghĩa nêu trên và R_{14} là C_1-C_6 alkyl;

các hợp chất có công thức VIII



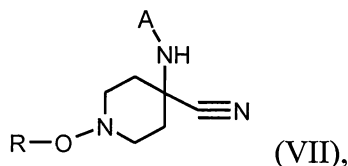
và muối của nó, trong đó R và A có nghĩa nêu trên;

các hợp chất có công thức XI

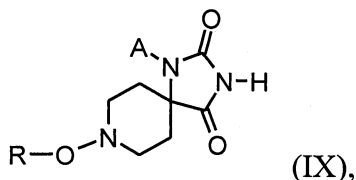


và muối của nó, trong đó X, Y, Z, m, n, R và A có nghĩa nêu trên;

các hợp chất có công thức VII



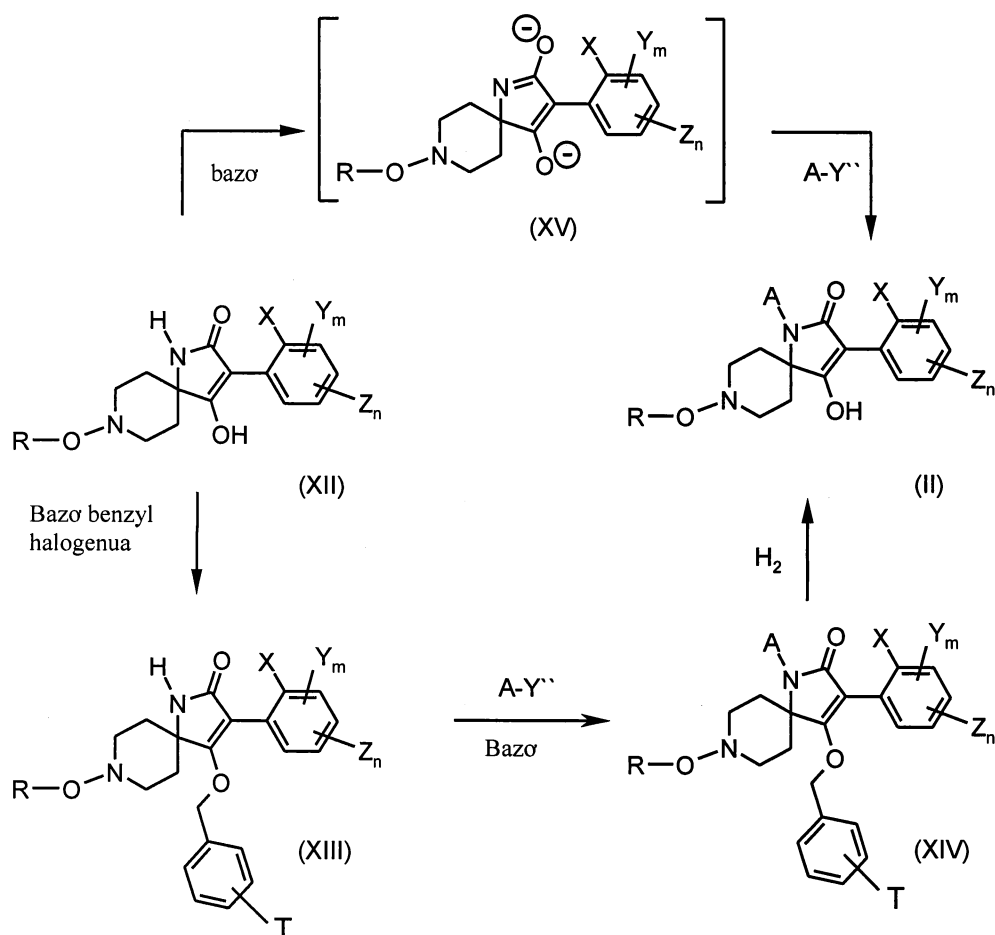
và muối của nó, trong đó R và A có nghĩa nêu trên, và các hợp chất có công thức IX



và muối của nó, trong đó R và A có nghĩa nêu trên.

Hợp chất ban đầu và trung gian còn lại của sơ đồ phản ứng là đã biết hoặc có thể được điều chế theo phương pháp đã biết với chuyên gia trong lĩnh vực.

Quy trình khác để điều chế hợp chất có công thức II bao gồm hydro hoá xúc tác hợp chất có công thức XIV có chức enol benzyl ete, trong đó nhóm benzyl có thể được thay thế tùy ý bằng T, trong đó T là ví dụ 4-metoxy hoặc 3,4-dimetoxi. Xử lý XIV bằng hydro (áp suất nằm trong khoảng từ 10^6 - 10^7 pascal) và lượng chất xúc tác paladi (ví dụ, paladi trên cacbon 1-30% trọng lượng) trong dung môi như metanol hoặc tetrahydrofuran, còn tùy ý chứa nước hoặc axit như HCl, nằm trong khoảng từ 0 đến 100°C là điều kiện phản ứng thường để loại benzyl hydro phân. Quy trình đại diện có thể thấy, ví dụ, theo Schobert et al., Organic & Biomolecular Chemistry 2004, 2, 3524-3529. Các điều kiện phản ứng êm dịu khác để loại bỏ nhóm benzyl sử dụng hết triethylsilan và lượng chất xúc tác paladi(II) axetat với sự có mặt của bazơ theo, ví dụ, Paintner et al., Synlett 2003, 627-30.



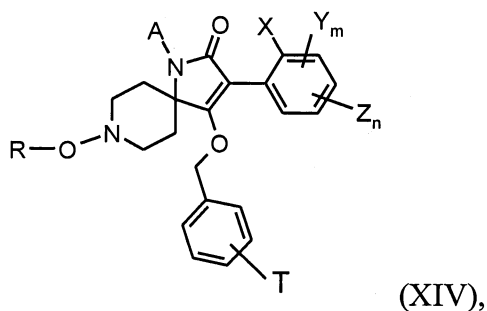
Hợp chất có công thức XIV có thể được điều chế bằng cách xử lý hợp chất có công thức XIII với chất alkyl hoá có công thức A-Y'', trong đó A là nhóm alkyl được kết hợp và Y'' là halogen (cụ thể là brom hoặc iot), sulfonat (cụ thể là mesylat hoặc tosylat) hoặc sulfat, tốt hơn là dưới sự có mặt của bazơ, trong các điều kiện đã biết.

Hợp chất có công thức XIII có thể được điều chế bằng cách xử lý hợp chất có công thức XII bằng benzyl halogenua, mà có thể được thế tùy ý bằng T, trong đó T là như được xác định trên đây, với sự có mặt của bazơ, trong các điều kiện đã biết, ví dụ giống với R. Labruere et al., Synthesis (2006), (24), 4163-4166 hoặc Y. Bourdreux et al., Tetrahedron (2008), 64(37), 8930-8937.

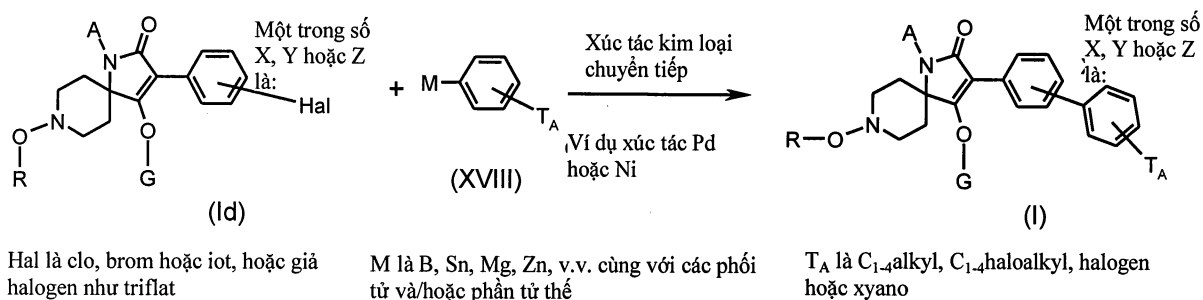
Điều kiện phản ứng thích hợp để biến đổi XII thành XIII và XIII thành XIV là, ví dụ, như được mô tả trên đây để biến đổi hợp chất có công thức II thành hợp chất có công thức I. Hợp chất có công thức XII và XIII là đã biết và được mô tả, ví dụ, trong WO 09/049851.

Nhưng quy trình khác để điều chế hợp chất có công thức II bao gồm xử lý hợp chất có công thức XII với bazơ, ít nhất hai đương lượng, với sự có mặt của dung môi thích hợp và ở nhiệt độ thích hợp để tạo thành dianion trung gian có công thức XV, hợp chất này còn được xử lý bằng chất alkyl hoá có công thức A-Y'', trong đó A là nhóm alkyl được kết hợp và Y'' là halogen (cụ thể là brom hoặc iot), sulfonat (cụ thể là mesylat hoặc tosylat) hoặc sulfate, trong các điều kiện đã biết.

Các hợp chất có công thức XIV

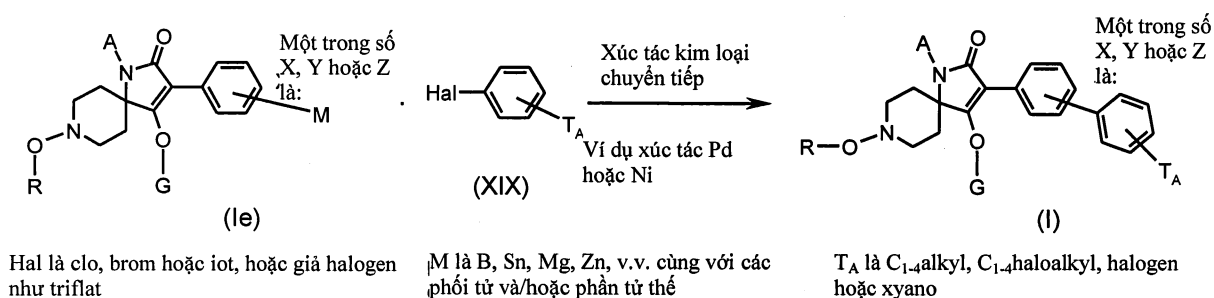


trong đó X, Y, Z, m, n, R, T và A có nghĩa nêu trên là mới và được chỉ định đặc biệt hơn để tổng hợp các hợp chất có công thức I.



Các hợp chất có công thức I, trong đó X, Y hoặc Z là phenyl hoặc phenyl được thế bằng C_{1-4} alkyl, C_{1-4} haloalkyl, halogen hoặc xyano, có thể được điều chế bằng cách cho tiền chất halogen tương ứng có công thức Id, trong đó Hal là clo, brom, iot hoặc giả halogen như C_{1-4} haloalkylsulfonat, cụ thể là triflat, phản ứng với loại phenyl kim loại hữu cơ thích hợp có công thức XVIII, trong đó T_A là C_{1-4} alkyl, C_{1-4} haloalkyl, halogen hoặc xyano và M là, ví dụ, B, Sn, Si, Mg hoặc Zn giữ phối tử khác và/hoặc phân tử thế, bằng cách phản ứng xúc tác kim loại chuyển tiếp. Loại kim loại hữu cơ có công thức XVIII là, ví dụ, axit aryl boronic T_A -Phenyl-B(OH)₂, hoặc muối thích hợp hoặc este của nó, chúng sẽ phản ứng với hợp chất có công thức Id trong điều kiện xúc

tác paladi hoặc nickel, như ví dụ, điều kiện Suzuki-Miyaura. Các loại kim loại, chất xúc tác và phối tử có thể được sử dụng trong loại phản ứng này. Điều kiện phản ứng và hệ thống xúc tác cho biến đổi này được mô tả, ví dụ, trong WO08/071405.



Người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực này sẽ nhận ra rằng sự phân cực ở hai tâm phản ứng trong quá trình tạo cặp đôi chéo này có thể bị đảo ngược. Các hợp chất có công thức I, trong đó X, Y hoặc Z là phenyl hoặc phenyl được thế bằng C₁₋₄alkyl, C₁₋₄haloalkyl, halogen hoặc xyano, cũng có thể được điều chế bằng cách cho loại kim loại kim loại hữu cơ tương ứng có công thức Ie, trong đó M là ví dụ B, Sn, Si, Mg hoặc Zn giữ phối tử khác và/hoặc phân tử thế, phản ứng với aryl halogenua có công thức XIX, trong đó Hal là clo, brom, iot hoặc giả halogen như C₁₋₄haloalkylsulfonat, cụ thể là triflat, bằng cách phản ứng xúc tác kim loại chuyển tiếp và trong điều kiện tương tự như được mô tả trên đây.

Trạng thái oxi hoá của lưu huỳnh của các hợp chất có công thức I, II, III, IV, XI và XIV, và của các hợp chất trung gian có công thức V, VII, VIII và IX, trong đó A kết hợp như nguyên tử S, như ví dụ, khi A là C₁₋₄alkylthio(C₁₋₄)alkyl, có thể dễ dàng được xác định trên số oxi hoá sulfite ở mức sulfoxit hoặc sulfon bằng phản ứng oxi hoá bao gồm chất phản ứng như, ví dụ, axit m-cloperbenzoic (MCPBA), oxon, natri periodat, natri hypoclorit hoặc tert-butyl hypoclorit trong số những chất khác.

Chất phản ứng có thể được phản ứng dưới sự có mặt của bazơ. Các ví dụ về bazơ thích hợp là hydroxit kim loại kiềm hoặc kim loại kiềm thổ, hydrua kim loại kiềm hoặc kim loại kiềm thổ, amit kim loại kiềm hoặc kim loại kiềm thổ, alkoxit kim loại kiềm hoặc kim loại kiềm thổ, axetat kim loại kiềm hoặc kim loại kiềm thổ, kim loại kiềm hoặc kim loại kiềm thổ carbonat, dialkylamit kim loại kiềm hoặc kim loại kiềm thổ hoặc alkylsilylamit kim loại kiềm hoặc kim loại kiềm thổ, alkylamin,

alkylendiamin, xycloalkylamin tự do hoặc được no hoặc không no alkyl hoá N, dị vòng bazơ, amoni hydroxit và amin vòng cacbon. Các ví dụ có thể được đề cập là natri hydroxit, natri hydrua, natri amit, natri methoxit, natri axetat, natri carbonat, kali tert-butoxit, kali hydroxit, kali carbonat, kali hydrua, liti diisopropylamit, kali bis(trimetylsilyl)amit, canxi hydrua, trietylamin, diisopropyletylamin, trietylendiamin, xyclohexylamin, N-xyclohexyl-N,N-dimetylamin, N,N-dietylanilin, pyridin, 4-(N,N-dimetylamin)pyridin, quinuclidin, N-metylmorpholin, benzyltrimetylamonit hydroxit và 1,8-diazabixyclo[5.4.0]undec-7-en (DBU).

Chất phản ứng có thể bị phản ứng với nhau như, có nghĩa là không cần dung môi hoặc chất pha loãng bổ sung. Trong hầu hết các trường hợp, tuy nhiên, có lợi để bổ sung dung môi hoặc chất pha loãng trợ hoặc hỗn hợp các chất này. Nếu tiến hành phản ứng dưới sự có mặt của bazơ, bazơ được sử dụng dư, như trietylamin, pyridin, N-metylmorpholin hoặc N,N-dietylanilin, cũng có thể đóng vai trò làm dung môi hoặc chất pha loãng.

Phản ứng được tiến hành thuận lợi ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ 80°C đến +140°C, tốt hơn là nằm trong khoảng từ -30°C đến +100°C, trong nhiều trường hợp nằm trong khoảng nhiệt độ môi trường đến +80°C.

Hợp chất I có thể được biến đổi theo cách đã biết thành hợp chất I khác bằng cách thay thế một hoặc nhiều phần tử thế của hợp chất I ban đầu theo cách thông thường bằng phần tử thế khác theo sáng chế.

Phụ thuộc vào lựa chọn điều kiện phản ứng và nguyên liệu ban đầu thích hợp trong mỗi trường hợp, ví dụ, trong trong một bước phản ứng chỉ có thể thay thế một phần tử thế bằng phần tử thế khác theo sáng chế, hoặc nhiều phần tử thế có thể được thay thế bằng phần tử thế khác theo sáng chế trong cùng bước phản ứng. Muối của hợp chất I có thể được điều chế theo cách đã biết. Do đó, ví dụ, muối cộng axit của hợp chất I thu được bằng cách xử lý bằng axit thích hợp hoặc chất phản ứng và muối trao đổi ion thích hợp với bazơ thu được bằng cách xử lý bằng bazơ thích hợp hoặc bằng chất phản ứng trao đổi ion thích hợp.

Muối của hợp chất I có thể được biến đổi theo cách thông thường thành hợp chất I tự do, muối cộng axit, ví dụ, bằng cách xử lý với hợp chất bazơ thích hợp hoặc

với chất phản ứng và muối trao đổi ion thích hợp với bazơ, ví dụ, bằng cách xử lý với axit thích hợp hoặc bằng chất phản ứng trao đổi ion thích hợp.

Muối của hợp chất I có thể được biến đổi theo cách đã biết thành muối khác của hợp chất I, muối cộng axit, ví dụ, thành muối cộng axit, ví dụ bằng cách xử lý muối của axit vô cơ như hydroclorua muối kim loại thích hợp như muối natri, bari hoặc bạc, của axit, ví dụ bằng bạc axetat, trong dung môi thích hợp trong đó muối vô cơ mà tạo thành, ví dụ bạc clorua, không hoà tan được và do đó kết tủa từ hỗn hợp phản ứng.

Phụ thuộc vào quy trình hoặc điều kiện phản ứng, các hợp chất I, các hợp chất này có đặc tính tạo muối có thể thu được ở dạng tự do hoặc ở dạng muối.

Các hợp chất I và, trong đó thích hợp, chất hỗ biến của nó, trong mỗi trường hợp ở dạng tự do hoặc ở dạng muối, có thể có mặt ở dạng một trong số các chất đồng phân các chất đồng phân này có thể hoặc làm hỗn hợp các chất này, ví dụ ở dạng chất đồng phân tinh khiết, như thể đối quang và/hoặc chất đồng phân không đối quang, hoặc làm hỗn hợp chất đồng phân, như hỗn hợp chất đồng phân đối ảnh, ví dụ raxemat, hỗn hợp chất đồng phân không đối quang hoặc hỗn hợp raxemat, phụ thuộc vào số, cấu hình tuyệt đối và tương đối của nguyên tử cacbon không đối xứng có mặt trong phân tử và/hoặc phụ thuộc vào cấu hình của liên kết đôi không thom có mặt trong phân tử; sáng chế đề cập đến chất đồng phân tinh khiết và tất cả hỗn hợp chất đồng phân có thể và được hiểu trong mỗi trường hợp trong câu trên đây và dưới đây, thậm chí khi chi tiết hoá lập thể không được đề cập cụ thể hơn trong mỗi trường hợp.

Hỗn hợp chất đồng phân không đối quang hoặc hỗn hợp raxemat của hợp chất I, ở dạng tự do hoặc ở dạng muối, mà có thể thu được phụ thuộc vào nguyên liệu ban đầu và quy trình được chọn có thể được tách theo cách đã biết thành chất đồng phân không đối quang hoặc raxemat tinh khiết dựa trên sự khác nhau về lý hoá của các thành phần, ví dụ bằng kết tinh phân đoạn, chưng cất và/hoặc sắc ký.

Hỗn hợp chất đồng phân đối ảnh, như raxemat, có thể thu được theo cách tương tự có thể được phân giải thành thể đối quang quang học bằng phương pháp đã biết, ví dụ bằng tái kết tinh từ dung môi có hoạt tính quang, bằng sắc ký trên chất hấp thụ không đối xứng, ví dụ sắc ký lỏng cao áp (HPLC) trên axetyl xenlulo, với sự hỗ trợ của vi sinh vật thích hợp, bằng sự phân cắt bằng enzym cố định, đặc hiệu, qua sự hình thành của hợp chất chứa trong, ví dụ, bằng cách sử dụng ete vòng không đối xứng,

trong đó chỉ có một chất đồng phân đối ảnh được tạo phức, hoặc bằng cách biến đổi thành muối đồng phân không đối quang, ví dụ, bằng cách cho sản phẩm cuối raxemat bazơ phản ứng với axit có hoạt tính quang, như axit carboxylic, ví dụ axit camphor, tartaric hoặc malic, hoặc axit sulfonic, ví dụ axit camphorsulfonic, và tách hỗn hợp chất đồng phân không đối quang mà có thể thu được theo cách này, ví dụ bằng kết tinh phân đoạn dựa vào độ hoà tan khác nhau của chúng, cho chất đồng phân không đối quang, chất đồng phân đối ảnh mong muốn có thể được giải phóng từ chúng bằng sự kích hoạt của chất thích hợp, ví dụ chất bazơ.

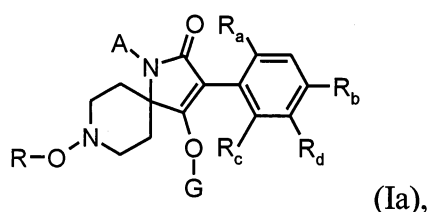
Chất đồng phân không đối quang hoặc chất đồng phân đối ảnh có thể thu được theo sáng chế không chỉ bằng cách tách hỗn hợp chất đồng phân thích hợp, mà còn bằng phương pháp tổng hợp chọn lọc không đối quang và chọn lọc đối ảnh, ví dụ bằng cách tiến hành quy trình theo sáng chế với nguyên liệu ban đầu của hoá lập thể thích hợp.

Ưu điểm để tách hoặc tổng hợp trong mỗi trường hợp chất đồng phân có hiệu quả sinh học hơn, ví dụ, chất đồng phân đối ảnh hoặc chất đồng phân không đối quang, hoặc hỗn hợp chất đồng phân, ví dụ, hỗn hợp chất đồng phân đối ảnh hoặc hỗn hợp chất đồng phân không đối quang, Nếu các thành phần riêng lẻ có hoạt tính sinh học khác nhau.

Các hợp chất I và, trong đó thích hợp, chất hỗ biến của nó, trong mỗi trường hợp ở dạng tự do hoặc ở dạng muối, có thể, nếu thích hợp, cũng có thể thu được dưới dạng hydrat và/hoặc bao gồm dung môi khác, ví dụ các hợp chất mà có thể được sử dụng để kết tinh hợp chất có mặt ở dạng rắn.

Các hợp chất theo bảng từ 1 đến 116 dưới đây có thể được điều chế theo phương pháp được mô tả trên đây. Ví dụ sau đây không nhằm làm giới hạn sáng chế và thể hiện hợp chất có công thức I được ưu tiên.

Bảng 1: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T1,001 đến T1.132 có công thức Ia:



trong đó R là CH₃, A là CH₃, G là hydro và R_a, R_b, R_c và R_d là như được xác định dưới đây:

Số	R _a	R _b	R _c	R _d
T1,001	Br	H	H	H
T1,002	Cl	H	H	H
T1,003	CH ₃	H	H	H
T1,004	CH ₂ CH ₃	H	H	H
T1,005	OCH ₃	H	H	H
T1,006	Br	Cl	H	H
T1,007	Cl	Br	H	H
T1,008	Cl	Cl	H	H
T1,009	Cl	CH ₃	H	H
T1,010	CH ₃	Cl	H	H
T1,011	CH ₃	CH ₃	H	H
T1,012	Cl	H	Cl	H
T1,013	Cl	H	CH ₃	H
T1,014	Cl	H	CH ₂ CH ₃	H
T1,015	Cl	H	OCH ₃	H
T1,016	CH ₃	H	CH ₃	H
T1,017	CH ₃	H	CH ₂ CH ₃	H
T1,018	CH ₃	H	OCH ₃	H
T1,019	CH ₂ CH ₃	H	CH ₂ CH ₃	H
T1,020	CH ₂ CH ₃	H	OCH ₃	H
T1,021	OCH ₃	H	OCH ₃	H
T1,022	Br	H	H	Cl
T1,023	Br	H	H	CH ₃
T1,024	Br	H	H	4-Cl-C ₆ H ₄
T1,025	Cl	H	H	Cl
T1,026	Cl	H	H	CH ₃
T1,027	Cl	H	H	4-Cl-C ₆ H ₄
T1,028	CH ₃	H	H	Br
T1,029	CH ₃	H	H	Cl
T1,030	CH ₃	H	H	CH ₃
T1,031	CH ₃	H	H	C ₆ H ₅
T1,032	CH ₃	H	H	4-Cl-C ₆ H ₄
T1,033	CH ₂ CH ₃	H	H	CH ₃
T1,034	CH ₂ CH ₃	H	H	4-Cl-C ₆ H ₄
T1,035	OCH ₃	H	H	CH ₃
T1,036	OCH ₃	H	H	4-Cl-C ₆ H ₄
T1,037	Cl	H	Cl	Br

Số	R _a	R _b	R _c	R _d
T1,038	CH ₃	H	CH ₃	Br
T1,039	CH ₃	H	CH ₃	Cl
T1,040	CH ₃	H	CH ₃	4-Cl-C ₆ H ₄
T1,041	Br	Cl	H	CH ₃
T1,042	Br	CH ₃	H	CH ₃
T1,043	Cl	Cl	H	Cl
T1,044	Cl	Br	H	CH ₃
T1,045	Cl	Cl	H	CH ₃
T1,046	Cl	CH ₃	H	Cl
T1,047	Cl	CH ₃	H	CH ₃
T1,048	CH ₃	Br	H	CH ₃
T1,049	CH ₃	Cl	H	CH ₃
T1,050	CH ₃	CH ₃	H	CH ₃
T1,051	CH ₃	CH ₃	H	4-Cl-C ₆ H ₄
T1,052	Br	Br	CH ₃	H
T1,053	Br	Cl	CH ₃	H
T1,054	Br	CH ₃	Br	H
T1,055	Br	CH ₃	Cl	H
T1,056	Cl	Br	CH ₃	H
T1,057	Cl	Cl	Cl	H
T1,058	Cl	Cl	CH ₃	H
T1,059	Cl	CH ₃	Cl	H
T1,060	Cl	CH ₃	CH ₂ CH ₃	H
T1,061	Cl	CH ₃	OCH ₃	H
T1,062	Cl	4-Cl-C ₆ H ₄	Cl	H
T1,063	Cl	4-Cl-C ₆ H ₄	CH ₃	H
T1,064	Cl	4-Cl-C ₆ H ₄	CH ₂ CH ₃	H
T1,065	Cl	4-Cl-C ₆ H ₄	OCH ₃	H
T1,066	CH ₃	Br	CH ₃	H
T1,067	CH ₃	Cl	CH ₃	H
T1,068	CH ₃	CH ₃	Br	H
T1,069	CH ₃	CH ₃	Cl	H
T1,070	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H
T1,071	CH ₃	CH ₃	CH ₂ CH ₃	H
T1,072	CH ₃	CH ₃	OCH ₃	H
T1,073	CH ₃	4-Cl-C ₆ H ₄	CH ₃	H
T1,074	CH ₃	4-Cl-C ₆ H ₄	CH ₂ CH ₃	H
T1,075	CH ₃	4-Cl-C ₆ H ₄	OCH ₃	H
T1,076	CH ₂ CH ₃	Br	Br	H
T1,077	CH ₂ CH ₃	Br	Cl	H

Số	R _a	R _b	R _c	R _d
T1,078	CH ₂ CH ₃	Br	CH ₃	H
T1,079	CH ₂ CH ₃	Br	CH ₂ CH ₃	H
T1,080	CH ₂ CH ₃	Br	OCH ₃	H
T1,081	CH ₂ CH ₃	Cl	Br	H
T1,082	CH ₂ CH ₃	Cl	Cl	H
T1,083	CH ₂ CH ₃	Cl	CH ₃	H
T1,084	CH ₂ CH ₃	Cl	CH ₂ CH ₃	H
T1,085	CH ₂ CH ₃	Cl	OCH ₃	H
T1,086	CH ₂ CH ₃	CH ₃	Br	H
T1,087	CH ₂ CH ₃	CH ₃	Cl	H
T1,088	CH ₂ CH ₃	CH ₃	CH ₂ CH ₃	H
T1,089	CH ₂ CH ₃	CH ₃	OCH ₃	H
T1,090	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CH ₃	H
T1,091	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	H
T1,092	CH ₂ CH ₃	4-Cl-C ₆ H ₄	Br	H
T1,093	CH ₂ CH ₃	4-Cl-C ₆ H ₄	CH ₂ CH ₃	H
T1,094	CH ₂ CH ₃	4-Cl-C ₆ H ₄	OCH ₃	H
T1,095	OCH ₃	Br	CH ₃	H
T1,096	OCH ₃	Cl	CH ₃	H
T1,097	OCH ₃	CH ₃	Br	H
T1,098	OCH ₃	CH ₃	Cl	H
T1,099	OCH ₃	CH ₃	OCH ₃	H
T1,100	OCH ₃	4-Cl-C ₆ H ₄	OCH ₃	H
T1,101	CH ₃	CH ₃	CH ₃	F
T1,102	CH ₃	CH ₃	CH ₃	Cl
T1,103	CH ₃	CH ₃	CH ₃	Br
T1,104	CH ₃	CH ₃	CH ₃	CH ₃
T1,105	CH ₃	CH ₃	CH ₃	4-Cl-C ₆ H ₄
T1,106	Cl	CH ₃	CH ₃	CH ₃
T1,107	CH ₃	Cl	CH ₃	CH ₃
T1,108	CH ₃	CH ₃	Cl	CH ₃
T1,109	CH ₂ CH ₃	CH ₃	CH ₃	CH ₃
T1,110	OCH ₃	CH ₃	CH ₃	CH ₃
T1,111	Xyclo-C3	CH ₃	CH ₃	CH ₃
T1,112	CH ₃	CH ₃	Xyclo-C3	H
T1,113	CH ₃	F	H	Br
T1,114	CH ₃	CH ₃	H	Br
T1,115	CH ₂ CH ₃	CH ₃	H	CH ₃
T1,116	OCH ₃	CH ₃	H	CH ₃
T1,117	Xyclo-C3	CH ₃	H	CH ₃

Số	R _a	R _b	R _c	R _d
T1.118	CH ₂ CH ₃	Cl	H	CH ₃
T1.119	OCH ₃	Cl	H	CH ₃
T1.120	Xyclo-C3	Cl	H	CH ₃
T1.121	Cl	H	CH ₃	CH ₃
T1.122	CH ₃	H	CH ₃	CH ₃
T1.123	CH ₂ CH ₃	H	CH ₃	CH ₃
T1.124	OCH ₃	H	CH ₃	CH ₃
T1.125	Xyclo-C3	H	CH ₃	CH ₃
T1.126	F	H	Cl	CH ₃
T1.127	Cl	H	F	CH ₃
T1.128	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃
T1.129	Br	CH ₃	CH ₃	CH ₃
T1.130	CH ₃	H	Cl	CH ₃
T1.131	CH ₃	H	Br	CH ₃
T1.132	Br	H	CH ₃	CH ₃

Xyclo-C3 nghĩa là xyclopropyl.

Bảng 2: Bảng này bậc 132 hợp chất từ T2.001 đến T2.132 có công thức Ia, trong đó R là CH₃, A là CH₂CH₃, G là hydro và R_a, R_b, R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 3: Bảng này bậc 132 hợp chất từ T3.001 đến T3.132 có công thức Ia, trong đó R là CH₃, A là n-C₃H₇, G là hydro và R_a, R_b, R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 4: Bảng này bậc 132 hợp chất từ T4.001 đến T4.132 có công thức Ia, trong đó R là CH₃, A là i-C₃H₇, G là hydro và R_a, R_b, R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 5: Bảng này bậc 132 hợp chất từ T5.001 đến T5.132 có công thức Ia, trong đó R là CH₃, A là n-C₄H₉, G là hydro và R_a, R_b, R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 6: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T6.001 đến T6.132 có công thức Ia, trong đó R là CH₃, A là i-C₄H₉, G là hydro và R_a, R_b, R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 7: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T7.001 đến T7.132 có công thức Ia, trong đó R là CH₃, A là t-C₄H₉, G là hydro và R_a, R_b, R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 8: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T8.001 đến T8.132 có công thức Ia, trong đó R là CH₃, A là xyclopropyl, G là hydro và R_a, R_b, R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 9: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T9.001 đến T9.132 có công thức Ia, trong đó R là CH₃, A là xyclopentyl, G là hydro và R_a, R_b, R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 10: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T10.001 đến T10.132 có công thức Ia, trong đó R là CH₃, A là xyclohexyl, G là hydro và R_a, R_b, R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 11: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T11.001 đến T11.132 có công thức Ia, trong đó R là CH₃, A là 2,2-(CH₃)₂-propyl, G là hydro và R_a, R_b, R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 12: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T12.001 đến T12.132 có công thức Ia, trong đó R là CH₃, A là allyl, G là hydro và R_a, R_b, R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 13: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T13.001 đến T13.132 có công thức Ia, trong đó R là CH₃, A là CH₂-CH=C(CH₃)₂, G là hydro và R_a, R_b, R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 14: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T14.001 đến T14.132 có công thức Ia, trong đó R là CH_3 , A là $\text{CH}_2\text{-CH=C(Cl)}_2$, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 15: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T15.001 đến T15.132 có công thức Ia, trong đó R là CH_3 , A là propargyl, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 16: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T16.001 đến T16.132 có công thức Ia, trong đó R là CH_3 , A là $\text{CH}_2\text{C}\equiv\text{CCH}_3$, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 17: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T17.001 đến T17.132 có công thức Ia, trong đó R là CH_3 , A là $\text{CH}_2\text{-xyclopropyl}$, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 18: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T18.001 đến T18.132 có công thức Ia, trong đó R là CH_3 , A là CH_2CN , G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 19: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T19.001 đến T19.132 có công thức Ia, trong đó R là CH_3 , A là CH_2OCH_3 , G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 20: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T20.001 đến T20.132 có công thức Ia, trong đó R là CH_3 , A là $\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_3$, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 21: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T21.001 đến T21.132 có công thức Ia, trong đó R là CH_3 , A là $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_3$, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 22: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T22.001 đến T22.132 có công thức Ia, trong đó R là CH₃, A là CH₂OCH₂CH₂OCH₃, G là hydro và R_a, R_b, R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 23: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T23.001 đến T23.132 có công thức Ia, trong đó R là CH₃, A là CH₂CH₂OCH₂OCH₃, G là hydro và R_a, R_b, R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 24: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T24.001 đến T24.132 có công thức Ia, trong đó R là CH₃, A là oxetan-3-yl, G là hydro và R_a, R_b, R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 25: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T25.001 đến T25.132 có công thức Ia, trong đó R là CH₃, A là tetrahydrofuran-2-yl, G là hydro và R_a, R_b, R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 26: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T26.001 đến T26.132 có công thức Ia, trong đó R là CH₃, A là tetrahydrofuran-3-yl, G là hydro và R_a, R_b, R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 27: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T27.001 đến T27.132 có công thức Ia, trong đó R là CH₃, A là tetrahydropyran-2-yl, G là hydro và R_a, R_b, R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 28: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T28.001 đến T28.132 có công thức Ia, trong đó R là CH₃, A là tetrahydropyran-4-yl, G là hydro và R_a, R_b, R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 29: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T29.001 đến T29.132 có công thức Ia, trong đó R là CH₃, A là CH₂CH₂F, G là hydro và R_a, R_b, R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 30: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T30.001 đến T30.132 có công thức Ia, trong đó R là CH₃, A là CH₂CHF₂, G là hydro và R_a, R_b, R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 31: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T31.001 đến T31.132 có công thức Ia, trong đó R là CH₃, A là CH₂CF₃, G là hydro và R_a, R_b, R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 32: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T32.001 đến T32.132 có công thức Ia, trong đó R là CH₃, A là benzyl, G là hydro và R_a, R_b, R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 33: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T33.001 đến T33.132 có công thức Ia, trong đó R là CH₃, A là C(O)-CH₃, G là hydro và R_a, R_b, R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 34: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T34.001 đến T34.132 có công thức Ia, trong đó R là CH₃, A là C(O)-OCH₃, G là hydro và R_a, R_b, R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 35: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T35.001 đến T35.132 có công thức Ia, trong đó R là CH₃, A là C(O)-xyclopropyl, G là hydro và R_a, R_b, R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 36: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T36.001 đến T36.132 có công thức Ia, trong đó R là CH₃, A là C(O)-N(CH₃)₂, G là hydro và R_a, R_b, R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 37: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T37.001 đến T37.132 có công thức Ia, trong đó R là CH₃, A là C(O)-C₆H₅, G là hydro và R_a, R_b, R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 38: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T38.001 đến T38.132 có công thức Ia, trong đó R là CH_3 , A là SO_2CH_3 , G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 39: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T39.001 đến T39.132 có công thức Ia, trong đó R là CH_3 , A là $\text{SO}_2\text{C}_6\text{H}_5$, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 40: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T40.001 đến T40.132 có công thức Ia, trong đó R là hydro, A là CH_3 , G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 41: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T41.001 đến T41.132 có công thức Ia, trong đó R là hydro, A là CH_2CH_3 , G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 42: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T42.001 đến T42.132 có công thức Ia, trong đó R là hydro, A là $i\text{-C}_3\text{H}_7$, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 43: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T43.001 đến T43.132 có công thức Ia, trong đó R là hydro, A là xyclopropyl, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 44: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T44.001 đến T44.132 có công thức Ia, trong đó R là hydro, A là $\text{CH}_2\text{-xyclopropyl}$, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 45: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T45.001 đến T45.132 có công thức Ia, trong đó R là hydro, A là CH_2OCH_3 , G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 46: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T46.001 đến T46.132 có công thức Ia, trong đó R là hydro, A là $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_3$, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 47: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T47.001 đến T47.132 có công thức Ia, trong đó R là hydro, A là $\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_3$, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 48: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T48.001 đến T48.132 có công thức Ia, trong đó R là hydro, A là $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{OCH}_3$, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 49: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T49.001 đến T49.132 có công thức Ia, trong đó R là hydro, A là oxetan-3-yl, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 50: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T50.001 đến T50.132 có công thức Ia, trong đó R là hydro, A là CH_2CHF_2 , G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 51: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T51.001 đến T51.132 có công thức Ia, trong đó R là hydro, A là CH_2CF_3 , G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 52: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T52.001 đến T52.132 có công thức Ia, trong đó R là hydro, A là benzyl, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 53: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T53.001 đến T53.132 có công thức Ia, trong đó R là CH_2CH_3 , A là CH_3 , G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 54: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T54.001 đến T54.132 có công thức Ia, trong đó R là CH_2CH_3 , A là CH_2CH_3 , G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 55: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T55.001 đến T55.132 có công thức Ia, trong đó R là CH_2CH_3 , A là $i\text{-C}_3\text{H}_7$, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 56: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T56.001 đến T56.132 có công thức Ia, trong đó R là CH_2CH_3 , A là xyclopropyl, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 57: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T57.001 đến T57.132 có công thức Ia, trong đó R là CH_2CH_3 , A là $\text{CH}_2\text{-xyclopropyl}$, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 58: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T58.001 đến T58.132 có công thức Ia, trong đó R là CH_2CH_3 , A là CH_2OCH_3 , G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 59: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T59.001 đến T59.132 có công thức Ia, trong đó R là CH_2CH_3 , A là $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_3$, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 60: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T60.001 đến T60.132 có công thức Ia, trong đó R là CH_2CH_3 , A là $\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_3$, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 61: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T61.001 đến T61.132 có công thức Ia, trong đó R là CH_2CH_3 , A là $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{OCH}_3$, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 62: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T62.001 đến T62.132 có công thức Ia, trong đó R là CH_2CH_3 , A là oxetan-3-yl, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 63: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T63.001 đến T63.132 có công thức Ia, trong đó R là CH_2CH_3 , A là CH_2CHF_2 , G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 64: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T64.001 đến T64.132 có công thức Ia, trong đó R là CH_2CH_3 , A là CH_2CF_3 , G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 65: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T65.001 đến T65.132 có công thức Ia, trong đó R là CH_2CH_3 , A là benzyl, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 66: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T66.001 đến T66.132 có công thức Ia, trong đó R là CH_2OCH_3 , A là CH_3 , G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 67: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T67.001 đến T67.132 có công thức Ia, trong đó R là CH_2OCH_3 , A là CH_2CH_3 , G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 68: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T68.001 đến T68.132 có công thức Ia, trong đó R là CH_2OCH_3 , A là $i\text{-C}_3\text{H}_7$, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 69: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T69.001 đến T69.132 có công thức Ia, trong đó R là CH_2OCH_3 , A là xyclopropyl, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 70: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T70,001 đến T70,132 có công thức Ia, trong đó R là CH_2OCH_3 , A là CH_2 -xyclopropyl, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 71: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T71,001 đến T71.132 có công thức Ia, trong đó R là CH_2OCH_3 , A là CH_2OCH_3 , G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 72: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T72.001 đến T72.132 có công thức Ia, trong đó R là CH_2OCH_3 , A là $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_3$, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 73: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T73.001 đến T73.132 có công thức Ia, trong đó R là CH_2OCH_3 , A là $\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_3$, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 74: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T74.001 đến T74.132 có công thức Ia, trong đó R là CH_2OCH_3 , A là $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{OCH}_3$, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 75: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T75.001 đến T75.132 có công thức Ia, trong đó R là CH_2OCH_3 , A là oxetan-3-yl, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 76: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T76.001 đến T76.132 có công thức Ia, trong đó R là CH_2OCH_3 , A là CH_2CHF_2 , G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 77: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T77,001 đến T77.132 có công thức Ia, trong đó R là CH_2OCH_3 , A là CH_2CF_3 , G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 78: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T78.001 đến T78.132 có công thức Ia, trong đó R là CH_2OCH_3 , A là benzyl, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 79: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T79.001 đến T79.132 có công thức Ia, trong đó R là $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_3$, A là CH_3 , G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 80: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T80.001 đến T80.132 có công thức Ia, trong đó R là $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_3$, A là CH_2CH_3 , G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 81: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T81.001 đến T81.132 có công thức Ia, trong đó R là $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_3$, A là $i\text{-C}_3\text{H}_7$, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 82: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T82.001 đến T82.132 có công thức Ia, trong đó R là $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_3$, A là xyclopropyl, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 83: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T83.001 đến T83.132 có công thức Ia, trong đó R là $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_3$, A là CH_2 -xyclopropyl, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 84: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T84.001 đến T84.132 có công thức Ia, trong đó R là $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_3$, A là CH_2OCH_3 , G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 85: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T85.001 đến T85.132 có công thức Ia, trong đó R là $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_3$, A là $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_3$, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 86: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T86.001 đến T86.132 có công thức Ia, trong đó R là $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_3$, A là $\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_3$, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 87: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T87.001 đến T87.132 có công thức Ia, trong đó R là $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_3$, A là $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{OCH}_3$, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 88: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T88.001 đến T88.132 có công thức Ia, trong đó R là $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_3$, A là oxetan-3-yl, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 89: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T89.001 đến T89.132 có công thức Ia, trong đó R là $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_3$, A là CH_2CHF_2 , G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 90: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T90.001 đến T90.132 có công thức Ia, trong đó R là $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_3$, A là CH_2CF_3 , G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 91: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T91.001 đến T91.132 có công thức Ia, trong đó R là $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_3$, A là benzyl, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 92: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T92.001 đến T92.132 có công thức Ia, trong đó R là benzyl, A là CH_3 , G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 93: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T93.001 đến T93.132 có công thức Ia, trong đó R là benzyl, A là CH_2CH_3 , G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 94: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T94.001 đến T94.132 có công thức Ia, trong đó R là benzyl, A là $i\text{-C}_3\text{H}_7$, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 95: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T95.001 đến T95.132 có công thức Ia, trong đó R là benzyl, A là xyclopropyl, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 96: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T96.001 đến T96.132 có công thức Ia, trong đó R là benzyl, A là $\text{CH}_2\text{-xyclopropyl}$, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 97: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T97.001 đến T97.132 có công thức Ia, trong đó R là benzyl, A là CH_2OCH_3 , G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 98: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T98.001 đến T98.132 có công thức Ia, trong đó R là benzyl, A là $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_3$, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 99: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T99.001 đến T99.132 có công thức Ia, trong đó R là benzyl, A là $\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_3$, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 100: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T100.001 đến T100.132 có công thức Ia, trong đó R là benzyl, A là $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{OCH}_3$, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 101: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T101.001 đến T101.132 có công thức Ia, trong đó R là benzyl, A là oxetan-3-yl, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 102: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T102.001 đến T102.132 có công thức Ia, trong đó R là benzyl, A là CH_2CHF_2 , G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 103: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T103.001 đến T103.132 có công thức Ia, trong đó R là benzyl, A là CH_2CF_3 , G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 104: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T104.001 đến T104.132 có công thức Ia, trong đó R là benzyl, A là benzyl, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 105: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T105.001 đến T105.132 có công thức Ia, trong đó R là CH_3 , A là metoxypropyl, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 106: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T106.001 đến T106.132 có công thức Ia, trong đó R là CH_3 , A là oxetan-3-ylmetyl, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 107: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T107.001 đến T107.132 có công thức Ia, trong đó R là CH_3 , A là tetrahydrofuran-2-ylmetyl, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 108: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T108.001 đến T108.132 có công thức Ia, trong đó R là CH_3 , A là tetrahydrofuran-3-ylmetyl, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 109: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T109.001 đến T109.132 có công thức Ia, trong đó R là CH_3 , A là tetrahydropyran-4-ylmetyl, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 110: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T110,001 đến T110,132 có công thức Ia, trong đó R là CH_3 , A là metylthioethyl, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 111: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T111,001 đến T111.132 có công thức Ia, trong đó R là H, A là metoxypropyl, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 112: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T112.001 đến T112.132 có công thức Ia, trong đó R là CH_2CH_3 , A là metoxypropyl, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 113: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T113.001 đến T113.132 có công thức Ia, trong đó R là $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_3$, A là metoxypropyl, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 114: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T114.001 đến T114.132 có công thức Ia, trong đó R là H, A là tetrahydrofuran-2-ylmethyl, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 115: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T115.001 đến T115.132 có công thức Ia, trong đó R là CH_2CH_3 , A là tetrahydrofuran-2-ylmethyl, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Bảng 116: Bảng này bộc lộ 132 hợp chất từ T116.001 đến T116.132 có công thức Ia, trong đó R là $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_3$, A là tetrahydrofuran-2-ylmethyl, G là hydro và R_a , R_b , R_c và R_d là như được xác định trong bảng 1.

Các hợp chất theo sáng chế là thành phần hoạt tính có giá trị ngăn ngừa và/hoặc trị bệnh trong lĩnh vực diệt trừ sinh vật gây hại, ngay cả khi ở tỷ lệ áp dụng thấp, mà có phổ kháng sinh diệt sinh vật phù hợp và được dung nạp tốt bởi loài máu nóng, cá và thực vật. Thành phần hoạt tính theo sáng chế hoạt động chống lại tất cả hoặc một vài các giai đoạn phát triển thường là nhạy cảm, mà còn kháng, sinh vật gây hại động vật,

như côn trùng hoặc đại diện họ ve bét. Hoạt tính diệt côn trùng hoặc ve bét của thành phần hoạt tính theo sáng chế có thể biểu hiện rõ ràng trực tiếp, ví dụ, sự tiêu diệt sinh vật gây hại, diễn ra ngay lập tức hoặc chỉ sau một thời gian, ví dụ, trong khi lột xác, hoặc gián tiếp, ví dụ, khi tốc độ đẻ trứng và/hoặc ấp trứng giảm, hoạt tính mạnh tương ứng với tốc độ tiêu diệt (chết) ít nhất nằm trong khoảng từ 50 đến 60%.

Hợp chất có công thức I có thể được sử dụng và diệt trừ sự phá hoại của côn trùng sinh vật gây hại như bướm, bộ hai cánh, bộ cánh màng, bộ cánh tơ, bộ cánh thẳng, siêu bộ cánh lưới, bộ cánh cứng, bộ chét, bộ cánh màng và bộ mối và ngoài ra còn sinh vật gây hại không xương khác, ví dụ, sinh vật gây hại ve bét, giun tròn và nhuyễn thể. Côn trùng, ve bét, giun tròn và nhuyễn thể ở đây được đề cập có chọn lọc đến là sinh vật gây hại. Sinh vật gây hại có thể bị diệt và phòng trừ bằng cách sử dụng hợp chất sáng chế bao gồm các sinh vật gây hại liên quan đến nông nghiệp (thuật ngữ này bao gồm sự phát triển của cây trồng thực phẩm và các sản phẩm sợi), nghề làm vườn và ngành chăn nuôi, vật nuôi, lâm nghiệp và bảo quản các sản phẩm có gốc thực vật (như hoa quả, ngũ cốc và gỗ); sinh vật gây hại có liên quan đến sự phá hoại công trình xây dựng của con người và sự truyền bệnh cho người và động vật; và ngoài ra còn có các sinh vật gây hại gây khó chịu (như ruồi).

Ví dụ về sinh vật gây hại có thể được diệt trừ bằng các hợp chất có công thức (I) bao gồm: *Myzus persicae* (rệp cây), *Aphis gossypii* (rệp cây), *Aphis fabae* (rệp cây), *Lygus* spp. (lớp vỏ capsid), *Dysdercus* spp. (lớp vỏ capsid), *Nilaparvata lugens* (rầy), *Nephotettix incticeps* (sâu cuốn lá), *Nezara* spp. (bọ xít), *Euschistus* spp. (bọ xít), *Leptocoris* spp. (bọ xít), *Frankliniella occidentalis* (bọ trĩ), *Thrips* spp. (bọ trĩ), *Leptinotarsa decemlineata* (bọ cánh cứng khoai tây Colorado), *Anthonomus grandis* (mọt nang), *Aonidiella* spp. (côn trùng có vảy), *Trialeurodes* spp. (ruồi trắng), *Bemisia tabaci* (ruồi trắng), *Ostrinia nubilalis* (sâu ngô châu Âu), *Spodoptera littoralis* (sâu lá bông), *Heliothis virescens* (sâu bướm ăn chồi non ở thuốc lá), *Helicoverpa armigera* (sâu lá bông), *Helicoverpa zea* (sâu nang bông), *Sylepta derogata* (sâu cuốn lá bông), *Pieris brassicae* (bướm trắng), *Plutella xylostella* (sâu tơ), *Agrotis* spp. (sâu bướm), *Chilo suppressalis* (sâu đục thân lúa), *Locusta migratoria* (châu chấu), *Chortiocetes terminifera* (châu chấu), *Diabrotica* spp. (sâu đục rễ), *Panonychus ulmi* (bét đỏ châu Âu), *Panonychus citri* (bét đỏ ở cam quýt), *Tetranychus urticae* (ve bét nhện 2 đốm), *Tetranychus cinnabarinus* (bét nhện đỏ), *Phyllocoptruta oleivora* (rệp gây bệnh rỉ sắt ở

cam quýt), *Polyphagotarsonemus latus* (rầy diện rộng), *Brevipalpus* spp. (bét phẳng), *Boophilus microplus* (ve bét gia súc), *Dermacentor variabilis* (ve bét chó Mỹ), *Ctenocephalides felis* (bọ chét ở mèo), *Liriomyza* spp. (sâu đục lá), *Musca domestica* (ruồi nhà), *Aedes aegypti* (muỗi), *Anopheles* spp. (muỗi), *Culex* spp. (muỗi), *Lucillia* spp. (ruồi nhặng xanh), *Blattella germanica* (gián), *Periplaneta americana* (gián), *Blatta orientalis* (gián), mỗi họ *Mastotermitidae* (ví dụ, *Mastotermes* spp.), mỗi họ *Kalotermitidae* (ví dụ, *Neotermes* spp.), mỗi họ *Rhinotermitidae* (ví dụ, *Coptotermes formosanus*, *Reticulitermes flavipes*, *R. speratu*, *R. virginicus*, *R. hesperus*, và *R. santonensis*) và mỗi họ *Termitidae* (ví dụ, *Globitermes sulfureus*), *Solenopsis geminata* (kiến lửa), *Monomorium pharaonis* (kiến pharaoh), *Damalinea* spp. và *Linognathus* spp. (rận cắn và hút máu), *Meloidogyn* spp. (giun tròn gây bệnh sưng rễ), *Globodera* spp. và *Heterodera* spp. (giun tròn bao nang), *Pratylenchus* spp. (giun tròn gây tổn thương), *Rhodopholus* spp. (giun tròn đục rễ cây chuối), *Tylenchulus* spp. (giun tròn ở cây cam quýt), *Haemonchus contortus* (giun xoắn), *Caenorhabditis elegans* (giun giấm), *Trichostrongylus* spp. (giun tròn trong dạ dày-ruột) và *Deroceras reticulatum* (sên).

Ví dụ còn đề cập đến các sinh vật gây hại trên đây là:

Từ bộ ve bét, ví dụ,

Acarus siro, *Aceria sheldoni*, *Aculus schlechtendali*, *Amblyomma* spp., *Argas* spp., *Boophilus* spp., *Brevipalpus* spp., *Bryobia praetiosa*, *Calipitimerus* spp., *Chorioptes* spp., *Dermanyssus gallinae*, *Eotetranychus carpini*, *Eriophyes* spp., *Hyalomma* spp., *Ixodes* spp., *Olygonychus pratensis*, *Ornithodoros* spp., *Panonychus* spp., *Phyllocoptruta oleivora*, *Polyphagotarsonemus latus*, *Psoroptes* spp., *Rhipicephalus* spp., *Rhizoglyphus* spp., *Sarcoptes* spp., *Tarsonemus* spp. và *Tetranychus* spp.;

từ bộ *Anoplura*, ví dụ,

Haematopinus spp., *Linognathus* spp., *Pediculus* spp., *Pemphigus* spp. và *Phylloxera* spp.;

từ bộ cánh cứng, ví dụ,

Agriotes spp., *Anthonomus* spp., *Atomaria linearis*, *Chaetocnema tibialis*, *Cosmopolites* spp., *Curculio* spp., *Dermestes* spp., *Diabrotica* spp., *Epilachna* spp.,

Eremnus spp., *Leptinotarsa decemLineata*, *Lissorhoptrus* spp., *Melolontha* spp., *Orycaephilus* spp., *Otiorhynchus* spp., *Phlyctinus* spp., *Popillia* spp., *Psylliodes* spp., *Rhizopertha* spp., *Scarabeidae*, *Sitophilus* spp., *Sitotroga* spp., *Tenebrio* spp., *Tribolium* spp. và *Trogoderma* spp.;

từ bộ sâu hai cánh, ví dụ,

Aedes spp., *Antherigona soccata*, *Bibio hortulanus*, *Calliphora erythrocephala*, *Ceratitis* spp., *Chrysomyia* spp., *Culex* spp., *Cuterebra* spp., *Dacus* spp., *Drosophila melanogaster*, *Fannia* spp., *Gastrophilus* spp., *Glossina* spp., *Hypoderma* spp., *Hyppobosca* spp., *Liriomyza* spp., *Lucilia* spp., *Melanagromyza* spp., *Musca* spp., *Oestrus* spp., *Orseolia* spp., *Oscinella frit*, *Pegomyia hyoscyami*, *Phorbia* spp., *Rhagoletis pomonella*, *Sciara* spp., *Stomoxys* spp., *Tabanus* spp., *Tannia* spp. và *Tipula* spp.;

từ bộ sâu bộ cánh khác, ví dụ,

Cimex spp., *Distantiella theobroma*, *Dysdercus* spp., *Euchistus* spp., *Eurygaster* spp., *Leptocorisa* spp., *Nezara* spp., *Piesma* spp., *Rhodnius* spp., *Sahlbergella singularis*, *Scotinophara* spp. và *Triatoma* spp.;

từ bộ cánh đều, ví dụ,

Aleurothrixus floccosus, *Aleyrodes brassicae*, *Aonidiella* spp., *Aphididae*, *Aphis* spp., *Aspidiotus* spp., *Bemisia tabaci*, *Ceroplaster* spp., *Chrysomphalus aonidium*, *Chrysomphalus dictyospermi*, *Coccus hesperidum*, *Empoasca* spp., *Eriosoma larigerum*, *Erythroneura* spp., *Gascardia* spp., *Laodelphax* spp., *Lecanium corni*, *Lepidosaphes* spp., *Macrosiphus* spp., *Myzus* spp., *Nephotettix* spp., *Nilaparvata* spp., *Parlatoria* spp., *Pemphigus* spp., *Planococcus* spp., *Pseudaulacaspis* spp., *Pseudococcus* spp., *Psylla* spp., *Pulvinaria aethiopica*, *Quadraspidotus* spp., *Rhopalosiphum* spp., *Saissetia* spp., *Scaphoideus* spp., *Schizaphis* spp., *Sitobion* spp., *Trialeurodes vaporariorum*, *Trioza erytreae* và *Unaspis citri*;

từ bộ cánh màng, ví dụ,

Acromyrmex, *Atta* spp., *Cephus* spp., *Diprion* spp., *Diprionidae*, *Gilpinia polytoma*, *Hoplocampa* spp., *Lasius* spp., *Monomorium pharaonis*, *Neodiprion* spp., *Solenopsis* spp. và *Vespa* spp.;

từ bộ mối, ví dụ,

Reticulitermes spp.;

từ bộ bướm, ví dụ,

Acleris spp., *Adoxophyes* spp., *Aegeria* spp., *Agrotis* spp., *Alabama argillaceae*, *Amylois* spp., *Anticarsia gemmatilis*, *Archips* spp., *Argyrotaenia* spp., *Autographa* spp., *Busseola fusca*, *Cadra cautella*, *Carposina nipponensis*, *Chilo* spp., *Choristoneura* spp., *Clysia ambiguella*, *Cnaphalocrocis* spp., *Cnephasia* spp., *Cochylis* spp., *Coleophora* spp., *Crocidolomia binotalis*, *Cryptophlebia leucotreta*, *Cydia* spp., *Diatraea* spp., *Diparopsis castanea*, *Earias* spp., *Ephestia* spp., *Eucosma* spp., *Eupoecilia ambiguella*, *Euproctis* spp., *Euxoa* spp., *Grapholita* spp., *Hedya nubiferana*, *Heliothis* spp., *Hellula undalis*, *Hyphantria cunea*, *Keiferia lycopersicella*, *Leucoptera scitella*, *Lithocollethis* spp., *Lobesia botrana*, *Lymantria* spp., *Lyonetia* spp., *Malacosoma* spp., *Mamestra brassicae*, *Manduca sexta*, *Operophtera* spp., *Ostrinia nubilalis*, *Pammen* spp., *Pandemis* spp., *Panolis flammea*, *Pectinophora gossypiella*, *Phthorimaea operculella*, *Pieris rapae*, *Pieris* spp., *Plutella xylostella*, *Prays* spp., *Scirpophaga* spp., *Sesamia* spp., *Sparganothis* spp., *Spodoptera* spp., *Synanthedon* spp., *Thaumetopoea* spp., *Tortrix* spp., *Trichoplusia ni* và *Yponomeuta* spp.;

từ bộ ăn lông, ví dụ,

Damalinea spp. và *Trichodectes* spp.;

từ bộ cánh thẳng, ví dụ,

Blatta spp., *Blattella* spp., *Gryllotalpa* spp., *Leucophaea maderae*, *Locusta* spp., *Periplaneta* spp. và *Schistocerca* spp.;

từ bộ *Psocoptera*, ví dụ,

Liposcelis spp.;

từ bộ bộ chét, ví dụ,

Ceratophyllus spp., *Ctenocephalogenus* spp. và *Xenopsylla cheopis*;

từ bộ cánh tơ, ví dụ,

Frankliniella spp., *Hercinothrips* spp., *Scirtothrips aurantii*, *Taeniothrips* spp., *Thrips palmi* và *Thrips tabaci*; và

từ bộ ba đuôi, ví dụ,

Lepisma saccharina.

Thành phần hoạt tính theo sáng chế có thể được sử dụng để diệt trừ, ví dụ, bao gồm hoặc tiêu diệt, sinh vật gây hại loại được đề cập trên đây xuất hiện cụ thể là trên thực vật, cụ thể là trên thực vật có ích và cây cảnh trong nông nghiệp, in nghề làm vườn và trong lâm nghiệp, hoặc trên các bộ phận, như quả, hoa, lá, thân, củ hoặc rễ của thực vật, và trong một số trường hợp thậm chí các bộ phận của thực vật được tạo thành tại thời điểm sau khi được bảo vệ chống lại sinh vật gây hại.

Cây trồng đích thích hợp là, cụ thể là, ngũ cốc, như lúa mì, lúa mạch, lúa mạch đen, yến mạch, ngô hoặc lúa miến; củ cải đường, như củ cải đường hoặc củ cải khô; quả, ví dụ quả táo, quả có hạt hoặc quả không hạt, như táo, lê, mận, đào, hạnh, sơ ri, hoặc beri, ví dụ dâu tây, quả mâm xôi; cây họ đậu, như đậu, đậu lăng, đậu Hà Lan, hoặc đậu nành; cây cung cấp dầu, như cây hạt dầu, mù tạt, cây anh túc, ô liu, hướng dương, dừa, thầu dầu, coca, hoặc lạc; họ bầu bí, như họ bí ngô, dưa chuột hoặc dưa; cây cung cấp sợi, như bông, cây lanh, gai dầu hoặc cây đay; cam quýt, như cam, chanh, nho, hoặc quýt; rau, như rau bina, rau diếp, măng tây, cải bắp, cà rốt, hành, cà chua, khoai tây, hoặc hồ tiêu; nguyệt quế, như lê tàu, quế hoặc long não; và thuốc lá, quả hạch, cà phê, cà tím, mía, chè, hạt tiêu, nho, hupblông, họ mã đề, cây cao su, cây cảnh.

Thuật ngữ cây trồng được hiểu là cũng bao gồm các cây trồng tạo ra tính dung nạp chất diệt cỏ hoặc các loại chất diệt cỏ như bromxynil hoặc các loại diệt cỏ (như, ví dụ, chất ức chế HPPD, chất ức chế ALS, ví dụ primisulfuron, prosulfuron và trifloxysulfuron, chất ức chế EPSPS (5-enol-pyrovyl-shikimat-3-phosphat-synthaza), GS (chất ức chế glutamin synthetaza)) do các phương pháp gieo hạt thông thường hoặc kỹ thuật gen. Ví dụ về cây trồng có khả năng dung nạp imidazolinon, ví dụ imazamox, bằng phương pháp gây giống thông thường là cây cải dầu mùa hè Clearfield® (canola). Ví dụ về cây trồng được dung nạp chất diệt cỏ bằng phương pháp gen bao gồm các giống ngô kháng glyphosat và kháng glufosinat có bán ngoài thị trường dưới các tên thương mại là RoundupReady® và LibertyLink®.

Thuật ngữ “cây trồng” cũng được hiểu là bao gồm cây trồng thu hoạch có thể được biến đổi bằng kỹ thuật tái tổ hợp ADN mà chúng có khả năng tổng hợp một hoặc nhiều độc tố có hoạt tính chọn lọc, như đã biết, ví dụ, từ vi khuẩn tạo độc tố, cụ thể là độc tố của *Bacillus*.

Độc tố có thể được biểu hiện bằng cây trồng chuyển gen bao gồm, ví dụ, protein diệt côn trùng, ví dụ protein diệt côn trùng từ *Bacillus cereus* hoặc *Bacillus popilliae*; hoặc protein diệt côn trùng sinh dưỡng từ *Bacillus thuringiensis*, như δ -nội độc tố, ví dụ CryIA(b), CryIA(c), CryIF, CryIF(a2), CryIIA(b), CryIIIA, CryIIIB(b1) hoặc Cry9c, hoặc protein diệt côn trùng sinh dưỡng (VIP), ví dụ VIP1, VIP2, VIP3 hoặc VIP3A; hoặc protein diệt côn trùng của vi khuẩn ký sinh giun tròn, ví dụ *Photorhabdus* spp. hoặc *Xenorhabdus* spp., như *Photorhabdus luminescens*, *Xenorhabdus nematophilus*; độc tố được tạo bởi động vật, như độc tố bọ cạp, độc tố của nhện, độc tố của ong bắp cày và độc tố thần kinh đặc hiệu côn trùng khác; độc tố được tạo ra do nấm, như độc tố *Streptomyces*, lectin thực vật, như lectin đậu Hà Lan, lectin đại mạch hoặc lectin cây bạch đầu ông; agglutinin; chất ức chế proteinaza, như chất ức chế trypsin, chất ức chế serin proteaza, patatin, xystatin, chất ức chế papain; protein vô hoạt ribosom (RIP), như rixin, RIP ngô, abrin, luffin, saporin hoặc bryodin; enzym chuyển hoá steroid, như 3-hydroxysteroidoxidaza, ecdysteroid-UDP-glycosyl-transferaza, cholesterol oxidaza, chất ức chế ecdyson, HMG-COA-reductaza, chất chặn kênh ion, như chất chặn kênh natri hoặc canxi, esterase hormon dậy thì, thụ thể hormon lợi tiểu, stilben synthaza, bibenzyl synthaza, chitinaza và glucanaza.

Theo tài liệu của sáng chế có thể hiểu được bởi δ -nội độc tố, ví dụ CryIA(b), CryIA(c), CryIF, CryIF(a2), CryIIA(b), CryIIIA, CryIIIB(b1) hoặc Cry9c, hoặc protein diệt côn trùng sinh dưỡng (VIP), ví dụ VIP1, VIP2, VIP3 hoặc VIP3A, cũng biểu hiện độc tố lai, độc tố bị cắt và độc tố được biến đổi. Độc tố lai được tạo ra tái tổ hợp bởi sự kết hợp mới của các miền khác nhau của các protein này (xem, ví dụ, WO 02/15701). Độc tố bị cắt, ví dụ CryIA(b) bị cắt, là đã biết. Trong trường hợp độc tố bị cắt, một hoặc nhiều axit amin của độc tố có mặt trong tự nhiên được thay thế. Trong việc thay thế các axit amin này, tốt hơn là trình tự nhận biết proteaza có mặt không tự nhiên được chèn vào trong độc tố, như, ví dụ, trong trường hợp CryIIIA055, trình tự nhận biết cathepsin-D được chèn vào trong độc tố CryIIIA (xem WO 03/018810).

Ví dụ độc tố này hoặc cây trồng chuyển gen có khả năng tổng hợp các độc tố này được bộc lộ, ví dụ, trong các tài liệu sáng chế EP-A-0 374 753, WO 93/07278, WO 95/34656, EP-A-0 427 529, EP-A-451 878 và WO 03/052073.

Quy trình điều chế của cây trồng chuyển gen này nói chung đã biết đối với chuyên gia trong lĩnh vực và được mô tả, ví dụ, trong các công bố nêu trên. Axit deoxyribonucleic mã hóa typ CryI và việc điều chế đã biết, ví dụ, từ các tài liệu sáng chế WO 95/34656, EP-A-0 367 474, EP-A-0 401 979 và WO 90/13651.

Độc tố được chứa trong cây trồng chuyển gen cho sự dung nạp cây trồng với côn trùng có ích. Côn trùng này có thể xuất hiện trong nhóm côn trùng phân loại bất kỳ, mà cụ thể là được tìm thấy phổ biến ở bộ cánh cứng (bộ cánh cứng), côn trùng hai cánh (bộ sâu hai cánh) và bướm (bộ bướm).

Cây trồng chuyển gen chứa một hoặc nhiều gen mã hoá sự kháng thuốc diệt côn trùng và biểu hiện một hoặc nhiều độc tố là đã biết và một trong số chúng là sẵn có. Ví dụ các cây trồng này là: YieldGard® (loại ngô biểu hiện độc tố CryIA(b)); YieldGard Rootworm® (loại ngô biểu hiện độc tố CryIIIB(b1)); YieldGard Plus® (loại ngô biểu hiện độc tố CryIA(b) và a CryIIIB(b1)); Starlink® (loại ngô biểu hiện độc tố Cry9(c)); Herculex I® (loại ngô biểu hiện độc tố CryIF(a2) và enzym phosphinothrixin N-axetyltransferaza (PAT) để đạt được dung nạp thuốc diệt cỏ glufosinat amoni); NuCOTN 33B® (loại cây bông biểu hiện độc tố CryIA(c)); Bollgard I® (loại cây bông biểu hiện độc tố CryIA(c)); Bollgard II® (loại cây bông biểu hiện độc tố CryIA(c) và CryIIA(b)); VIPCOT® (loại cây bông biểu hiện độc tố VIP); NewLeaf® (khoai tây biểu hiện độc tố CryIIIA); NatureGard® Agrisure® GT Advantage (GA21 đặc điểm dung nạp glyphosat), Agrisure® CB Advantage (Bt11 đặc điểm sâu ngô (CB)) và Protecta®.

Ví dụ khác về cây trồng chuyển gen này là:

1. Ngô Bt11 từ Syngenta Seeds SAS, Chemin de l'Hobit 27, F-31 790 St. Sauveur, France, số đăng ký C/FR/96/05/10. Zea may được biến đổi gen được tạo khả năng chống sự tấn công bởi sâu ngô Châu Âu (*Ostrinia nubilalis* và *Sesamia nonagrioides*) bằng sự biểu hiện gen của độc tố CryIA(b) bị cắt. Ngô Bt11 cũng biểu hiện chuyển gen enzym PAT để thu được sự dung nạp thuốc diệt cỏ glufosinat amoni.

2. Ngô Bt176 từ Syngenta Seeds SAS, Chemin de l'Hobit 27, F-31 790 St. Sauveur, France, số đăng ký C/FR/96/05/10. Zea may được biến đổi gen được tạo khả năng chống sự tấn công bởi sâu ngô Châu Âu (*Ostrinia nubilalis* và *Sesamia nonagrioides*) bằng sự biểu hiện gen của độc tố CryIA(b). Ngô Bt176 cũng biểu hiện chuyển gen enzym PAT để thu được sự dung nạp thuốc diệt cỏ glufosinat amoni.

3. Ngô MIR604 từ Syngenta Seeds SAS, Chemin de l'Hobit 27, F-31 790 St. Sauveur, France, số đăng ký C/FR/96/05/10. Ngô được tạo ra sự kháng côn trùng bằng sự biểu hiện gen của độc tố CryIIIA được biến đổi. Độc tố này là Cry3A055 được biến đổi bằng cách chèn trình tự nhận biết cathepsin-D-proteaza. Sự tạo thành cây ngô chuyển gen được mô tả trong WO 03/018810.

4. MON 863 Ngô từ Monsanto Europe S.A. 270-272 Avenue de Tervuren, B-1150 Brussel, Bỉ, số đăng ký C/DE/02/9. MON 863 biểu hiện độc tố CryIIIB(b1) và có khả năng kháng một số côn trùng bộ cánh cứng.

5. Bông IPC 531 từ Monsanto Europe S.A. 270-272 Avenue de Tervuren, B-1150 Brussels, Bỉ, số đăng ký C/ES/96/02.

6. Ngô 1507 từ Pioneer Overseas Corpon, Avenue Tedesco, 7 B-1160 Brussels, Bỉ, số đăng ký C/NL/00/10. Ngô được biến đổi gen để biểu hiện Cry1F để thu được sự kháng côn trùng bộ cánh vảy và protein PAT để đạt được sự dung nạp thuốc diệt cỏ glufosinat amoni.

7. Ngô NK603 × MON 810 từ Monsanto Europe S.A. 270-272 Avenue de Tervuren, B-1150 Brussels, Bỉ, số đăng ký C/GB/02/M3/03. Bao gồm giống ngô lai được gieo hạt thông thường bằng cách lai giống được biến đổi gen NK603 và MON 810. NK603 × MON 810 Ngô biến đổi gen biểu hiện protein CP4 EPSPS, thu được từ *Agrobacterium sp.* chủng CP4, tạo khả năng dung nạp thuốc diệt cỏ Roundup® (chứa glyphosat), và độc tố CryIA(b) cũng thu được từ *Bacillus thuringiensis subsp. kurstaki* mang lại khả năng dung nạp đối với bộ cánh vảy, bao gồm sâu ngô Châu Âu.

Cây trồng chuyển gen của thực vật kháng côn trùng cũng được mô tả trong BATS (Zentrum für Biosicherheit und Nachhaltigkeit, Zentrum BATS, Clarastrasse 13, 4058 Basel, Thụy sỹ) Report 2003.

Thuật ngữ “cây trồng” được hiểu là cũng bao gồm cây trồng thu hoạch cũng được biến đổi bằng cách sử dụng kỹ thuật tái tổ hợp ADN mà chúng có khả năng tổng hợp chất chống mầm bệnh có hoạt tính chọn lọc, như, ví dụ, thuật ngữ “protein liên quan đến mầm bệnh” (PRPs xem ví dụ, EP-A-0 392 225). Ví dụ về chất và cây trồng chuyển gen chống mầm bệnh có thể tổng hợp chất chống mầm bệnh này là đã biết, ví dụ, từ các tài liệu sáng chế EP-A-0 392 225, WO 95/33818, và EP-A-0 353 191. Phương pháp tạo thành cây trồng chuyển gen này nói chung là đã biết với chuyên gia trong lĩnh vực và được mô tả, ví dụ, trong các công bố nêu trên.

Chất chống mầm bệnh có thể được biểu hiện bởi cây trồng chuyển gen này bao gồm, ví dụ, chất chặn kênh ion, như chất chặn kênh natri và canxi, ví dụ, độc tố virut KP1, KP4 hoặc KP6; stilben synthaza; bibenzyl synthaza; chitinaza; glucanaza; thuật ngữ “protein liên quan đến mầm bệnh” (PRPs; xem ví dụ EP-A-0 392 225); chất chống mầm bệnh được tạo thành bởi vi sinh vật, ví dụ kháng sinh peptit hoặc kháng sinh dị vòng (xem ví dụ WO 95/33818) hoặc protein hoặc nhân tố polypeptit được bao gồm trong bảo vệ mầm bệnh thực vật (thuật ngữ “gen chống bệnh thực vật”, như được mô tả trong WO 03/000906).

Các lĩnh vực khác sử dụng các hợp chất và chế phẩm theo sáng chế là bảo vệ hàng hoá bảo quản và kho bảo quản và bảo vệ nguyên liệu thô, như gỗ, nguyên liệu dệt, lớp phủ sàn nhà hoặc toà nhà, và ngoài ra còn trong khu vệ sinh, cụ thể là bảo vệ con người, vật nuôi trong nhà và thú nuôi hữu ích chống lại sinh vật gây hại của các loại nêu trên.

Trong khu vệ sinh, các hợp chất và chế phẩm theo sáng chế có hoạt tính chống lại vật ký sinh bên ngoài như ve bét cứng, ve bét mềm, ghẻ, ve bét cây thu hoạch, ruồi (đốt và đậu), ấu trùng ruồi ký sinh, chấy, chấy tóc, rận chim, và bọ chết.

Ví dụ các sinh vật ký sinh này là:

Bộ Anoplurida: *Haematopinus* spp., *Linognathus* spp., *Pediculus* spp. và *Phthirus* spp., *Solenopotes* spp..

Bộ Mallophagida: *Trimenopon* spp., *Menopon* spp., *Trinoton* spp., *Bovicola* spp., *Werneckiella* spp., *Lepikentron* spp., *Damalina* spp., *Trichodectes* spp. và *Felicola* spp..

Bộ sâu hai cánh bộ phụ Nematocerina và Brachycerina, ví dụ *Aedes* spp., *Anopheles* spp., *Culex* spp., *Simulium* spp., *Eusimulium* spp., *Phlebotomus* spp., *Lutzomyia* spp., *Culicoides* spp., *Chrysops* spp., *Hybomitra* spp., *Atylotus* spp., *Tabanus* spp., *Haematopota* spp., *Philipomyia* spp., *Braula* spp., *Musca* spp., *Hydrotaea* spp., *Stomoxys* spp., *Haematobia* spp., *Morellia* spp., *Fannia* spp., *Glossina* spp., *Calliphora* spp., *Lucilia* spp., *Chrysomyia* spp., *Wohlfahrtia* spp., *Sarcophaga* spp., *Oestrus* spp., *Hypoderma* spp., *Gasterophilus* spp., *Hippobosca* spp., *Lipoptena* spp. và *Melophagus* spp..

Bộ Siphonaptera, ví dụ *Pulex* spp., *Ctenocephalogenus* spp., *Xenopsylla* spp., *Ceratophyllus* spp..

Bộ Heteroptera, ví dụ *Cimex* spp., *Triatoma* spp., *Rhodnius* spp., *Panstrongylus* spp..

Bộ Blattellidae, ví dụ *Blattella orientalis*, *Periplaneta americana*, *Blattella germanica* và *Supella* spp..

Lớp phụ Acaria (Acarida) và các bộ Meta- và Meso-stigmata, ví dụ *Argas* spp., *Ornithodoros* spp., *Otobius* spp., *Ixodes* spp., *Amblyomma* spp., *Boophilus* spp., *Dermacentor* spp., *Haemaphysalis* spp., *Hyalomma* spp., *Rhipicephalus* spp., *Dermanyssus* spp., *Raillietia* spp., *Pneumonyssus* spp., *Sternostoma* spp. và *Varroa* spp..

Bộ Actinotrichida (Prostigmata) và Acaridida (Astigmata), ví dụ *Acarapis* spp., *Cheyletiella* spp., *Ornithocheyletia* spp., *Myobia* spp., *Psorergates* spp., *Demodex* spp., *Trombicula* spp., *Listrophorus* spp., *Acarus* spp., *Tyrophagus* spp., *Caloglyphus* spp., *Hypodectes* spp., *Pterolichus* spp., *Psoroptes* spp., *Chorioptes* spp., *Otodectes* spp., *Sarcoptes* spp., *Notoedres* spp., *Knemidocoptes* spp., *Cytodites* spp. và *Laminosioptes* spp..

Các hợp chất và chế phẩm theo sáng chế còn thích hợp để bảo vệ chống lại sự phá hoại của côn trùng trong trường hợp các vật liệu như gỗ, vải, nhựa, keo, keo dán, sơn, giấy, bìa, da, chất phủ sàn nhà và toà nhà.

Chế phẩm theo sáng chế có thể được sử dụng, ví dụ, chống lại sinh vật gây hại sau đây: bọ cánh cứng như *Hylotrupes bajulus*, *Clophorus pilosis*, *Anobium punctatum*, *Xestobium rufovillosum*, *Ptilinuspecticornis*, *Dendrobium pertinex*, *Ernobiusmollis*, *Priobium carpini*, *Lyctus brunneus*, *Lyctus africanus*, *Lyctus planicollis*, *Lyctus linearis*, *Lyctus pubescens*, *Trogoxylon aequale*, *Minthesrugicollis*, *Xyleborus spec.*, *Tryptodendron spec.*, *Apate monachus*, *Bostrychus capucins*, *Heterobostrychus brunneus*, *Sinoxylon spec.* và *Dinoderus minutus*, và cũng như bộ cánh màng như *Sirex juvencus*, *Urocerus gigas*, *Urocerus gigas taignus* và *Urocerus augur*, và termites như *Kaloterms flavicollis*, *Cryptoterms brevis*, *Heteroterms indicola*, *Reticuliterms flavipes*, *Reticuliterms santonensis*, *Reticuliterms lucifugus*, *Mastoterms darwiniensis*, *Zootermopsis nevadensis* và *Coptoterms formosanus*, và bristletails như *Lepisma saccharina*.

Do đó, sáng chế đề xuất phương pháp diệt và phòng trừ côn trùng, ve bét, giun tròn hoặc nhuyễn thể bao gồm áp dụng lượng có hiệu chất diệt côn trùng, ve bét, giun tròn hoặc nhuyễn thể của hợp chất có công thức I, hoặc chế phẩm chứa hợp chất có công thức I, đến sinh vật gây hại, nơi khu trú của sinh vật gây hại, hoặc thực vật dễ bị tấn công bởi sinh vật gây hại ngoại trừ phương pháp điều trị cơ thể người hoặc động vật bằng phương pháp phẫu thuật hoặc phương pháp chẩn đoán và trị liệu thực hành trên cơ thể người hoặc động vật. Hợp chất có công thức I tốt hơn là được sử dụng chống lại côn trùng hoặc ve bét.

Như được sử dụng ở đây thuật ngữ “thực vật” bao gồm cây giống, cây bụi và cây.

Ngoài việc thể hiện hoạt tính diệt côn trùng và diệt ve bét và đặc tính ưu việt, thành phần hoạt tính theo sáng chế được đặc trưng bởi khả năng tương thích thực vật/cây trồng tốt. Dưới phương pháp áp dụng khác nhau, các hợp chất có công thức I, hoặc chế phẩm của nó theo sáng chế, thể hiện sự dung nạp thực vật/cây trồng tốt nhờ đó sự phá hoại thực vật/cây trồng (độc tốt thực vật) được giảm đáng kể. Thuật ngữ “cây trồng” và “thực vật” được hiểu như được xác định trên đây, trong đó thuật ngữ “phương pháp áp dụng” được đề cập dưới đây.

Do đó, sáng chế cũng đề cập đến chế phẩm diệt sinh vật gây hại như nhũ đặc, huyền phù cô đặc, dung dịch phun trực tiếp hoặc pha loãng, bột nhão phết, nhũ loãng,

bột tan, bột phân tán, bột thấm ướt, bụi, hạt hoặc bao nang trong chất polyme, bao gồm ít nhất một trong số các thành phần hoạt tính theo sáng chế và được chọn phù hợp với trường hợp cụ thể và chiếm ưu thế.

Trong các chế phẩm này, thành phần hoạt tính được dùng ở dạng tinh khiết, thành phần hoạt tính rắn ví dụ ở kích thước hạt đặc biệt, hoặc, tốt hơn là, cùng với ít nhất một trong số các chất phụ trợ thường được sử dụng trong lĩnh vực có công thức tition, như chất kéo dài, ví dụ dung môi hoặc chất mang rắn, hoặc như hợp chất có hoạt tính bề mặt (chất có hoạt tính bề mặt).

Ví dụ về dung môi thích hợp là: hydrocarbon thơm không được hydro hoá hoặc được hydro hoá, tốt hơn là phân đoạn từ C8 đến C12 của alkylbenzen, như hỗn hợp xylen, naphthalen hoặc tetrahydronaphthalen được alkyl hoá, hydrocarbon béo hoặc vòng béo, như parafin hoặc xyclohexan, rượu như etanol, propanol hoặc butanol, glycol và ete hoặc este như propylen glycol, dipropylen glycol ete, etylen glycol hoặc etylen glycol monometyl ete hoặc etylen glycol monoetyl ete, keton, như xyclohexanon, isophoron hoặc rượu diaxeton, dung môi phân cực mạnh, như N-metylpyrrolid-2-on, dimetyl sulfoxit hoặc N,N-dimetylformamit, nước, dầu thực vật không epoxy hoá hoặc epoxy hoá, cải dầu, thầu dầu, dừa hoặc dầu đậu nành và dầu silicon không epoxy hoá hoặc epoxy hoá.

Chất mang rắn được sử dụng ví dụ cho bụi và bột phân tán là, quy định là, chất khoáng tự nhiên được nghiền như canxit, đá tal, cao lanh, montmorillonit hoặc atapulgit. Để cải thiện đặc tính vật lý, cũng có thể thêm silic oxit phân tán nhiều hoặc polyme hấp thụ phân tán cao. Chất mang hấp phụ hạt thích hợp là loại xốp, như đá bọt, đá mặt gạch, sepiolit hoặc bentonit, và nguyên liệu chất mang không hấp thụ thích hợp là hoặc cát. Thêm vào đó, số lượng lớn nguyên liệu hạt có bản chất vô cơ hoặc hữu cơ có thể được sử dụng, cụ thể là cặn thực vật dolomit hoặc tán nhỏ.

Hợp chất có hoạt tính bề mặt thích hợp là phụ thuộc vào loại thành phần hoạt tính được điều chế, chất có hoạt tính bề mặt hoặc hỗn hợp thành phần hoạt tính bề mặt không điện ly, cation và/hoặc anion có đặc tính nhũ hoá, phân tán và thấm ướt. Chất có hoạt tính bề mặt nêu dưới đây chỉ được xét làm ví dụ; lượng lớn chất có hoạt tính bề mặt khác thường được sử dụng trong lĩnh vực của chế phẩm và thích hợp theo sáng chế được mô tả trong tài liệu liên quan.

Chất có hoạt tính bề mặt không điện ly là, cụ thể là, hợp chất polyglycol ete của rượu béo hoặc vòng béo, của axit no hoặc không no bão hoà hoặc alkyl phenol nằm trong khoảng từ 3 đến 30 glycol nhóm ete và nằm trong khoảng từ 8 đến 20 nguyên tử cacbon trong gốc hydrocarbon (vòng) béo hoặc nằm trong khoảng từ 6 đến 18 nguyên tử cacbon trong gốc alkyl của alkyl phenol. Ngoài ra, thích hợp là sản phẩm cộng polyetylen oxit hoà tan trong nước với polypropylen glycol, etylendiaminpolypropylen glycol hoặc alkyl polypropylen glycol nằm trong khoảng từ 1 đến 10 nguyên tử cacbon trong chuỗi alkyl và nằm trong khoảng từ 20 đến 250 nhóm etylen glycol ete và nằm trong khoảng từ 10 đến 100 nhóm propylen glycol ete. Thông thường, các hợp chất nêu trên chứa từ 1 đến 5 đơn vị etylen glycol/đơn vị propylen glycol. Các ví dụ có thể được đề cập là nonylphenoxypolyetoxyetanol, dầu thầu dầu polyglycol ete, các sản phẩm cộng polypropylen glycol/polyetylen oxit, tributylphenoxypolyetoxyetanol, polyetylen glycol hoặc octylphenoxypolyetoxyetanol. Ngoài ra thích hợp là este của axit béo của polyoxyetylen sorbitan, như polyoxyetylen sorbitan trioleat.

Chất có hoạt tính bề mặt cation là, cụ thể là, muối amoni bậc bốn nói chung có ít nhất một gốc alkyl có từ 8 đến 22 nguyên tử C là phần tử thế và khi phần tử thế khác (không halogen hoá hoặc halogen hoá) alkyl hoặc hydroxyalkyl thấp hơn hoặc gốc benzyl. Muối tốt hơn là dưới dạng halogenua, metylsulfat hoặc etylsulfat. Ví dụ là stearyltrimetylamonium clorua và benzylbis(2-cloetyl)etylamonium bromua.

Ví dụ chất có hoạt tính bề mặt anion thích hợp là xà phòng hoà tan trong nước hợp chất có hoạt tính bề mặt tổng hợp hoà tan trong nước. Ví dụ xà phòng thích hợp là muối amoni kiềm hoặc kiềm thổ hoặc (không no hoặc no) của axit béo có từ 10 đến 22 nguyên tử C, như muối natri hoặc kali của axit oleic hoặc stearic, hoặc của hỗn hợp axit béo tự nhiên có thể thu được, ví dụ, từ dầu dừa hoặc dầu nhưa thông; đề cập trên cũng phải được làm từ metyl taurat của axit béo. Tuy nhiên, chất có hoạt tính bề mặt tổng hợp được sử dụng thường xuyên hơn, cụ thể là sulfonat béo, sulfat béo, hợp chất benzimidazol sulfonat hoá hoặc alkylaryl sulfonat. Thông thường, sulfonat béo và sulfat béo là kiềm hoặc kiềm thổ hoặc muối amoni (được thế hoặc không được thế) và chúng thường có gốc alkyl nằm trong khoảng từ 8 đến 22 nguyên tử C, alkyl cũng được hiểu là bao gồm gốc alkyl của các gốc axyl; các ví dụ có thể được đề cập là muối natri hoặc canxi của axit lignosulfonic, của este dodexylsulfuric hoặc của hỗn hợp sulfat rượu béo được điều chế từ axit béo tự nhiên. Nhóm này cũng bao gồm muối của

este sulfuric và axit sulfonic của sản phẩm cộng rượu béo/etylen oxit. hợp chất benzimidazol sulfonat hoá tốt hơn là chưa 2 nhóm sulfonyl và gốc axit béo nằm trong khoảng từ 8 đến 22 nguyên tử C. Ví dụ alkylarylsulfonat là natri, canxi hoặc trietanolamoni của axit dexylbensensulfonic, của axit dibutyl-naphthalensulfonic hoặc của sản phẩm ngưng naphthalensulfonic axit/formaldehyt. Ngoài ra cũng là, hơn nữa, phosphat thích hợp, như muối của phosphoric este của sản phẩm cộng p-nonylphenol/(4-14)etylen oxit, hoặc phospholipit. Phosphat thích hợp hơn là tris-este của axit phosphoric với rượu béo hoặc thơm và/hoặc bis-este của axit alkyl phosphonic với rượu béo hoặc thơm, là thuốc phụ trợ loại dầu cao áp. Tris-este này được mô tả, ví dụ, trong các tài liệu sáng chế WO0147356, WO0056146, EP-A-0579052 hoặc EP-A-1018299 hoặc có sẵn ngoài thị trường dưới tên hoá học của chúng. Tris-este của axit phosphoric được ưu tiên để sử dụng trong chế phẩm mới là tris-(2-etylhexyl) phosphat, tris-n-octyl phosphat và tris-butoxyetyl phosphat, trong đó tris-(2-etylhexyl) phosphat được ưu tiên nhất. Bis-este thích hợp của axit alkyl phosphonic là bis-(2-etylhexyl)-(2-etylhexyl)-phosphonat, bis-(2-etylhexyl)-(n-octyl)-phosphonat, dibutyl-butyl phosphonat và bis(2-etylhexyl)-tripropylen-phosphonat, trong đó bis-(2-etylhexyl)-(n-octyl)-phosphonat là đặc biệt ưu tiên.

Chế phẩm theo sáng chế tốt hơn là có thể còn bao gồm chất phụ gia chứa dầu có gốc thực vật hoặc động vật, dầu khoáng, alkyl este của dầu này hoặc hỗn hợp của dầu này và hợp chất dầu. Lượng phụ gia dầu được sử dụng trong chế phẩm theo sáng chế nói chung nằm trong khoảng từ 0,01 đến 10%, dựa trên hỗn hợp phun. Ví dụ, phụ gia dầu có thể được thêm vào bình phun ở nồng độ mong muốn sau khi hỗn hợp hỗn hợp phun được điều chế. Phụ gia dầu được ưu tiên chứa dầu khoáng hoặc dầu có gốc thực vật, ví dụ, dầu hạt cải như ADIGOR® và MERO®, dầu oliu hoặc dầu hương dương, dầu thực vật nhũ hoá, như AMIGO® (Rhône-Poulenc Canada Inc.), alkyl este của dầu có gốc thực vật, ví dụ, hợp chất metyl, hoặc dầu có gốc động vật, như dầu cá hoặc mỡ cừu. Chất phụ gia được ưu tiên chứa, ví dụ, thành phần hoạt tính cần thiết 80% trọng lượng alkyl este dầu cá và 15% trọng lượng dầu hạt cải metyl hoá, và ngoài ra 5% trọng lượng chất nhũ hoá thông thường và chất biến đổi pH. Cụ thể là phụ gia dầu được ưu tiên chứa alkyl este của axit béo C₈-C₂₂, cụ thể là hợp chất metyl của axit béo C₁₂-C₁₈, ví dụ, metyl este của axit lauric, axit palmitic và axit oleic, là quan trọng. Este là đã biết như metyl laurat (CAS-111-82-0), metyl palmitat (CAS-112-39-0) và metyl

oleat (CAS-112-62-9). Hợp chất methyl este của axit béo được ưu tiên là Emery® 2230 và 2231 (Cognis GmbH). Hợp chất đó và hợp chất dầu khác là đã biết từ tài liệu The Compendium of Herbicide Adjuvants, 5th Edition, Southern Illinois University, 2000. Ngoài ra, axit béo alkoxyl hoá có thể được sử dụng làm chất phụ gia trong chế phẩm sáng chế cũng như chất phụ gia bazơ hoá polymethylsiloxan được mô tả trong WO08/037373.

Sự áp dụng và hoạt động của chất phụ gia dầu còn có thể được cải thiện bằng cách kết hợp chúng với chất hoạt tính bề mặt, như chất có hoạt tính bề mặt không điện ly, anion hoặc cation. Ví dụ về chất có hoạt tính bề mặt anion, không điện ly và cation phù hợp được liệt kê trong trang 7 và 8 của WO 97/34485. Chất có hoạt tính bề mặt được ưu tiên là chất có hoạt tính bề mặt anion của loại dodexylbenzylsulfonat, cụ thể là muối canxi của nó, và chất có hoạt tính bề mặt không điện ly của loại rượu béo etoxyl hoá. Ưu tiên đặc biệt là rượu béo C₁₂-C₂₂ etoxyl hoá có độ etoxy hoá nằm trong khoảng từ 5 đến 40. Ví dụ về chất có hoạt tính bề mặt sẵn có ngoài thị trường là loại Genapol (Clariant AG). Ưu tiên nữa là chất có hoạt tính bề mặt silicon, cụ thể là heptamethyltrisiloxan được biến đổi polyalkyl-oxit, có sẵn ngoài thị trường ví dụ như Silwet L-77®, và chất có hoạt tính bề mặt perfluorinat. Nồng độ của chất có hoạt tính bề mặt có mối quan hệ với tổng số chất phụ gia nói chung nằm trong khoảng từ 1 đến 30% khối lượng. Ví dụ chất phụ gia dầu chứa hỗn hợp dầu hoặc dầu khoáng hoặc hợp chất của nó với chất có hoạt tính bề mặt là Edenor ME SU®, Turbocharge® (Syngenta AG, CH) và Actipron® (BP Oil UK Limited, GB).

Chất có hoạt tính bề mặt nêu trên cũng có thể được sử dụng trong chế phẩm một mình, có nghĩa là không có chất phụ gia dầu.

Hơn nữa, bổ sung dung môi hữu cơ vào hỗn hợp phụ gia dầu/chất hoạt tính bề mặt có thể góp phần tăng cường hoạt tính.. Dung môi thích hợp là, ví dụ, Solvesso® (ESSO) và Aromatic Solvent® (Exxon Corpon). Nồng độ của dung môi này có thể nằm trong khoảng từ 10 đến 80% trọng lượng trên tổng trọng lượng. Chất phụ gia dầu này, có thể trong hỗn hợp với dung môi, được mô tả, ví dụ, trong US-A-4 834 908. Chất phụ gia dầu sẵn có ngoài thị trường được bộc lộ là đã biết dưới tên MERGE® (BASF Corpon). Chất phụ gia dầu còn được ưu tiên theo sáng chế là SCORE® (Syngenta Crop Protection Canada.)

Ngoài chất phụ gia dầu được liệt kê trên đây, để tăng cường hoạt tính của chế phẩm theo sáng chế cũng là có thể cho chế phẩm của alkylpyrrolidon, (ví dụ, Agrimax®) được thêm vào hỗn hợp phun. Chế phẩm của cao su tổng hợp như, ví dụ, hợp chất polyacrylamit, polyvinyl hoặc poly-1-p-menthen (ví dụ, Bond®, Courier® hoặc Emerald®) cũng có thể được sử dụng. Dung dịch chứa axit propionic, ví dụ, Eurogkem Pen-e-trate®, cũng có thể được trộn trong hỗn hợp phun làm chất tăng cường hoạt tính.

Thông thường, chế phẩm chứa từ 0,1 đến 99%, cụ thể là 0,1 đến 95%, thành phần hoạt tính của chế phẩm nằm trong khoảng từ 1 đến 99,9%, cụ thể là nằm trong khoảng từ 5 đến 99,9%, của ít nhất một thuốc phụ trợ rắn hoặc lỏng, có thể thường nằm trong khoảng từ 0 đến 25%, cụ thể là từ 0,1 đến 20%, của chế phẩm là chất có hoạt tính bề mặt (% trong mỗi trường hợp có nghĩa là khối lượng). Trong khi chế phẩm được cô đặc có xu hướng được ưu tiên làm chế phẩm thương mại, người tiêu dùng thường sử dụng chế phẩm pha loãng có nồng độ thành phần hoạt tính thấp hơn đáng kể. Chế phẩm được ưu tiên được tạo ra cụ thể như sau (% = phần trăm theo khối lượng):

Nhũ tương đậm đặc:

thành phần hoạt tính:	từ 1 đến 30%, tốt hơn là từ 10 đến 20%
chất có hoạt tính bề mặt:	từ 1 đến 95%, tốt hơn là từ 5 đến 50%, tốt hơn là từ 5 đến 20%
dung môi:	từ 5 đến 98%, tốt hơn là từ 70 đến 85%

Bụi:

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

Huyền phù cô đặc:

thành phần hoạt tính:	từ 5 đến 75%, tốt hơn là từ 10 đến 50%, tốt hơn nữa là từ 10 đến 40%
nước:	từ 94 đến 24%, tốt hơn là từ 88 đến 30%
chất có hoạt tính bề mặt:	từ 1 đến 40%, tốt hơn là từ 2 đến 30%

Huyền phù cô đặc bazơ hoá dầu:

thành phần hoạt tính:	từ 2 đến 75%, tốt hơn là từ 5 đến 50%, tốt hơn nữa là từ 10 đến 25%
dầu:	từ 94 đến 24%, tốt hơn là từ 88 đến 30%
chất có hoạt tính bề mặt:	từ 1 đến 40%, tốt hơn là từ 2 đến 30%

Bột thấm ướt:

thành phần hoạt tính:	từ 0,5 đến 90%, tốt hơn là từ 1 đến 80%, tốt hơn nữa là từ 25 đến 75%
chất có hoạt tính bề mặt:	từ 0,5 đến 20%, tốt hơn là từ 1 đến 15%
chất mang rắn:	từ 5 đến 99%, tốt hơn là từ 15 đến 98%

Hạt:

thành phần hoạt tính:	từ 0,5 đến 30%, tốt hơn là từ 3 đến 25%, tốt hơn nữa là từ 3 đến 15%
chất mang rắn:	từ 99,5 đến 70%, tốt hơn là từ 97 đến 85%

Tốt hơn là, thuật ngữ “thành phần hoạt tính” đề cập đến một trong số các hợp chất được chọn từ bảng 1 đến 116 được thể hiện trên đây. Ngoài ra còn đề cập đến hỗn hợp chất có công thức I, cụ thể là hợp chất được chọn từ bảng 1 đến 116 trên đây, với chất diệt côn trùng, thuốc diệt nấm, thuốc diệt cỏ, chất bảo vệ, chất phụ trợ và tương tự, hỗn hợp được bộc lộ cụ thể hơn dưới đây.

Chế phẩm còn chứa chất bổ sung lỏng, như chất ổn định, ví dụ dầu thực vật không epoxy hoá hoặc epoxi hoá (ví dụ, dầu dừa epoxy hoá, dầu hạt cải hoặc dầu đậu nành), chất chống tạo bọt, ví dụ dầu silicon, chất bảo quản, chất điều nhớt, chất kết dính và/hoặc chất dính; phân bón, cụ thể là nitơ chứa phân bón như amoni nitrat và ure như được mô tả trong WO08/017388, có thể tăng cường hiệu quả hợp chất sáng chế; hoặc thành phần hoạt tính khác để đạt được hiệu quả đặc biệt, ví dụ muối amoni hoặc phospho, cụ thể là halogenua, (hydro)sulphat, nitrat, (hydro)carbonat, xitrat, tartrat, formiat và axetat, như được mô tả trong WO07/068427 và WO07/068428, cũng có thể tăng cường hiệu quả của hợp chất sáng chế và có thể được sử dụng kết hợp với chất tăng độ thấm như axit béo alkoxal hoá; chất kích hoạt thuốc diệt vi khuẩn, diệt nấm, giun tròn, nhuyễn thể hoặc thuốc diệt cỏ.

Chế phẩm theo sáng chế được điều chế theo cách đã biết, với sự có mặt của chất bổ sung ví dụ bằng cách nghiền, sàng lọc và/hoặc nén thành phần hoạt tính rắn và với sự có mặt của ít nhất một chất bổ sung ví dụ bằng cách phối trộn kỹ và/hoặc nghiền thành phần hoạt tính chất bổ sung (các chất bổ sung). Các quy trình này để điều chế chế phẩm và sử dụng các hợp chất I để điều chế các chế phẩm này cũng là đối tượng của sáng chế.

Phương pháp áp dụng cho chế phẩm, đó là phương pháp diệt trừ các loại sinh vật gây hại nêu trên, như phun, phun sương, tạo bụi, quét, đắp, rắc hoặc tưới được lựa chọn để phù hợp với mục đích của trường hợp chiếm ưu thế - và sử dụng chế phẩm để diệt trừ sinh vật gây hại của loại được nêu trên là đối tượng khác của sáng chế. Thường thì tỷ lệ nồng độ nằm trong khoảng từ 0,1 đến 1000ppm, tốt hơn là nằm trong khoảng từ 0,1 đến 500ppm, của thành phần hoạt tính. Tỷ lệ áp dụng/hecta thường nằm trong khoảng từ 1 đến 2000g thành phần hoạt tính/hecta, cụ thể là nằm trong khoảng từ 10 đến 1000g/ha, tốt hơn nằm trong khoảng từ 10 đến 600g/ha.

Phương pháp áp dụng được ưu tiên trong lĩnh vực bảo vệ mùa màng là áp dụng vào lá của thực vật (áp dụng lá), có thể lựa chọn tần suất và tỷ lệ áp dụng để phù hợp với độ nguy hiểm của sự phá hoại do sinh vật gây hại gây ra. Theo cách khác, thành phần hoạt tính có thể đến với cây trồng thông qua hệ rễ (tác động hệ thống), bằng cách làm ướt nơi khu trú của thực vật bằng chế phẩm lỏng hoặc bằng thành phần hoạt tính kết hợp ở dạng rắn trong vùng khu trú của thực vật, ví dụ trong đất, ví dụ dưới dạng hạt (áp dụng vào đất). Trong trường hợp cây trồng là lúa gạo, hạt này có thể được xử lý trong cánh đồng ngập nước.

Chế phẩm theo sáng chế còn thích hợp để bảo vệ nguyên liệu cấy truyền thực vật, ví dụ hạt giống, như quả, củ hoặc hạt, hoặc thực vật ươm mầm, chống lại sinh vật gây hại của loại được nêu trên. Nguyên liệu cấy truyền có thể được xử lý bằng chế phẩm trước khi trồng, ví dụ hạt giống có thể được xử lý trước khi gieo hạt. Theo cách khác, chế phẩm có thể được áp dụng cho hạt giống (bao), bằng cách ngâm hạt trong chế phẩm lỏng hoặc áp dụng lớp chế phẩm rắn. Cũng có thể áp dụng chế phẩm khi nguyên liệu cấy truyền được trồng ở vị trí áp dụng, ví dụ trong luống hạt trong khi gieo. Phương pháp xử lý này cho vật liệu cấy truyền thực vật và vật liệu cấy truyền thực vật do đó được xử lý các đối tượng khác của sáng chế.

Phương pháp áp dụng khác của chế phẩm theo sáng chế còn bao gồm áp dụng nhỏ giọt trên đất, cắm một phần của thực vật như củ rễ hoặc thân, thấm ướt đất, cũng như phun vào đất. Phương pháp này đã được biết trong lĩnh vực.

Để áp dụng hợp chất có công thức I làm thuốc diệt côn trùng, thuốc diệt ve bét, thuốc diệt giun tròn hoặc thuốc diệt nhuễn thể với sinh vật gây hại, nơi khu trú của sinh vật gây hại, hoặc thực vật dễ bị tấn công bởi sinh vật gây hại, hợp chất có công thức I thường được điều chế thành chế phẩm, chế phẩm này bao gồm, thêm vào hợp chất có công thức I, chất pha loãng hoặc chất mang trợ thích hợp và, tùy ý, chất phụ trợ chế phẩm dưới dạng chất có hoạt tính bề mặt (SFA) như được mô tả ở đây hoặc, ví dụ, trong EP-B-1062217. SFA là hoá chất có thể thay đổi đặc tính bề mặt (ví dụ, mặt phân giới lỏng/rắn, lỏng/khí hoặc lỏng/lỏng) bằng cách làm giảm sức căng bề mặt và do đó dẫn đến thay đổi đặc tính khác nhau (ví dụ, phân tán, nhũ hoá và thấm ướt). Ưu tiên tất cả các chế phẩm (cả chế phẩm rắn và lỏng) chứa, khối lượng nằm trong khoảng từ 0,0001 đến 95%, tốt hơn nữa là nằm trong khoảng từ 1 đến 85%, ví dụ nằm trong khoảng từ 5 đến 60%, của hợp chất có công thức I. Chế phẩm thường được sử dụng để diệt trừ sinh vật gây hại với điều kiện là hợp chất có công thức I được áp dụng ở tỷ lệ nằm trong khoảng từ 0,1g đến 10kg/hecta, tốt hơn là nằm trong khoảng từ 1g đến 6kg/hecta, tốt hơn nữa là nằm trong khoảng từ 1g đến 1kg/hecta.

Khi sử dụng cho hạt, hợp chất có công thức I được sử dụng ở tỷ lệ nằm trong khoảng từ 0,0001g đến 10g (ví dụ, 0,001g hoặc 0,05g), tốt hơn là nằm trong khoảng từ 0,005g đến 10g, tốt hơn nữa là từ 0,005g đến 4g/kilogram hạt giống.

Theo khía cạnh khác, sáng chế đề cập đến chế phẩm diệt côn trùng, diệt ve bét, diệt giun tròn hoặc nhuễn thể chứa lượng hiệu quả thuốc diệt côn trùng, diệt ve bét, diệt giun tròn hoặc nhuễn thể của hợp chất I và chất mang hoặc chất pha loãng thích hợp của chúng.

Theo khía cạnh khác nữa của sáng chế đề cập đến phương pháp tiêu diệt và phòng trừ sinh vật hại ở một vị trí mà bao gồm xử lý sinh vật hại hoặc vị trí sinh vật hại với lượng hiệu quả thuốc diệt côn trùng, diệt ve bét, diệt giun tròn hoặc nhuễn thể của chế phẩm chứa hợp chất có công thức I.

Các chế phẩm có thể được chọn từ một số các loại chế phẩm, bao gồm bột bụi (DP), bột tan được (SP), hạt tan trong nước (SG), hạt phân tán trong nước (WG), bột

ấm (WP), các hạt nhỏ (GR) (phân rã chậm hoặc nhanh), chất cô đặc tan được (SL), dầu trộn với dung dịch (OL), dung dịch khối lượng siêu thấp (UL), chất nhũ hóa cô đặc (EC), chất cô đặc phân tán được (DC), chất nhũ hóa (cả dầu trong nước (EW) và nước trong dầu (EO)), vi nhũ hóa (ME), chất huyền phù cô đặc (SC), chất huyền phù cô đặc trên dầu (OD), sol khí, chế phẩm dạng sương/khói, huyền phù viên nang (CS) và chế phẩm xử lý hạt giống. Loại chế phẩm bào chế được chọn trong bất kỳ trường hợp nào đều phụ thuộc vào mục đích dự kiến cụ thể và tính chất vật lý, hóa học và sinh học của hợp chất có công thức I.

Bột bụi (DP) có thể được điều chế bằng cách trộn hợp chất có công thức I với một hoặc nhiều chất pha loãng dạng rắn (ví dụ, đất sét tự nhiên, cao lanh, pyrophyllit, bentonit, nhôm oxit, montmorillonit, đất kieselguhr, đá phấn, đất tảo cát, canxi phosphat, canxi và magie carbonat, lưu huỳnh, đá vôi, flo, talc và các chất mang rắn hữu cơ và vô cơ khác) và nghiền hỗn hợp bằng máy móc thành bột mịn.

Bột tan được (SP) có thể điều chế bằng cách trộn hợp chất có công thức I với một hoặc nhiều muối vô cơ tan trong nước (như natri bicarbonat, natri carbonat hoặc magie sulphat) hoặc một hoặc nhiều chất rắn hữu cơ tan trong nước (như polysaccarit) và, thường là, một hoặc nhiều chất làm ẩm, một hoặc nhiều chất phân tán hoặc hỗn hợp của các chất trên để cải thiện khả năng phân tán/hòa tan trong nước. Sau đó, nghiền hỗn hợp này thành bột mịn. Các chế phẩm tương tự cũng có thể được nghiền thành hạt nhỏ để tạo thành hạt hòa tan trong nước (SG).

Bột ẩm (WP) có thể được điều chế bằng cách trộn hợp chất có công thức I với một hoặc nhiều chất pha loãng hoặc chất mang rắn, một hoặc nhiều chất làm ẩm và, tốt hơn, nếu một hoặc nhiều chất phân tán và, thường là, một hoặc nhiều chất huyền phù để tạo điều kiện phân tán trong dung dịch. Sau đó, hỗn hợp được nghiền thành bột mịn. Các chế phẩm tương tự cũng có thể được nghiền thành hạt nhỏ để tạo thành hạt phân tán trong nước (WG).

Hạt nhỏ (GR) có thể được tạo thành bằng cách nghiền thành hạt nhỏ hỗn hợp của hợp chất có công thức I và một hoặc nhiều chất pha loãng hoặc chất mang rắn dạng bột, hoặc từ các hạt rỗng được tạo thành trước bằng cách hấp thụ hợp chất có công thức I (hoặc dung dịch của chúng, trong chất thích hợp) trong vật liệu dạng hạt có lỗ (như đá bọt, đất sét attapulgit, đất tẩy màu, đất kieselguhr, đất tảo cát hoặc đất

trồng ngô) hoặc bằng cách hấp thụ hợp chất có công thức I (hoặc dung dịch của chúng, trong chất thích hợp) trên vật liệu lõi cứng (như cát, silicat, carbonat khoáng, sulphat hoặc phosphat) và làm khô nếu cần thiết. Các chất mà thường dùng để hỗ trợ sự hấp thụ hoặc sự hấp thụ bao gồm dung môi (như dung môi dầu béo và thơm, rượu, ete, keton và este) và chất bám dính (như polyvinyl axetat, rượu polyvinyl, dextrin, đường và dầu thực vật). Một hoặc nhiều chất bổ sung khác cũng có thể bao gồm trong các hạt nhỏ (ví dụ, chất nhũ hóa, chất làm ẩm hoặc chất phân tán).

Chất cô đặc phân tán được (DC) có thể điều chế bằng cách hòa tan hợp chất có công thức I trong nước hoặc dung môi hữu cơ, như keton, rượu hoặc glycol ete. Các dung dịch này có thể chứa chất hoạt động bề mặt (ví dụ, để cải thiện khả năng pha loãng trong nước hoặc ngăn ngừa sự kết tinh trong dung dịch phun).

Chất nhũ hóa cô đặc (EC) hoặc chất nhũ hóa dầu trong nước (EW) có thể được điều chế bằng cách hòa tan hợp chất có công thức I trong dung môi hữu cơ (thường chứa một hoặc nhiều chất làm ẩm, một hoặc nhiều chất nhũ hóa hoặc hỗn hợp của các chất trên). Dung môi hữu cơ thích hợp để sử dụng trong các EC bao gồm hydrocarbon thơm (như alkylbenzen hoặc alkyl-naphthalen, ví dụ, SOLVESSO 100, SOLVESSO 150 và SOLVESSO 200; SOLVESSO đã đăng ký nhãn hiệu), keton (như cyclohexanon hoặc methylcyclohexanon) và rượu (như rượu benzyl, rượu furfuryl hoặc butanol), N-alkylpyrrolidon (như N-methylpyrrolidon hoặc N-octylpyrrolidon), dimethyl amit của axit béo (như dimethylamit của axit béo C₈-C₁₀) và clorinat hydrocarbon. Sản phẩm EC có thể tự nhũ hóa bằng cách bổ sung nước, để sản xuất chất nhũ hóa với đầy đủ ổn định để cho phép áp dụng phun thông qua thiết bị thích hợp. Việc điều chế EW bao gồm thu hợp chất có công thức I như dung dịch lỏng (nếu nó không là dung dịch ở nhiệt độ phòng, nó có thể được tan chảy ở nhiệt độ hợp lý, thường là dưới 70°C) hoặc trong dung dịch (bằng cách hòa tan trong dung môi thích hợp) và sau đó nhũ hóa dung dịch thu được hoặc dung dịch vào trong nước chứa một hoặc nhiều SFA, dưới lực ép lớn, để thu chất nhũ hóa. Dung môi thích hợp được sử dụng trong EW bao gồm dầu thực vật, clorinat hydrocarbon (như clobenzen), dung môi thơm (như alkylbenzen hoặc alkyl-naphthalen) và các dung môi hữu cơ thích hợp khác mà có độ hòa tan thấp trong nước.

Vi nhũ hóa (ME) có thể được điều chế bằng cách trộn nước với hỗn hợp pha trộn của một hoặc nhiều dung môi với một hoặc nhiều SFA, để tự sản xuất chế phẩm

lỏng đẳng hướng thích hợp một cách nhiệt động. hợp chất có công thức I là có mặt đầu tiên trong nước hoặc hỗn hợp pha trộn dung môi /SFA. Các dung môi thích hợp để sử dụng trong ME bao gồm các dung môi mô tả ở trên đây để sử dụng trong EC hoặc EW. ME có thể là hệ thống dầu trong nước hoặc nước trong dầu (mà hệ thống có mặt có thể xác định bằng cách đo độ dẫn điện) và có thể thích hợp để trộn với nước thuốc diệt sinh vật hại hòa tan trong nước và trong dầu trong cùng một chế phẩm. ME là thích hợp để pha loãng trong nước, phần còn lại là vi nhũ hóa hoặc tạo thành nhũ tương dầu trong nước thông thường.

Huyền phù cô đặc (SC) có thể bao gồm huyền phù lỏng hoặc khan của các hạt nhỏ rắn không tan được nghiền mịn của hợp chất có công thức I. SC có thể được điều chế bằng cách đóng cục hoặc tạo hạt nghiền hợp chất có công thức I rắn trong môi trường thích hợp, thường với một hoặc nhiều chất phân tán, để sản xuất huyền phù dạng hạt mịn của hợp chất. Một hoặc nhiều chất làm ẩm có thể bao gồm trong chế phẩm và chất huyền phù có thể bao gồm để làm giảm tỷ lệ mà các hạt kết tủa. Nói cách khác, hợp chất có công thức I có thể được nghiền khô và bổ sung vào nước, chứa các chất mô tả ở trên đây, để thu sản xuất cuối cùng mong muốn.

Huyền phù cô đặc trên dầu (OD) có thể điều chế tương tự bằng cách tạo huyền phù các hạt nhỏ rắn mịn nghiền mịn không tan dạng huyền phù của hợp chất có công thức I trong chất lưu động hữu cơ (ví dụ, ít nhất một dầu khoáng hoặc dầu thực vật). OD cũng có thể bao gồm ít nhất một chất hoạt hóa thẩm thấu (ví dụ, rượu etoxylat hoặc hợp chất liên quan), ít nhất một chất hoạt động bề mặt không điện ly và/hoặc ít nhất một chất hoạt động bề mặt anion, và thường là ít nhất một chất bổ sung từ nhóm các chất nhũ hóa, chất ức chế sự tạo bọt, chất bảo quản, chất chống oxy hóa, thuốc nhuộm, và/hoặc vật liệu chất đệm trơ. OD được dự định và thích hợp cho sự pha loãng với nước trước khi sử dụng để sản xuất dung dịch phun với tính đủ tính ổn định để cho phép phun áp dụng thông qua thiết bị thích hợp.

Chế phẩm sol khí chứa hợp chất có công thức I và nhiên liệu thích hợp (ví dụ, *n*-butan). hợp chất có công thức I cũng có thể hoà tan hoặc phân tán trong môi trường thích hợp (ví dụ, nước hoặc dung dịch hỗn hợp nước, như *n*-propanol) để thu chế phẩm sử dụng trong bơm phun dẫn động bằng tay không áp lực.

Hợp chất có công thức I có thể trộn trong trạng thái khô với hỗn hợp để tạo thành chế phẩm thích hợp cho sản xuất, trong phần đính kèm, khối chứa hợp chất.

Huyền phù viên nang (CS) có thể được điều chế bằng phương pháp tương tự điều chế các chế phẩm EW nhưng thêm giai đoạn polyme hóa để thu dung dịch phân tán của dầu nhỏ giọt, mà mỗi dầu nhỏ giọt là bao gói bằng vỏ polyme và chứa hợp chất có công thức I và, tùy ý, chất mang hoặc pha loãng của chúng. Vỏ polyme có thể sản xuất bằng phản ứng đa trùng ngưng mặt phân giới hoặc bằng quy trình sinh giọt tụ. Chế phẩm có thể đề xuất để diệt trừ sự phân rã của hợp chất có công thức I và chúng có thể sử dụng để xử lý hạt giống. hợp chất có công thức I cũng có thể được phối chế trong màng polyme có thể bị vi khuẩn phân giải để diệt trừ sự phân rã của hợp chất.

Hợp chất có công thức I cũng có thể được phối chế để sử dụng cho xử lý hạt giống, ví dụ, như chế phẩm bột, bao gồm bột để xử lý hạt giống khô (DS), bột hòa tan trong nước (SS) hoặc bột phân tán trong nước để xử lý bùn (WS), hoặc như chế phẩm lỏng, bao gồm chất cô đặc chảy được (FS), dung dịch (LS) hoặc huyền phù viên nang (CS). Điều chế các chế phẩm DS, SS, WS, FS và LS là tương tự như nhau, khác biệt là, các chế phẩm DP, SP, WP, SC, OD và DC mô tả ở trên. Các chế phẩm để xử lý hạt giống có thể bao gồm chất để hỗ trợ sự bám dính của chế phẩm với hạt giống (ví dụ, dầu khoáng hoặc lớp chắn sự tạo màng).

Chế phẩm theo sáng chế có thể bao gồm một hoặc nhiều chất bổ sung để cải thiện tính chất sinh học của chế phẩm (ví dụ, bằng cách cải thiện độ ẩm, sự duy trì hoặc sự phân bố trên bề mặt; chống mưa trên bề mặt được xử lý; hoặc hấp thụ hoặc biến đổi hợp chất có công thức). Các chất bổ sung này bao gồm chất hoạt động bề mặt (SFA), chất bổ sung phun trên dầu, ví dụ, dầu khoáng, dầu thực vật hoặc dầu thực vật tự nhiên (như dầu đậu nành và dầu hạt nho), và hỗn hợp của các chất chất phụ trợ tăng cường sinh học khác (thành phần mà có thể hỗ trợ hoặc biến đổi hoạt động của hợp chất có công thức I). Sự tăng ảnh hưởng của hợp chất có công thức I có thể, ví dụ, để thu được bằng cách bổ sung muối amoni và/hoặc phosphoni, và/hoặc thông thường ít nhất một chất hoạt hóa thẩm thấu như rượu béo alkoxylat (ví dụ, metyl este dầu nho) hoặc este dầu thực vật.

Chất làm ẩm, chất phân tán và chất nhũ hóa có thể là chất hoạt động bề mặt (SFA) của loại cation, anion, lưỡng tính hoặc không điện ly.

Các chất SFA thích hợp của loại cation bao gồm hợp chất amoni bậc bốn (ví dụ, xetyltrimetyl amoni bromua), imidazolin và muối amin.

Các SFA anion thích hợp bao gồm muối kim loại kiềm của axit béo, muối của monoeste béo của axit sulphuric (ví dụ, natri lauryl sulphat), muối của hợp chất thơm sulphonat hóa (ví dụ, natri dodexylbensensulphonat, canxi dodexylbensensulphonat, butylnaphthalen sulphonat và hỗn hợp của natri di-*isopropyl*- và tri-*isopropyl*-naphthalen sulphonat), ete sulphat, ete rượu sulphat (ví dụ, natri laureth-3-sulphat), ete carboxylat (ví dụ, natri laureth-3-carboxylat), phosphat este (sản phẩm từ phản ứng giữa một hoặc nhiều rượu béo và axit phosphoric (mạnh hơn các mono-este) hoặc phospho pentoxit (mạnh hơn di-este), ví dụ, phản ứng giữa rượu lauryl và axit tetraphosphoric; ngoài ra các sản phẩm này có thể được etoxy hóa), sulphosuccinamat, parafin hoặc olefin sulphonat, taurat và lignosulphonat.

Các SFA của loại lưỡng tính bao gồm betain, propionat và glyxinat.

Các SFA của loại không điện ly bao gồm các sản phẩm ngưng của alkylen oxit, như etylen oxit, propylen oxit, butylen oxit hoặc hỗn hợp của chúng, với rượu béo (như rượu oleyl hoặc rượu xetyl) hoặc với alkylphenol (như octylphenol, nonylphenol hoặc octylcresol); este một phần dẫn xuất từ chuỗi axit béo dài hoặc hexitol anhydrit; các sản phẩm ngưng của các este một phần với etylen oxit; polyme khối (bao gồm etylen oxit và propylen oxit); alkanolamit; các este đơn (ví dụ, glycol este polyetylen của axit béo); amin oxit (ví dụ, lauryl dimetyl amin oxit); và lexitin.

Các chất huyền phù thích hợp bao gồm colloid ưa nước (như polysaccarit, polyvinylpyrrolidon hoặc natri carboxymetylxelluloza) và đất sét phòng (như bentonit hoặc atapulgit).

Hợp chất có công thức I có thể được ứng dụng bằng phương pháp ứng dụng của hợp chất trừ sinh vật gây hại bất kỳ đã biết. Ví dụ, nó có thể ứng dụng, phối chế hoặc không phối chế, cho sinh vật hại hoặc một vị trí của sinh vật hại (như môi trường sống của sinh vật hại, hoặc cây trồng sinh trưởng bị nhiễm ký sinh do các sinh vật hại) hoặc tới một phần của cây trồng, bao gồm tán lá, thân cây, cành hoặc rễ, tới hạt giống trước khi được trồng hoặc tới vùng khác mà cây trồng được phát triển hoặc được trồng (như đất xung quanh rễ, đất thông thường, lúa nước hoặc hệ thống trồng cây trong nước), trực tiếp hoặc được phun, phủ, áp dụng bằng cách nhúng, áp dụng như kem hoặc chế

phẩm nhão, áp dụng như dạng hơi nước hoặc áp dụng thông qua sự phân bố hoặc sự hợp chất của chế phẩm (như chế phẩm dạng hạt hoặc chế phẩm đóng gói trong túi hòa tan trong nước) trong đất hoặc môi trường lỏng.

Hợp chất có công thức I cũng có thể tiêm vào cây trồng hoặc phun lên thực vật sử dụng thiết bị phun điện động hoặc các phương pháp khối lượng thấp khác, hoặc áp dụng trên đất hoặc hệ thống dẫn nước trên không.

Chế phẩm được sử dụng như chế phẩm lỏng (dung dịch lỏng hoặc phân tán) thường được cung cấp dưới dạng cô đặc chứa tỷ lệ cao của thành phần hoạt tính, nồng độ được thêm vào nước trước khi sử dụng. Các nồng độ này, mà bao gồm DC, SC, OD, EC, EW, ME, SG, SP, WP, WG và CS, thường được yêu cầu để bảo quản trong thời gian dài và, sau khi bảo quản, có khả năng bổ sung vào nước để tạo thành chế phẩm lỏng mà còn lại sự đồng nhất cho một thời gian đủ để có thể cho chúng ứng dụng bằng các thiết bị phun thông thường. Các chế phẩm lỏng này có thể chứa một lượng không ổn định của hợp chất có công thức I (ví dụ, từ 0,0001 đến 10% trọng lượng) phụ thuộc vào mục đích mà chúng được sử dụng.

Hợp chất có công thức I có thể được sử dụng trong hỗn hợp với phân bón (ví dụ, phân bón chứa nitơ, kali hoặc phospho, và thường là amoni nitrat và/hoặc phân bón urê). Loại chế phẩm thích hợp bao gồm các hạt nhỏ phân bón. Hỗn hợp phù hợp chứa tối đa 25% trọng lượng của hợp chất có công thức I.

Do đó, sáng chế cũng đề cập đến chế phẩm phân bón chứa phân bón và hợp chất có công thức I.

Chế phẩm theo sáng chế có thể chứa các hợp chất khác có hoạt tính sinh học, ví dụ, chất dinh dưỡng vi lượng hoặc hợp chất có hoạt tính diệt nấm hoặc mà điều chỉnh cây trồng phát triển, có hoạt tính diệt cỏ, chất an toàn, diệt côn trùng, diệt giun tròn hoặc diệt ve bét.

Hợp chất có công thức I có thể là thành phần hoạt tính để của chế phẩm hoặc nó có thể trộn trước với một hoặc nhiều thành phần hoạt tính bổ sung như thuốc diệt sinh vật hại (côn trùng, ve bét, nhuyễn thể và giun tròn), thuốc diệt nấm, chất tăng cường, thuốc diệt cỏ, chất an toàn hoặc chất điều hòa tăng trưởng thực vật khi thích hợp. Do đó, hoạt tính của chế phẩm theo sáng chế có thể được mở rộng hơn và có thể có thuận lợi ngạc nhiên mà cũng có thể được mô tả, trong một ý nghĩa rộng hơn, như hoạt tính

hợp lực. Thành phần hoạt tính bổ sung có thể: đề cập đến một chế phẩm có quang phổ rộng hơn về hoạt tính hoặc tăng cường tính bền ở một vị trí; đề cập đến chế phẩm chứng minh tốt hơn khả năng dung nạp của thực vật/cây trồng bằng cách giảm độc tố thực vật; đề cập đến chế phẩm diệt trừ côn trùng trong từng giai đoạn phát triển khác nhau của chúng; chất tăng cường hoạt tính hoặc thực hiện hoạt tính (ví dụ, bằng cách tăng cường tốc độ của ảnh hưởng hoặc khắc phục khả năng kháng) của hợp chất có công thức I; hoặc giúp khắc phục hoặc ngăn cản sự phát triển của sự kháng lại của thành phần riêng lẻ. Thành phần hoạt tính bổ sung đặc biệt sẽ phụ thuộc vào lợi ích mong muốn của chế phẩm. Ví dụ về cách chế phẩm diệt sinh vật gây hại bao gồm dưới đây:

a) Pyrethroid, như permethrin, xypermethrin, fenvalerat, esfenvalerat, deltamethrin, xyhalothrin (đặc biệt là lambda-xyhalothrin), bifenthrin, fenpropathrin, xyfluthrin, tefluthrin, pyrethroid an toàn cho cá (ví dụ, ethofenprox), pyrethrin tự nhiên, tetramethrin, s-bioallethrin, fenfluthrin, prallethrin hoặc 5-benzyl-3-furylmethyl-(E)-(1R,3S)-2,2-dimethyl-3-(2-oxothiolan-3-ylidenemethyl)xyclopropan carboxylat;

b) Phosphat hữu cơ, như profenofos, sulprofos, axephat, methyl parathion, azinphos-methyl, demeton-s-methyl, heptenophos, thiometon, fenamiphos, monocrotophos, profenofos, triazophos, methamidophos, dimethoat, phosphamidon, malathion, clorpyrifos, phosalon, terbufos, fensulfothion, fonofos, phorat, phoxim, pirimiphos-methyl, pirimiphos-ethyl, fenitrothion, fosthiazat hoặc diazinon;

c) Carbamat (bao gồm aryl carbamat), như pirimicarb, triazamat, cloethocarb, carbofuran, furathiocarb, ethiofencarb, aldicarb, thiofurox, carbosulfan, bendiocarb, fenobucarb, propoxur, metomyl hoặc oxamyl;

d) Benzoyl urê, như diflubenzuron, triflumuron, hexaflumuron, flufenoxuron hoặc clorfluazuron;

e) Hợp chất thiếc hữu cơ, như xyhexatin, fenbutatin oxit hoặc azoxyclostin;

f) Pyrazol, như tebufenpyrat và fenpyroximat;

g) Macrolit, như avermectins hoặc milbemyxins, ví dụ, abamectin, emamectin benzoat, ivermectin, milbemyxin, hoặc spinosad, spinetoram hoặc azadirachtin;

h) Hormon hoặc pheromon;

- i) hợp chất clo hữu cơ như endosulfan, benzen hexaclorua, DDT, clodan hoặc dieldrin;
- j) Amidin, như clordimeform hoặc amitraz;
- k) Chất phun khói, như clopicrin, diclopropan, metyl bromua hoặc metam;
- l) hợp chất neonicotinoit như imidacloprít, thiacloprít, axetamiprit, clothianidin, nitenpyram, dinotefuran hoặc thiamethoxam;
- m) Diaxylyhydrazin, như tebufenozit, chromafenozit hoặc metoxyfenozit;
- n) Diphenyl ete, như diofenolan hoặc pyriproxifen;
- o) Indoxacarb;
- p) Clorfenapyr;
- q) Pymetrozin hoặc pyrifluquinazon;
- r) Spirotetramat, spiroadiclofen hoặc spiromesifen;
- s) Flubendiamit, cloranthraliniprol, hoặc xyanthraniliprol;
- t) Xenopyrafen hoặc xyflumetofen; hoặc
- u) Sulfoxaflor.

Ngoài lớp hóa học chính của thuốc diệt sinh vật hại liệt kê ở trên, các thuốc diệt sinh vật hại khác có mục tiêu đặc biệt có thể được dùng trong chế phẩm, nếu thích hợp với lợi ích mong muốn của chế phẩm. Chẳng hạn, thuốc diệt côn trùng chọn cho cây trồng đặc biệt, ví dụ, thuốc diệt sâu đục thân đặc hiệu (như cartap) hoặc thuốc diệt bọ chét đặc hiệu (như buprofezin) để sử dụng cho lúa có thể được dùng. Nói cách khác, thuốc diệt côn trùng hoặc ve bét đặc hiệu cho từng loài/giai đoạn côn trùng đặc biệt cũng có thể bao gồm trong chế phẩm (ví dụ, diệt ấu trùng ve bét, như clofentezin, flubenzimin, hexythiazox hoặc tetradifon; thuốc diệt nhuyễn thể, như dicofol hoặc propargite; thuốc diệt ve bét, như bromopropylat hoặc clobenzilat; hoặc chất điều hòa tăng trưởng, như hydrametylnon, xyromazin, methopren, clorfluazuron hoặc diflubenzuron).

Các hỗn hợp sau của hợp chất có công thức I với các thành phần hoạt tính được ưu tiên, trong đó, tốt hơn, nếu thuật ngữ “hợp chất có công thức I” đề cập đến hợp chất chọn từ bảng 1 đến 116:

chất tá được chọn từ nhóm chất chứa dầu có gốc thực vật hoặc động vật, dầu khoáng, alkyl este của các dầu này hoặc hỗn hợp của các dầu này, và dầu mỏ (tên khác) (628) + hợp chất có công thức I,

thuốc diệt ve bét chọn từ nhóm chất chứa 1,1-bis(4-clophenyl)-2-etoxyetanol (tên theo IUPAC) (910) + hợp chất có công thức I, 2,4-diclophenyl benzensulfonat (IUPAC/Tên tóm tắt hoá học) (1059) + hợp chất có công thức I, 2-flo-*N*-metyl-*N*-1-naphthylaxetamit (tên theo IUPAC) (1295) + hợp chất có công thức I, 4-clophenyl phenyl sulfon (tên theo IUPAC) (981) + hợp chất có công thức I, abamectin (1) + hợp chất có công thức I, axequinoxyl (3) + hợp chất có công thức I, axetoprol [CCN] + hợp chất có công thức I, acrinathrin (9) + hợp chất có công thức I, aldicarb (16) + hợp chất có công thức I, aldoxycarb (863) + hợp chất có công thức I, alpha-xypermethrin (202) + hợp chất có công thức I, amidithion (870) + hợp chất có công thức I, amidoflomet [CCN] + hợp chất có công thức I, amidothioat (872) + hợp chất có công thức I, amiton (875) + hợp chất có công thức I, amiton hydro oxalat (875) + hợp chất có công thức I, amitraz (24) + hợp chất có công thức I, aramit (881) + hợp chất có công thức I, oxit arsen (882) + hợp chất có công thức I, AVI 382 (mã hợp chất) + hợp chất có công thức I, AZ 60541 (mã hợp chất) + hợp chất có công thức I, azinphos-etyl (44) + hợp chất có công thức I, azinphos-metyl (45) + hợp chất có công thức I, azobenzen (tên theo IUPAC) (888) + hợp chất có công thức I, azoxyclostin (46) + hợp chất có công thức I, azothoat (889) + hợp chất có công thức I, benomyl (62) + hợp chất có công thức I, benoxafos (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, benzoximat (71) + hợp chất có công thức I, benzyl benzoat (tên theo IUPAC) [CCN] + hợp chất có công thức I, bifenazat (74) + hợp chất có công thức I, bifenthrin (76) + hợp chất có công thức I, binapacryl (907) + hợp chất có công thức I, brofenvalerat (tên tùy chọn) + hợp chất có công thức I, bromxyclen (918) + hợp chất có công thức I, bromphos (920) + hợp chất có công thức I, bromphos-etyl (921) + hợp chất có công thức I, brompropylat (94) + hợp chất có công thức I, buprofezin (99) + hợp chất có công thức I, butocarboxim (103) + hợp chất có công thức I, butoxycarboxim (104) + hợp chất có công thức I, butylpyridaben (tên tùy chọn) + hợp chất có công thức I, canxi polysulfit (tên theo IUPAC) (111) + hợp chất có công thức I, campheclo (941) + hợp chất có công thức I, carbanolat (943) + hợp chất có công thức I, carbaryl (115) + hợp chất có công thức I, carbofuran (118) + hợp chất có công thức I, carbophenothion (947) + hợp chất có công thức I, CGA 50'439 (mã mở rộng) (125) + hợp chất có công thức I, chinomethionat (126) + hợp chất có công thức I, clobenside (959) + hợp chất có công thức I, clodimeform (964) + hợp chất có công thức I, clodimeform hydroclorua (964) + hợp

chất có công thức I, clofenapyr (130) + hợp chất có công thức I, clofenethol (968) + hợp chất có công thức I, clofenson (970) + hợp chất có công thức I, clofensulphide (971) + hợp chất có công thức I, clofenvinphos (131) + hợp chất có công thức I, clobenzilat (975) + hợp chất có công thức I, clomebuform (977) + hợp chất có công thức I, clomethiuron (978) + hợp chất có công thức I, clopropylat (983) + hợp chất có công thức I, clopyrifos (145) + hợp chất có công thức I, clopyrifos-metyl (146) + hợp chất có công thức I, clothiophos (994) + hợp chất có công thức I, cinerin I (696) + hợp chất có công thức I, cinerin II (696) + hợp chất có công thức I, cinerins (696) + hợp chất có công thức I, clofentezin (158) + hợp chất có công thức I, closantel (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, coumaphos (174) + hợp chất có công thức I, crotamiton (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, crotoxyphos (1010) + hợp chất có công thức I, cufranb (1013) + hợp chất có công thức I, xyanthoat (1020) + hợp chất có công thức I, xyenopyrafen [CCN] + hợp chất có công thức I, xyflumetofen (CAS Reg. No.: 400882-07-7) + hợp chất có công thức I, xyhalothrin (196) + hợp chất có công thức I, xyhexatin (199) + hợp chất có công thức I, xypermethrin (201) + hợp chất có công thức I, DCPM (1032) + hợp chất có công thức I, DDT (219) + hợp chất có công thức I, demephion (1037) + hợp chất có công thức I, demephion-O (1037) + hợp chất có công thức I, demephion-S (1037) + hợp chất có công thức I, demeton (1038) + hợp chất có công thức I, demeton-metyl (224) + hợp chất có công thức I, demeton-O (1038) + hợp chất có công thức I, demeton-O-metyl (224) + hợp chất có công thức I, demeton-S (1038) + hợp chất có công thức I, demeton-S-metyl (224) + hợp chất có công thức I, demeton-S-metylsulphon (1039) + hợp chất có công thức I, diafenthuron (226) + hợp chất có công thức I, dialifos (1042) + hợp chất có công thức I, diazinon (227) + hợp chất có công thức I, dichlofluanit (230) + hợp chất có công thức I, diclovos (236) + hợp chất có công thức I, dicliphos (tên tùy chọn) + hợp chất có công thức I, dicofol (242) + hợp chất có công thức I, dicrotophos (243) + hợp chất có công thức I, dienoclo (1071) + hợp chất có công thức I, diflovidazin [CCN] + hợp chất có công thức I, dimefox (1081) + hợp chất có công thức I, dimethoat (262) + hợp chất có công thức I, dinaetin (tên tùy chọn) (653) + hợp chất có công thức I, dinex (1089) + hợp chất có công thức I, dinex-diclexin (1089) + hợp chất có công thức I, dinobuton (269) + hợp chất có công thức I, dinocap (270) + hợp chất có công thức I, dinocap-4 [CCN] + hợp chất có công thức I, dinocap-6 [CCN] + hợp chất có công thức I,

dinocton (1090) + hợp chất có công thức I, dinopenton (1092) + hợp chất có công thức I, dinosulfon (1097) + hợp chất có công thức I, dinoterbon (1098) + hợp chất có công thức I, dioxathion (1102) + hợp chất có công thức I, diphenyl sulfon (tên theo IUPAC) (1103) + hợp chất có công thức I, disulfiram (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, disulfoton (278) + hợp chất có công thức I, DNOC (282) + hợp chất có công thức I, dofenapyn (1113) + hợp chất có công thức I, doramectin (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, endosulfan (294) + hợp chất có công thức I, endothion (1121) + hợp chất có công thức I, EPN (297) + hợp chất có công thức I, eprinomectin (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, ethion (309) + hợp chất có công thức I, ethoat-metyl (1134) + hợp chất có công thức I, etoxazol (320) + hợp chất có công thức I, etrimfos (1142) + hợp chất có công thức I, fenazaflor (1147) + hợp chất có công thức I, fenazaquin (328) + hợp chất có công thức I, fenbutatin oxit (330) + hợp chất có công thức I, fenothiocarb (337) + hợp chất có công thức I, fenpropathrin (342) + hợp chất có công thức I, fenpyrat (tên tùy chọn) + hợp chất có công thức I, fenpyroximat (345) + hợp chất có công thức I, fenson (1157) + hợp chất có công thức I, fentrifanil (1161) + hợp chất có công thức I, fenvalerat (349) + hợp chất có công thức I, fipronil (354) + hợp chất có công thức I, fluacrypyrim (360) + hợp chất có công thức I, fluazuron (1166) + hợp chất có công thức I, flubenzimin (1167) + hợp chất có công thức I, fluxycloxuron (366) + hợp chất có công thức I, fluxythrinat (367) + hợp chất có công thức I, fluenetil (1169) + hợp chất có công thức I, flufenoxuron (370) + hợp chất có công thức I, flumethrin (372) + hợp chất có công thức I, fluorbenside (1174) + hợp chất có công thức I, fluvalinat (1184) + hợp chất có công thức I, FMC 1137 (mã mở rộng) (1185) + hợp chất có công thức I, formetanat (405) + hợp chất có công thức I, formetanat hydroclorua (405) + hợp chất có công thức I, formothion (1192) + hợp chất có công thức I, formparanat (1193) + hợp chất có công thức I, gamma-HCH (430) + hợp chất có công thức I, glyodin (1205) + hợp chất có công thức I, halfenprox (424) + hợp chất có công thức I, heptenophos (432) + hợp chất có công thức I, hexadexyl xyclopropancarboxylat (IUPAC/Tên tóm tắt hoá học) (1216) + hợp chất có công thức I, hexythiazox (441) + hợp chất có công thức I, IKA 2002 (CAS Reg. No.: 211923-74-9) + hợp chất có công thức I, iodometan (tên theo IUPAC) (542) + hợp chất có công thức I, isocarbophos (tên tùy chọn) (473) + hợp chất có công thức I, isopropyl O-(metoxyaminthiophosphoryl)salixylat (tên theo IUPAC) (473) + hợp chất có công thức

I, ivermectin (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, jasmolin I (696) + hợp chất có công thức I, jasmolin II (696) + hợp chất có công thức I, jodfenphos (1248) + hợp chất có công thức I, lindan (430) + hợp chất có công thức I, lufenuron (490) + hợp chất có công thức I, malathion (492) + hợp chất có công thức I, malonoben (1254) + hợp chất có công thức I, mecarbam (502) + hợp chất có công thức I, mephosfolan (1261) + hợp chất có công thức I, mesulfen (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, methacrifos (1266) + hợp chất có công thức I, methamidophos (527) + hợp chất có công thức I, methidathion (529) + hợp chất có công thức I, methiocarb (530) + hợp chất có công thức I, methomyl (531) + hợp chất có công thức I, methyl bromua (537) + hợp chất có công thức I, metolcarb (550) + hợp chất có công thức I, mevinphos (556) + hợp chất có công thức I, mexacarb (1290) + hợp chất có công thức I, milbemectin (557) + hợp chất có công thức I, milbemycin oxim (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, mipafox (1293) + hợp chất có công thức I, monocrotophos (561) + hợp chất có công thức I, morphothion (1300) + hợp chất có công thức I, moxitectin (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, naled (567) + hợp chất có công thức I, NC-184 (mã hợp chất) + hợp chất có công thức I, NC-512 (mã hợp chất) + hợp chất có công thức I, nifluridid (1309) + hợp chất có công thức I, nikkomyxin (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, nitrilacarb (1313) + hợp chất có công thức I, nitrilacarb 1:1 phức kẽm clorua (1313) + hợp chất có công thức I, NNI-0101 (mã hợp chất) + hợp chất có công thức I, NNI-0250 (mã hợp chất) + hợp chất có công thức I, omethoat (594) + hợp chất có công thức I, oxamyl (602) + hợp chất có công thức I, oxydeprofos (1324) + hợp chất có công thức I, oxydisulfoton (1325) + hợp chất có công thức I, pp'-DDT (219) + hợp chất có công thức I, parathion (615) + hợp chất có công thức I, permethrin (626) + hợp chất có công thức I, dầu mỏ (tên tùy chọn) (628) + hợp chất có công thức I, phenkapton (1330) + hợp chất có công thức I, phenthoat (631) + hợp chất có công thức I, phorat (636) + hợp chất có công thức I, phosalon (637) + hợp chất có công thức I, phosfolan (1338) + hợp chất có công thức I, phosmet (638) + hợp chất có công thức I, phosphamidon (639) + hợp chất có công thức I, phoxim (642) + hợp chất có công thức I, pirimiphos-methyl (652) + hợp chất có công thức I, polycloterpen (tên thông thường) (1347) + hợp chất có công thức I, polynactin (tên tùy chọn) (653) + hợp chất có công thức I, proclonol (1350) + hợp chất có công thức I, profenofos (662) + hợp chất có công thức I, promaxyl (1354) + hợp chất có

công thức I, propargit (671) + hợp chất có công thức I, propetamphos (673) + hợp chất có công thức I, propoxur (678) + hợp chất có công thức I, prothidathion (1360) + hợp chất có công thức I, prothoat (1362) + hợp chất có công thức I, pyrethrin I (696) + hợp chất có công thức I, pyrethrin II (696) + hợp chất có công thức I, pyrethrins (696) + hợp chất có công thức I, pyridaben (699) + hợp chất có công thức I, pyridaphenthion (701) + hợp chất có công thức I, pyrimidifen (706) + hợp chất có công thức I, pyrimitat (1370) + hợp chất có công thức I, quinalphos (711) + hợp chất có công thức I, quintiofos (1381) + hợp chất có công thức I, R-1492 (mã mở rộng) (1382) + hợp chất có công thức I, RA-17 (mã mở rộng) (1383) + hợp chất có công thức I, rotenon (722) + hợp chất có công thức I, schradan (1389) + hợp chất có công thức I, sebufos (tên tùy chọn) + hợp chất có công thức I, selamectin (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, SI-0009 (mã hợp chất) + hợp chất có công thức I, sophamit (1402) + hợp chất có công thức I, spiroadiclofen (738) + hợp chất có công thức I, spiromesifen (739) + hợp chất có công thức I, SSI-121 (mã mở rộng) (1404) + hợp chất có công thức I, sulfiram (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, sulfluramid (750) + hợp chất có công thức I, sulfotep (753) + hợp chất có công thức I, sulfur (754) + hợp chất có công thức I, SZI-121 (mã mở rộng) (757) + hợp chất có công thức I, tau-fluvalinat (398) + hợp chất có công thức I, tebufenpyrat (763) + hợp chất có công thức I, TEPP (1417) + hợp chất có công thức I, terbam (tên tùy chọn) + hợp chất có công thức I, tetraclovinphos (777) + hợp chất có công thức I, tetradifon (786) + hợp chất có công thức I, tetraactin (tên tùy chọn) (653) + hợp chất có công thức I, tetrasul (1425) + hợp chất có công thức I, thiafenox (tên tùy chọn) + hợp chất có công thức I, thiocarboxim (1431) + hợp chất có công thức I, thiofanox (800) + hợp chất có công thức I, thiometon (801) + hợp chất có công thức I, thioquinox (1436) + hợp chất có công thức I, thuringiensin (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, triamiphos (1441) + hợp chất có công thức I, triarathen (1443) + hợp chất có công thức I, triazophos (820) + hợp chất có công thức I, triazuron (tên tùy chọn) + hợp chất có công thức I, triclofon (824) + hợp chất có công thức I, trifenofos (1455) + hợp chất có công thức I, trinactin (tên tùy chọn) (653) + hợp chất có công thức I, vamidothion (847) + hợp chất có công thức I, vaniliprol [CCN] và YI-5302 (mã hợp chất) + hợp chất có công thức I,

chất diệt tảo được chọn từ nhóm các chất bao gồm bethoxazin [CCN] + hợp chất có công thức I, đồng dioctanoat (tên theo IUPAC) (170) + hợp chất có công thức I, đồng sulfat (172) + hợp chất có công thức I, xybutryn [CCN] + hợp chất có công thức I, dichlon (1052) + hợp chất có công thức I, diclophen (232) + hợp chất có công thức I, endothal (295) + hợp chất có công thức I, fentin (347) + hợp chất có công thức I, đá vôi hydrat hoá [CCN] + hợp chất có công thức I, nabam (566) + hợp chất có công thức I, quinoclamin (714) + hợp chất có công thức I, quinonamit (1379) + hợp chất có công thức I, simazin (730) + hợp chất có công thức I, triphenyltin axetat (tên theo IUPAC) (347) và triphenyltin hydroxit (tên theo IUPAC) (347) + hợp chất có công thức I,

thuốc trừ giun sán được chọn từ nhóm các chất bao gồm abamectin (1) + hợp chất có công thức I, crufomat (1011) + hợp chất có công thức I, doramectin (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, emamectin (291) + hợp chất có công thức I, emamectin benzoat (291) + hợp chất có công thức I, eprinomectin (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, ivermectin (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, milbemyxin oxim (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, moxitetin (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, piperazin [CCN] + hợp chất có công thức I, selamectin (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, spinosat (737) và thiophanat (1435) + hợp chất có công thức I,

avixit được chọn từ nhóm các chất bao gồm cloalozaxin (127) + hợp chất có công thức I, endrin (1122) + hợp chất có công thức I, fenthion (346) + hợp chất có công thức I, pyridin-4-amin (tên theo IUPAC) (23) và strychnin (745) + hợp chất có công thức I,

chất kháng khuẩn được chọn từ nhóm các chất bao gồm 1-hydroxy-1*H*-pyridin-2-thion (tên theo IUPAC) (1222) + hợp chất có công thức I, 4-(quinoxalin-2-ylamin)benzensulfonamit (tên theo IUPAC) (748) + hợp chất có công thức I, 8-hydroxyquinolin sulfat (446) + hợp chất có công thức I, bronopol (97) + hợp chất có công thức I, đồng dioctanoat (tên theo IUPAC) (170) + hợp chất có công thức I, đồng hydroxit (tên theo IUPAC) (169) + hợp chất có công thức I, cresol [CCN] + hợp chất có công thức I, diclophen (232) + hợp chất có công thức I, dipyrithion (1105) + hợp chất có công thức I, dodicin (1112) + hợp chất có công thức I, fenaminsulf (1144) + hợp chất có công thức I, formaldehyt (404) + hợp chất có công thức I, hydrargaphen (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, kasugamixin (483) + hợp chất có công thức I, kasugamixin hydroclorua hydrat (483) + hợp chất có công thức I, niken

bis(dimetyldithiocarbamat) (tên theo IUPAC) (1308) + hợp chất có công thức I, nitrapyrin (580) + hợp chất có công thức I, octhilinon (590) + hợp chất có công thức I, axit oxolinic (606) + hợp chất có công thức I, oxytetracyclin (611) + hợp chất có công thức I, kali hydroxyquinolin sulfat (446) + hợp chất có công thức I, probenazol (658) + hợp chất có công thức I, streptomycin (744) + hợp chất có công thức I, streptomycin sesquisulfat (744) + hợp chất có công thức I, tecloftalam (766) + hợp chất có công thức I, và thiomersal (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I,

chất sinh học được chọn từ nhóm các chất bao gồm *Adoxophyes orana* GV (tên tùy chọn) (12) + hợp chất có công thức I, *Agrobacterium radiobacter* (tên tùy chọn) (13) + hợp chất có công thức I, *Amblyseius* spp. (tên tùy chọn) (19) + hợp chất có công thức I, *Anagrapta falcifera* NPV (tên tùy chọn) (28) + hợp chất có công thức I, *Anagrus atomus* (tên tùy chọn) (29) + hợp chất có công thức I, *Aphidius colemani* (tên tùy chọn) (33) + hợp chất có công thức I, *Aphidius colemani* (tên tùy chọn) (34) + hợp chất có công thức I, *Aphidoletes aphidimyza* (tên tùy chọn) (35) + hợp chất có công thức I, *Autographa californica* NPV (tên tùy chọn) (38) + hợp chất có công thức I, *Bacillus firmus* (tên tùy chọn) (48) + hợp chất có công thức I, *Bacillus sphaericus* Neide (tên khoa học) (49) + hợp chất có công thức I, *Bacillus thuringiensis* Berliner (tên khoa học) (51) + hợp chất có công thức I, *Bacillus thuringiensis* subsp. *aizawai* (tên khoa học) (51) + hợp chất có công thức I, *Bacillus thuringiensis* subsp. *israelensis* (tên khoa học) (51) + hợp chất có công thức I, *Bacillus thuringiensis* subsp. *japonensis* (tên khoa học) (51) + hợp chất có công thức I, *Bacillus thuringiensis* subsp. *kurstaki* (tên khoa học) (51) + hợp chất có công thức I, *Bacillus thuringiensis* subsp. *tenebrionis* (tên khoa học) (51) + hợp chất có công thức I, *Beauveria bassiana* (tên tùy chọn) (53) + hợp chất có công thức I, *Beauveria brongniartii* (tên tùy chọn) (54) + hợp chất có công thức I, *Chrysoperla carnea* (tên tùy chọn) (151) + hợp chất có công thức I, *Cryptolaemus montrouzieri* (tên tùy chọn) (178) + hợp chất có công thức I, *Xydia pomonella* GV (tên tùy chọn) (191) + hợp chất có công thức I, *Dacnusa sibirica* (tên tùy chọn) (212) + hợp chất có công thức I, *Diglyphus isaea* (tên tùy chọn) (254) + hợp chất có công thức I, *Encarsia formosa* (tên khoa học) (293) + hợp chất có công thức I, *Eretmocerus eremicus* (tên tùy chọn) (300) + hợp chất có công thức I, *Helicoverpa zea* NPV (tên tùy chọn) (431) + hợp chất có công thức I, *Heterorhabditis bacteriophora* và *H. megidis* (tên tùy chọn) (433) + hợp chất có công thức I, *Hippodamia convergens*

(tên tùy chọn) (442) + hợp chất có công thức I, *Leptomastix dactylopii* (tên tùy chọn) (488) + hợp chất có công thức I, *Macrolophus caliginosus* (tên tùy chọn) (491) + hợp chất có công thức I, *Mamestra brassicae* NPV (tên tùy chọn) (494) + hợp chất có công thức I, *Metaphycus helvolus* (tên tùy chọn) (522) + hợp chất có công thức I, *Metarhizium anisopliae* var. *acridum* (tên khoa học) (523) + hợp chất có công thức I, *Metarhizium anisopliae* var. *anisopliae* (tên khoa học) (523) + hợp chất có công thức I, *Neodiprion sertifer* NPV và *N. lecontei* NPV (tên tùy chọn) (575) + hợp chất có công thức I, *Orius* spp. (tên tùy chọn) (596) + hợp chất có công thức I, *Paecilomyces fumosoroseus* (tên tùy chọn) (613) + hợp chất có công thức I, *Phytoseiulus persimilis* (tên tùy chọn) (644) + hợp chất có công thức I, *Spodoptera exigua* multicapsit nuclear polyhedrosis virus (tên khoa học) (741) + hợp chất có công thức I, *Steinernema bibionis* (tên tùy chọn) (742) + hợp chất có công thức I, *Steinernema carpocapsae* (tên tùy chọn) (742) + hợp chất có công thức I, *Steinernema feltiae* (tên tùy chọn) (742) + hợp chất có công thức I, *Steinernema glaseri* (tên tùy chọn) (742) + hợp chất có công thức I, *Steinernema riobrave* (tên tùy chọn) (742) + hợp chất có công thức I, *Steinernema riobravus* (tên tùy chọn) (742) + hợp chất có công thức I, *Steinernema scapterisci* (tên tùy chọn) (742) + hợp chất có công thức I, *Steinernema* spp. (tên tùy chọn) (742) + hợp chất có công thức I, *Trichogramma* spp. (tên tùy chọn) (826) + hợp chất có công thức I, *Typhlodromus occidentalis* (tên tùy chọn) (844) và *Verticillium lecanii* (tên tùy chọn) (848) + hợp chất có công thức I,

thuốc triệt sinh đất được chọn từ nhóm các chất bao gồm iodometan (tên theo IUPAC) (542) và metyl bromua (537) + hợp chất có công thức I,

hóa chất sát khuẩn được chọn từ nhóm các chất bao gồm apholat [CCN] + hợp chất có công thức I, bisazir (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, busulfan (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, diflubenzuron (250) + hợp chất có công thức I, dimatif (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, hemel [CCN] + hợp chất có công thức I, hempa [CCN] + hợp chất có công thức I, metepa [CCN] + hợp chất có công thức I, methiotepa [CCN] + hợp chất có công thức I, metyl apholat [CCN] + hợp chất có công thức I, morzit [CCN] + hợp chất có công thức I, penfluron (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, tepa [CCN] + hợp chất có công thức I, thiohempa (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, thiotepa (tên tùy chọn) [CCN] + hợp

chất có công thức I, tretamin (tên tùy chọn) [CCN] và uredepa (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I,

pheromon diệt côn trùng được chọn từ nhóm các chất bao gồm (*E*)-dec-5-en-1-yl axetat với (*E*)-dec-5-en-1-ol (tên theo IUPAC) (222) + hợp chất có công thức I, (*E*)-tridec-4-en-1-yl axetat (tên theo IUPAC) (829) + hợp chất có công thức I, (*E*)-6-methylhept-2-en-4-ol (tên theo IUPAC) (541) + hợp chất có công thức I, (*E,Z*)-tetradeca-4,10-dien-1-yl axetat (tên theo IUPAC) (779) + hợp chất có công thức I, (*Z*)-dodec-7-en-1-yl axetat (tên theo IUPAC) (285) + hợp chất có công thức I, (*Z*)-hexadec-11-enal (tên theo IUPAC) (436) + hợp chất có công thức I, (*Z*)-hexadec-11-en-1-yl axetat (tên theo IUPAC) (437) + hợp chất có công thức I, (*Z*)-hexadec-13-en-11-yn-1-yl axetat (tên theo IUPAC) (438) + hợp chất có công thức I, (*Z*)-icos-13-en-10-on (tên theo IUPAC) (448) + hợp chất có công thức I, (*Z*)-tetradec-7-en-1-al (tên theo IUPAC) (782) + hợp chất có công thức I, (*Z*)-tetradec-9-en-1-ol (tên theo IUPAC) (783) + hợp chất có công thức I, (*Z*)-tetradec-9-en-1-yl axetat (tên theo IUPAC) (784) + hợp chất có công thức I, (*7E,9Z*)-dodeca-7,9-dien-1-yl axetat (tên theo IUPAC) (283) + hợp chất có công thức I, (*9Z,11E*)-tetradeca-9,11-dien-1-yl axetat (tên theo IUPAC) (780) + hợp chất có công thức I, (*9Z,12E*)-tetradeca-9,12-dien-1-yl axetat (tên theo IUPAC) (781) + hợp chất có công thức I, 14-metyloctadec-1-en (tên theo IUPAC) (545) + hợp chất có công thức I, 4-metylnonan-5-ol với 4-metylnonan-5-on (tên theo IUPAC) (544) + hợp chất có công thức I, alpha-multistriatin (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, brevicomin (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, codlelure (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, codlemon (tên tùy chọn) (167) + hợp chất có công thức I, cuelure (tên tùy chọn) (179) + hợp chất có công thức I, disparlure (277) + hợp chất có công thức I, dodec-8-en-1-yl axetat (tên theo IUPAC) (286) + hợp chất có công thức I, dodec-9-en-1-yl axetat (tên theo IUPAC) (287) + hợp chất có công thức I, dodeca-8 + hợp chất có công thức I, 10-dien-1-yl axetat (tên theo IUPAC) (284) + hợp chất có công thức I, dominicalure (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, etyl 4-metyloctanoat (tên theo IUPAC) (317) + hợp chất có công thức I, eugenol (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, frontalin (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, gossyplure (tên tùy chọn) (420) + hợp chất có công thức I, grandlure (421) + hợp chất có công thức I, grandlure I (tên tùy chọn) (421) + hợp chất có công thức I, grandlure II (tên tùy chọn) (421) + hợp chất có công

thức I, grandlure III (tên tùy chọn) (421) + hợp chất có công thức I, grandlure IV (tên tùy chọn) (421) + hợp chất có công thức I, hexalure [CCN] + hợp chất có công thức I, ipsdienol (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, ipsenol (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, japonilure (tên tùy chọn) (481) + hợp chất có công thức I, lineatin (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, litlure (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, looplure (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, medlure [CCN] + hợp chất có công thức I, axit megatomoic (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, metyl eugenol (tên tùy chọn) (540) + hợp chất có công thức I, muscalure (563) + hợp chất có công thức I, octadeca-2,13-dien-1-yl axetat (tên theo IUPAC) (588) + hợp chất có công thức I, octadeca-3,13-dien-1-yl axetat (tên theo IUPAC) (589) + hợp chất có công thức I, orfralure (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, oryctalure (tên tùy chọn) (317) + hợp chất có công thức I, ostramon (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, siglure [CCN] + hợp chất có công thức I, sordidin (tên tùy chọn) (736) + hợp chất có công thức I, sulcatol (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, tetradec-11-en-1-yl axetat (tên theo IUPAC) (785) + hợp chất có công thức I, trimedlure (839) + hợp chất có công thức I, trimedlure A (tên tùy chọn) (839) + hợp chất có công thức I, trimedlure B₁ (tên tùy chọn) (839) + hợp chất có công thức I, trimedlure B₂ (tên tùy chọn) (839) + hợp chất có công thức I, trimedlure C (tên tùy chọn) (839) và trunc-call (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I,

chất đuổi côn trùng được chọn từ nhóm các chất bao gồm 2-(octylthio)etanol (tên theo IUPAC) (591) + hợp chất có công thức I, butopyronoxyl (933) + hợp chất có công thức I, butoxy(polypropylen glycol) (936) + hợp chất có công thức I, dibutyl adipat (tên theo IUPAC) (1046) + hợp chất có công thức I, dibutyl phthalat (1047) + hợp chất có công thức I, dibutyl succinat (tên theo IUPAC) (1048) + hợp chất có công thức I, diethyltoluamit [CCN] + hợp chất có công thức I, dimetyl carbat [CCN] + hợp chất có công thức I, dimetyl phthalat [CCN] + hợp chất có công thức I, etyl hexandiol (1137) + hợp chất có công thức I, hexamit [CCN] + hợp chất có công thức I, methoquin-butyl (1276) + hợp chất có công thức I, metylneodecanamit [CCN] + hợp chất có công thức I, oxamat [CCN] và picaridin [CCN] + hợp chất có công thức I,

chất diệt côn trùng được chọn từ nhóm các chất bao gồm 1-diclo-1-nitroetan (IUPAC/Tên tóm tắt hoá học) (1058) + hợp chất có công thức I, 1,1-diclo-2,2-bis(4-

ethylphenyl)etan (tên theo IUPAC) (1056), + hợp chất có công thức I, 1,2-diclopropan (IUPAC/Tên tóm tắt hoá học) (1062) + hợp chất có công thức I, 1,2-diclopropan với 1,3-diclopropen (tên theo IUPAC) (1063) + hợp chất có công thức I, 1-brom-2-cloetan (IUPAC/Tên tóm tắt hoá học) (916) + hợp chất có công thức I, 2,2,2-triclo-1-(3,4-diclophenyl)etyl axetat (tên theo IUPAC) (1451) + hợp chất có công thức I, 2,2-dicloviny 2-etylsulfinyletyl metyl phosphat (tên theo IUPAC) (1066) + hợp chất có công thức I, 2-(1,3-dithiolan-2-yl)phenyl dimetylcarbammat (IUPAC/ Tên tóm tắt hoá học) (1109) + hợp chất có công thức I, 2-(2-butoxyetoxi)etyl thioxyanat (IUPAC/Tên tóm tắt hoá học) (935) + hợp chất có công thức I, 2-(4,5-dimetyl-1,3-dioxolan-2-yl)phenyl metylcarbammat (IUPAC/ Tên tóm tắt hoá học) (1084) + hợp chất có công thức I, 2-(4-clo-3,5-xylyloxy)etanol (tên theo IUPAC) (986) + hợp chất có công thức I, 2-cloviny dietyl phosphat (tên theo IUPAC) (984) + hợp chất có công thức I, 2-imidazolidon (tên theo IUPAC) (1225) + hợp chất có công thức I, 2-isovalerylindan-1,3-dion (tên theo IUPAC) (1246) + hợp chất có công thức I, 2-metyl(prop-2-ynyl)aminphenyl metylcarbammat (tên theo IUPAC) (1284) + hợp chất có công thức I, 2-thioxyanatoetyl laurat (tên theo IUPAC) (1433) + hợp chất có công thức I, 3-brom-1-cloprop-1-en (tên theo IUPAC) (917) + hợp chất có công thức I, 3-metyl-1-phenylpyrazol-5-yl dimetylcarbammat (tên theo IUPAC) (1283) + hợp chất có công thức I, 4-metyl(prop-2-ynyl)amin-3,5-xylyl metylcarbammat (tên theo IUPAC) (1285) + hợp chất có công thức I, 5,5-dimetyl-3-oxoxyclohex-1-enyl dimetylcarbammat (tên theo IUPAC) (1085) + hợp chất có công thức I, abamectin (1) + hợp chất có công thức I, axephat (2) + hợp chất có công thức I, axetamiprit (4) + hợp chất có công thức I, axethion (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, axetoprol [CCN] + hợp chất có công thức I, acrinathrin (9) + hợp chất có công thức I, acrylonitrile (tên theo IUPAC) (861) + hợp chất có công thức I, alanycarb (15) + hợp chất có công thức I, aldicarb (16) + hợp chất có công thức I, aldoxycarb (863) + hợp chất có công thức I, aldrin (864) + hợp chất có công thức I, allethrin (17) + hợp chất có công thức I, allosamidin (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, allyxycarb (866) + hợp chất có công thức I, alpha-xypermethrin (202) + hợp chất có công thức I, alpha-ecdysone (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, alpha-endosulfan [CCN] + hợp chất có công thức I, nhôm phosphit (640) + hợp chất có công thức I, amidithion (870) + hợp chất có công thức I, amidothioat (872) + hợp chất có công thức I,

amincarb (873) + hợp chất có công thức I, amiton (875) + hợp chất có công thức I, amiton hydro oxalat (875) + hợp chất có công thức I, amitraz (24) + hợp chất có công thức I, anabasin (877) + hợp chất có công thức I, athidathion (883) + hợp chất có công thức I, AVI 382 (mã hợp chất) + hợp chất có công thức I, AZ 60541 (mã hợp chất) + hợp chất có công thức I, azadirachtin (tên tùy chọn) (41) + hợp chất có công thức I, azamethiphos (42) + hợp chất có công thức I, azinphos-ethyl (44) + hợp chất có công thức I, azinphos-metyl (45) + hợp chất có công thức I, azothoat (889) + hợp chất có công thức I, (889) (tên tùy chọn) (52) + hợp chất có công thức I, bari hexaflosilicat (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, bari polysulfit (IUPAC/Tên tóm tắt hoá học) (892) + hợp chất có công thức I, barthrin [CCN] + hợp chất có công thức I, Bayer 22/190 (mã mở rộng) (893) + hợp chất có công thức I, Bayer 22408 (mã mở rộng) (894) + hợp chất có công thức I, bendiocarb (58) + hợp chất có công thức I, benfuracarb (60) + hợp chất có công thức I, bensultap (66) + hợp chất có công thức I, beta-xyfluthrin (194) + hợp chất có công thức I, beta-xypermethrin (203) + hợp chất có công thức I, bifenthrin (76) + hợp chất có công thức I, bioallethrin (78) + hợp chất có công thức I, bioallethrin *S*-xyclopentenyl chất đồng phân (tên tùy chọn) (79) + hợp chất có công thức I, bioetanomethrin [CCN] + hợp chất có công thức I, biopermethrin (908) + hợp chất có công thức I, bioresmethrin (80) + hợp chất có công thức I, bis(2-cloetyl) ete (tên theo IUPAC) (909) + hợp chất có công thức I, bistrifluron (83) + hợp chất có công thức I, borax (86) + hợp chất có công thức I, brofenvalerat (tên tùy chọn) + hợp chất có công thức I, bromfenvinfos (914) + hợp chất có công thức I, bromxyclen (918) + hợp chất có công thức I, brom-DDT (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, bromphos (920) + hợp chất có công thức I, bromphos-ethyl (921) + hợp chất có công thức I, bufencarb (924) + hợp chất có công thức I, buprofezin (99) + hợp chất có công thức I, butacarb (926) + hợp chất có công thức I, butathiofos (927) + hợp chất có công thức I, butocarboxim (103) + hợp chất có công thức I, butonat (932) + hợp chất có công thức I, butoxycarboxim (104) + hợp chất có công thức I, butylpyridaben (tên tùy chọn) + hợp chất có công thức I, cadusafos (109) + hợp chất có công thức I, canxi arsenat [CCN] + hợp chất có công thức I, canxi xyanua (444) + hợp chất có công thức I, canxi polysulfit (tên theo IUPAC) (111) + hợp chất có công thức I, campheclo (941) + hợp chất có công thức I, carbanolat (943) + hợp chất có công thức I, carbaryl (115) + hợp chất có công thức I, carbofuran (118) + hợp chất có công thức I, carbon disulfit

(IUPAC/Tên tóm tắt hoá học) (945) + hợp chất có công thức I, carbon tetrachlorua (tên theo IUPAC) (946) + hợp chất có công thức I, carbophenothion (947) + hợp chất có công thức I, carbosulfan (119) + hợp chất có công thức I, cartap (123) + hợp chất có công thức I, cartap hydrochlorua (123) + hợp chất có công thức I, xevadin (tên tùy chọn) (725) + hợp chất có công thức I, cloantraniliprol [CCN] + hợp chất có công thức I, clobixyclen (960) + hợp chất có công thức I, clodan (128) + hợp chất có công thức I, clodecon (963) + hợp chất có công thức I, clodimeform (964) + hợp chất có công thức I, clodimeform hydrochlorua (964) + hợp chất có công thức I, cloetoxxyfos (129) + hợp chất có công thức I, clofenapyr (130) + hợp chất có công thức I, clofenvinphos (131) + hợp chất có công thức I, clofluazuron (132) + hợp chất có công thức I, clomephos (136) + hợp chất có công thức I, cloroform [CCN] + hợp chất có công thức I, clopicrin (141) + hợp chất có công thức I, clophoxim (989) + hợp chất có công thức I, cloprazophos (990) + hợp chất có công thức I, clopyrifos (145) + hợp chất có công thức I, clopyrifos-metyl (146) + hợp chất có công thức I, clothiophos (994) + hợp chất có công thức I, chromafenozit (150) + hợp chất có công thức I, cinerin I (696) + hợp chất có công thức I, cinerin II (696) + hợp chất có công thức I, cinerins (696) + hợp chất có công thức I, cis-resmethrin (tên tùy chọn) + hợp chất có công thức I, cismethrin (80) + hợp chất có công thức I, cloxythrin (tên tùy chọn) + hợp chất có công thức I, cloethocarb (999) + hợp chất có công thức I, closantel (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, clothianidin (165) + hợp chất có công thức I, đồng axetoarsenit [CCN] + hợp chất có công thức I, đồng arsenat [CCN] + hợp chất có công thức I, đồng oleat [CCN] + hợp chất có công thức I, coumaphos (174) + hợp chất có công thức I, coumithoat (1006) + hợp chất có công thức I, crotamiton (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, crotoxyphos (1010) + hợp chất có công thức I, crufomat (1011) + hợp chất có công thức I, cryolite (tên tùy chọn) (177) + hợp chất có công thức I, CS 708 (mã mở rộng) (1012) + hợp chất có công thức I, xyanofenphos (1019) + hợp chất có công thức I, xyanophos (184) + hợp chất có công thức I, xyanthoat (1020) + hợp chất có công thức I, xyantraniliprol [CCN] + hợp chất có công thức I, xyclethrin [CCN] + hợp chất có công thức I, xycloprothrin (188) + hợp chất có công thức I, xyfluthrin (193) + hợp chất có công thức I, xyhalothrin (196) + hợp chất có công thức I, xypermethrin (201) + hợp chất có công thức I, xyphenothrin (206) + hợp chất có công thức I, xyromazin (209) + hợp chất có công thức I, xythioat (tên tùy

chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, *d*-limonen (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, *d*-tetramethrin (tên tùy chọn) (788) + hợp chất có công thức I, DAEP (1031) + hợp chất có công thức I, dazomet (216) + hợp chất có công thức I, DDT (219) + hợp chất có công thức I, decarbofuran (1034) + hợp chất có công thức I, deltamethrin (223) + hợp chất có công thức I, demephion (1037) + hợp chất có công thức I, demephion-O (1037) + hợp chất có công thức I, demephion-S (1037) + hợp chất có công thức I, demeton (1038) + hợp chất có công thức I, demeton-metyl (224) + hợp chất có công thức I, demeton-O (1038) + hợp chất có công thức I, demeton-O-metyl (224) + hợp chất có công thức I, demeton-S (1038) + hợp chất có công thức I, demeton-S-metyl (224) + hợp chất có công thức I, demeton-S-metylsulphon (1039) + hợp chất có công thức I, diafenthiuron (226) + hợp chất có công thức I, dialifos (1042) + hợp chất có công thức I, diamidafos (1044) + hợp chất có công thức I, diazinon (227) + hợp chất có công thức I, dicapthon (1050) + hợp chất có công thức I, dichlofenthion (1051) + hợp chất có công thức I, diclovos (236) + hợp chất có công thức I, dicliphos (tên tùy chọn) + hợp chất có công thức I, dicresyl (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, dicrotophos (243) + hợp chất có công thức I, dixyclanil (244) + hợp chất có công thức I, dieldrin (1070) + hợp chất có công thức I, diethyl 5-methylpyrazol-3-yl phosphat (tên theo IUPAC) (1076) + hợp chất có công thức I, diflubenzuron (250) + hợp chất có công thức I, dilor (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, dimefluthrin [CCN] + hợp chất có công thức I, dimefox (1081) + hợp chất có công thức I, dimetan (1085) + hợp chất có công thức I, dimethoat (262) + hợp chất có công thức I, dimethrin (1083) + hợp chất có công thức I, dimethylvinphos (265) + hợp chất có công thức I, dimetilan (1086) + hợp chất có công thức I, dinex (1089) + hợp chất có công thức I, dinex-diclexin (1089) + hợp chất có công thức I, dinoprop (1093) + hợp chất có công thức I, dinosam (1094) + hợp chất có công thức I, dinoseb (1095) + hợp chất có công thức I, dinotefuran (271) + hợp chất có công thức I, diofenolan (1099) + hợp chất có công thức I, dioxabenzofos (1100) + hợp chất có công thức I, dioxacarb (1101) + hợp chất có công thức I, dioxathion (1102) + hợp chất có công thức I, disulfoton (278) + hợp chất có công thức I, dithicrofos (1108) + hợp chất có công thức I, DNOC (282) + hợp chất có công thức I, doramectin (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, DSP (1115) + hợp chất có công thức I, ecdysterone (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, EI 1642 (mã mở rộng) (1118) + hợp

chất có công thức I, emamectin (291) + hợp chất có công thức I, emamectin benzoat (291) + hợp chất có công thức I, EMPC (1120) + hợp chất có công thức I, empenthrin (292) + hợp chất có công thức I, endosulfan (294) + hợp chất có công thức I, endothion (1121) + hợp chất có công thức I, endrin (1122) + hợp chất có công thức I, EPBP (1123) + hợp chất có công thức I, EPN (297) + hợp chất có công thức I, epofenonan (1124) + hợp chất có công thức I, eprinomectin (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, esfenvalerat (302) + hợp chất có công thức I, etaphos (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, ethiofencarb (308) + hợp chất có công thức I, ethion (309) + hợp chất có công thức I, ethiprol (310) + hợp chất có công thức I, ethoat-metyl (1134) + hợp chất có công thức I, ethoprophos (312) + hợp chất có công thức I, etyl format (tên theo IUPAC) [CCN] + hợp chất có công thức I, etyl-DDD (tên tùy chọn) (1056) + hợp chất có công thức I, etylen dibromua (316) + hợp chất có công thức I, etylen diclorua (tên hoá học) (1136) + hợp chất có công thức I, etylen oxit [CCN] + hợp chất có công thức I, etofenprox (319) + hợp chất có công thức I, etrimfos (1142) + hợp chất có công thức I, EXD (1143) + hợp chất có công thức I, famphur (323) + hợp chất có công thức I, fenamiphos (326) + hợp chất có công thức I, fenazaflor (1147) + hợp chất có công thức I, fenclophos (1148) + hợp chất có công thức I, fenethacarb (1149) + hợp chất có công thức I, fenfluthrin (1150) + hợp chất có công thức I, fenitrothion (335) + hợp chất có công thức I, fenobucarb (336) + hợp chất có công thức I, fenoxacrim (1153) + hợp chất có công thức I, fenoxycarb (340) + hợp chất có công thức I, fenpirithrin (1155) + hợp chất có công thức I, fenpropathrin (342) + hợp chất có công thức I, fenpyrat (tên tùy chọn) + hợp chất có công thức I, fensulfothion (1158) + hợp chất có công thức I, fenthion (346) + hợp chất có công thức I, fenthion-etyl [CCN] + hợp chất có công thức I, fenvalerat (349) + hợp chất có công thức I, fipronil (354) + hợp chất có công thức I, flonicamid (358) + hợp chất có công thức I, flubendiamit (CAS. Reg. No.: 272451-65-7) + hợp chất có công thức I, flucofuron (1168) + hợp chất có công thức I, fluxycloxuron (366) + hợp chất có công thức I, fluxythrinate (367) + hợp chất có công thức I, fluenetil (1169) + hợp chất có công thức I, flufenerim [CCN] + hợp chất có công thức I, flufenoxuron (370) + hợp chất có công thức I, flufenprox (1171) + hợp chất có công thức I, flumethrin (372) + hợp chất có công thức I, fluvalinat (1184) + hợp chất có công thức I, FMC 1137 (mã mở rộng) (1185) + hợp chất có công thức I, fonofos (1191) + hợp chất có công thức I,

formetanat (405) + hợp chất có công thức I, formetanat hydroclorua (405) + hợp chất có công thức I, formothion (1192) + hợp chất có công thức I, formparanat (1193) + hợp chất có công thức I, fosmethilan (1194) + hợp chất có công thức I, fospirat (1195) + hợp chất có công thức I, fosthiazat (408) + hợp chất có công thức I, fosthietan (1196) + hợp chất có công thức I, furathiocarb (412) + hợp chất có công thức I, furethrin (1200) + hợp chất có công thức I, gamma-xyhalothrin (197) + hợp chất có công thức I, gamma-HCH (430) + hợp chất có công thức I, guazatin (422) + hợp chất có công thức I, guazatin axetat (422) + hợp chất có công thức I, GY-81 (mã mở rộng) (423) + hợp chất có công thức I, halfenprox (424) + hợp chất có công thức I, halofenozit (425) + hợp chất có công thức I, HCH (430) + hợp chất có công thức I, HEOD (1070) + hợp chất có công thức I, heptaclo (1211) + hợp chất có công thức I, heptenophos (432) + hợp chất có công thức I, heterophos [CCN] + hợp chất có công thức I, hexaflumuron (439) + hợp chất có công thức I, HHDN (864) + hợp chất có công thức I, hydrametylnon (443) + hợp chất có công thức I, hydro xyanua (444) + hợp chất có công thức I, hydropren (445) + hợp chất có công thức I, hyquincarb (1223) + hợp chất có công thức I, imidacloprit (458) + hợp chất có công thức I, imiprothrin (460) + hợp chất có công thức I, indoxacarb (465) + hợp chất có công thức I, iodometan (tên theo IUPAC) (542) + hợp chất có công thức I, IPSP (1229) + hợp chất có công thức I, isazofos (1231) + hợp chất có công thức I, isobenzan (1232) + hợp chất có công thức I, isocarbophos (tên tùy chọn) (473) + hợp chất có công thức I, isodrin (1235) + hợp chất có công thức I, isofenphos (1236) + hợp chất có công thức I, isolan (1237) + hợp chất có công thức I, isoprocab (472) + hợp chất có công thức I, isopropyl *O*-(metoxyaminthiophosphoryl)salixylat (tên theo IUPAC) (473) + hợp chất có công thức I, isoprothiolan (474) + hợp chất có công thức I, isothioat (1244) + hợp chất có công thức I, isoxathion (480) + hợp chất có công thức I, ivermectin (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, jasmolin I (696) + hợp chất có công thức I, jasmolin II (696) + hợp chất có công thức I, jodfenphos (1248) + hợp chất có công thức I, hormon chưa chín I (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, hormon chưa chín II (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, hormon chưa chín III (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, kelevan (1249) + hợp chất có công thức I, kinopren (484) + hợp chất có công thức I, lambda-xyhalothrin (198) + hợp chất có công thức I, chì arsenat [CCN] + hợp chất có công thức I, lepimectin (CCN) + hợp

chất có công thức I, leptophos (1250) + hợp chất có công thức I, lindan (430) + hợp chất có công thức I, lirimfos (1251) + hợp chất có công thức I, lufenuron (490) + hợp chất có công thức I, lythidathion (1253) + hợp chất có công thức I, *m*-cumenyl methylcarbamate (tên theo IUPAC) (1014) + hợp chất có công thức I, magie phosphit (tên theo IUPAC) (640) + hợp chất có công thức I, malathion (492) + hợp chất có công thức I, malonoben (1254) + hợp chất có công thức I, mazidox (1255) + hợp chất có công thức I, mecarbam (502) + hợp chất có công thức I, mecarphon (1258) + hợp chất có công thức I, menazon (1260) + hợp chất có công thức I, mephosfolan (1261) + hợp chất có công thức I, thuỷ ngân (I) clorua (513) + hợp chất có công thức I, mesulfenfos (1263) + hợp chất có công thức I, metaflumizon (CCN) + hợp chất có công thức I, metam (519) + hợp chất có công thức I, metam-kali (tên tùy chọn) (519) + hợp chất có công thức I, metam-natri (519) + hợp chất có công thức I, methacrifos (1266) + hợp chất có công thức I, methamidophos (527) + hợp chất có công thức I, metansulfonyl florua (IUPAC/Tên tóm tắt hoá học) (1268) + hợp chất có công thức I, methidathion (529) + hợp chất có công thức I, methiocarb (530) + hợp chất có công thức I, methocrotophos (1273) + hợp chất có công thức I, methomyl (531) + hợp chất có công thức I, methopren (532) + hợp chất có công thức I, methoquin-butyl (1276) + hợp chất có công thức I, methothrin (tên tùy chọn) (533) + hợp chất có công thức I, metoxyclo (534) + hợp chất có công thức I, metoxyfenozit (535) + hợp chất có công thức I, methyl bromua (537) + hợp chất có công thức I, methyl isothioxyanat (543) + hợp chất có công thức I, methylcloroform (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, metylen clorua [CCN] + hợp chất có công thức I, metofluthrin [CCN] + hợp chất có công thức I, metolcarb (550) + hợp chất có công thức I, metoxadiazon (1288) + hợp chất có công thức I, mevinphos (556) + hợp chất có công thức I, mexacarb (1290) + hợp chất có công thức I, milbemectin (557) + hợp chất có công thức I, milbemycin oxim (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, mipafox (1293) + hợp chất có công thức I, mirex (1294) + hợp chất có công thức I, monocrotophos (561) + hợp chất có công thức I, morphothion (1300) + hợp chất có công thức I, moxitectin (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, naftalofos (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, naled (567) + hợp chất có công thức I, naphthalen (IUPAC/Tên tóm tắt hoá học) (1303) + hợp chất có công thức I, NC-170 (mã mở rộng) (1306) + hợp chất có công thức I, NC-184 (mã hợp chất) + hợp chất có công thức I, nicotine (578) + hợp chất có

công thức I, nicotin sulfat (578) + hợp chất có công thức I, nifluridid (1309) + hợp chất có công thức I, nitenpyram (579) + hợp chất có công thức I, nithiazin (1311) + hợp chất có công thức I, nitrilacarb (1313) + hợp chất có công thức I, nitrilacarb 1:1 phức kẽm clorua (1313) + hợp chất có công thức I, NNI-0101 (mã hợp chất) + hợp chất có công thức I, NNI-0250 (mã hợp chất) + hợp chất có công thức I, nornicotin (tên thông thường) (1319) + hợp chất có công thức I, novaluron (585) + hợp chất có công thức I, noviflumuron (586) + hợp chất có công thức I, *O*-5-diclo-4-iodophenyl *O*-ethyl etylphosphonothioat (tên theo IUPAC) (1057) + hợp chất có công thức I, *O,O*-diethyl *O*-4-metyl-2-oxo-2*H*-chromen-7-yl phosphorothioat (tên theo IUPAC) (1074) + hợp chất có công thức I, *O,O*-diethyl *O*-6-metyl-2-propylpyrimidin-4-yl phosphorothioat (tên theo IUPAC) (1075) + hợp chất có công thức I, *O,O,O',O'*-tetrapropyl dithiopyrophosphat (tên theo IUPAC) (1424) + hợp chất có công thức I, axit oleic (tên theo IUPAC) (593) + hợp chất có công thức I, omethoat (594) + hợp chất có công thức I, oxamyl (602) + hợp chất có công thức I, oxydemeton-metyl (609) + hợp chất có công thức I, oxydeprofos (1324) + hợp chất có công thức I, oxydisulfoton (1325) + hợp chất có công thức I, pp'-DDT (219) + hợp chất có công thức I, para-diclobenzen [CCN] + hợp chất có công thức I, parathion (615) + hợp chất có công thức I, parathion-metyl (616) + hợp chất có công thức I, penfluron (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, pentaclophenol (623) + hợp chất có công thức I, pentaclophenyl laurat (tên theo IUPAC) (623) + hợp chất có công thức I, permethrin (626) + hợp chất có công thức I, dầu mỏ (tên tùy chọn) (628) + hợp chất có công thức I, PH 60-38 (mã mở rộng) (1328) + hợp chất có công thức I, phenkapton (1330) + hợp chất có công thức I, phenothrin (630) + hợp chất có công thức I, phenthoat (631) + hợp chất có công thức I, phorat (636) + hợp chất có công thức I, phosalon (637) + hợp chất có công thức I, phosfolan (1338) + hợp chất có công thức I, phosmet (638) + hợp chất có công thức I, phosniclo (1339) + hợp chất có công thức I, phosphamidon (639) + hợp chất có công thức I, phosphin (tên theo IUPAC) (640) + hợp chất có công thức I, phoxim (642) + hợp chất có công thức I, phoxim-metyl (1340) + hợp chất có công thức I, pirimetaphos (1344) + hợp chất có công thức I, pirimicarb (651) + hợp chất có công thức I, pirimiphos-etyl (1345) + hợp chất có công thức I, pirimiphos-metyl (652) + hợp chất có công thức I, chất đồng phân polyclodixyclopentadien (tên theo IUPAC) (1346) + hợp chất có công thức I, polycloterpen (tên thông thường) (1347) + hợp chất

có công thức I, kali arsenit [CCN] + hợp chất có công thức I, kali thioxyanat [CCN] + hợp chất có công thức I, prallethrin (655) + hợp chất có công thức I, precocen I (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, precocen II (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, precocen III (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, primidophos (1349) + hợp chất có công thức I, profenofos (662) + hợp chất có công thức I, profluthrin [CCN] + hợp chất có công thức I, promaxyl (1354) + hợp chất có công thức I, promecarb (1355) + hợp chất có công thức I, propaphos (1356) + hợp chất có công thức I, propetamphos (673) + hợp chất có công thức I, propoxur (678) + hợp chất có công thức I, prothidathion (1360) + hợp chất có công thức I, prothiofos (686) + hợp chất có công thức I, prothoat (1362) + hợp chất có công thức I, protrifenbut [CCN] + hợp chất có công thức I, pymetrozin (688) + hợp chất có công thức I, pyraclofos (689) + hợp chất có công thức I, pyrafluprol [CCN] + hợp chất có công thức I, pyrazophos (693) + hợp chất có công thức I, pyresmethrin (1367) + hợp chất có công thức I, pyrethrin I (696) + hợp chất có công thức I, pyrethrin II (696) + hợp chất có công thức I, pyrethrin (696) + hợp chất có công thức I, pyridaben (699) + hợp chất có công thức I, pyridalyl (700) + hợp chất có công thức I, pyridaphenthion (701) + hợp chất có công thức I, pyrifluquinazon [CCN] + hợp chất có công thức I, pyrimidifen (706) + hợp chất có công thức I, pyrimitat (1370) + hợp chất có công thức I, pyriprol [CCN] + hợp chất có công thức I, pyriproxifen (708) + hợp chất có công thức I, quassia (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, quinalphos (711) + hợp chất có công thức I, quinalphos-metyl (1376) + hợp chất có công thức I, quinothion (1380) + hợp chất có công thức I, quintiofos (1381) + hợp chất có công thức I, R-1492 (mã mở rộng) (1382) + hợp chất có công thức I, rafoxanit (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, resmethrin (719) + hợp chất có công thức I, rotenon (722) + hợp chất có công thức I, RU 15525 (mã mở rộng) (723) + hợp chất có công thức I, RU 25475 (mã mở rộng) (1386) + hợp chất có công thức I, ryania (tên tùy chọn) (1387) + hợp chất có công thức I, ryanodin (tên thông thường) (1387) + hợp chất có công thức I, sabadilla (tên tùy chọn) (725) + hợp chất có công thức I, schradan (1389) + hợp chất có công thức I, sebufos (tên tùy chọn) + hợp chất có công thức I, selamectin (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, SI-0009 (mã hợp chất) + hợp chất có công thức I, SI-0205 (mã hợp chất) + hợp chất có công thức I, SI-0404 (mã hợp chất) + hợp chất có công thức I, SI-0405 (mã hợp chất) + hợp chất có công thức I, silafluofen (728)

+ hợp chất có công thức I, SN 72129 (mã mở rộng) (1397) + hợp chất có công thức I, natri arsenit [CCN] + hợp chất có công thức I, natri xyanua (444) + hợp chất có công thức I, natri florua (IUPAC/Tên tóm tắt hoá học) (1399) + hợp chất có công thức I, natri hexaflosilicat (1400) + hợp chất có công thức I, natri pentaclophenoxit (623) + hợp chất có công thức I, natri selenat (tên theo IUPAC) (1401) + hợp chất có công thức I, natri thioxyanat [CCN] + hợp chất có công thức I, sophamit (1402) + hợp chất có công thức I, spinetoram [CCN] + hợp chất có công thức I, spinosat (737) + hợp chất có công thức I, spiromesifen (739) + hợp chất có công thức I, spirotetramat [CCN] + hợp chất có công thức I, sulcofuron (746) + hợp chất có công thức I, sulcofuron-natri (746) + hợp chất có công thức I, sulfluramid (750) + hợp chất có công thức I, sulfotep (753) + hợp chất có công thức I, sulfoxaflor [CCN] + hợp chất có công thức I, sulfuryl florua (756) + hợp chất có công thức I, sulprofos (1408) + hợp chất có công thức I, dầu hắc ín (tên tùy chọn) (758) + hợp chất có công thức I, tau-fluvalinat (398) + hợp chất có công thức I, tazimcarb (1412) + hợp chất có công thức I, TDE (1414) + hợp chất có công thức I, tebufenozit (762) + hợp chất có công thức I, tebufenpyrat (763) + hợp chất có công thức I, tebupirimfos (764) + hợp chất có công thức I, teflubenzuron (768) + hợp chất có công thức I, tefluthrin (769) + hợp chất có công thức I, temephos (770) + hợp chất có công thức I, TEPP (1417) + hợp chất có công thức I, terallethrin (1418) + hợp chất có công thức I, terbam (tên tùy chọn) + hợp chất có công thức I, terbufos (773) + hợp chất có công thức I, tetracloetan [CCN] + hợp chất có công thức I, tetraclovinphos (777) + hợp chất có công thức I, tetramethrin (787) + hợp chất có công thức I, tetrametylfluthrin (CAS. Reg. No.: 84937-88-2) + hợp chất có công thức I, theta-xypermethrin (204) + hợp chất có công thức I, thiacloprit (791) + hợp chất có công thức I, thiafenox (tên tùy chọn) + hợp chất có công thức I, thiamethoxam (792) + hợp chất có công thức I, thicrofos (1428) + hợp chất có công thức I, thiocarboxim (1431) + hợp chất có công thức I, thioxyclam (798) + hợp chất có công thức I, thioxyclam hydro oxalat (798) + hợp chất có công thức I, thiodicarb (799) + hợp chất có công thức I, thiofanox (800) + hợp chất có công thức I, thiometon (801) + hợp chất có công thức I, thionazin (1434) + hợp chất có công thức I, thiosultap (803) + hợp chất có công thức I, thiosultap-natri (803) + hợp chất có công thức I, thuringiensin (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, tolfenpyrat (809) + hợp chất có công thức I, tralomethrin (812) + hợp chất có công thức I, transfluthrin (813) +h chất có công thức

I, transpermethrin (1440) + hợp chất có công thức I, triamiphos (1441) + hợp chất có công thức I, triazamat (818) + hợp chất có công thức I, triazophos (820) + hợp chất có công thức I, triazuron (tên tùy chọn) + hợp chất có công thức I, triclofon (824) + hợp chất có công thức I, triclometaphos-3 (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, triclonat (1452) + hợp chất có công thức I, trifenofos (1455) + hợp chất có công thức I, triflumuron (835) + hợp chất có công thức I, trimethacarb (840) + hợp chất có công thức I, tripren (1459) + hợp chất có công thức I, vamidothion (847) + hợp chất có công thức I, vaniliprol [CCN] + hợp chất có công thức I, veratridin (tên tùy chọn) (725) + hợp chất có công thức I, veratrin (tên tùy chọn) (725) + hợp chất có công thức I, XMC (853) + hợp chất có công thức I, xylylcarb (854) + hợp chất có công thức I, YI-5302 (mã hợp chất) + hợp chất có công thức I, zeta-xypermethrin (205) + hợp chất có công thức I, zetamethrin (tên tùy chọn) + hợp chất có công thức I, kẽm phosphit (640) + hợp chất có công thức I, zolaprofos (1469) và ZXI 8901 (mã mở rộng) (858) + hợp chất có công thức I,

chất diệt nhuễn thể được chọn từ nhóm các chất bao gồm bis(tributyltin) oxit (tên theo IUPAC) (913) + hợp chất có công thức I, bromaxetamit [CCN] + hợp chất có công thức I, canxi arsenat [CCN] + hợp chất có công thức I, cloethocarb (999) + hợp chất có công thức I, đồng axetoarsenit [CCN] + hợp chất có công thức I, đồng sulfat (172) + hợp chất có công thức I, fentin (347) + hợp chất có công thức I, sắt phosphat (tên theo IUPAC) (352) + hợp chất có công thức I, metaldehyt (518) + hợp chất có công thức I, methiocarb (530) + hợp chất có công thức I, niclosamit (576) + hợp chất có công thức I, niclosamit-olamin (576) + hợp chất có công thức I, pentaclophenol (623) + hợp chất có công thức I, natri pentaclophenoxit (623) + hợp chất có công thức I, tazimcarb (1412) + hợp chất có công thức I, thiodicarb (799) + hợp chất có công thức I, tralopyril [CCN] + hợp chất có công thức I, tributyltin oxit (913) + hợp chất có công thức I, trifenmorph (1454) + hợp chất có công thức I, trimethacarb (840) + hợp chất có công thức I, triphenyltin axetat (tên theo IUPAC) (347) và triphenyltin hydroxit (tên theo IUPAC) (347) + hợp chất có công thức I,

chất diệt giun tròn được chọn từ nhóm các chất bao gồm AKD-3088 (mã hợp chất) + hợp chất có công thức I, 1,2-dibrom-3-clopropan (IUPAC/Tên tóm tắt hoá học) (1045) + hợp chất có công thức I, 1,2-diclopropan (IUPAC/ Tên tóm tắt hoá học) (1062) + hợp chất có công thức I, 1,2-diclopropan với 1,3-diclopropen (tên theo IUPAC) (1063)

+ hợp chất có công thức I, 1,3-diclopropen (233) + hợp chất có công thức I, 3,4-diclotetrahydrothiophen 1,1-dioxit (IUPAC/Tên tóm tắt hoá học) (1065) + hợp chất có công thức I, 3-(4-clophenyl)-5-metyl-rhodanin (tên theo IUPAC) (980) + hợp chất có công thức I, axit 5-metyl-6-thioxo-1,3,5-thiadiazinan-3-ylaxetic (tên theo IUPAC) (1286) + hợp chất có công thức I, 6-isopentenylaminpurin (tên tùy chọn) (210) + hợp chất có công thức I, abamectin (1) + hợp chất có công thức I, axetoprol [CCN] + hợp chất có công thức I, alanycarb (15) + hợp chất có công thức I, aldicarb (16) + hợp chất có công thức I, aldoxycarb (863) + hợp chất có công thức I, AZ 60541 (mã hợp chất) + hợp chất có công thức I, benclothiaz [CCN] + hợp chất có công thức I, benomyl (62) + hợp chất có công thức I, butylpyridaben (tên tùy chọn) + hợp chất có công thức I, cadusafos (109) + hợp chất có công thức I, carbofuran (118) + hợp chất có công thức I, carbon disulfit (945) + hợp chất có công thức I, carbosulfan (119) + hợp chất có công thức I, clopicrin (141) + hợp chất có công thức I, clopyrifos (145) + hợp chất có công thức I, cloethocarb (999) + hợp chất có công thức I, xytokinin (tên tùy chọn) (210) + hợp chất có công thức I, dazomet (216) + hợp chất có công thức I, DBCP (1045) + hợp chất có công thức I, DCIP (218) + hợp chất có công thức I, diamidafos (1044) + hợp chất có công thức I, dichlofenthion (1051) + hợp chất có công thức I, dicliphos (tên tùy chọn) + hợp chất có công thức I, dimethoat (262) + hợp chất có công thức I, doramectin (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, emamectin (291) + hợp chất có công thức I, emamectin benzoat (291) + hợp chất có công thức I, eprinomectin (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, ethoprophos (312) + hợp chất có công thức I, etylen dibromua (316) + hợp chất có công thức I, fenamiphos (326) + hợp chất có công thức I, fenpyrat (tên tùy chọn) + hợp chất có công thức I, fensulfothion (1158) + hợp chất có công thức I, fluensulfon (CAS. Reg. No.: 318290-98-1) + hợp chất có công thức I, fosthiazat (408) + hợp chất có công thức I, fosthietan (1196) + hợp chất có công thức I, furfural (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, GY-81 (mã mở rộng) (423) + hợp chất có công thức I, heterophos [CCN] + hợp chất có công thức I, imixyafos [CCN] + hợp chất có công thức I, iodometan (tên theo IUPAC) (542) + hợp chất có công thức I, isamidofos (1230) + hợp chất có công thức I, isazofos (1231) + hợp chất có công thức I, ivermectin (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, kinetin (tên tùy chọn) (210) + hợp chất có công thức I, mecarphon (1258) + hợp chất có công thức I, metam (519) + hợp chất có công thức I, metam-kali (tên tùy chọn)

(519) + hợp chất có công thức I, metam-natri (519) + hợp chất có công thức I, metyl bromua (537) + hợp chất có công thức I, metyl isothioxyanat (543) + hợp chất có công thức I, milbemycin oxim (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, moxictin (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, chế phẩm *Myrothecium verrucari* (tên tùy chọn) (565) + hợp chất có công thức I, NC-184 (mã hợp chất) + hợp chất có công thức I, oxamyl (602) + hợp chất có công thức I, phorat (636) + hợp chất có công thức I, phosphamidon (639) + hợp chất có công thức I, phosphocarb [CCN] + hợp chất có công thức I, sebufos (tên tùy chọn) + hợp chất có công thức I, selamectin (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I, spinosat (737) + hợp chất có công thức I, terbam (tên tùy chọn) + hợp chất có công thức I, terbufos (773) + hợp chất có công thức I, tetraclothiophen (IUPAC/ Tên tóm tắt hoá học) (1422) + hợp chất có công thức I, thiafenox (tên tùy chọn) + hợp chất có công thức I, thionazin (1434) + hợp chất có công thức I, triazophos (820) + hợp chất có công thức I, triazuron (tên tùy chọn) + hợp chất có công thức I, xlenols [CCN] + hợp chất có công thức I, YI-5302 (mã hợp chất) và zeatin (tên tùy chọn) (210) + hợp chất có công thức I,

chất ức chế nitrat hóa được chọn từ nhóm các chất bao gồm kali etylxanthat [CCN] và nitrapyrin (580) + hợp chất có công thức I,

chất hoạt hóa thực vật được chọn từ nhóm các chất bao gồm acibenzolar (6) + hợp chất có công thức I, acibenzolar-*S*-metyl (6) + hợp chất có công thức I, probenazol (658) và chiết xuất *Reynoutria sachalinensis* (tên tùy chọn) (720) + hợp chất có công thức I,

chất diệt động vật gặm nhấm được chọn từ nhóm các chất bao gồm 2-isovalerylindan-1,3-dion (tên theo IUPAC) (1246) + hợp chất có công thức I, 4-(quinoxalin-2-ylamin)benzensulfonamit (tên theo IUPAC) (748) + hợp chất có công thức I, alpha-clohydrin [CCN] + hợp chất có công thức I, nhôm phosphit (640) + hợp chất có công thức I, antu (880) + hợp chất có công thức I, oxit arsen (882) + hợp chất có công thức I, bari carbonat (891) + hợp chất có công thức I, bithiosemi (912) + hợp chất có công thức I, brodifacoum (89) + hợp chất có công thức I, bromadiolon (91) + hợp chất có công thức I, bromethalin (92) + hợp chất có công thức I, canxi xyanua (444) + hợp chất có công thức I, cloaloza (127) + hợp chất có công thức I, clophaxinon (140) + hợp chất có công thức I, cholecalxiferol (tên tùy chọn) (850) + hợp chất có công thức I, coumaclo (1004) + hợp chất có công thức I, coumafuryl (1005) + hợp chất có công thức I, coumatralyl (175) + hợp chất có công thức I, crimidin (1009) + hợp chất có

công thức I, difenacoum (246) + hợp chất có công thức I, difethialon (249) + hợp chất có công thức I, diphaxinon (273) + hợp chất có công thức I, ergocalciferol (301) + hợp chất có công thức I, flocoumafen (357) + hợp chất có công thức I, floaxetamit (379) + hợp chất có công thức I, flupropadin (1183) + hợp chất có công thức I, flupropadin hydroclorua (1183) + hợp chất có công thức I, gamma-HCH (430) + hợp chất có công thức I, HCH (430) + hợp chất có công thức I, hydro xyanua (444) + hợp chất có công thức I, iodometan (tên theo IUPAC) (542) + hợp chất có công thức I, lindan (430) + hợp chất có công thức I, magie phosphit (tên theo IUPAC) (640) + hợp chất có công thức I, metyl bromua (537) + hợp chất có công thức I, norbormid (1318) + hợp chất có công thức I, phosaxetim (1336) + hợp chất có công thức I, phosphin (tên theo IUPAC) (640) + hợp chất có công thức I, phospho [CCN] + hợp chất có công thức I, pindon (1341) + hợp chất có công thức I, kali arsenit [CCN] + hợp chất có công thức I, pyrinuron (1371) + hợp chất có công thức I, scillirosit (1390) + hợp chất có công thức I, natri arsenit [CCN] + hợp chất có công thức I, natri xyanua (444) + hợp chất có công thức I, natri floaxetat (735) + hợp chất có công thức I, strychnin (745) + hợp chất có công thức I, thallium sulfat [CCN] + hợp chất có công thức I, warfarin (851) và kẽm phosphit (640) + hợp chất có công thức I,

chất hiệp đồng được chọn từ nhóm các chất bao gồm 2-(2-butoxyetoxy)etyl piperonylat (tên theo IUPAC) (934) + hợp chất có công thức I, 5-(1,3-benzodioxol-5-yl)-3-hexylxyclohex-2-enon (tên theo IUPAC) (903) + hợp chất có công thức I, farnesol với nerolidol (tên tùy chọn) (324) + hợp chất có công thức I, MB-599 (mã mở rộng) (498) + hợp chất có công thức I, mgK 264 (mã mở rộng) (296) + hợp chất có công thức I, piperonyl butoxit (649) + hợp chất có công thức I, piprotal (1343) + hợp chất có công thức I, chất đồng phân propyl (1358) + hợp chất có công thức I, S421 (mã mở rộng) (724) + hợp chất có công thức I, sesamex (1393) + hợp chất có công thức I, sesasmolin (1394) và sulfoxit (1406) + hợp chất có công thức I,

chất diệt động vật được chọn từ nhóm các chất bao gồm anthraquinon (32) + hợp chất có công thức I, cloaloza (127) + hợp chất có công thức I, đồng naphthenat [CCN] + hợp chất có công thức I, đồng oxyclorua (171) + hợp chất có công thức I, diazinon (227) + hợp chất có công thức I, dixyclopentadien (tên hoá học) (1069) + hợp chất có công thức I, guazatin (422) + hợp chất có công thức I, guazatin axetat (422) + hợp chất có công thức I, methiocarb (530) + hợp chất có công thức I, pyridin-4-amin (tên theo

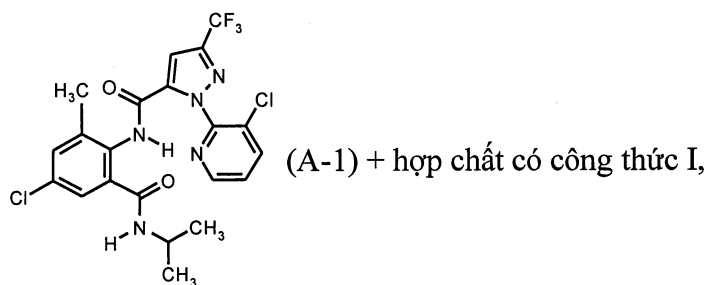
IUPAC) (23) + hợp chất có công thức I, thiram (804) + hợp chất có công thức I, trimethacarb (840) + hợp chất có công thức I, kẽm naphthenat [CCN] và ziram (856) + hợp chất có công thức I,

chất diệt virus được chọn từ nhóm các chất bao gồm imanin (tên tùy chọn) [CCN] và ribavirin (tên tùy chọn) [CCN] + hợp chất có công thức I,

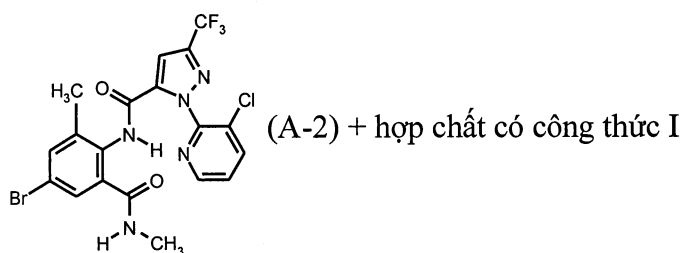
chất bảo vệ vết thương được chọn từ nhóm các chất bao gồm thủy ngân oxit (512) + hợp chất có công thức I, octhilinon (590) và thiophanat-metyl (802) + hợp chất có công thức I,

chất diệt côn trùng được chọn từ nhóm gồm hợp chất có

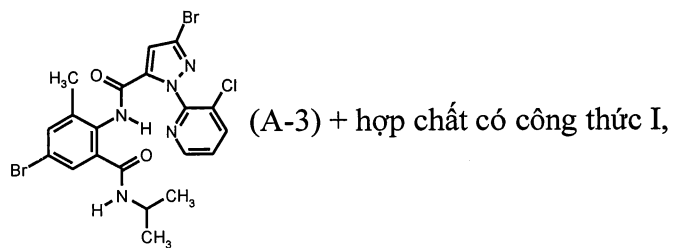
công thức A-1



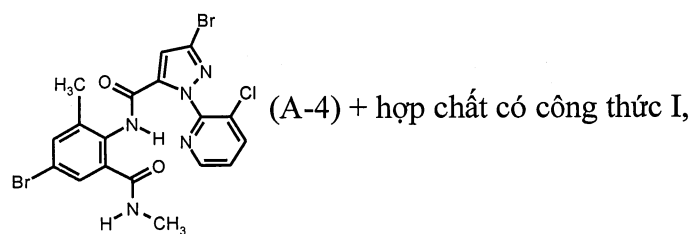
công thức A-2



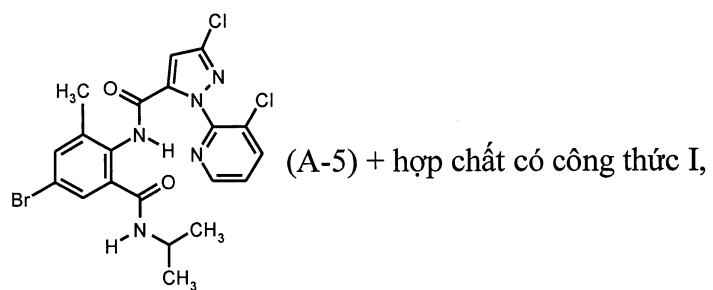
công thức A-3



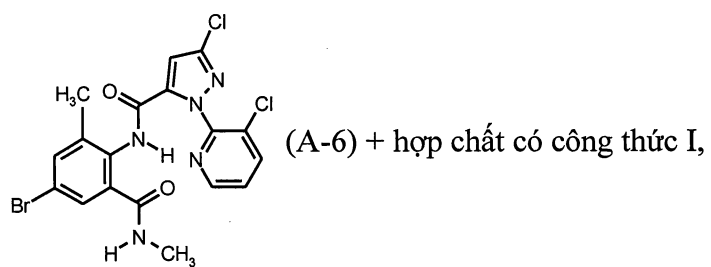
công thức A-4



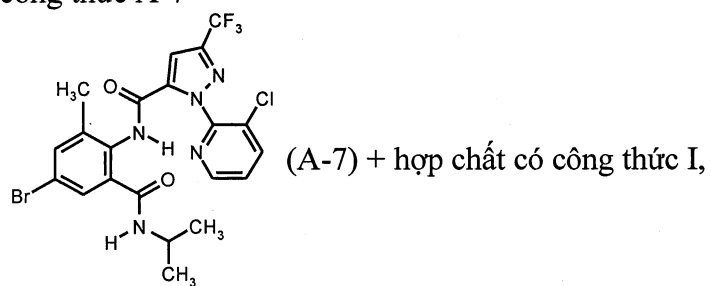
công thức A-5



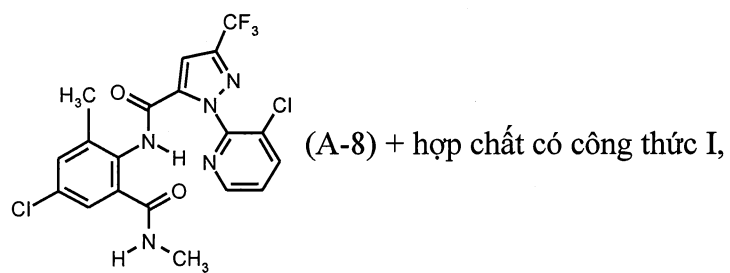
công thức A-6



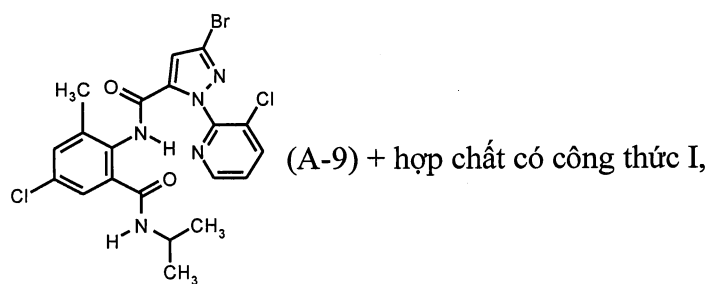
công thức A-7



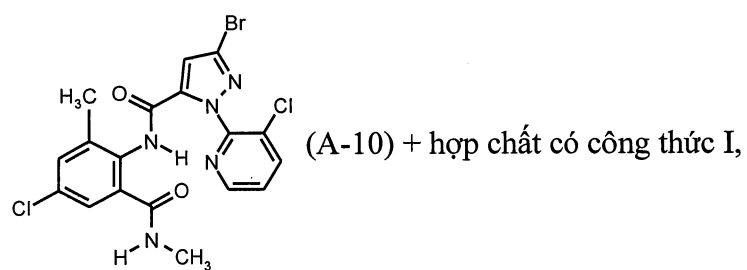
công thức A-8



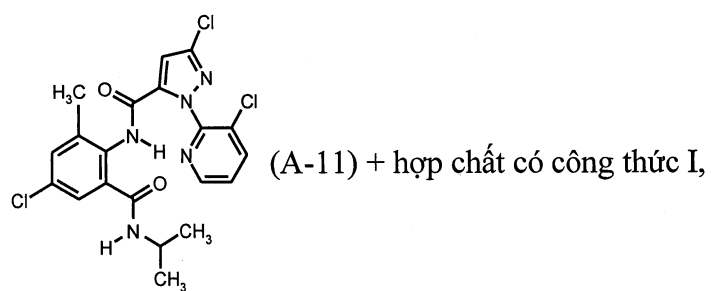
công thức A-9



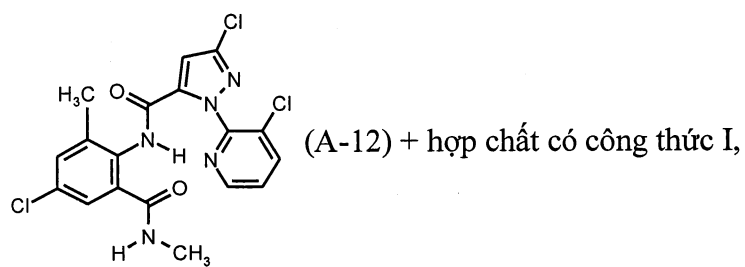
công thức A-10



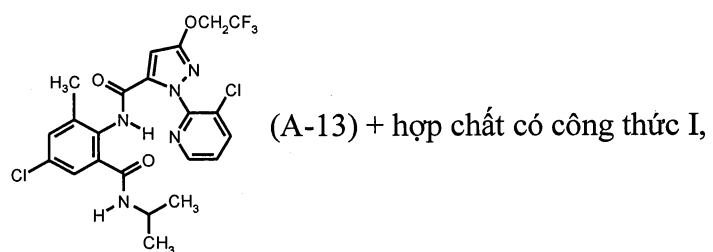
công thức A-11



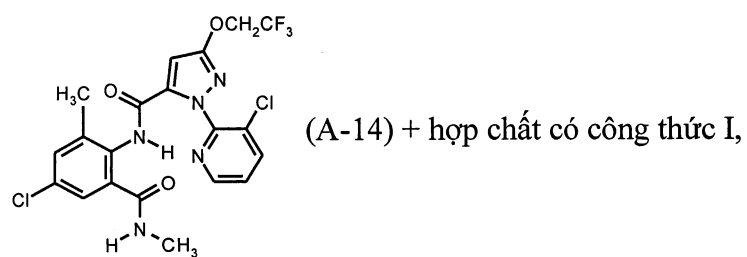
công thức A-12



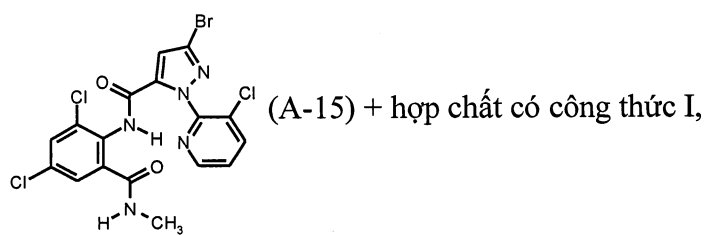
công thức A-13



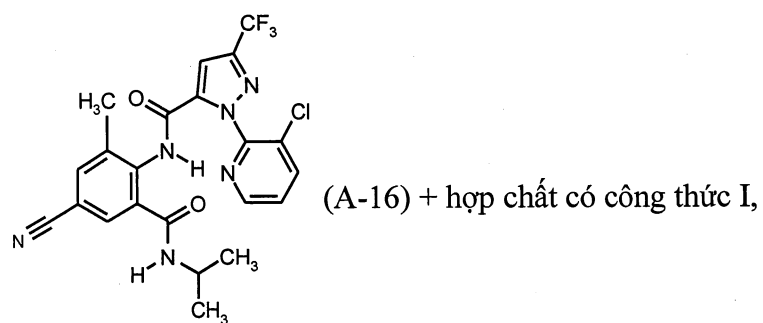
công thức A-14



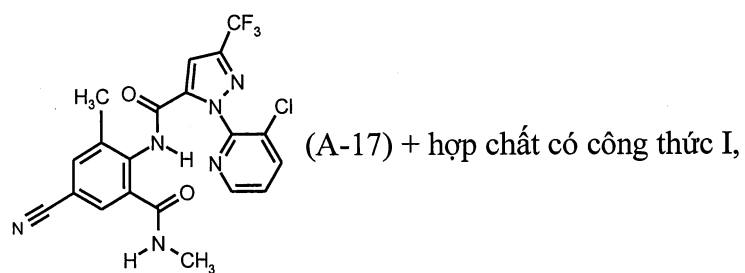
công thức A-15



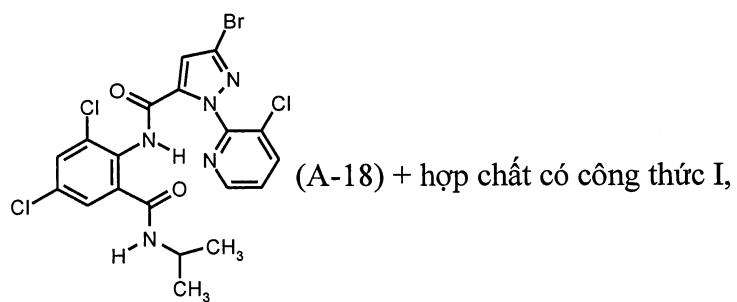
công thức A-16



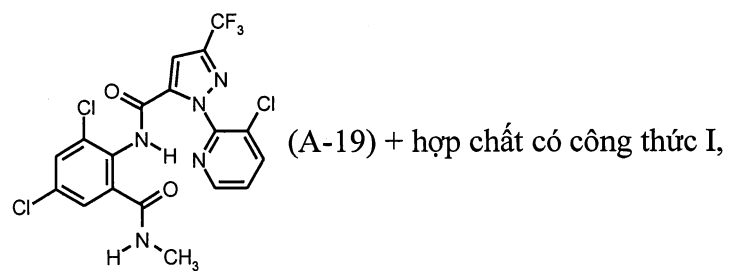
công thức A-17



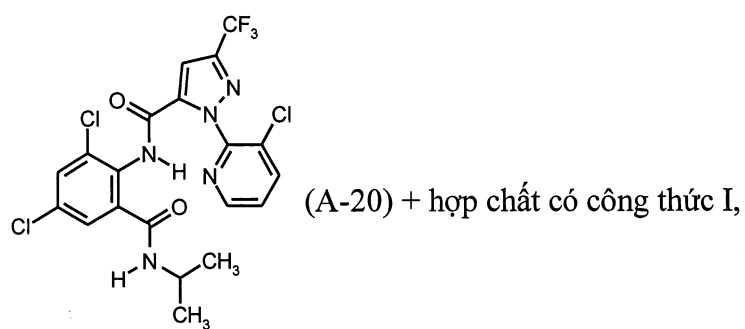
công thức A-18



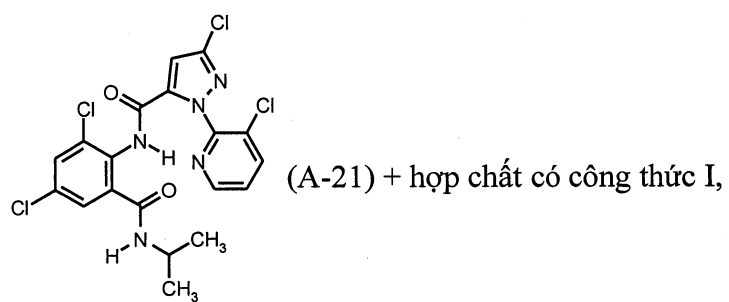
công thức A-19



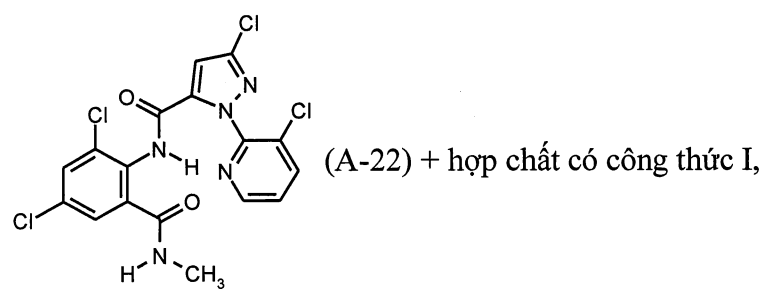
công thức A-20



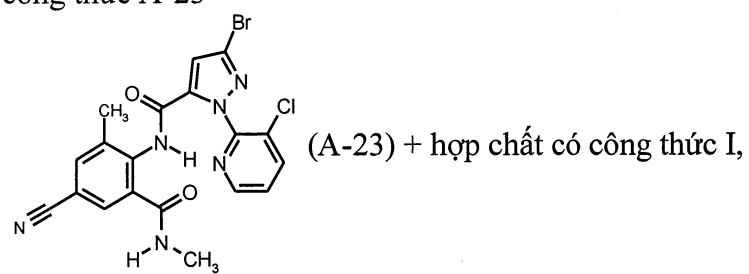
công thức A-21



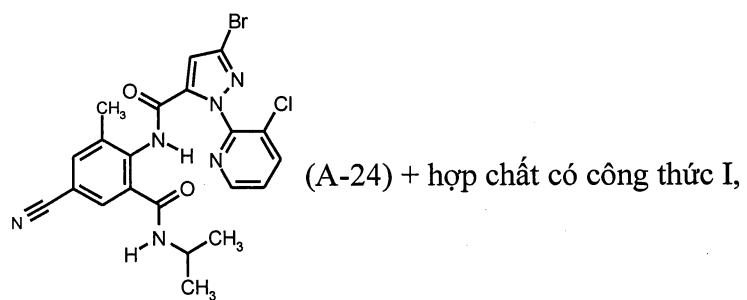
công thức A-22



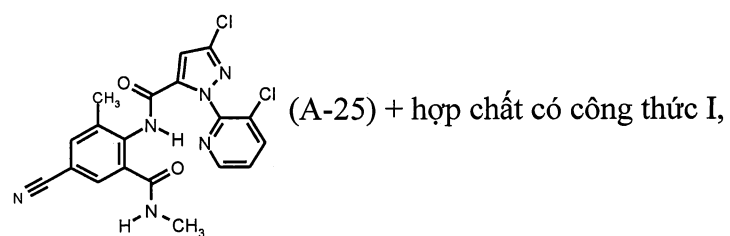
công thức A-23



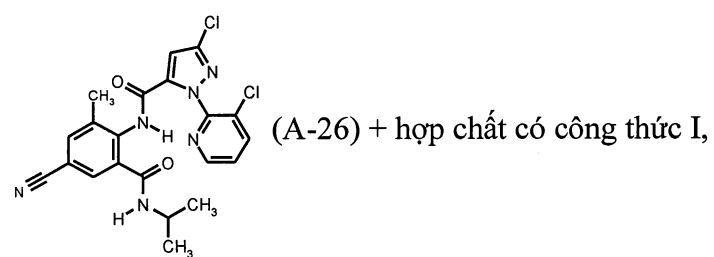
công thức A-24



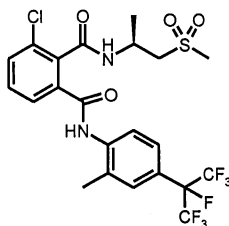
công thức A-25



công thức A-26



và công thức A-27



(A-27) + hợp chất có công thức I.

Các tham chiếu trong ngoặc đơn sau các thành phần hoạt tính, ví dụ [3878-19-1] đề cập đến số đăng ký tóm tắt hóa học. Các hợp chất có công thức từ A-1 đến A-26 được mô tả trong công bố đơn quốc tế WO 03/015518 hoặc trong WO 04/067528. hợp chất có công thức A-27 được mô tả trong công bố đơn quốc tế WO 06/022225 và trong công bố đơn quốc tế WO 07/112844. Các hợp chất trong hỗn hợp nêu trên đã được biết. Trong trường hợp các thành phần hoạt tính có trong "The Pesticide Manual" [The Pesticide Manual - A World Compendium; Thirteenth Edition; Editor: C. D. S. Tomlin; The British Crop Protection Council], chúng được mô tả ở đó dưới các số đăng ký trong dấu ngoặc đơn nêu trên đối với các hợp chất cụ thể; ví dụ, hợp chất "abamectin" được mô tả trong số đăng ký (1). Trong trường hợp "[CCN]" được bổ sung trên đây vào hợp chất cụ thể, hợp chất được đề cập có trong "Compendium of Pesticide Common Names", có thể truy cập internet [A. Wood; Compendium of Pesticide Common Names, Copyright © 1995-2004]; ví dụ, hợp chất "axetoprol" được mô tả tại địa chỉ trên internet <http://www.alanwood.net/pesticides/axetoprol.html>.

Phần lớn các thành phần hoạt tính được mô tả ở trên được gọi là "tên thường gọi", "tên thường gọi ISO" thích hợp hoặc "tên thường gọi" khác được dùng trong các trường hợp riêng. Nếu sự chỉ định này không phải là "tên thường gọi", bản chất của sự chỉ định được sử dụng thay vì được xác định trong dấu ngoặc đơn đối với hợp chất cụ thể; trong trường hợp đó, Tên theo IUPAC, Tên theo IUPAC/tên hóa học viết tắt, "tên hóa học", "tên thông thường", "tên hợp chất" hoặc "mã mở rộng" được sử dụng hoặc, nếu không sự chỉ định nào trong số các chỉ định đó hoặc "tên thường gọi" không được dùng, "tên tùy chọn" được sử dụng. "CAS Reg. No" có nghĩa là số đăng ký tóm tắt hóa học.

Hợp chất có công thức I theo sáng chế cũng có thể được sử dụng kết hợp với một hoặc nhiều chất diệt nấm. Cụ thể là, trong các hỗn hợp sau đây của hợp chất có công thức I với các thuốc diệt nấm, thuật ngữ hợp chất có công thức I tốt hơn là đề cập đến hợp chất được chọn từ một trong số các bảng từ 1 đến 116:

hợp chất có công thức I + (*E*)-*N*-metyl-2-[2-(2,5-dimetylphenoxy)metyl]phenyl]-2-metoxi-iminoaxetamit (SSF-129), hợp chất có công thức I + 4-brom-2-xyano-*N,N*-dimetyl-6-triflometylbenzimidazol-1-sulphonamit, hợp chất có công thức I + α -[*N*-(3-clo-2,6-xylyl)-2-metoxaxetamido]- γ -butyrolactone, hợp chất có công thức I + 4-clo-2-xyano-*N,N*-dimetyl-5-*p*-tolylimidazol-1-sulfonamit (IKF-916, xyamidazosulfamid), hợp chất có công thức I + 3-5-diclo-*N*-(3-clo-1-etyl-1-metyl-2-oxopropyl)-4-metylbenzamit (RH-7281, zoxamit), hợp chất có công thức I + *N*-allyl-4,5,-dimetyl-2-trimetylsilylthiophen-3-carboxamit (MON65500), hợp chất có công thức I + *N*-(1-xyano-1,2-dimetylpropyl)-2-(2,4-diclophenoxy)propionamit (AC382042), hợp chất có công thức I + *N*-(2-metoxi-5-pyridyl)-xyclopropan carboxamit, hợp chất có công thức I + acibenzolar, hợp chất có công thức I + alanycarb, hợp chất có công thức I + aldimorph, hợp chất có công thức I + amisulbrom, hợp chất có công thức I + anilazin, hợp chất có công thức I + azaconazol, hợp chất có công thức I + azoxystrobin, hợp chất có công thức I + benalaxyl, hợp chất có công thức I + benalaxyl-M, hợp chất có công thức I + benomyl, hợp chất có công thức I + benthiavalicarb, hợp chất có công thức I + biloxazol, hợp chất có công thức I + bitertanol, hợp chất có công thức I + bixafen, hợp chất có công thức I + blastixidin S, hợp chất có công thức I + boscalid, hợp chất có công thức I + bromuconazol, hợp chất có công thức I + bupirimat, hợp chất có công thức I + captafol, hợp chất có công thức I + captan, hợp chất có công thức I + carbendazim, hợp chất có công thức I + carbendazim clohydrat, hợp chất có công thức I + carboxin, hợp chất có công thức I + carpropamid, carvon, hợp chất có công thức I + CGA41396, hợp chất có công thức I + CGA41397, hợp chất có công thức I + chinomethionat, hợp chất có công thức I + chlazafenon, hợp chất có công thức I + clothalonil, hợp chất có công thức I + clozolinat, hợp chất có công thức I + clozylacon, hợp chất có công thức I + hợp chất chứa đồng như đồng oxyclorea, đồng oxyquinolat, đồng sulphat, đồng tallat và hỗn hợp Bordeaux, hợp chất có công thức I + xyazofamid, hợp chất có công thức I + xyflufenamid, hợp chất có công thức I + xymoxanil, hợp chất có công thức I +

xyproconazol, hợp chất có công thức I + xyprodinil, hợp chất có công thức I + debacarb, hợp chất có công thức I + di-2-pyridyl disulphide 1,1'-dioxit, hợp chất có công thức I + dichlofluanid, hợp chất có công thức I + diclomezin, hợp chất có công thức I + dicloran, hợp chất có công thức I + diethofencarb, hợp chất có công thức I + difenoconazol, hợp chất có công thức I + difenzoquat, hợp chất có công thức I + diflumetorim, hợp chất có công thức I + *O,O*-di-*iso*-propyl-*S*-benzyl thiophosphat, hợp chất có công thức I + dimefluazol, hợp chất có công thức I + dimetconazol, hợp chất có công thức I + dimethomorph, hợp chất có công thức I + dimethirimol, hợp chất có công thức I + dimoxystrobin, hợp chất có công thức I + diniconazol, hợp chất có công thức I + dinocap, hợp chất có công thức I + dithianon, hợp chất có công thức I + dodexyl dimetyl amoni clorua, hợp chất có công thức I + dodemorph, hợp chất có công thức I + dodin, hợp chất có công thức I + doguadine, hợp chất có công thức I + edifenphos, hợp chất có công thức I + epoxiconazol, hợp chất có công thức I + ethirimol, hợp chất có công thức I + etyl(*Z*)-*N*-benzyl-*N*[(metyl(metylthioethylidenaminoxycarbonyl)amin]thio)- β -alaninat, hợp chất có công thức I + etridiazol, hợp chất có công thức I + famoxadon, hợp chất có công thức I + fenamidon (RPA407213), hợp chất có công thức I + fenarimol, hợp chất có công thức I + fenbuconazol, hợp chất có công thức I + fenfuram, hợp chất có công thức I + fenhexamid (KBR2738), hợp chất có công thức I + fenoxanil, hợp chất có công thức I + fenpiclonil, hợp chất có công thức I + fenpropidin, hợp chất có công thức I + fenpropimorph, hợp chất có công thức I + fenpyrazamin/ipfenpyrazolon, hợp chất có công thức I + fentin axetat, hợp chất có công thức I + fentin hydroxit, hợp chất có công thức I + ferbam, hợp chất có công thức I + ferimzon, hợp chất có công thức I + fluazinam, hợp chất có công thức I + fludioxonil, hợp chất có công thức I + flumetover, hợp chất có công thức I + flumorph, hợp chất có công thức I + fluopicolit, hợp chất có công thức I + fluopyram, hợp chất có công thức I + fluoxastrobin, hợp chất có công thức I + floimide, hợp chất có công thức I + fluquinconazol, hợp chất có công thức I + flusilazol, hợp chất có công thức I + flutianil, hợp chất có công thức I + flutolanil, hợp chất có công thức I + flutriafol, hợp chất có công thức I + fluxapyroxad, hợp chất có công thức I + folpet, hợp chất có công thức I + fuberidazol, hợp chất có công thức I + furalaxyl, hợp chất có công thức I + furametpyr, hợp chất có công thức I + guazatin, hợp chất có công thức I + hexaconazol, hợp chất có công thức I +

hydroxyisoxazol, hợp chất có công thức I + hymexazol, hợp chất có công thức I + imazalil, hợp chất có công thức I + imibenconazol, hợp chất có công thức I + iminoctadin, hợp chất có công thức I + iminoctadin triaxetat, hợp chất có công thức I + ipconazol, hợp chất có công thức I + iprobenfos, hợp chất có công thức I + iprodione, hợp chất có công thức I + iprovalicarb (SZX0722), hợp chất có công thức I + isopropanyl butyl carbamat, hợp chất có công thức I + isoprothiolan, hợp chất có công thức I + isopyrazam, hợp chất có công thức I + isotianil, hợp chất có công thức I + kasugamyxin, hợp chất có công thức I + kresoxim-metyl, hợp chất có công thức I + LY186054, hợp chất có công thức I + LY211795, hợp chất có công thức I + LY248908, hợp chất có công thức I + mancozeb, hợp chất có công thức I + mandipropamid, hợp chất có công thức I + maneb, hợp chất có công thức I + mefenoxam, hợp chất có công thức I + mepanipyrim, hợp chất có công thức I + mepronil, hợp chất có công thức I + meptyldinocap, hợp chất có công thức I + metalaxyl, hợp chất có công thức I + metconazol, hợp chất có công thức I + metiram, hợp chất có công thức I + metiram-kẽm, hợp chất có công thức I + metominostrobin, hợp chất có công thức I + metrafenon, hợp chất có công thức I + myclobutanil, hợp chất có công thức I + neoasozin, hợp chất có công thức I + nickel dimetyldithiocarbamat, hợp chất có công thức I + nicobifen, hợp chất có công thức I + nitrothal-*iso*-propyl, hợp chất có công thức I + nuarimol, hợp chất có công thức I + ofurace, hợp chất có công thức I + hợp chất thuỷ ngân hữu cơ, hợp chất có công thức I + orysastrobin, hợp chất có công thức I + oxadixyl, hợp chất có công thức I + oxasulfuron, hợp chất có công thức I + oxolinic axit, hợp chất có công thức I + oxpoconazol, hợp chất có công thức I + oxycarboxin, hợp chất có công thức I + pefurazoat, hợp chất có công thức I + penconazol, hợp chất có công thức I + penxycuron, hợp chất có công thức I + penthiopyrad, hợp chất có công thức I + phenazin oxit, hợp chất có công thức I + phosetyl-Al, hợp chất có công thức I + axit phospho, hợp chất có công thức I + phthalogenua, hợp chất có công thức I + picoxystrobin (ZA1963), hợp chất có công thức I + polyoxin D, hợp chất có công thức I + polyram, hợp chất có công thức I + probenazol, hợp chất có công thức I + procloaz, hợp chất có công thức I + proxymidon, hợp chất có công thức I + propamocarb, hợp chất có công thức I + propiconazol, hợp chất có công thức I + propineb, hợp chất có công thức I + axit propionic, hợp chất có công thức I + proquinazid, hợp chất có công

thức I + prothioconazol, hợp chất có công thức I + pyraclostrobin, hợp chất có công thức I + pyrazophos, hợp chất có công thức I + pyribencarb, hợp chất có công thức I + pyrifenox, hợp chất có công thức I + pyrimethanil, hợp chất có công thức I + pyroquilon, hợp chất có công thức I + pyroxyfur, hợp chất có công thức I + pyrolnitrin, hợp chất có công thức I + hợp chất amoni bậc bốn, hợp chất có công thức I + quinomethionat, hợp chất có công thức I + quinoxifen, hợp chất có công thức I + quintozen, hợp chất có công thức I + sedaxan, hợp chất có công thức I + sipconazol (F-155), hợp chất có công thức I + natri pentaclophenat, hợp chất có công thức I + spiroxamin, hợp chất có công thức I + streptomycin, hợp chất có công thức I + lưu huỳnh, hợp chất có công thức I + tebuconazol, hợp chất có công thức I + tecloftalam, hợp chất có công thức I + tecnazen, hợp chất có công thức I + tetraconazol, hợp chất có công thức I + thiabendazol, hợp chất có công thức I + thifluzamid, hợp chất có công thức I + 2-(thioxyanometylthio)benzothiazol, hợp chất có công thức I + thiophanat--metyl, hợp chất có công thức I + thiram, hợp chất có công thức I + tiadinil, hợp chất có công thức I + timibenconazol, hợp chất có công thức I + tolclofos-metyl, hợp chất có công thức I + tolylfluanid, hợp chất có công thức I + triadimefon, hợp chất có công thức I + triadimenol, hợp chất có công thức I + triazbutil, hợp chất có công thức I + triazoxit, hợp chất có công thức I + trixyclozol, hợp chất có công thức I + tridemorph, hợp chất có công thức I + trifloxystrobin, hợp chất có công thức I + triforin, hợp chất có công thức I + triflumizol, hợp chất có công thức I + triticonazol, hợp chất có công thức I + validamycin A, hợp chất có công thức I + valiphenal, hợp chất có công thức I + vapam, hợp chất có công thức I + vinclozolin, hợp chất có công thức I + zineb và hợp chất có công thức I + ziram.

Hợp chất có công thức I có thể được trộn với đất, than bùn hoặc môi trường tạo rễ khác để bảo vệ thực vật khỏi các bệnh phát sinh từ hạt, bệnh phát sinh từ đất hoặc bệnh nấm lá.

Hợp chất có công thức I theo sáng chế cũng có thể được sử dụng kết hợp với một hoặc nhiều chất hiệp đồng. Cụ thể là, hỗn hợp sau đây của hợp chất có công thức I, trong đó thuật ngữ này tốt hơn là đề cập đến hợp chất được chọn từ một trong số các bảng từ 1 đến 102, là quan trọng:

hợp chất có công thức I + piperonyl butoxit, hợp chất có công thức I + sesamex, hợp chất có công thức I + safroxan và hợp chất có công thức I + dodexyl imidazol.

Hợp chất có công thức I theo sáng chế cũng có thể được sử dụng kết hợp với một hoặc nhiều chất diệt cỏ khác. Cụ thể là, các hỗn hợp sau đây của hợp chất có công thức I, trong đó thuật ngữ này tốt hơn là đề cập đến hợp chất được chọn từ một trong số các bảng từ 1 đến 102, là quan trọng:

hợp chất có công thức I + axetoclo, hợp chất có công thức I + axiflofen, hợp chất có công thức I + axiflofen-natri, hợp chất có công thức I + aclonifen, hợp chất có công thức I + acrolein, hợp chất có công thức I + alaclo, hợp chất có công thức I + alloxymid, hợp chất có công thức I + allyl rượu, hợp chất có công thức I + ametryn, hợp chất có công thức I + amicarbazone, hợp chất có công thức I + amidosulfuron, hợp chất có công thức I + aminxyclopyraclo, hợp chất có công thức I + aminpyralid, hợp chất có công thức I + amitrol, hợp chất có công thức I + amoni sulfamat, hợp chất có công thức I + anilofos, hợp chất có công thức I + asulam, hợp chất có công thức I + atraton, hợp chất có công thức I + atrazin, hợp chất có công thức I + azimsulfuron, hợp chất có công thức I + BCPC, hợp chất có công thức I + beflubutamid, hợp chất có công thức I + benazolin, hợp chất có công thức I + bencarbazon, hợp chất có công thức I + benfluralin, hợp chất có công thức I + benfuresat, hợp chất có công thức I + bensulfuron, hợp chất có công thức I + bensulfuron-metyl, hợp chất có công thức I + bensulid, hợp chất có công thức I + bentazon, hợp chất có công thức I + benzfendizon, hợp chất có công thức I + benzobixyclon, hợp chất có công thức I + benzofenap, hợp chất có công thức I + bixyclopyron, hợp chất có công thức I + bifenox, hợp chất có công thức I + bilanafos, hợp chất có công thức I + bispyribac, hợp chất có công thức I + bispyribac-natri, hợp chất có công thức I + borax, hợp chất có công thức I + bromaxil, hợp chất có công thức I + brombutide, hợp chất có công thức I + bromxynil, hợp chất có công thức I + butaclo, hợp chất có công thức I + butafenacil, hợp chất có công thức I + butamifos, hợp chất có công thức I + butralin, hợp chất có công thức I + butroxydim, hợp chất có công thức I + butylat, hợp chất có công thức I + axit cacodylic, hợp chất có công thức I + canxi cloat, hợp chất có công thức I + cafenstrol, hợp chất có công thức I + carbetamit, hợp chất có công thức I + carfentrazon, hợp chất có công thức I + carfentrazon-etyl, hợp chất có công thức I + CDEA, hợp chất có công thức I + CEPC, hợp chất có công thức I + cloflurenol, hợp chất có công thức I + cloflurenol-metyl, hợp chất có công thức I + cloidazon, hợp chất có công thức I + cloimuron, hợp chất có công thức I + cloimuron-etyl, hợp chất có công thức I + axit

cloaxetic, hợp chất có công thức I + clotoluron, hợp chất có công thức I + clopropham, hợp chất có công thức I + closulfuron, hợp chất có công thức I + clothal, hợp chất có công thức I + clothal-dimetyl, hợp chất có công thức I + xinidon-etyl, hợp chất có công thức I + xinmetylin, hợp chất có công thức I + xinosulfuron, hợp chất có công thức I + xisanilid, hợp chất có công thức I + clethodim, hợp chất có công thức I + clodinafop, hợp chất có công thức I + clodinafop-propargyl, hợp chất có công thức I + clomazon, hợp chất có công thức I + clomeprop, hợp chất có công thức I + clopyralid, hợp chất có công thức I + cloransulam, hợp chất có công thức I + cloransulam-metyl, hợp chất có công thức I + CMA, hợp chất có công thức I + 4-CPB, hợp chất có công thức I + CPMF, hợp chất có công thức I + 4-CPP, hợp chất có công thức I + CPPC, hợp chất có công thức I + cresol, hợp chất có công thức I + cumyluron, hợp chất có công thức I + xyanamit, hợp chất có công thức I + xyanazin, hợp chất có công thức I + xycloat, hợp chất có công thức I + xyclosulfamuron, hợp chất có công thức I + xycloxydim, hợp chất có công thức I + xyhalofop, hợp chất có công thức I + xyhalofop-butyl, hợp chất có công thức I + 2,4-D, hợp chất có công thức I + 3,4-DA, hợp chất có công thức I + daimuron, hợp chất có công thức I + dalapon, hợp chất có công thức I + dazomet, hợp chất có công thức I + 2,4-DB, hợp chất có công thức I + 3,4-DB, hợp chất có công thức I + 2,4-DEB, hợp chất có công thức I + desmedipham, hợp chất có công thức I + dicamba, hợp chất có công thức I + diclobenil, hợp chất có công thức I + ortho-diclobenzen, hợp chất có công thức I + para-diclobenzen, hợp chất có công thức I + dicloprop, hợp chất có công thức I + dicloprop-P, hợp chất có công thức I + diclofop, hợp chất có công thức I + diclofop-metyl, hợp chất có công thức I + diclosulam, hợp chất có công thức I + difenzoquat, hợp chất có công thức I + difenzoquat metilsulfat, hợp chất có công thức I + diflufenican, hợp chất có công thức I + diflufenzopyr, hợp chất có công thức I + dimefuron, hợp chất có công thức I + dimepiperat, hợp chất có công thức I + dimethaclo, hợp chất có công thức I + dimethametryn, hợp chất có công thức I + dimethenamid, hợp chất có công thức I + dimethenamid-P, hợp chất có công thức I + dimethipin, hợp chất có công thức I + axit dimethylarsinic, hợp chất có công thức I + dinitramin, hợp chất có công thức I + dinoterb, hợp chất có công thức I + diphenamid, hợp chất có công thức I + diquat, hợp chất có công thức I + diquat dibromua, hợp chất có công thức I + dithiopyr, hợp chất có công thức I + diuron, hợp chất có công thức I + DNOC, hợp chất có công thức I +

3,4-DP, hợp chất có công thức I + DSMA, hợp chất có công thức I + EBEP, hợp chất có công thức I + endothal, hợp chất có công thức I + EPTC, hợp chất có công thức I + esprocarb, hợp chất có công thức I + ethalfluralin, hợp chất có công thức I + ethametsulfuron, hợp chất có công thức I + ethametsulfuron-metyl, hợp chất có công thức I + ethofumesat, hợp chất có công thức I + etoxyfen, hợp chất có công thức I + etoxysulfuron, hợp chất có công thức I + etobenzanid, hợp chất có công thức I + fenoxaprop-P, hợp chất có công thức I + fenoxaprop-P-etyl, hợp chất có công thức I + fentrazamit, hợp chất có công thức I + sắt (II) sulfat, hợp chất có công thức I + flamprop-M, hợp chất có công thức I + flazasulfuron, hợp chất có công thức I + florasulam, hợp chất có công thức I + fluazifop, hợp chất có công thức I + fluazifop-butyl, hợp chất có công thức I + fluazifop-P, hợp chất có công thức I + fluazifop-P-butyl, hợp chất có công thức I + flucarbazon, hợp chất có công thức I + flucarbazon-natri, hợp chất có công thức I + flucetosulfuron, hợp chất có công thức I + flucloalin, hợp chất có công thức I + flufenaxet, hợp chất có công thức I + flufenpyr, hợp chất có công thức I + flufenpyr-etyl, hợp chất có công thức I + flumetsulam, hợp chất có công thức I + flumiclorac, hợp chất có công thức I + flumiclorac-pentyl, hợp chất có công thức I + flumioxazin, hợp chất có công thức I + fluometuron, hợp chất có công thức I + floglycofen, hợp chất có công thức I + floglycofen-etyl, hợp chất có công thức I + flupropanat, hợp chất có công thức I + flupyr-sulfuron, hợp chất có công thức I + flupyr-sulfuron-metyl-natri, hợp chất có công thức I + flurenol, hợp chất có công thức I + fluridon, hợp chất có công thức I + fluroclodion, hợp chất có công thức I + fluroxypyr, hợp chất có công thức I + flurtamone, hợp chất có công thức I + fluthiaxet, hợp chất có công thức I + fluthiaxet-metyl, hợp chất có công thức I + fomesafen, hợp chất có công thức I + foramsulfuron, hợp chất có công thức I + fosamin, hợp chất có công thức I + glufosinat, hợp chất có công thức I + glufosinat-amoni, hợp chất có công thức I + glufosinat-P, hợp chất có công thức I + glyphosat, hợp chất có công thức I + glyphosat-trimesium, hợp chất có công thức I + halosulfuron, hợp chất có công thức I + halosulfuron-metyl, hợp chất có công thức I + haloxyfop, hợp chất có công thức I + haloxyfop-P, hợp chất có công thức I + HC-252, hợp chất có công thức I + hexazinon, hợp chất có công thức I + imazamethabenz, hợp chất có công thức I + imazamethabenz-metyl, hợp chất có công thức I + imazamox, hợp chất có công thức I + imazapic, hợp chất có công thức I + imazapyr, hợp chất có công thức I + imazaquin,

hợp chất có công thức I + imazethapyr, hợp chất có công thức I + imazosulfuron, hợp chất có công thức I + indanofan, hợp chất có công thức I + indaziflam, hợp chất có công thức I + iometan, hợp chất có công thức I + iodosulfuron, hợp chất có công thức I + iodosulfuron-metyl-natri, hợp chất có công thức I + ioxynil, hợp chất có công thức I + ipfencarbazon, hợp chất có công thức I + isoproturon, hợp chất có công thức I + isouron, hợp chất có công thức I + isoxaben, hợp chất có công thức I + isoxaclotol, hợp chất có công thức I + isoxaflutol, hợp chất có công thức I + karbutilat, hợp chất có công thức I + lactofen, hợp chất có công thức I + lenacil, hợp chất có công thức I + linuron, hợp chất có công thức I + MAA, hợp chất có công thức I + MAMA, hợp chất có công thức I + MCPA, hợp chất có công thức I + MCPA-thioetyl, hợp chất có công thức I + MCPB, hợp chất có công thức I + mecoprop, hợp chất có công thức I + mecoprop-P, hợp chất có công thức I + mefenacet, hợp chất có công thức I + mefluidide, hợp chất có công thức I + mesosulfuron, hợp chất có công thức I + mesosulfuron-metyl, hợp chất có công thức I + mesotrion, hợp chất có công thức I + metam, hợp chất có công thức I + metamifop, hợp chất có công thức I + metamitron, hợp chất có công thức I + metazaclo, hợp chất có công thức I + methabenzthiazuron, hợp chất có công thức I + metylarsonic axit, hợp chất có công thức I + metyldymron, hợp chất có công thức I + metyl isothioxyanat, hợp chất có công thức I + metobenzuron, hợp chất có công thức I + metolaclo, hợp chất có công thức I + S-metolaclo, hợp chất có công thức I + metosulam, hợp chất có công thức I + metoxuron, hợp chất có công thức I + metribuzin, hợp chất có công thức I + metsulfuron, hợp chất có công thức I + metsulfuron-metyl, hợp chất có công thức I + MK-616, hợp chất có công thức I + molinat, hợp chất có công thức I + monolinuron, hợp chất có công thức I + MSMA, hợp chất có công thức I + naproanilide, hợp chất có công thức I + napropamit, hợp chất có công thức I + naptalam, hợp chất có công thức I + neburon, hợp chất có công thức I + nicosulfuron, hợp chất có công thức I + axit nonanoic, hợp chất có công thức I + norflurazon, hợp chất có công thức I + axit oleic (axit béo), hợp chất có công thức I + orbencarb, hợp chất có công thức I + orthosulfamuron, hợp chất có công thức I + oryzalin, hợp chất có công thức I + oxadiargyl, hợp chất có công thức I + oxadiazon, hợp chất có công thức I + oxasulfuron, hợp chất có công thức I + oxaziclomefon, hợp chất có công thức I + oxyfluorfen, hợp chất có công thức I + paraquat, hợp chất có công thức I + paraquat

diclorua, hợp chất có công thức I + pebulat, HỢP hợp chất có công thức I + pendimethalin, hợp chất có công thức I + penoxsulam, hợp chất có công thức I + pentaclophenol, hợp chất có công thức I + pentanoclo, hợp chất có công thức I + pentoxazon, hợp chất có công thức I + pethoxamid, hợp chất có công thức I + dầu mỏ, hợp chất có công thức I + phenmedipham, hợp chất có công thức I + phenmedipham-etyl, hợp chất có công thức I + picloram, hợp chất có công thức I + picolinafen, hợp chất có công thức I + pinoxaden, hợp chất có công thức I + piperophos, hợp chất có công thức I + kali arsenit, hợp chất có công thức I + kali azit, hợp chất có công thức I + pretilaclo, hợp chất có công thức I + primisulfuron, hợp chất có công thức I + primisulfuron-metyl, hợp chất có công thức I + prodiamin, hợp chất có công thức I + profluazol, hợp chất có công thức I + profoxydim, hợp chất có công thức I + prometon, hợp chất có công thức I + prometryn, hợp chất có công thức I + propaclo, hợp chất có công thức I + propanil, hợp chất có công thức I + propaquizafop, hợp chất có công thức I + propazin, hợp chất có công thức I + propham, hợp chất có công thức I + propisoclo, hợp chất có công thức I + propoxycarbazon, hợp chất có công thức I + propoxycarbazon-natri, HỢP hợp chất có công thức I + propyrisulfuron, hợp chất có công thức I + propyzamit, hợp chất có công thức I + prosulfocarb, hợp chất có công thức I + prosulfuron, hợp chất có công thức I + pyraclonil, hợp chất có công thức I + pyraflufen, hợp chất có công thức I + pyraflufen-etyl, hợp chất có công thức I + pyrasulfutol, hợp chất có công thức I + pyrazolynat, hợp chất có công thức I + pyrazosulfuron, hợp chất có công thức I + pyrazosulfuron-etyl, hợp chất có công thức I + pyrazoxyfen, hợp chất có công thức I + pyribenzoxim, hợp chất có công thức I + pyributicarb, hợp chất có công thức I + pyridafol, hợp chất có công thức I + pyridat, hợp chất có công thức I + pyriftalid, hợp chất có công thức I + pyriminobac, hợp chất có công thức I + pyriminobac-metyl, hợp chất có công thức I + pyrimisulfan, hợp chất có công thức I + pyrihiobac, hợp chất có công thức I + pyrihiobac-natri, hợp chất có công thức I + pyroxsulam, hợp chất có công thức I + pyroxasulfon, hợp chất có công thức I + quinclorac, hợp chất có công thức I + quinmerac, hợp chất có công thức I + quinclamin, hợp chất có công thức I + quizalofop, hợp chất có công thức I + quizalofop-P, hợp chất có công thức I + rimsulfuron, hợp chất có công thức I + saflufenaxil, hợp chất có công thức I + setoxydim, hợp chất có công thức I + siduron, hợp chất có công thức I + simazin, hợp chất có công thức I + simetryn, hợp chất có

công thức I + SMA, hợp chất có công thức I + natri arsenit, hợp chất có công thức I + natri azid, hợp chất có công thức I + natri cloat, hợp chất có công thức I + sulcotrion, hợp chất có công thức I + sulfentrazon, hợp chất có công thức I + sulfometuron, hợp chất có công thức I + sulfometuron-metyl, HỢP hợp chất có công thức I + sulfosat, hợp chất có công thức I + sulfosulfuron, hợp chất có công thức I + axit sulfuric, hợp chất có công thức I + dầu hắc ín, hợp chất có công thức I + 2,3,6-TBA, hợp chất có công thức I + TCA, hợp chất có công thức I + TCA-natri, hợp chất có công thức I + tebuthiuron, hợp chất có công thức I + tefuryltrion, hợp chất có công thức I + tembotrion, hợp chất có công thức I + tepraloxymid, hợp chất có công thức I + terbaxil, hợp chất có công thức I + terbumeton, hợp chất có công thức I + terbuthylazin, hợp chất có công thức I + terbutryn, hợp chất có công thức I + thenylclo, hợp chất có công thức I + thiazopyr, hợp chất có công thức I + thiencarbazon, hợp chất có công thức I + thifensulfuron, hợp chất có công thức I + thifensulfuron-metyl, hợp chất có công thức I + thiobencarb, hợp chất có công thức I + tiocarbazil, hợp chất có công thức I + topramezon, hợp chất có công thức I + tralkoxydim, hợp chất có công thức I + tri-allat, hợp chất có công thức I + triasulfuron, hợp chất có công thức I + triaziflam, hợp chất có công thức I + tribenuron, hợp chất có công thức I + tribenuron-metyl, hợp chất có công thức I + tricamba, hợp chất có công thức I + triclopyr, hợp chất có công thức I + trietazin, hợp chất có công thức I + trifloxysulfuron, hợp chất có công thức I + trifloxysulfuron-natri, hợp chất có công thức I + trifluralin, hợp chất có công thức I + triflusulfuron, hợp chất có công thức I + triflusulfuron-metyl, hợp chất có công thức I + trihydroxytriazin, hợp chất có công thức I + tritosulfuron, hợp chất có công thức I + etyl este của axit [3-[2-clo-4-flo-5-(1-metyl-6-triflometyl-2,4-dioxo-1,2,3,4-tetrahydropyrimidin-3-yl)phenoxy]-2-pyridyloxy] (CAS RN 353292-31-6), hợp chất có công thức I + axit 4-[(4,5-dihydro-3-metoxi-4-metyl-5-oxo)-1H-1,2,4-triazol-1-ylcarbonylsulfamoyl]-5-metylthiophen-3-carboxylic (BAY636), hợp chất có công thức I + BAY747 (CAS RN 335104-84-2), hợp chất có công thức I + topramezon (CAS RN 210631-68-8), hợp chất có công thức I + 4-hydroxy-3-[[2-[(2-metoxietoxy)metyl]-6-(triflometyl)-3-pyridinyl]carbonyl]-bixyclo[3.2.1]oct-3-en-2-on (CAS RN 352010-68-5), và hợp chất có công thức I + 4-hydroxy-3-[[2-(3-metoxipropyl)-6-(diflometyl)-3-pyridinyl]carbonyl]-bixyclo[3.2.1]oct-3-en-2-on.

Hợp chất có công thức (I) theo sáng chế cũng có thể được sử dụng kết hợp với chất an toàn. Tốt hơn, nếu trong các hỗn hợp này, hợp chất có công thức (I) là một trong số các hợp chất được liệt kê trong các bảng từ 1 đến 116 ở trên. Cụ thể là, xem xét các hỗn hợp sau đây với chất an toàn:

hợp chất có công thức (I) + cloquintoxet-mexyl, hợp chất có công thức (I) + axit cloquintoxet và muối của nó, hợp chất có công thức (I) + fencloazol-etyl, hợp chất có công thức (I) + fencloazol axit và muối của nó, hợp chất có công thức (I) + mefenpyr-dietyl, hợp chất có công thức (I) + mefenpyr diaxit, hợp chất có công thức (I) + isoxadifen-etyl, hợp chất có công thức (I) + axit isoxadifen, hợp chất có công thức (I) + furilazol, hợp chất có công thức (I) + furilazol R chất đồng phân, hợp chất có công thức (I) + benoxacor, hợp chất có công thức (I) + diclomid, hợp chất có công thức (I) + AD-67, hợp chất có công thức (I) + oxabetrinil, hợp chất có công thức (I) + xyometrinil, hợp chất có công thức (I) + xyometrinil Z-chất đồng phân, hợp chất có công thức (I) + fenclorim, hợp chất có công thức (I) + xyprosulfamid, hợp chất có công thức (I) + naphthalic anhydrua, hợp chất có công thức (I) + flurazol, hợp chất có công thức (I) + N-(2-metoxybenzoyl)-4-[(methylamincarbonyl)amin]benzensulfonamid, hợp chất có công thức (I) + CL 304,415, hợp chất có công thức (I) + dixyclonon, hợp chất có công thức (I) + fluxofenim, hợp chất có công thức (I) + DKA-24, hợp chất có công thức (I) + R-29148 và hợp chất có công thức (I) + PPG-1292. Hiệu quả an toàn cũng có thể được quan sát đối với hỗn hợp chất có công thức (I) + dymron, hợp chất có công thức (I) + MCPA, hợp chất có công thức (I) + mecoprop và hợp chất có công thức (I) + mecoprop-P.

Các hợp chất trong hỗn hợp của hợp chất có công thức I cũng có thể ở dạng este hoặc muối, như nêu ví dụ trong The Pesticide Manual, 12th Edition (BCPC), 2000.

Trong các danh mục khác nhau nêu trên của thành phần hoạt tính được trộn với hợp chất có công thức I, hợp chất có công thức I tốt hơn là hợp chất của các bảng từ 1 đến 116; và tốt hơn nữa là, hợp chất được chọn từ T1,011, T1,016, T1,023, T1,026, T1,030, T1,042, T1,047, T1,049, T1,050, T1,066, T1,067, T1,068, T1,069, T1,070, T1,071, T1,072, T1,104, T1,116, T1,117, T1,118, T1,120, T1,121, T1,125, T1,130, T1,131, theo đó có thể là hydro, C(O)OEt hoặc C(O)OiPr, hoặc hợp chất được chọn từ T19.011, T19.016, T19.023, T19.026, T19.030, T19.042, T19.047, T19.049, T19.050, T19.066, T19.067, T19.068, T19.069, T19.070, T19.071, T19.072, T19.104,

T19.116, T19.117, T19.118, T19.120, T19.121, T19.125, T19.130, T19.131, theo đó có thể là hydro, C(O)OEt hoặc C(O)OiPr; hoặc hợp chất được chọn từ T21.011, T21.016, T21.023, T21.026, T21.030, T21.042, T21.047, T21.049, T21.050, T21.066, T21.067, T21.068, T21.069, T21.070, T21.071, T21.072, T21.104, T21.116, T21.117, T21.118, T21.120, T21.121, T21.125, T21.130, T21.131, theo đó có thể là hydro, C(O)OEt hoặc C(O)OiPr; hoặc hợp chất được chọn từ T22.011, T22.016, T22.023, T22.026, T22.030, T22.042, T22.047, T22.049, T22.050, T22.066, T22.067, T22.068, T22.069, T22.070, T22.071, T22.072, T22.104, T22.116, T22.117, T22.118, T22.120, T22.121, T22.125, T22.130, T22.131, theo đó có thể là hydro, C(O)OEt hoặc C(O)OiPr; hoặc hợp chất được chọn từ T23.011, T23.016, T23.023, T23.026, T23.030, T23.042, T23.047, T23.049, T23.050, T23.066, T23.067, T23.068, T23.069, T23.070, T23.071, T23.072, T23.104, T23.116, T23.117, T23.118, T23.120, T23.121, T23.125, T23.130, T23.131, theo đó có thể là hydro, C(O)OEt hoặc C(O)OiPr;

và

và thậm chí tốt hơn, nếu hợp chất của các bảng từ P1 đến P5.

Trong hỗn hợp nêu trên của hợp chất có công thức I, cụ thể là hợp chất được chọn từ các bảng từ các bảng từ 1 đến 102 nêu trên, với chất diệt côn trùng, chất diệt nấm, chất diệt cỏ, chất an toàn, chất phụ trợ và các chất tương tự khác, tỷ lệ hỗn hợp có thể thay đổi trong phạm vi rộng và tốt hơn là nằm trong khoảng từ 100:1 đến 1:6000, đặc biệt là từ 50:1 đến 1:50, cụ thể hơn là nằm trong khoảng từ 20:1 đến 1:20, thậm chí đặc biệt hơn là nằm trong khoảng từ 10:1 đến 1:10. Một mặt các tỷ lệ hỗn hợp này được hiểu là bao gồm các tỷ lệ theo trọng lượng và mặt khác là tỷ lệ mol.

Một cách thuận lợi, các hỗn hợp này có thể được sử dụng trong các chế phẩm nêu trên (trong đó thuật ngữ "thành phần hoạt tính" đề cập đến hỗn hợp tương ứng của hợp chất có công thức I với thành phần có trong hỗn hợp).

Một số hỗn hợp có thể chứa thành phần hoạt tính có đặc tính vật lý, hóa học và sinh học khác biệt đáng kể sao cho chúng không dễ dàng thêm vào cùng loại chế phẩm thông thường. Trong các trường hợp này, các loại chế phẩm khác có thể được điều chế. Ví dụ, trong trường hợp một thành phần hoạt tính là chất rắn không tan trong nước và thành phần kia là chất lỏng không tan trong nước, tuy nhiên nó có thể phân tán mỗi thành phần hoạt tính trong cùng pha chứa nước liên tục bằng cách phân tán

thành phần hoạt tính dạng rắn dưới dạng hỗn dịch (bằng cách sử dụng chế phẩm tương tự chế phẩm của SC) nhưng phân tán thành phần hoạt tính dạng lỏng dưới dạng nhũ tương (bằng cách sử dụng chế phẩm tương tự chế phẩm của EW). Chế phẩm thu được là huyền phù nhũ tương (suspoemulsion-SE).

Hỗn hợp chứa hợp chất có công thức I được chọn từ các bảng từ 1 đến 116 và một hoặc nhiều thành phần hoạt tính như được mô tả ở trên có thể được sử dụng, ví dụ, ở dạng chế phẩm trộn dùng ngay, trong hỗn hợp phun kết hợp gồm từ các chế phẩm riêng biệt của các thành phần hoạt tính đơn lẻ, như “chế phẩm pha tại chỗ”, và trong sử dụng kết hợp của thành phần hoạt tính đơn lẻ khi được sử dụng theo cách lần lượt, tức là cái này rồi đến cái kia với thời gian hợp lý, như vài giờ hoặc vài ngày. Trật tự sử dụng hợp chất có công thức I được chọn từ các bảng từ 1 đến 102 và các thành phần hoạt tính như được mô tả ở trên không phải là thiết yếu cho tiến hành sáng chế.

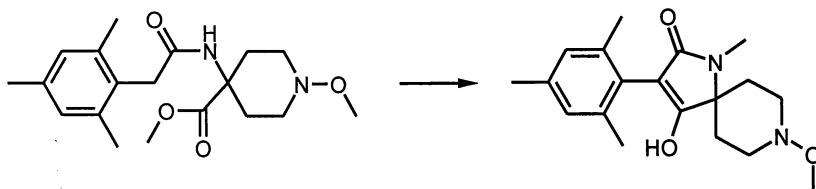
Ví dụ thực hiện sáng chế

Sáng chế được minh họa bằng các ví dụ điều chế. Dữ liệu H-NMR của một số hợp chất của sáng chế thể hiện sự mở rộng hàng ở nhiệt độ trong phòng, đề xuất sự tồn tại của nhiều chất đồng phân cấu trúc do, ví dụ chất đồng phân hổ biến keto-enol, sự quay chậm lại, sự nghịch chuyển vòng trong gốc piperidin hoặc sự chuyển hóa nitơ ở tâm piperidin N-OR. Do đó, các tín hiệu rộng đã được đánh dấu ‘br’.

Ví dụ 1: Điều chế Etyl este 8-metoxi-1-metyl-2-oxo-3-(2,4,6-trimetyl-phenyl)-1,8-diaza-spiro[4.5]dec-3-en-4-yl este của axit carbonic (hợp chất P1.2)

Bước 1: Điều chế 4-hydroxy-8-metoxi-1-metyl-3-(2,4,6-trimetyl-phenyl)-1,8-diaza-spiro[4.5]dec-3-en-2-on (hợp chất P2.2)

[(amit alkyl hoá N và đóng vòng) hai bước, quy trình một bình phản ứng]

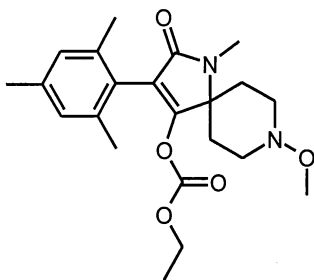


Thêm natri hydrua (122mg, 55% theo trọng lượng phân tán trong dầu khoáng, 2,81mmol) thành hai phần vào dung dịch gồm metyl este của axit 1-metoxy-4-[2-(2,4,6-trimetyl-phenyl)-axetylamin]-piperidin-4-carboxylic [được điều chế theo WO09/049851] (850mg, 2,44mmol) trong dimetylformamit (20ml) ở 0°C. Khuấy hỗn hợp phản ứng ở 0°C trong một giờ, xử lý nhỏ giọt bằng metyl iodua (0,175ml, 398mg, 2,81mmol), và khuấy thêm ở 0°C trong một giờ và ở nhiệt độ trong phòng trong 3 giờ. Thêm natri methoxit (198mg, 3,66mmol) trong một phần vào hỗn hợp được tái làm lạnh ở 0°C, và tiếp tục khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 2 giờ, ở 40°C trong 30 phút và sau đó còn thêm vào natri methoxit (~20mg) ở 50°C trong 45 phút. Rót hỗn hợp phản ứng amoniclorua trong nước đóng băng, axit hoá đến độ pH = 5-6 bằng dung dịch HCl trong nước và chiết hoàn toàn bằng etyl axetat. Rửa lớp hỗn hợp hữu cơ bằng nước muối, làm khô trên natri sulfat và cô đặc. Tinh chế sản phẩm dầu thô bằng sắc ký trên silica gel (etyl axetat), và nghiền kỹ bằng dietyl ete lạnh, lọc và làm khô. Thu được: 338mg 4-hydroxy-8-metoxy-1-metyl-3-(2,4,6-trimetyl-phenyl)-1,8-diaza-spiro[4.5]dec-3-en-2-on (hợp chất P2.2) là chất rắn, điểm nóng chảy 241-243°C.

¹H-NMR (CD₃OD): 1,44 (br m, 1H), 1,72 (br m, 1H), 2,10 (s, 6H), 2,25 (s, 3H), 2,33 (br m, 1H), 2,48 (br m, 1H), 2,89 (tín hiệu br, 3H), 3,20 (br m, 1H), 3,27-3,43 (tín hiệu brs, tổng 3H), 3,54 (s, 3H), 6,89 (s, 2H).

LC/MS (ES⁺): 331 (M+H)⁺, LC/MS (ES⁻): 329 (M-H)⁻

Bước 2: Điều chế etyl este 8-metoxy-1-metyl-2-oxo-3-(2,4,6-trimetyl-phenyl)-1,8-diaza-spiro[4.5]dec-3-en-4-yl este của axit carbonic (hợp chất tiêu đề P1.2)



Thêm nhỏ giọt etyl cloroformat (0,075ml, 85mg, 0,79mmol) vào dung dịch gồm 4-hydroxy-8-metoxy-1-metyl-3-(2,4,6-trimetyl-phenyl)-1,8-diaza-spiro[4.5]dec-3-en-2-on (238mg, 0,72mmol), trietylamin (0,15ml, 109mg, 1,08mmol) và 4-dimetylaminpyridin (2mg) trong tetrahydrofuran (10ml) ở 0°C. Khuấy huyền phù ở 0°C trong một giờ. Pha loãng hỗn hợp phản ứng bằng etyl axetat và nước, tách lớp,

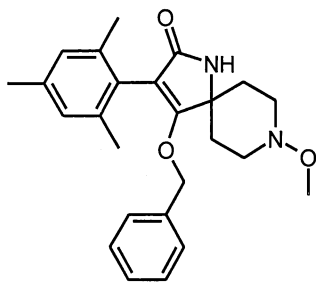
chiết pha chứa nước bằng etyl axetat, rửa pha hỗn hợp hữu cơ bằng nước muối, làm khô trên natri sulfat và cô đặc. Tinh chế phần còn lại bằng sắc ký trên silica gel (etyl axetat/heptan 5:1). Thu được: 145mg etyl este 8-metoxi-1-metyl-2-oxo-3-(2,4,6-trimetyl-phenyl)-1,8-diaza-spiro[4.5]dec-3-en-4-yl este của axit carbonic (hợp chất tiêu đề P1.2) là chất rắn màu trắng, điểm nóng chảy 134-136°C.

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3): 1,05 (t, 3H), 1,59 (br m, 1H), 1,83 (br m, 1H), 2,15 (s, 6H), 2,25 (s, 3H), 2,36 (br m, 2H), 2,88 (br m, 1H), 2,95 (br s, 3H), 3,22 (br m, 1H), 3,38 (m, 2H), 3,55 (s, 3H), 3,98 (q, 2H), 6,84 (s, 2H).

LC/MS (ES $^+$): 403 (M+H) $^+$

Ví dụ 2: Điều chế 4-hydroxy-8-metoxi-1-metyl-3-(2,4,6-trimetyl-phenyl)-1,8-diaza-spiro[4.5]dec-3-en-2-on (hợp chất P2.2)

Bước 1: Điều chế 4-benzyloxy-8-metoxi-3-(2,4,6-trimetyl-phenyl)-1,8-diaza-spiro[4.5]dec-3-en-2-on (hợp chất P3.4)

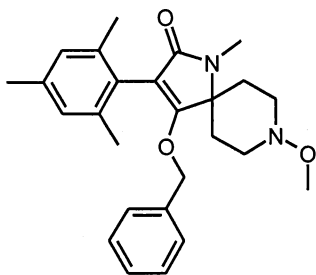


Thêm nhỏ giọt kali carbonat (35,1g, 254,1mmol), sau đó là benzyl bromua (35,3ml, 50,7g, 296,4mmol) vào huyền phù gồm 4-hydroxy-8-metoxi-3-(2,4,6-trimetyl-phenyl)-1,8-diaza-spiro[4.5]dec-3-en-2-on [được điều chế theo WO09/049851] (67,0g, 211,7mmol) trong axeton (900ml). Khuấy huyền phù để hồi lưu trong một giờ, sau đó rót trên nước đá và etyl axetat. Lọc kết tủa tạo thành, hoà tan trong metylen clorua, làm khô trên natri sulfat, cô đặc và làm khô trên phospho pentoxit trong chân không ở 50°C qua đêm để thu được nhóm sản phẩm đầu tiên là chất rắn màu trắng (55,8g). Tách lớp dịch cái, chiết pha chứa nước bằng etyl axetat, rửa pha hỗn hợp hữu cơ bằng nước muối, làm khô trên natri sulfat và cô đặc. Tạo huyền phù phần còn lại trong dietyl ete, lọc và làm khô để tạo ra 22,6g sản phẩm. Thu được: 78,4g 4-benzyloxy-8-metoxi-3-(2,4,6-trimetyl-phenyl)-1,8-diaza-spiro[4.5]dec-3-en-2-on (hợp chất P3.4) là chất rắn, điểm nóng chảy 184-186°C.

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3): 1,66 (m, 2H), 2,11 (s, 6H), 2,28 (s, 3H), 2,33 (m, 2H), 2,47 (m, 2H), 3,45 (m, 2H), 3,55 (s, 3H), 4,68 (s, 2H), 6,13 (br s, 1H), 6,87 (s, 2H), 7,04 (m, 2H), 7,28 (m, 3H).

LC/MS (ES $^+$): 407 (M+H) $^+$

Bước 2: Điều chế 4-benzyloxy-8-metoxi-1-metyl-3-(2,4,6-trimetyl-phenyl)-1,8-diaza-spiro[4.5]dec-3-en-2-on (hợp chất P3.5)

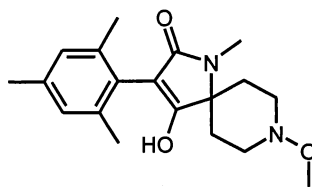


Thêm 1,0 M dung dịch liti bis(trimetylsilyl)amit trong tetrahydrofuran (108,3ml, 108,3mmol) nhỏ giọt vào dung dịch gồm 4-benzyloxy-8-metoxi-3-(2,4,6-trimetyl-phenyl)-1,8-diaza-spiro[4.5]dec-3-en-2-on (40,0g, 98,4mmol) trong tetrahydrofuran (500ml) ở 0°C hơn một giờ. Khuấy hỗn hợp ở 0°C trong 30 phút và ở nhiệt độ trong phòng trong 30 phút, sau đó xử lý bằng metyl iodua (6,75ml, 15,4g, 108,2mmol) nhỏ giọt ở 0°C hơn 10 phút. Tiếp tục khuấy ở nhiệt độ trong phòng qua đêm và dùng hỗn hợp phản ứng bằng amoni clorua bão hoà trong nước lạnh. Tách lớp, chiết pha chứa nước hai lần bằng etyl axetat, rửa pha hỗn hợp hữu cơ bằng nước muối, làm khô trên natri sulfat và cô đặc. Tạo huyền phù phần còn lại trong dietyl ete, khuấy trong 30 phút, lọc và làm khô. Thu được: 28,6g 4-benzyloxy-8-metoxi-1-metyl-3-(2,4,6-trimetyl-phenyl)-1,8-diaza-spiro[4.5]dec-3-en-2-on (hợp chất P3.5) là chất rắn, điểm nóng chảy 139-141°C.

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3): 1,52 (br m, 1H), 1,74 (br m, 1H), 2,11 (br s, 6H), 2,28 (s, 3H), 2,34 (br m, 2H), 2,92 (tín hiệu br, 3H), 3,12 (br m, 1H), 3,30 (m, 3H), 3,52 (s, 3H), 4,67 (tín hiệu br, 2H), 6,85 (s, 2H), 7,04 (m, 2H), 7,28 (m, 3H).

LC/MS (ES $^+$): 421 (M+H) $^+$

Bước 3: Điều chế 4-hydroxy-8-metoxi-1-metyl-3-(2,4,6-trimetyl-phenyl)-1,8-diaza-spiro[4.5]dec-3-en-2-on (hợp chất tiêu đề P2.2)

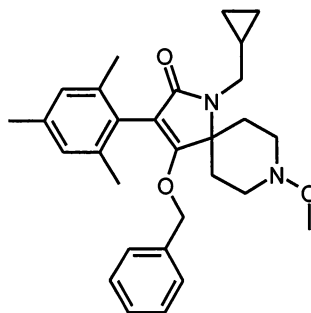


Thêm 5% Pd/C (22,6g) vào dung dịch gồm 4-benzyloxy-8-metoxi-1-metyl-3-(2,4,6-trimetyl-phenyl)-1,8-diaza-spiro[4.5]dec-3-en-2-on (22,6g, 53,7mmol) trong metanol (226ml) và nước (22,6ml) trong thiết bị hydro hóa loại lắc Parr. Sau khi hydro hoá dưới 4.10^5 pascal H_2 ở $36^\circ C$ trong 22 giờ, lọc và cô đặc hỗn hợp phản ứng. Pha loãng phần còn lại bằng etyl axetat và chiết bằng natri carbonat bão hoà trong nước dưới đá lạnh. Loại bỏ lớp hữu cơ, axit hoá pha kiềm chứa nước bằng cách làm lạnh đến độ pH = 5-6 bằng dung dịch HCl trong nước và chiết hoàn toàn bằng etyl axetat. Rửa lớp hỗn hợp hữu cơ bằng nước muối, làm khô trên natri sulfat và cô đặc. Thu được: 13,0g 4-hydroxy-8-metoxi-1-metyl-3-(2,4,6-trimetyl-phenyl)-1,8-diaza-spiro[4.5]dec-3-en-2-on (hợp chất tiêu đề P2.2) là chất rắn, điểm nóng chảy $239-241^\circ C$.

Dữ liệu phổ là đồng nhất với dữ liệu được mô tả trên đây trong điều chế ví dụ 1, bước 1.

Ví dụ 3: Điều chế 1-Xyclopropylmetyl-4-hydroxy-8-metoxi-3-(2,4,6-trimetyl-phenyl)-1,8-diaza-spiro[4.5]dec-3-en-2-on (hợp chất P2,8)

Bước 1: Điều chế 4-benzyloxy-1-xyclopropylmetyl-8-metoxi-3-(2,4,6-trimetyl-phenyl)-1,8-diaza-spiro[4.5]dec-3-en-2-on (hợp chất P3.8)



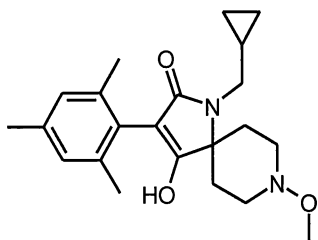
Thêm brommetyl-xyclopropan (1,257ml, 1,78g, 13,16mmol) và kali *tert*-butoxit (1,50g, 13,37mmol) vào dung dịch gồm 4-benzyloxy-8-metoxi-3-(2,4,6-trimetyl-phenyl)-1,8-diaza-spiro[4.5]dec-3-en-2-on (hợp chất P3.4) (1,0g, 2,46mmol) trong

dioxan (40ml). Khuấy hỗn hợp phản ứng ở 100°C trong 5 ngày, sau đó đổ vào nước và chiết bằng etyl axetat. Rửa pha hỗn hợp hữu cơ bằng nước muối, làm khô trên natri sulfate và cô đặc. Tạo huyền phù phần còn lại trong etyl axetat/heptan 1:5, khuấy qua đêm, lọc và làm khô thu được nhóm sản phẩm đầu tiên là chất rắn màu trắng (350mg). Cô đặc dịch cái, và tinh chế phần còn lại bằng sắc ký trên silica gel (diclometan/axeton 10:1) để tạo ra 205mg sản phẩm. Thu được: 555mg 4-benzyloxy-1-xyclopropylmetyl-8-metoxi-3-(2,4,6-trimetyl-phenyl)-1,8-diaza-spiro[4.5]dec-3-en-2-on (hợp chất P3.8) là chất rắn, điểm nóng chảy 119-121°C.

¹H-NMR (CD₃OD): 0,34 (m, 2H), 0,52 (m, 2H), 1,10 (m, 1H), 1,48 (br m, 1H), 1,83 (br m, 1H), 2,11 (br s, 6H), 2,29 (s, 3H), 2,41 (br m, 1H), 2,60 (br m, 1H), 3,12 (br m, 1H), 3,23 (m, 2H), 3,24-3,41 (tín hiệu brs, tổng 3H), 3,50 (s, 3H), 4,72 (tín hiệu br, 2H), 6,91 (s, 2H), 7,06 (m, 2H), 7,29 (m, 3H).

LC/MS (ES⁺): 461 (M+H)⁺

Bước 2: Điều chế 1-xyclopropylmetyl-4-hydroxy-8-metoxi-3-(2,4,6-trimetyl-phenyl)-1,8-diaza-spiro[4.5]dec-3-en-2-on (hợp chất tiêu đề P2,8)



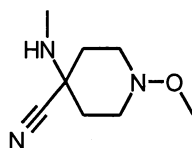
Dẫn debenzyl hoá bằng cách sử dụng thiết bị hydro hoá dòng chảy liên tục loại H-Cube[®]: hoà tan 4-benzyloxy-1-xyclopropylmetyl-8-metoxi-3-(2,4,6-trimetyl-phenyl)-1,8-diaza-spiro[4.5]dec-3-en-2-on (546mg, 1,34mmol) trong metanol (47ml) và bơm dung dịch nền này (0,029 M) hai lần qua hộp lọc 5% Pd/C ở tốc độ dòng 1ml/phút, nhiệt độ 35°C và áp suất là 2-3.10⁵ pascal. Cô đặc dung dịch sản phẩm thu được, và tinh chế phần còn lại bằng sắc ký trên silica gel (etyl axetat/heptan 1:1). Thu được: 215mg 1-xyclopropylmetyl-4-hydroxy-8-metoxi-3-(2,4,6-trimetyl-phenyl)-1,8-diaza-spiro[4.5]dec-3-en-2-on (hợp chất tiêu đề P2,8) là chất rắn màu trắng, điểm nóng chảy 223-225°C.

$^1\text{H-NMR}$ (CD_3OD): 0,34 (m, 2H), 0,52 (m, 2H), 1,11 (m, 1H), 1,43 (br m, 1H), 1,78 (br m, 1H), 2,11 (s, 6H), 2,25 (s, 3H), 2,41 (br m, 1H), 2,62 (br m, 1H), 3,23 (tín hiệu br, tổng 3H), 3,28-3,45 (tín hiệu brs, tổng 3H), 3,55 (s, 3H), 6,90 (s, 2H).

LC/MS (ES⁺): 371 (M+H)⁺, 369 (M-H)⁻

Ví dụ 4: Điều chế 4-Hydroxy-8-metoxi-1-metyl-3-(2,4,6-trimetyl-phenyl)-1,8-diaza-spiro[4.5]dec-3-en-2-on (hợp chất P2.2)

Bước 1: Điều chế 1-metoxi-4-metylamin-piperidin-4-carbonitril (hợp chất P5.1)

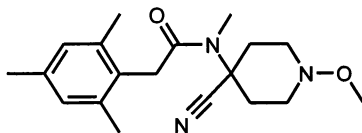


Thêm nhỏ giọt dung dịch kali xyanua (55,5g, 0,85mol) trong nước (150ml) vào dung dịch gồm 1-metoxi-piperidin-4-on [được điều chế theo Journal of Organic Chemistry (1961), 26, 1867-74] (100g, 0,77mol), metylamin trong nước (40% trọng lượng trong nước H_2O , 86ml) và metylamin hydroclorua (57,5g, 0,85mol) trong nước (700ml) ở 0°C hơn một giờ. Khuấy hỗn hợp phản ứng ở nhiệt độ trong phòng trong hai ngày. Hơn năm ngày kế tiếp, xử lý thêm hỗn hợp bằng metylamin hydroclorua (5x 2,6g, tổng 13,0g), metylamin dạng dịch (5x 4,3ml, tổng 21,5ml) và kali xyanua (5x 2,5g, tổng 12,5g), và tiếp tục khuấy ở nhiệt độ trong phòng cho đến khi phản ứng được cho là hoàn toàn bằng sắc ký lớp mỏng. Chiết hỗn hợp phản ứng chứa nước bằng diclometan (1x 500ml, và 4x 200ml), làm khô pha hỗn hợp hữu cơ trên natri sulfat và cho bay hơi. Thu được: 113,0g 1-metoxi-4-metylamin-piperidin-4-carbonitril (hợp chất P5.1) là chất lỏng màu đỏ. Sử dụng nguyên liệu này mà không cần tinh chế thêm trong bước tiếp theo.

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3): 1,36 (br s, 1H), 1,62-2,22 (tín hiệu brs, tổng 4H), 2,51 (s, 3H), 2,63-3,41 (tín hiệu brs, tổng 4H), 3,51 (s, 3H).

IR (CN): ν 2220 cm^{-1} . LC/MS (ES⁺): 170 (M+H)⁺

Bước 2: Điều chế N-(4-xyano-1-metoxi-piperidin-4-yl)-N-metyl-2-(2,4,6-trimetyl-phenyl)-axetamit (hợp chất P4.1)



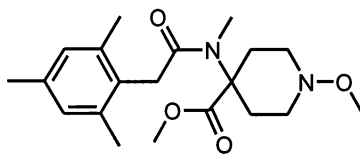
Phương pháp A: thêm nhỏ giọt dung dịch (2,4,6-trimetyl-phenyl)-axetyl clorua (25,6g, 130,0mmol) trong THF (25ml) hơn 1,5 giờ vào dung dịch gồm 1-metoxi-4-metylamin-piperidin-4-carbonitril (20,0g, 118,2mmol), trietylamin (24,6ml, 17,9g, 177,3mmol) và 4-dimetylaminpyridin (DMAP, 0,1g) trong tetrahydrofuran (250ml) ở 0-5°C. Khuấy hỗn hợp phản ứng ở nhiệt độ trong phòng trong khoảng 3 giờ, trong khi đó xử lý bằng (2,4,6-trimetyl-phenyl)-axetyl clorua (5,4g) và trietylamin (7ml). Pha loãng hỗn hợp phản ứng bằng etyl axetat và nước, tách lớp, chiết pha chứa nước hai lần bằng etyl axetat, rửa pha hỗn hợp hữu cơ hai lần bằng natri hydro carbonat bão hoà trong nước và nước muối, làm khô trên natri sulfat và cô đặc. Tạo huyền phù phần rắn còn lại trong dietyl ete (500ml), khuấy qua đêm ở nhiệt độ trong phòng, lọc và làm khô. Thu được: 27,5g N-(4-xyano-1-metoxi-piperidin-4-yl)-N-metyl-2-(2,4,6-trimetyl-phenyl)-axetamit (hợp chất P4.1) là chất rắn màu trắng, điểm nóng chảy 171-178°C. Sử dụng nguyên liệu này mà không cần tinh chế thêm trong bước tiếp theo.

¹H-NMR (CDCl₃): 2,01 (br m, 1H), 2,11 (br m, 1H), 2,20 (s, 6H), 2,25 (s, 3H), 2,34 (br m, 1H), 2,57 (br m, 1H), 2,83 (br m, 1H), 3,12 (s, 3H), 3,20 (br m, 1H), 3,34 (br m, 2H), 3,50 (br s, 3H), 3,66 (s, 2H), 6,85 (s, 2H).

IR (CN): ν 2231 cm⁻¹. LC/MS (ES⁺): 330 (M+H)⁺

Phương pháp B: vào dung dịch gồm 1-metoxi-4-metylamin-piperidin-4-carbonitril (20,0g, 118,2mmol) in pyridin (250ml) thêm (2,4,6-trimetyl-phenyl)-axetyl clorua (25,6g, 130,0mmol) nhỏ giọt ở 0°C. Khuấy hỗn hợp phản ứng ở 0°C trong một giờ và ở nhiệt độ trong phòng qua đêm, đổ vào nước đá và axit hoá đến độ pH = 7 bằng dung dịch HCl 2N trong nước. Lọc kết tủa cứng thu được, rửa bằng nước lạnh, hoà tan trong diclometan, làm khô trên natri sulfat và cô đặc. Tạo huyền phù phần rắn còn lại trong hexan, khuấy ở nhiệt độ trong phòng, lọc và làm khô. Thu được: 32,7g N-(4-xyano-1-metoxi-piperidin-4-yl)-N-metyl-2-(2,4,6-trimetyl-phenyl)-axetamit (hợp chất P4.1) là chất rắn màu vàng nhạt, điểm nóng chảy 175-177°C. Dữ liệu phổ của nguyên liệu này là đồng nhất với dữ liệu được mô tả trên đây trong điều chế ví dụ 4, bước 2, phương pháp A.

Bước 3: Điều chế methyl este của axit 1-metoxi-4-{metyl-[2-(2,4,6-trimetyl-phenyl)-axetyl]-amin}-piperidin-4-carboxylic (hợp chất P4.2)

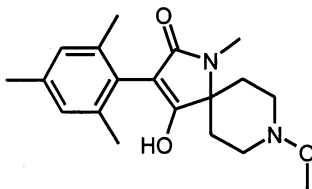


Thêm axit sulfuric đậm đặc (85,7ml, 157,8g, 1,609mol) nhỏ giọt vào huyền phù gồm N-(4-xyano-1-metoxi-piperidin-4-yl)-N-metyl-2-(2,4,6-trimetyl-phenyl)-axetamit (106,0g, 0,322mol) trong metanol (222ml) ở 15-20°C hơn 75 phút và khuấy hỗn hợp phản ứng ở nhiệt độ trong phòng trong một giờ. Đổ hỗn hợp trên đá (1 kg), khuấy trong một giờ, sau đó trung hoà cẩn thận bằng natri hydroxit trong nước 30% đến độ pH = 5-5,5 (làm lạnh bằng đá bên ngoài). Pha loãng hỗn hợp nhão cứng bằng nước (1000ml) và lọc. Rửa chất rắn còn lại bằng nước và hexan, làm khô bằng không khí và làm khô thêm trên phospho pentoxit trong chân không ở 40°C trong hai giờ. Để loại bỏ tạp chất vô cơ (natri sulfat), pha loãng nguyên liệu rắn bằng diclometan (600ml), rửa bằng nước (2x 300ml), chiết pha chứa nước một lần bằng diclometan, làm khô pha hỗn hợp hữu cơ trên natri sulfat và cho bay hơi. Thu được: 85,4g methyl este của axit 1-metoxi-4-{metyl-[2-(2,4,6-trimetyl-phenyl)-axetyl]-amin}-piperidin-4-carboxylic (hợp chất P4.2) là chất rắn màu trắng, điểm nóng chảy 133-135°C.

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3): 1,92 (br m, 1H), 2,04 (br m, 1H), 2,16 (s, 6H), 2,23 (s, 3H), 2,27-2,49 (br m, 2H), 2,82 (br m, 2H), 3,14 (br m, 2H), 3,22 (br s, 3H), 3,52 (s, 3H), 3,62 (br s, 5H), 6,82 (s, 2H).

LC/MS (ES⁺): 363 (M+H)⁺

Bước 4: Điều chế 4-hydroxy-8-metoxi-1-metyl-3-(2,4,6-trimetyl-phenyl)-1,8-diaza-spiro[4.5]dec-3-en-2-on (hợp chất tiêu đề P2.2)

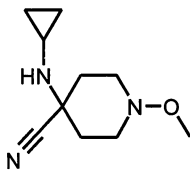


Thêm natri methoxit (38,0g, 703,5mmol) thành 4 phần vào dung dịch gồm methyl este của axit 1-metoxi-4-{metyl-[2-(2,4,6-trimetyl-phenyl)-axetyl]-amin}-piperidin-4-carboxylic (85,0g, 234,5mmol) trong dimetylformamit (800ml) ở 0°C và

tiếp tục khuấy ở 0°C trong 30 phút, sau đó ở nhiệt độ trong phòng trong 1 giờ. Rót hỗn hợp phản ứng trên đá và amoni clorua bão hoà trong nước, axit hoá đến độ pH = 5-6 bằng HCl cô đặc và chiết hoàn toàn bằng etyl axetat. Rửa lớp hỗn hợp hữu cơ bằng nước và nước muối, làm khô trên natri sulfat, cô đặc và làm khô phần còn lại trong chân không. Thu được: 72,7g 4-hydroxy-8-metoxi-1-metyl-3-(2,4,6-trimetyl-phenyl)-1,8-diaza-spiro[4.5]dec-3-en-2-on (hợp chất tiêu đề P2.2) là chất rắn.

Dữ liệu phổ của vật liệu thô này là đồng nhất với dữ liệu được mô tả trên đây trong điều chế ví dụ 1, bước 1.

Ví dụ 5: Điều chế 4-xyclopropylamin-1-metoxi-piperidin-4-carbonitril (hợp chất P5.2)



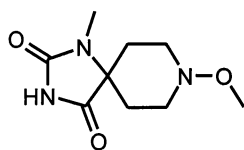
Thêm nhỏ giọt axit clohydric 1N (20ml, 20,0mmol) vào dung dịch gồm xyclopropylamin (1,4ml, 1,14g, 20,0mmol) trong metanol (20ml) ở 0°C và khuấy hỗn hợp ở nhiệt độ trong phòng trong 30 phút. 1-Metoxi-piperidin-4-on [được điều chế theo Journal of Organic Chemistry (1961), 26, 1867-74] (2,58g, 20,0mmol), 10 phút sau đó tiếp theo là kali xyanua (1,3g, 20,0mmol) trong nước (10ml) sau đó thêm nhỏ giọt ở 0°C. Làm ấm hỗn hợp phản ứng đến nhiệt độ trong phòng và khuấy qua đêm, pha loãng bằng nước và dietyl ete, tách lớp và chiết pha chứa nước hoàn toàn bằng dietyl ete. Rửa lớp hỗn hợp hữu cơ bằng nước muối, làm khô trên natri sulfat và cho bay hơi. Thu được: 3,19g 4-xyclopropylamin-1-metoxi-piperidin-4-carbonitril (hợp chất tiêu đề P5.2) là dầu. Sử dụng nguyên liệu này mà không cần tinh chế thêm trong bước tiếp theo.

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3): 0,42 (br m, 2H), 0,56 (m, 2H), 1,57-2,30 (tín hiệu brs, tổng 5H), 2,31 (m, 1H), 2,63-3,41 (tín hiệu brs, tổng 4H), 3,51 (br s, 3H).

IR (CN): ν 2223 cm^{-1} . LC/MS (ES $^+$): 196 (M+H) $^+$

Ví dụ 6: Điều chế metyl este của axit 1-metoxi-4-metylamin-piperidin-4-carboxylic (hợp chất P5.4)

Bước 1: Điều chế 8-metoxi-1-metyl-1,3,8-triaza-spiro[4.5]decan-2,4-dion (hợp chất P5.6)

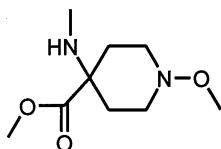


Thêm closulfonyl isoxyanat (5,14ml, 8,36g, 59,05mmol) nhỏ giọt vào dung dịch gồm 1-metoxi-4-metylamin-piperidin-4-carbonitril (hợp chất P5.1) (10,0g, 59,09mmol) trong diclometan (180ml) hơn 15 phút ở 20-30°C. Khuấy huyền phù màu phớt vàng ở nhiệt độ trong phòng trong 30 phút và cô đặc để tạo thành màu vàng nhạt. Hoà tan nguyên liệu này trong axit clohydric 1N trong nước (180ml), đun nóng để hồi lưu trong một giờ, làm lạnh đến 0°C và axit hoá đến độ pH = 5,5 bằng dung dịch NaOH 4N trong nước. Chiết pha chứa nước bằng etyl axetat (4x), rửa lớp hỗn hợp hữu cơ bằng nước muối, làm khô trên natri sulfat và cô đặc. Tinh chế phần còn lại bằng sắc ký trên silica gel (etyl axetat/heptan 1:1). Thu được: 3,86g 8-metoxi-1-metyl-1,3,8-triaza-spiro[4.5]decan-2,4-dion (hợp chất P5.6) là chất rắn.

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3): 1,33-2,41 (tín hiệu brs, tổng 4H), 2,86 (br s, 3H), 3,09-3,42 (tín hiệu brs, tổng 4H), 3,52 (br s, 3H), 7,76 (br s, 1H).

LC/MS (ES⁺): 214 (M+H)⁺

Bước 2: Điều chế methyl este của axit 1-metoxi-4-metylamin-piperidin-4-carboxylic (hợp chất tiêu đề P5.4)



Thêm natri hydroxit (0,63g, 15,75mmol) vào huyền phù gồm 8-metoxi-1-metyl-1,3,8-triaza-spiro[4.5]decan-2,4-dion (3,36g, 15,76mmol) trong nước (100ml) và đun nóng hỗn hợp trong thiết bị vi sóng ở 190°C trong 30 phút, ở 200°C trong một giờ và ở 210°C trong một giờ cho đến khi được đánh giá hoàn toàn bằng phân tích LC-MS. Axit hoá hỗn hợp phản ứng đến độ pH = 3 (làm mát bằng đá) bằng dung dịch HCl trong nước, cô đặc trong chân không, thu chất rắn còn lại trong metanol ẩm (40°C), lọc và cho bay hơi dịch lọc. Làm khô phần còn lại trên phospho pentoxit ở 40°C qua đêm.

Thu được: 2,08g muối hydroclorua của axit 1-metoxi-4-metylamin-piperidin-4-carboxylic.

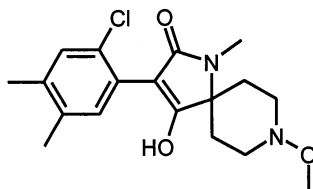
LC/MS (ES⁺): 189 (M+H)⁺ của bazơ tự do.

Thêm thionyl clorua (2,41ml, 3,97g, 33,40mmol) vào huyền phù gồm muối hydroclorua của axit 1-metoxi-4-metylamin-piperidin-4-carboxylic (2,08g, 9,26mmol) trong metanol (20ml) ở 0-5°C và đun nóng hồi lưu hỗn hợp phản ứng trong 7 ngày. Sau đó làm mát, cô đặc hỗn hợp, pha loãng phần còn lại bằng nước đá và trung hoà bằng natri bicarbonat trong nước. Chiết pha chứa nước bằng etyl axetat (4x), lớp hỗn hợp hữu cơ rửa bằng nước muối, làm khô trên natri sulfat và cô đặc. Tinh chế phần còn lại bằng sắc ký trên silica gel (gradient etyl axetat → etyl axetat/metanol 20:1). Thu được: 76mg methyl este của axit 1-metoxi-4-metylamin-piperidin-4-carboxylic (hợp chất tiêu đề P5.4) là dầu.

¹H-NMR (CDCl₃): 1,46-2,33 (tín hiệu brs, tổng 5H), 2,22 (br s, 3H), 2,51-3,31 (tín hiệu brs, tổng 4H), 3,51 (s, 3H), 3,72 (br s, 3H).

IR (COOMe): ν 1726 cm⁻¹. LC/MS (ES⁺): 203 (M+H)⁺

Ví dụ 7: Điều chế 3-(2-Clo-4,5-dimetyl-phenyl)-4-hydroxy-8-metoxi-1-metyl-1,8-diaza-spiro[4.5]dec-3-en-2-on (hợp chất P2.26)



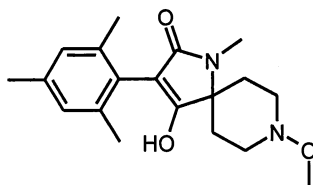
Thêm nhỏ giọt axit sulfuric đậm đặc (0,876ml, 16,43mmol) vào dung dịch gồm 2-(2-clo-4,5-dimetyl-phenyl)-N-(4-xyano-1-metoxi-piperidin-4-yl)-N-metyl-axetamid (hợp chất P4.27) (1,15g, 3,29mmol) trong metanol (~3ml) ở 10°C và khuấy hỗn hợp phản ứng ở nhiệt độ trong phòng qua đêm. Sau khi xử lý thêm bằng axit sulfuric đậm đặc (0,876ml, 16,43mmol) và khuấy ở 80°C qua đêm, thêm axit sulfuric đậm đặc bổ sung (0,876ml, 16,43mmol) và tiếp tục khuấy ở 90°C thêm đêm nữa. Đổ hỗn hợp trên đá, trung hoà cẩn thận bằng natri hydroxit trong nước 30% đến độ pH = 5-6, lọc và làm khô kết tủa thu được thu được nhóm sản phẩm đầu tiên là chất rắn màu be (225mg). Cô đặc dịch cái, và tinh chế phần còn lại bằng sắc ký trên silica gel (etyl axetat) để tạo ra 462mg sản phẩm là chất rắn màu vàng nhẹ. Thu được: 687mg 3-(2-

clo-4,5-dimethyl-phenyl)-4-hydroxy-8-metoxi-1-metyl-1,8-diaza-spiro[4.5]dec-3-en-2-on (hợp chất tiêu đề P2.26) là chất rắn, điểm nóng chảy 191-192°C.

$^1\text{H-NMR}$ (CD_3Cl_3): 1,49-2,57 (tín hiệu brs, tổng 4H), 2,20 (s, 3H), 2,21 (s, 3H), 2,79-3,46 (tín hiệu brs, tổng 4H), 3,00 (br s, 3H), 3,52 (br s, 3H), 4,40 (br s, 1H), 6,87 (s, 1H), 7,16 (s, 1H).

LC/MS (ES⁺): 351/353 (M+H)⁺

Ví dụ 8: Cách điều chế khác 4-hydroxy-8-metoxi-1-metyl-3-(2,4,6-trimetyl-phenyl)-1,8-diaza-spiro[4.5]dec-3-en-2-on (hợp chất P2.2)

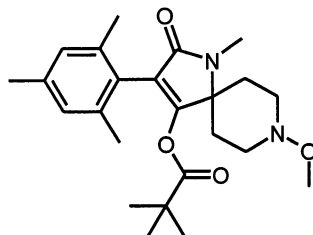


Thêm nhỏ giọt dung dịch 1,0M liti bis(trimetylsilyl)amit trong hexan (3,32ml, 3,32mmol) vào dung dịch gồm 4-hydroxy-8-metoxi-3-(2,4,6-trimetyl-phenyl)-1,8-diaza-spiro[4.5]dec-3-en-2-on [nguyên liệu ban đầu (SM) được điều chế theo WO09/049851] (500mg, 1,58mmol) trong tetrahydrofuran (20ml) ở 0°C trên 15 phút. Khuấy hỗn hợp một giờ ở 0°C, xử lý bằng metyl iodua (0,099ml, 225mg, 1,59mmol) nhỏ giọt hơn 10 phút, và khuấy thêm ở 0°C trong 30 phút và ở nhiệt độ trong phòng trong một giờ. Dừng hỗn hợp phản ứng over amoni clorua bão hoà trong nước lạnh và extracted với *tert*-butyl metyl ete (3x), rửa pha hỗn hợp hữu cơ bằng nước muối, làm khô trên natri sulfat và cô đặc. Phần còn dư (210mg) được được tạo huyền phù trong hexan, khuấy ở nhiệt độ trong phòng for 10 phút, lọc và làm khô. Thu được: 171mg hỗn hợp nguyên liệu ban đầu sạch (SM) và 4-hydroxy-8-metoxi-1-metyl-3-(2,4,6-trimetyl-phenyl)-1,8-diaza-spiro[4.5]dec-3-en-2-on (hợp chất tiêu đề P2.2) là chất rắn màu be. Phân tích $^1\text{H-NMR}$ và LC-MS nguyên liệu thô chỉ ra tỷ lệ ~1:2.5 của hỗn hợp SM/hợp chất P2.2 này.

$^1\text{H-NMR}$ (CD_3OD , tín hiệu được chọn): 6,86 (s, 2H, H_{arom} SM), 6,89 (s, 2H, H_{arom} hợp chất P2.2); cả hai tín hiệu ở tỷ lệ 1:2.6.

LC/MS (ES⁺): 317 (M+H)⁺; R_t = 1,40 phút for SM, LC/MS (ES⁺): 331 (M+H)⁺; R_t = 1,46 phút đối với hợp chất P2.2. Cả hai tín hiệu ở tỷ lệ 1:2.5 xem xét vùng đỉnh UV ở 220 nm.

Ví dụ 9: Điều chế 8-metoxi-1-metyl-2-oxo-3-(2,4,6-trimetyl-phenyl)-1,8-diaza-spiro[4.5]dec-3-en-4-yl este của axit 2,2-dimetyl-axit propionic (hợp chất P1.31)



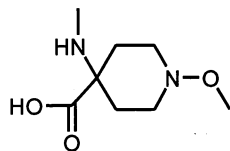
Thêm nhỏ giọt pivaloyl clorua (0,143ml, 140,1mg, 1,16mmol) vào dung dịch gồm 4-hydroxy-8-metoxi-1-metyl-3-(2,4,6-trimetyl-phenyl)-1,8-diaza-spiro[4.5]dec-3-en-2-on (hợp chất P2.2) (350mg, 1,06mmol) và trietylamin (0,221ml, 160,7mg, 1,59mmol) trong tetrahydrofuran (10ml) ở 0°C. Khuấy huyền phù ở 0°C trong hai giờ. Pha loãng hỗn hợp phản ứng bằng etyl axetat và nước, tách lớp, chiết pha chứa nước bằng etyl axetat, rửa pha hỗn hợp hữu cơ bằng nước muối, làm khô trên natri sulfat và cô đặc. Tinh chế phần còn lại bằng sắc ký trên silica gel (etyl axetat). Thu được: 344mg 2,2-dimetyl-axit propionic 8-metoxi-1-metyl-2-oxo-3-(2,4,6-trimetyl-phenyl)-1,8-diaza-spiro[4.5]dec-3-en-4-yl este (hợp chất P1.31) là gồm không màu.

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3): 1,02 (br s, 9H), 1,46-2,51 (tín hiệu brs, tổng 4H), 2,14 (s, 6H), 2,23 (s, 3H), 2,70-3,46 (tín hiệu brs, tổng 4H), 2,95 (br s, 3H), 3,54 (s, 3H), 6,82 (s, 2H).

LC/MS (ES^+): 415 ($\text{M}+\text{H}$) $^+$

Ví dụ 10: Điều chế metyl este của axit 4-{[2-(2,5-Dimetyl-phenyl)-axetyl]-metylamin}-1-metoxi-piperidin-4-carboxylic (hợp chất P4.46)

Bước 1: Điều chế axit 1-metoxi-4-metylamin-piperidin-4-carboxylic (hợp chất P5.7)



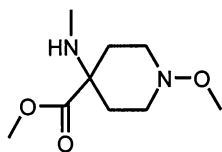
Thêm 1-metoxi-4-metylamin-piperidin-4-carbonitril (hợp chất P5.1) (3,0g, 17,73mmol) thành hai phần vào axit sulfuric đậm đặc (30ml) ở 0°C. Sau khi khuấy trong 20 phút, thu được dung dịch màu vàng được giữ ở nhiệt độ trong phòng qua đêm. Pha loãng cẩn thận hỗn hợp phản ứng bằng nước đá (60ml), đun nóng hồi lưu

trong 4 giờ, sau đó đổ vào đá (50g) và trung hoà bằng amoniac trong nước 25% lạnh đến độ pH = 7-8. Cho bay hơi hỗn hợp phản ứng và nghiền chất rắn còn lại với metanol ẩm (40°C)(3x 50ml), lọc và cô đặc pha hỗn hợp metanol. Xử lý phần còn lại bằng toluen (3x 50ml) để loại hỗn hợp đồng sôi nước đến trọng lượng không đổi, sau đó nghiền với tetrahydrofuran, lọc và làm khô. Thu được: 2,30g axit 1-metoxi-4-metylamin-piperidin-4-carboxylic (hợp chất P5.7) là chất rắn màu trắng, điểm nóng chảy >250°C.

¹H-NMR (D₂O): 1,73 (m, 1H), 2,02 (m, 2H), 2,32 (m, 1H), 2,54 (appar, d, 3H), 2,69 (m, 1H), 2,99 (m, 1H), 3,18 (m, 1H), 3,33 (m, 1H), 3,49 (appar, d, 3H). Dữ liệu phổ đề xuất hai chất tương ứng ở tỷ lệ 1:1.

LC/MS (ES⁺): 189 (M+H)⁺

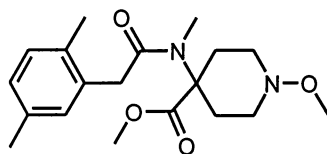
Bước 2: Điều chế methyl este của axit 1-metoxi-4-metylamin-piperidin-4-carboxylic (hợp chất P5.4)



Thêm thionyl clorua (2,29ml, 3,76g, 31,57mmol) vào huyền phù gồm axit 1-metoxi-4-metylamin-piperidin-4-carboxylic (2,0g, 10,63mmol) trong metanol (50ml) ở 0-10°C và đun nóng hồi lưu hỗn hợp phản ứng qua đêm. Sau đó làm mát, cô đặc hỗn hợp, pha loãng phần còn lại bằng nước đá (20ml) và trung hoà bằng natri bicarbonat trong nước. Chiết pha chứa nước bằng etyl axetat (4x25ml) và diclometan (4x50ml), rửa lớp hỗn hợp hữu cơ bằng natri bicarbonat trong nước (15ml) và nước muối (15ml), làm khô trên natri sulfat và cô đặc. Thu được: 0,76g methyl este của axit 1-metoxi-4-metylamin-piperidin-4-carboxylic (hợp chất P5.4) là dầu nhớt, màu cam. Dữ liệu phổ của vật liệu thô này là đồng nhất với dữ liệu được mô tả trên đây trong điều chế ví dụ 6, bước 2.

LC/MS (ES⁺): 203 (M+H)⁺

Bước 3: Điều chế methyl este của axit 4-{[2-(2,5-Dimetyl-phenyl)-axetyl]-metylamin}-1-metoxi-piperidin-4-carboxylic (hợp chất tiêu đề P4.46)



Thêm nhỏ giọt (2,5-dimetyl-phenyl)-axetyl clorua (240mg, 1,31mmol) vào dung dịch gồm metyl este của axit 1-metoxi-4-metylamin-piperidin-4-carboxylic (200mg, 0,99mmol) trong pyridin (5ml) ở 0°C. Khuấy hỗn hợp phản ứng ở 0°C trong một giờ và ở nhiệt độ trong phòng trong 6 giờ, đổ vào nước đá, axit hoá đến độ pH = 7 bằng dung dịch HCl 2N trong nước và pha loãng bằng etyl axetat (50ml). Tách lớp, chiết pha chứa nước bằng etyl axetat (3x25ml), rửa pha hỗn hợp hữu cơ bằng nước (3x 15ml) và nước muối, làm khô trên natri sulfat và cô đặc. Tinh chế phần còn lại bằng sắc ký trên silica gel (xyclohexan/etyl axetat 2:1). Thu được: 170mg metyl este của axit 4-{[2-(2,5-Dimetyl-phenyl)-axetyl]-metyl-amin}-1-metoxypiperidin-4-carboxylic (hợp chất tiêu đề P4.46) là gồm không màu.

$^1\text{H-NMR}$ (CD_3OD): 1,99 (br m, 2H), 2,17 (s, 3H), 2,26 (s, 3H), 2,36 (br m, 2H), 2,79 (br m, 1H), 2,93 (br m, 1H), 3,06 (appar, d, 3H), 3,21 (br m, 2H), 3,50 (s, 3H), 3,67 (s, 3H), 3,68 (br s, 2H), 6,91 (br s, 1H), 6,95 (d, 1H), 7,04 (d, 1H).

LC/MS (ES⁺): 349 (M+H)⁺

Hợp chất có công thức I từ Bảng P1. hợp chất có công thức II từ Bảng P2 và các hợp chất trung gian được liệt kê trong các bảng P3 và P4 có thể được điều chế bằng quy trình tương tự. Một trong số các phương pháp LC-MS sau đây được sử dụng để xác định đặc tính của các hợp chất này

Phương pháp A

MS: Phổ khối ZQ từ Waters (phổ khối mạch bốn cực đơn); Phương pháp ion hóa: phun điện; Phân cực: ion dương/ ion âm; Mao dẫn (kV) 3,00, Côn (V) 30,00, Bình chiết (V) 2,00, Nhiệt độ nguồn (°C) 100, Nhiệt độ cân solvat hóa (°C) 250, Dòng khí côn (L/giờ) 50, Dòng khí cân solvat hóa (L/Giờ) 400; mức khối: từ 150 đến 1000 hoặc từ 100 đến 900 Da.

LC: HP 1100 HPLC từ Agilent: máy khử khí dung môi, bơm bốn kênh (ZCQ) / bơm đôi (ZDQ), ngăn cột gia nhiệt và máy phát hiện mảng diot. Cột: Phenomenex Gemini C18, 3 cỡ μm , 110 Angström, 30 x 3 mm, Nhiệt độ: 60°C; hạt khoảng bước

sóng DAD (nm): từ 200 đến 500; gradien dung môi: A = nước + 0,05% thể tích HCOOH, B= Axetonitril/Metanol (4:1, thể tích) + 0,04% thể tích HCOOH.

Thời gian (phút)	A%	B%	Lưu lượng (mL/phút)
0,00	95,0	5,0	1,700
2,00	0,0	100,0	1,700
2,80	0,0	100,0	1,700
2,90	95,0	5,0	1,700
3,00	95,0	5,0	1,700

Phương pháp B

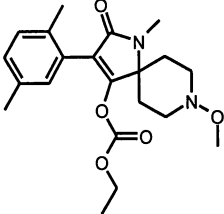
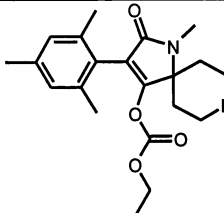
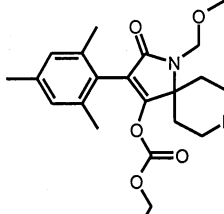
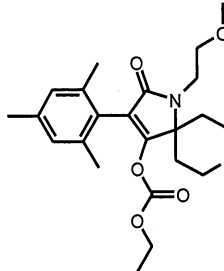
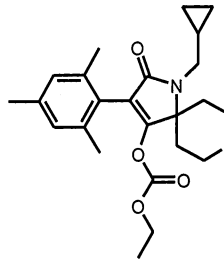
MS: Phổ khối ZMD từ Waters (phổ khối mạch bốn cực đơn); phương pháp Ion hóa: phun điện; phân cực: ion dương/ ion âm; Mao dẫn (kV) 3,80, Côn (V) 30,00, Bình chiết (V) 3,00, Nhiệt độ nguồn (°C) 150, Nhiệt độ cân solvat hóa (°C) 350, Dòng khí côn (L/ giờ) OFF, Dòng khí cân solvat hóa (L/giờ) 600; mức khối: từ 150 đến 1000 (từ 100 đến 1500 đối với khối thấp) hoặc từ 100 đến 900Da.

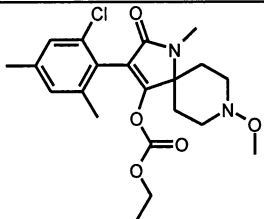
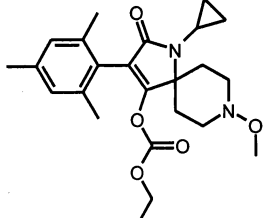
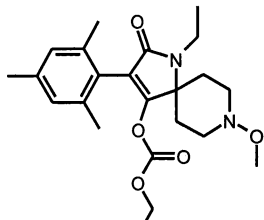
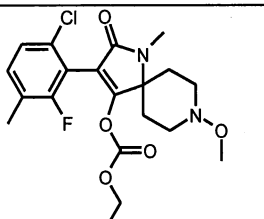
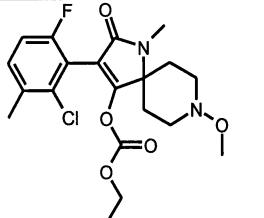
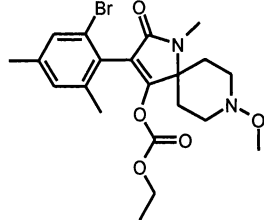
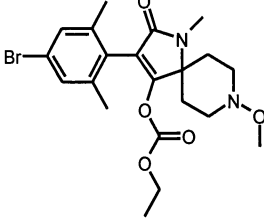
LC: HP 1100 HPLC từ Agilent: máy khử khí dung môi, bơm đôi, gian cột gia nhiệt và máy phát hiện mảng diot. Cột: Phenomenex Gemini C18, cỡ hạt 3µm, 110 Angström, 30 x 3 mm, Nhiệt độ: 60 °C; phạm vi bước sóng DAD (nm): từ 200 đến 500; gradien dung môi: A = nước + 0,05% thể tích HCOOH, B= Axetonitril/Metanol (4:1, v:v) + 0,04% thể tích HCOOH.

Thời gian (phút)	A%	B%	Lưu lượng (mL/phút)
0,00	95,0	5,0	1,700
2,00	0,0	100,0	1,700
2,80	0,0	100,0	1,700
2,90	95,0	5,0	1,700
3,00	95,0	5,0	1,700

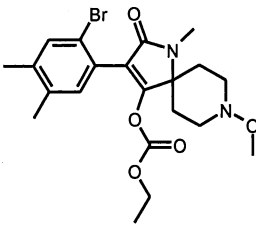
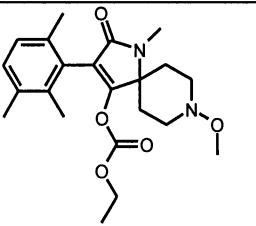
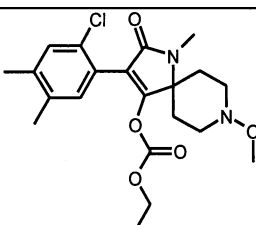
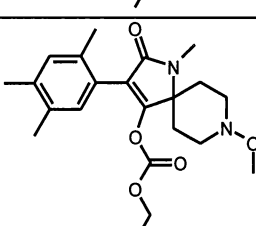
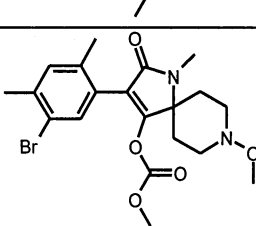
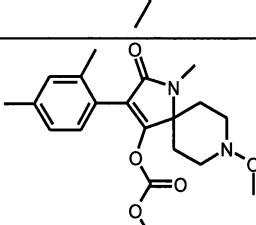
Các giá trị đặc tính thu được đối với mỗi hợp chất là thời gian duy trì ("R_t" được ghi lại theo phút) và ion phân tử nhiệt như liệt kê trong Bảng P1, Bảng P2, Bảng P3, Bảng P4 và trong Bảng P5.

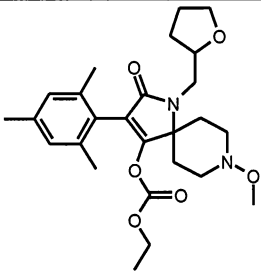
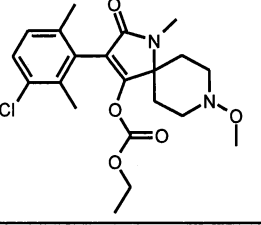
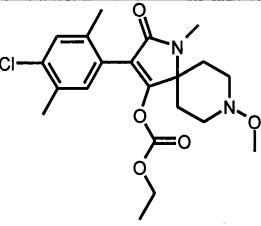
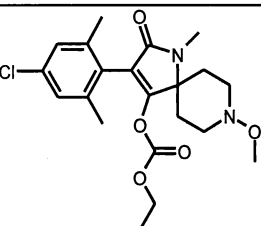
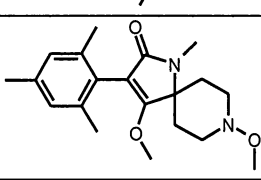
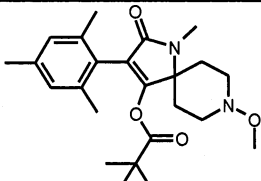
Bảng P1: Dữ liệu vật lý của hợp chất có công thức I:

Hợp chất số	Cấu trúc	Điểm nóng chảy	MS/NMR
P1.1		96-110°C	LC/MS: 389 (M+H) ⁺ R _t = 1,82 phút
P1.2	 Ví dụ 1, bước 2	134-136°C	LC/MS: 403 (M+H) ⁺ R _t = 1,81 phút
P1.3		gôm	¹ H-NMR (CD ₃ OD, tín hiệu được chọn): 1,03 (t, 3H, OCH ₂ CH ₃), 2,14 (s, 6H, mesityl CH ₃), 2,26 (s, 3H, mesityl CH ₃), 3,34 (br s, 3H, CH ₂ OCH ₃), 3,55 (s, 3H, NOCH ₃), 4,01 (q, 2H, OCH ₂ CH ₃), 6,89 (s, 2H, H _{arom}),
P1.4		rắn	LC/MS: 447 (M+H) ⁺ R _t = 1,94 phút
P1.5		gôm	¹ H-NMR (CD ₃ OD): 0,38 (m, 2H), 0,55 (m, 2H), 1,02 (t, 3H), 1,15 (m, 1H), 1,54 (br m, 1H), 1,88 (br m, 1H), 2,13 (s, 6H), 2,25 (s, 3H), 2,48 (br m, 1H), 2,66 (br m, 1H), 2,83 (br m, 1H), 3,18 (br m, 1H), 3,30 (br m, 2H), 3,41 (br m, 2H), 3,55 (s, 3H), 4,00 (q, 2H), 6,87 (s, 2H), LC/MS (ES ⁺): 443 (M+H) ⁺ ; R _t = 2,06 phút

Hợp chất số	Cấu trúc	Điểm nóng chảy	MS/NMR
P1.6		164-167°C	LC/MS: 423/425 (M+H) ⁺ R _t = 1,82 phút
P1.7		gôm	LC/MS: 429 (M+H) ⁺ R _t = 1,93 phút
P1.8		101-103°C	LC/MS: 417 (M+H) ⁺ R _t = 1,91 phút
P1.9		rắn	LC/MS: 427/429 (M+H) ⁺ R _t = 1,75 phút
P1.10		47-50°C	LC/MS: 427/429 (M+H) ⁺ R _t = 1,73 phút
P1.11		163-167°C	LC/MS: 467/469 (M+H) ⁺ R _t = 1,83 phút
P1.12		126-127°C	LC/MS: 467/469 (M+H) ⁺ R _t = 1,89 phút

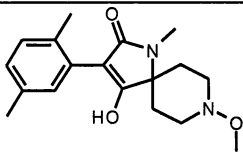
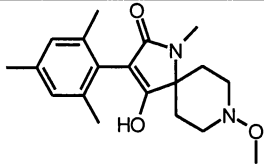
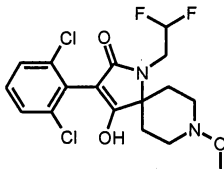
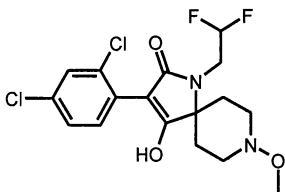
Hợp chất số	Cấu trúc	Điểm nóng chảy	MS/NMR
P1.13		106-109°C	LC/MS: 389 (M+H) ⁺ R _t = 1,74 phút
P1.14		gôm	LC/MS: 471/473 (M+H) ⁺ R _t = 1,81 phút
P1.15		87-89°C	LC/MS: 473/475/477 (M+H) ⁺ R _t = 1,80 phút
P1.16		gôm	LC/MS: 461 (M+H) ⁺ R _t = 1,91 phút
P1.17		gôm	LC/MS: 477 (M+H) ⁺ R _t = 1,89 phút
P1.18		gôm	LC/MS: 477 (M+H) ⁺ R _t = 1,91 phút
P1.19		rắn	LC/MS: 417 (M+H) ⁺ R _t = 1,86 phút

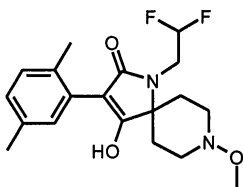
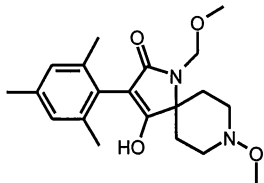
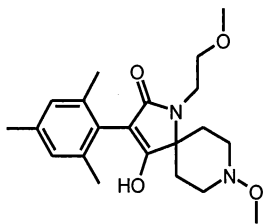
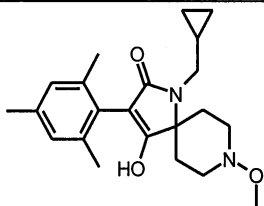
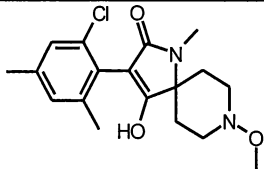
Hợp chất số	Cấu trúc	Điểm nóng chảy	MS/NMR
P1.20		158-159°C	$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 , tín hiệu được chọn): 1,16 (t, 3H, OCH_2CH_3), 2,20 (s, 3H, phenyl CH_3), 2,22 (s, 3H, phenyl CH_3), 2,94 (br s, 3H, N- CH_3 ; overlapping signal với piperidiny l Hs), 3,56 (s, 3H, NOCH_3), 4,09 (q, 2H, OCH_2CH_3), 7,07 (s, 1H, H_{arom}), 7,35 (s, 1H, H_{arom}),
P1.21		gôm	LC/MS: 403 ($\text{M}+\text{H}$) ⁺ R_t = 1,81 phút
P1.22		149-150°C	LC/MS: 423/425 ($\text{M}+\text{H}$) ⁺ R_t = 1,91 phút
P1.23		gôm	LC/MS: 403 ($\text{M}+\text{H}$) ⁺ R_t = 1,83 phút
P1.24		rắn	LC/MS: 467/469 ($\text{M}+\text{H}$) ⁺ R_t = 1,88 phút
P1.25		rắn	LC/MS: 389 ($\text{M}+\text{H}$) ⁺ R_t = 1,77 phút

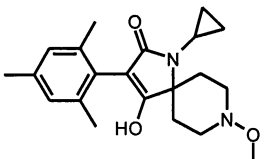
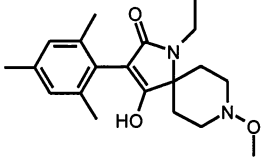
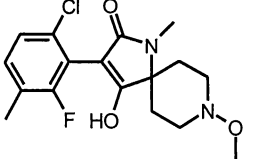
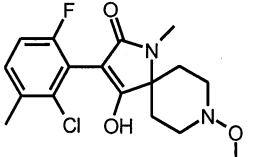
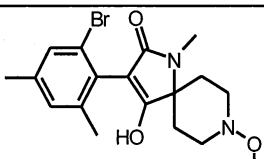
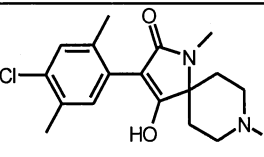
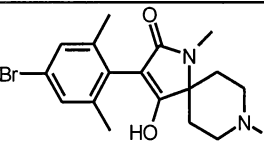
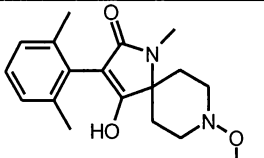
Hợp chất số	Cấu trúc	Điểm nóng chảy	MS/NMR
P1.26		gôm	LC/MS: 473 (M+H) ⁺ R _t = 1,96 phút
P1.27		gôm	LC/MS: 423/425 (M+H) ⁺ R _t = 1,84 phút
P1.28		gôm	LC/MS: 423/425 (M+H) ⁺ R _t = 1,86 phút
P1.29		130-132°C	LC/MS: 423/425 (M+H) ⁺ R _t = 1,86 phút
P1.30			LC/MS: 345 (M+H) ⁺ R _t = 1,77 phút
P1.31	 Ví dụ 9	gôm	LC/MS: 415 (M+H) ⁺ R _t = 2,00 phút

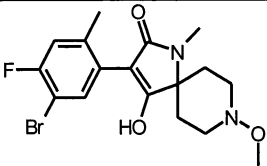
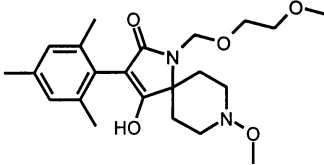
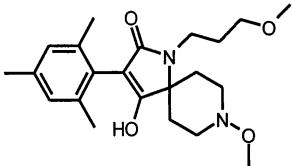
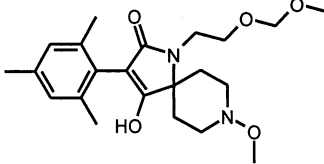
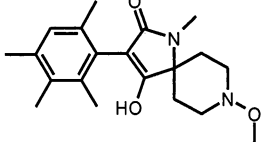
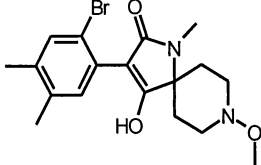
Bảng P2: Dữ liệu vật lý của hợp chất có công thức II:

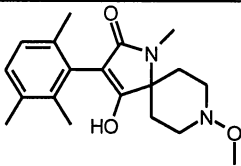
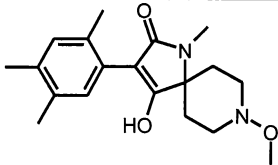
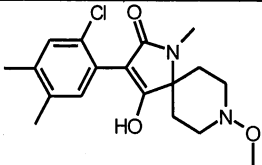
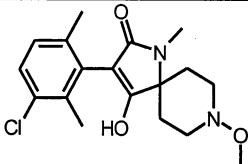
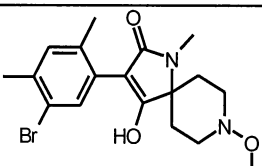
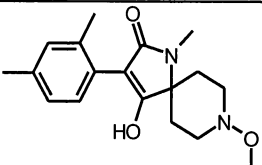
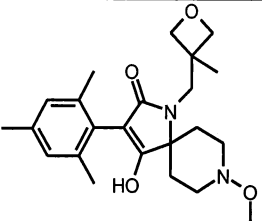
Hợp chất số	Cấu trúc	Điểm nóng chảy	MS/NMR
-------------	----------	----------------	--------

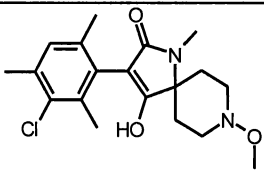
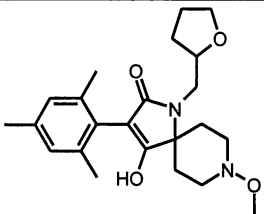
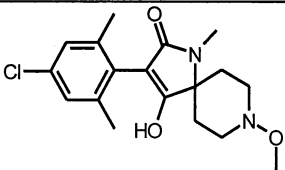
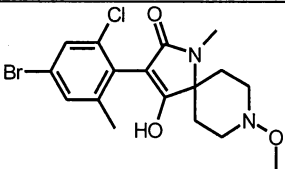
Hợp chất số	Cấu trúc	Điểm nóng chảy	MS/NMR
P2.1		121-123°C	LC/MS: 317 (M+H) ⁺ R _t = 1,49 phút
P2.2	 Ví dụ 1, bước 1 Ví dụ 2, bước 3 Ví dụ 4, bước 4	241-243°C	LC/MS: 331 (M+H) ⁺ R _t = 1,44 phút
P2.3		rắn	¹ H-NMR (400MHz, CDCl ₃): 1,75 (m, 2H), 2,31 (m, 2H), 2,48 (m, 2H), 3,47 (m, 2H), 3,58 (s, 3H), 3,93 (m, 2H), 5,90 (m, 1H), 6,30 (br s, 1H), 7,25-7,32 (m, 2H), 7,40 (m, 1H),
P2.4		rắn	¹ H-NMR (400MHz, CDCl ₃ , tín hiệu được chọn): 3,57 (s, 3H, NOCH ₃), 5,85 (m, 1H, CHF ₂), 6,52 (br s, 1H), 7,27-7,35 (m, 2H, H _{arom}), 7,49 (d, 1H, H _{arom}),

Hợp chất số	Cấu trúc	Điểm nóng chảy	MS/NMR
P2.5		rắn	¹ H-NMR (400MHz, CDCl ₃ , tín hiệu được chọn): 2,18 (s, 3H, phenyl CH ₃), 2,31 (s, 3H, phenyl CH ₃), 3,39 (s, 3H, NOCH ₃), 5,78 (m, 1H, CHF ₂), 6,19 (br s, 1H), 7,00 (s, 1H, H _{arom}), 7,08 (d, 1H, H _{arom}), 7,12 (d, 1H, H _{arom}),
P2.6		205-207°C	LC/MS: 361 (M+H) ⁺ R _t = 1,47 phút
P2.7		rắn	LC/MS: 375 (M+H) ⁺ R _t = 1,58 phút
P2.8	 Ví dụ 3, bước 2	223-225°C	LC/MS: 371 (M+H) ⁺ R _t = 1,76 phút
P2.9		>240°C	LC/MS: 351/353 (M+H) ⁺ R _t = 1,48 phút

Hợp chất số	Cấu trúc	Điểm nóng chảy	MS/NMR
P2.10		208-211°C	LC/MS: 357 (M+H) ⁺ R _t = 1,61 phút
P2.11		218-221°C	LC/MS: 345 (M+H) ⁺ R _t = 1,58 phút
P2.12		rắn	LC/MS: 355/357 (M+H) ⁺ R _t = 1,52 phút
P2.13		54-57°C	LC/MS: 355/357 (M+H) ⁺ R _t = 1,49 phút
P2.14		rắn	LC/MS: 395/397 (M+H) ⁺ R _t = 1,48 phút
P2.15		191-195°C	LC/MS: 351/353 (M+H) ⁺ R _t = 1,58 phút
P2.16		234-235°C	LC/MS: 395/397 (M+H) ⁺ R _t = 1,54 phút
P2.17		202-204°C	LC/MS: 317 (M+H) ⁺ R _t = 1,36 phút

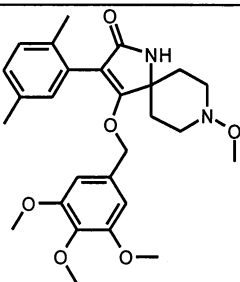
Hợp chất số	Cấu trúc	Điểm nóng chảy	MS/NMR
P2.18		gôm	LC/MS: 399/401 (M+H) ⁺ R _t = 1,54 phút
P2.19		80-82°C	¹ H-NMR (CD ₃ OD, tín hiệu được chọn): 2,12 (s, 6H, mesityl CH ₃), 2,27 (s, 3H, mesityl CH ₃), 3,37 (s, 3H, CH ₂ CH ₂ OCH ₃), 3,47 (t, 2H, CH ₂ CH ₂ OMe), 3,55 (s, 3H, NOCH ₃), 3,65 (t, 2H, CH ₂ CH ₂ OMe), 6,91 (s, 2H, H _{arom}),
P2.20		79-81°C	LC/MS: 389 (M+H) ⁺ R _t = 1,62 phút
P2.21		181-183°C	LC/MS: 405 (M+H) ⁺ R _t = 1,60 phút
P2.22		rắn	LC/MS: 345 (M+H) ⁺ R _t = 1,55 phút
P2.23		191-193°C	LC/MS: 395/397 (M+H) ⁺ R _t = 1,59 phút

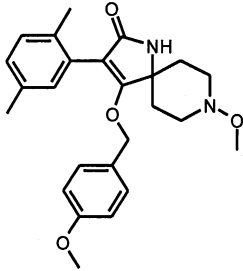
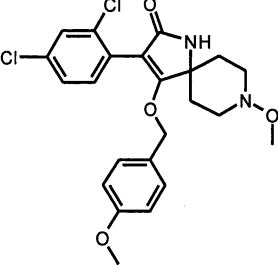
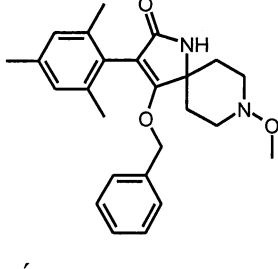
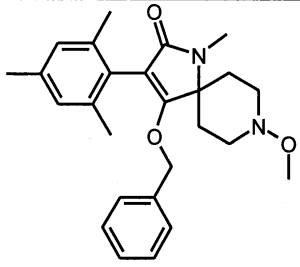
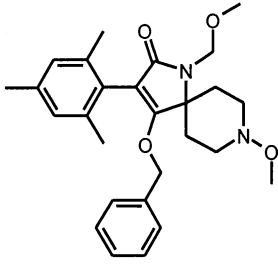
Hợp chất số	Cấu trúc	Điểm nóng chảy	MS/NMR
P2.24		192-194°C	LC/MS: 331 (M+H) ⁺ R _t = 1,41 phút
P2.25		183-186°C	LC/MS: 331 (M+H) ⁺ R _t = 1,56 phút
P2.26	 Ví dụ 7	191-192°C	LC/MS: 351/353 (M+H) ⁺ R _t = 1,60 phút
P2.27		138-142°C	LC/MS: 351/353 (M+H) ⁺ R _t = 1,49 phút
P2.28		182-183°C	LC/MS: 395/397 (M+H) ⁺ R _t = 1,62 phút
P2.29		rắn	LC/MS: 317 (M+H) ⁺ R _t = 1,47 phút
P2.30		180-182°C	LC/MS: 401 (M+H) ⁺ R _t = 1,50 phút

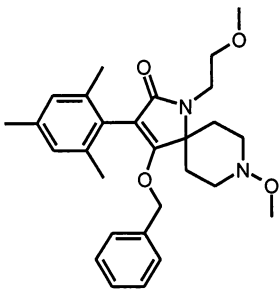
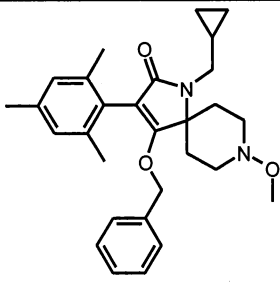
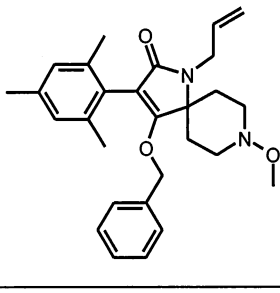
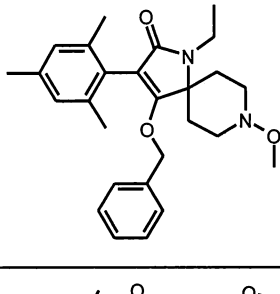
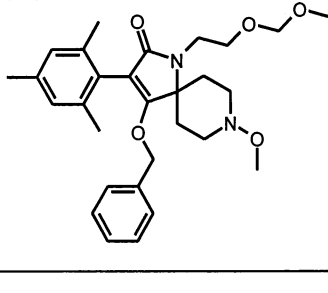
Hợp chất số	Cấu trúc	Điểm nóng chảy	MS/NMR
P2.31			LC/MS: 365/367 (M+H) ⁺ R _t = 1,59 phút
P2.32		211-213°C	LC/MS: 401 (M+H) ⁺ R _t = 1,60 phút
P2.33		rắn	LC/MS: 351/353 (M+H) ⁺ R _t = 1,50 phút
P2.34		>200°C	LC/MS: 415/417/419 (M+H) ⁺ R _t = 1,54 phút

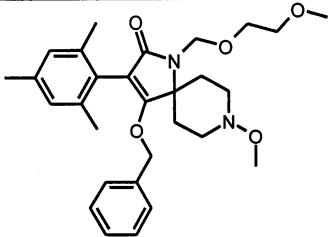
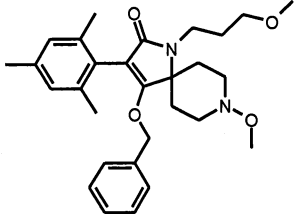
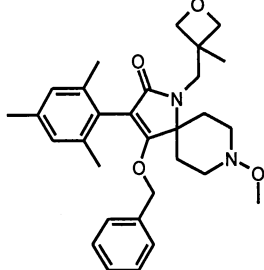
Chất trung gian có công thức XIII hoặc XIV từ Bảng P3 có thể được điều chế bằng các quy trình tương tự.

Bảng P3: Dữ liệu vật lý của các chất trung gian có công thức XIII hoặc XIV:

Hợp chất số	Cấu trúc	Điểm nóng chảy	MS/NMR
P3.1		128-131°C	Được mô tả trong WO09/049851

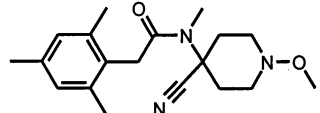
Hợp chất số	Cấu trúc	Điểm nóng chảy	MS/NMR
P3.2		180-183°C	Được mô tả trong WO09/049851
P3.3		111-113°C	Được mô tả trong WO09/049851
P3.4	 Ví Dụ 2, bước 1	184-186°C	LC/MS: 407 (M+H) ⁺ R _t = 2,02 phút
P3.5	 Ví Dụ 2, bước 2	139-141°C	LC/MS: 421 (M+H) ⁺ R _t = 2,04 phút
P3.6		rắn	LC/MS: 451 (M+H) ⁺ R _t = 2,08 phút

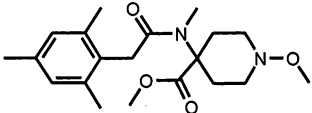
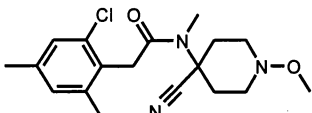
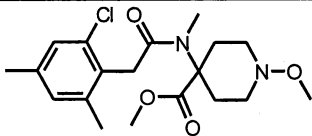
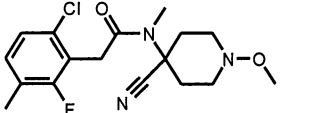
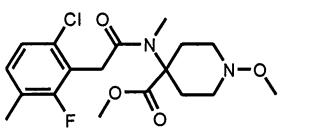
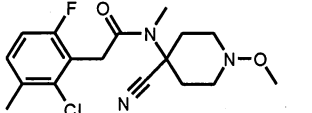
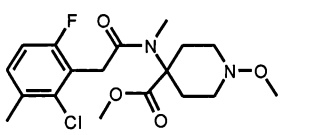
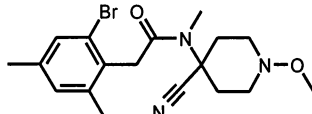
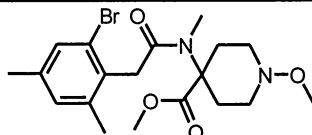
Hợp chất số	Cấu trúc	Điểm nóng chảy	MS/NMR
P3.7		rắn	LC/MS: 465 (M+H) ⁺ R _t = 2,05 phút
P3.8	 Ví dụ 3, bước 1	119-121°C	LC/MS: 461 (M+H) ⁺ R _t = 2,19 phút
P3.9		134-136°C	LC/MS: 447 (M+H) ⁺ R _t = 2,14 phút
P3.10		rắn	LC/MS: 435 (M+H) ⁺ R _t = 2,07 phút
P3.11		90-92°C	LC/MS: 495 (M+H) ⁺ R _t = 2,06 phút

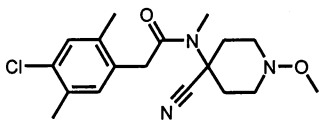
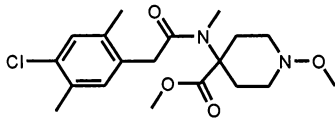
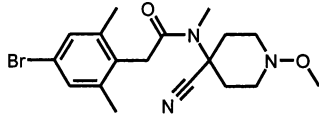
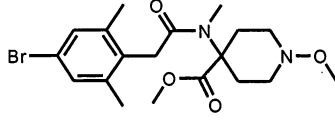
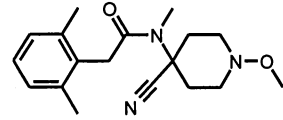
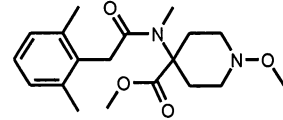
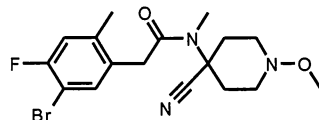
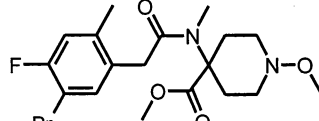
Hợp chất số	Cấu trúc	Điểm nóng chảy	MS/NMR
P3.12		68-70°C	LC/MS: 495 (M+H) ⁺ R _t = 2,05 phút
P3.13		rắn	LC/MS: 479 (M+H) ⁺ R _t = 2,07 phút
P3.14			LC/MS: 491 (M+H) ⁺ R _t = 2,04 phút

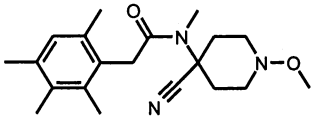
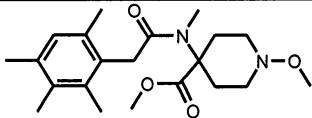
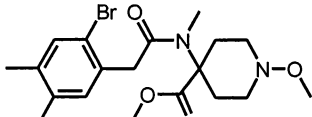
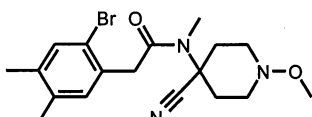
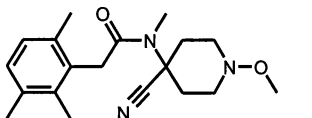
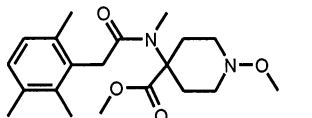
Các chất trung gian có công thức IV hoặc XI từ Bảng P4 có thể được điều chế bằng các quy trình tương tự.

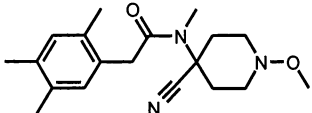
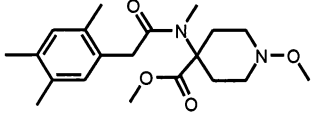
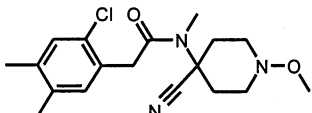
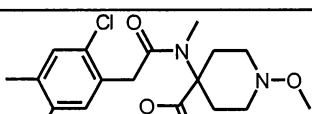
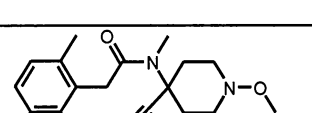
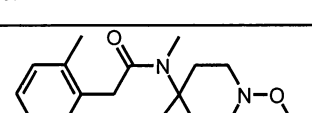
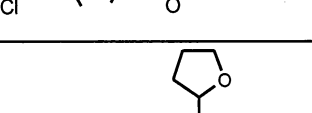
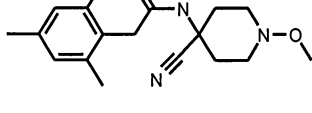
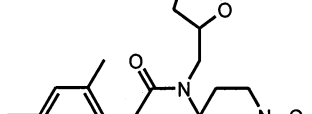
Bảng P4: Dữ liệu vật lý của các chất trung gian có công thức IV hoặc XI:

Hợp chất số	Cấu trúc	Điểm nóng chảy	MS/NMR
P4.1	 Ví dụ 4, bước 2	175-177°C	LC/MS: 330 (M+H) ⁺ R _t = 1,78 phút

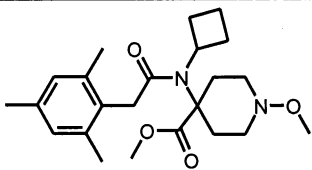
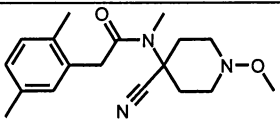
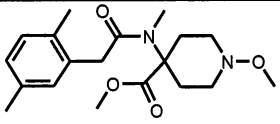
Hợp chất số	Cấu trúc	Điểm nóng chảy	MS/NMR
P4.2	 VÍ DỤ 4, bước 3	133-135°C	LC/MS: 363 (M+H) ⁺ R _t = 1,79 phút
P4.3			LC/MS: 350/352 (M+H) ⁺ R _t = 1,78 phút
P4.4			LC/MS: 383/385 (M+H) ⁺ R _t = 1,79 phút
P4.5			LC/MS: 354/356 (M+H) ⁺ R _t = 1,71 phút
P4.6			LC/MS: 387/389 (M+H) ⁺ R _t = 1,73 phút
P4.7			LC/MS: 354/356 (M+H) ⁺ R _t = 1,70 phút
P4.8			LC/MS: 387/389 (M+H) ⁺ R _t = 1,71 phút
P4.9			LC/MS: 394/396 (M+H) ⁺ R _t = 1,78 phút
P4.10			LC/MS: 427/429 (M+H) ⁺ R _t = 1,81 phút

Hợp chất số	Cấu trúc	Điểm nóng chảy	MS/NMR
P4.11			LC/MS: 350/352 (M+H) ⁺ R _t = 1,78 phút
P4.12			LC/MS: 383/385 (M+H) ⁺ R _t = 1,78 phút
P4.13		rắn	LC/MS: 394/396 (M+H) ⁺ R _t = 1,78 phút
P4.14		rắn	LC/MS: 427/429 (M+H) ⁺ R _t = 1,80 phút
P4.15		171-174°C	LC/MS: 316 (M+H) ⁺ R _t = 1,64 phút
P4.16		139-141°C	LC/MS: 349 (M+H) ⁺ R _t = 1,64 phút
P4.17		gôm	LC/MS: 398/400 (M+H) ⁺ R _t = 1,71 phút
P4.18		rắn	LC/MS: 431/433 (M+H) ⁺ R _t = 1,75 phút

Hợp chất số	Cấu trúc	Điểm nóng chảy	MS/NMR
P4.19			$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 , tín hiệu được chọn): 3,15 (s, 3H, N-CH ₃), 3,50 (br s, 3H, NOCH ₃), 3,75 (s, 2H, PhCH ₂ CO), 6,89 (s, 1H, H _{arom}),
P4.20			LC/MS: 377 (M+H) ⁺ R _t = 1,81 phút
P4.21		gôm	LC/MS: 427/429 (M+H) ⁺ R _t = 1,82 phút
P4.22		123-126°C	LC/MS: 394/396 (M+H) ⁺ R _t = 1,82 phút
P4.23			$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 , tín hiệu được chọn): 2,13 (s, 3H, phenyl CH ₃), 2,22 (s, 3H, phenyl CH ₃), 2,25 (s, 3H, phenyl CH ₃), 3,14 (s, 3H, N-CH ₃), 3,51 (br s, 3H, NOCH ₃), 3,73 (s, 2H, PhCH ₂ CO),
P4.24			$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 , tín hiệu được chọn): 3,52 (br s, 3H, NOCH ₃),

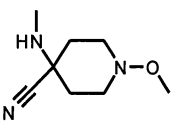
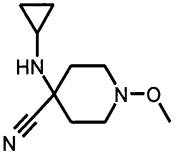
Hợp chất số	Cấu trúc	Điểm nóng chảy	MS/NMR
P4.25			LC/MS: 330 (M+H) ⁺ R _t = 1,78 phút
P4.26			LC/MS: 363 (M+H) ⁺ R _t = 1,77 phút
P4.27		rắn	LC/MS: 350/352 (M+H) ⁺ R _t = 1,54 phút
P4.28			
P4.29			
P4.30			
P4.31		134-136°C	LC/MS: 400 (M+H) ⁺ R _t = 1,87 phút
P4.32		132-134°C	LC/MS: 433 (M+H) ⁺ R _t = 1,87 phút
P4.33		144-146°C	LC/MS: 394/396 (M+H) ⁺ R _t = 1,82 phút

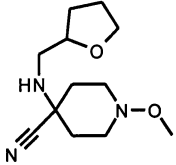
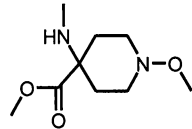
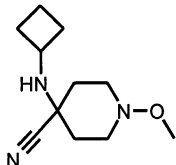
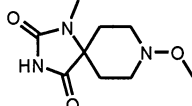
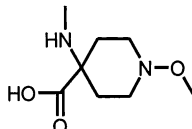
Hợp chất số	Cấu trúc	Điểm nóng chảy	MS/NMR
P4.34		gôm	LC/MS: 427/429 (M+H) ⁺ R _t = 1,84 phút
P4.35		rắn	LC/MS: 316 (M+H) ⁺ R _t = 1,66 phút
P4.36		rắn	LC/MS: 349 (M+H) ⁺ R _t = 1,67 phút
P4.37		188-192°C	LC/MS: 350/352 (M+H) ⁺ R _t = 1,75 phút
P4.38		150-152°C	LC/MS: 383/385 (M+H) ⁺ R _t = 1,77 phút
P4.39		rắn	LC/MS: 414/416/418 (M+H) ⁺ R _t = 1,78 phút
P4.40		gôm	LC/MS: 447/449/451 (M+H) ⁺ R _t = 1,82 phút
P4.41			LC/MS: 356 (M+H) ⁺ R _t = 1,87 phút
P4.42			LC/MS: 389 (M+H) ⁺ R _t = 1,89 phút
P4.43		gôm	LC/MS: 370 (M+H) ⁺ R _t = 1,99 phút

Hợp chất số	Cấu trúc	Điểm nóng chảy	MS/NMR
P4.44			
P4.45			
P4.46	 Ví dụ 10, bước 3	gôm	LC/MS: 349 (M+H) ⁺ R _t = 1,66 phút

Các chất trung gian có công thức V, VII, VIII hoặc IX từ Bảng P5 có thể được điều chế bằng các quy trình tương tự.

Bảng P5: Dữ liệu vật lý của các chất trung gian có công thức V, VII, VIII hoặc IX:

Hợp chất số	Cấu trúc	Điểm nóng chảy	MS/NMR/IR
P5.1	 Ví dụ 4, bước 1	lỏng	¹ H-NMR (CDCl ₃): 1,36 (br s, 1H), 1,62-2,22 (tín hiệu brs, tổng 4H), 2,51 (s, 3H), 2,63-3,41 (tín hiệu brs, tổng 4H), 3,51 (s, 3H), LC/MS (ES ⁺): 170 (M+H) ⁺ ; R _t = 0,25 phút
P5.2	 Ví dụ 5		LC/MS: 196 (M+H) ⁺ R _t = 1,14 phút IR (CN): □ 2223 cm ⁻¹

Hợp chất số	Cấu trúc	Điểm nóng chảy	MS/NMR/IR
P5.3		dầu	LC/MS: 240 (M+H) ⁺ R _t = 1,18 phút
P5.4	 Ví dụ 6, bước 2 Ví dụ 10, bước 2	dầu	¹ H-NMR (CDCl ₃): 1,46-2,33 (tín hiệu brs, tổng 5H), 2,22 (br s, 3H), 2,51-3,31 (tín hiệu brs, tổng 4H), 3,51 (s, 3H), 3,72 (br s, 3H), LC/MS (ES+): 203 (M+H) ⁺ ; R _t = 0,20 phút
P5.5			LC/MS: 210 (M+H) ⁺ R _t = 1,10 phút IR (CN): □ 2222 cm ⁻¹
P5.6	 Ví dụ 6, bước 1	rắn	LC/MS: 214 (M+H) ⁺ R _t = 0,75 phút
P5.7	 Ví dụ 10, bước 1	> 250°C	¹ H-NMR (D ₂ O): 1,73 (m, 1H), 2,02 (m, 2H), 2,32 (m, 1H), 2,54 (appar, d, 3H), 2,69 (m, 1H), 2,99 (m, 1H), 3,18 (m, 1H), 3,33 (m, 1H), 3,49 (appar, d, 3H), LC/MS (ES+): 189 (M+H) ⁺ ; R _t = 0,21 phút

Ví dụ về chế phẩm (% = phần trăm khối lượng)

Ví dụ F1: Nhũ tương đậm đặc	a)	b)	c)
Thành phần hoạt tính	25%	40%	50%
Canxi dodexylbenzensulfonat	5%	8%	6%
polyetylen glycol ete dầu thầu dầu (36mol EO)	5%	-	-
Tributylphenoxypolyetylen glycol ete (30mol EO)	-	12%	4%
Xyclohexanon	-	15%	20%
Hỗn hợp xylen	65%	25%	20%

Nhũ tương nồng độ mong muốn bất kỳ có thể được điều chế từ chế phẩm cô đặc bằng cách pha loãng với nước.

Ví dụ F2: Dung dịch	a)	b)	c)	d)
Thành phần hoạt tính	80%	10%	5%	95%
Etylen glycol monometyl ete	20%	-	-	-
Polyetylen glycol MW 400	-	70%	-	-
N-Metylpyrolid-2-on	-	20%	-	-
Dầu dừa epoxy hoá	-	-	1%	5%
Ete dầu mỏ (nhiệt độ sôi: 160-190°)	-	-	94%	-

Dung dịch này thích hợp để dùng dưới dạng giọt nhỏ.

Ví dụ F3: Hạt	a)	b)	c)	d)
Thành phần hoạt tính	5%	10%	8%	21%
Cao lanh	94%	-	79%	54%
Silic oxit phân tán cao	1%	-	13%	7%
Atapulgit	-	90%	-	18%

Thành phần hoạt tính được hòa tan trong diclometan, dung dịch được phun lên trên chất mang và dung môi tiếp đó được làm bay hơi trong chân không.

Ví dụ F4: Bụi	a)	b)
---------------	----	----

Thành phần hoạt tính	2%	5%
Silic oxit phân tán cao	1%	5%
Đá tal	97%	-
Cao lanh	-	90%

Bụi để sử dụng ngay thu được bằng cách trộn kỹ chất mang thành phần hoạt tính.

Ví dụ F5: Bột thấm ướt	a)	b)	c)
Thành phần hoạt tính	25%	50%	75%
Natri lignosulfonat	5%	5%	-
Natri lauryl sulfat	3%	-	5%
Natri diisobutylnaphthalenulfonat	-	6%	10%
Octylphenoxypolyetylen glycol ete (7-8mol EO)	-	2%	-
Silic oxit phân tán cao	5%	10%	10%
Cao lanh	62%	27%	-

Trộn thành phần hoạt tính với chất phụ trợ và nghiền kỹ hỗn hợp trong máy nghiền thích hợp. Quy trình này thu được bột thấm ướt được, mà có thể được pha loãng bằng nước để thu được hỗn dịch có nồng độ mong muốn bất kỳ.

Ví dụ F6: Hạt ép đùn

Thành phần hoạt tính	10%
Natri lignosulfonat	2%
Carboxymetylxenluloza	1%
Cao lanh	87%

Trộn thành phần hoạt tính với chất phụ trợ, và nghiền hỗn hợp, làm ẩm bằng nước, ép đùn, tạo hạt và làm khô trong dòng khí.

Ví dụ F7: Hạt bao

Thành phần hoạt tính	3%
Polyetylen glycol (MW 200)	3%

Cao lanh

94%

Trong máy trộn, áp dụng đồng nhất thành phần hoạt tính được nghiền mịn với kaolin, mà đã được làm ẩm bằng polyetylen glycol. Quy trình này thu được hạt bao không bụi.

Ví dụ F8a: Huyền phù đậm đặc

Thành phần hoạt tính	40%
Etylen glycol	10%
Nonylphenoxypolyetylen glycol ete (15mol EO)	6%
Natri lignosulfonat	10%
Carboxymetylxenluloza	1%
Dung dịch formaldehyt chứa nước 37%	0,2%
Dầu silicon (nhũ tương chứa nước 75%)	0,8%
Nước	32%

Ví dụ F8b: Huyền phù đậm đặc

Thành phần hoạt tính	10%
Axit naphthalenulfonic, muối natri được ngưng tụ bằng formaldehyt	
Dung dịch chất đồng trùng hợp ghép acrylic graft trong nước và propylenglycol	
Nhũ tương chống tạo bọt silicon	0,5%
DL-propandiol-(1,2)	3%
Heteropolysacarit	0,5%
1,2-Benzisothiazol-3-on	0,2%
Nước	75,8%

Trộn kỹ thành phần hoạt tính được nghiền mịn với chất phụ trợ. Hỗn dịch nồng độ bất kỳ có thể được điều chế từ huyền phù đậm đặc thu được bằng cách pha loãng với nước.

Ví dụ F9: Bột để xử lý hạt khô

	a)	b)	c)
thành phần hoạt tính	25%	50%	75%
Dầu khoáng nhẹ	5%	5%	5%
Axit silicic phân tán cao	5%	5%	-

Cao lanh	65%	40%	-
Bột talc	-		20%

Trộn kỹ thành phần hoạt tính với chất phụ trợ và nghiền kỹ hỗn hợp này trong máy nghiền thích hợp, thu được bột có thể được sử dụng trực tiếp để xử lý hạt.

Ví dụ F10: Kem đặc để xử lý hạt

thành phần hoạt tính	40%
propylen glycol	5%
chất đồng trùng hợp butanol PO/EO	2%
tristyrenphenol với 10-20mol EO	2%
1,2-benzisothiazolin-3-on (dưới dạng dung dịch 20% trong nước)	0,5%
Muối canxit bắt màu monoazo	5%
Dầu silicon (dưới dạng hỗn dịch 75% trong nước)	0,2%
Nước	45,3%

Trộn kỹ thành phần hoạt tính được nghiền mịn với chất phụ trợ, thu được hỗn dịch đậm đặc mà từ đó thu được hỗn dịch chất pha loãng mong muốn bất kỳ bằng cách pha loãng với nước. Bằng cách pha loãng như vậy, thực vật sống cũng như vật liệu thực vật có thể được xử lý và được bảo vệ khỏi sự tấn công của vi sinh vật, bằng cách phun, rót hoặc ngâm.

Ví dụ F11a: chất cô đặc nhũ hóa dầu (trên cơ sở dầu thực vật)

Thành phần hoạt tính	10%
Tristyrylphenol với 16mol EO	10%
Chất đồng trùng hợp khối của axit polyhydroxystearic và polyalkylen glycol	2%
AEROSIL 200	1%
Rape seed dầu metyl este	12%
Axit oleic	65%

Ví dụ F11b: chất cô đặc nhũ hóa dạng dầu (trên dầu khoáng)

Thành phần hoạt tính	10%
Rượu etoxyl, C16-18 và C18-unsatd	5%

Mạch thẳng muối Ca của axit dodexyl-benzen sulfonic	2.5%
2-Pyrolidinon, 1-etenylhexadexyl-, chất đồng trùng hợp	1%
Đất sét ưa chất hữu cơ	1%
Hỗn hợp dầu mỡ	80.5%

Trộn kỹ thành phần hoạt tính đã được nghiền mịn với chất phụ trợ. Hỗn dịch có nồng độ mong muốn bất kỳ có thể được điều chế từ chất cô đặc nhũ hóa thu được bằng cách pha loãng với nước.

Tốt hơn, nếu thuật ngữ “thành phần hoạt tính” được sử dụng ở trên đề cập đến một trong các hợp chất được chọn từ các bảng từ 1 đến 116 được thể hiện ở trên. Nó cũng đề cập đến hỗn hợp của hợp chất công thức I, cụ thể là hợp chất được chọn từ các bảng từ 1 đến 116 nêu trên, với chất diệt côn trùng, chất diệt nấm, chất diệt cỏ, chất an toàn, chất phụ trợ và các chất tương tự khác, mà các hỗn hợp này được mô tả cụ thể ở trên.

Ví dụ sinh học

Các ví dụ này minh họa các đặc tính trừ sâu/ trừ côn trùng của hợp chất có công thức I.

Ví dụ B1: Hoạt tính diệt *Myzus persicae* (rệp cây đào xanh) (quần thể hỗn hợp, cung cấp thức ăn /hoạt tính tiếp xúc dư, phòng ngừa)

Đặt các đĩa lá hoa hướng dương lên trên thạch trong đĩa vi chuẩn độ 24 giếng và phun dung dịch thử nghiệm. Sau khi làm khô, lây nhiễm các đĩa lá bằng quần thể aphid gồm các lứa tuổi khác nhau. Sau thời gian ủ 6 ngày, kiểm tra mẫu đối với tỷ lệ tử vong và hiệu quả cụ thể (ví dụ, tính độc thực vật).

Trong thử nghiệm này, các hợp chất được liệt kê trong các bảng nêu trên có hoạt tính tốt. Trong các hợp chất cụ thể P1.2, P1.3, P1.4, P1.6, P1.7, P1.11, P1.12, P1.13, P1.16, P1.17, P1.18, P1.25, P1.27, P1.29, P2.2, P2.4, P2.6, P2.7, P2.9, P2.10, P2.14, P2.16, P2.17, P2.19, P2.20, P2.21, P2.31 và P2.33 có hoạt tính trên 80% ở nồng độ 400ppm.

Ví dụ B2: Hoạt tính diệt *Myzus persicae* (rệp cây đào xanh) (quần thể hỗn hợp, hoạt tính nội hấp /hoạt tính cung cấp thức ăn, chữa bệnh)

Rễ của các cây đậu Hà Lan con, được lây nhiễm quần thể rệp cây thuộc các lứa tuổi khác nhau, được đặt trực tiếp trong dung dịch thử nghiệm. Sáu ngày sau khi đưa

vào, kiểm tra mẫu đối với kiểm tra mẫu đối với tỷ lệ tử vong và hiệu quả cụ thể trên thực vật.

Trong thử nghiệm này, các hợp chất được liệt kê trong các bảng nêu trên có hoạt tính tốt. Cụ thể là các hợp chất P1.2, P1.3, P1.4, P1.10, P1.11, P1.17, P1.18, P2.2, P2.6, P2.9, P2.16, P2.19, P2.20, P2.21 và P2.31 thể hiện hoạt tính trên 80% ở nồng độ 400ppm.

Ví dụ B3: Hoạt tính diệt *Thrips tabaci* (bọ trĩ ở hành) (quần thể hỗn hợp, hoạt tính cung cấp thức ăn/hoạt tính tiếp xúc dư, phòng ngừa)

Đặt các đĩa lá cây hoa hướng dương lên trên thạch trong đĩa vi chuẩn độ 24 giếng và phun dịch thử nghiệm. Sau khi làm khô, lây nhiễm các đĩa lá này bằng quần thể bọ trĩ gồm nhiều lứa tuổi khác nhau. Sau thời gian ủ bệnh 6 ngày, kiểm tra mẫu đối với tỷ lệ tử vong và hiệu quả cụ thể (ví dụ, tính độc thực vật).

Trong thử nghiệm, các hợp chất nêu trong các nêu trên thể hiện hoạt tính tốt. Cụ thể là các hợp chất P1.2, P1.3, P1.18, P1.28, P2.2, P2.6, P2.19, P2.20, P3.1, P3.2 và P3.4 thể hiện hoạt tính trên 80% ở nồng độ 400ppm.

Ví dụ B4: Hoạt tính diệt *Tetranychus urticae* (nhện hai chấm có tơ) (quần thể hỗn hợp, hoạt tính cung cấp thức ăn/hoạt tính tiếp xúc dư, phòng ngừa)

Phun các đĩa lá cây đậu lên trên thạch trong các đĩa vi chuẩn độ 24 giếng dung dịch thử nghiệm. Sau khi làm khô, lây nhiễm các đĩa lá này bằng quần thể bét gồm nhiều lứa tuổi khác nhau. Sau 8 ngày, kiểm tra các đĩa đối với tỷ lệ tử vong trứng, tử vong ấu trùng, và tử vong tuổi trưởng thành.

Trong thử nghiệm, các hợp chất nêu trong các nêu trên thể hiện hoạt tính tốt. Cụ thể là các hợp chất P1.2, P1.3, P1.5, P1.6, P1.9, P1.12, P1.16, P1.18, P1.21, P1.25, P1.26, P2.2, P2.6, P2.9, P2.13, P2.14, P2.15, P2.19, P2.20, P2.21, P2.31, P2.32, P3.4 và P3.8 thể hiện hoạt tính trên 80% ở nồng độ 400ppm.

Ví dụ B5: Hoạt tính diệt *Plutella xylostella* (sâu tơ) (thuốc diệt các loại ấu trùng, hoạt tính cung cấp thức ăn/hoạt tính liên hệ dư, phòng ngừa)

Xử lý đĩa vi chuẩn độ 24 giếng (microtiter plate-MTP) bằng chế độ dinh dưỡng nhân tạo bằng cách sử dụng pipet. Sau khi làm khô, lây nhiễm các MTP bằng các ấu

trùng (L2)(10-15/giếng). Sau thời gian 5 ngày, kiểm tra các mẫu đối với tỷ lệ tử vong ấu trùng, chống phân bào và điều hòa sinh trưởng.

Trong thử nghiệm, các hợp chất nêu trong các nêu trên thể hiện hoạt tính tốt. Cụ thể là các hợp chất P1.3, P1.12, P2.5 và P2.6 thể hiện hoạt tính trên 80% ở nồng độ 400ppm.

Ví dụ B6: Hoạt tính diệt *Frankliniella occidentalis* (bọ trĩ ở hoa ở miền tây)

Xử lý các đĩa lá đậu lên trên thạch trong các đĩa petri hoặc các cây đậu trong buồng phun bằng dung dịch thử nghiệm pha loãng. Sau khi làm khô, cắt các đĩa lá và đặt vào cốc nhựa trên bề mặt của lớp thạch và lây nhiễm quần thể hỗn hợp. 6 ngày (các đĩa lá) hoặc 14 ngày (thực vật) sau khi lây nhiễm, kiểm tra các mẫu đối với sự giảm quần thể được xử lý và so với quần thể không được xử lý.

Trong thử nghiệm, các hợp chất nêu trong các nêu trên thể hiện hoạt tính tốt. Cụ thể là các hợp chất P1.2, P1.4, P1.18, P2.2 và P2.7 thể hiện hoạt tính trên 80% ở nồng độ 400ppm.

Ví dụ B7: Hoạt tính diệt *Bemisia tabaci* (ruồi trắng trên thuốc lá) (thuốc diệt các loại ấu trùng, tiếp xúc/ cho ăn)

Lây nhiễm các cây đậu bằng 20-30 cá thể trưởng thành mà được loại bỏ sau giai đoạn đẻ trứng 4 ngày. Sau 7 ngày nữa, xử lý các cây đậu có nhộng nở (N-2) (2 bản sao) bằng dung dịch thử nghiệm trong buồng phun. Ba tuần sau, kiểm tra các mẫu đối với số lượng cá thể trưởng thành xuất hiện. Tính toán hiệu quả bằng cách so sánh số lượng cá thể trưởng thành xuất hiện trong các mẫu được xử lý và các mẫu chưa được xử lý.

Trong thử nghiệm, các hợp chất nêu trong các nêu trên thể hiện hoạt tính tốt. Cụ thể là các hợp chất P1.2, P1.3, P1.4, P2.2, P2.6 và P2.7 thể hiện hoạt tính trên 80% ở nồng độ 400ppm.

Ví dụ B8: Hoạt tính diệt *Nilaparvata lugens* (rầy nâu) (thuốc diệt các loại ấu trùng, cho ăn/ tiếp xúc)

Xử lý các cây lúa con bằng dung dịch thử nghiệm pha loãng trong buồng phun. Sau khi làm khô, lây nhiễm bằng 20 N₃ nhộng (2 bản sao). 6-12 ngày sau khi xử lý kiểm tra mẫu đối với tỷ lệ tử vong, điều hòa sinh trưởng, và hiệu quả trên thế hệ F₁.

Trong thử nghiệm, các hợp chất nêu trong các nêu trên thể hiện hoạt tính tốt. Cụ thể là các hợp chất P1.2, P1.3, P1.4, P1.5, P1.11, P1.18, P2.2, P2.6, P2.7, P2.14 và P2.19 thể hiện hoạt tính trên 80% ở nồng độ 400ppm.

Ví dụ B9: Hoạt tính diệt *Aphis craccivora* (rệp cây đậu đũa) (quần thể hỗn hợp, tiếp xúc/ cho ăn)

Xử lý các cây đậu Hà lan con đã được cho nhiễm quần thể rệp gồm nhiều lứa tuổi khác nhau (2 bản sao) bằng dung dịch thử nghiệm pha loãng trong buồng phun. 6 ngày sau khi kiểm tra, kiểm tra mẫu đối với tỷ lệ tử vong.

Trong thử nghiệm, các hợp chất nêu trong các nêu trên thể hiện hoạt tính tốt. Cụ thể là các hợp chất P1.3, P1.18, P2.14 và P2.19 thể hiện hoạt tính trên 80% ở nồng độ 400ppm.

Ví dụ B10: Hoạt tính diệt *Aphis craccivora* (rệp sáp) (quần thể hỗn hợp, nội hấp/cho ăn)

Nhiễm vào rễ cây con đậu Hà Lan quần thể rệp gồm nhiều lứa tuổi khác nhau, được chuyển (2 thế hệ) trực tiếp trong dung dịch thử nghiệm. Sau 6 ngày, kiểm tra mẫu đối với tỷ lệ tử vong.

Trong thử nghiệm, các hợp chất nêu trong các nêu trên thể hiện hoạt tính tốt. Cụ thể là các hợp chất P1.2, P1.3, P1.4, P1.11, P1.18, P2.2, P2.6, P2.7, P2.14 và P2.19 thể hiện hoạt tính trên 80% ở nồng độ 400ppm.

Ví dụ B11: Truyền lớp hoạt tính diệt *Aphis craccivora* (rệp ở cây đậu đũa)

Nhiễm lá đậu tây của Pháp (*Phaseolus vulgaris*) bằng 20 cá thể với tuổi khác nhau ở mặt dưới lá sử dụng lông kẹp. Một ngày sau khi nhiễm, xử lý mặt trên của lá với dung dịch thử nghiệm bằng cách quét lên. 5 ngày sau, kiểm tra mẫu đối với tỷ lệ chết.

Trong thử nghiệm, các hợp chất nêu trong các nêu trên thể hiện hoạt tính tốt. Cụ thể là các hợp chất P1.2, P1.3, P1.4, P1.5, P1.11, P1.18, P2.2, P2.6, P2.7, P2.14 và P2.19 thể hiện hoạt tính trên 80% ở nồng độ 400ppm.

Ví dụ B12: Hoạt tính diệt *Aonidiella aurantii* (rỉ sắt đỏ)

Xử lý cây thân củ khoai tây bằng cách nhúng trong dung dịch thử nghiệm. Một ngày sau, nhiễm cây thân củ bằng 50 con rận. Sau 6-8 tuần, kiểm tra số lượng rận ở thể tiếp theo trên mẫu thử (so sánh với mẫu không xử lý).

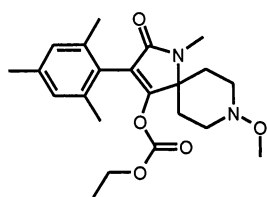
Trong thử nghiệm, các hợp chất nêu trong các nêu trên thể hiện hoạt tính tốt. Cụ thể là các hợp chất P1.3, P1.4, P2.2, P2.6 và P2.7 thể hiện hoạt tính trên 80% ở nồng độ 400ppm.

Ví dụ B13: Hoạt tính mạnh diệt *Myzus persicae* (rệp vùng trên đào xanh)

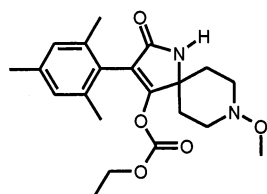
Cấy cây đậu non lên đất ở cánh đồng đã được xử lý bằng cách phun mạnh và nhiễm quần thể hỗn hợp *M. persicae*. Bảy ngày sau khi nhiễm, kiểm tra mẫu đối với tỷ lệ tử vong.

Trong thử nghiệm, các hợp chất nêu trong các nêu trên thể hiện hoạt tính tốt. Cụ thể là các hợp chất P1.2, P1.3, P1.4, P1.11, P1.18, P2.2, P2.6, P2.7, P2.14 và P2.19 thể hiện hoạt tính trên 80% ở nồng độ 25ppm.

Ví dụ B14: So sánh hoạt tính diệt sâu bọ và tính tương hợp cây trồng của hợp chất theo sáng chế với hợp chất đề cập trong lĩnh vực này (Hợp chất số A18 đã mô tả ở trang 97 của WO09/049851):



(hợp chất số P1.2 theo sáng chế)



(hợp chất số A18 theo tình trạng kỹ thuật)

Hoạt tính mạnh diệt *Myzus persicae* (rệp vùng trên cây đào xanh) (quần thể hỗn hợp, áp dụng phun mưa lên đất trên cánh đồng, ước định tính bền, sự thiệt hại của cây trồng)

Trồng cây hồ tiêu sáu tuần tuổi lên đất trên cánh đồng đã được xử lý bằng cách phun mưa ở các tỷ lệ khác nhau (mg a.i./lit đất). Trong cùng ngày, nhiễm thực vật bằng quần thể hỗn hợp *M. persicae* và ủ trong nhà kính dưới điều kiện môi trường nhà kính. Ước định tỷ lệ tử vong ở mẫu sau 7 ngày nhiễm. Tái nhiễm thực vật đã xử lý 7, 14, 21 và 28 ngày sau khi áp dụng. Thường xuyên tiến hành ước định trong 7 ngày sau khi nhiễm. Kiểm tra sự thiệt hại của thực vật (độ độc), sự đánh giá bằng mắt thường sử dụng chia tỷ lệ 0-100% (100% = tổng thiệt hại của thực vật; 0% = thực vật không bị thiệt hại).

Kết quả được thể hiện trong bảng B14:

Bảng B14: Hoạt tính (tỷ lệ chết) diệt *Myzus persicae* (rệp vùng ở đào xanh) và thiệt hại ở cây hồ tiêu

Hợp chất:	Nồng độ (ppm)	(%) bị chết sau xx ngày áp dụng (độ mạnh, hoạt tính ngấm, tính bền)					(%) thiệt hại trên cây hồ tiêu sau xx ngày áp dụng				
		0	7	14	21	28	0	7	14	21	28
A18 (tình trạng kỹ thuật sáng chế)	12,5	100	100	98	95	95	40	70	85	85	85
P1.2 (sáng chế)	12,5	98	98	98	100	98	0	0	0	0	0

Bảng B14 thể hiện hợp chất số P1.2 theo sáng chế sử dụng hoạt tính diệt sâu bọ *Myzus persicae* có hoạt tính tương tự với hợp chất được đề cập trong lĩnh vực này. Tuy nhiên, hợp chất P1.2 thể hiện khả năng tương thích tốt hơn đáng kể cho thấy không có thiệt hại đối với tất cả cây hồ tiêu, trong khi đó hợp chất A18 có gây thiệt hại đến mức độ cao không thể chấp nhận được.

Ví dụ B15: Hoạt tính diệt *Aphis craccivora* (rệp đậu đũa) (quần thể hỗn hợp, tác dụng của tá dược, trị bệnh)

Nhiễm nhiều quần thể rệp đậu đũa lên cây đậu tằm gồm nhiều lứa tuổi khác nhau. Một ngày sau khi nhiễm, xử lý thực vật bằng dung dịch thử nghiệm hòa tan hợp chất có công thức dạng EC050 thiết bị phun (4 lần). Tùy ý, bổ sung chất phụ trợ với nồng độ 0,1% (thể tích/thể tích) vào dung dịch phun. Sau 7 ngày xử lý kiểm tra mẫu đối với tỷ lệ tử vong. Tính toán hiệu quả bằng công thức của Abbott.

Kết quả thể hiện ở bảng B15A và B15B

Bảng B15A: Hoạt tính diệt *Aphis craccivora* (rệp đậu đũa)

Hợp chất:	Nồng độ (ppm)	Hiệu quả theo Abbott (%) diệt <i>Aphis craccivora</i>
P1.2, không có chất phụ trợ	3	54
P1.2 + Merge	3	51
P1.2 + Amoni nitrate	3	79
P1.2 + Mero	3	64
P1.2 + Adigor	3	99

Merge (đăng ký CAS số 147230-14-6) là hỗn hợp trộn lẫn có hoạt tính bề mặt và có khả năng hòa tan (hydrocarbon dầu mỡ).

Amoni nitrat: “Ammonsalpeter”, phân bón nitơ, chứa 27% nitơ (N), chế phẩm được sử dụng (50% amoni N và 50% nitrat N).

Mero (đăng ký CAS số 85586-25-0) là metyl este của dầu hạt cải.

Adigor (đăng ký CAS số 1103981-66-3) là metyl este của dầu hạt cải.

Bảng B15B: Hoạt tính diệt *Aphis craccivora* (rệp đậu đũa)

Hợp chất:	Nồng độ (ppm)	Hiệu quả theo Abbott (%) diệt <i>Aphis craccivora</i>
P1.2, không có chất phụ trợ	3	25
P1.2 + Agnique ME CSO 10	3	53
P1.2 + Break Thru S 233	3	77
P1.2 + RME	3	73

Agnique ME CSO 10 là dầu thầu dầu được bazơ metyl hoá etoxylat.

Break Thru S 233 là polyete biến đổi của polysiloxan bazơ.

RME là metyl este của dầu hạt cải.

Bảng B15A và B15B bộc lộ chất phụ trợ có gốc từ các loại chất hóa học khác nhau, như ví dụ, nhưng không giới hạn ở, chất có hoạt tính bề mặt với hoặc không có dung môi, dầu thực vật, phân bón, muối amoni hoặc polysiloxan thay đổi polyalkyl-oxit có khả năng tăng cường hoạt tính diệt sâu bọ của hợp chất P1.2 một cách đáng kể.

Ví dụ B16: Hoạt tính diệt *Myzus persicae* (rệp vừng trên đào xanh)

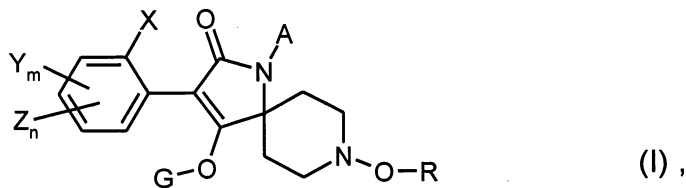
(quần thể hỗn hợp, cung cấp thức ăn/hoạt tính tiếp xúc dư, xác định thiệt hại của thực vật)

Nhiễm hỗn hợp quần thể *Myzus persicae* vào cây hồ tiêu đã được xử lý bằng dung dịch thử nghiệm pha loãng hợp chất trong thiết bị phun. Sau 6 ngày xử lý, kiểm tra mẫu đối với tỷ lệ tử vong và đối với thiệt hại cây trồng (độc tính của hợp chất), xác định bằng thị giác được tạo ra sử dụng thang tỷ lệ 0-100% (100% = tổng cây trồng thiệt hại; 0% = không cây trồng nào thiệt hại).

Trong thử nghiệm, các hợp chất nêu trong các bảng trên đây thể hiện hoạt tính tốt diệt *Myzus persicae* và tương thích với thực vật. Ví dụ các hợp chất P1.2, P1.4, P1.5, P1.11, P1.12, P1.13, P1.15, P1.16, P1.21, P1.25, P1.27, P1.29, P2.2, P2.6, P2.16, P2.17, P2.21, P2.24, P2.27, P2.30, P2.31, P2.33 và P2.34 thể hiện hoạt tính mạnh hơn hoặc bằng đến 80% hoạt tính diệt *Myzus persicae* và thiệt hại cho cây hồ tiêu thấp hơn hoặc bằng 10% ở nồng độ 200ppm.

YÊU CẦU BẢO HỘ

1. Hợp chất có công thức I



trong đó:

X, Y và Z độc lập với nhau là C₁₋₄alkyl, C₃₋₆cycloalkyl, C₁₋₄haloalkyl, C₁₋₄alkoxy, halogen, phenyl hoặc phenyl được thế bằng C₁₋₄alkyl, C₁₋₄haloalkyl, halogen hoặc xyano;

m và n, độc lập với nhau, là 0, 1, 2 hoặc 3 và m+n là 0, 1, 2 hoặc 3;

G là hydro, kim loại, amoni, sulfoni hoặc nhóm ăn, được chọn từ nhóm gồm C₁-C₈alkyl, C₂-C₈haloalkyl, phenylC₁-C₈alkyl (trong đó phenyl có thể tùy ý được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano hoặc bằng nitro), heteroarylC₁-C₈alkyl (trong đó heteroaryl có thể tùy ý được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano hoặc bằng nitro), C₃-C₈alkenyl, C₃-C₈haloalkenyl, C₃-C₈alkynyl, C(X^a)-R^a, C(X^b)-X^c-R^b, C(X^d)-N(R^c)-R^d, -SO₂-R^e, -P(X^e)(R^f)-R^g hoặc CH₂-X^f-R^h trong đó X^a, X^b, X^c, X^d, X^e và X^f độc lập với nhau là oxy hoặc lưu huỳnh;

R^a là H, C₁-C₁₈alkyl, C₂-C₁₈alkenyl, C₂-C₁₈alkynyl, C₁-C₁₀haloalkyl, C₁-C₁₀xyanoalkyl, C₁-C₁₀nitroalkyl, C₁-C₁₀aminalkyl, C₁-C₅alkylaminC₁-C₅alkyl, C₂-C₈dialkylaminC₁-C₅alkyl, C₃-C₇cycloalkylC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkoxyC₁-C₅alkyl, C₃-C₅alkenyloxyC₁-C₅alkyl, C₃-C₅alkynylC₁-C₅oxyalkyl, C₁-C₅alkylthioC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylsulfinylC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylsulfonylC₁-C₅alkyl, C₂-C₈alkylidenaminxyC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylcarbonylC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkoxycarbonylC₁-C₅alkyl, amincarbonylC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylamincarbonylC₁-C₅alkyl, C₂-C₈dialkylamincarbonylC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylcarbonylaminC₁-C₅alkyl, N-C₁-C₅alkylcarbonyl-N-C₁-C₅alkylaminC₁-C₅alkyl, C₃-C₆trialkylsilylC₁-C₅alkyl, phenylC₁-C₅alkyl (trong đó phenyl có thể tùy ý được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-

C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano, hoặc bằng nitro), heteroarylC₁-C₅alkyl, (trong đó heteroaryl có thể tùy ý được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano, hoặc bằng nitro), C₂-C₅haloalkenyl, C₃-C₈xycloalkyl, phenyl hoặc phenyl được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro, heteroaryl hoặc heteroaryl được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro,

R^b là C₁-C₁₈alkyl, C₃-C₁₈alkenyl, C₃-C₁₈alkynyl, C₂-C₁₀haloalkyl, C₁-C₁₀xyanoalkyl, C₁-C₁₀nitroalkyl, C₂-C₁₀aminalkyl, C₁-C₅alkylaminC₁-C₅alkyl, C₂-C₈dialkylaminC₁-C₅alkyl, C₃-C₇xycloalkylC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkoxyC₁-C₅alkyl, C₃-C₅alkenyloxyC₁-C₅alkyl, C₃-C₅alkynyloxyC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylthioC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylsulfinylC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylsulfonylC₁-C₅alkyl, C₂-C₈alkylidenaminxyC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylcarbonylC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkoxycarbonylC₁-C₅alkyl, amincarbonylC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylamincarbonylC₁-C₅alkyl, C₂-C₈dialkylamincarbonylC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylcarbonylaminC₁-C₅alkyl, N-C₁-C₅alkylcarbonyl-N-C₁-C₅alkylaminC₁-C₅alkyl, C₃-C₆trialkylsilylC₁-C₅alkyl, phenylC₁-C₅alkyl (trong đó phenyl có thể tùy ý được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano, hoặc bằng nitro), heteroarylC₁-C₅alkyl, (trong đó heteroaryl có thể tùy ý được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano, hoặc bằng nitro), C₃-C₅haloalkenyl, C₃-C₈xycloalkyl, phenyl hoặc phenyl được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro, heteroaryl hoặc heteroaryl được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro,

R^c và R^d độc lập với nhau là hydro, C₁-C₁₀alkyl, C₃-C₁₀alkenyl, C₃-C₁₀alkynyl, C₂-C₁₀haloalkyl, C₁-C₁₀xyanoalkyl, C₁-C₁₀nitroalkyl, C₁-C₁₀aminalkyl, C₁-C₅alkylaminC₁-C₅alkyl, C₂-C₈dialkylaminC₁-C₅alkyl, C₃-C₇xycloalkylC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkoxyC₁-C₅alkyl, C₃-C₅alkenyloxyC₁-C₅alkyl, C₃-C₅alkynyloxyC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylthioC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylsulfinylC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylsulfonylC₁-C₅alkyl, C₂-C₈alkylidenaminxyC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylcarbonylC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkoxycarbonylC₁-C₅alkyl, amincarbonylC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylamincarbonylC₁-

C₅alkyl, C₂-C₈dialkylamincarbonylC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylcarbonylaminC₁-C₅alkyl, *N*-C₁-C₅alkylcarbonyl-*N*-C₂-C₅alkylaminalkyl, C₃-C₆trialkylsilylC₁-C₅alkyl, phenylC₁-C₅alkyl (trong đó phenyl có thể tùy ý được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano, hoặc bằng nitro), heteroarylC₁-C₅alkyl, (trong đó heteroaryl có thể tùy ý được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano, hoặc bằng nitro), C₂-C₅haloalkenyl, C₃-C₈xycloalkyl, phenyl hoặc phenyl được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro, heteroaryl hoặc heteroaryl được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro, heteroarylamin hoặc heteroarylamin được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro, diheteroarylamin hoặc diheteroarylamin được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro, phenylamin hoặc phenylamin được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, halogen, xyano hoặc bằng nitro, diphenylamin hoặc diphenylamin được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, halogen, xyano hoặc bằng nitro hoặc C₃-C₇xycloalkylamin, di-C₃-C₇xycloalkylamin hoặc C₃-C₇xycloalkoxy hoặc R^c và R^d có thể cùng tham gia để tạo thành vòng có 3-7 cạnh, tùy ý chứa một nguyên tử khác loại được chọn từ O hoặc S,

R^c là C₁-C₁₀alkyl, C₂-C₁₀alkenyl, C₂-C₁₀alkynyl, C₁-C₁₀haloalkyl, C₁-C₁₀xyanoalkyl, C₁-C₁₀nitroalkyl, C₁-C₁₀aminalkyl, C₁-C₅alkylaminC₁-C₅alkyl, C₂-C₈dialkylaminC₁-C₅alkyl, C₃-C₇xycloalkylC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkoxyC₁-C₅alkyl, C₃-C₅alkenyloxyC₁-C₅alkyl, C₃-C₅alkynyloxyC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylthioC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylsulfinylC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylsulfonylC₁-C₅alkyl, C₂-C₈alkylidenaminxyC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylcarbonylC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkoxycarbonylC₁-C₅alkyl, amincarbonylC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylamincarbonylC₁-C₅alkyl, C₂-C₈dialkylamincarbonylC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylcarbonylaminC₁-C₅alkyl, *N*-C₁-C₅alkylcarbonyl-*N*-C₁-C₅alkylaminC₁-C₅alkyl, C₃-C₆trialkylsilylC₁-C₅alkyl, phenylC₁-C₅alkyl (trong đó phenyl có thể tùy ý được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano, hoặc bằng nitro), heteroarylC₁-C₅alkyl (trong đó heteroaryl có thể tùy ý được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl,

C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano, hoặc bằng nitro), C₂-C₅haloalkenyl, C₃-C₈xycloalkyl, phenyl hoặc phenyl được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro, heteroaryl hoặc heteroaryl được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, halogen, xyano hoặc bằng nitro, heteroarylamin hoặc heteroarylamin được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, halogen, xyano hoặc bằng nitro, diheteroarylamin hoặc diheteroarylamin được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro, phenylamin hoặc phenylamin được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro, hoặc C₃-C₇xycloalkylamin, diC₃-C₇xycloalkylamin hoặc C₃-C₇xycloalkoxy, C₁-C₁₀alkoxy, C₁-C₁₀haloalkoxy, C₁-C₅alkylamin hoặc C₂-C₈dialkylamin

R^f và R^g độc lập với nhau là C₁-C₁₀alkyl, C₂-C₁₀alkenyl, C₂-C₁₀alkynyl, C₁-C₁₀alkoxy, C₁-C₁₀haloalkyl, C₁-C₁₀xyanoalkyl, C₁-C₁₀nitroalkyl, C₁-C₁₀aminalkyl, C₁-C₅alkylaminC₁-C₅alkyl, C₂-C₈dialkylaminC₁-C₅alkyl, C₃-C₇xycloalkylC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkoxyC₁-C₅alkyl, C₃-C₅alkenyloxyC₁-C₅alkyl, C₃-C₅alkynyloxyC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylthioC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylsulfinylC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylsulfonylC₁-C₅alkyl, C₂-C₈alkylidenaminxyC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylcarbonylC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkoxycarbonylC₁-C₅alkyl, amincarbonylC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylamincarbonylC₁-C₅alkyl, C₂-C₈dialkylamincarbonylC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylcarbonylaminC₁-C₅alkyl, *N*-C₁-C₅alkylcarbonyl-*N*-C₂-C₅alkylaminalkyl, C₃-C₆trialkylsilylC₁-C₅alkyl, phenylC₁-C₅alkyl (trong đó phenyl có thể tùy ý được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano, hoặc bằng nitro), heteroarylC₁-C₅alkyl (trong đó heteroaryl có thể tùy ý được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano, hoặc bằng nitro), C₂-C₅haloalkenyl, C₃-C₈xycloalkyl, phenyl hoặc phenyl được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro, heteroaryl hoặc heteroaryl được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, halogen, xyano hoặc bằng nitro, heteroarylamin hoặc heteroarylamin

được thế bằng C₁-C₃ alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, halogen, xyano hoặc bằng nitro, diheteroarylamin hoặc diheteroarylamin được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro, phenylamin hoặc phenylamin được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro, diphenylamin, hoặc diphenylamin được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro, hoặc C₃-C₇xycloalkylamin, diC₃-C₇xycloalkylamin hoặc C₃-C₇xycloalkoxy, C₁-C₁₀haloalkoxy, C₁-C₅alkylamin hoặc C₂-C₈dialkylamin, benzyloxy hoặc phenoxy, trong đó các nhóm benzyl và phenyl có thể lần lượt được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, halogen, xyano hoặc nitro, và R^h là C₁-C₁₀alkyl, C₃-C₁₀alkenyl, C₃-C₁₀alkynyl, C₁-C₁₀haloalkyl, C₁-C₁₀xyanoalkyl, C₁-C₁₀nitroalkyl, C₂-C₁₀aminalkyl, C₁-C₅alkylaminC₁-C₅alkyl, C₂-C₈dialkylaminC₁-C₅alkyl, C₃-C₇xycloalkylC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkoxyC₁-C₅alkyl, C₃-C₅alkenyloxyC₁-C₅alkyl, C₃-C₅alkynyloxyC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylthioC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylsulfinylC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylsulfonylC₁-C₅alkyl, C₂-C₈alkylidenaminxyC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylcarbonylC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkoxycarbonylC₁-C₅alkyl, amincarbonylC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylamincarbonylC₁-C₅alkyl, C₂-C₈dialkylamincarbonylC₁-C₅alkyl, C₁-C₅alkylcarbonylaminC₁-C₅alkyl, *N*-C₁-C₅alkylcarbonyl-*N*-C₁-C₅alkylaminC₁-C₅alkyl, C₃-C₆trialkylsilylC₁-C₅alkyl, phenylC₁-C₅alkyl (trong đó trong đó phenyl có thể tùy ý được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano hoặc bằng nitro), heteroarylC₁-C₅alkyl (trong đó heteroaryl có thể tùy ý được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano hoặc bằng nitro), phenoxyC₁-C₅alkyl (trong đó trong đó phenyl có thể tùy ý được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano hoặc bằng nitro), heteroaryloxyC₁-C₅alkyl (trong đó heteroaryl có thể tùy ý được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, C₁-C₃alkylthio, C₁-C₃alkylsulfinyl, C₁-C₃alkylsulfonyl, halogen, xyano hoặc bằng nitro), C₃-C₅haloalkenyl, C₃-C₈xycloalkyl, phenyl hoặc phenyl được thế bằng C₁-C₃alkyl, C₁-C₃haloalkyl, C₁-C₃alkoxy, C₁-C₃haloalkoxy, halogen hoặc bằng nitro, hoặc heteroaryl,

hoặc heteroaryl được thế bằng C_1 - C_3 alkyl, C_1 - C_3 haloalkyl, C_1 - C_3 alkoxy, C_1 - C_3 haloalkoxy, halogen, xyano hoặc bằng nitro;

R là hydro, C_{1-6} alkyl, C_{1-6} haloalkyl, C_{1-6} xyanoalkyl, benzyl, C_{1-4} alkoxy(C_{1-4})alkyl, C_{1-4} alkoxy(C_{1-4})alkoxy(C_{1-4})alkyl hoặc nhóm được chọn từ G; và

A là C_{1-6} alkyl, C_{1-6} haloalkyl, C_{3-6} xycloalkyl, C_{3-6} xycloalkyl(C_{1-4})alkyl, hoặc C_{3-6} xycloalkyl(C_{1-4})alkyl trong đó gốc xycloalkyl nhóm metylen được thay thế bằng O, S hoặc NR_0 , ở đây R_0 là C_{1-6} alkyl hoặc C_{1-6} alkoxy, hoặc A là C_{2-6} alkenyl, C_{2-6} haloalkenyl, C_{3-6} alkynyl, C_{1-6} xyanoalkyl, benzyl, C_{1-4} alkoxy(C_{1-4})alkyl, C_{1-4} alkoxy(C_{1-4})alkoxy(C_{1-4})alkyl, oxetanyl, tetrahydrofuranyl, tetrahydropyranyl, C_{1-6} alkylcarbonyl, C_{1-6} alkoxycarbonyl, C_{3-6} xycloalkyl carbonyl, N-di(C_{1-6} alkyl)carbamoyl, benzoyl, C_{1-6} alkylsulfonyl, phenylsulfonyl, C_{1-4} alkylthio(C_{1-4})alkyl, C_{1-4} alkylsulfinyl(C_{1-4})alkyl hoặc C_{1-4} alkylsulfonyl(C_{1-4})alkyl;

hoặc muối khả dụng nông hoá hoặc oxit nito của chúng.

2. Hợp chất theo điểm 1, trong đó G là nhóm được chọn từ $-C(X^a)-R^a$ hoặc $-C(X^b)-X^c-R^b$, và ý nghĩa của X^a , R^a , X^b , X^c và R^b là như được xác định theo điểm 1.

3. Hợp chất theo điểm 1, trong đó R là hydro, metyl, etyl, triflometyl, alyl, propargyl, benzyl, metoxymetyl, etoxymetyl hoặc metoxyetyl, X là metyl, etyl, xyclopropyl, metoxy, flo, bromo hoặc clo, Y và Z, độc lập với nhau là metyl, etyl, xyclopropyl, metoxy, flo, clo, bromo, phenyl hoặc phenyl được thế bởi halogen hoặc C_1 - C_2 alkyl, G là hydro và A là như được xác định theo điểm 1.

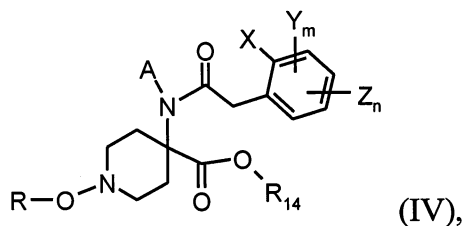
4. Hợp chất theo điểm 1 hoặc điểm 3, trong đó R là metyl, etyl, alyl, propargyl, metoxymetyl, X là metyl, etyl, xyclopropyl, metoxy, flo, bromo hoặc clo, Y và Z, độc lập với nhau, là metyl, etyl, xyclopropyl, metoxy, flo, clo, bromo, phenyl hoặc phenyl được thế bởi halogen hoặc C_1 - C_2 alkyl, G là hydro và A là như được xác định theo điểm 1.

5. Hợp chất theo điểm bất kỳ trong số các điểm 1, 3 và 4, trong đó R là metyl, etyl, metoxymetyl, X là metyl, etyl, xyclopropyl, metoxy, flo, bromo hoặc clo, Y và Z, độc lập với nhau là metyl, etyl, xyclopropyl, metoxy, flo, clo, bromo, phenyl hoặc phenyl được thế bởi halogen hoặc C_1 - C_2 alkyl, G là hydro và A là metyl, etyl, isopropyl, triflometyl, 2,2,2-trifloetyl, 2,2-difloetyl, 2-floetyl, xyclopropyl, xyclobutyl,

xyclopentyl, xyclohexyl, xyclopropylmetyl, xyclobutylmetyl, xyclopentylmetyl, xyclohexylmetyl, oxetan-3-ylmetyl, tetrahydrofuran-2-ylmetyl, tetrahydropyran-2-ylmetyl, tetrahydrofuran-3-ylmetyl, tetrahydropyran-3-ylmetyl, tetrahydropyran-4-ylmetyl, alyl, propargyl, benzyl, metoxymetyl, etoxymetyl, metoxyetyl, metoxypropyl, metoxyetoxymetyl, metoxymetoxetyl, oxetanyl-3-yl, tetrahydropyran-4-yl hoặc methylthioetyl.

6. Hợp chất theo điểm bất kỳ trong số các điểm 1 và 3-5, trong đó R là metyl, etyl, metoxymetyl, X là metyl, etyl, xyclopropyl, metoxy, flo, bromo hoặc clo, Y và Z, độc lập với nhau là metyl, etyl, xyclopropyl, metoxy, flo, clo, bromo, phenyl hoặc phenyl được thế bởi halogen hoặc C₁-C₂alkyl, G là hydro và A là metyl, etyl, isopropyl, triflometyl, 2,2,2-trifloetyl, 2,2-difloetyl, 2-floetyl, xyclopropyl, xyclohexyl, xyclopropylmetyl, alyl, propargyl, benzyl, metoxy metyl, etoxymetyl, metoxyetyl, metoxyetoxymetyl, metoxymetoxetyl, oxetanylyl.

7. Quy trình điều chế hợp chất có công thức I theo điểm bất kỳ trong số các điểm 1 đến 6, trong đó G là hydro, quy trình này bao gồm bước đóng vòng của hợp chất có công thức IV



trong đó X, Y, Z, m, n, R và A có nghĩa được xác định theo điểm bất kỳ trong số các điểm 1 đến 6, và R₁₄ là C₁₋₆alkyl, trong điều kiện bazơ.

8. Chế phẩm diệt sinh vật gây hại chứa lượng hiệu quả diệt sinh vật gây hại của ít nhất một hợp chất có công thức I theo điểm bất kỳ trong số các điểm 1 đến 6.

9. Chế phẩm diệt sinh vật gây hại theo điểm 8, trong đó ngoài chứa hợp chất có công thức I, chế phẩm này còn chứa thuốc phụ trợ cho chế phẩm.

10. Chế phẩm diệt sinh vật gây hại theo điểm 9, trong đó thuốc phụ trợ cho chế phẩm là dầu có nguồn gốc thực vật hoặc động vật, dầu khoáng, alkyl este của các dầu này hoặc hỗn hợp của các dầu này và dẫn xuất của dầu, hoặc là phân bón hoặc muối amoni hoặc phospho, tùy ý kết hợp với dầu và dẫn xuất của dầu nêu trên.

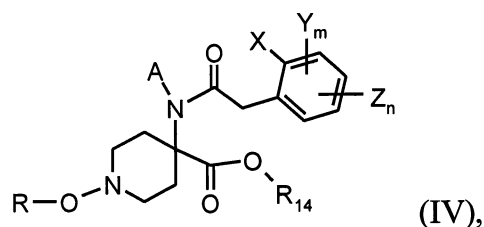
11. Chế phẩm diệt sinh vật gây hại theo điểm 8, trong đó ngoài chứa hợp chất có công thức I, chế phẩm này còn chứa ít nhất một thuốc diệt côn trùng, thuốc diệt ve bét, thuốc diệt giun tròn hoặc thuốc diệt nhuễn thể bổ sung.

12. Chế phẩm diệt sinh vật gây hại theo điểm 8, trong đó ngoài chứa hợp chất có công thức I, chế phẩm này còn chứa ít nhất một thuốc diệt nấm, thuốc diệt cỏ, chất an toàn hoặc chất điều hoà sinh trưởng thực vật bổ sung.

13. Phương pháp diệt và phòng trừ sinh vật gây hại bao gồm bước phun cho sinh vật gây hại, vị trí của sinh vật gây hại, hoặc thực vật dễ bị tấn công bởi sinh vật gây hại lượng có hiệu quả diệt sinh vật gây hại của hợp chất có công thức I như được xác định theo điểm bất kỳ trong số các điểm 1 đến 6, ngoại trừ phương pháp điều trị cho cơ thể người hoặc động vật bằng phương pháp phẫu thuật hoặc trị liệu và chẩn đoán thực hành trên cơ thể người hoặc động vật.

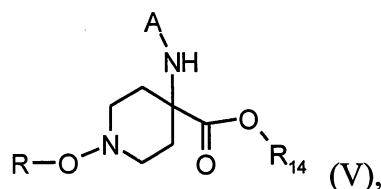
14. Phương pháp diệt và phòng trừ sinh vật gây hại bao gồm bước phun cho sinh vật gây hại, vào vị trí của sinh vật gây hại, hoặc thực vật dễ bị tấn công bởi sinh vật gây hại chế phẩm diệt sinh vật gây hại theo điểm 8, ngoại trừ phương pháp điều trị cho cơ thể người hoặc động vật bằng phương pháp phẫu thuật hoặc trị liệu và chẩn đoán thực hành trên cơ thể người hoặc động vật.

15. Hợp chất có công thức IV



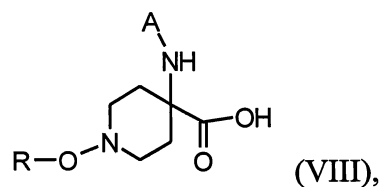
hoặc muối của nó, trong đó X, Y, Z, m, n, R và A có nghĩa như được xác định theo điểm bất kỳ trong số các điểm 1 đến 6, và R₁₄ là C₁₋₆alkyl.

16. Hợp chất có công thức V



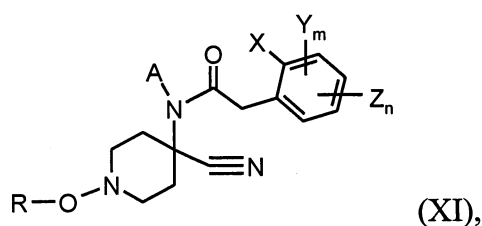
hoặc muối của nó, trong đó: R và A có nghĩa như được xác định theo điểm bất kỳ trong số các điểm 1 đến 6, và R₁₄ là C₁₋₆alkyl.

17. Hợp chất có công thức VIII



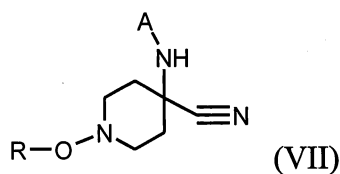
hoặc muối của nó, trong đó: R và A có nghĩa như được xác định theo điểm bất kỳ trong số các điểm 1 đến 6.

18. Hợp chất có công thức XI



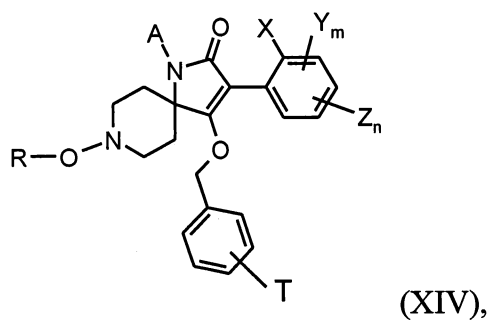
hoặc muối của nó, trong đó: X, Y, Z, m, n, R và A có nghĩa như được xác định theo điểm bất kỳ trong số các điểm 1 đến 6.

19. Hợp chất có công thức VII



hoặc muối của nó, trong đó R và A có nghĩa như được xác định theo điểm bất kỳ trong số các điểm 1 đến 6.

20. Hợp chất có công thức XIV



hoặc muối của nó, trong đó: X, Y, Z, m, n, R và A có nghĩa như được xác định theo điểm bất kỳ trong số các điểm 1 đến 6, và T là hydro, C₁₋₄alkoxy, di(C₁₋₄alkoxy), nitro hoặc clo.

21. Hợp chất theo điểm 1, trong đó hợp chất này được chọn từ:

