



(12) **BẢN MÔ TẢ SÁNG CHẾ THUỘC BẢNG ĐỘC QUYỀN SÁNG CHẾ**

(19) **Cộng hòa xã hội chủ nghĩa Việt Nam (VN)**
CỤC SỞ HỮU TRÍ TUỆ

(11) 
1-0021888

(51)⁷ **C07C 69/78, A01N 25/02**

(13) **B**

(21) 1-2013-00255

(22) 26.07.2011

(86) PCT/IB2011/053325 26.07.2011

(87) WO2012/014152 02.02.2012

(30) 1012586.2 27.07.2010 GB

(45) 25.10.2019 379

(43) 25.06.2013 303

(73) Syngenta Limited (GB)

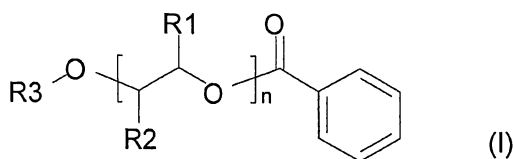
Syngenta Limited, European Regional Centre Priestley Road, Surrey Research Park,
Guildford Surrey GU2 7YH United Kingdom

(72) BELL, Gordon Alastair (GB), WALLER, Anne (GB), WAILES, Jeffrey Steven (GB)

(74) Công ty TNHH Ban Ca (BANCA)

(54) **CHẾ PHẨM NÔNG HOÁ CHỨA HỢP CHẤT ALKYLEN GLYCOL BENZOAT**

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



trong đó R¹ là hydro, metyl, etyl, propyl hoặc butyl; R² là metyl hoặc etyl; R³ là hydro, metyl hoặc etyl; và n bằng 1, 2 hoặc 3; và các chế phẩm nông hóa chứa hợp chất này.

Lĩnh vực kỹ thuật được đề cập

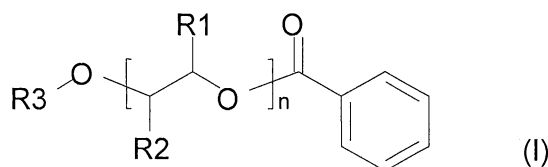
Sáng chế đề cập đến việc sử dụng một số hợp chất alkylen glycol benzoat làm dung môi, đặc biệt là trong các chế phẩm, cụ thể là trong các chế phẩm nông hóa và trong các chế phẩm thân thiện với môi trường; và đến một số hợp chất mới. Các dung môi theo sáng chế cho thấy là có hiệu quả đặc biệt khi hòa tan các chất diệt loài gây hại thuộc họ các strobilurin, triazol và các chất ức chế suxinat dehydrogenaza (SDHI) (đặc biệt là các pyrazol; thích hợp là hóa chất thuộc họ pyrazam).

Tình trạng kỹ thuật của sáng chế

Hiện nay, các nhà hóa học khi phát triển các chế phẩm mới được yêu cầu phải chú ý đến một số tiêu chuẩn môi trường. Lý tưởng là, dung môi thích hợp phải thể hiện nhiều hoặc toàn bộ các tính chất sau: có khả năng hòa tan tốt thuốc trừ sâu hoặc các phân tử hữu cơ khác; được làm từ các nguồn động hoặc thực vật có thể phục hồi; ít kích thích da; ít gây độc sinh thái, ví dụ như với bộ nước; hàm lượng chất hữu cơ dễ bay hơi thấp; và điểm bốc cháy cao. Mỗi hợp chất theo sáng chế đều thể hiện toàn bộ hoặc nhiều các tính chất này, đặc biệt là khả năng hòa tan tốt; các hợp chất này có thể được dùng làm dung môi một cách có hiệu quả.

Bản chất kỹ thuật của sáng chế

Do đó, sáng chế đề xuất chế phẩm nông hóa có chứa hợp chất có công thức (I)



trong đó R¹ là hydro, metyl, etyl, propyl hoặc butyl; R² là metyl hoặc etyl; R³ là hydro, metyl hoặc etyl; và n bằng 1, 2 hoặc 3.

Mô tả chi tiết sáng chế

Các nhóm propyl và butyl là mạch thẳng hoặc nhánh. Các ví dụ là *iso*-propyl, *n*-propyl, *n*-butyl, *sec*-butyl và *tert*-butyl.

Thích hợp là R¹ là H.

Thích hợp là R² là metyl.

Thích hợp là R³ là H.

Thích hợp là n bằng 1.

Phù hợp với những điều trên, sáng chế đề xuất việc sử dụng hợp chất có công thức (I) trong chế phẩm nông hóa.

Các hợp chất theo sáng chế có thể được dùng làm dung môi.

Nhiều hợp chất được sáng chế bộc lộ là mới.

IL58111A liên quan đến các nhũ tương của dầu cam quýt thích hợp cho đồ uống, EP2000485A1 mô tả nhũ tương chứa các este và bioxit nhất định, WO97/1648A1 thảo luận về các este nhất định sử dụng cùng với các chất hóa dẻo và EP026892A2 liên quan đến các chế phẩm diệt loài gây hại dạng rắn có phủ nhựa.

Do đó, theo khía cạnh khác, sáng chế đề xuất hợp chất có công thức (I) như được định nghĩa ở trên; với điều kiện là hợp chất không là 2-hydroxypropyl benzoat, 2-hydroxy-1-metyletyl benzoat, 1,2 butanediol -2-benzoat, 1,2 butanediol-1-benzoat hoặc 1-propanol-2(2-hydroxypropoxy)-1-benzoat.

Bảng 1 đưa ra các cấu trúc và một số dữ liệu quang phổ đối với các hợp chất có công thức (I) thích hợp:

Bảng 1

Hợp chất số	R ¹	R ²	R ³	n	MH ⁺ từ GCMS	Dải IR cm ⁻¹ OH	Dải IR cm ⁻¹ este	Dải IR cm ⁻¹ chất thơm
1	H	CH ₃	H	1	181	3340	1712	1600

2	H	CH ₂ CH ₃	H	1	195	3355	1715	1600
---	---	---------------------------------	---	---	-----	------	------	------

Các hợp chất theo sáng chế dễ điều chế; ví dụ như, glycol ete được cho phản ứng với một hợp chất thơm có nhóm rời chuyển thích hợp, như benzoyl clorua.

Các hợp chất theo sáng chế có thể được dùng trong các ứng dụng khác nhau (bao gồm các chế phẩm nông hóa), đặc biệt là làm dung môi. Các dung môi này có thể được dùng với nhiều loại vật liệu khác nhau, bao gồm các thuốc diệt cỏ, thuốc diệt nấm, thuốc diệt bọ mạt, thuốc diệt giun tròn, thuốc trừ sâu [và cả các chất điều chỉnh tăng trưởng thực vật].

Sáng chế bao gồm hỗn hợp hai hoặc nhiều hợp chất có công thức (I) khác nhau.

Các hợp chất theo sáng chế có thể được dùng để pha chế các dung dịch của các vật liệu khác nhau, bao gồm các chất nông hóa mà chúng có thể được pha chế dưới dạng nhũ tương, dịch đặc phân tán, các nhũ tương trong nước hoặc dầu, các chế phẩm vi nang, các dịch phun sương sol khí hoặc các chế phẩm tạo khói; và các dung dịch này có thể được pha chế thêm thành các vật liệu dạng hạt hoặc các bột, ví dụ như để dùng cho các ứng dụng khô hoặc làm các chế phẩm có thể phân tán trong nước. Mỗi dung dịch được tạo thành như vậy cũng có thể được dùng trực tiếp lên đất hoặc cây cối hoặc trong các ứng dụng phi nông hóa khác.

Ví dụ về các ứng dụng thích hợp bao gồm làm giấy, xử lý nước, các ứng dụng trong lâm nghiệp, các điều trị sức khỏe cộng đồng, sử dụng cho các bể bơi trong đô thị và các nguồn nước khác, trong các ứng dụng vùng bờ sông, hồ, hồ chứa hoặc biển và trong các ứng dụng trong đó việc phát tán vào khí quyển buộc phải giảm thiểu hoặc được khống chế và trong đó nguy hại cho khí quyển là không cho phép. Các ví dụ bao gồm việc sử dụng trong các lớp sơn, phủ, véc ni, sáp trong nhà hoặc ngoài trời hoặc các lớp bảo vệ khác hoặc các chất làm đục, tạo màu hoặc các tấm chắn; trong nhuộm, tô màu hoặc dùng trong các mực; trong các sản phẩm làm sạch dùng trong nhà, ngoài vườn hoặc các ứng dụng công nghiệp; và trong xà phòng hoặc chất tẩy rửa dùng trong công nghiệp, nhà ở hoặc môi trường. Các hợp chất theo sáng chế cũng có thể được dùng trong dầu gội đầu, chất tẩy rửa dùng trong gia đình, và trong các chất làm sạch dùng trong gia đình [ví dụ như các chất làm sạch lò nấu và các chất làm sạch bề mặt].

Các hợp chất theo sáng chế có khả năng hòa tan đặc biệt nhiều loại khác nhau của các chất nông hóa, dược liệu và các hợp chất có giá trị thương mại khác, thêm vào đó, khả năng hòa tan còn hòa tan bụi, dầu mỡ hoặc sáp.

Sáng chế được minh họa bởi các ví dụ sau, trong đó:

g = gam

°C = độ bách phân

Trừ khi được quy định khác, mọi nồng độ được thể hiện theo phần trăm khối lượng.

Các dung môi theo sáng chế có hiệu quả đặc biệt khi hòa tan các chất diệt loài gây hại thuộc họ: các strobilurin, triazol và các chất ức chế suxinat dehydrogenaza (SDHI) (đặc biệt là các pyrazol; thích hợp là hóa chất thuộc họ pyrazam). Thực tế này được chứng minh trong các ví dụ, trong đó chúng cho thấy rằng độ tan của các chất diệt loài gây hại azoxystrobin, difenoconazol và isopyrazam trong dung môi propylen glycol benzoat là cao hơn trong loạt các dung môi thường dùng. Đáng ngạc nhiên là, độ tan của xyprodinil, clorothalonil và bixyclopyron trong propylen glycol benzoat là thấp hơn so với loạt tương tự của các dung môi thường dùng. Các độ tan được dẫn theo phần trăm kl/kl ở 20°C.

Ví dụ thực hiện sáng chế

Ví dụ 1

Ví dụ này minh họa độ tan cao của một số hoạt chất nông hóa trong các dung môi theo sáng chế [các hợp chất 1 và 2 của bảng 1].

Lọ thủy tinh được đổ đầy khoảng một phần tám bằng hoạt chất [AI] và sau đó dung môi [trong ví dụ này, propylen glycol benzoat hoặc butylen glycol benzoat] được thêm cho đến khi lọ đầy khoảng một phần ba. Mẫu thu được được trộn bằng WhirlimixerTM và sau đó bảo quản ở 25°C. Mẫu được kiểm tra vài ngày một lần; nếu không có mặt hoạt chất rắn thì bổ sung thêm hoạt chất; nếu không còn chất lỏng thì bổ sung thêm dung môi. Quá trình này được lặp lại cho đến khi mẫu đạt được cân bằng trong 4 tuần sau khi kết thúc việc thêm hoạt chất hoặc dung môi. Sau đó lớp chất lỏng nổi trên mặt được phân tích nồng độ hoạt chất bằng sắc ký khí; các kết quả được trình bày trong bảng 2:

Bảng 2

Hoạt chất	Độ tan trong propylen glycol benzoat ở 25°C (%kl/kl)	Độ tan trong butylen glycol benzoat ở 25°C (%kl/kl)
Difenoconazol	50,5	-
Clorothalonil	1,32	-
Xyprodinil	18,4	-
4-Hydroxy-3-[2-(2-methoxyethoxymetyl)-6-triflorometylpyridin-3-carbonyl]-bicyclo[3.2.1]oct-3-en-2-on	27,4	-
Azoxystrobin	5,5	8,1
Xyproconazol	4,5	6,9
Isopyrazam	12,7	12,4

Ví dụ 2

Ví dụ này cho thấy rằng các dung môi theo sáng chế là đặc biệt có hiệu quả trong hòa tan các thuốc diệt loài gây hại thuộc họ: các strobilurin, triazol và các chất ức chế suxinat dehydrogenaza (SDHI) (đặc biệt là các pyrazol; thích hợp là hóa chất thuộc họ pyrazam). Các bảng 3a và 3b thể hiện độ tan của các thuốc diệt loài gây hại azoxystrobin, difenoconazol, isopyrazam, xyprodinil, clorothalonil và bixyclopyron trong dung môi propyl glycol benzoat [hợp chất 1 của bảng 1]. Để so sánh, độ tan trong loạt các dung môi được dùng phổ biến cũng được lập bảng. Số liệu này cho thấy rằng trong hầu hết các trường hợp, propylen glycol benzoat là dung môi đối với ba thuốc diệt loài gây hại đầu tiên (tương ứng là triazol, SDHI và strobilurin) tốt hơn so với các dung môi thông dụng khác. Các độ tan được dẫn theo phần trăm khối lượng/khối lượng ở 20°C.

Bảng 3a

Dung môi	Difenoconazol	Isopyrazam	Azoxystrobin
Propylen glycol benzoat	50,5	12,7	5,5
n-Butylbenzoat	29,4	7,6	4,0
Solvesso TM 100 ND/ULN	37,8	0,0	1,7
Solvesso TM 200 ND/ULN	37,7	5,8	5,6
Dowanol TM PnB	34,4	8,8	1,3
Isobornyl axetat	24,9	6,8	1,6
Benzoflex TM 9-88	19,8	6,3	4,2
Butyl lactat	47,1	16,5	4,6
Dowanol TM PGDA	34,1	6,9	9,4
Benzyl axeton	44,9	12,6	14,1
Benzyl axetat	46,0	8,9	13,8
Triaxetin	22,3	4,3	6,4

Bảng 3b

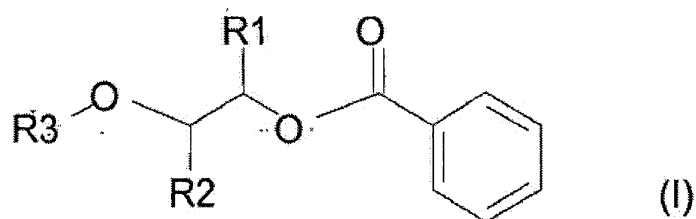
Dung môi	Xyprodinil	Bixyclopyron	Clorothalonil
Propylen glycol benzoat	18,4	27,4	1,3
n-Butylbenzoat	35,5	45,6	2,3
Solvesso TM 100 ND/ULN	31,1	52,3	7,1
Solvesso TM 200 ND/ULN	34,4	50,7	9,6
Dowanol TM PnB	41,7	32,0	0,2
Isobornyl axetat	32,8	38,4	0,5
Benzoflex TM 9-88	22,6	23,2	1,9
Butyl lactat	52,5	48,6	0,4

21888

Dowanol TM PGDA	31,3	38,3	0,6
Benzyl axeton	39,6	53,0	2,8
Benzyl axetat	36,8	55,5	2,0
Triaxetin	18,9	33,3	0,4

YÊU CẦU BẢO HỘ

1. Chế phẩm nông hóa chứa chất nông hóa và hợp chất có công thức (I)



trong đó R¹ là hydro, metyl, etyl, propyl hoặc butyl; R² là metyl hoặc etyl; R³ là hydro, metyl hoặc etyl; trong đó chất nông hóa này là strobilurin, triazol hoặc chất ức chế suxinat dehydrogenaza và chế phẩm này ở dạng dịch đặc có thể nhũ hóa hoặc nhũ tương.

2. Chế phẩm theo điểm 1, trong đó R¹ là hydro.

3. Chế phẩm theo điểm 1 hoặc 2, trong đó R³ là hydro.

4. Chế phẩm theo điểm 1, 2 hoặc 3, trong đó chất nông hóa này là azoxystrobin, difenoconazol hoặc isopyrazam.