



УКРАЇНА

(19) **UA** (11) **130694** (13) **C2**
(51) МПК

C07D 403/10 (2006.01)
C07D 405/10 (2006.01)
C07D 417/10 (2006.01)
A01N 43/58 (2006.01)
C07D 237/16 (2006.01)
C07D 409/10 (2006.01)
C07D 413/10 (2006.01)

НАЦІОНАЛЬНИЙ ОРГАН
ІНТЕЛЕКТУАЛЬНОЇ ВЛАСНОСТІ
ДЕРЖАВНА ОРГАНІЗАЦІЯ
"УКРАЇНСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ
ОФІС ІНТЕЛЕКТУАЛЬНОЇ
ВЛАСНОСТІ ТА ІННОВАЦІЙ"

(12) ОПИС ДО ПАТЕНТУ НА ВИНАХІД

(21) Номер заявки: a 2022 00605	(72) Винахідник(и): Лінг Кеннет Брюс (GB), Мет'юз Крістофер Джон (GB), Шенахен Стівен Едвард (GB), Кіціу Крістіана (GB), Седен Пітер Тімоті (GB), Фінні Джон (GB), Дрюе-Лефевр Валері (GB)
(22) Дата подання заявки: 17.07.2020	(73) Володілець (володільці): СІНГЕНТА КРОП ПРОТЕКШН АГ, Rosentalstrasse 67, 4058 Basel, Switzerland (CH)
(24) Дата, з якої є чинними права інтелектуальної власності: 23.04.2026	(74) Представник: Петров Андрій Володимирович, реєстр. №139
(31) Номер попередньої заявки відповідно до Паризької конвенції: 1910291.2	(56) Перелік документів, взятих до уваги експертизою: WO 2011/045271 A1, 21.04.2011 WO 2016/008816 A1, 21.01.2016 WO 2011/035878 A1, 31.03.2011
(32) Дата подання попередньої заявки відповідно до Паризької конвенції: 18.07.2019	
(33) Код держави-учасниці Паризької конвенції, до якої подано попередню заявку: GB	
(41) Публікація відомостей про заявку: 23.03.2022, Бюл.№ 12	
(46) Публікація відомостей про державну реєстрацію: 22.04.2026, Бюл.№ 16	
(86) Номер та дата подання міжнародної заявки, поданої відповідно до Договору РСТ: РСТ/EP2020/070243, 17.07.2020	

(54) ЗАМІЩЕНІ ПІРИДАЗИНОНИ ЯК ГЕРБІЦИДИ

(57) Реферат:

Винахід стосується гербіцидних заміщених фенілпіридазиндіонів та заміщених фенілпіридазинонових похідних формули (I), а також способів і проміжних сполук, застосовуваних для одержання таких похідних. Даний винахід додатково поширюється на гербіцидні композиції, які містять такі похідні, а також на застосування таких сполук і композицій у забезпеченні контролю росту небажаних рослин, зокрема на застосування в забезпеченні контролю бур'янів, таких як широколисті дводольні бур'яни, у сільськогосподарських культурах корисних рослин.

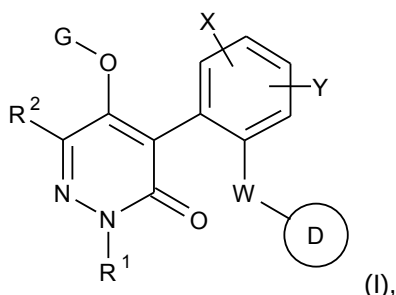
UA 130694 C2

Даний винахід стосується гербіцидних заміщених фенілпіридазиндіонів та заміщених фенілпіридазинонових похідних формули (I), а також способів і проміжних сполук, застосовуваних для одержання таких похідних. Даний винахід додатково поширюється на гербіцидні композиції, які містять такі похідні, а також на застосування таких сполук і композицій у забезпеченні контролю росту небажаних рослин, зокрема на застосування в забезпеченні контролю бур'янів, таких як широколисті дводольні бур'яни, у сільськогосподарських культурах корисних рослин.

Гербіцидні піридазинони відомі з WO 2009/086041. Крім того, гербіцидні 5/6-членні гетероцикліл-заміщені піридазинони відомі з WO 2011/045271. При цьому у WO 2013/160126 описані індолілпіридазинонові похідні, які проявляють гербіцидну активність.

Даний винахід базується на відкритті того, що заміщені фенілпіридазиндіони та заміщені фенілпіридазинонові похідні формули (I) проявляють несподівано добру гербіцидну активність.

Таким чином, у першому аспекті передбачена сполука формули (I),



або її сіль або N-оксид, де

R^1 вибраний із групи, що складається з C_1 - C_4 алкілу, C_3 - C_6 циклоалкілу, C_3 - C_6 алкокси, C_1 - C_2 алкокси- C_1 - C_2 алкіл-, C_2 - C_4 алкенілу, C_1 - C_4 галогеналкілу, ціано- C_1 - C_4 алкілу, C_2 - C_4 галогеналкенілу, C_2 - C_4 алкінілу та C_2 - C_4 галогеналкінілу;

R^2 вибраний із групи, що складається з водню, галогену, ціано, C_1 - C_6 алкілу, C_1 - C_6 галогеналкілу, C_1 - C_6 галогеналкокси, C_1 - C_3 галогеналкокси- C_1 - C_3 алкіл-, C_1 - C_6 алкокси, C_1 - C_3 алкокси- C_1 - C_3 алкіл-, C_1 - C_3 алкокси- C_1 - C_3 алкокси- C_1 - C_3 алкіл-, C_3 - C_6 циклоалкілу, C_2 - C_6 алкенілу, C_2 - C_6 галогеналкенілу, C_2 - C_6 алкінілу, C_1 - C_6 гідроксиалкіл-, C_1 - C_6 алкілкарбоніл-, $-S(O)_mC_1$ - C_6 алкілу, аміно, C_1 - C_6 алкіламіно, C_1 - C_6 діалкіламіно, $-C(C_1-C_3алкіл)=N-O-C_1-C_3алкілу$ і C_2 - C_6 галогеналкінілу;

G являє собою водень або $C(O)R^3$;

R^3 вибраний із групи, що складається з C_1 - C_6 алкілу, C_2 - C_6 алкенілу, C_2 - C_6 алкінілу, C_1 - C_6 алкіл-S-, C_1 - C_6 алкокси, $-NR^4R^5$ і фенілу, необов'язково заміщених одним або декількома R^6 ;

кожен R^4 і R^5 незалежно вибрані із групи, що складається з водню, C_1 - C_6 алкілу, C_1 - C_6 алкокси і C_3 - C_6 циклоалкілу, або R^4 і R^5 разом можуть утворювати морфолінільне кільце; і

R^6 вибраний із групи, що складається з галогену, ціано, нітро, C_1 - C_3 алкілу, C_1 - C_3 галогеналкілу, C_1 - C_3 алкокси і C_1 - C_3 галогеналкокси;

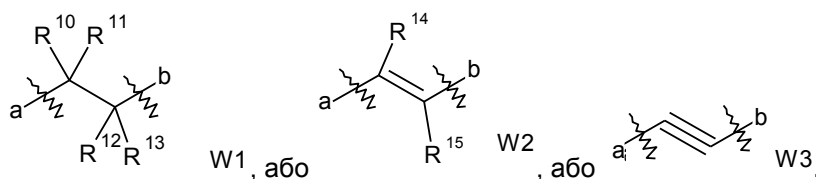
кожен X та Y незалежно являють собою водень, C_1 - C_3 алкіл, циклопропіл, C_1 - C_3 алкокси, C_1 - C_3 галогеналкіл, C_1 - C_3 галогеналкокси або галоген;

D являє собою або заміщену або незаміщену нафталінову кільцеву систему або заміщену або незаміщену 8-10-членну біциклічну насичену, частково насичену або ненасичену гетероциклічну кільцеву систему, що містить 1, 2, 3 або 4 гетероатоми, незалежно вибрані з кисню, азоту і сірки, і при цьому, якщо D заміщений, то він заміщений за щонайменше одним атомом вуглецю в кільці за допомогою R^8 та/або за щонайменше одним атомом азоту в кільці за допомогою R^9 ;

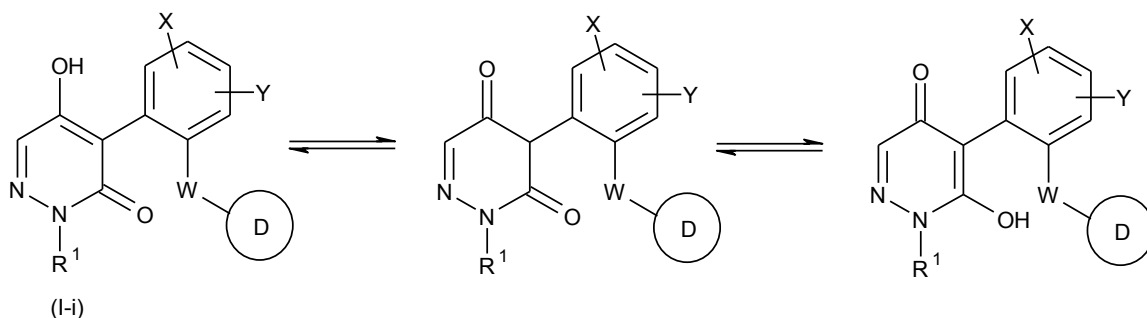
кожен R^8 являє собою незалежно кисень, гідроксил, галоген, ціано, C_1 - C_6 алкіл, C_1 - C_6 галогеналкіл, C_3 - C_6 циклоалкіл, C_1 - C_6 алкокси, C_1 - C_6 галогеналкокси, C_1 - C_3 алкокси- C_1 - C_3 алкіл, C_1 - C_3 галогеналкокси- C_1 - C_3 алкіл-, C_1 - C_3 алкокси- C_1 - C_3 алкокси- C_1 - C_3 алкіл-, C_2 - C_6 алкеніл, C_2 - C_6 галогеналкеніл, C_2 - C_6 алкініл, C_2 - C_6 галогеналкініл, C_1 - C_6 гідроксиалкіл-, C_1 - C_6 алкілкарбоніл-, C_1 - C_6 галогеналкілкарбоніл-, C_3 - C_6 циклоалкілкарбоніл-, C_1 - C_6 алкіл- $S(O)_m$ -, $-S(O)_mC_1$ - C_6 галогеналкіл, $-S(O)_mC_3$ - C_6 циклоалкіл, $-O-S(O)_2C_1$ - C_3 алкіл, $-C_1$ - C_3 алкіл- $S(O)_mC_1$ - C_6 алкіл, $-C_1$ - C_3 алкіл- $S(O)_mC_1$ - C_6 галогеналкіл, $-C_1$ - C_3 алкіл- $S(O)_mC_3$ - C_6 циклоалкіл, ціано- C_1 - C_6 -алкіл-, $-NR^4R^5$, $-C(C_1-C_3алкіл)=N-O-C_1-C_3алкіл$, $-C(S)NH_2$, C_1 - C_6 алкіламініотіокарбоніл-, ди(C_1 - C_6 алкіл)амінотіокарбоніл-, C_3 - C_6 циклоалкіламіно-тіокарбоніл- $S(O)_2NH_2$, $-S(O)_2NHC(O)C_1$ - C_3 алкіл, C_1 - C_6 алкіламіносульфоніл-, ди(C_1 - C_6 алкіл)аміносульфоніл-, C_3 - C_6 циклоалкіламіно-сульфоніл-, $-C(O)OH$, $-C(O)OC_1$ - C_6 алкіл, $-C(O)NHS(O)_2C_1$ - C_6 алкіл, $-C(O)NR^4R^5$, $-NR^4C(O)NR^4R^5$, C_1 -

- С₆алкілкарбоніл(С₁-С₆алкіл)аміно-, С₁-С₆галогеналкілкарбоніламіно-, С₁-С₆галогеналкілкарбоніл(С₁-С₆алкіл)аміно-, С₁-С₆алкоксикарбоніламіно-, С₁-С₆алкоксикарбоніл(С₁-С₆алкіл)аміно-, С₁-С₆алкілсульфоніламіно-, С₁-С₆алкілсульфоніл(С₁-С₆алкіл)аміно-, С₁-С₆галогеналкілсульфоніламіно-, С₁-С₆галогеналкілсульфоніл(С₁-С₆алкіл)аміно-, С₃-С₆циклоалкілсульфоніламіно-, С₃-С₆циклоалкілсульфоніл(С₁-С₆алкіл)аміно-, С₁-С₆алкіламінокарбоніламіно-, С₁-С₆алкіламінокарбоніл(С₁-С₆алкіл)аміно-, ди(С₁-С₆алкіл)амінокарбоніламіно-, С₁-С₆галогеналкіламінокарбоніламіно-, С₁-С₆галогеналкіламінокарбоніл(С₁-С₆алкіл)аміно-, ди(С₁-С₆галогеналкіл)амінокарбоніламіно-, ди(С₁-С₆галогеналкіл)аміно-карбоніл(С₁-С₆алкіл)аміно-, гідроксиаміно-, гідрокси(С₁-С₆алкіл)аміно-, С₁-С₆алкоксиаміно-, С₁-С₆алкокси(С₁-С₆алкіл)аміно-, С₁-С₆галогеналкоксиаміно-, С₁-С₆галогеналкокси(С₁-С₆алкіл)аміно або кільцеву систему, вибрану із групи, що складається з фенільного кільця, 5-6-членного гетероарильного кільця і 3-6-членного гетероциклічного кільця, де вказана кільцева система заміщена за допомогою 0-5 R¹⁶;
- т являє собою ціле число, яке дорівнює 0, 1 або 2;
- кожен R⁹ являє собою незалежно С₁-С₆алкіл, С₁-С₆галогеналкіл, гідроксил, С₁-С₄алкокси, С₁-С₄алкілтіо, С₃-С₆циклоалкіл, С₁-С₃алкокси-С₁-С₃алкіл, С₁-С₃галогеналкокси-С₁-С₃алкіл-, С₁-С₃алкокси-С₁-С₃алкокси-С₁-С₃алкіл-, С₁-С₆гідроксиалкіл-, -С₁-С₃алкіл-S(O)_m-С₁-С₆алкіл, -С₁-С₃алкіл-S(O)_m-С₁-С₆галогеналкіл, -С₁-С₃алкіл-S(O)_m-С₃-С₆циклоалкіл, ціано-С₁-С₆-алкіл- або кільцеву систему, вибрану з групи, що складається з фенільного кільця, 5-6-членного гетероарильного кільця і 3-6-членного гетероциклічного кільця, де вказана кільцева система заміщена за допомогою 0-5 R¹⁶;
- кожен R¹⁶ являє собою незалежно галоген, ціано, С₁-С₆алкіл, С₁-С₆галогеналкіл, С₁-С₆алкокси або С₁-С₆галогеналкокси; і
- W являє собою

25



- де
- "a" позначає точку приєднання до фенілпіридазинового/фенілпіридазиндіонового фрагмента,
- "b" позначає точку приєднання до кільця D,
- кожен із R¹⁰, R¹², R¹⁴ і R¹⁵ незалежно являє собою водень, С₁-С₃алкіл або С₁-С₃галогеналкіл; або R¹⁰ і R¹² разом з атомами вуглецю, до яких вони приєднані, утворюють С₃-С₆карбоциклічне кільце; і
- кожен із R¹¹ і R¹³ незалежно являє собою водень, галоген, С₁-С₃алкіл або С₁-С₃галогеналкіл, за умови, що якщо один з R¹¹ або R¹³ являє собою галоген, С₁-С₃алкіл або С₁-С₃галогеналкіл, то інший являє собою водень.
- Сполуки формули (I) можуть містити асиметричні центри та можуть бути представлені у вигляді одного енантіомера, пар енантіомерів у будь-якій пропорції або, за наявності більше ніж одного асиметричного центру, містити діастереоізомери в усіх можливих співвідношеннях. Зазвичай один з енантіомерів характеризується підвищеною біологічною активністю порівняно з іншими варіантами.
- Аналогічно у разі дизаміщених алкенів вони можуть бути представлені в E- або Z-формі або у вигляді сумішей обох у будь-якій пропорції.
- До того ж сполуки формули (I) можуть бути у стані рівноваги з альтернативними таутомерними формами. Наприклад, сполука формули (I-i), тобто сполука формули (I), де R² являє собою водень і G являє собою водень, може бути зображена в щонайменше трьох таутомерних формах:



Слід розуміти, що всі таутомерні форми (окреми таутомер або їх суміші), рацемічні суміші й окремі ізомери охоплюються обсягом даного винаходу.

Кожен алкільний фрагмент або окремо, або як частина більшої групи (такої як алкокси, алкілтіо, алкоксикарбоніл, алкілкарбоніл, алкіламінокарбоніл або діалкіламінокарбоніл тощо) може бути з прямим ланцюгом або розгалуженим. Зазвичай алкіл являє собою, наприклад, метил, етил, н-пропіл, ізопропіл, н-бутил, втор-бутил, ізобутил, трет-бутил, н-пентил, неопентил або н-гексил. Алкільні групи зазвичай являють собою C_1 - C_6 алкільні групи (за винятком випадків, коли вони вже визначені в більш вузькому сенсі), але переважно являють собою C_1 - C_4 алкільні або C_1 - C_3 алкільні групи та більш переважно являють собою C_1 - C_2 алкільні групи (такі як метил).

Алкенільні та алкінільні фрагменти можуть перебувати у формі прямих або розгалужених ланцюгів, та алкенільні фрагменти, якщо це необхідно, можуть перебувати або в (E)-, або в (Z)-конфігурації. Алкенільні або алкінільні фрагменти зазвичай являють собою C_2 - C_4 алкеніл або C_2 - C_4 алкініл, більш конкретно вініл, аліл, етиніл, пропаргіл або проп-1-ініл. Алкенільні та алкінільні фрагменти можуть містити один або декілька подвійних та/або потрійних зв'язків у будь-якій комбінації, але переважно вони містять тільки один подвійний зв'язок (для алкенілу) або тільки один потрійний зв'язок (для алкінілу).

Переважно термін "циклоалкіл" стосується циклопропілу, циклобутилу, циклопентилу або циклогексилу.

У контексті даного опису термін "арил" переважно означає феніл. Термін "гетероарил", застосовуваний у даному документі, означає моноциклічну або біциклічну ароматичну кільцеву систему, що містить щонайменше один гетероатом у кільці. Переважно, моноциклічні кільцеві системи будуть містити 1, 2 або 3 гетероатоми у кільці, і біциклічні кільцеві системи будуть містити 1, 2, 3 або 4 гетероатоми у кільці, при цьому кожен гетероатом вибраний незалежно із азоту, кисню і сірки.

Типово, моноциклічне гетероарильне кільце, вибране із групи, що складається з фурильного, тієнільного, піролільного, піразолільного, імідазолільного, 1,2,3-триазолільного, 1,2,4-триазолільного, оксазолільного, ізоксазолільного, тіазолільного, ізотіазолільного, 1,2,4-оксадіазолільного, 1,3,4-оксадіазолільного, 1,2,5-оксадіазолільного, 1,2,3-тіадіазолільного, 1,2,4-тіадіазолільного, 1,3,4-тіадіазолільного, 1,2,5-тіадіазолільного, піридинільного, піримідинільного, піридазинільного, піразинільного, 1,2,3-триазинільного, 1,2,4-триазинільного або 1,3,5-триазинільного кільця.

Типово, біциклічна гетероарильна кільцева система вибрана з групи, що складається з індолінінільної, індольної, ізоіндольної, 3-Н-індольної, бензофуранільної, бензотіофенільної, 1Н-індазолільної, бензімідазолільної, бензтіазолільної, пуринільної, 4Н-хінолінінільної, хінолінільної, ізохінолінільної, цинолінільної, фталазинільної, хіноксалінільної, 1-8-нафтиридинільної або птеридинільної кільцевої системи.

Гетероциклільні групи і гетероциклічні кільця (або окремо, або як частина більшої групи, такої як гетероцикліалкіл-) являють собою кільцеві системи, що містять щонайменше один гетероатом, і можуть бути у моно- або біциклічній формі, і можуть бути частково насиченими або повністю насиченими. Переважно гетероциклільні групи будуть містити до двох гетероатомів, які переважно будуть вибрані з азоту, кисню та сірки. Приклади гетероциклічних груп включають оксетаніл, тіетаніл, азетидиніл та 7-оксабіцикло[2.2.1]гепт-2-іл. Гетероциклільні групи, які містять один атом кисню як гетероатом, є найбільш переважними.

Галоген (або галогено) охоплює фтор, хлор, бром або йод. Те саме, відповідно, стосується галогену в контексті інших визначень, таких як галогеналкіл або галогенфеніл.

Галогеналкільними групами з довжиною ланцюга від 1 до 6 атомів вуглецю є, наприклад, фторметил, дифторметил, трифторметил, хлорметил, дихлорметил, трихлорметил, 2,2,2-трифторетил, 2-фторетил, 2-хлоретил, пентафторетил, 1,1-дифтор-2,2,2-трихлоретил, 2,2,3,3-тетрафторетил та 2,2,2-трихлоретил, гептафтор-н-пропіл і перфтор-н-гексил.

Алкоксигрупи переважно характеризуються довжиною ланцюга від 1 до 6 атомів вуглецю. Алкокси являє собою, наприклад, метокси, етокси, пропокси, ізопропокси, н-бутокси, ізобутокси, втор-бутокси або трет-бутокси або ізомер пентилокси або гексилокси, переважно метокси та етокси. Також слід розуміти, що два алкокси-замісники можуть бути наявними на одному й тому ж атомі вуглецю.

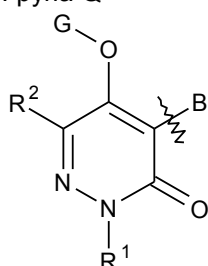
Галогеналкокси являє собою, наприклад, фторметокси, дифторметокси, трифторметокси, 2,2,2-трифторетокси, 1,1,2,2-тетрафторетокси, 2-фторетокси, 2-хлоретокси, 2,2-дифторетокси або 2,2,2-трихлоретокси, переважно дифторметокси, 2-хлоретокси або трифторметокси.

C₁-C₆алкіл-S- (алкілтіо) являє собою, наприклад, метилтіо, етилтіо, пропілтіо, ізопропілтіо, н-бутилтіо, ізобутилтіо, втор-бутилтіо або трет-бутилтіо, переважно метилтіо або етилтіо.

C₁-C₆алкіл-S(O)- (алкілсульфініл) являє собою, наприклад, метилсульфініл, етилсульфініл, пропілсульфініл, ізопропілсульфініл, н-бутилсульфініл, ізобутилсульфініл, втор-бутилсульфініл або трет-бутилсульфініл, переважно метилсульфініл або етилсульфініл.

C₁-C₆алкіл-S(O)₂- (алкілсульфоніл) являє собою, наприклад, метилсульфоніл, етилсульфоніл, пропілсульфоніл, ізопропілсульфоніл, н-бутилсульфоніл, ізобутилсульфоніл, втор-бутилсульфоніл або трет-бутилсульфоніл, переважно метилсульфоніл або етилсульфоніл.

Група Q



(Q) згадується в даному документі як піридазиндіононовий/піридазиноновий фрагмент, де В означає точку приєднання до решти молекули (тобто до необов'язково заміщеного феніл-W-D-фрагмента).

Даний винахід також включає прийнятні в сільському господарстві солі, які сполуки формули (I) можуть утворювати з амінами (наприклад, аміаком, диметиламіном і триетиламіном), основами лужних металів та лужно-земельних металів або четвертинними амонієвими основами. Серед гідроксидів, оксидів, алкоксидів, і гідрокарбонатів, і карбонатів лужних металів та лужно-земельних металів, застосовуваних як солеутворювачі, особливу увагу слід приділити гідроксидам, алкоксидам, оксидам і карбонатам літію, натрію, калію, магнію та кальцію, але особливо гідроксидам, алкоксидам, оксидам і карбонатам натрію, магнію та кальцію. Також можна застосовувати відповідну триметилсульфонієву сіль. Сполуки формули (I) згідно з даним винаходом також включають гідрати, які можуть бути утворені під час солеутворення.

Переважні значення R¹, R², R³, R⁴, R⁵, R⁶, R⁸, R⁹, R¹⁰, R¹¹, R¹², R¹³, R¹⁴, R¹⁵, W, D, G, X, Y, Z і m наведені нижче, і сполука формули (I) за даним винаходом може передбачати будь-яку комбінацію вказаних значень. Фахівцю в даній галузі буде зрозуміло, що значення для будь-якої вказаної групи варіантів здійснення можна комбінувати зі значеннями для будь-якої іншої групи варіантів здійснення, якщо такі комбінації не є взаємовиключними.

Переважно R¹ вибраний із групи, що складається з метилу, етилу, пропілу (зокрема, н- або циклопропілу), пропаргілу або C₁галогеналкілу. Більш переважно R¹ являє собою метил, етил, циклопропіл, пропаргіл або C₁фторалкіл. Ще більш переважно R¹ являє собою метил, етил, циклопропіл або пропаргіл. Найбільш переважно R¹ являє собою метил.

Переважно R² вибраний із групи, що складається з водню, галогену, C₁-C₆алкілу, C₁-C₆галогеналкілу, C₁-C₆алкокси, C₁-C₃алкокси-C₁-C₃алкілу, C₃-C₆циклоалкілу, C₂-C₆алкенілу, C₂-C₆галогеналкенілу, C₂-C₆алкінілу і C₂-C₆галогеналкінілу. Більш переважно R² вибраний із групи, що складається з хлору, фтору, метилу, етилу, циклопропілу, трифторметилу і метоксиметилу, ще більш переважно хлору, циклопропілу, трифторметилу або метилу, найбільш переважно хлору або метилу. В одній групі варіантів здійснення даного винаходу R² являє собою водень. У додатковій групі варіантів здійснення R² являє собою циклопропіл, у третій групі варіантів здійснення R² являє собою метил, у четвертій групі варіантів здійснення R² являє собою трифторметил, і в п'ятій групі варіантів здійснення R² являє собою хлор. Як описано в даному документі, G може являти собою водень або -C(O)-R³, і R³ вибраний із групи, що складається з C₁-C₆алкілу, C₂-C₆алкенілу, C₂-C₆алкінілу, C₁-C₆алкіл-S-, C₁-C₆алкокси, -NR⁴R⁵ і фенілу, необов'язково заміщених одним або декількома R⁶. Як визначено в даному документі, кожен із R⁴ і R⁵ незалежно вибраний із групи, що складається з водню, C₁-C₆алкілу, C₁-C₆алкокси- і C₃-C₆циклоалкілу; або вони можуть разом утворювати морфолінільне кільце. Переважно кожен із

R^4 та R^5 незалежно вибраний із групи, що складається з метилу, етилу, пропілу, метокси, етокси та пропокси. R^6 вибраний із групи, що складається з галогену, ціано, нітро, C_1 - C_3 алкілу, C_1 - C_3 галогеналкілу, C_1 - C_3 алкокси та C_1 - C_3 галогеналкокси. Переважно, R^6 вибраний із групи, що складається з галогену, метилу, етилу, трифторметилу, метокси і етокси.

5 Переважно R^3 являє собою C_1 - C_4 алкіл, C_2 - C_3 алкеніл, C_2 - C_3 алкініл, C_1 - C_4 алкокси, або - NR^4R^5 , де R^4 і R^5 разом утворюють морфолінільне кільце. Більш переважно R^3 являє собою ізопропіл, трет-бутил, метил, етил, пропаргіл, метокси, етокси або трет-бутокси.

В одній групі варіантів здійснення G являє собою водень або -C(O)- R^3 , де R^3 являє собою C_1 - C_4 алкіл, C_2 - C_3 алкеніл, C_2 - C_3 алкініл або - C_1 - C_3 алкокси. У додатковій групі варіантів здійснення G являє собою водень або -C(O)- R^3 , де R^3 являє собою ізопропіл, трет-бутил, метил, етил, пропаргіл або метокси. Однак особливо переважно, щоб G являв собою водень або -C(O)- R^3 , де R^3 являє собою ізопропіл.

X переважно являє собою водень, галоген або C_1 галогеналкіл, більш переважно водень, фтор, хлор, бром або C_1 фторалкіл та ще більш переважно водень, фтор, хлор або трифторметил. В одній групі варіантів здійснення є переважним, щоб X знаходився в орто-положенні (положення 6) відносно піридазинового/піридазиндіонового фрагмента (група Q). Особливо переважно, щоб X являв собою фтор, хлор або C_1 -галогеналкіл (зокрема C_1 фторалкіл) і знаходився в орто-положенні (положення 6) відносно піридазинового/піридазиндіонового фрагмента (група Q). Найбільш переважно X являє собою фтор і знаходиться в орто-положенні (положення 6) відносно піридазинового/піридазиндіонового фрагмента.

Y являє собою переважно водень, C_1 - C_3 алкіл, циклопропіл, C_1 - C_3 галогеналкіл або галоген. Більш переважно Y являє собою водень, хлор, фтор або бром.

В одній групі варіантів здійснення переважно, щоб Y знаходився в орто-положенні (положення 3) відносно -W-D-фрагмента. У додатковій групі варіантів здійснення Y перебуває в пара-положенні відносно піридазинон-/піридазиндіонового фрагмента (група Q).

Особливо переважно, щоб Y знаходився в орто-положенні (положення 3) відносно -W-D-фрагмента і являв собою галоген, зокрема хлор або фтор; більш переважно хлор.

В одній особливо переважній групі варіантів здійснення X являє собою фтор і знаходиться в орто-положенні (положення 6) відносно піридазинового/піридазиндіонового фрагмента, і Y являє собою хлор і знаходиться в орто-положенні (положення 3) відносно -W-D-фрагмента.

Як описано в даному документі, D являє собою заміщену або незаміщену нафталінову кільцеву систему або заміщену або незаміщену 8-10-членну біциклічну насичену, частково насичену або ненасичену гетероциклічну кільцеву систему, що містить 1, 2, 3 або 4 гетероатоми незалежно вибрані з кисню, азоту і сірки, і при цьому, якщо D заміщений, то він заміщений за щонайменше одним атомом вуглецю в кільці за допомогою R^8 та/або за необхідності за атомом азоту в кільці за допомогою R^9 . В одній групі переважних варіантів здійснення кільцева система D приєднана до іншої частини молекули за допомогою атома вуглецю в кільці.

Переважно D являє собою заміщену або незаміщену нафталінову кільцеву систему або являє собою заміщене або незаміщене 8-10-членне біциклічне гетероциклічне кільце, що містить 1, 2, 3 або 4 гетероатоми, незалежно вибрані з кисню, азоту і сірки. Більш переважно D являє собою заміщену (за допомогою щонайменше одного R^8 та/або R^9 , як описано в даному документі) або незаміщену нафталінову, індолізову, індоліну, ізоіндоліну, індолінову, ізоіндолінову, 3-Н-індоліну, бензофуранову, бензотіофенову, 1Н-індазоліну, бензімідазоліну, бензтіазоліну, бензоксазоліну, бензодіоксоліну, пуринову, 4Н-хінолізінову, хінолінову, ізохінолінову, тетрагідрохінолінову, цинолінову, фталазінову, хіноксалінову, 1-8-нафтиридинову, птеридинову, 1Н-піроло[2,3-*b*]піридинову, імідазо[1,2-*a*]піразинову або 1Н-бензотриазоліну кільцеву систему.

Навіть більш переважно D являє собою заміщену (за допомогою щонайменше одного R^8 та/або R^9 , як описано в даному документі) або незаміщену нафталінову, індолізову, індоліну, ізоіндоліну, 3-Н-індоліну, бензофуранову, бензотіофенову, 1Н-індазоліну, бензімідазоліну, бензтіазоліну, бензоксазоліну, пуринову, 4Н-хінолізінову, хінолінову, ізохінолінову, тетрагідрохінолінову, цинолінову, фталазінову, хіноксалінову, 1-8-нафтиридинову або птеридинову кільцеву систему.

Більш переважно в таких варіантах здійснення D являє собою заміщене (як описано в даному документі) або незаміщене нафталінове, хінолінове, тетрагідрохінолінове, індоліне або бензоксазоліне кільце.

Переважно, кожен R^8 являє собою незалежно кисень, гідроксил, галоген, ціано, C_1 - C_6 алкіл, C_1 - C_6 галогеналкіл, C_3 - C_6 циклоалкіл, C_1 - C_6 алкокси, C_1 - C_6 галогеналкокси, C_1 - C_3 алкокси- C_1 - C_3 алкіл, C_1 - C_3 галогеналкокси- C_1 - C_3 алкіл-, C_1 - C_3 алкокси- C_1 - C_3 алкокси- C_1 - C_3 алкіл-, C_2 - C_6 алкеніл,

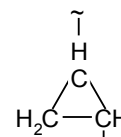
C_2-C_6 галогеналкеніл, C_2-C_6 алкініл, C_2-C_6 галогеналкініл, C_1-C_6 гідроксиалкіл-, C_1-C_6 алкілкарбоніл-,
 C_1-C_6 галогеналкілкарбоніл-, C_3-C_6 циклоалкілкарбоніл-, C_1-C_6 алкіл- $S(O)_m$ -, $-S(O)_m-C_1-$
 C_6 галогеналкіл, $-S(O)_m-C_3-C_6$ циклоалкіл, $-O-S(O)_2C_1-C_3$ алкіл, $-C_1-C_3$ алкіл- $S(O)_m-C_1-C_6$ алкіл, $-C_1-$
 C_3 алкіл- $S(O)_m-C_1-C_6$ галогеналкіл, $-C_1-C_3$ алкіл- $S(O)_m-C_3-C_6$ циклоалкіл, ціано- C_1-C_6 -алкіл-, $-NR^4R^5$,
 5 $-C(C_1-C_3$ алкіл) $=N-O-C_1-C_3$ алкіл, $-C(S)NH_2$, C_1-C_6 алкіламінотіокарбоніл-, ди(C_1-
 C_6 алкіл)амінотіокарбоніл-, C_3-C_6 циклоалкіламіно-тіокарбоніл- $S(O)_2NH_2$, $-S(O)_2NHC(O)C_1-C_3$ алкіл,
 C_1-C_6 алкіламіносультфоніл-, ди(C_1-C_6 алкіл)аміносультфоніл-, C_3-C_6 циклоалкіламіно-сультфоніл-,
 10 $-C(O)OH$, $-C(O)OC_1-C_6$ алкіл, $-C(O)NHS-(O)_2C_1-C_6$ алкіл, $-C(O)NR^4R^5$, $-NR^4C(O)NR^4R^5$, C_1-
 C_6 алкілкарбоніл(C_1-C_6 алкіл)аміно-, C_1-C_6 галогеналкілкарбоніламіно-, C_1-
 C_6 галогеналкілкарбоніл(C_1-C_6 алкіл)аміно-, C_1-C_6 алкоксикарбоніламіно-, C_1-
 C_6 алкоксикарбоніл(C_1-C_6 алкіл)аміно-, C_1-C_6 алкілсультфоніламіно-, C_1-C_6 алкілсультфоніл(C_1-
 C_6 алкіл)аміно-, C_1-C_6 галогеналкілсультфоніламіно-, C_1-C_6 галогеналкілсультфоніл(C_1-
 C_6 алкіл)аміно-, C_3-C_6 циклоалкілсультфоніламіно-, C_3-C_6 циклоалкілсультфоніл(C_1-C_6 алкіл)аміно-,
 15 C_1-C_6 алкіламінокарбоніламіно-, C_1-C_6 алкіламінокарбоніл(C_1-C_6 алкіл)аміно-, ди(C_1-
 C_6 алкіл)амінокарбоніламіно-, C_1-C_6 галогеналкіламінокарбоніламіно-, C_1-C_6 галогеналкіламіно-
 карбоніл(C_1-C_6 алкіл)аміно-, ди(C_1-C_6 галогеналкіл)амінокарбоніламіно-, ди(C_1-
 C_6 галогеналкіл)аміно-карбоніл(C_1-C_6 алкіл)аміно-, гідроксиаміно-, гідрокси(C_1-C_6 алкіл)аміно, C_1-
 C_6 алкоксиаміно, C_1-C_6 алкокси(C_1-C_6 алкіл)аміно, C_1-C_6 галогеналкоксиаміно, C_1-
 C_6 галогеналкокси(C_1-C_6 алкіл)аміно.
 20 Більш переважно кожен R^8 являє собою незалежно кисень, гідроксил, галоген, ціано, C_1-
 C_6 алкіл, C_1-C_6 галогеналкіл, C_1-C_6 галогеналкокси, C_1-C_3 галогеналкокси- C_1-C_3 алкіл-, C_1-
 C_6 алкокси, C_1-C_3 алкокси- C_1-C_3 алкіл, C_1-C_3 алкокси- C_1-C_3 алкокси- C_1-C_3 алкіл-, C_3-C_6 циклоалкіл,
 C_2-C_6 алкеніл, C_2-C_6 галогеналкеніл, C_2-C_6 алкініл, C_1-C_6 гідроксиалкіл-, C_1-C_6 алкілкарбоніл-, C_1-
 C_6 алкіл- $S(O)_m$ -, аміно, C_1-C_6 алкіламіно, C_1-C_6 діалкіламіно, $-C(C_1-C_3$ алкіл) $=N-O-C_1-C_3$ алкіл або C_2-
 25 C_6 галогеналкініл.

Навіть більш переважно кожен R^8 являє собою незалежно гідроксил, галоген, C_1-C_6 алкіл, C_1-
 C_6 галогеналкіл, C_1-C_6 алкокси. Навіть ще більш переважно кожен R^8 являє собою незалежно C_1-
 C_3 алкіл, C_1-C_3 галогеналкіл, хлор, фтор, гідроксил або C_1-C_3 алкокси.

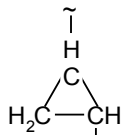
Переважно кожен R^9 незалежно являє собою C_1-C_4 алкіл, C_1-C_4 галогеналкіл, гідроксил, C_1-
 30 C_4 алкокси або C_1-C_4 алкілтіо. Більш переважно кожен R^9 являє собою незалежно, C_1-C_4 алкіл або
 C_1-C_4 алкокси. Навіть більш переважно кожен R^9 являє собою незалежно C_1-C_4 алкіл. Найбільш
 переважно кожен R^9 являє собою метил.

m являє собою ціле число, яке дорівнює 0, 1 або 2. Переважно m дорівнює 0 або 2.

35 W виконує функцію лінкерного фрагмента, який сполучає кільцеву систему D з іншою
 частиною молекули (тобто з фенілпіридазиновим/фенілпіридазиндіоновим фрагментом).
 Сполуки формули (I), де лінкер являє собою $W1$ і $W3$, володіють гербіцидною активністю, при
 цьому сполуки формули (I), де лінкер являє собою $W2$, можуть володіти не тільки гербіцидною
 активністю, але також є застосовними проміжними сполуками в одержанні сполук формули (I),
 40 що містять лінкери $W1$. Таким чином в одній групі варіантів здійснення W являє собою $W1$ або
 $W3$ (переважно $W1$), при цьому в другій групі варіантів здійснення W являє собою $W2$.



Конкретні приклади W включають $-CH_2-CH_2-$ і $-CH=CH-$, $-C\equiv C-$, в цис- і транс-



положенні. У переважних варіантах здійснення W являє собою або $-CH_2-CH_2-$, або $-$
 $CH=CH-$, або $-C\equiv C-$.

45 Переважно кожен із R^{10} , R^{11} , R^{12} та R^{13} незалежно вибраний із водню або C_1-C_3 алкілу. В
 одній групі варіантів здійснення всі з R^{10} , R^{11} , R^{12} та R^{13} являють собою водень.

Переважно кожен із R^{14} та R^{15} незалежно вибраний із водню або C_1-C_3 алкілу. В одній групі
 варіантів здійснення обидва з R^{14} та R^{15} являють собою водень.

В одній переважній групі варіантів здійснення в сполучі формули (I)

R^1 являє собою метил, етил, циклопропіл, пропаргіл або C_1 фторалкіл;

50 R^2 являє собою хлор, циклопропіл, трифторметил або метил;

G являє собою водень або $-C(O)-R^3$, де R^3 являє собою ізопропіл, трет-бутил, метил, етил,

пропаргіл, метокси, етокси або трет-бутокс;

X являє собою фтор, хлор або C₁-галогеналкіл і знаходиться в орто-положенні відносно піридазинового/піридазиндіонового фрагмента;

5 Y являє собою водень, хлор, фтор або бром і знаходиться в орто-положенні відносно -W-D-фрагмента;

10 D являє собою або заміщену або незаміщену нафталінову кільцеву систему або заміщену або незаміщену 8-10-членну біциклічну насичену, частково насичену або ненасичену гетероциклічну кільцеву систему, що містить 1, 2, 3 або 4 гетероатоми, незалежно вибрані з кисню, азоту і сірки, і при цьому, якщо D заміщений, то він заміщений за щонайменше одним атомом вуглецю в кільці за допомогою R⁸ та/або за щонайменше одним атомом азоту в кільці за допомогою R⁹;

кожен R⁸ являє собою незалежно гідроксил, галоген, C₁-C₆алкіл, C₁-C₆галогеналкіл або C₁-C₆алкокси;

15 кожен R⁹ являє собою незалежно C₁-C₄алкіл або C₁-C₄алкокси;

W являє собою W1; і

всі з R¹⁰, R¹¹, R¹² і R¹³ являють собою водень.

В ще більш переважній групі варіантів здійснення у сполучі формули (I)

R¹ являє собою метил;

R² являє собою метил;

20 G являє собою водень або -C(O)-R³, де R³ являє собою ізопропіл, трет-бутил, метил, етил, пропаргіл, метокси, етокси або трет-бутокс;

X являє собою фтор і знаходиться в орто-положенні відносно піридазинового/піридазиндіонового фрагмента;

Y являє собою хлор і знаходиться в орто-положенні відносно -W-D-фрагмента;

25 D являє собою заміщену або незаміщену нафталінову, індолізинову, індольну, ізоіндольну, індолінову, ізоіндолінову, 3-Н-індольну, бензофуранову, бензотіофенову, 1Н-індазольну, бензімідазольну, бензтіазольну, бензоксазольну, бензодіоксольну, пуринову, 4Н-хінолізинову, хінолінову, ізохінолінову, тетрагідрохінолінову, цинолінову, фталазинову, хіноксалинову, 1-8-нафтиридинову, птеридинову, 1Н-піроло[2,3-*b*]піридинову, імідазо[1,2-*a*]піразинову або 1Н-бензотриазольну кільцеву систему, і при цьому, якщо D заміщений, то він заміщений за одним або двома атомами вуглецю в кільці за допомогою R⁸ та/або за одним атомом азоту в кільці за допомогою R⁹;

кожен R⁸ являє собою незалежно C₁-C₃алкіл, C₁-C₃галогеналкіл, хлор, фтор, гідроксил або C₁-C₃алкокси;

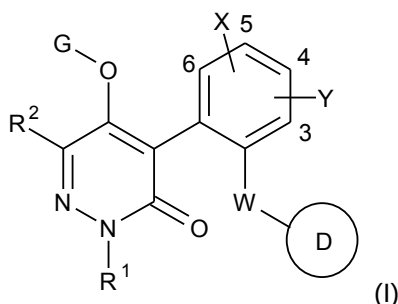
35 R⁹ являє собою C₁-C₄алкіл;

W являє собою W1; і

всі з R¹⁰, R¹¹, R¹² і R¹³ являють собою водень.

В таблицях 1-4 нижче проілюстровані 2752 конкретні приклади сполук формули (I) за даним винаходом.

40 Гербіцидні сполуки за даним винаходом. Система нумерації, використовувана для опису положень X та Y, показана тільки для ясності.



45 В таблиці 1 представлені 688 сполук від A-1.001 до A-1.688 формули (I), наведеної вище, де G являє собою водень, W являє собою -CH₂-CH₂- і R¹, R², X, Y, D визначені для сполук під №№ 1.001-1.688 відповідно в таблиці A нижче.

Таблиця А

Визначення замісників R¹, R², X, Y і D для сполук формули (I)

№ сполуки	R ¹	R ²	X	Y	D
1,001	-Me	-Me	6-F	3-F	1,2,3,4-тетрагідрохінолін-6-іл-
1,002	-Me	-Me	6-F	3-F	1Н-індол-4-іл-
1,003	-Me	-Me	6-F	3-F	1Н-індол-5-іл-
1,004	-Me	-Me	6-F	3-F	1Н-індол-6-іл-
1,005	-Me	-Me	6-F	3-F	1-метиліндол-4-іл-
1,006	-Me	-Me	6-F	3-F	1-метиліндол-5-іл-
1,007	-Me	-Me	6-F	3-F	1-метиліндол-6-іл-
1,008	-Me	-Me	6-F	3-F	1-нафтил-
1,009	-Me	-Me	6-F	3-F	2-(трифторметил)-4-хіноліл-
1,010	-Me	-Me	6-F	3-F	2-етил-1,3-бензоксазол-6-іл-
1,011	-Me	-Me	6-F	3-F	2-метил-1,3-бензоксазол-6-іл-
1,012	-Me	-Me	6-F	3-F	2-метил-1,2,3,4-тетрагідрохінолін-6-іл-
1,013	-Me	-Me	6-F	3-F	2-метил-6-хіноліл-
1,014	-Me	-Me	6-F	3-F	2-метил-6-хіноліл-
1,015	-Me	-Me	6-F	3-F	2-метил-6-хіноліл-
1,016	-Me	-Me	6-F	3-F	2-метил-6-хіноліл-
1,017	-Me	-Me	6-F	3-F	2-нафтил-
1,018	-Me	-Me	6-F	3-F	4-хіноліл-
1,019	-Me	-Me	6-F	3-Cl	1,2,3,4-тетрагідрохінолін-6-іл-
1,020	-Me	-Me	6-F	3-Cl	1Н-індол-4-іл-
1,021	-Me	-Me	6-F	3-Cl	1Н-індол-5-іл-
1,022	-Me	-Me	6-F	3-Cl	1Н-індол-6-іл-
1,023	-Me	-Me	6-F	3-Cl	1-метиліндол-4-іл-
1,024	-Me	-Me	6-F	3-Cl	1-метиліндол-5-іл-
1,025	-Me	-Me	6-F	3-Cl	1-метиліндол-6-іл-
1,026	-Me	-Me	6-F	3-Cl	1-нафтил-
1,027	-Me	-Me	6-F	3-Cl	2-(трифторметил)-4-хіноліл-
1,028	-Me	-Me	6-F	3-Cl	2-етил-1,3-бензоксазол-6-іл-
1,029	-Me	-Me	6-F	3-Cl	2-метил-1,3-бензоксазол-6-іл-
1,030	-Me	-Me	6-F	3-Cl	2-метил-1,2,3,4-тетрагідрохінолін-6-іл-
1,031	-Me	-Me	6-F	3-Cl	2-метил-6-хіноліл-
1,032	-Me	-Me	6-F	3-Cl	2-метил-6-хіноліл-
1,033	-Me	-Me	6-F	3-Cl	2-метил-6-хіноліл-
1,034	-Me	-Me	6-F	3-Cl	2-метил-6-хіноліл-
1,035	-Me	-Me	6-F	3-Cl	2-нафтил-
1,036	-Me	-Me	6-F	3-Cl	4-хіноліл-
1,037	-Me	-Me	6-Cl	3-F	1,2,3,4-тетрагідрохінолін-6-іл-
1,038	-Me	-Me	6-Cl	3-F	1Н-індол-4-іл-
1,039	-Me	-Me	6-Cl	3-F	1Н-індол-5-іл-
1,040	-Me	-Me	6-Cl	3-F	1Н-індол-6-іл-
1,041	-Me	-Me	6-Cl	3-F	1-метиліндол-4-іл-
1,042	-Me	-Me	6-Cl	3-F	1-метиліндол-5-іл-
1,043	-Me	-Me	6-Cl	3-F	1-метиліндол-6-іл-
1,044	-Me	-Me	6-Cl	3-F	1-нафтил-
1,045	-Me	-Me	6-Cl	3-F	2-(трифторметил)-4-хіноліл-
1,046	-Me	-Me	6-Cl	3-F	2-етил-1,3-бензоксазол-6-іл-
1,047	-Me	-Me	6-Cl	3-F	2-метил-1,3-бензоксазол-6-іл-
1,048	-Me	-Me	6-Cl	3-F	2-метил-1,2,3,4-тетрагідрохінолін-6-іл-
1,049	-Me	-Me	6-Cl	3-F	2-метил-6-хіноліл-
1,050	-Me	-Me	6-Cl	3-F	2-метил-6-хіноліл-
1,051	-Me	-Me	6-Cl	3-F	2-метил-6-хіноліл-
1,052	-Me	-Me	6-Cl	3-F	2-метил-6-хіноліл-

Визначення замісників R¹, R², X, Y і D для сполук формули (I)

№ сполуки	R ¹	R ²	X	Y	D
1,053	-Me	-Me	6-Cl	3-F	2-нафтил-
1,054	-Me	-Me	6-Cl	3-F	4-хіноліл-
1,055	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	1,2,3,4-тетрагідрохінолін-6-іл-
1,056	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	1H-індол-4-іл-
1,057	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	1H-індол-5-іл-
1,058	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	1H-індол-6-іл-
1,059	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	1-метиліндол-4-іл-
1,060	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	1-метиліндол-5-іл-
1,061	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	1-метиліндол-6-іл-
1,062	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	1-нафтил-
1,063	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	2-(трифторметил)-4-хіноліл-
1,064	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	2-етил-1,3-бензоксазол-6-іл-
1,065	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	2-метил-1,3-бензоксазол-6-іл-
1,066	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	2-метил-1,2,3,4-тетрагідрохінолін-6-іл-
1,067	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	2-метил-6-хіноліл-
1,068	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	2-метил-6-хіноліл-
1,069	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	2-метил-6-хіноліл-
1,070	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	2-метил-6-хіноліл-
1,071	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	2-нафтил-
1,072	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	4-хіноліл-
1,073	-Me	-Cl	6-F	3-F	1,2,3,4-тетрагідрохінолін-6-іл-
1,074	-Me	-Cl	6-F	3-F	1H-індол-4-іл-
1,075	-Me	-Cl	6-F	3-F	1H-індол-5-іл-
1,076	-Me	-Cl	6-F	3-F	1H-індол-6-іл-
1,077	-Me	-Cl	6-F	3-F	1-метиліндол-4-іл-
1,078	-Me	-Cl	6-F	3-F	1-метиліндол-5-іл-
1,079	-Me	-Cl	6-F	3-F	1-метиліндол-6-іл-
1,080	-Me	-Cl	6-F	3-F	1-нафтил-
1,081	-Me	-Cl	6-F	3-F	2-(трифторметил)-4-хіноліл-
1,082	-Me	-Cl	6-F	3-F	2-етил-1,3-бензоксазол-6-іл-
1,083	-Me	-Cl	6-F	3-F	2-метил-1,3-бензоксазол-6-іл-
1,084	-Me	-Cl	6-F	3-F	2-метил-1,2,3,4-тетрагідрохінолін-6-іл-
1,085	-Me	-Cl	6-F	3-F	2-метил-6-хіноліл-
1,086	-Me	-Cl	6-F	3-F	2-метил-6-хіноліл-
1,087	-Me	-Cl	6-F	3-F	2-метил-6-хіноліл-
1,088	-Me	-Cl	6-F	3-F	2-метил-6-хіноліл-
1,089	-Me	-Cl	6-F	3-F	2-нафтил-
1,090	-Me	-Cl	6-F	3-F	4-хіноліл-
1,091	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	1,2,3,4-тетрагідрохінолін-6-іл-
1,092	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	1H-індол-4-іл-
1,093	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	1H-індол-5-іл-
1,094	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	1H-індол-6-іл-
1,095	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	1-метиліндол-4-іл-
1,096	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	1-метиліндол-5-іл-
1,097	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	1-метиліндол-6-іл-
1,098	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	1-нафтил-
1,099	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	2-(трифторметил)-4-хіноліл-
1,100	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	2-етил-1,3-бензоксазол-6-іл-
1,101	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	2-метил-1,3-бензоксазол-6-іл-
1,102	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	2-метил-1,2,3,4-тетрагідрохінолін-6-іл-
1,103	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	2-метил-6-хіноліл-
1,104	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	2-метил-6-хіноліл-
1,105	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	2-метил-6-хіноліл-

Визначення замісників R¹, R², X, Y і D для сполук формули (I)

№ сполуки	R ¹	R ²	X	Y	D
1,106	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	2-метил-6-хіноліл-
1,107	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	2-нафтил-
1,108	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	4-хіноліл-
1,109	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	1,2,3,4-тетрагідрохінолін-6-іл-
1,110	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	1H-індол-4-іл-
1,111	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	1H-індол-5-іл-
1,112	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	1H-індол-6-іл-
1,113	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	1-метиліндол-4-іл-
1,114	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	1-метиліндол-5-іл-
1,115	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	1-метиліндол-6-іл-
1,116	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	1-нафтил-
1,117	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	2-(трифторметил)-4-хіноліл-
1,118	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	2-етил-1,3-бензоксазол-6-іл-
1,119	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	2-метил-1,3-бензоксазол-6-іл-
1,120	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	2-метил-1,2,3,4-тетрагідрохінолін-6-іл-
1,121	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	2-метил-6-хіноліл-
1,122	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	2-метил-6-хіноліл-
1,123	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	2-метил-6-хіноліл-
1,124	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	2-метил-6-хіноліл-
1,125	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	2-нафтил-
1,126	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	4-хіноліл-
1,127	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	1,2,3,4-тетрагідрохінолін-6-іл-
1,128	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	1H-індол-4-іл-
1,129	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	1H-індол-5-іл-
1,130	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	1H-індол-6-іл-
1,131	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	1-метиліндол-4-іл-
1,132	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	1-метиліндол-5-іл-
1,133	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	1-метиліндол-6-іл-
1,134	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	1-нафтил-
1,135	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	2-(трифторметил)-4-хіноліл-
1,136	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	2-етил-1,3-бензоксазол-6-іл-
1,137	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	2-метил-1,3-бензоксазол-6-іл-
1,138	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	2-метил-1,2,3,4-тетрагідрохінолін-6-іл-
1,139	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	2-метил-6-хіноліл-
1,140	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	2-метил-6-хіноліл-
1,141	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	2-метил-6-хіноліл-
1,142	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	2-метил-6-хіноліл-
1,143	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	2-нафтил-
1,144	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-хіноліл-
1,145	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-F	1,2,3,4-тетрагідрохінолін-6-іл-
1,146	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-F	1H-індол-4-іл-
1,147	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-F	1H-індол-5-іл-
1,148	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-F	1H-індол-6-іл-
1,149	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-F	1-метиліндол-4-іл-
1,150	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-F	1-метиліндол-5-іл-
1,151	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-F	1-метиліндол-6-іл-
1,152	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-F	1-нафтил-
1,153	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-F	2-(трифторметил)-4-хіноліл-
1,154	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-F	2-етил-1,3-бензоксазол-6-іл-
1,155	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-F	2-метил-1,3-бензоксазол-6-іл-
1,156	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-F	2-метил-1,2,3,4-тетрагідрохінолін-6-іл-
1,157	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-F	2-метил-6-хіноліл-
1,158	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-F	2-метил-6-хіноліл-

Визначення замісників R¹, R², X, Y і D для сполук формули (I)

№ сполуки	R ¹	R ²	X	Y	D
1,159	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-F	2-метил-6-хіноліл-
1,160	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-F	2-метил-6-хіноліл-
1,161	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-F	2-нафтил-
1,162	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-F	4-хіноліл-
1,163	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	1,2,3,4-тетрагідрохінолін-6-іл-
1,164	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	1H-індол-4-іл-
1,165	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	1H-індол-5-іл-
1,166	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	1H-індол-6-іл-
1,167	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	1-метиліндол-4-іл-
1,168	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	1-метиліндол-5-іл-
1,169	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	1-метиліндол-6-іл-
1,170	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	1-нафтил-
1,171	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	2-(трифторметил)-4-хіноліл-
1,172	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	2-етил-1,3-бензоксазол-6-іл-
1,173	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	2-метил-1,3-бензоксазол-6-іл-
1,174	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	2-метил-1,2,3,4-тетрагідрохінолін-6-іл-
1,175	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	2-метил-6-хіноліл-
1,176	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	2-метил-6-хіноліл-
1,177	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	2-метил-6-хіноліл-
1,178	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	2-метил-6-хіноліл-
1,179	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	2-нафтил-
1,180	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	4-хіноліл-
1,181	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	1,2,3,4-тетрагідрохінолін-6-іл-
1,182	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	1H-індол-4-іл-
1,183	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	1H-індол-5-іл-
1,184	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	1H-індол-6-іл-
1,185	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	1-метиліндол-4-іл-
1,186	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	1-метиліндол-5-іл-
1,187	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	1-метиліндол-6-іл-
1,188	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	1-нафтил-
1,189	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	2-(трифторметил)-4-хіноліл-
1,190	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	2-етил-1,3-бензоксазол-6-іл-
1,191	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	2-метил-1,3-бензоксазол-6-іл-
1,192	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	2-метил-1,2,3,4-тетрагідрохінолін-6-іл-
1,193	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	2-метил-6-хіноліл-
1,194	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	2-метил-6-хіноліл-
1,195	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	2-метил-6-хіноліл-
1,196	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	2-метил-6-хіноліл-
1,197	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	2-нафтил-
1,198	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	4-хіноліл-
1,199	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	1,2,3,4-тетрагідрохінолін-6-іл-
1,200	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	1H-індол-4-іл-
1,201	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	1H-індол-5-іл-
1,202	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	1H-індол-6-іл-
1,203	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	1-метиліндол-4-іл-
1,204	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	1-метиліндол-5-іл-
1,205	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	1-метиліндол-6-іл-
1,206	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	1-нафтил-
1,207	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	2-(трифторметил)-4-хіноліл-
1,208	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	2-етил-1,3-бензоксазол-6-іл-
1,209	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	2-метил-1,3-бензоксазол-6-іл-
1,210	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	2-метил-1,2,3,4-тетрагідрохінолін-6-іл-
1,211	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	2-метил-6-хіноліл-

Визначення замісників R¹, R², X, Y і D для сполук формули (I)

№ сполуки	R ¹	R ²	X	Y	D
1,212	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	2-метил-6-хіноліл-
1,213	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	2-метил-6-хіноліл-
1,214	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	2-метил-6-хіноліл-
1,215	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	2-нафтил-
1,216	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	4-хіноліл-
1,217	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-F	1,2,3,4-тетрагідрохінолін-6-іл-
1,218	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-F	1Н-індол-4-іл-
1,219	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-F	1Н-індол-5-іл-
1,220	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-F	1Н-індол-6-іл-
1,221	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-F	1-метиліндол-4-іл-
1,222	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-F	1-метиліндол-5-іл-
1,223	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-F	1-метиліндол-6-іл-
1,224	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-F	1-нафтил-
1,225	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-F	2-(трифторметил)-4-хіноліл-
1,226	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-F	2-етил-1,3-бензоксазол-6-іл-
1,227	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-F	2-метил-1,3-бензоксазол-6-іл-
1,228	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-F	2-метил-1,2,3,4-тетрагідрохінолін-6-іл-
1,229	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-F	2-метил-6-хіноліл-
1,230	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-F	2-метил-6-хіноліл-
1,231	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-F	2-метил-6-хіноліл-
1,232	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-F	2-метил-6-хіноліл-
1,233	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-F	2-нафтил-
1,234	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-F	4-хіноліл-
1,235	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	1,2,3,4-тетрагідрохінолін-6-іл-
1,236	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	1Н-індол-4-іл-
1,237	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	1Н-індол-5-іл-
1,238	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	1Н-індол-6-іл-
1,239	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	1-метиліндол-4-іл-
1,240	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	1-метиліндол-5-іл-
1,241	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	1-метиліндол-6-іл-
1,242	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	1-нафтил-
1,243	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	2-(трифторметил)-4-хіноліл-
1,244	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	2-етил-1,3-бензоксазол-6-іл-
1,245	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	2-метил-1,3-бензоксазол-6-іл-
1,246	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	2-метил-1,2,3,4-тетрагідрохінолін-6-іл-
1,247	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	2-метил-6-хіноліл-
1,248	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	2-метил-6-хіноліл-
1,249	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	2-метил-6-хіноліл-
1,250	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	2-метил-6-хіноліл-
1,251	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	2-нафтил-
1,252	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	4-хіноліл-
1,253	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	1,2,3,4-тетрагідрохінолін-6-іл-
1,254	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	1Н-індол-4-іл-
1,255	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	1Н-індол-5-іл-
1,256	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	1Н-індол-6-іл-
1,257	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	1-метиліндол-4-іл-
1,258	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	1-метиліндол-5-іл-
1,259	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	1-метиліндол-6-іл-
1,260	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	1-нафтил-
1,261	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	2-(трифторметил)-4-хіноліл-
1,262	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	2-етил-1,3-бензоксазол-6-іл-
1,263	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	2-метил-1,3-бензоксазол-6-іл-
1,264	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	2-метил-1,2,3,4-тетрагідрохінолін-6-іл-

Визначення замісників R¹, R², X, Y і D для сполук формули (I)

№ сполуки	R ¹	R ²	X	Y	D
1,265	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	2-метил-6-хіноліл-
1,266	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	2-метил-6-хіноліл-
1,267	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	2-метил-6-хіноліл-
1,268	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	2-метил-6-хіноліл-
1,269	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	2-нафтил-
1,270	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	4-хіноліл-
1,271	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	1,2,3,4-тетрагідрохінолін-6-іл-
1,272	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	1H-індол-4-іл-
1,273	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	1H-індол-5-іл-
1,274	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	1H-індол-6-іл-
1,275	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	1-метиліндол-4-іл-
1,276	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	1-метиліндол-5-іл-
1,277	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	1-метиліндол-6-іл-
1,278	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	1-нафтил-
1,279	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	2-(трифторметил)-4-хіноліл-
1,280	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	2-етил-1,3-бензоксазол-6-іл-
1,281	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	2-метил-1,3-бензоксазол-6-іл-
1,282	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	2-метил-1,2,3,4-тетрагідрохінолін-6-іл-
1,283	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	2-метил-6-хіноліл-
1,284	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	2-метил-6-хіноліл-
1,285	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	2-метил-6-хіноліл-
1,286	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	2-метил-6-хіноліл-
1,287	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	2-нафтил-
1,288	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	4-хіноліл-
1,289	-Me	-Me	6-F	3-F	2-метил-5-1,3-бензотіазоліл-
1,290	-Me	-Me	6-F	3-F	2,2-диметил-6-3H-бензофураніл-
1,291	-Me	-Me	6-F	3-F	2-метил-6-1,3-бензоксазоліл-
1,292	-Me	-Me	6-F	3-F	2,2-дифтор-5-1,3-бензодіоксоліл-
1,293	-Me	-Me	6-F	3-F	3-метил-5-бензотриазоліл-
1,294	-Me	-Me	6-F	3-F	1-метил-3-індазоліл-
1,295	-Me	-Me	6-F	3-F	1-метил-5-піроло[2,3-b]піридиніл-
1,296	-Me	-Me	6-F	3-F	5-бензофураніл-
1,297	-Me	-Me	6-F	3-F	6-бензотіофеніл-
1,298	-Me	-Me	6-F	3-F	5-бензотіофеніл-
1,299	-Me	-Me	6-F	3-F	6-1,3-бензотіазоліл-
1,300	-Me	-Me	6-F	3-F	5-1,3-бензотіазоліл-
1,301	-Me	-Me	6-F	3-F	3-метил-6-1,2-бензоксазоліл-
1,302	-Me	-Me	6-F	3-F	5-2-оксо-3H-1,3-бензоксазоліл-
1,303	-Me	-Me	6-F	3-F	6-1-метиліндазоліл-
1,304	-Me	-Me	6-F	3-F	5-1-метиліндазоліл-
1,305	-Me	-Me	6-F	3-F	6-1-метиліндоліл-
1,306	-Me	-Me	6-F	3-F	5-1-метиліндоліл-
1,307	-Me	-Me	6-F	3-F	5-2-оксоіндолініл-
1,308	-Me	-Me	6-F	3-F	2-метил-1,3-діоксо-ізоіндолін-5-іл
1,309	-Me	-Me	6-F	3-F	2-1,3-бензоксазоліл-
1,310	-Me	-Me	6-F	3-F	2-1,3-бензотіазоліл
1,311	-Me	-Me	6-F	3-F	5-2,2-диметил-1,3-бензодіоксоліл-
1,312	-Me	-Me	6-F	3-F	6-2,2-диметил-3H-бензофураніл-
1,313	-Me	-Me	6-F	3-F	6-імідазо[1,2-a]піразиніл-
1,314	-Me	-Me	6-F	3-Cl	2-метил-5-1,3-бензотіазоліл-
1,315	-Me	-Me	6-F	3-Cl	2,2-диметил-6-3H-бензофураніл-
1,316	-Me	-Me	6-F	3-Cl	2-метил-6-1,3-бензоксазоліл-
1,317	-Me	-Me	6-F	3-Cl	2,2-дифтор-5-1,3-бензодіоксоліл-

Визначення замісників R¹, R², X, Y і D для сполук формули (I)

№ сполуки	R ¹	R ²	X	Y	D
1,318	-Me	-Me	6-F	3-Cl	3-метил-5-бензотриазоліл-
1,319	-Me	-Me	6-F	3-Cl	1-метил-3-індазоліл-
1,320	-Me	-Me	6-F	3-Cl	1-метил-5-піроло[2,3-b]піридиніл-
1,321	-Me	-Me	6-F	3-Cl	5-бензофураніл-
1,322	-Me	-Me	6-F	3-Cl	6-бензотіофеніл-
1,323	-Me	-Me	6-F	3-Cl	5-бензотіофеніл-
1,324	-Me	-Me	6-F	3-Cl	6-1,3-бензотіазоліл-
1,325	-Me	-Me	6-F	3-Cl	5-1,3-бензотіазоліл-
1,326	-Me	-Me	6-F	3-Cl	3-метил-6-1,2-бензоксазоліл-
1,327	-Me	-Me	6-F	3-Cl	5-2-оксо-3Н-1,3-бензоксазоліл-
1,328	-Me	-Me	6-F	3-Cl	6-1-метиліндазоліл-
1,329	-Me	-Me	6-F	3-Cl	5-1-метиліндазоліл-
1,330	-Me	-Me	6-F	3-Cl	6-1-метиліндоліл-
1,331	-Me	-Me	6-F	3-Cl	5-1-метиліндоліл-
1,332	-Me	-Me	6-F	3-Cl	5-2-оксоіндолініл-
1,333	-Me	-Me	6-F	3-Cl	2-метил-1,3-діоксо-ізоіндолін-5-іл
1,334	-Me	-Me	6-F	3-Cl	2-1,3-бензоксазоліл-
1,335	-Me	-Me	6-F	3-Cl	2-1,3-бензотіазоліл
1,336	-Me	-Me	6-F	3-Cl	5-2,2-диметил-1,3-бензодіоксоліл-
1,337	-Me	-Me	6-F	3-Cl	6-2,2-диметил-3Н-бензофураніл-
1,338	-Me	-Me	6-F	3-Cl	6-імідазо[1,2-а]піразиніл-
1,339	-Me	-Me	6-Cl	3-F	2-метил-5-1,3-бензотіазоліл-
1,340	-Me	-Me	6-Cl	3-F	2,2-диметил-6-3Н-бензофураніл-
1,341	-Me	-Me	6-Cl	3-F	2-метил-6-1,3-бензоксазоліл-
1,342	-Me	-Me	6-Cl	3-F	2,2-дифтор-5-1,3-бензодіоксоліл-
1,343	-Me	-Me	6-Cl	3-F	3-метил-5-бензотриазоліл-
1,344	-Me	-Me	6-Cl	3-F	1-метил-3-індазоліл-
1,345	-Me	-Me	6-Cl	3-F	1-метил-5-піроло[2,3-b]піридиніл-
1,346	-Me	-Me	6-Cl	3-F	5-бензофураніл-
1,347	-Me	-Me	6-Cl	3-F	6-бензотіофеніл-
1,348	-Me	-Me	6-Cl	3-F	5-бензотіофеніл-
1,349	-Me	-Me	6-Cl	3-F	6-1,3-бензотіазоліл-
1,350	-Me	-Me	6-Cl	3-F	5-1,3-бензотіазоліл-
1,351	-Me	-Me	6-Cl	3-F	3-метил-6-1,2-бензоксазоліл-
1,352	-Me	-Me	6-Cl	3-F	5-2-оксо-3Н-1,3-бензоксазоліл-
1,353	-Me	-Me	6-Cl	3-F	6-1-метиліндазоліл-
1,354	-Me	-Me	6-Cl	3-F	5-1-метиліндазоліл-
1,355	-Me	-Me	6-Cl	3-F	6-1-метиліндоліл-
1,356	-Me	-Me	6-Cl	3-F	5-1-метиліндоліл-
1,357	-Me	-Me	6-Cl	3-F	5-2-оксоіндолініл-
1,358	-Me	-Me	6-Cl	3-F	2-метил-1,3-діоксо-ізоіндолін-5-іл
1,359	-Me	-Me	6-Cl	3-F	2-1,3-бензоксазоліл-
1,360	-Me	-Me	6-Cl	3-F	2-1,3-бензотіазоліл
1,361	-Me	-Me	6-Cl	3-F	5-2,2-диметил-1,3-бензодіоксоліл-
1,362	-Me	-Me	6-Cl	3-F	6-2,2-диметил-3Н-бензофураніл-
1,363	-Me	-Me	6-Cl	3-F	6-імідазо[1,2-а]піразиніл-
1,364	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	2-метил-5-1,3-бензотіазоліл-
1,365	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	2,2-диметил-6-3Н-бензофураніл-
1,366	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	2-метил-6-1,3-бензоксазоліл-
1,367	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	2,2-дифтор-5-1,3-бензодіоксоліл-
1,368	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	3-метил-5-бензотриазоліл-
1,369	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	1-метил-3-індазоліл-
1,370	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	1-метил-5-піроло[2,3-b]піридиніл-

Визначення замісників R¹, R², X, Y і D для сполук формули (I)

№ сполуки	R ¹	R ²	X	Y	D
1,371	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	5-бензофураніл-
1,372	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	6-бензотіофеніл-
1,373	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	5-бензотіофеніл-
1,374	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	6-1,3-бензотіазоліл-
1,375	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	5-1,3-бензотіазоліл-
1,376	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	3-метил-6-1,2-бензоксазоліл-
1,377	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	5-2-оксо-3Н-1,3-бензоксазоліл-
1,378	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	6-1-метиліндазоліл-
1,379	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	5-1-метиліндазоліл-
1,380	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	6-1-метиліндоліл-
1,381	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	5-1-метиліндоліл-
1,382	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	5-2-оксоіндолініл-
1,383	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	2-метил-1,3-діоксо-ізоіндолін-5-іл
1,384	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	2-1,3-бензоксазоліл-
1,385	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	2-1,3-бензотіазоліл
1,386	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	5-2,2-диметил-1,3-бензодіоксоліл-
1,387	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	6-2,2-диметил-3Н-бензофураніл-
1,388	-Me	-Me	6-Cl	3-Cl	6-імідазо[1,2-а]піразиніл-
1,389	-Me	-Cl	6-F	3-F	2-метил-5-1,3-бензотіазоліл-
1,390	-Me	-Cl	6-F	3-F	2,2-диметил-6-3Н-бензофураніл-
1,391	-Me	-Cl	6-F	3-F	2-метил-6-1,3-бензоксазоліл-
1,392	-Me	-Cl	6-F	3-F	2,2-дифтор-5-1,3-бензодіоксоліл-
1,393	-Me	-Cl	6-F	3-F	3-метил-5-бензотриазоліл-
1,394	-Me	-Cl	6-F	3-F	1-метил-3-індазоліл-
1,395	-Me	-Cl	6-F	3-F	1-метил-5-піроло[2,3-б]піридиніл-
1,396	-Me	-Cl	6-F	3-F	5-бензофураніл-
1,397	-Me	-Cl	6-F	3-F	6-бензотіофеніл-
1,398	-Me	-Cl	6-F	3-F	5-бензотіофеніл-
1,399	-Me	-Cl	6-F	3-F	6-1,3-бензотіазоліл-
1,400	-Me	-Cl	6-F	3-F	5-1,3-бензотіазоліл-
1,401	-Me	-Cl	6-F	3-F	3-метил-6-1,2-бензоксазоліл-
1,402	-Me	-Cl	6-F	3-F	5-2-оксо-3Н-1,3-бензоксазоліл-
1,403	-Me	-Cl	6-F	3-F	6-1-метиліндазоліл-
1,404	-Me	-Cl	6-F	3-F	5-1-метиліндазоліл-
1,405	-Me	-Cl	6-F	3-F	6-1-метиліндоліл-
1,406	-Me	-Cl	6-F	3-F	5-1-метиліндоліл-
1,407	-Me	-Cl	6-F	3-F	5-2-оксоіндолініл-
1,408	-Me	-Cl	6-F	3-F	2-метил-1,3-діоксо-ізоіндолін-5-іл
1,409	-Me	-Cl	6-F	3-F	2-1,3-бензоксазоліл-
1,410	-Me	-Cl	6-F	3-F	2-1,3-бензотіазоліл
1,411	-Me	-Cl	6-F	3-F	5-2,2-диметил-1,3-бензодіоксоліл-
1,412	-Me	-Cl	6-F	3-F	6-2,2-диметил-3Н-бензофураніл-
1,413	-Me	-Cl	6-F	3-F	6-імідазо[1,2-а]піразиніл-
1,414	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	2-метил-5-1,3-бензотіазоліл-
1,415	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	2,2-диметил-6-3Н-бензофураніл-
1,416	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	2-метил-6-1,3-бензоксазоліл-
1,417	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	2,2-дифтор-5-1,3-бензодіоксоліл-
1,418	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	3-метил-5-бензотриазоліл-
1,419	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	1-метил-3-індазоліл-
1,420	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	1-метил-5-піроло[2,3-б]піридиніл-
1,421	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	5-бензофураніл-
1,422	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	6-бензотіофеніл-
1,423	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	5-бензотіофеніл-

Визначення замісників R¹, R², X, Y і D для сполук формули (I)

№ сполуки	R ¹	R ²	X	Y	D
1,424	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	6-1,3-бензотіазоліл-
1,425	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	5-1,3-бензотіазоліл-
1,426	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	3-метил-6-1,2-бензоксазоліл-
1,427	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	5-2-оксо-3H-1,3-бензоксазоліл-
1,428	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	6-1-метиліндазоліл-
1,429	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	5-1-метиліндазоліл-
1,430	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	6-1-метиліндоліл-
1,431	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	5-1-метиліндоліл-
1,432	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	5-2-оксоіндолініл-
1,433	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	2-метил-1,3-діоксо-ізоіндолін-5-іл
1,434	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	2-1,3-бензоксазоліл-
1,435	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	2-1,3-бензотіазоліл
1,436	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	5-2,2-диметил-1,3-бензодіоксоліл-
1,437	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	6-2,2-диметил-3H-бензофураніл-
1,438	-Me	-Cl	6-F	3-Cl	6-імідазо[1,2-a]піразиніл-
1,439	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	2-метил-5-1,3-бензотіазоліл-
1,440	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	2,2-диметил-6-3H-бензофураніл-
1,441	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	2-метил-6-1,3-бензоксазоліл-
1,442	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	2,2-дифтор-5-1,3-бензодіоксоліл-
1,443	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	3-метил-5-бензотриазоліл-
1,444	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	1-метил-3-індазоліл-
1,445	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	1-метил-5-піроло[2,3-b]піридиніл-
1,446	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	5-бензофураніл-
1,447	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	6-бензотіофеніл-
1,448	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	5-бензотіофеніл-
1,449	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	6-1,3-бензотіазоліл-
1,450	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	5-1,3-бензотіазоліл-
1,451	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	3-метил-6-1,2-бензоксазоліл-
1,452	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	5-2-оксо-3H-1,3-бензоксазоліл-
1,453	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	6-1-метиліндазоліл-
1,454	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	5-1-метиліндазоліл-
1,455	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	6-1-метиліндоліл-
1,456	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	5-1-метиліндоліл-
1,457	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	5-2-оксоіндолініл-
1,458	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	2-метил-1,3-діоксо-ізоіндолін-5-іл
1,459	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	2-1,3-бензоксазоліл-
1,460	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	2-1,3-бензотіазоліл
1,461	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	5-2,2-диметил-1,3-бензодіоксоліл-
1,462	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	6-2,2-диметил-3H-бензофураніл-
1,463	-Me	-Cl	6-Cl	3-F	6-імідазо[1,2-a]піразиніл-
1,464	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	2-метил-5-1,3-бензотіазоліл-
1,465	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	2,2-диметил-6-3H-бензофураніл-
1,466	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	2-метил-6-1,3-бензоксазоліл-
1,467	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	2,2-дифтор-5-1,3-бензодіоксоліл-
1,468	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	3-метил-5-бензотриазоліл-
1,469	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	1-метил-3-індазоліл-
1,470	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	1-метил-5-піроло[2,3-b]піридиніл-
1,471	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	5-бензофураніл-
1,472	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	6-бензотіофеніл-
1,473	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	5-бензотіофеніл-
1,474	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	6-1,3-бензотіазоліл-
1,475	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	5-1,3-бензотіазоліл-
1,476	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	3-метил-6-1,2-бензоксазоліл-

Визначення замісників R¹, R², X, Y і D для сполук формули (I)

№ сполуки	R ¹	R ²	X	Y	D
1,477	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	5-2-оксо-3H-1,3-бензоксазоліл-
1,478	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	6-1-метиліндазоліл-
1,479	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	5-1-метиліндазоліл-
1,480	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	6-1-метиліндоліл-
1,481	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	5-1-метиліндоліл-
1,482	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	5-2-оксоіндолініл-
1,483	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	2-метил-1,3-діоксо-ізоіндолін-5-іл
1,484	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	2-1,3-бензоксазоліл-
1,485	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	2-1,3-бензотіазоліл
1,486	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	5-2,2-диметил-1,3-бензодіоксоліл-
1,487	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	6-2,2-диметил-3H-бензофураніл-
1,488	-Me	-Cl	6-Cl	3-Cl	6-імідазо[1,2-a]піразиніл-
1,489	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-F	2-метил-5-1,3-бензотіазоліл-
1,490	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-F	2,2-диметил-6-3H-бензофураніл-
1,491	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-F	2-метил-6-1,3-бензоксазоліл-
1,492	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-F	2,2-дифтор-5-1,3-бензодіоксоліл-
1,493	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-F	3-метил-5-бензотриазоліл-
1,494	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-F	1-метил-3-індазоліл-
1,495	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-F	1-метил-5-піроло[2,3-b]піридиніл-
1,496	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-F	5-бензофураніл-
1,497	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-F	6-бензотіофеніл-
1,498	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-F	5-бензотіофеніл-
1,499	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-F	6-1,3-бензотіазоліл-
1,500	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-F	5-1,3-бензотіазоліл-
1,501	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-F	3-метил-6-1,2-бензоксазоліл-
1,502	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-F	5-2-оксо-3H-1,3-бензоксазоліл-
1,503	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-F	6-1-метиліндазоліл-
1,504	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-F	5-1-метиліндазоліл-
1,505	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-F	6-1-метиліндоліл-
1,506	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-F	5-1-метиліндоліл-
1,507	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-F	5-2-оксоіндолініл-
1,508	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-F	2-метил-1,3-діоксо-ізоіндолін-5-іл
1,509	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-F	2-1,3-бензоксазоліл-
1,510	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-F	2-1,3-бензотіазоліл
1,511	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-F	5-2,2-диметил-1,3-бензодіоксоліл-
1,512	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-F	6-2,2-диметил-3H-бензофураніл-
1,513	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-F	6-імідазо[1,2-a]піразиніл-
1,514	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	2-метил-5-1,3-бензотіазоліл-
1,515	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	2,2-диметил-6-3H-бензофураніл-
1,516	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	2-метил-6-1,3-бензоксазоліл-
1,517	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	2,2-дифтор-5-1,3-бензодіоксоліл-
1,518	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	3-метил-5-бензотриазоліл-
1,519	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	1-метил-3-індазоліл-
1,520	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	1-метил-5-піроло[2,3-b]піридиніл-
1,521	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	5-бензофураніл-
1,522	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	6-бензотіофеніл-
1,523	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	5-бензотіофеніл-
1,524	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	6-1,3-бензотіазоліл-
1,525	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	5-1,3-бензотіазоліл-
1,526	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	3-метил-6-1,2-бензоксазоліл-
1,527	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	5-2-оксо-3H-1,3-бензоксазоліл-
1,528	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	6-1-метиліндазоліл-
1,529	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	5-1-метиліндазоліл-

Визначення замісників R¹, R², X, Y і D для сполук формули (I)

№ сполуки	R ¹	R ²	X	Y	D
1,530	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	6-1-метиліндоліл-
1,531	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	5-1-метиліндоліл-
1,532	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	5-2-оксоіндолініл-
1,533	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	2-метил-1,3-діоксо-ізоіндолін-5-іл
1,534	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	2-1,3-бензоксазоліл-
1,535	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	2-1,3-бензотіазоліл
1,536	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	5-2,2-диметил-1,3-бензодіоксоліл-
1,537	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	6-2,2-диметил-3Н-бензофураніл-
1,538	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-F	3-Cl	6-імідазо[1,2-а]піразиніл-
1,539	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	2-метил-5-1,3-бензотіазоліл-
1,540	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	2,2-диметил-6-3Н-бензофураніл-
1,541	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	2-метил-6-1,3-бензоксазоліл-
1,542	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	2,2-дифтор-5-1,3-бензодіоксоліл-
1,543	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	3-метил-5-бензотриазоліл-
1,544	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	1-метил-3-індазоліл-
1,545	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	1-метил-5-піроло[2,3-б]піридиніл-
1,546	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	5-бензофураніл-
1,547	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	6-бензотіофеніл-
1,548	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	5-бензотіофеніл-
1,549	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	6-1,3-бензотіазоліл-
1,550	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	5-1,3-бензотіазоліл-
1,551	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	3-метил-6-1,2-бензоксазоліл-
1,552	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	5-2-оксо-3Н-1,3-бензоксазоліл-
1,553	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	6-1-метиліндазоліл-
1,554	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	5-1-метиліндазоліл-
1,555	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	6-1-метиліндоліл-
1,556	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	5-1-метиліндоліл-
1,557	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	5-2-оксоіндолініл-
1,558	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	2-метил-1,3-діоксо-ізоіндолін-5-іл
1,559	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	2-1,3-бензоксазоліл-
1,560	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	2-1,3-бензотіазоліл
1,561	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	5-2,2-диметил-1,3-бензодіоксоліл-
1,562	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	6-2,2-диметил-3Н-бензофураніл-
1,563	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-F	6-імідазо[1,2-а]піразиніл-
1,564	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	2-метил-5-1,3-бензотіазоліл-
1,565	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	2,2-диметил-6-3Н-бензофураніл-
1,566	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	2-метил-6-1,3-бензоксазоліл-
1,567	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	2,2-дифтор-5-1,3-бензодіоксоліл-
1,568	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	3-метил-5-бензотриазоліл-
1,569	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	1-метил-3-індазоліл-
1,570	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	1-метил-5-піроло[2,3-б]піридиніл-
1,571	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	5-бензофураніл-
1,572	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	6-бензотіофеніл-
1,573	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	5-бензотіофеніл-
1,574	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	6-1,3-бензотіазоліл-
1,575	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	5-1,3-бензотіазоліл-
1,576	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	3-метил-6-1,2-бензоксазоліл-
1,577	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	5-2-оксо-3Н-1,3-бензоксазоліл-
1,578	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	6-1-метиліндазоліл-
1,579	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	5-1-метиліндазоліл-
1,580	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	6-1-метиліндоліл-
1,581	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	5-1-метиліндоліл-
1,582	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	5-2-оксоіндолініл-

Визначення замісників R¹, R², X, Y і D для сполук формули (I)

№ сполуки	R ¹	R ²	X	Y	D
1,583	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	2-метил-1,3-діоксо-ізоіндолін-5-іл
1,584	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	2-1,3-бензоксазоліл-
1,585	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	2-1,3-бензотіазоліл
1,586	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	5-2,2-диметил-1,3-бензодіоксоліл-
1,587	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	6-2,2-диметил-3Н-бензофураніл-
1,588	-CH ₂ -C≡CH	-Me	6-Cl	3-Cl	6-імідазо[1,2-а]піразиніл-
1,589	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-F	2-метил-5-1,3-бензотіазоліл-
1,590	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-F	2,2-диметил-6-3Н-бензофураніл-
1,591	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-F	2-метил-6-1,3-бензоксазоліл-
1,592	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-F	2,2-дифтор-5-1,3-бензодіоксоліл-
1,593	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-F	3-метил-5-бензотриазоліл-
1,594	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-F	1-метил-3-індазоліл-
1,595	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-F	1-метил-5-піроло[2,3-б]піридиніл-
1,596	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-F	5-бензофураніл-
1,597	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-F	6-бензотіофеніл-
1,598	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-F	5-бензотіофеніл-
1,599	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-F	6-1,3-бензотіазоліл-
1,600	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-F	5-1,3-бензотіазоліл-
1,601	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-F	3-метил-6-1,2-бензоксазоліл-
1,602	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-F	5-2-оксо-3Н-1,3-бензоксазоліл-
1,603	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-F	6-1-метиліндазоліл-
1,604	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-F	5-1-метиліндазоліл-
1,605	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-F	6-1-метиліндоліл-
1,606	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-F	5-1-метиліндоліл-
1,607	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-F	5-2-оксоіндолініл-
1,608	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-F	2-метил-1,3-діоксо-ізоіндолін-5-іл
1,609	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-F	2-1,3-бензоксазоліл-
1,610	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-F	2-1,3-бензотіазоліл
1,611	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-F	5-2,2-диметил-1,3-бензодіоксоліл-
1,612	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-F	6-2,2-диметил-3Н-бензофураніл-
1,613	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-F	6-імідазо[1,2-а]піразиніл-
1,614	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	2-метил-5-1,3-бензотіазоліл-
1,615	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	2,2-диметил-6-3Н-бензофураніл-
1,616	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	2-метил-6-1,3-бензоксазоліл-
1,617	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	2,2-дифтор-5-1,3-бензодіоксоліл-
1,618	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	3-метил-5-бензотриазоліл-
1,619	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	1-метил-3-індазоліл-
1,620	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	1-метил-5-піроло[2,3-б]піридиніл-
1,621	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	5-бензофураніл-
1,622	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	6-бензотіофеніл-
1,623	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	5-бензотіофеніл-
1,624	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	6-1,3-бензотіазоліл-
1,625	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	5-1,3-бензотіазоліл-
1,626	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	3-метил-6-1,2-бензоксазоліл-
1,627	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	5-2-оксо-3Н-1,3-бензоксазоліл-
1,628	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	6-1-метиліндазоліл-
1,629	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	5-1-метиліндазоліл-
1,630	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	6-1-метиліндоліл-
1,631	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	5-1-метиліндоліл-
1,632	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	5-2-оксоіндолініл-
1,633	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	2-метил-1,3-діоксо-ізоіндолін-5-іл
1,634	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	2-1,3-бензоксазоліл-
1,635	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	2-1,3-бензотіазоліл

Визначення замісників R¹, R², X, Y і D для сполук формули (I)

№ сполуки	R ¹	R ²	X	Y	D
1,636	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	5-2,2-диметил-1,3-бензодіоксоліл-
1,637	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	6-2,2-диметил-3Н-бензофураніл-
1,638	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-F	3-Cl	6-імідазо[1,2-а]піразиніл-
1,639	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	2-метил-5-1,3-бензотіазоліл-
1,640	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	2,2-диметил-6-3Н-бензофураніл-
1,641	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	2-метил-6-1,3-бензоксазоліл-
1,642	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	2,2-дифтор-5-1,3-бензодіоксоліл-
1,643	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	3-метил-5-бензотриазоліл-
1,644	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	1-метил-3-індазоліл-
1,645	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	1-метил-5-піроло[2,3-b]піридиніл-
1,646	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	5-бензофураніл-
1,647	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	6-бензотіофеніл-
1,648	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	5-бензотіофеніл-
1,649	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	6-1,3-бензотіазоліл-
1,650	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	5-1,3-бензотіазоліл-
1,651	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	3-метил-6-1,2-бензоксазоліл-
1,652	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	5-2-оксо-3Н-1,3-бензоксазоліл-
1,653	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	6-1-метиліндазоліл-
1,654	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	5-1-метиліндазоліл-
1,655	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	6-1-метиліндоліл-
1,656	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	5-1-метиліндоліл-
1,657	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	5-2-оксоіндолініл-
1,658	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	2-метил-1,3-діоксо-ізоіндолін-5-іл
1,659	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	2-1,3-бензоксазоліл-
1,660	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	2-1,3-бензотіазоліл
1,661	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	5-2,2-диметил-1,3-бензодіоксоліл-
1,662	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	6-2,2-диметил-3Н-бензофураніл-
1,663	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-F	6-імідазо[1,2-а]піразиніл-
1,664	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	2-метил-5-1,3-бензотіазоліл-
1,665	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	2,2-диметил-6-3Н-бензофураніл-
1,666	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	2-метил-6-1,3-бензоксазоліл-
1,667	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	2,2-дифтор-5-1,3-бензодіоксоліл-
1,668	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	3-метил-5-бензотриазоліл-
1,669	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	1-метил-3-індазоліл-
1,670	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	1-метил-5-піроло[2,3-b]піридиніл-
1,671	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	5-бензофураніл-
1,672	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	6-бензотіофеніл-
1,673	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	5-бензотіофеніл-
1,674	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	6-1,3-бензотіазоліл-
1,675	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	5-1,3-бензотіазоліл-
1,676	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	3-метил-6-1,2-бензоксазоліл-
1,677	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	5-2-оксо-3Н-1,3-бензоксазоліл-
1,678	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	6-1-метиліндазоліл-
1,679	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	5-1-метиліндазоліл-
1,680	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	6-1-метиліндоліл-
1,681	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	5-1-метиліндоліл-
1,682	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	5-2-оксоіндолініл-
1,683	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	2-метил-1,3-діоксо-ізоіндолін-5-іл
1,684	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	2-1,3-бензоксазоліл-
1,685	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	2-1,3-бензотіазоліл
1,686	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	5-2,2-диметил-1,3-бензодіоксоліл-
1,687	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	6-2,2-диметил-3Н-бензофураніл-
1,688	-CH ₂ -C≡CH	-Cl	6-Cl	3-Cl	6-імідазо[1,2-а]піразиніл-

В Таблиці 2 представлені 688 сполук від A-2.001 до A-2.688 формули (I), наведеної вище, де G являє собою водень, W являє собою (E)-CH=CH-, і R¹, R², X, Y, D визначені для сполук під №№ 1.001-1.688 відповідно в таблиці A вище.

В таблиці 3 представлені 688 сполук від A-3.001 до A-3.688 формули (I), наведеної вище, де G являє собою -(C=O)iPr, W являє собою -CH₂-CH₂-, і R¹, R², X, Y, D визначені для сполук під №№ 1.001-1.288 відповідно в таблиці A вище.

В таблиці 4 представлені 688 сполук від A-4.001 до A-4.688 формули (I), наведеної вище, де G являє собою -(C=O)iPr, W являє собою (E)-CH=CH-, і R¹, R², X, Y, D визначені для сполук під №№ 1.001-1.288 відповідно в таблиці A вище.

Сполуки за даним винаходом можуть бути одержані відповідно до наступних схем, в яких замісники R¹, R², R³, R⁴, R⁵, R⁶, R⁸, R⁹, R¹⁰, R¹¹, R¹², R¹³, R¹⁴, R¹⁵, R¹⁶, W, D, G, X, Y, Z і m мають (якщо явно не вказано інше) визначення, описані в даному документі вище.

Деякі сполуки (I-ii) за даним винаходом можна одержувати зі сполук (2), як показано на схемі реакції 1. Сполуки (I-ii) являють собою сполуки формули (I), в якій W являє собою -CH₂-CH₂-.



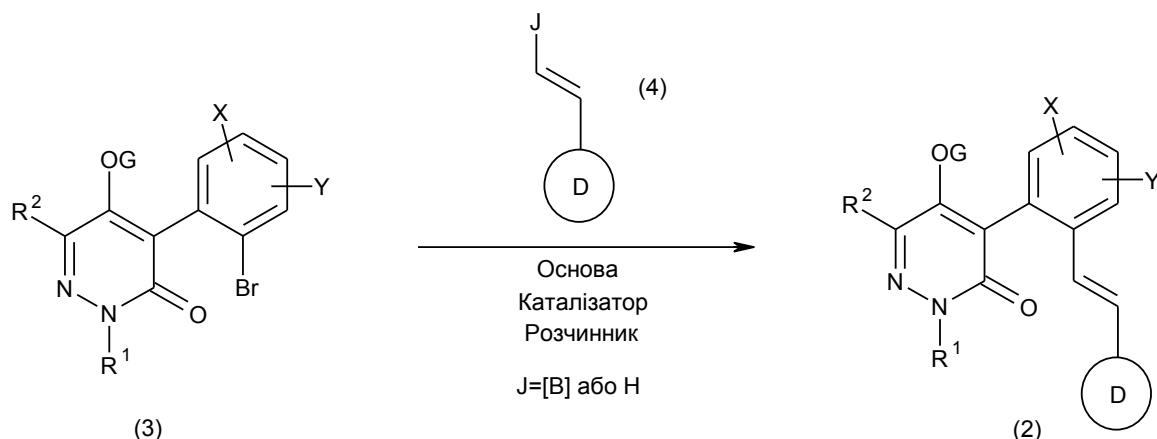
Сполуки (I-ii) можна одержувати шляхом каталітичної гідрогенізації сполук (2) за допомогою газоподібного водню в придатному розчиннику [такому як тетрагідрофуран, метанол, етанол, оцтова кислота або етилацетат] у присутності придатного каталізатора [такого як Pd/C, Pd/CaCO₃, Rh/Al₂CO₃ або губчастий нікель] за температури від -10 до 100 °C.

Як альтернатива, сполуки (I-ii) можуть також бути одержані шляхом каталітичного переносу-гідрогенізації сполук (2) шляхом обробки за допомогою придатного джерела водню у придатному розчиннику в присутності придатного каталізатора за температури в діапазоні від -10 до 100 °C. Прикладами придатних систем є тетрагідроксибор в суміші дихлорметан/вода або дихлорметан/метанол у присутності Pd/C, Pd(OAc)₂ або Pd(OH)₂/C (J. Am. Chem. Soc., 2016, 138, 6107-6110) або діетил-1,4-дигідро-2,6-диметил-3,5-піридиндикарбоксилат в етанолі у присутності Pd/C (Tetrahedron Letters, 2009, 50, 1026).

Як альтернатива, сполуки (I-ii) можуть також бути одержані шляхом відновлення за допомогою діїміду, одержаного in-situ з придатного попередника в придатному розчиннику за температури в діапазоні від -10 до 200 °C. Приклади придатних реагентів для одержання діїміду включають заміщені арилсульфонілгідрозиди, такі як 2,4,6-триізопропілбензолсульфонілгідрозид, необов'язково у присутності придатної основи. Приклади придатних основ включають триетиламін, діізопропілетиламін, карбонат калію та карбонат натрію. Придатні розчинники включають тетрагідрофуран, 1,4-діоксан, етилацетат, ацетонітрил і диметилформамід.

Сполуки (2) можна одержувати зі сполук (3) та сполук (4), як показано на схемі реакції 2, згідно або з описаним протоколом реакції Сузукі, або з описаним протоколом реакції Хека. У разі використання протоколу реакції Сузукі сполуки (4) являють собою борорганічні сполуки, такі як боронові кислоти, боронові естери або солі, які являють собою трифторборат калію. У разі використання протоколу реакції Хека сполуки (4) являють собою стирили.

Схема реакції 2



Протокол реакції Сузукі

Сполуки (2) можна одержувати шляхом обробки сполук (3) за допомогою сполук (4) у присутності придатної основи та придатного каталізатора в придатному розчиннику за температури від 10 до 150 °С. Прикладами придатних основ є карбонат калію, фосфат калію, карбонат натрію, бікарбонат натрію і фторид калію. Прикладами придатних каталізаторів є комплекс 1,1'-біс(дифенілфосфіно)фероцен]дихлорпаладію(II) і дихлорметану [PdCl₂(dppf).DCM], тетракіс(трифенілфосфін)паладій(0) [Pd(PPh₃)₄] і каталітична система, утворена in-situ із суміші ацетату паладію(II) і трифенілфосфіну. Прикладами придатних розчинників є вода, 1,4-діоксан, 2-метилтетрагідрофуран, тетрагідрофуран, ацетонітрил і толуол. Багато сполук (4) є комерційно доступними [такі як 4,4,5,5-тетраметил-2-[(E)-2-(2-нафтил)вініл]-1,3,2-діоксаборолан] або можуть бути одержані за допомогою відомих способів. Приклади сполук (3), що характеризуються особливою застосовністю в протоколі реакції Сузукі, являють собою ізобутирилові естери (3-і), де G являє собою ізобутирил.

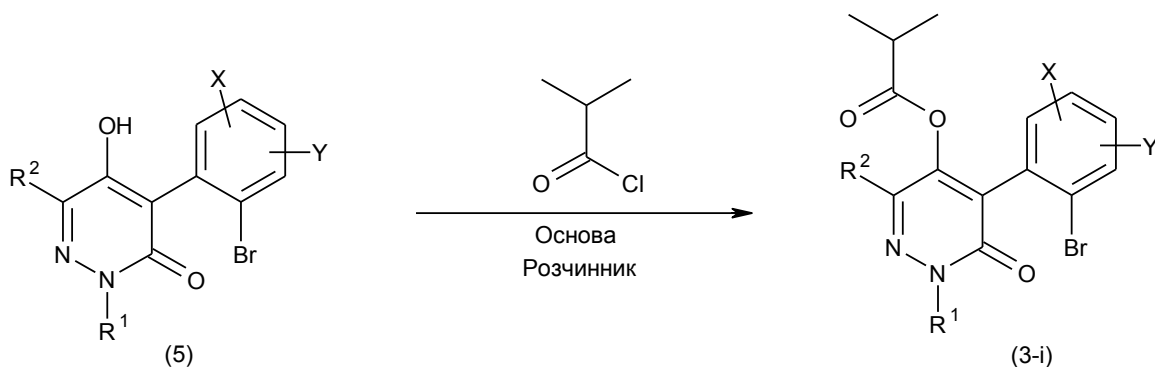
Фахівцю в даній галузі буде зрозуміло, що умови протоколу реакції Сузукі можуть забезпечувати розщеплення естерних груп, отже, схема реакції 2 також може описувати реакцію, де вихідний матеріал (3) містить естерний фрагмент [так що G являє собою ацильну групу], але продукт (2) не містить [так що G являє собою водень].

Протокол реакції Хека

Сполуки (2) можна одержувати шляхом обробки сполук (3) за допомогою сполук (4) у присутності придатної основи та придатного каталізатора за температури від 10 до 150 °С. Необов'язково може бути включений додатковий розчинник. Прикладами придатних основ є триетиламін, морфолін, N-метилморфолін, діізопропілетиламін і піридин. Прикладами придатних каталізаторів є тетракіс(трифенілфосфін)паладій(0) [Pd(PPh₃)₄], каталітична система, утворена in-situ із суміші ацетату паладію(II) і трифенілфосфіну, каталітична система, утворена in-situ із суміші трис(добензиліденацетон)дипаладію(0) і тетрафторборату три-трет-бутилфосфонію, і каталітична система, утворена in-situ із паладієвоциклічного передкаталізатора, такого як хлор[(три-трет-бутилфосфін)-2-(2-амінобіфеніл)]паладій(II). Прикладами необов'язкових додаткових розчинників є 1,4-діоксан, тетрагідрофуран, ацетонітрил і толуол. Багато сполук (4) є комерційно доступними [такі як 2-вінілнафталін] або можуть бути одержані за допомогою відомих способів. Приклади сполук (3), що характеризуються особливою застосовністю в протоколі реакції Хека, являють собою ізобутирилові естери (3-і), де G являє собою ізобутирил.

Сполуки (3-і) можна одержувати зі сполук (5), як показано на схемі реакції 3.

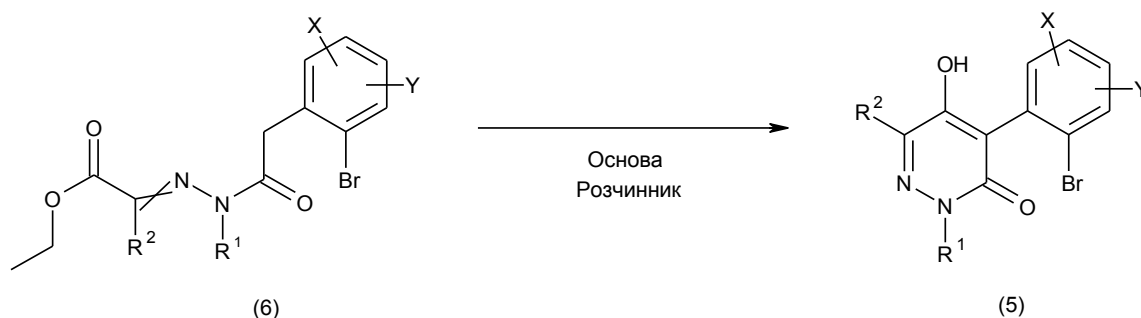
Схема реакції 3



Сполуки (3-i) можна одержувати шляхом обробки сполук (5) за допомогою ізобутирилхлориду в придатному розчиннику [такому як дихлорметан, ацетонітрил або толуол] у присутності придатної основи [такої як триетиламін, діізопропілетиламін або піридин] за температури від -10 до 60 °С. Необов'язково може бути включений каталізатор [такий як 4-(диметиламіно)піридин].

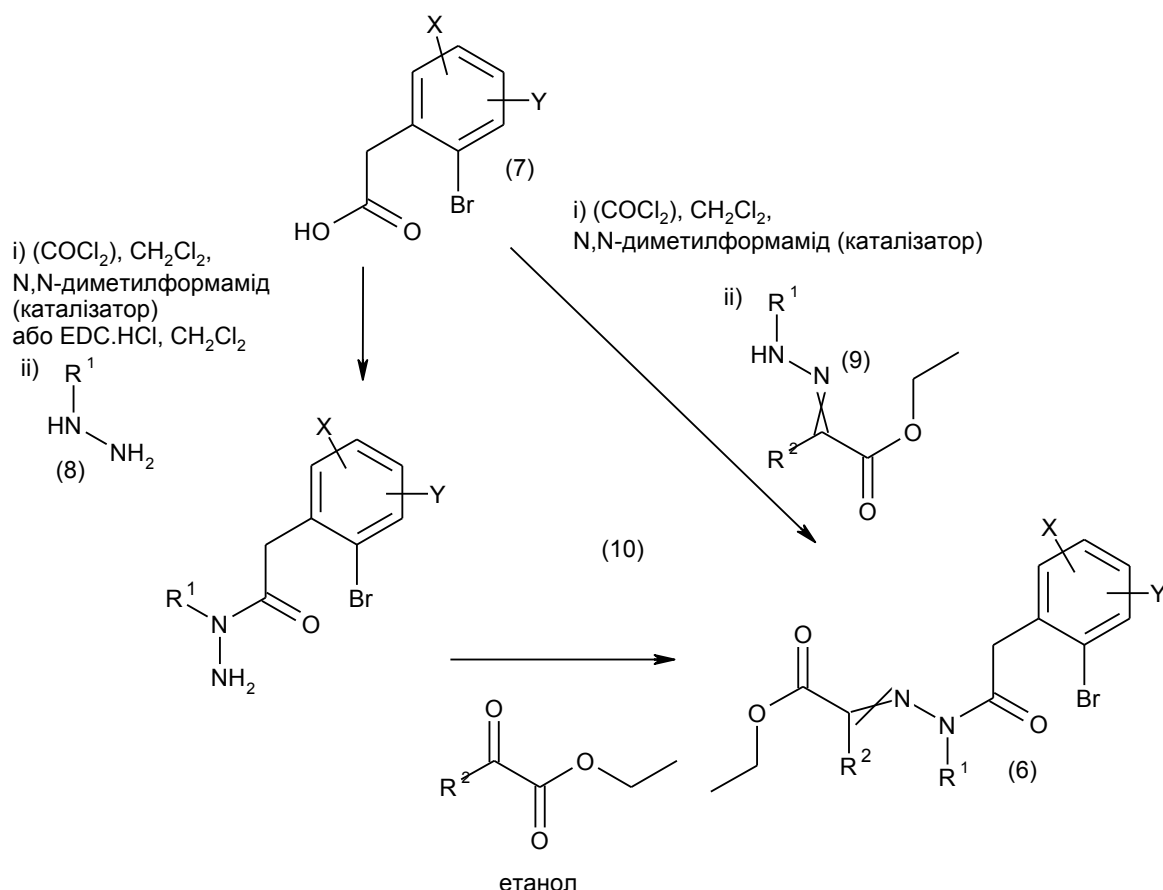
Сполуки (5) можна одержувати зі сполук (6), як показано на схемі реакції 4, шляхом нагрівання сполук (6) з основою (такою як 1,8-діазабіцикло[5.4.0]ундец-7-ен, гексаметилдисилазид натрію або гексаметилдисилазид літію) у розчиннику [такому як ацетонітрил, N,N-диметилформамід або толуол] за температури від 50 до 200 °С. Може застосовуватися традиційне нагрівання або нагрівання за допомогою мікрохвильового випромінювання.

Схема реакції 4



Сполуки (6) можна одержувати з фенілоцтових кислот (7), як показано на схемі реакції 5.

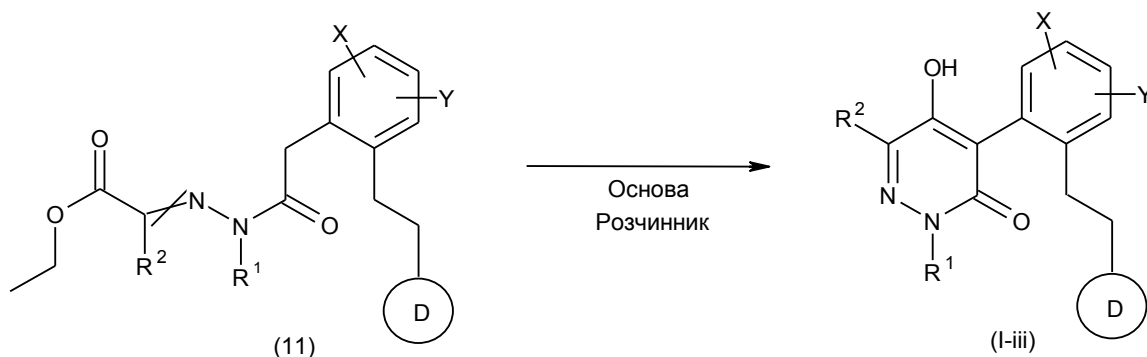
Схема реакції 5



Щодо схеми реакції 5 прикладом гідразинів (8) є метилгідразин, і прикладом кетоестерів (10) є етилпіруват. Прикладом гідразонів (9) є етил(2E/Z)-2-(метилгідразоно)пропаноат, одержаний відповідно до способів, описаних в поданій відповідно до РСТ заявці на патент WO2016/008816. Прикладом фенолоцтових кислот (7) є (2-бром-6-фтор-феніл)оцтова кислота, яка може бути синтезована відповідно до схеми реакції 10. Додатковим прикладом фенолоцтових кислот (7) є (2-бром-3-хлор-6-фтор-феніл)оцтова кислота, яка може бути синтезована відповідно до схеми реакції 11.

Деякі сполуки (I-iii) за даним винаходом можна одержувати зі сполук (11), як показано на схемі реакції 6, або зі сполук (I-iv), як показано на схемі реакції 12. Сполуки (I-iii) являють собою сполуки формули (I), в яких W являє собою $-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$, і G являє собою водень.

Схема реакції 6

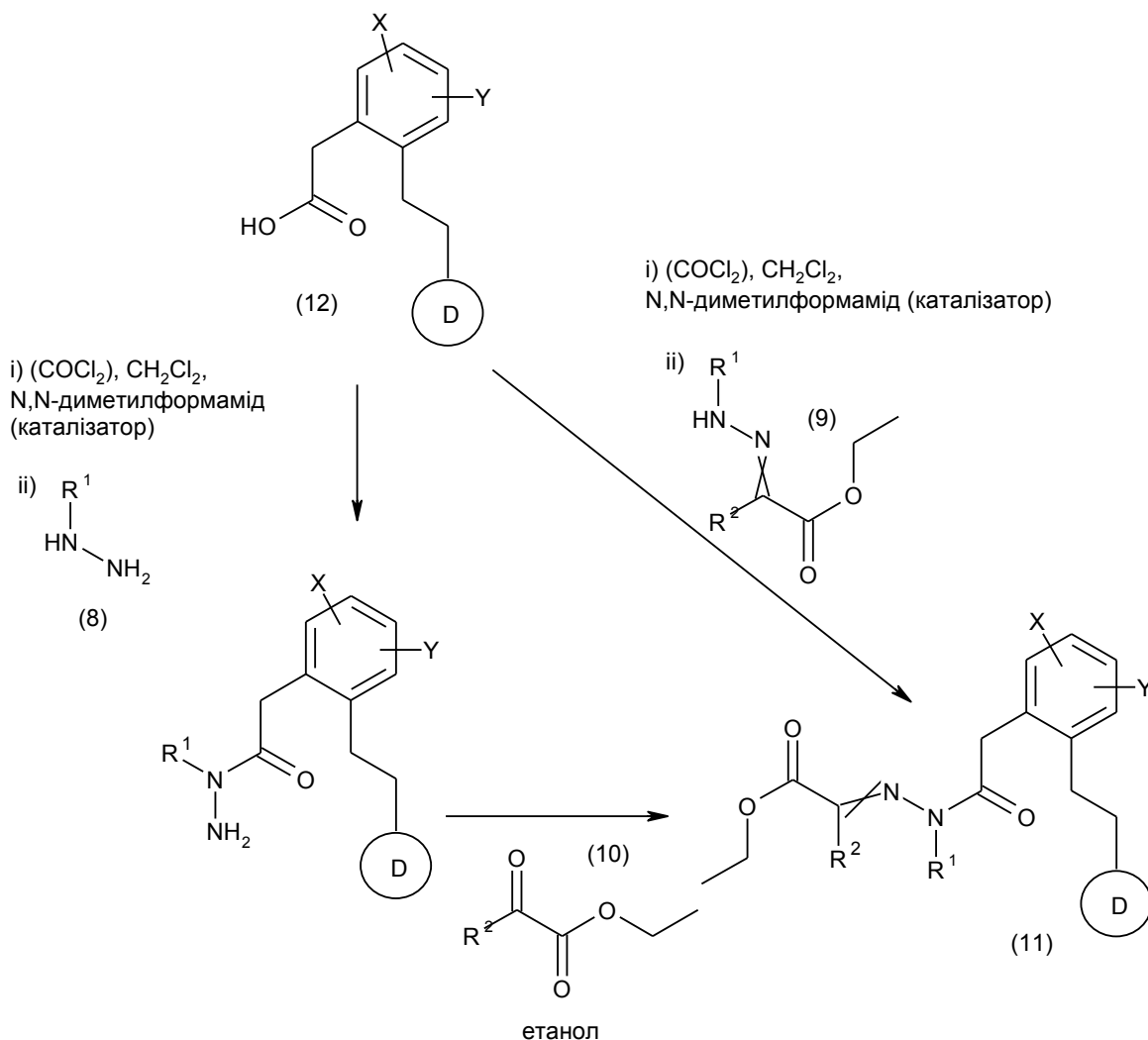


Сполуки (I-iii) можна одержувати шляхом нагрівання сполук (11) з основою (такою як 1,8-діазабіцикло[5.4.0]ундец-7-ен, гексаметилдисилазид натрію або гексаметилдисилазид літію) в розчиннику [такому як ацетонітрil, N,N-диметилформамід або толуол] за температури від 50 до 200 °C. Може застосовуватися традиційне нагрівання або нагрівання за допомогою

мікрохвильового випромінювання.

Сполуки (11) можуть бути одержані зі сполук (12), як показано на схемі реакції 7 нижче.

Схема реакції 7

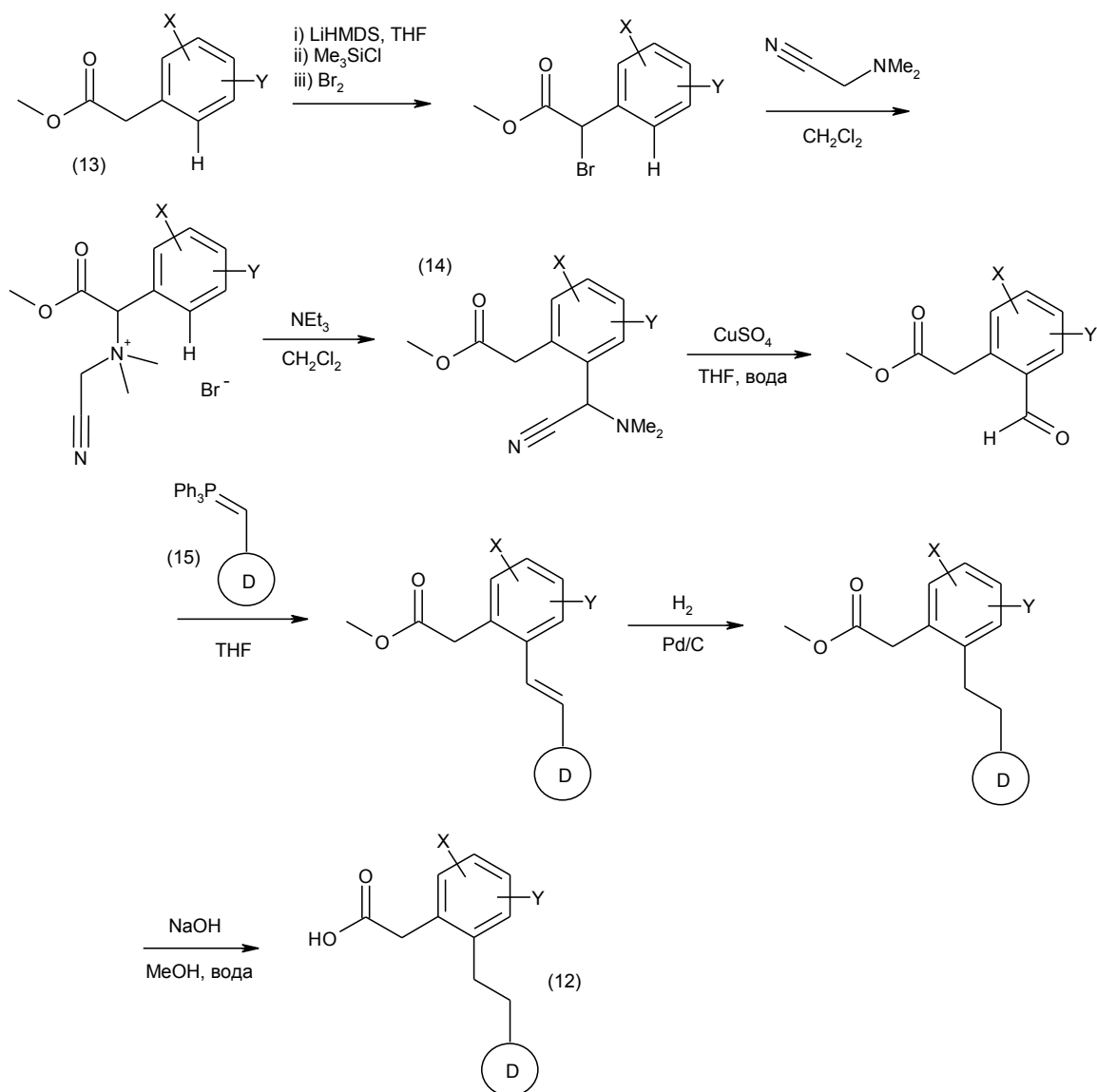


5

Сполуки (12) можна одержувати зі сполук (13), як показано на схемі реакції 8. Багато сполук (13) є комерційно доступними [такі як метил-2-фенілацетат та метил-2-(2-фторфеніл)ацетат].

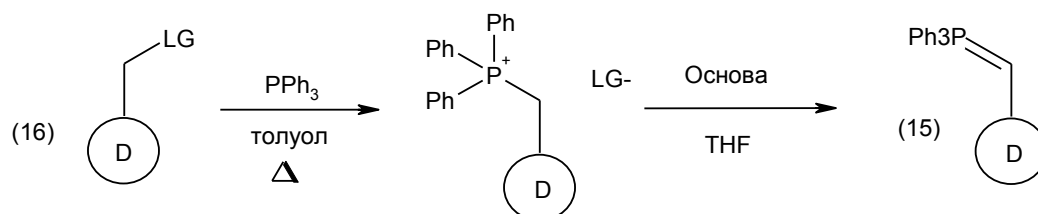
Схема реакції 8

10



Щодо схеми реакції 8, фосфорани (15) можуть бути одержані відповідно до схеми реакції 9.

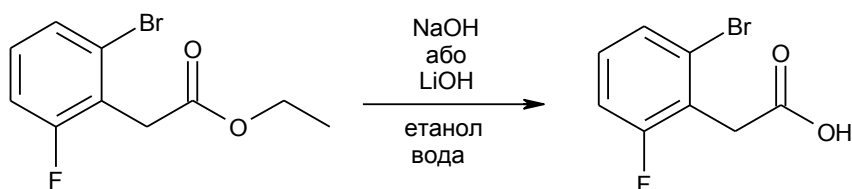
5



Щодо схеми реакції 9 приклади придатних основ являють собою гідрид натрію, гексаметилдисилазид натрію та трет-бутоксид калію. Сполуки (16) являють собою електрофіли, де LG являє собою групу, що відходить [таку як хлорид, бромід, йодид, тозилат або мезилат]. Багато сполук (16) є комерційно доступними [такі як 4-хлорбензилбромід або 2-хлор-5-хлорметилтіазол].

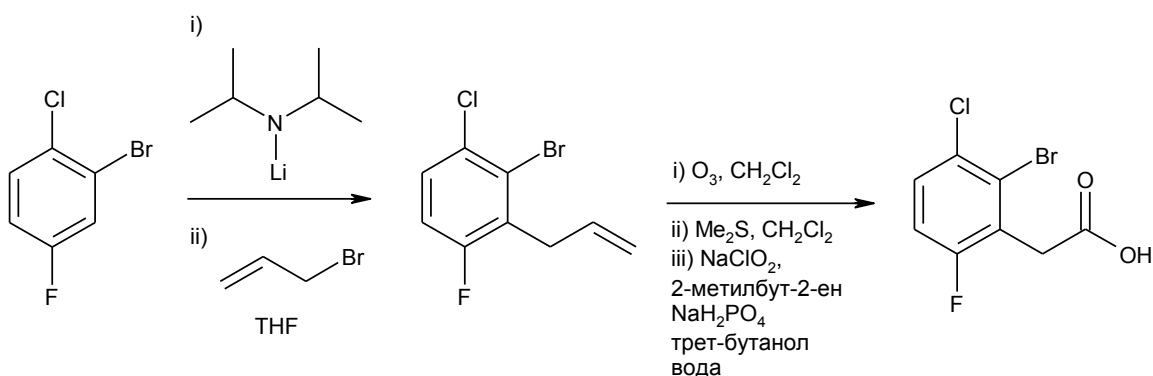
Схема реакції 10

15



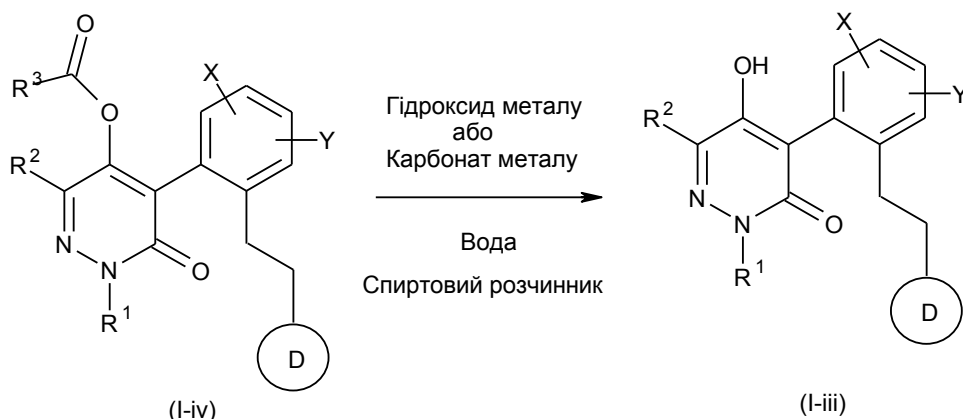
Щодо схеми реакції 10 етиловий естер (2-бром-6-фторфеніл)оцтової кислоти можна одержувати, як описано в Lundgren et al. JACS 2016, 138, 13826-13829.

5 Схема реакції 11



10 Щодо схеми реакції 11, 2-бром-1-хлор-4-фтор-бензол є комерційно доступним.

Схема реакції 12

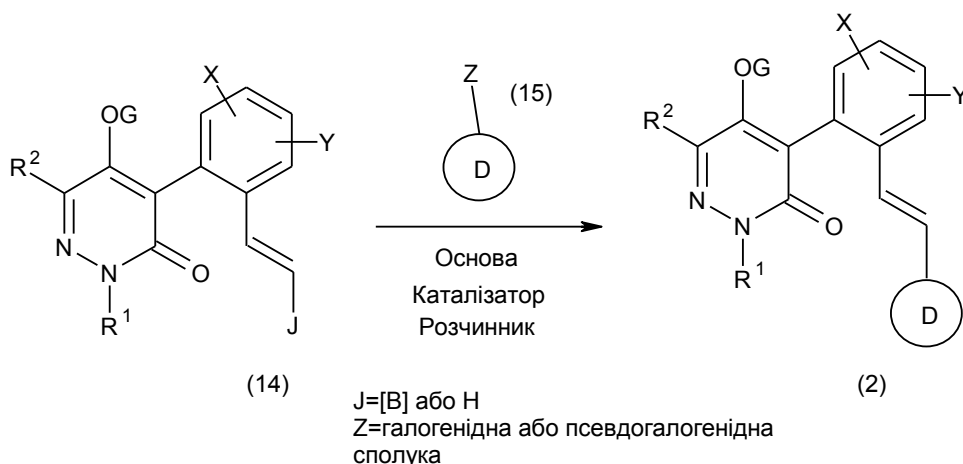


15 Сполуки (I-iii) можуть бути одержані шляхом обробки сполук (I-iv) за допомогою гідроксиду металу [такого як гідроксид натрію, гідроксид літію або гідроксид калію] у суміші води і придатного розчинника [такого як метанол, етанол або тетрагідрофуран]; або шляхом обробки сполук (I-iv) карбонатом металу [таким як карбонат натрію або карбонат калію] в спиртовому розчиннику [такому як метанол або етанол] за температури в діапазоні від 0 °C до 100 °C.

20 Сполуки (I-iv) являють собою сполуки формули (I), в якій W являє собою -CH₂-CH₂-, і G являє собою C(O)R³.

Сполуки (2) можна одержувати зі сполук (14) та сполук (15), як показано на схемі реакції 13, згідно або з описаним протоколом реакції Сузукі, або з описаним протоколом реакції Хека. У разі використання протоколу реакції Сузукі сполуки (14) являють собою борорганічні сполуки, такі як боронові кислоти, боронові естери або солі, що являють собою трифторборат калію, і сполуки (15) являють собою галогенідні або псевдогалогенідні сполуки, такі як хлориди, броміди, йодиди або трифлати. У разі застосування протоколу реакції Хека сполуки (14) являють собою стирили, і сполуки (15) являють собою галогенідні або псевдогалогенідні сполуки, такі як хлориди, броміди, йодиди або трифлати.

30 Схема реакції 13



Протокол реакції Сузукі

Сполуки (2) можна одержувати шляхом обробки сполук (14) за допомогою сполук (15) у присутності придатної основи та придатного каталізатора в придатному розчиннику за температури від 10 до 150 °С. Прикладами придатних основ є карбонат калію, фосфат калію, карбонат натрію, бікарбонат натрію і фторид калію. Прикладами придатних каталізаторів є комплекс 1,1'-біс(дифенілфосфіно)фероцен]дихлорпаладію(II) і дихлорметану [PdCl₂(dppf).DCM], тетракіс(трифенілфосфін)паладій(0) [Pd(PPh₃)₄] і каталітична система, утворена in-situ із суміші ацетату паладію(II) і трифенілфосфіну. Прикладами придатних розчинників є вода, 1,4-діоксан, 2-метилтетрагідрофуран, тетрагідрофуран, ацетонітрил і толуол. Багато сполук (15) є комерційно доступними або можуть бути одержані за допомогою відомих способів. Приклади сполук (14), що характеризуються особливою застосовністю в протоколі реакції Сузукі, являють собою ізобутирилові естери (14-і), де G являє собою ізобутирил.

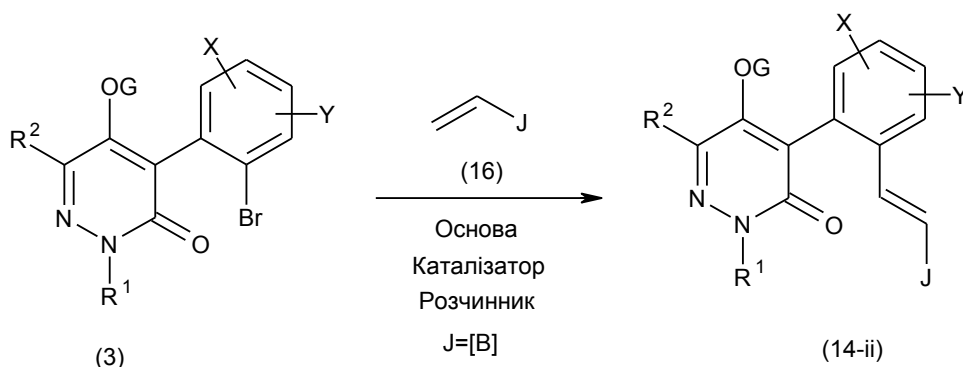
Фахівцю в даній галузі буде зрозуміло, що умови протоколу реакції Сузукі можуть забезпечувати розщеплення естерних груп, отже, схема реакції 13 також може описувати реакцію, де вихідний матеріал (14) містить естерний фрагмент [так що G являє собою ацильну групу], але продукт (2) не містить [так що G являє собою водень].

Протокол реакції Хека

Сполуки (2) можна одержувати шляхом обробки сполук (14) за допомогою сполук (15) у присутності придатної основи та придатного каталізатора за температури від 10 до 150 °С. Необов'язково може бути включений додатковий розчинник. Прикладами придатних основ є триетиламін, морфолін, N-метилморфолін, діізопропілетиламін і піридин. Прикладами придатних каталізаторів є тетракіс(трифенілфосфін)паладій(0) [Pd(PPh₃)₄], каталітична система, утворена in-situ із суміші ацетату паладію(II) і трифенілфосфіну, каталітична система, утворена in-situ із суміші трис(добензиліденацетон)дипаладію(0) і тетрафторборату три-трет-бутилфосфонію, і каталітична система, утворена in-situ з паладієвоциклічного передкаталізатора, такого як хлор[(три-трет-бутилфосфін)-2-(2-амінобіфеніл)]паладій(II). Прикладами необов'язкових додаткових розчинників є 1,4-діоксан, тетрагідрофуран, ацетонітрил і толуол. Багато сполук (15) є комерційно доступними або можуть бути одержані за допомогою відомих способів. Приклади сполук (14), що характеризуються особливою застосовністю в протоколі реакції Хека, являють собою ізобутирилові естери (14-і), де G являє собою ізобутирил.

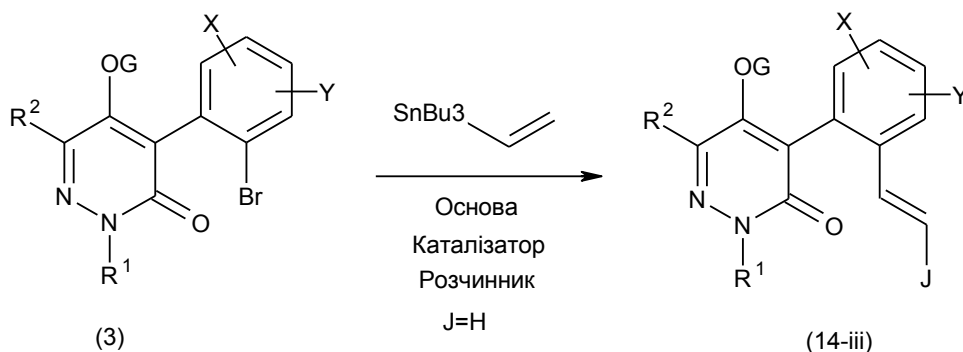
Сполуки (14-ii), де J являє собою бороорганічну сполуку, таку як бороновий естер, можна одержувати зі сполук (3) та сполук (16), як показано на схемі реакції 14.

Схема реакції 14



Сполуки (14-ii) можна одержувати шляхом обробки сполук (3) за допомогою сполук (16) у присутності придатної основи та придатного каталізатора за температури від 10 до 150 °С. Необов'язково може бути включений додатковий розчинник. Прикладами придатних основ є триетиламін, морфолін, N-метилморфолін, діізопропілетиламін і піридин. Прикладами придатних каталізаторів є тетракіс(трифенілфосфін)паладій(0) [Pd(PPh₃)₄], каталітична система, утворена in-situ із суміші ацетату паладію(II) і трифенілфосфіну, і каталітична система, утворена in-situ із суміші трис(дибензиліденацетон)дипаладію(0) і тетрафторборату три-трет-бутилфосфонію. Прикладами необов'язкових додаткових розчинників є 1,4-діоксан, тетрагідрофуран, ацетонітрил і толуол. Багато сполук (16) є комерційно доступними, такі як MIDA-естер вінілборонової кислоти або пінаколовий естер вінілборонової кислоти, або можуть бути одержані за допомогою відомих способів. Приклади сполук (3), що характеризуються особливою застосовністю в протоколі реакції Хека, являють собою ізобутирилові естери (3-i), де G являє собою ізобутирил.

Схема реакції 15

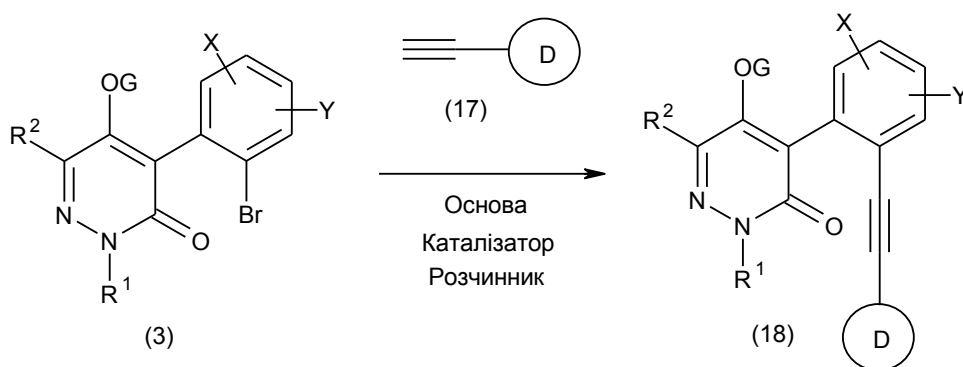


Сполуки (14-iii), де J являє собою водень, може бути одержаний зі сполук (3), як показано в схемі реакції 15 вище.

Сполуки (14-iii) можна одержувати шляхом обробки сполук (3) за допомогою трибутил(вініл)станану необов'язково в присутності придатної основи, у присутності придатного каталізатора за температури від 10 до 150 °С у придатному розчиннику. Прикладами необов'язкових основ є триетиламін, морфолін, N-метилморфолін, діізопропілетиламін і піридин. Прикладами придатних каталізаторів є комплекс 1,1'-біс(дифенілфосфіно)фероцен]дихлорпаладію(II) і дихлорметану [PdCl₂(dppf).DCM], тетракіс(трифенілфосфін)паладій(0) [Pd(PPh₃)₄], каталітична система, утворена in-situ із суміші ацетату паладію(II) і трифенілфосфіну, каталітична система, утворена in-situ із суміші трис(дибензиліденацетон)дипаладію(0) і тетрафторборату три-трет-бутилфосфонію, і каталітична система, утворена in-situ з паладієвоциклічного передкаталізатора, такого як хлор[(три-трет-бутилфосфін)-2-(2-амінобіфеніл)]паладій(II). Прикладами придатних розчинників є 1,4-діоксан, тетрагідрофуран, ацетонітрил і толуол. Прикладами сполук (3), що характеризуються особливою застосовністю, є ізобутирилові естери (3-i), де G являє собою ізобутирил.

Сполуки (18) можна одержувати зі сполук (3) за допомогою реакції Соногашири, як показано на схемі реакції 16.

Схема реакції 16

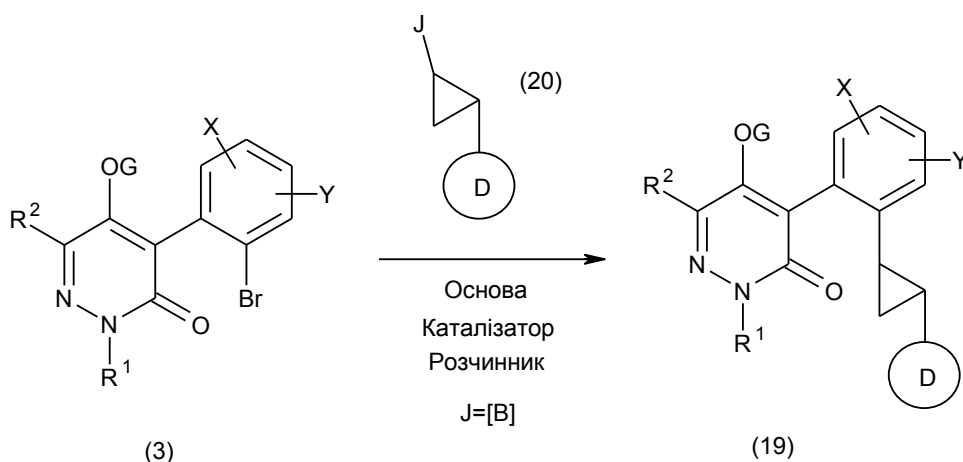


Сполуки (18) можна одержувати шляхом обробки сполук (3) за допомогою сполук (17) у присутності придатної основи та придатного(-их) каталізатора(-ів) за температури від 10 до 150 °С. Необов'язково може бути доданий додатковий розчинник. Прикладами придатних основ є триетиламін, морфолін, N-метилморфолін, діізопропіламін, діізопропілетиламін і піридин. Прикладами придатних каталізаторів є дихлорид біс(трифенілфосфін)паладію(II) [Pd(PPh₃)Cl₂], каталітична система, утворена in-situ із суміші ацетату паладію(II) і трифенілфосфіну, каталітична система, утворена in-situ із суміші трис(добензиліденацетон)дипаладію(0) і тетрафторборату три-трет-бутилфосфонію, і каталітична система, утворена in-situ з паладієвоциклічного передкаталізатора, такого як хлор[(три-трет-бутилфосфін)-2-(2-амінобіфеніл)]паладій(II). Необов'язково також можуть бути додані мідні каталізатори, такі як йодид міді(I). Прикладами придатних додаткових розчинників є 1,4-діоксан, тетрагідрофуран, ацетонітрил, толуол і N,N-диметилформамід. Прикладами сполук (3), що характеризуються особливою застосовністю, є ізобутирилові естери (3-і), де G являє собою ізобутирил.

Фахівцю в даній галузі буде зрозуміло, що умови реакції Соногашири можуть забезпечувати розщеплення естерних груп, отже, схема реакції 16 також може описувати реакцію, де вихідний матеріал (3) містить естерний фрагмент [так що G являє собою ацильну групу], але продукт (18) не містить [так що G являє собою водень].

Сполуки (19) можна одержувати зі сполук (3) та сполук (20), як показано на схемі реакції 17, за допомогою реакції Сузукі, де сполука (20) являє собою придатні борорганічні сполуки, такі як борна кислота, боронатний естер або сіль, що являє собою трифторборат калію.

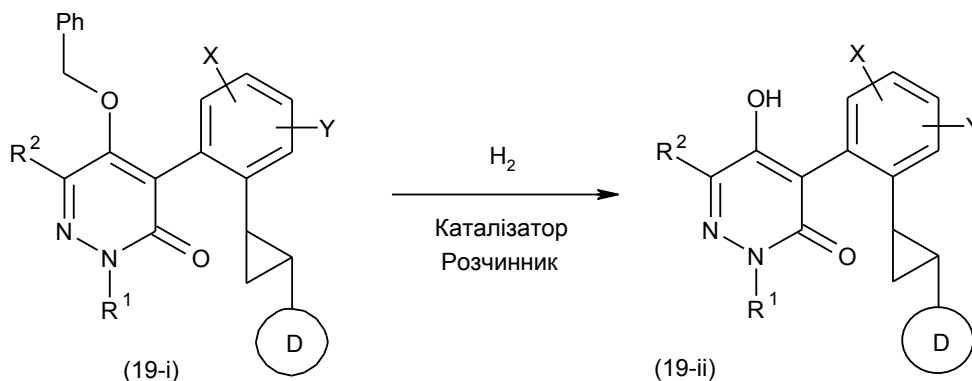
Схема реакції 17



Сполуки (19) можна одержувати шляхом обробки сполук (3) за допомогою сполук (20) у присутності придатної основи та придатного каталізатора в придатному розчиннику за температури від 10 до 150 °С. Прикладами придатних основ є карбонат калію, фосфат калію, карбонат натрію, бікарбонат натрію і фторид калію. Прикладами придатних каталізаторів є комплекс 1,1'-біс(дифенілфосфіно)фероцен]дихлорпаладію(II) і дихлорметану [PdCl₂(dppf).DCM], каталітична система, утворена in-situ із суміші трис(добензиліденацетон)дипаладію(0) і тетрафторборату три-третбутилфосфонію, каталітична система, утворена in-situ із суміші трис(добензиліденацетон)дипаладію(0) і трициклогексилфосфіну, каталітична система, утворена in-situ з паладієвоциклічного

передкаталізатора, такого як хлор[(три-трет-бутилфосфін)-2-(2-амінобіфеніл)]паладій(II), і каталітична система, утворена *in-situ* з паладієвоциклічного передкаталізатора, такого як хлор[(трициклогексилфосфін)-2-(2'-амінобіфеніл)]паладій(II). Прикладами придатних розчинників є вода, 1,4-діоксан, 2-метилтетрагідрофуран, тетрагідрофуран, ацетонітрил і толуол. Деякі сполуки (20) є комерційно доступними або можуть бути одержані за допомогою відомих способів (див., наприклад, способи, описані в Org. Process Res. Dev. 2012, 16, 87–95). Приклади сполук (3), що характеризуються особливою застосовністю в реакції Сузукі, являють собою бензилові естери (3-ii), де G являє собою бензил.

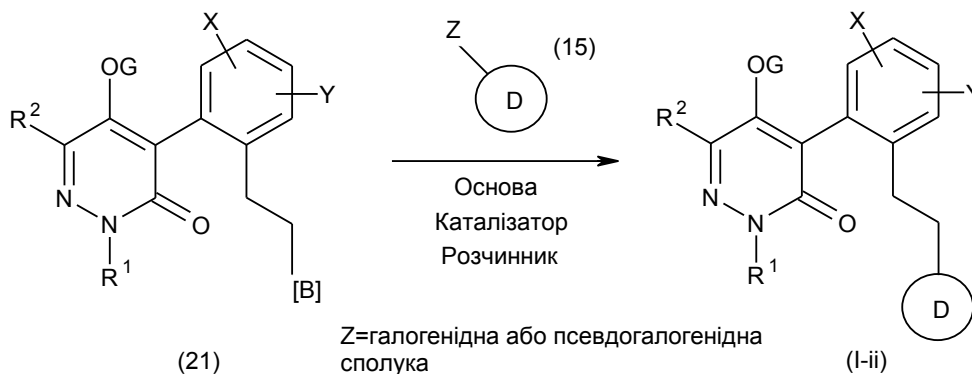
Схема реакції 18



Сполуки (19-ii) можна одержувати шляхом каталітичної гідрогенізації сполук (19-i) за допомогою газоподібного водню в придатному розчиннику [такому як тетрагідрофуран, метанол, етанол, оцтова кислота або етилацетат] у присутності придатного каталізатора [такого як Pd/C, Pd/CaCO₃, Rh/Al₂CO₃ або губчастий нікель] за температури від -10 до 100 °C.

Певні сполуки (I-ii) за даним винаходом можуть бути одержані зі сполук (21), як показано на схемі реакції 19. Сполуки (I-ii) являють собою сполуки формули (I), в якій W являє собою -CH₂-CH₂-.

Схема реакції 19

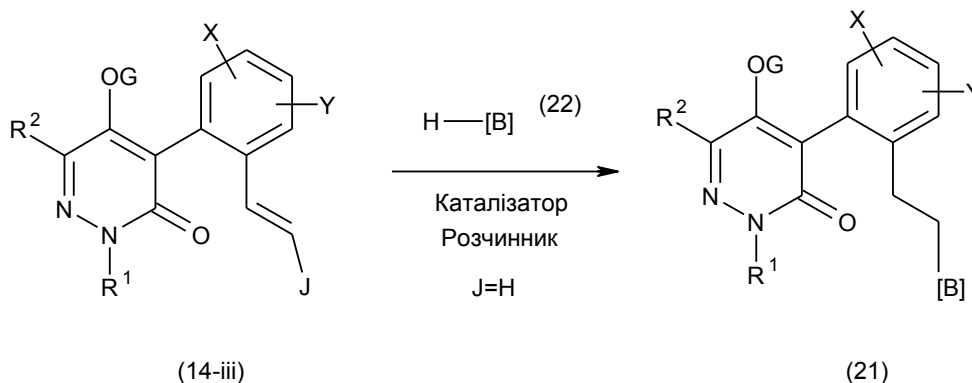


Сполуки (I-ii) можуть бути одержані шляхом обробки сполук (21), де [B] може являти собою триалкілборан, алкілборонову кислоту, естер алкілборонової кислоти або сіль алкілу і трифторборату калію, за допомогою сполук (15) у присутності придатної основи і придатного каталізатора в придатному розчиннику за температури в діапазоні від 10 до 150 °C. Прикладами придатних основ є карбонат калію, фосфат калію, карбонат натрію, карбонат цезію, бікарбонат натрію і фторид калію. Прикладами придатних каталізаторів є комплекс 1,1'-біс(дифенілфосфіно)фероцен]дихлорпаладій(II) і дихлорметану [PdCl₂(dppf).DCM], [1,3-біс(2,6-ди-3-пентилфеніл)імідазол-2-іліден](3-хлорпіридил)дихлорпаладій(II) [Pd-PEPPSI™-IPent], каталітична система, утворена *in-situ* з паладієвоциклічного передкаталізатора, такого як хлор(2-дициклогексилфосфіно-2',6'-диізопропокси-1,1'-біфеніл)[2-(2'-аміно-1,1'-біфеніл)]паладій(II) [RuPhos-Pd-G2], [дициклогексил[2',4',6'-трис(1-метилетил)[1,1'-біфеніл]-2-іл]фосфін](метансульфонато-кО)[2'-(метиламіно-кN)[1,1'-біфеніл]-2-іл-кC]паладій [XPhos-Pd-G4], і [(4-(N,N-диметиламіно)феніл)ди-трет-бутилфосфін](метансульфонато-кО)[2'-(метиламіно-кN)[1,1'-біфеніл]-2-іл-кC]паладій [APhos-Pd-G4]. Прикладами придатних розчинників є вода, 1,4-

діоксан, 2-метилтетрагідрофуран, тетрагідрофуран, ацетонітрил і толуол. Багато сполук (15) є комерційно доступними або можуть бути одержані за допомогою відомих способів. Прикладами сполук (21), що характеризуються особливою застосовністю в протоколі реакції Сузукі, є ізобутирилові естери (21-i), де G являє собою ізобутирил.

Фахівцю в даній галузі буде зрозуміло, що умови протоколу реакції Сузукі можуть забезпечувати розщеплення естерних груп, отже схема реакції 19 також може описувати реакцію, де вихідний матеріал (21) містить естерний фрагмент [так, що G являє собою ацильну групу], а продукт (I-ii) не містить [так, що G являє собою водень].

Схема реакції 20



Сполуки (21) можуть бути одержані шляхом гідроборування алкенів (14-iii) із застосуванням придатних гідроборувальних реагентів (22) в придатному розчиннику з необов'язковим додаванням придатного каталізатора за температури в діапазоні від 0 °C до 100 °C. Приклади гідроборувальних засобів включають боран, дихлорборан, дибромборан, 4,4,5,5-тетраметил-1,3,2-діоксаборолан [пінаколборан], 1,3,2-бензодіоксаборол [катехолборан] або 9-борилбіцикло[3.3.1]нонан [9-BBN]. Приклади придатних розчинників включають тетрагідрофуран, 2-метилтетрагідрофуран, 1,4-діоксан, 2-метокси-2-метилпропан [MTBE] і діетиленер. Приклади придатних каталізаторів включають каталітичну систему, утворену in situ з дихлориду біс(1,5-циклооктадієн)дііридію(I) $[\text{Ir}(\text{COD})\text{Cl}]_2$ і 4-дифенілфосфанілбутил(дифеніл)фосфану [DPPB] [J. Am. Chem. Soc., 2004, 126, 9200-9201].

Якщо [B] являє собою естер алкілборонової кислоти, його можна перетворити у відповідну боронову кислоту шляхом обробки метилбороною кислотою $[\text{MeB}(\text{OH})_2]$ і трифтороцтовою кислотою в придатному розчиннику, такому як дихлорметан [DCM], за температури в діапазоні від 0 до 40 °C [Org. Lett., 2019, 21, 3048-3052]. Якщо [B] являє собою алкілборонову кислоту або її естер, його можна перетворити у відповідну сіль алкілу та трифторборату калію шляхом обробки гідрофторидом калію в придатному розчиннику, такому як метанол або ацетон, за температури в діапазоні від 0 до 40 °C.

Сполуки відповідно до даного винаходу можна застосовувати як гербіцидні засоби в немодифікованій формі, але зазвичай їх різними способами складають у композиції із застосуванням допоміжних речовин для складання, таких як носії, розчинники та поверхнево-активні речовини. Склади можуть перебувати в різних фізичних формах, наприклад, у формі порошків, які розпилюються, гелів, змочуваних порошків, гранул, що диспергуються у воді, таблеток, що диспергуються у воді, шипучих драже, концентратів, здатних до емульгування, концентратів, здатних до утворення мікроемульсій, емульсій типу "масло у воді", масляних плинних складів, водних дисперсій, масляних дисперсій, суспензій, здатних до емульгування гранул, розчинних рідин, водорозчинних концентратів (із водою або змішуванням із водою органічним розчинником як носієм), просочених полімерних плівок або в інших формах, відомих, наприклад, із Manual on Development and Use of FAO and WHO Specifications for Pesticides, United Nations, First Edition, Second Revision (2010). Такі складки можна застосовувати або безпосередньо, або розбавляти перед застосуванням. Розбавлення можна здійснювати, наприклад, за допомогою води, рідких добрив, поживних мікроелементів, біологічних організмів, масла або розчинників.

Склади можна одержувати, наприклад, шляхом змішування активного інгредієнта з допоміжними речовинами для складання з одержанням композицій у формі тонкодисперсних твердих речовин, гранул, розчинів, дисперсій або емульсій. Активні інгредієнти також можна складати з іншими допоміжними речовинами, такими як тонкодисперсні тверді речовини, мінеральні масла, масла рослинного або тваринного походження, модифіковані масла

рослинного або тваринного походження, органічні розчинники, вода, поверхнево-активні речовини або їх комбінації.

Активні інгредієнти також можуть міститися в дуже дрібних мікрокапсулах. Мікрокапсули містять активні інгредієнти в пористому носії. Це забезпечує вивільнення активних інгредієнтів у навколишнє середовище в контрольованих кількостях (наприклад, повільне вивільнення). Мікрокапсули зазвичай мають діаметр від 0,1 до 500 мікронів. Вони містять активні інгредієнти у кількості від приблизно 25 до 95 % за вагою від ваги капсули. Активні інгредієнти можуть знаходитись у формі монолітної твердої речовини, у формі дрібних частинок у твердій або рідкій дисперсії або у формі придатного розчину. Інкапсулювальні мембрани можуть містити, наприклад, природні або синтетичні каучуки, целюлозу, співполімери стиролу й бутадієну, поліакрилонітрил, поліакрилат, поліестери, поліаміди, полісечовини, поліуретан або хімічно модифіковані полімери та ксантати крохмалю або інші полімери, відомі фахівцю в даній галузі техніки. Як альтернатива можуть бути утворені дуже дрібні мікрокапсули, в яких активний інгредієнт міститься у вигляді тонкодисперсних частинок у твердій матриці основної речовини, але власне мікрокапсули не є інкапсульованими.

Допоміжні речовини для складання, які є придатними для одержання композицій згідно з даним винаходом, відомі *per se*. Як рідкі носії можна застосовувати воду, толуол, ксилол, петролейний етер, рослинні масла, ацетон, метилетилкетон, циклогексанон, ангідриди кислот, ацетонітрил, ацетофенон, амілацетат, 2-бутанон, бутиленкарбонат, хлорбензол, циклогексан, циклогексанол, алкілові естери оцтової кислоти, діацетоновий спирт, 1,2-дихлорпропан, діетаноламін, п-діетилбензол, діетиленгліколь, діетиленгліколю абіетат, бутиловий етер діетиленгліколю, етиловий етер діетиленгліколю, метиловий етер діетиленгліколю, N,N-диметилформамід, диметилсульфоксид, 1,4-діоксан, дипропіленгліколь, метиловий етер дипропіленгліколю, дибензоат дипропіленгліколю, дипрокситол, алкілпіролідон, етилацетат, 2-етилгексанол, етиленкарбонат, 1,1,1-трихлоретан, 2-гептанон, альфа-пінен, d-лімонен, етиллактат, етиленгліколь, бутиловий етер етиленгліколю, метиловий етер етиленгліколю, гамма-бутиролактон, гліцерин, ацетат гліцерину, діацетат гліцерину, триацетат гліцерину, гексадекан, гексиленгліколь, ізоамілацетат, ізоборнілацетат, ізооктан, ізофорон, ізопропілбензол, ізопропілміристат, молочну кислоту, лауриламін, мезитилоксид, метоксипропанол, метилізоамілкетон, метилізобутилкетон, метиллаурат, метилоктаноат, метилолеат, метиленхлорид, м-ксилол, н-гексан, н-октиламін, октадеканову кислоту, октиламінацетат, олеїнову кислоту, олеїламін, о-ксилол, фенол, поліетиленгліколь, пропіонову кислоту, пропіллактат, пропіленкарбонат, пропіленгліколь, метиловий етер пропіленгліколю, п-ксилол, толуол, триетилфосфат, триетиленгліколь, ксилолсульфонову кислоту, парафін, мінеральне масло, трихлоретилен, перхлоретилен, етилацетат, амілацетат, бутилацетат, метиловий етер пропіленгліколю, метиловий етер діетиленгліколю, метанол, етанол, ізопропанол і високомолекулярні спирти, такі як аміловий спирт, тетрагідрофурфуриловий спирт, гексанол, октанол, етиленгліколь, пропіленгліколь, гліцерин, N-метил-2-піролідон тощо.

Придатними твердими носіями є, наприклад, тальк, діоксид титану, пірофілітова глина, діоксид кремнію, атапульгітова глина, кізельгур, вапно, карбонат кальцію, бентоніт, кальцієвий монтморилоніт, лущиння насіння бавовнику, пшеничне борошно, соєве борошно, пемза, деревне борошно, подрібнена шкаралупа волоських горіхів, лігнін і подібні речовини.

Велику кількість поверхнево-активних речовин можна успішно застосовувати як у твердих, так і в рідких складах, особливо в таких складах, які можна розводити носієм перед застосуванням. Поверхнево-активні речовини можуть бути аніонними, катіонними, неіоногенними або полімерними, і їх можна застосовувати як емульгатори, змочувальні засоби або суспендувальні засоби для інших цілей. Типові поверхнево-активні речовини включають, наприклад, солі алкілсульфатів, такі як лаурилсульфат діетаноламонію; солі алкіларилсульфонатів, такі як додецилбензолсульфонат кальцію; продукти приєднання алкілфенолу/алкіленоксиду, такі як етоксилат нонілфенолу; продукти приєднання спирту/алкіленоксиду, такі як етоксилат тридецилового спирту; мила, такі як стеарат натрію; солі алкілнафталінсульфонатів, такі як дибутилнафталінсульфонат натрію; діалкілові естери сульфосукцинатних солей, такі як натрій-ди(2-етилгексил)сульфосукцинат; естери сорбіту, такі як сорбітолеат; четвертинні аміни, такі як хлорид лаурилтриметиламонію, поліетиленгліколеві естери жирних кислот, такі як стеарат поліетиленгліколю; блок-співполімери етиленоксиду і пропіленоксиду та солі моно- і діалкілфосфатних естерів; а також додаткові речовини, які описані, наприклад, у McCutcheon's Detergents and Emulsifiers Annual, MC Publishing Corp., Ridgewood New Jersey (1981).

Додаткові допоміжні речовини, які можна застосовувати в пестицидних складах, включають інгібітори кристалізації, модифікатори в'язкості, суспендувальні засоби, барвники,

антиоксиданти, спінювальні засоби, поглиначі світла, допоміжні засоби для змішування, протиспінювальні речовини, комплексоутворювальні засоби, речовини і буфери для нейтралізації та модифікації рН, інгібітори корозії, запашні речовини, змочувальні засоби, підсилювачі поглинання, поживні мікроелементи, пластифікатори, речовини, що сприяють ковзанню, змашувальні речовини, диспергувальні засоби, загусники, засоби, що запобігають замерзанню, мікробіоциди та рідкі і тверді добрива.

Композиції згідно з даним винаходом можуть містити добавку, яка передбачає масло рослинного або тваринного походження, мінеральне масло, алкілові естери таких масел або суміші таких масел і похідних масел. Кількість масляної добавки у композиції згідно з даним винаходом зазвичай становить від 0,01 до 10 % у перерахунку на суміш, що підлягає застосуванню. Наприклад, масляну добавку можна вносити в резервуар обприскувача у необхідній концентрації після одержання суміші для розпилення. Переважні масляні добавки передбачають мінеральні масла або олію рослинного походження, наприклад, ріпакову олію, оливкову олію або соняшникову олію, емульговану рослинну олію, алкілові естери олій рослинного походження, наприклад метилові похідні, або масло тваринного походження, таке як риб'ячий жир або яловиче сало. Переважні масляні добавки містять алкілові естери C_8 - C_{22} жирних кислот, особливо метилові похідні C_{12} - C_{18} жирних кислот, наприклад, метилові естери лауринової кислоти, пальмітинової кислоти та олеїнової кислоти (метиллаурат, метилпальмітат і метилолеат відповідно). Багато з масляних похідних відомі із Compendium of Herbicide Adjuvants, 10th Edition, Southern Illinois University, 2010.

Гербіцидні композиції зазвичай містять від 0,1 до 99 % за вагою, зокрема від 0,1 до 95 % за вагою сполук формули (I) і від 1 до 99,9 % за вагою допоміжної речовини для складання, яка переважно включає від 0 до 25 % за вагою поверхнево-активної речовини. Композиції за даним винаходом зазвичай містять від 0,1 до 99 % за вагою, зокрема від 0,1 до 95 % за вагою сполук за даним винаходом і від 1 до 99,9 % за вагою допоміжної речовини для складання, яка переважно включає від 0 до 25 % за вагою поверхнево-активної речовини. Оскільки комерційні продукти переважно можуть бути складені у вигляді концентратів, то кінцевий споживач зазвичай буде використовувати розбавлені склади.

Норми застосування варіюють у широких межах і залежать від властивостей ґрунту, способу застосування, культурної рослини, шкідника, який підлягає контролю, переважних кліматичних умов та інших факторів, зумовлених способом застосування, часом застосування і цільовою сільськогосподарською культурою. Як загальна настанова, сполуки можна застосовувати за норми від 1 до 2000 л/га, зокрема від 10 до 1000 л/га.

Переважні склади можуть характеризуватися наступними композиціями (ваг. %).

Концентрати, здатні до емульгування:

активний інгредієнт: 1-95 %, переважно 60-90 %;

поверхнево-активна речовина: 1-30 %, переважно 5-20 %

рідкий носій: 1-80 %, переважно 1-35 %

Пилоподібні препарати:

активний інгредієнт: 0,1-10 %, переважно 0,1-5 %

твердий носій: 99,9-90 %, переважно 99,9-99 %

5Суспензійні концентрати:

активний інгредієнт: 5-75 %, переважно 10-50 %

вода: 94-24 %, переважно 88-30 %

45поверхнево-активна речовина: 1-40 %, переважно 2-30 %

Змочувані порошки:

активний інгредієнт: 0,5-90 %, переважно 1-80 %

поверхнево-активна речовина: 0,5-20 %, переважно 1-15 %

твердий носій: 5-95 %, переважно 15-90 %

50Гранули:

активний інгредієнт: 0,1-30 %, переважно 0,1-15 %

твердий носій: 99,5-70 %, переважно 97-85 %

Композиція за даним винаходом може додатково містити щонайменше один додатковий пестицид. Наприклад, сполуки згідно з даним винаходом також можна застосовувати в комбінації з іншими гербіцидами або регуляторами росту рослин. У переважному варіанті здійснення додатковим пестицидом є гербіцид та/або антидот гербіциду.

Таким чином, сполуки формули (I) можуть використовуватися в комбінації з одним або декількома іншими гербіцидами із одержанням різних гербіцидних сумішей. Конкретні приклади таких сумішей включають (де "I" являє собою сполуку формули (I)): I + ацетохлор; I + ацифлуорфен (у тому числі ацифлуорфен-натрій); I + аклоніфен; I + аметрин; I + амікарбазон; I

- + амінопіралід; I + аминотриазол; I + атразин; I + бефлубутамід-М; I + бенквітріон; I + бенсульфурон (у тому числі бенсульфурон-метил); I + бентазон; I + біциклопірон; I + біланафос; I + біспірибак-натрій; I + бікслозон; I + бромацил; I + бромоксиніл; I + бутахлор; I + бутафенацил; I + карфентразон (у тому числі карфентразон-етил); I + клорансулам (у тому числі клорансулам-метил); I + хлоримурон (у тому числі хлоримурон-етил); I + хлортолурон; I + хлорсульфурон; I + цинметилін; I + клацифос; I + клетодим; I + клодинафоп (у тому числі клодинафоп-пропаргіл); I + кломазон; I + клопіралід; I + циклопіраніл; I + циклопіриморат; I + циклосульфамурон; I + цигалофоп (у тому числі цигалофоп-бутил); I+2,4-D (у тому числі її холінову сіль і 2-етилгексиловий естер); I+2,4-DB; I + десмедифам; I + дикамба (у тому числі алюміній, амінопропіл, біс-амінопропілметил, холін, дихлорпроп, диглікольамін, диметиламін, диметиламоній, їх калієві та натрієві солі); I + диклосулам; I + дифлуфенікан; I + дифлуфензопір; I + диметахлор; I + диметенамід-Р; I + дикват дибромід; I + діурон; I + епіріфенацил; I + еталфлуралін; I + етофумезат; I + феноксапроп (у тому числі феноксапроп-Р-етил); I + феноксасульфон; I + фенквінотрион; I + фентразамід; I + флазасульфурон; I + флорасулам; I + флорпірауксифен (у тому числі флорпірауксифен-бензил); I + флуазифоп (у тому числі флуазифоп-Р-бутил); I + флукарбазон (у тому числі флукарбазон-натрій); I + флуфенацет; I + флуметсулам; I + флуміоксазин; I + флуометурон; I + флупірсульфурон (у тому числі флупірсульфурон-метил-натрій); I + флуороксіпір (у тому числі флуороксіпір-мептил); I + фомесафен; I + форамсульфурон; I + глюфосинат (у тому числі його амонієва сіль); I + гліфосат (у тому числі його діамонієві, ізопропіламонієві та калієві солі); I + галауксифен (у тому числі галауксифен-метил); I + галоксифоп (у тому числі галоксифоп-метил); I + гексазинон; I + гідантоцидин; I + імазамокс; I + імазапик; I + імазапір; I + імазетапір; I + індазифлам; I + йодосульфурон (у тому числі йодосульфурон-метил-натрій); I + іофенсульфурон (у тому числі іофенсульфурон-натрій); I + іоксиніл; I + ізопротурон; I + ізоксафлютол; I + ланкотрион; I+MCPA; I+MCPB; I + мекопроп-Р; I + мезосульфурон (у тому числі мезосульфурон-метил); I + мезотрион; I + метамітрон; I + метазахлор; I + метіозолін; I + метолахлор; I + метосулам; I + метрибузин; I + метсульфурон; I + напропамід; I + нікосульфурон; I + норфлуразон; I + оксадіазон; I + оксасульфурон; I + оксифлуорфен; I + паракват дихлорид; I + пендиметалін; I + пеноксиулам; I + фенмедифам; I + піхлорам; I + піноксаден; I + претилахлор; I + примісульфурон-метил; I + прометрин; I + пропаніл; I + пропаквізафоп; I + пропірисульфурон; I + пропізамід; I + просульфокарб; I + просульфурон; I + піраклоніл; I + пірафлуфен (у тому числі пірафлуфен-етил); I + пірасульфотол; I + піридат; I + пірифталід; I + піримісульфан; I + піроксасульфон; I + піроксулам; I + квінклорак; I + квінмерак; I + квізалофоп (у тому числі квізалофоп-Р-етил і квізалофоп-Р-тефурил); I + римсульфурон; I + сафлуфенацил; I + сетоксидим; I + симазин; I+S-металохлор; I + сульфентразон; I + сульфосульфурон; I + тебутіурон; I + тефурилтрион; I + темботрион; I + тербутилазин; I + тербутрин; I + тетфлупіролімет; I + тіенкарбазон; I + тифенсульфурон; I + тіафенацил; I + толпіралат; I + топрамезон; I + тралкоксидим; I + триафамон; I + триалат; I + триасульфурон; I + трибенурон (у тому числі трибенурон-метил); I + трихлопір; I + трифлорксисульфурон (у тому числі трифлорксисульфурон-натрій); I + трифлудимоксазин; I + трифлуралін; I + трифлусульфурон; I + етиловий естер 3-(2-хлор-4-фтор-5-(3-метил-2,6-діоксо-4-трифторметил-3,6-дигідропіримідин-1(2H)-іл)феніл)-5-метил-4,5-дигідроізоксазол-5-карбонової кислоти; I+4-гідрокси-1-метокси-5-метил-3-[4-(трифторметил)-2-піридил]імідазолідин-2-он; I+4-гідрокси-1,5-диметил-3-[4-(трифторметил)-2-піридил]імідазолідин-2-он; I+5-етокси-4-гідрокси-1-метил-3-[4-(трифторметил)-2-піридил]імідазолідин-2-он; I+4-гідрокси-1-метил-3-[4-(трифторметил)-2-піридил]імідазолідин-2-он; I+4-гідрокси-1,5-диметил-3-[1-метил-5-(трифторметил)піразол-3-іл]імідазолідин-2-он; I + (4R)1-(5-трет-бутилізоксазол-3-іл)-4-етокси-5-гідрокси-3-метил-імідазолідин-2-он; I+3-[2-(3,4-диметоксифеніл)-6-метил-3-оксо-піридазин-4-карбоніл]біцикло[3.2.1]октан-2,4-діон; I+2-[2-(3,4-диметоксифеніл)-6-метил-3-оксо-піридазин-4-карбоніл]-5-метил-циклогексан-1,3-діон; I+2-[2-(3,4-диметоксифеніл)-6-метил-3-оксо-піридазин-4-карбоніл]циклогексан-1,3-діон; I+2-[2-(3,4-диметоксифеніл)-6-метил-3-оксо-піридазин-4-карбоніл]-5,5-диметил-циклогексан-1,3-діон; I+6-[2-(3,4-диметоксифеніл)-6-метил-3-оксо-піридазин-4-карбоніл]-2,2,4,4-тетраметил-циклогексан-1,3,5-трион; I+2-[2-(3,4-диметоксифеніл)-6-метил-3-оксо-піридазин-4-карбоніл]-5-етил-циклогексан-1,3-діон; I+2-[2-(3,4-диметоксифеніл)-6-метил-3-оксо-піридазин-4-карбоніл]-4,4,6,6-тетраметил-циклогексан-1,3-діон; I+2-[6-циклопропіл-2-(3,4-диметоксифеніл)-3-оксо-піридазин-4-карбоніл]-5-метил-циклогексан-1,3-діон; I+3-[6-циклопропіл-2-(3,4-диметоксифеніл)-3-оксо-піридазин-4-карбоніл]біцикло[3.2.1]октан-2,4-діон; I+2-[6-циклопропіл-2-(3,4-диметоксифеніл)-3-оксо-піридазин-4-карбоніл]-5,5-диметил-циклогексан-1,3-діон; I+6-[6-циклопропіл-2-(3,4-диметоксифеніл)-3-оксо-піридазин-4-карбоніл]-2,2,4,4-тетраметил-циклогексан-1,3,5-трион; I+2-[6-циклопропіл-2-(3,4-диметоксифеніл)-3-оксо-піридазин-4-карбоніл]циклогексан-1,3-діон; I+4-[2-

(3,4-диметоксифеніл)-6-метил-3-оксо-піридазин-4-карбоніл]-2,2,6,6-тетраметил-тетрагідропіран-3,5-діон; I+4-[6-циклопропіл-2-(3,4-диметоксифеніл)-3-оксо-піридазин-4-карбоніл]-2,2,6,6-тетраметил-тетрагідропіран-3,5-діон; I+4-аміно-3-хлор-5-фтор-6-(7-фтор-1H-індол-6-іл)піридин-2-карбонова кислота (у тому числі її агрохімічно прийнятні естери, наприклад, метил-4-аміно-3-хлор-5-фтор-6-(7-фтор-1H-індол-6-іл)піридин-2-карбоксилат, проп-2-ініл 4-аміно-3-хлор-5-фтор-6-(7-фтор-1H-індол-6-іл)піридин-2-карбоксилат і ціанометил-4-аміно-3-хлор-5-фтор-6-(7-фтор-1H-індол-6-іл)піридин-2-карбоксилат); I+3-етилсульфаніл-N-(1,3,4-оксадіазол-2-іл)-5-(трифторметил)-[1,2,4]триазоло[4,3-а]піридин-8-карбоксамід; I+3-(ізопропілсульфанілметил)-N-(5-метил-1,3,4-оксадіазол-2-іл)-5-(трифторметил)-[1,2,4]триазоло[4,3-а]піридин-8-карбоксамід; I+3-(ізопропілсульфонілметил)-N-(5-метил-1,3,4-оксадіазол-2-іл)-5-(трифторметил)-[1,2,4]триазоло[4,3-а]піридин-8-карбоксамід; I+3-(етилсульфонілметил)-N-(5-метил-1,3,4-оксадіазол-2-іл)-5-(трифторметил)-[1,2,4]триазоло[4,3-а]піридин-8-карбоксамід; I + етил-2-[[3-[[3-хлор-5-фтор-6-[3-метил-2,6-діоксо-4-(трифторметил)піримідин-1-іл]-2-піридил]окси]ацетат; I+6-хлор-4-(2,7-диметил-1-нафтил)-5-гідрокси-2-метил-піридазин-3-он; I+1-[2-хлор-6-(5-хлорпіримідин-2-іл)окси-феніл]-4,4,4-трифтор-бутан-1-он і I+5-[2-хлор-6-(5-хлорпіримідин-2-іл)окси-феніл]-3-(дифторметил)ізоксазол. Компоненти, змішувані зі сполукою формули (I), можуть також перебувати у формі естерів або солей, як згадується, наприклад, у The Pesticide Manual, Fourteenth Edition, British Crop Protection Council, 2006.

Сполуку формули (I) також можна застосовувати в сумішах з іншими агрохімічними засобами, такими як фунгіциди, нематодици або інсектициди, приклади яких наведені в The Pesticide Manual.

Співвідношення в суміші сполуки формули (I) і змішуваного компонента переважно становить від 1:100 до 1000:1.

Суміші переважно можна застосовувати у вказаних вище складах (у цьому разі "активний інгредієнт" стосується відповідної суміші сполуки формули (I) зі змішуваним компонентом).

Сполуки формули (I) за даним винаходом можуть також бути об'єднані з антидотами гербіцидів. Переважні комбінації (де "I" являє собою сполуку формули (I)) включають: I + беноксакор, I + клоквінтосет (у тому числі клоквінтосет-мексил); I + ципросульфамід; I + дихлормід; I + фенхлоразол (у тому числі фенхлоразол-етил); I + фенклорим; I + флуксофенім; I+ фурилазол I + ізоксадифен (у тому числі ізоксадифен-етил); I + мефенпір (у тому числі мефенпір-діетил); I + меткаміфен; I+N-(2-метоксибензоїл)-4-[(метиламінокарбоніл)аміно]бензолсульфонамід та I + оксабетриніл.

Зокрема, переважними є суміші сполуки формули (I) із ципросульфамідом, ізоксадифеном (у тому числі ізоксадифен-етилом), клоквінтосетом (у тому числі клоквінтосет-мексилом) та/або N-(2-метоксибензоїл)-4-[(метиламінокарбоніл)аміно]бензолсульфонамідом.

Антидоти сполуки формули I також можуть перебувати у формі естерів або солей, як згадується, наприклад, у The Pesticide Manual, 14th Edition (BCPC), 2006. Посилання на клоквінтосет-мексил також стосується його солі з літієм, натрієм, калієм, кальцієм, магнієм, алюмінієм, залізом, амонієм, четвертинним амонієм, сульфонієм або фосфонієм, як розкрито у WO 02/34048, а посилання на фенхлоразол-етил також стосується фенхлоразолу тощо.

Переважно співвідношення у суміші сполуки формули (I) та антидоту становить від 100:1 до 1:10, зокрема від 20:1 до 1:1.

Суміші переважно можна застосовувати у вказаних вище складах (у цьому разі вираз "активний інгредієнт" означає відповідну суміш сполуки формули (I) з антидотом).

Сполуки формули (I) за даним винаходом є застосовним як гербіциди. Отже, у даному винаході додатково передбачений спосіб контролю небажаних рослин, який включає застосування щодо вказаних рослин або місця зростання, в якому вони містяться, ефективною кількості сполуки за даним винаходом або гербіцидної композиції, яка містить указану сполуку. "Контроль" означає знищення, зменшення або вповільнення росту або запобігання проростанню або зменшення проростання. Зазвичай рослинами, що підлягають контролю, є небажані рослини (бур'яни). "Місце зростання" означає територію, на якій рослини зростають або будуть зростати.

Норми застосування сполук формули (I) можуть варіювати в широких межах і залежать від властивостей ґрунту, способу застосування (досходового; післясходового; застосування щодо борозни для насіння; застосування у разі безорної обробки тощо), культурної рослини, бур'яну(бур'янів), що підлягає(підлягають) контролю, переважних кліматичних умов та інших факторів, що визначаються способом застосування, часом застосування та цільовою сільськогосподарською культурою. Сполуки формули (I) відповідно до даного винаходу зазвичай застосовують за норми від 10 до 2000 г/га, зокрема від 50 до 1000 г/га.

Застосування зазвичай здійснюють шляхом розпилювання композиції зазвичай за

допомогою встановленого на тракторі обприскувача для великих площ, але також можна застосовувати й інші способи, такі як обпилювання (для порошоків), краплинний полив або зрошення.

Корисні рослини, щодо яких можна застосовувати композицію згідно з даним винаходом, включають сільськогосподарські культури, такі як зернові, наприклад ячмінь і пшениця, бавовник, олійний ріпак, соняшник, маїс, рис, соя, цукровий буряк, цукрова тростина та дерновий покрив.

Культурні рослини можуть також включати дерева, такі як плодові дерева, пальмові дерева, кокосові пальми або інші горіхоплідні культури. Також включені виткі рослини, такі як виноград, плодові кущі, плодові рослини й овочеві культури.

Слід розуміти, що сільськогосподарські культури також включають такі сільськогосподарські культури, яким надали толерантності до гербіцидів або класів гербіцидів (наприклад, ALS-, GS-, EPSPS-, PPO-, ACCСаза- та HPPD-інгібітори) за допомогою традиційних способів селекції або за допомогою генної інженерії. Прикладом сільськогосподарської культури, якій надали толерантності до імідазолінонів, наприклад імазамоксу, за допомогою традиційних способів селекції, є капуста польова Clearfield® (канола). Приклади сільськогосподарських культур, яким надали толерантності до гербіцидів за допомогою способів генної інженерії, включають, наприклад, сорти маїсу, стійкі до гліфосату та глюфосинату, комерційно доступні під товарними знаками RoundupReady® і LibertyLink®.

Під сільськогосподарськими культурами також слід розуміти ті, яким за допомогою способів генної інженерії було надано стійкості до шкідливих комах, наприклад, Bt-маїс (стійкий до метелика кукурудзяного), Bt-бавовник (стійкий до довгоносика бавовняного), а також різновиди Bt-картоплі (стійкі до колорадського жука). Прикладами Bt-маїсу є гібриди маїсу Bt 176 NK® (Syngenta Seeds). Токсин Bt являє собою білок, який у природі утворюють ґрунтові бактерії *Bacillus thuringiensis*. Приклади токсинів або трансгенних рослин, здатних синтезувати такі токсини, описані в EP-A-451878, EP-A-374753, WO 93/07278, WO 95/34656, WO 03/052073 та EP-A-427529. Прикладами трансгенних рослин, що містять один або декілька генів, які кодують стійкість до комах, та експресують один або декілька токсинів, є KnockOut® (маїс), Yield Gard® (маїс), NuCOTIN33B® (бавовник), Bollgard® (бавовник), NewLeaf® (різновиди картоплі), NatureGard® і Protexcta®. Рослинні культури або їхній насіннєвий матеріал можуть бути стійкими до гербіцидів і водночас стійкими до поїдання комахами (трансгенні об'єкти з "пакетованими" генами). Наприклад, насіння може мати здатність експресувати інсектицидний білок Cry3 та водночас бути толерантним до гліфосату.

Також слід розуміти, що сільськогосподарські культури включають ті, які одержані традиційними способами селекції або генної інженерії та мають так звані привнесені ознаки (наприклад, поліпшену стабільність під час зберігання, вищу поживну цінність та поліпшений смак).

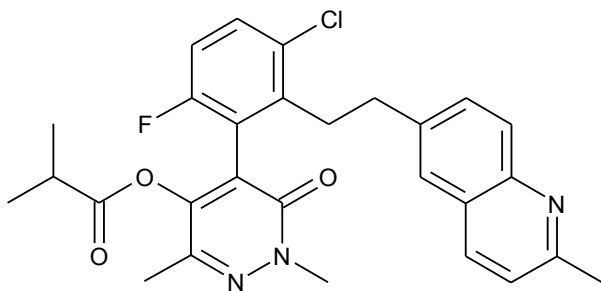
Інші корисні рослини включають газонну траву, наприклад на майданчиках для гольфу, галявинах, у парках і на узбіччях доріг або комерційно вирощувану для газону, та декоративні рослини, такі як квіти або чагарники.

Сполуки формули (I) і композиції за даним винаходом зазвичай можна застосовувати для контролю великої різноманітності однодольних і дводольних видів бур'янів. Приклади видів, що належать до однодольних, які зазвичай можна контролювати, включають *Alopecurus myosuroides*, *Avena fatua*, *Brachiaria plantaginea*, *Bromus tectorum*, *Cyperus esculentus*, *Digitaria sanguinalis*, *Echinochloa crus-galli*, *Lolium perenne*, *Lolium multiflorum*, *Panicum miliaceum*, *Poa annua*, *Setaria viridis*, *Setaria faberi* та *Sorghum bicolor*. Приклади видів, що належать до дводольних, які можна контролювати, включають *Abutilon theophrasti*, *Amaranthus retroflexus*, *Bidens pilosa*, *Chenopodium album*, *Euphorbia heterophylla*, *Galium aparine*, *Ipomoea hederacea*, *Kochia scoparia*, *Polygonum convolvulus*, *Sida spinosa*, *Sinapis arvensis*, *Solanum nigrum*, *Stellaria media*, *Veronica persica* та *Xanthium strumarium*. Бур'яни також можуть включати рослини, які можна вважати культурними рослинами, але які виростають за межами посівної площі ("втікачі") або які виростають із насіння, що залишилося від попереднього посіву іншої сільськогосподарської культури ("рослини-самосіви"). Такі "рослини-самосіви" або "втікачі" можуть бути толерантними щодо певних інших гербіцидів.

Різні аспекти та варіанти здійснення даного винаходу далі будуть більш докладно проілюстровані за допомогою прикладу. Слід розуміти, що можна здійснювати модифікацію деяких подробиць без відхилення від обсягу даного винаходу.

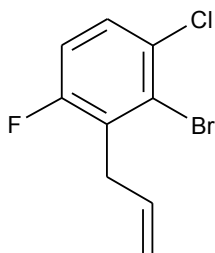
ПРИКЛАДИ ОДЕРЖАННЯ

Приклад 1. Одержання [5-[3-хлор-6-фтор-2-[2-(2-метил-6-хіноліл)етил]феніл]-1,3-диметил-6-оксо-піридазин-4-іл]-2-метилпропаноату (A-3.034)



1.1 3-Аліл-2-бром-1-хлор-4-фтор-бензол

- 5 Розчин діізопропіламіду літію (2 М у тетрагідрофурані, 3,6 мл, 7,2 ммоль) охолоджували до -78 °С в атмосфері N₂. Розчин 2-бром-1-хлор-4-фторбензолу (1,0 г, 4,8 ммоль) у тетрагідрофурані по краплях додавали за -78 °С. Суміш перемішували протягом 45 хвилин за такої ж температури перед обробкою алілбромідом (0,3 мл, 5,7 ммоль). Забезпечували продовження реакції за -78 °С протягом 2 год., потім забезпечували нагрівання до к. т. Реакцію
- 10 гасили за допомогою нас. розчину NH₄Cl (водн.) та екстрагували етилацетатом. Органічні речовини відокремлювали та залишали, потім промивали сольовим розчином. Органічні речовини висушували над сульфатом натрію та концентрували за зниженого тиску з одержанням 3-аліл-2-бром-1-хлор-4-фторбензолу (1,2 г, 100 %) у вигляді масла.



15

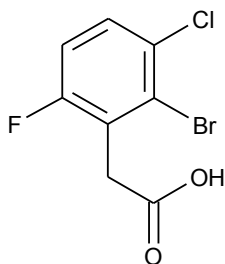
¹H ЯМР (400 МГц, CDCl₃) δ_H: 7,34-7,30 (m, 1H), 7,01-6,96 (m, 1H), 5,94-5,83 (m, 1H), 5,10-5,00 (m, 2H), 3,64-3,58 (m, 2H).

1.2 2-(2-Бром-3-хлор-6-фтор-феніл)оцтова кислота

- 20 Розчин 3-аліл-2-бром-1-хлор-4-фторбензолу (15,0 г, 60,1 ммоль) у дихлорметані (200 мл) у 2-горлій колбі охолоджували до -78 °С. Горло з одного боку з'єднували з пасткою, що містить водний розчин KI. Через розчин барботували озон, поки вихідний матеріал не був повністю витрачений (5 годин). Через розчин протягом 10 хвилин барботували повітря для видалення надлишку озону. Додавали диметилсульфід (44 мл, 601 ммоль) і забезпечували нагрівання
- 25 суміші до к. т. Забезпечували продовження реакції протягом 16 год. за к. т.

Суміш промивали сольовим розчином (2×100 мл) та органічний шар залишали. Органічні речовини висушували над Na₂SO₄, фільтрували та концентрували за зниженого тиску з одержанням неочищеного 2-(2-бром-3-хлор-6-фторфеніл)ацетальдегіду (15,3 г), який застосовували для наступної стадії без додаткового очищення.

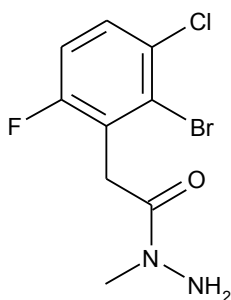
- 30 Неочищений 2-(2-бром-3-хлор-6-фторфеніл)ацетальдегід (15,3 г, 60,8 ммоль) розчиняли в суміші трет-бутанолу (92 мл) та води (46 мл), потім охолоджували до 0 °С. Додавали 2-метилбут-2-ен (64,5 мл, 608 ммоль), дигідрофосфат натрію (34,6 г, 243 ммоль) і хлорит натрію (16,5 г, 163 ммоль). Суміш перемішували протягом 2 год., потім розбавляли сольовим розчином (150 мл) та 2 М хлористоводневою кислотою (150 мл). Суміш екстрагували етилацетатом
- 35 (3×100 мл). Об'єднані органічні екстракти промивали насиченим водним розчином метабісульфіту натрію (100 мл), потім висушували над Na₂SO₄, фільтрували та концентрували за зниженого тиску з одержанням біло-жовтої твердої речовини. Неочищену тверду речовину розчиняли в суміші води (100 мл) і 2,0 М NaOH (30 мл). Водний розчин промивали етилацетатом (100 мл), а органічні речовини видаляли. Водний шар підкислювали шляхом
- 40 додавання концентрованої хлористоводневої кислоти (20 мл), що викликало утворення білої суспензії. Суміш екстрагували етилацетатом (3×200 мл). Об'єднані органічні речовини промивали сольовим розчином, висушували над Na₂SO₄, фільтрували та випарювали з одержанням 2-(2-бром-3-хлор-6-фторфеніл)оцтової кислоти (8,0 г, 49 %) у вигляді білої твердої речовини.



5 ^1H ЯМР (400 МГц, DMSO-d_6) δ_{H} : 12,79 (br.s, 1H), 7,67-7,59 (m, 1H), 7,39-7,31 (m, 1H), 3,82 (s, 2H).

1.3 2-(2-Бром-3-хлор-6-фтор-феніл)-N-метил-ацетогідрозид

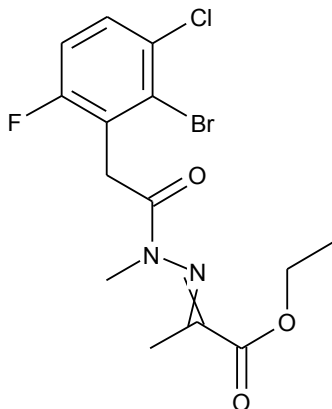
До перемішаного розчину 2-(2-бром-3-хлор-6-фторфеніл)оцтової кислоти (2,0 г, 7,5 ммоль) у дихлорметані (20 мл) за 0 °C додавали N-(3-диметиламінопропіл)-N'-етилкарбодііміду гідрохлорид [EDC.HCl] (1,4 г, 9,0 ммоль) із наступним додаванням по краплях метилгідрозину (0,4 мл, 7,5 ммоль). Температуру реакційної суміші підтримували на рівні 0 °C протягом 3 год. Потім реакцію гасили за допомогою води та екстрагували в дихлорметан. Органічні речовини відокремлювали, промивали сольовим розчином і висушували над Na_2SO_4 . Концентрування за зниженого тиску забезпечувало одержання неочищеного 2-(2-бром-3-хлор-6-фторфеніл)-N-метилацетогідрозиду (1,8 г, 81 %), який застосовували на наступній стадії без додаткового очищення.



20 ^1H ЯМР (400 МГц, DMSO-d_6) δ_{H} : 7,59 (dd, $J=8,9$ та $5,4$, 1H), 7,30 (t, $J=8,9$, 1H), 4,91 (s, 2H), 4,10 (br. s, 2H), 3,02 (s, 3H).

1.4 Етиловий естер 2-[[2-(2-бром-3-хлор-6-фторфеніл)-ацетил]-метилгідразоно]-пропіонової кислоти

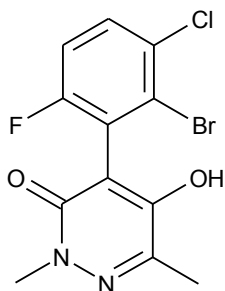
До перемішаного розчину 2-(2-бром-3-хлор-6-фторфеніл)-N-метилацетогідрозиду (1,8 г, 6,09 ммоль) в етанолі (5 мл) по краплях додавали етилпіруват (0,7 мл, 6,7 ммоль). Реакційну суміш нагрівали за 80 °C протягом 4 год. Потім забезпечували охолодження реакційної суміші до к. т. та випарювали її за зниженого тиску. Залишок очищали за допомогою колонкової хроматографії на силікагелі (градієнтне елювання сумішшю етилацетат/гексан) з одержанням необхідної сполуки – етилового естеру 2-[[2-(2-бром-3-хлор-6-фторфеніл)-ацетил]-метилгідразоно]-пропіонової кислоти (1,8 г, 75 %) – у вигляді брудно-білої твердої речовини.



¹H ЯМР (400 МГц, CDCl₃) δ_H: 7,40-7,35 (m, 1H), 7,04-6,98 (m, 1H), 4,32 (q, J=7,1, 2H), 4,24 (s, 2H), 3,41 (s, 3H), 2,32 (s, 3H), 1,36 (t, J=7,1, 3H).

1.5 4-(2-Бром-3-хлор-6-фтор-феніл)-5-гідрокси-2,6-диметил-піридазин-3-он

- 5 Етиловий естер 2-[[2-(2-бром-3-хлор-6-фторфеніл)-ацетил]-метилгідразоно]-пропіонової кислоти (500 мг, 1,27 ммоль) розчиняли в ацетонітрилі (2,5 мл) та обробляли 1,8-діазабіцикло[5.4.0]ундец-7-еном [DBU] (0,47 мл, 3,2 ммоль). Суміш нагрівали до 125 °С за допомогою мікрохвильового випромінювання протягом 1 год. Потім реакційну суміш випарювали за зниженого тиску. Залишок розчиняли у воді та підкислювали до pH 1 за допомогою 2 н. хлористоводневої кислоти. Суміш екстрагували за допомогою DCM, органічні речовини відокремлювали та промивали сольовим розчином. Органічний розчин висушували над Na₂SO₄ та концентрували за зниженого тиску з одержанням неочищеного продукту. Неочищену речовину очищали за допомогою колонкової хроматографії на силікагелі (градієнтне елювання сумішшю етилацетат/гексан) з одержанням 4-(2-бром-3-хлор-6-фторфеніл)-5-гідрокси-2,6-диметилпіридазин-3-ону (340 мг, 77,1 %) у вигляді брудно-білої твердої речовини.

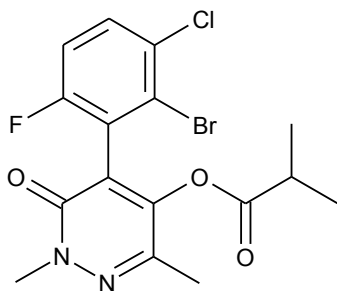


- 20 ¹H ЯМР (400 МГц, DMSO-d₆) δ_H: 11,01 (s, 1H), 7,77-7,73 (m, 1H), 7,39 (t, J=8,7, 1H), 3,58 (s, 3H), 2,24 (s, 3H).

1.6 [5-(2-Бром-3-хлор-6-фтор-феніл)-1,3-диметил-6-оксо-піридазин-4-іл]-2-метилпропаноат

- До перемішаного розчину 4-(2-бром-3-хлор-6-фторфеніл)-5-гідрокси-2,6-диметилпіридазин-3-ону (1,4 г, 4,02 ммоль) у дихлорметані (32 мл) за к. т. додавали триетиламін (1,1 мл, 8,06 ммоль), 4-(диметиламіно)піридин [DMAP] (49 мг, 0,40 ммоль) та ізобутирилхлорид (0,6 мл, 4,83 ммоль).

- Після того як реакцію вважали закінченою, реакційну суміш розбавляли дихлорметаном і водою. Органічний шар відокремлювали, висушували над Na₂SO₄ та концентрували за зниженого тиску з одержанням неочищеного продукту. Неочищену речовину очищали за допомогою колонкової хроматографії на силікагелі (градієнтне елювання сумішшю етилацетат/гексан) з одержанням [5-(2-бром-3-хлор-6-фторфеніл)-1,3-диметил-6-оксопіридазин-4-іл]-2-метилпропаноату (1,47 г, 87 %).



- 35 ¹H ЯМР (400 МГц, CDCl₃) δ_H: 7,51-7,47 (m, 1H), 7,10-7,05 (m, 1H), 3,82 (s, 3H), 2,60-2,55 (m, 1H), 2,25 (s, 3H), 1,02-0,98 (m, 6H).

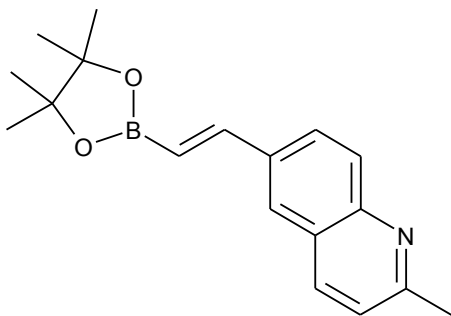
1.7 2-Метил-6-[(E)-2-(4,4,5,5-тетраметил-1,3,2-діоксаборолан-2-іл)вініл]хінолін

- 4,4,5,5-Тетраметил-2-вініл-1,3,2-діоксаборолан (0,73 мл, 4,32 ммоль) і N,N-діізопропілетиламін (1,25 мл, 7,20 ммоль) додавали до перемішаного розчину 6-бром-2-метил-хіноліну (800 мг, 3,6 ммоль) і хлор[(три-трет-бутилфосфін)-2-(2-амінобіфеніл)]паладію(II) (92 мг, 0,18 ммоль) в толуолі (14 мл). Реакційну суміш нагрівали до 95 °С в атмосфері азоту протягом 4 год.

Після завершення забезпечували охолодження реакційної суміші до кімнатної температури,

потім фільтрували через Celite® (елювання за допомогою DCM). Фільтрат концентрували *in vacuo*, потім очищали за допомогою колонкової флеш-хроматографії (діоксид кремнію, елюент – градієнт етилацетату/ізогексану) з одержанням 2-метил-6-[(E)-2-(4,4,5,5-тетраметил-1,3,2-діоксаборолан-2-іл)вініл]хіноліну (886 мг, вихід 83 %).

5



¹H ЯМР (400 МГц, розчинник) δ ppm 1,34 (s, 12 H) 2,74 (s, 3 H) 6,29 (d, J=18,46 Гц, 1 H) 7,26-7,29 (m, 1 H) 7,55 (d, J=18,4 Гц, 1 H) 7,77 (d, J=1,47 Гц, 1 H) 7,85-7,92 (m, 1 H) 7,94-7,99 (m, 1 H) 8,02 (d, J=8,4 Гц, 1 H).

10

1.8 [5-[3-Хлор-6-фтор-2-[(E)-2-(2-метил-6-хіноліл)вініл]феніл]-1,3-диметил-6-оксо-піридазин-4-іл]-2-метилпропаноат (А-4.034)

Перемішуваний розчин [5-(2-бром-3-хлор-6-фтор-феніл)-1,3-диметил-6-оксо-піридазин-4-іл]-2-метилпропаноату (1,03 г, 2,47 ммоль), Cs₂CO₃ (2,43 г, 7,40 ммоль), 2-метил-6-[(E)-2-(4,4,5,5-тетраметил-1,3,2-діоксаборолан-2-іл)вініл]хіноліну (0,874 г, 2,96 ммоль) і Pd(dppf)Cl₂.DCM (0,101 г, 0,123 ммоль) в 1,4-діоксані (21 мл) і воді (6 мл) нагрівали зі зворотним холодильником.

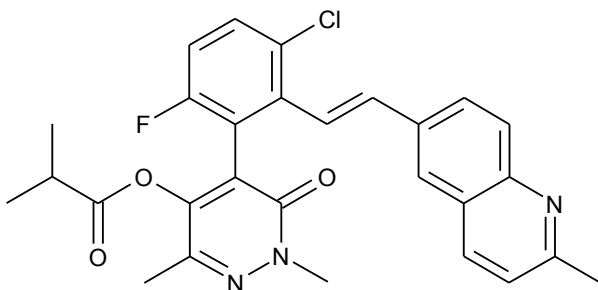
15

Після 16 год. реакційну суміш концентрували *in vacuo* з видаленням більшої частини діоксану, потім розбавляли водою і EtOAc. Органічний шар розділяли і водну фазу екстрагували порціями EtOAc (2X). рН водної фази потім регулювали до рН 2 за допомогою 2М HCl (водн.), потім екстрагували за допомогою додаткової порції EtOAc.

20

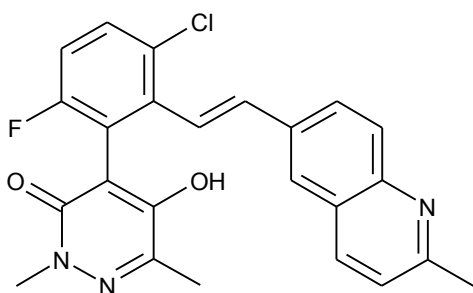
Неочищений продукт очищали за допомогою колонкової флеш-хроматографії (діоксид кремнію, елюент – градієнт етилацетату/ізогексану) з одержанням [5-[3-хлор-6-фтор-2-[(E)-2-(2-метил-6-хіноліл)вініл]феніл]-1,3-диметил-6-оксо-піридазин-4-іл]-2-метилпропаноату (86 мг, вихід 7 %, А-4.034) і 4-[3-хлор-6-фтор-2-[(E)-2-(2-метил-6-хіноліл)вініл]феніл]-5-гідрокси-2,6-диметил-піридазин-3-ону (51 мг, вихід 5 %, А-2.034).

25



¹H ЯМР (400 МГц, CDCl₃) δ ppm 1,11 (що здається t, J=7,1 Гц, 6 H) 2,23 (s, 3 H) 2,63-2,71 (m, 1 H) 2,74 (s, 3 H) 3,69 (s, 3 H) 6,81 (d, J=16,4 Гц, 1 H) 7,04 (t, J=8,7 Гц, 1 H) 7,15 (d, J=16,5 Гц, 1 H) 7,27 (s, 1 H) 7,45 (dd, J=8,9, 5,07 Гц, 1 H) 7,63 (d, J=1,7 Гц, 1 H) 7,75-7,81 (m, 1 H) 7,94 (d, J=8,8 Гц, 1 H) 8,01 (d, J=8,3 Гц, 1 H).

30



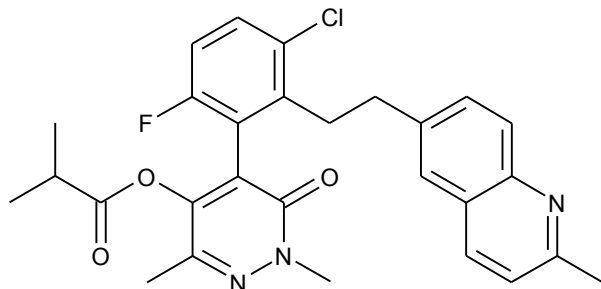
¹H ЯМР (400 МГц, CDCl₃) δ ppm 2,24 (s, 3 H) 2,66 (s, 3 H) 3,66 (s, 3 H) 6,72 (d, J=16,4 Гц, 1 H) 6,93-7,07 (m, 2 H) 7,26 (s, 1 H) 7,38 (dd, J=8,9, 5,14 Гц, 1 H) 7,55 (d, J=1,7 Гц, 1 H) 7,66 (dd, J=8,8, 2,0 Гц, 1 H) 7,84 (d, J=8,8 Гц, 1 H) 7,99 (d, J=8,4 Гц, 1 H)

1.9 [5-[3-Хлор-6-фтор-2-[2-(2-метил-6-хіноліл)етил]феніл]-1,3-диметил-6-оксо-піридазин-4-іл]-2-метилпропаноат (А-3.034)

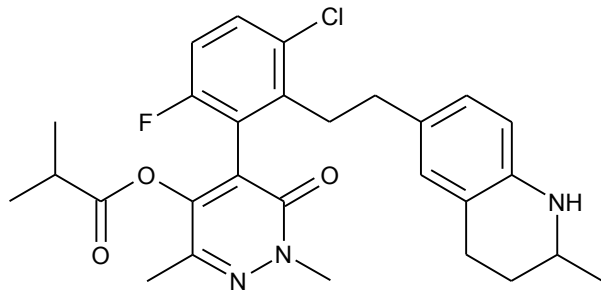
[5-[3-Хлор-6-фтор-2-[(E)-2-(2-метил-6-хіноліл)вініл]феніл]-1,3-диметил-6-оксо-піридазин-4-іл]-2-метилпропаноат (56 мг, 0,12 ммоль, 4.034) піддавали каталітичній гідрогенізації в тетрагідрофурани (0,3 мл) у присутності 5 % каталізатора Pd/C (24 мг) за тиску H₂ 3 бар.

Після завершення реакційну суміш фільтрували через шар Celite®, здійснюючи елюювання за допомогою DCM. Фільтрат концентрували in-vacuo з одержанням неочищеного залишку.

Залишок адсорбували на діоксид кремнію і очищали за допомогою колонкової флеш-хроматографії (діоксид кремнію, елюент – етилацетат/ізогексан) з одержанням [5-[3-хлор-6-фтор-2-[2-(2-метил-6-хіноліл)етил]феніл]-1,3-диметил-6-оксо-піридазин-4-іл]-2-метилпропаноату (15 мг, вихід 27 %, А-3.034) і суміші додатково відновлених продуктів, які додатково очищали за допомогою мас-спрямованої препаративної HPLC з оберненою фазою з одержанням [5-[3-хлор-6-фтор-2-[2-(2-метил-1,2,3,4-тетрагідрохінолін-6-іл)етил]феніл]-1,3-диметил-6-оксо-піридазин-4-іл]-2-метилпропаноату (6 мг, вихід 11 %, А-3.030).

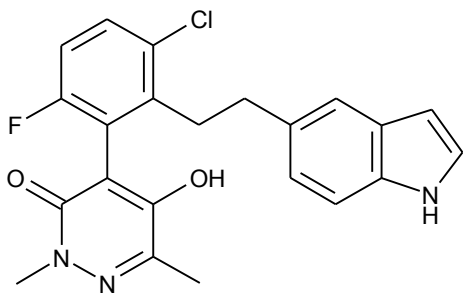


¹H ЯМР (400 МГц, CDCl₃) δ ppm 0,97 (dd, J=7,0, 4,4 Гц, 6 H) 2,24 (s, 3 H) 2,47-2,57 (m, 1 H) 2,73 (s, 3 H) 2,79-3,09 (m, 4 H) 3,84 (s, 3 H) 7,00 (t, J=8,6 Гц, 1 H) 7,25 (d, J=8,3 Гц, 1 H) 7,49 (що здається d, J=1,1 Гц, 3 H) 7,90 (d, J=8,4 Гц, 1 H) 7,96 (d, J=8,3 Гц, 1 H).



¹H ЯМР (400 МГц, CDCl₃) δ ppm 0,96 (dd, J=7,03, 2,02 Гц, 6 H) 1,25 (d, J=6,24 Гц, 3 H) 1,58-1,69 (m, 1 H) 1,90-1,98 (m, 1 H) 2,24 (s, 3 H) 2,54 (dt, J=13,94, 6,97 Гц, 1 H) 2,63-2,84 (m, 6 H) 3,39 (td, J=6,51, 3,12 Гц, 1 H) 3,83 (s, 3 H) 6,52 (br d, J=6,48 Гц, 1 H) 6,72-6,79 (m, 2 H) 6,96 (t, J=8,62 Гц, 1 H) 7,40 (dd, J=8,80, 5,14 Гц, 1 H).

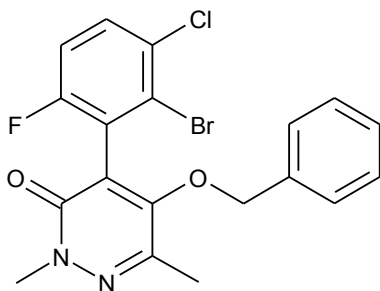
Приклад 2. Одержання 4-[3-хлор-6-фтор-2-[2-(1H-індол-5-іл)етил]феніл]-5-гідрокси-2,6-диметил-піридазин-3-ону (А-1.021)



2.1 5-Бензилокси-4-(2-бром-3-хлор-6-фтор-феніл)-2,6-диметил-піридазин-3-он

Бензилбромід (0,19 мл, 1,58 ммоль) додавали до перемішуваної суспензії 4-(2-бром-3-хлор-6-фтор-феніл)-5-гідрокси-2,6-диметил-піридазин-3-ону (500 мг, 1,44 ммоль) і K_2CO_3 (0,22 г, 1,58 ммоль) в ацетоні (2,9 мл) і суміш нагрівали зі зворотним холодильником протягом 2 год.

Після завершення забезпечували охолодження реакційної суміші до к. т., потім фільтрували (елювання за допомогою ацетону). Фільтрат концентрували in vacuo, потім очищали за допомогою колонкової флеш-хроматографії (діоксид кремнію, елюент – градієнт етилацетату/ізогексану) з одержанням 5-бензилокси-4-(2-бром-3-хлор-6-фтор-феніл)-2,6-диметил-піридазин-3-ону (560 мг, вихід 89 %).

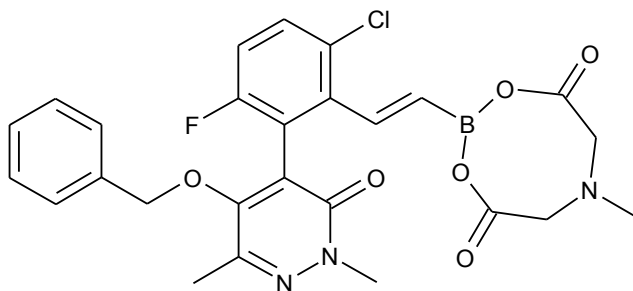


1H ЯМР (400 МГц, $CDCl_3$) δ ppm 2,29 (s, 3 H) 3,77 (s, 3 H) 4,59-4,76 (m, 2 H) 7,09 (dd, $J=8,93$, 7,95 Гц, 1 H) 7,13-7,20 (m, 2 H) 7,29-7,36 (m, 3 H) 7,52 (dd, $J=8,93$, 5,38 Гц, 1 H).

2.2 2-[(E)-2-[2-(5-Бензилокси-2,6-диметил-3-оксо-піридазин-4-іл)-6-хлор-3-фтор-феніл]вініл]-6-метил-1,3,6,2-діоксазаборокан-4,8-діон

Перемішуваний розчин 5-бензилокси-4-(2-бром-3-хлор-6-фтор-феніл)-2,6-диметил-піридазин-3-ону (1,00 г, 2,28 ммоль), хлор[(три-трет-бутилфосфін)-2-(2-амінобіфеніл)]паладію(II) (59 мг, 0,11 ммоль), N,N-діізопропілетиламіну (0,80 мл, 4,57 ммоль) і 6-метил-2-вініл-1,3,6,2-діоксазаборокан-4,8-діону (0,50 г, 2,74 ммоль) в THF (23 мл) нагрівали за 90 °C протягом 5 год., потім за 70 °C протягом додаткових 16 год.

Забезпечували охолодження реакційної суміші до кімнатної температури, потім розбавляли за допомогою DCM і фільтрували через Celite®, здійснюючи елювання додатковими порціями DCM. Фільтрат концентрували in vacuo, потім очищали за допомогою колонкової флеш-хроматографії (діоксид кремнію, елюент – градієнт етилацетату/метанолу) з одержанням 5-бензилокси-4-(2-бром-3-хлор-6-фтор-феніл)-2,6-диметил-піридазин-3-ону; 2-[(E)-2-[2-(5-бензилокси-2,6-диметил-3-оксо-піридазин-4-іл)-6-хлор-3-фтор-феніл]вініл]-6-метил-1,3,6,2-діоксазаборокан-4,8-діону (904 мг, вихід 74 %).



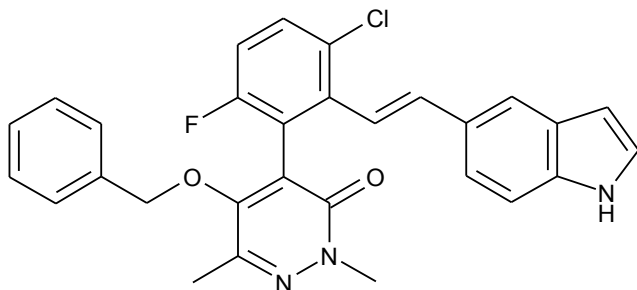
¹H ЯМР (400 МГц, CDCl₃) δ ppm 2,26 (s, 3 H) 2,79 (s, 3 H) 3,73 (s, 7 H) 4,60 (s, 2 H) 5,97 (d, J=18,6 Гц, 1 H) 6,76 (d, J=18,5 Гц, 1 H) 7,02 (t, J=8,6 Гц, 1 H) 7,09 (dd, J=6,7, 3,00 Гц, 2 H) 7,29-7,34 (m, 3 H) 7,44 (dd, J=8,9, 5,1 Гц, 1 H).

2.3 5-Бензилокси-4-[3-хлор-6-фтор-2-[(E)-2-(1H-індол-5-іл)вініл]феніл]-2,6-диметил-піридазин-3-он

У посудину для мікрохвильової обробки додавали 2-[(E)-2-[2-(5-бензилокси-2,6-диметил-3-оксо-піридазин-4-іл)-6-хлор-3-фтор-феніл]вініл]-6-метил-1,3,6,2-діоксазаборокан-4,8-діон (300 мг, 0,56 ммоль), 5-бром-1H-індол (163 мг, 0,84 ммоль), Pd(dppf)Cl₂.DCM (23 мг, 0,028 ммоль,) і K₃PO₄.H₂O (512 мг, 2,22 ммоль). Ємність потім закривали пробкою і продували за допомогою N₂ перед додаванням THF (5,6 мл) і води (0,2 мл). Реакційну суміш потім нагрівали до 90 °C протягом 30 хв. під дією мікрохвильового випромінювання.

Реакційну суміш охолоджували до кімнатної температури, потім розділяли між водою (20 мл) і EtOAc (20 мл). Органічний шар розділяли і водний шар екстрагували за допомогою екстрагували за допомогою EtOAc (2×20 мл). Об'єднані органічні шари збирали, висушували (MgSO₄), фільтрували та концентрували in vacuo з одержанням неочищеного продукту.

Неочищений продукт очищали за допомогою мас-спрямованої препаративної HPLC з оберненою фазою з одержанням 5-бензилокси-4-[3-хлор-6-фтор-2-[(E)-2-(1H-індол-5-іл)вініл]феніл]-2,6-диметил-піридазин-3-ону (45 мг, вихід 16 %).



20

¹H ЯМР (400 МГц, CDCl₃) δ ppm 2,20 (s, 3 H) 3,76 (s, 3 H) 4,70 (d, J=5,3 Гц, 2 H) 6,53 (t, J=2,1 Гц, 1 H) 6,78-6,86 (m, 1 H) 6,88-6,94 (m, 1 H) 7,01 (t, J=8,6 Гц, 1 H) 7,12-7,17 (m, 2 H) 7,19 (t, J=2,8 Гц, 1 H) 7,21-7,25 (m, 1 H) 7,29-7,35 (m, 4 H) 7,47 (dd, J=8,9, 5,3 Гц, 1 H) 7,55 (s, 1 H) 8,25-8,44 (m, 1 H).

25

2.4 4-[3-Хлор-6-фтор-2-[2-(1H-індол-5-іл)етил]феніл]-5-гідрокси-2,6-диметил-піридазин-3-он (A-1.021)

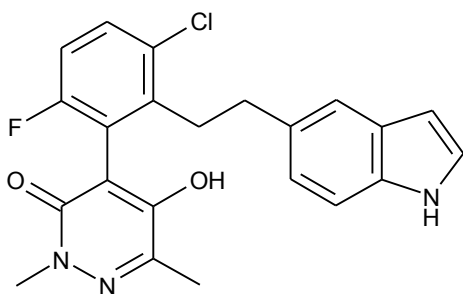
5-Бензилокси-4-[3-хлор-6-фтор-2-[(E)-2-(1H-індол-5-іл)вініл]феніл]-2,6-диметил-піридазин-3-он (45 мг, 0,09 ммоль) піддавали каталітичній гідрогенізації в тетрагідрофурани (0,23 мл) у присутності 5 % каталізатора Pd/C (38 мг x 2) за тиску H₂ 3 бар.

30

Після завершення реакційну суміш фільтрували через шар Celite®, здійснюючи елюювання за допомогою DCM. Фільтрат концентрували in vacuo з одержанням неочищеного залишку.

Залишок адсорбували на діоксид кремнію і очищали за допомогою колонкової флеш-хроматографії (діоксид кремнію, елюент – етилацетат/ізогексан) з одержанням 4-[3-хлор-6-фтор-2-[2-(1H-індол-5-іл)етил]феніл]-5-гідрокси-2,6-диметил-піридазин-3-ону (24 мг, вихід 65 %, A-1.021).

35

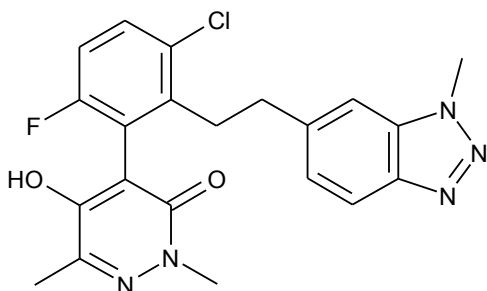


40

¹H ЯМР (400 МГц, CDCl₃) δ ppm 2,18 (s, 3 H) 2,70-2,96 (m, 4 H) 3,69 (s, 3 H) 6,44 (ddd, J=3,0, 2,0, 0,7 Гц, 1 H) 6,78 (dd, J=8,3, 1,6 Гц, 1 H) 6,89 (t, J=8,6 Гц, 1 H) 7,14-7,18 (m, 1 H) 7,18-7,26 (m, 2 H) 7,37 (dd, J=8,8, 5,14 Гц, 1 H) 8,21 (br s, 1 H).

Приклад 3. Одержання 4-[3-хлор-6-фтор-2-[2-(3-метилбензотриазол-5-іл)етил]феніл]-5-

гідрокси-2,6-диметил-піридазин-3-ону (1.343)



5 3.1 [5-[3-Хлор-6-фтор-2-[(E)-2-(6-метил-4,8-діоксо-1,3,6,2-діоксазаборокан-2-іл)вініл]феніл]-1,3-диметил-6-оксо-піридазин-4-іл]-2-метилпропаноат

[5-(2-Бром-3-хлор-6-фтор-феніл)-1,3-диметил-6-оксо-піридазин-4-іл]-2-метил-пропаноат (5,00 г, 11,97 ммоль, 1,0 екв.), 6-метил-2-вініл-1,3,6,2-діоксазаборокан-4,8-діон (2,63 г, 14,36 ммоль, 1,2 екв.) і хлор[(три-трет-бутилфосфін)-2-(2-амінобіфеніл)]паладій(II) (307 мг, 0,60 ммоль, 0,05 екв.) завантажували в круглодонну колбу об'ємом 250 мл, оснащену

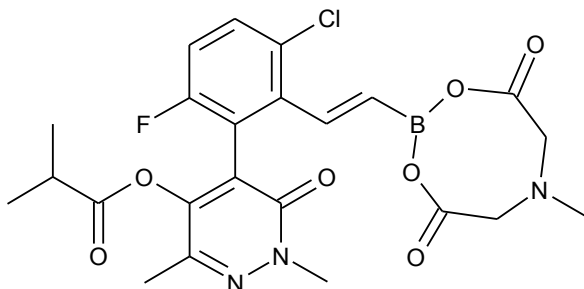
10 холодильником, якорем магнітної мішалки та барботером для азоту. Додавали THF (100 мл) із наступним додаванням N,N-діізопропілетиламіну (4,2 мл, 23,94 ммоль, 2,0 екв.) проти потоку азоту та суміш нагрівали до температури утворення флегми протягом 3 год.

Забезпечували охолодження реакційної суміші до кімнатної температури потім розводили в DCM і фільтрували через Celite®, промивали додатковими порціями DCM. Елюент потім концентрували до сухого стану.

Неочищений продукт очищали за допомогою колонкової флеш-хроматографії з одержанням

[5-[3-хлор-6-фтор-2-[(E)-2-(6-метил-4,8-діоксо-1,3,6,2-діоксазаборокан-2-іл)вініл]феніл]-1,3-диметил-6-оксопіридазин-4-іл]-2-метилпропаноату (5,91 г, 11,4 ммоль, вихід 95 %) у вигляді

20 брудно-білої твердої речовини.



25 ¹H ЯМР (400 МГц, DMSO-d₆) δ=7,63 (dd, J=5,1, 8,9 Гц, 1H), 7,31 (t, J=8,9 Гц, 1H), 6,65 (d, J=18,3 Гц, 1H), 5,68 (d, J=18,3 Гц, 1H), 4,24 (dd, J=11,9, 17,2 Гц, 2H), 3,95-3,83 (m, 2H), 3,70 (s, 3H), 2,66 (spt, J=7,0 Гц, 1H), 2,16 (s, 3H), 0,90 (d, J=7,0 Гц, 3H), 0,89 (d, J=7,0 Гц, 3H)

3.2 [5-[3-Хлор-6-фтор-2-[(E)-2-(3-метилбензотриазол-5-іл)вініл]феніл]-1,3-диметил-6-оксо-піридазин-4-іл]-2-метилпропаноат (4.343)

30 [5-[3-Хлор-6-фтор-2-[(E)-2-(6-метил-4,8-діоксо-1,3,6,2-діоксазаборокан-2-іл)вініл]феніл]-1,3-диметил-6-оксо-піридазин-4-іл]-2-метилпропаноат (700 мг, 1,35 ммоль), комплекс 1,1-біс(дифенілфосфіно)фероцен]дихлорпаладію(II) і дихлорметану [PdCl₂(dppf).DCM] (55 мг, 0,067 ммоль), 6-бром-1-метил-бензотриазол (371 мг, 1,75 ммоль) і фосфат калію (1,17 г, 5,39 ммоль) додавали до посудини для мікрохвильової обробки об'ємом 10-20 мл. Додавали 2-метилтетрагідрофуран (10 мл) і воду (0,5 мл), потім реакційну суміш дегазували шляхом

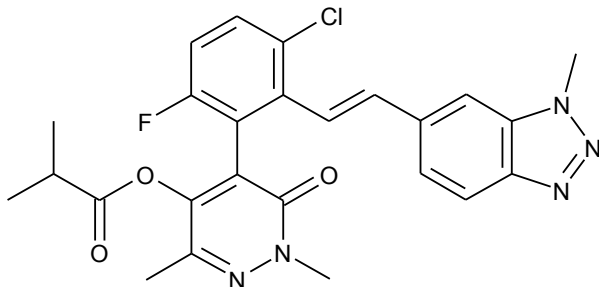
35 створення вакууму і повторного заповнення азотом (ХЗ). Реакційну суміш нагрівали за 120 °C протягом 60 хв. під дією мікрохвильового випромінювання.

Реакційну суміш фільтрували через шар Celite®, здійснюючи промивання за допомогою EtOAc і EtOH. Фільтрат концентрували за зниженого тиску з одержанням коричневої смоли (853 мг). Неочищений матеріал очищали за допомогою автоматизованої флеш-хроматографії на

40 силікагелі, здійснюючи елювання за допомогою градієнта циклогексану/етилацетату з одержанням [5-[3-хлор-6-фтор-2-[(E)-2-(3-метилбензотриазол-5-іл)вініл]феніл]-1,3-диметил-6-оксо-піридазин-4-іл]-2-метилпропаноату (4.343) як оранжевої смоли (622 мг, вихід 87 %).

Очищений матеріал розчиняли в ацетонітрилі (10 мл) і обробляли за допомогою SiliCycle

SiliaMetS® – смоли з тіоловими групами (SH), для видалення металів (622 мг) за кімнатної температури. Суспензію перемішували за кімнатної температури протягом 1,5 год., потім фільтрували для видалення смоли, здійснюючи промивання додатковим ацетонітрилом. Фільтрат концентрували in vacuo з одержанням [5-[3-хлор-6-фтор-2-[(E)-2-(3-метилбензотриазол-5-іл)вініл]феніл]-1,3-диметил-6-оксо-піридазин-4-іл]-2-метилпропаноату (4.343) у вигляді білої твердої речовини (583 мг, вихід 87 %).

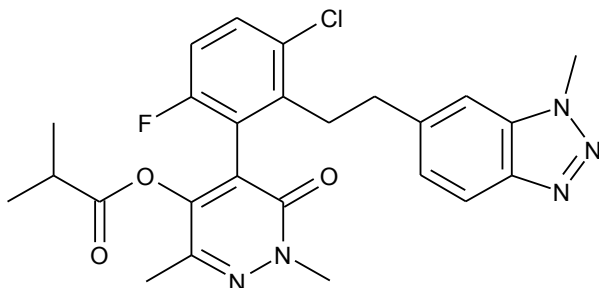


¹H ЯМР(400 МГц, хлороформ) 7,96 (d, J=9,0 Гц, 1H), 7,39-7,49 (m, 3H), 7,15 (d, J=16,3 Гц, 1H), 7,05 (t, J=8,7 Гц, 1H), 6,81 (d, J=16,3 Гц, 1H), 4,29 (s, 3H), 3,68 (s, 3H), 2,67(spt, J=7,0 Гц, 1H), 2,23 (s, 3H), 1,13 (d, J=7,0 Гц, 3H), 1,09 (d, J=7,0 Гц, 3H)

3.3 [5-[3-Хлор-6-фтор-2-[2-(3-метилбензотриазол-5-іл)етил]феніл]-1,3-диметил-6-оксо-піридазин-4-іл]-2-метилпропаноат

[5-[3-Хлор-6-фтор-2-[(E)-2-(3-метилбензотриазол-5-іл)вініл]феніл]-1,3-диметил-6-оксо-піридазин-4-іл]-2-метилпропаноат (496 мг, 1,00 ммоль) піддавали каталітичній гідрогенізації в EtOAc (10 мл) у присутності 5 % каталізатора Pd/C (50 % сирової ваги) (0,21 г) за тиску H₂ 3 бар протягом 18 год.

Реакційну суміш фільтрували через шар Celite®, здійснюючи промивання етилацетатом. Фільтрат концентрували in vacuo з одержанням неочищеного залишку (503 мг), який очищали за допомогою мас-спрямованої препаративної HPLC з оберненою фазою з одержанням [5-[3-хлор-6-фтор-2-[2-(3-метилбензотриазол-5-іл)етил]феніл]-1,3-диметил-6-оксо-піридазин-4-іл]-2-метилпропаноату як безбарвної смоли (332 мг, вихід 67 %).



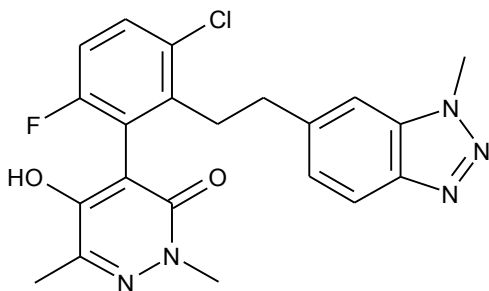
25

¹H ЯМР (400 МГц, хлороформ) δ=7,92 (d, J=8,6 Гц, 1H), 7,43 (dd, J=5,1, 8,7 Гц, 1H), 7,24 (br s, 1H), 7,17 (dd, J=1,3, 8,6 Гц, 1H), 7,01 (t, J=8,7 Гц, 1H), 4,26 (s, 3H), 3,81 (s, 3H), 3,11-2,91 (m, 3H), 2,86-2,72 (m, 1H), 2,54 (spt, J=7,0 Гц, 1H), 2,25 (s, 3H), 0,98 (d, J=7,1 Гц, 3H), 0,96 (d, J=7,0 Гц, 3H)

3.4 Одержання 4-[3-хлор-6-фтор-2-[2-(3-метилбензотриазол-5-іл)етил]феніл]-5-гідрокси-2,6-диметил-піридазин-3-ону (1.343)

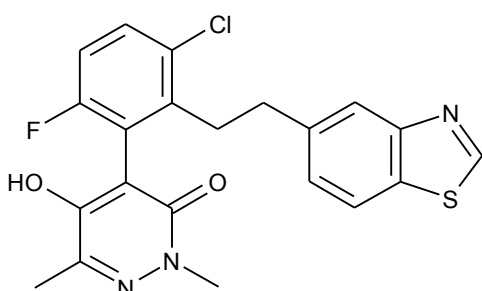
[5-[3-Хлор-6-фтор-2-[2-(3-метилбензотриазол-5-іл)етил]феніл]-1,3-диметил-6-оксо-піридазин-4-іл]-2-метилпропаноат (332 мг, 0,67 ммоль) перемішували в етанолі (5 мл) за кімнатної температури. По краплях додавали розчин моногідрату гідроксиду літію (85 мг, 2,00 ммоль) у воді (2 мл) і реакційну суміш перемішували за кімнатної температури протягом 21 год.

Розчинник, що являв собою етанол, видаляли за зниженого тиску, потім залишок розбавляли водою (20 мл). Водну фазу підкислювали до ~pH 3-4 шляхом додавання 2M HCl (водн.), потім екстрагували за допомогою EtOAc (3×10 мл). Об'єднані органічні екстракти концентрували за зниженого тиску з одержанням білої твердої речовини (240 мг). Неочищений залишок очищали за допомогою автоматизованої флеш-хроматографії на діоксиді кремнію, здійснюючи елювання за допомогою градієнта циклогексану/етилацетату з одержанням 4-[3-хлор-6-фтор-2-[2-(3-метилбензотриазол-5-іл)етил]феніл]-5-гідрокси-2,6-диметил-піридазин-3-ону (1.343) у вигляді білої твердої речовини (196 мг, 69 %).



¹H ЯМР (400 МГц, ацетонітрил) δ ppm 7,83 (d, J=8,6 Гц, 1H), 7,57 (dd, J=5,2, 8,8 Гц, 1H), 7,33 (s, 1H), 7,10-7,18 (m, 2H), 4,22 (s, 3H), 3,64 (s, 3H), 2,84-3,07 (m, 4H) 2,21 (s, 3H)

Приклад 4. Одержання 4-[2-[2-(1,3-бензотіазол-5-іл)етил]-3-хлор-6-фтор-феніл]-5-гідрокси-2,6-диметил-піридазин-3-ону (1.350)

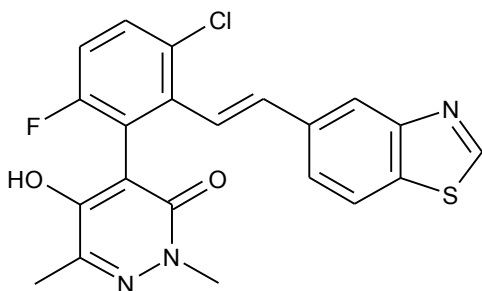


4.1 4-[2-[(E)-2-(1,3-Бензотіазол-5-іл)вініл]-3-хлор-6-фтор-феніл]-5-гідрокси-2,6-диметил-піридазин-3-он

[5-[3-Хлор-6-фтор-2-[(E)-2-(6-метил-4,8-діоксо-1,3,6,2-діоксазаборокан-2-іл)вініл]феніл]-1,3-диметил-6-оксо-піридазин-4-іл]-2-метилпропаноат (500 мг, 0,96 ммоль), 5-бром-1,3-бензотіазол (309 мг, 1,44 ммоль), комплекс 1,1-біс(дифенілфосфіно)фероцен]дихлорпаладію(II) та дихлорметану [PdCl₂(dppf).DCM] (4 мг, 0,05 ммоль) і карбонат калію (403 мг, 2,89 ммоль) додавали до посудини для мікрохвильової обробки об'ємом 10-20 мл в атмосфері азоту. Додавали дегазований ацетонітрил (8 мл) і воду (2 мл) і суміш нагрівали до 150 °С протягом 30 хв. під дією мікрохвильового випромінювання.

Реакційну суміш концентрували до сухого стану. Залишок обробляли водою (10 мл) і водну фазу підкисляли до pH 4 шляхом додавання 1M HCl (водн.). Додавали DCM (20 мл) і шари розділяли. Водну фазу додатково екстрагували за допомогою DCM/MeOH (8:1) (2×10 мл), потім об'єднані органічні екстракти висушували і концентрували з одержанням коричневого масла. Неочищений матеріал очищали за допомогою автоматизованої флеш-хроматографії на силікагелі, здійснюючи елювання за допомогою градієнта циклогексану/етилацетату, з одержанням 4-[2-[(E)-2-(1,3-бензотіазол-5-іл)вініл]-3-хлор-6-фтор-феніл]-5-гідрокси-2,6-диметил-піридазин-3-ону у вигляді білої твердої речовини (302 мг, вихід 73 %).

Одержаний продукт розчиняли в суміші метанолу/етилацетату 3:2 (25 мл). Розчин обробляли активованим вугіллям (100 мг), потім перемішували за к. т. протягом 1 год. Суміш фільтрували через Celite®, потім промивали додатковою кількістю суміші MeOH/EtOAc 3:2 (10 мл). Фільтрат обробляли за допомогою SiliCycle SiliaMetS® – смоли з тіоловими групами (SH) (300 мг), потім перемішували за к. т. протягом 16 год. Суміш фільтрували для видалення смоли, потім фільтрат концентрували in vacuo з одержанням брудно-білої твердої речовини (286 мг).

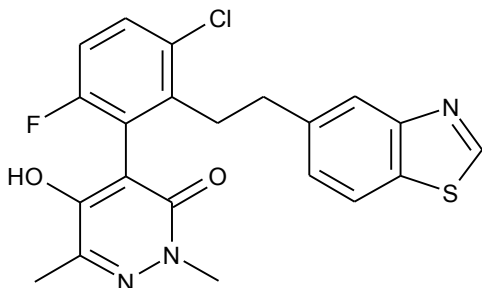


¹H ЯМР (400 МГц, DMSO-d₆) δ=10,84 (br s, 1H), 9,41 (s, 1H), 8,14 (d, J=8,4 Гц, 1H), 8,00 (d, J=1,5 Гц, 1H), 7,62 (dd, J=5,1, 8,7 Гц, 1H), 7,54 (dd, J=1,5, 8,4 Гц, 1H), 7,29 (t, J=8,7 Гц, 1H), 7,09 (d, J=16,5 Гц, 1H), 6,74 (d, J=16,5 Гц, 1H), 3,54 (s, 3H), 2,18 (s, 3H)

4.2 4-[2-[2-(1,3-Бензотіазол-5-іл)етил]-3-хлор-6-фтор-феніл]-5-гідрокси-2,6-диметил-піридазин-3-он (1.350)

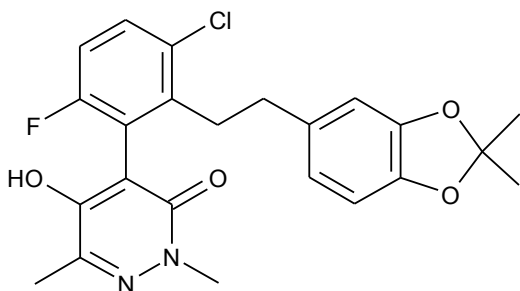
До розчину 4-[2-[(E)-2-(1,3-бензотіазол-5-іл)вініл]-3-хлор-6-фтор-феніл]-5-гідрокси-2,6-диметил-піридазин-3-ону (835 мг, 1,95 ммоль) в тетрагідрофурані (30 мл) в атмосфері азоту додавали N,N-діізопропілетиламін (2,70 мл, 16,0 ммоль). Перемішувану реакційну суміш нагрівали до 70 °C і порціями додавали 2,4,6-триізопропілбензолсульфонілгідрозид (5,17 г, 15,6 ммоль) протягом 4 год., потім суміш нагрівали зі зворотним холодильником протягом 16 год. До реакційної суміші додавали додатковий N,N-діізопропілетиламін (1,70 мл, 9,80 ммоль) із наступним додаванням 2,4,6-триізопропілбензолсульфонілгідрозиду (3,24 г, 9,77 ммоль) і суміш нагрівали зі зворотним холодильником протягом додаткових 6 год.

Забезпечували охолодження реакційної суміші до кімнатної температури, потім концентрували безпосередньо на діоксиді кремнію. Неочищений матеріал частково очищали за допомогою автоматизованої флеш-хроматографії на силікагелі, здійснюючи елювання за допомогою градієнта циклогексану/етилацетату. Одержаний матеріал додатково очищали за допомогою мас-спрямованої препаративної HPLC з оберненою фазою з одержанням 4-[3-хлор-6-фтор-2-[2-[4-(метилсульфанілметил)феніл]етил]феніл]-5-гідрокси-2,6-диметил-піридазин-3-ону (1.350) як блідо-жовтої твердої речовини (227 мг, вихід 27 %)



¹H NMR (500 МГц, DMSO-d₆) δ ppm 10,84 (br. s, 1H), 9,35 (s, 1H), 8,03 (d, J=8,3 Гц, 1H), 7,71 (d, J=1,0 Гц, 1H), 7,55 (dd, J=5,2, 8,8 Гц, 1H), 7,23 (t, J=8,8 Гц, 1H), 7,16 (dd, J=1,0, 8,3 Гц, 1H), 3,62 (s, 3H), 2,93-2,70 (m, 4 H), 2,26 (s, 3H)

Приклад 5. Одержання [3-хлор-2-[2-(2,2-диметил-1,3-бензодіоксол-5-іл)етил]-6-фтор-феніл]-5-гідрокси-2,6-диметил-піридазин-3-ону (1.361)

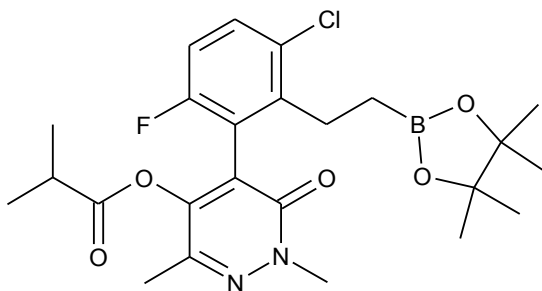


5.1 [5-[3-Хлор-6-фтор-2-[2-(4,4,5,5-тетраметил-1,3,2-діоксаборолан-2-іл)етил]феніл]-1,3-

диметил-6-оксо-піридазин-4-іл]-2-метилпропаноат

У висушену в печі круглодонну колбу потім завантажували Ir(COD)Cl₂ (299 мг, 0,45 ммоль) і 4-дифенілфосфанілбутил(дифеніл)фосфан (0,380 мг, 0,89 ммоль). Із колби викачували повітря і знову заповнювали азотом (х 3), потім додавали THF (75 мл) і реакційну суміш перемішували за кімнатної температури протягом 30 хв. Розчин [5-(3-хлор-6-фтор-2-вініл-феніл)-1,3-диметил-6-оксо-піридазин-4-іл]-2-метилпропаноату [одержаний, як описано в прикладі 4] (6,7 г, 17,8 ммоль) в THF додавали по краплях і суміш перемішували протягом 10 хв. із наступним додаванням по краплях 4,4,5,5-тетраметил-1,3,2-діоксаборолану (3,02 мл, 20,8 ммоль). Реакційну суміш перемішували за 60° С протягом ночі.

Через 24 год. забезпечували охолодження реакційної суміші до кімнатної температури, потім концентрували in vacuo. Неочищений продукт очищали за допомогою колонкової хроматографії на силікагелі, здійснюючи елюювання за допомогою градієнта циклогексану/етилацетату, з одержанням [5-[3-хлор-6-фтор-2-[2-(4,4,5,5-тетраметил-1,3,2-діоксаборолан-2-іл)етил]феніл]-1,3-диметил-6-оксо-піридазин-4-іл]-2-метилпропаноату (4,50 г, вихід 51 %) у вигляді жовтої твердої речовини.

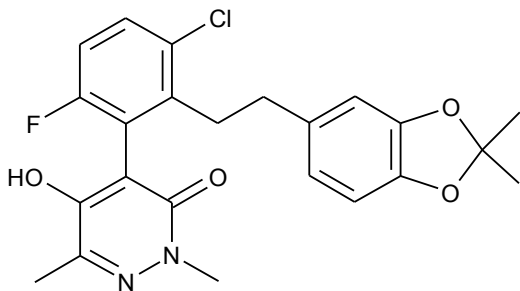


¹H ЯМР (500 МГц, хлороформ) δ=7,35 (dd, J=5,2, 8,9 Гц, 1H), 6,90 (t, J=8,6 Гц, 1H), 3,81 (s, 3H), 2,59 (t, J=8,5 Гц, 2H), 2,53 (spt, J=7,0 Гц, 1H), 2,24 (s, 3H), 1,32-1,16 (m, 12H), 1,08-1,00 (m, 2H), 0,98 (d, J=7,0 Гц, 3H), 0,94 (d, J=7,0 Гц, 3H).

5.2 [3-Хлор-2-[2-(2,2-диметил-1,3-бензодіоксол-5-іл)етил]-6-фтор-феніл]-5-гідрокси-2,6-диметил-піридазин-3-он (1.361)

5-Бром-2,2-диметил-1,3-бензодіоксол (70 мг, 0,30 ммоль) завантажували в посудину для мікрохвильової обробки об'ємом 2-5 мл. [5-[3-Хлор-6-фтор-2-[2-(4,4,5,5-тетраметил-1,3,2-діоксаборолан-2-іл)етил]феніл]-1,3-диметил-6-оксо-піридазин-4-іл]-2-метилпропаноат (100 мг, 0,20 ммоль) додавали як розчин у 1,4-діоксані (2 мл) із наступним додаванням хлор(2-дициклогексилфосфіно-2',6'-диізопропокси-1,1'-біфеніл)[2-(2'-аміно-1,1'-біфеніл)]паладію(II) (RuPhos Pd-G2) (26 мг, 0,03 ммоль) як розчину в 1,4-діоксані (2 мл). Додавали 2М водний розчин карбонату калію (0,30 мл, 0,61 ммоль) і суміш нагрівали до 140 °С протягом 80 хв. під дією мікрохвильового випромінювання.

Реакційну суміш охолоджували до кімнатної температури, потім фільтрували через попередньо змочений картридж з 0,5 г діоксиду кремнію-TMT, здійснюючи промивання ацетонітрилом (2×2 мл). Фільтрат концентрували до сухого стану, потім очищали за допомогою мас-спрямованої препаративної HPLC з оберненою фазою з одержанням [3-хлор-2-[2-(2,2-диметил-1,3-бензодіоксол-5-іл)етил]-6-фтор-феніл]-5-гідрокси-2,6-диметил-піридазин-3-ону (1.361) у вигляді білої твердої речовини (15 мг, вихід 17 %).

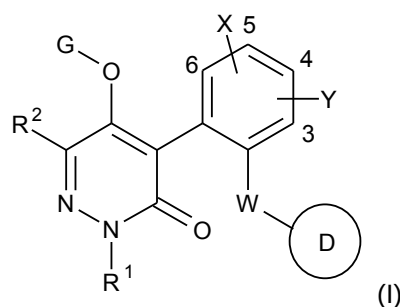


¹H ЯМР (500 МГц, хлороформ) δ ppm 7,43 (dd, J=5,2, 8,7 Гц, 1H), 6,99 (t, J=8,7 Гц, 1H), 6,56 (d, J=7,7 Гц, 1H), 6,40-6,36 (m, 2H), 3,74 (s, 3H), 2,85-2,78 (m, 1H), 2,77-2,61 (m, 3H), 2,30 (s, 3H), 1,65 (s, 3H), 1,64 (s, 3H)

Сполуки 1.019, 1.021, 1.027, 1.028, 1.036, 2.034, 3.030, 3.034, 4.034, 1.339, 1.340, 1.341, 1.342,, 1.344, 1.345, 1.346, 1.347, 1.348, 1.349, 1.351, 1.352, 1.353, 1.354, 1.355, 1.356, 1.044, 1.053, 1.357, 1.358, 1.359, 1.360,, 2.362, 2.363 і 4.342 одержували із застосуванням загальних способів, описаних вище. В таблиці 5 нижче показана структура таких сполук і дані ЯМР, що характеризують їх.

Таблиця 5

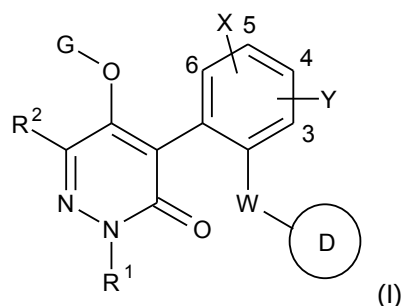
Приклади одержання сполук формули (I). Система нумерації, використовувана для опису положень X та Y, показана тільки для ясності



№ сполуки	R ¹	R ²	G	X	Y	W	D	Докладні дані ЯМР
1,019	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH ₂ -CH ₂ -	1,2,3,4-тетрагідрохінолін-6-іл-	¹ H ЯМР (400 МГц, хлороформ) д ppm 1,91 (br d, J=5,26 Гц, 3 H) 2,30 (s, 3 H) 2,50-2,84 (m, 5 H) 3,19-3,30 (m, 2 H) 3,46 (s, 1 H) 3,73 (s, 3 H) 6,35 (d, J=8,56 Гц, 1 H) 6,57-6,65 (m, 2 H) 6,97 (t, J=8,56 Гц, 1 H) 7,41 (dd, J=8,80, 5,14 Гц, 1 H)
1,021	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH ₂ -CH ₂ -	1H-індол-5-іл-	¹ H ЯМР (400 МГц, хлороформ) д ppm 2,18 (s, 3 H) 2,70-2,96 (m, 4 H) 3,69 (s, 3 H) 6,44 (ddd, J=3,00, 2,02, 0,73 Гц, 1 H) 6,78 (dd, J=8,31, 1,59 Гц, 1 H) 6,89 (t, J=8,56 Гц, 1 H) 7,14-7,18 (m, 1 H) 7,18-7,26 (m, 2 H) 7,37 (dd, J=8,80, 5,14 Гц, 1 H) 8,21 (br s, 1 H)
1,027	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH ₂ -CH ₂ -	2-(трифторметил)-4-хіноліл-	¹ H ЯМР (400 МГц, хлороформ) д ppm 2,28 (s, 3 H) 2,81-2,94 (m, 1 H) 3,01 (br d, J=6,11 Гц, 1 H) 3,35 (s, 2 H) 3,75 (s, 3 H) 7,04 (t, J=8,56 Гц, 1 H) 7,42-7,49 (m, 2 H) 7,58 (ddd, J=8,31, 6,97, 1,10 Гц, 1 H) 7,79 (ddd, J=8,41, 6,94, 1,28 Гц, 1 H) 7,86 (d, J=8,07 Гц, 1 H) 8,20 (d, J=8,56 Гц, 1 H)

Таблиця 5

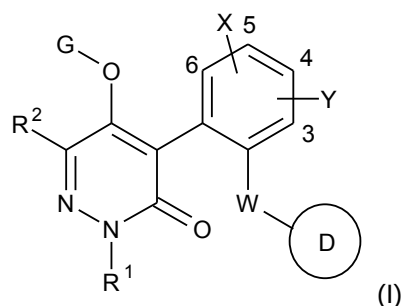
Приклади одержання сполук формули (I). Система нумерації, використовувана для опису положень X та Y, показана тільки для ясності



№ сполуки	R ¹	R ²	G	X	Y	W	D	Докладні дані ЯМР
1,028	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH ₂ - CH ₂ -	2-етил-1,3- бензоксазол-6-іл-	¹ H ЯМР (400 МГц, метанол) δ=7,49 (dd, J=5,3, 8,8 Гц, 1H), 7,40 (d, J=8,3 Гц, 1H), 7,26 (d, J=1,2 Гц, 1H), 7,08 (t, J=8,8 Гц, 1H), 7,02 (dd, J=1,2, 8,3 Гц, 1H), 3,73 (s, 3H), 2,96 (q, J=7,6 Гц, 2H), 2,91-2,74 (m, 4H), 2,33 (s, 3H), 1,42 (t, J=7,6 Гц, 3H)
1,036	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH ₂ - CH ₂ -	4-хіноліл-	¹ H ЯМР (400 МГц, хлороформ) δ ppm 2,28 (s, 3 H) 2,88-3,02 (m, 2 H) 3,24 (ddd, J=19,47, 10,48, 6,24 Гц, 2 H) 3,74 (s, 3 H) 7,00 (t, J=8,56 Гц, 1 H) 7,17 (d, J=4,52 Гц, 1 H) 7,38-7,51 (m, 2 H) 7,64-7,79 (m, 2 H) 8,03 (d, J=8,19 Гц, 1 H) 8,65 (d, J=4,40 Гц, 1 H)
2,034	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	(E)- CH=CH-	2-метил-6-хіноліл-	¹ H ЯМР (400 МГц, розчинник) δ ppm 1,11 (t, J=7,15 Гц, 6 H) 2,23 (s, 3 H) 2,63-2,71 (m, 1 H) 2,74 (s, 3 H) 3,69 (s, 3 H) 6,81 (d, J=16,38 Гц, 1 H) 7,04 (t, J=8,68 Гц, 1 H) 7,15 (d, J=16,51 Гц, 1 H) 7,27 (s, 1 H) 7,45 (dd, J=8,86, 5,07 Гц, 1 H) 7,63 (d, J=1,71 Гц, 1 H) 7,75-7,81 (m, 1 H) 7,94 (d, J=8,80 Гц, 1 H) 8,01 (d, J=8,31 Гц, 1 H)

Таблиця 5

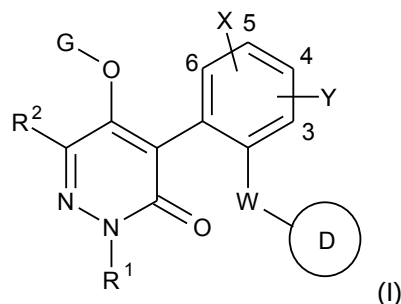
Приклади одержання сполук формули (I). Система нумерації, використовувана для опису положень X та Y, показана тільки для ясності



№ сполуки	R ¹	R ²	G	X	Y	W	D	Докладні дані ЯМР
3,030	-Me	-Me	-(C=O)iPr	6-F	3-Cl	-CH ₂ - CH ₂ -	2-метил-1,2,3,4- тетрагідрокінолін- 6-іл-	¹ H ЯМР (400 МГц, розчинник) д ppm 0,96 (dd, J=7,03, 2,02 Гц, 6 H) 1,25 (d, J=6,24 Гц, 3 H) 1,58-1,69 (m, 1 H) 1,90-1,98 (m, 1 H) 2,24 (s, 3 H) 2,54 (dt, J=13,94, 6,97 Гц, 1 H) 2,63-2,84 (m, 6 H) 3,39 (td, J=6,51, 3,12 Гц, 1 H) 3,83 (s, 3 H) 6,52 (br d, J=6,48 Гц, 1 H) 6,72-6,79 (m, 2 H) 6,96 (t, J=8,62 Гц, 1 H) 7,40 (dd, J=8,80, 5,14 Гц, 1 H)
3,034	-Me	-Me	-(C=O)iPr	6-F	3-Cl	-CH ₂ - CH ₂ -	2-метил-6-хіноліл-	¹ H ЯМР (400 МГц, розчинник) д ppm 0,97 (dd, J=6,97, 4,40 Гц, 6 H) 2,24 (s, 3 H) 2,47-2,57 (m, 1 H) 2,73 (s, 3 H) 2,79-3,09 (m, 4 H) 3,84 (s, 3 H) 7,00 (t, J=8,62 Гц, 1 H) 7,25 (d, J=8,31 Гц, 1 H) 7,49 (d, J=1,10 Гц, 3 H) 7,90 (d, J=8,44 Гц, 1 H) 7,96 (d, J=8,31 Гц, 1 H)
4,034	-Me	-Me	-(C=O)iPr	6-F	3-Cl	(E)- CH=CH-	2-метил-6-хіноліл-	¹ H ЯМР (400 МГц, розчинник) д ppm 2,24 (s, 3 H) 2,66 (s, 3 H) 3,66 (s, 3 H) 6,72 (d, J=16,38 Гц, 1 H) 6,93-7,07 (m, 2 H) 7,26 (s, 1 H) 7,38 (dd, J=8,93, 5,14 Гц, 1 H) 7,55 (d, J=1,71 Гц, 1 H) 7,66 (dd, J=8,80, 1,96 Гц, 1 H) 7,84 (d, J=8,80 Гц, 1 H) 7,99 (d, J=8,44 Гц, 1 H)

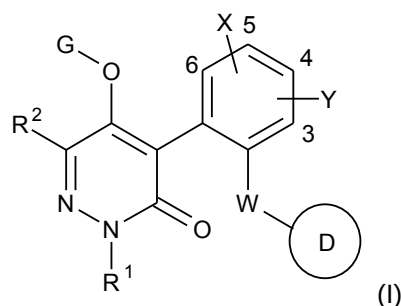
Таблиця 5

Приклади одержання сполук формули (I). Система нумерації, використувувана для опису положень X та Y, показана тільки для ясності



№ сполуки	R ¹	R ²	G	X	Y	W	D	Докладні дані ЯМР
1,339	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH ₂ - CH ₂ -	2-метил-5-1,3- бензотіазоліл-	¹ H ЯМР (500 МГц, хлороформ) д ppm 7,64 (d, J=8,1 Гц, 1H), 7,52 (br s, 1H), 7,19 (dd, J=5,1, 8,6 Гц, 1H), 7,01 (br d, J=8,1 Гц, 1H), 6,92 (t, J=8,6 Гц, 1H), 3,80 (s, 3H), 2,90-2,74 (m, 4H), 2,69 (s, 3H), 2,32 (s, 3H)
1,340	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH ₂ - CH ₂ -	2,2-диметил-6-3H- бензофураніл-	¹ H ЯМР (400 МГц, метанол) д ppm 7,50 (dd, J=5,1, 8,8 Гц, 1H), 7,08 (t, J=8,8 Гц, 1H), 6,97(d, J=7,5 Гц, 1H), 6,44(dd, J=1,2, 7,5 Гц, 1H), 6,29 (d, J=1,2 Гц, 1H), 3,73 (s, 3H), 2,93 (s, 2H), 2,79-2,50 (m, 4H), 2,33 (s, 3H), 1,41 (s, 6H)
1,341	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH ₂ - CH ₂ -	2-метил-6-1,3- бензоксазоліл-	¹ H ЯМР (400 МГц, DMSO-d ₆) д ppm 10,83 (br.s, 1H), 7,54 (dd, J=5,2, 8,9 Гц, 1H), 7,50 (d, J=8,1 Гц, 1H), 7,24 (d, J=1,4 Гц, 1H), 7,22 (t, J=8,9 Гц, 1H), 6,96 (dd, J=1,4, 8,1 Гц, 1H), 3,61 (s, 3H), 2,87-2,66 (m, 4H), 2,57 (s, 3H), 2,25 (s, 3H)
1,342	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH ₂ - CH ₂ -	2,2-дифтор-5-1,3- бензодіоксоліл-	¹ H ЯМР (400 МГц, хлороформ) д ppm 7,38 (dd, J=8,8, 5,1 Гц, 1H), 6,94 (t, J=8,8 Гц, 1H), 6,87 (d, J=8,1 Гц, 1H), 6,70-6,63 (m, 2H), 3,68 (s, 3H), 2,76-2,65 (m, 4H), 2,26 (s, 3H)

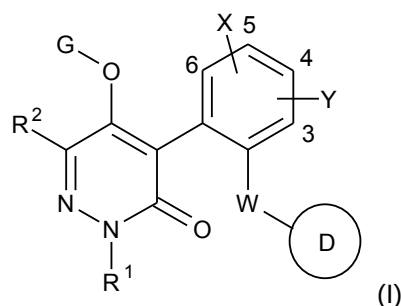
Приклади одержання сполук формули (I). Система нумерації, використовувана для опису положень X та Y, показана тільки для ясності



№ сполуки	R ¹	R ²	G	X	Y	W	D	Докладні дані ЯМР
1,344	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH ₂ - CH ₂ -	1-метил-3-індазоліл-	¹ H ЯМР (400 МГц, DMSO-d ₆) д ppm 10,86 (s, 1H), 7,59-7,53 (m, 2H), 7,34 (t, J=7,2 Гц, 1H), 7,27-7,21 (m, 2H), 7,02 (t, J=7,2 Гц, 1H), 3,93 (s, 3H), 3,58 (s, 3H), 2,99-2,92 (m, 2H), 2,87-2,83 (m, 2H), 2,23 (s, 3H)
1,345	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH ₂ - CH ₂ -	1-метил-5-піроло[2,3-b]піридиніл-	¹ H ЯМР (400 МГц, метанол) д ppm 8,12 (d, J=1,7 Гц, 1H), 7,95 (d, J=1,7 Гц, 1H), 7,52 (d, J=3,5 Гц, 1H), 7,46 (dd, J=5,1, 8,8 Гц, 1H), 7,10 (t, J=8,8 Гц, 1H), 6,64 (d, J=3,5 Гц, 1H), 3,93 (s, 3H), 3,63 (s, 3H), 3,11-2,99 (m, 2H), 2,98-2,82 (m, 2H), 2,30 (s, 3H)
1,346	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH ₂ - CH ₂ -	5-бензофураніл-	¹ H ЯМР (400 МГц, DMSO-d ₆) д ppm 10,82 (s, 1H), 7,93 (d, J=1,8 Гц, 1H), 7,57-7,53 (m, 1H), 7,45 (d, J=8,4 Гц, 1H), 7,28 (br. s, 1H), 7,21 (t, J=8,5 Гц, 1H), 6,92 (d, J=8,4 Гц, 1H), 6,87 (br. s, 1H), 3,61 (s, 3H), 2,76-2,67 (m, 4H), 2,25 (s, 3H)

Таблиця 5

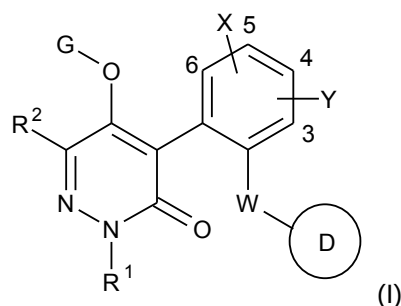
Приклади одержання сполук формули (I). Система нумерації, використовувана для опису положень X та Y, показана тільки для ясності



№ сполуки	R ¹	R ²	G	X	Y	W	D	Докладні дані ЯМР
1,347	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH ₂ - CH ₂ -	6-бензотіофеніл-	¹ H ЯМР (400 МГц, DMSO-d ₆) д ppm 10,83 (s, 1H), 7,87 (d, J=8,24 Гц, 1H), 7,72 (d, J=5,4 Гц, 1H), 7,58-7,54 (m, 1H), 7,52 (s, 1H), 7,37 (d, J=5,4 Гц, 1H), 7,22 (t, J=8,8 Гц, 1H), 7,00 (d, J=8,24 Гц, 1H), 3,61 (s, 3H), 2,79-2,69 (m, 4H), 2,25 (s, 3H)
1,348	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH ₂ - CH ₂ -	5-бензотіофеніл-	¹ H ЯМР (400 МГц, DMSO-d ₆) д ppm 10,83 (s, 1H), 7,86 (m, 1H), 7,72 (m, 1H), 7,58-7,52 (m, 2H), 7,37 (m, 1H), 7,22 (m, 1H), 7,01-6,98 (m, 1H), 3,61 (s, 3H), 2,79-2,71 (m, 4H), 2,25 (s, 3H)
1,349	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH ₂ - CH ₂ -	6-1,3- бензотіазоліл-	¹ H ЯМР (400 МГц, DMSO-d ₆) д ppm 10,81 (s, 1H), 9,30 (s, 1H), 7,95 (d, J=8,3 Гц, 1H), 7,81 (s, 1H), 7,57-7,53 (m, 1H), 7,24-7,16 (m, 2H), 3,59 (s, 3H), 2,82-2,73 (m, 4H), 2,24 (s, 3H)
1,351	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH ₂ - CH ₂ -	3-метил-6-1,2- бензоксазоліл-	¹ H ЯМР (400 МГц, DMSO-d ₆) д ppm 10,81 (s, 1H), 7,70 (d, J=8,04 Гц, 1H), 7,54 (m, 1H), 7,29 (s, 1H), 7,21 (t, J=8,7 Гц, 1H), 7,01 (d, J=8,04 Гц, 1H), 3,60 (s, 3H), 2,86-2,73 (m, 4H), 2,50 (s, 3H), 2,24 (s, 3H)

Таблиця 5

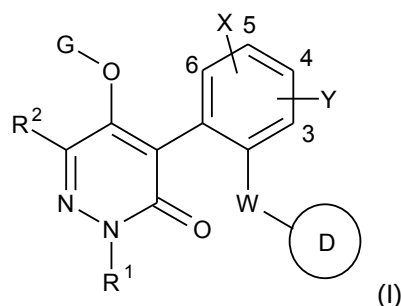
Приклади одержання сполук формули (I). Система нумерації, використувувана для опису положень X та Y, показана тільки для ясності



№ сполуки	R ¹	R ²	G	X	Y	W	D	Докладні дані ЯМР
1,352	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH ₂ - CH ₂ -	5-2-оксо-3H-1,3-бензоксазоліл-	¹ H ЯМР (400 МГц, метанол) д ppm 7,49 (dd, J=5,1, 8,8 Гц, 1H), 7,09 (t, J=8,8 Гц, 1H), 7,04 (d, J=8,2 Гц, 1H), 6,74 (dd, J=1,5, 8,2 Гц, 1H), 6,71 (d, J=1,5 Гц, 1H), 3,72 (s, 3H), 2,88-2,65 (m, 4H), 2,32 (s, 3H)
1,353	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH ₂ - CH ₂ -	6-1-метиліндазоліл-	¹ H ЯМР (400 МГц, метанол) д ppm 7,90 (d, J=1,0 Гц, 1H), 7,58 (dd, J=0,6, 8,3 Гц, 1H), 7,51 (dd, J=5,1, 8,8 Гц, 1H), 7,10 (br. s, 1H), 7,11 (t, J=8,8 Гц, 1H), 6,81 (dd, J=1,0, 8,3 Гц, 1H), 3,98 (s, 3H), 3,68 (s, 3H), 2,99-2,77 (m, 4H), 2,27 (s, 3H)
1,354	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH ₂ - CH ₂ -	5-1-метиліндазоліл-	¹ H ЯМР (400MHz, метанол) 7,86 (s, 1H), 7,49 (dd, J=5,1, 8,8 Гц, 1H), 7,38 (d, J=8,6 Гц, 1H), 7,35 (s, 1H), 7,09 (t, J=8,8 Гц, 1H), 7,07 (d, J=8,6 Гц, 1H), 4,00 (s, 3H), 3,70 (s, 3H), 2,92-2,74 (m, 4H), 2,30 (s, 3H)
1,355	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH ₂ - CH ₂ -	6-1-метиліндоліл-	¹ H ЯМР (400 МГц, DMSO-d ₆) д ppm 10,85 (s, 1H), 7,58-7,55 (m, 1H), 7,40 (d, 1H), 7,23-7,20 (m, 2H), 6,93 (s, 1H), 6,66 (d, 1H), 6,33 (d, 1H), 3,71 (s, 3H), 3,62 (s, 3H), 2,76-2,68 (m, 4H), 2,26 (s, 3H)

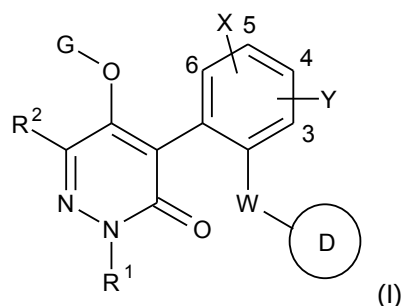
Таблиця 5

Приклади одержання сполук формули (I). Система нумерації, використовувана для опису положень X та Y, показана тільки для ясності



№ сполуки	R ¹	R ²	G	X	Y	W	D	Докладні дані ЯМР
1,356	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH ₂ - CH ₂ -	5-1-метиліндоліл-	¹ H ЯМР (400 МГц, DMSO-d6) д ppm 10,83 (s, 1H), 7,57-7,54 (m, 1H), 7,33-7,29 (m, 1H), 7,26 (d, 1H), 7,21 (t, 1H), 7,15 (s, 1H), 6,76 (d, 1H), 6,31 (d, 1H), 3,73 (s, 3H), 3,61 (s, 3H), 2,72-2,64 (m, 4H), 2,27 (s, 3H)
1,044	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH ₂ - CH ₂ -	1-нафтил-	¹ H ЯМР (400 МГц, DMSO-d6) д ppm 10,96 (s, 1H), 7,91 (d, J=8,2 Гц, 1H), 7,77 (d, J=8,2 Гц, 1H), 7,63-7,59 (m, 1H), 7,56 (d, J=8,4 Гц, 1H), 7,50 (t, J=7,6 Гц, 1H), 7,44-7,36 (m, 2H), 7,28-7,23 (m, 2H), 3,64 (s, 3H), 3,12-3,03 (m, 2H), 2,80-2,72 (m, 2H), 2,28 (s, 3H)
1,053	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH ₂ - CH ₂ -	2-нафтил-	¹ H ЯМР (400 МГц, DMSO-d6) д ppm 10,85 (s, 1H), 7,86-7,78 (m, 3H), 7,58-7,55 (m, 1H), 7,51-7,42 (m, 3H), 7,23 (t, J=8,7 Гц, 1H), 7,16-7,14 (1H), 3,61 (s, 3H), 2,88-2,72 (m, 4H), 2,25 (s, 3H)
1,357	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH ₂ - CH ₂ -	5-2-оксоіндолініл-	¹ H ЯМР (400 МГц, DMSO-d6) 10,82 (br. s, 1H), 10,28 (s, 1H), 7,55 (dd, J=5,3, 8,7 Гц, 1H), 7,21 (t, J=8,7 Гц, 1H), 6,85 (br. s, 1H), 6,79 (br.d, J=7,8 Гц, 1H), 6,68 (d, J=7,8 Гц, 1H), 3,61 (s, 3H), 3,40 (s, 2H), 2,73-2,52 (m, 4H), 2,26 (s, 3H)

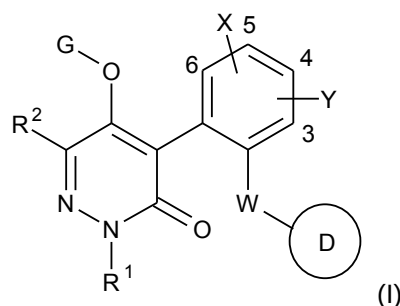
Приклади одержання сполук формули (I). Система нумерації, використовувана для опису положень X та Y, показана тільки для ясності



№ сполуки	R ¹	R ²	G	X	Y	W	D	Докладні дані ЯМР
1,358	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH ₂ - CH ₂ -	2-метил-1,3- діоксо-ізоіндолін- 5-іл-	¹ H ЯМР (500 МГц, хлороформ) д ppm 7,68 (d, J=7,6 Гц, 1H), 7,52 (br s, 1H), 7,45 (dd, J=5,2, 8,7 Гц, 1H), 7,39-7,34 (m, 1H), 7,05 (t, J=8,7 Гц, 1H), 3,78 (s, 3H), 3,15 (s, 3H), 3,04-2,85 (m, 3H), 2,82-2,71 (m, 1H), 2,32 (s, 3H)
1,359	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH ₂ - CH ₂ -	2-1,3- бензоксазоліл-	¹ H ЯМР (400 МГц, d6-DMSO), д ppm 10,81 (s, 1H), 7,65-7,57 (m, 3H), 7,36-7,30 (m, 2H), 7,28-7,23 (t, 1H), 3,53 (s, 3H), 3,09-2,99 (m, 4H), 2,19 (s, 3H)
1,360	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	-CH ₂ - CH ₂ -	2-1,3- бензотіазоліл	¹ H ЯМР (400 МГц, DMSO-D6) д ppm 10,85 (br. s, 1H), 8,04-8,02 (d, 1H), 7,91-7,89 (d, 1H), 7,61-7,58 (dd, 1H), 7,49-7,46 (t, 1H), 7,41-7,37 (t, 1H), 7,28-7,23 (t, 1H), 3,57 (s, 3H), 3,26-3,13 (m, 2H), 3,07-2,92 (m, 2H), 2,21 (s, 3H)
2,362	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	(E)- CH=CH-	6-2,2-диметил-3Н- бензофураніл-	¹ H ЯМР (400 МГц, метанол) 7,52 (dd, J=5,1, 8,8 Гц, 1H), 7,12 (t, J=8,8Hz, 1H), 7,05 (d, J=7,6 Гц, 1H), 6,91 (d, J=16,4 Гц, 1H), 6,70 (dd, J=1,3, 7,6 Гц, 1H), 6,62 (s, 1H), 6,47 (d, J=16,4 Гц, 1H), 3,66 (s, 3H), 2,97 (s, 2H), 2,26 (s, 3H), 1,42 (s, 6H)

Таблиця 5

Приклади одержання сполук формули (I). Система нумерації, використовувана для опису положень X та Y, показана тільки для ясності



№ сполуки	R ¹	R ²	G	X	Y	W	D	Докладні дані ЯМР
2,363	-Me	-Me	-H	6-F	3-Cl	(E)- CH=CH-	6-імідазо[1,2- а]піразиніл-	¹ H ЯМР (400MHz, DMSO-d6) 10,83 (br. s, 1H), 9,06 (s, 1H), 8,55 (d, J=1,1 Гц, 1H), 8,07 (s, 1H), 7,79 (d, J=1,1 Гц, 1H), 7,63 (dd, J=5,3, 8,8 Гц, 1H), 7,48 (d, J=15,9 Гц, 1H), 7,28 (t, J=8,8 Гц, 1H), 6,65 (d, J=15,9 Гц, 1H), 3,56 (s, 3H), 2,20 (s, 3H)
4,342	-Me	-Me	-(C=O)iPr	6-F	3-Cl	(E)- CH=CH-	2,2-дифтор-5-1,3- бензодіоксоліл-	¹ H ЯМР (400 МГц, хлороформ) δ=7,43 (dd, J=5,1, 8,9 Гц, 1H), 7,12 (d, J=1,6 Гц, 1H), 7,05-6,95 (m, 3H), 6,91 (d, J=16,5 Гц, 1H), 6,60 (d, J=16,5 Гц, 1H), 3,71 (s, 3H), 2,64 (spt, J=7,0 Гц, 1H), 2,23 (s, 3H), 1,10 (d, J=7,0 Гц, 3H), 1,07 (d, J=7,0 Гц, 3H)

БІОЛОГІЧНІ ПРИКЛАДИ

B1 Ефективність після появи сходів – тест 1

- Насіння ряду тестованих видів висівали в стандартний ґрунт у горщиках: *Solanum nigrum* (SOLNI), *Amaranthus retroflexus* (AMARE), *Setaria faberi* (SETFA), *Echinochloa crus-galli* (ECHCG), *Ipomoea hederacea* (IPOHE), *Lolium perenne* (LOLPE). Після культивування протягом 8 днів (після появи сходів) за контрольованих умов у теплиці (за 24/16 °С, день/ніч; 14-годинного світлового періоду; вологості 65 %) рослини обприскували водним розчином для обприскування, одержаним зі складу на основі технічного активного інгредієнта в розчині ацетон/вода (50:50), що містить 0,5 % Tween 20 (поліоксиетиленсорбітанмонолаурат, реєстр. № згідно CAS 9005-64-5). Сполуки застосовували з розрахунку 250 г/га. Потім тестовані рослини вирощували в теплиці у контрольованих тепличних умовах (за температури 24/16 °С, день/ніч; 14-годинного світлового періоду; вологості 65 %) та поливали двічі на добу. Через 13 днів у тесті проводили оцінку частки пошкодження, яке було завдане рослині. Значення біологічної активності визначали за п'ятибальною шкалою (5=80-100 %; 4=60-79 %; 3=40-59 %; 2=20-39 %; 1=0-19 %). Відсутність значення в таблиці вказує на те, що сполуку не тестували щодо даного виду.

Таблиця 6

Контроль деяких видів бур'янів за допомогою сполук формули (I) після післясходового застосування

Сполука	AMARE	SOLNI	SETFA	LOLPE	ECHCG	IPOHE
1,019	4	5	5	5	3	5
1,027	2		4	4	4	5
1,028	5	5	5	5	5	5
1,036	5	5	5	5	5	5
2,034	1	5	2	2		3
3,030	5	5	5	5	5	5
3,034	4	5	5	5	4	4
4,034	1	5	2	1		3
1,357	5	5	5	5	4	5
4,342	0	4	1	2	1	3

B2 Ефективність після появи сходів – тест 2

- Насіння ряду тестованих видів висівали в стандартний ґрунт у горщиках: *Amaranthus retroflexus* (AMARE), *Setaria faberi* (SETFA), *Echinochloa crus-galli* (ECHCG), *Ipomoea hederacea* (IPOHE), *Zea Mays* (ZEAMX), *Abutilon theophrasti* (ABUTH). Після культивування протягом 8 днів (після появи сходів) за контрольованих умов у теплиці (за 24/16 °С, день/ніч; 14-годинного світлового періоду; вологості 65 %) рослини обприскували водним розчином для обприскування, одержаним зі складу на основі технічного активного інгредієнта в розчині ацетон/вода (50:50), що містить 0,5 % Tween 20 (поліоксиетиленсорбітанмонолаурат, реєстр. № згідно CAS 9005-64-5). Сполуки застосовували з розрахунку 250 г/га. Потім тестовані рослини вирощували в теплиці у контрольованих тепличних умовах (за температури 24/16 °С, день/ніч; 14-годинного світлового періоду; вологості 65 %) та поливали двічі на добу. Через 13 днів у тесті проводили оцінку частки пошкодження, яке було завдане рослині. Значення біологічної активності визначали за п'ятибальною шкалою (5=80-100 %; 4=60-79 %; 3=40-59 %; 2=20-39 %; 1=0-19 %). Відсутність значення в таблиці вказує на те, що сполуку не тестували щодо даного виду.

Таблиця 7

Контроль деяких видів бур'янів за допомогою сполук формули (I) після післясходового застосування

Сполука	AMARE	ZEAMX	SETFA	ABUTH	ECHCG	IPOHE
1,339	4	0	4	3	5	4
1,340	5	5	5	5	5	4
1,341	5	4	4	5	5	5
1,342	5	4	4	5	5	5
1,318	4	2	5	4	4	4
1,344	3	1		4	2	3
1,345	4	2	4	4	3	4
1,346	2	2	0	4	4	3
1,347	4	4	4	4	4	4
1,348	4	4	4	3	4	4
1,349	4	2	4	4	4	4
1,350	4	3	4	5	4	3
1,351	5	5	4	5	4	5
1,352	4	3	4	4	4	3
1,353	4	3	4	4	4	3
1,354	4	4	4	4	5	4
1,355	4	1	2	3	1	4
1,356	5	2	5	4	4	4
1,044	3	1	0	3	0	4

Таблиця 7

Контроль деяких видів бур'янів за допомогою сполук формули (I) після післясходового застосування

Сполука	AMARE	ZEAMX	SETFA	ABUTH	ECHCG	IPOHE
1,053	4	4	4	3	3	4
1,357	2	5	4	4		4
1,359	3	1	3	4	3	2
1,361	3	4	5	5	4	5
2,363	1	0	0	0	0	2

В3 Ефективність до появи сходів – тест 1

- Насіння ряду тестованих видів висівали у стандартний ґрунт у горщиках: *Solanum nigrum* (SOLNI), *Amaranthus retroflexus* (AMARE), *Setaria faberi* (SETFA), *Echinochloa crus-galli* (ECHCG), *Ipomoea hederacea* (IPOHE), *Lolium perenne* (LOLPE). Після культивування протягом одного дня (до появи сходів) за контрольованих умов у теплиці (за 24/16°C, день/ніч, 14-годинного світлового періоду, вологості 65 %) рослини обприскували водним розчином для обприскування, одержаним зі складу технічного активного інгредієнта в розчині ацетон/вода (50:50), що містить 0,5 % Tween 20 (поліоксиетиленсорбітан монолаурат, реєстр. № згідно CAS 9005-64-5). Сполуки застосовували з розрахунку 250 г/га. Потім тестові рослини вирощували у теплиці за контрольованих умов (за 24/16°C, день/ніч, 14-годинного світлового періоду, вологості 65 %) та поливали двічі на день. Через 13 днів у тесті проводили оцінку частки пошкодження, яке було завдане рослині. Значення біологічної активності визначали за п'ятибальною шкалою (5=80-100 %; 4=60-79 %; 3=40-59 %; 2=20-39 %; 1=0-19 %). Відсутність значення в таблиці вказує на те, що сполуку не тестували щодо даного виду.

Таблиця 8

Контроль деяких видів бур'янів за допомогою сполук формули (I) після досходового застосування

Сполука	AMARE	SOLNI	SETFA	LOLPE	ECHCG	IPOHE
1,019	5	5	4	3	1	1
1,027	1	4	1	3	3	3
1,028	5	5	5	5	1	5
1,036	5	5	5	5	5	5
2,034	1	2	1	1	1	0
3,030	5	5	5	5	5	5
3,034	5	5	5	5	5	2
4,034	0	1	0	0	0	0
4,342	1	3	0	0	0	1

В4 Ефективність до появи сходів – тест 2

- Насіння ряду тестованих видів висівали у стандартний ґрунт у горщиках: *Amaranthus retroflexus* (AMARE), *Setaria faberi* (SETFA), *Echinochloa crus-galli* (ECHCG), *Ipomoea hederacea* (IPOHE), *Zea Mays* (ZEAMX), *Abutilon theophrasti* (ABUTH). Після культивування протягом одного дня (до появи сходів) за контрольованих умов у теплиці (за 24/16°C, день/ніч, 14-годинного світлового періоду, вологості 65 %) рослини обприскували водним розчином для обприскування, одержаним зі складу технічного активного інгредієнта в розчині ацетон/вода (50:50), що містить 0,5 % Tween 20 (поліоксиетиленсорбітан монолаурат, реєстр. № згідно CAS 9005-64-5). Сполуки застосовували з розрахунку 250 г/га. Потім тестові рослини вирощували у теплиці за контрольованих умов (за 24/16 °C, день/ніч, 14-годинного світлового періоду, вологості 65 %) та поливали двічі на день. Через 13 днів у тесті проводили оцінку частки пошкодження, яке було завдане рослині. Значення біологічної активності визначали за п'ятибальною шкалою (5=80-100 %; 4=60-79 %; 3=40-59 %; 2=20-39 %; 1=0-19 %). Відсутність значення в таблиці вказує на те, що сполуку не тестували щодо даного виду.

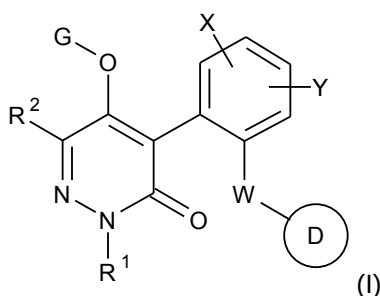
Таблиця 9

Контроль деяких видів бур'янів за допомогою сполук формули (I) після досходового застосування

Сполука	AMARE	ZEAMX	SETFA	ABUTH	ECHCG	IPOHE
1,339	5	1	5	4	5	2
1,340	5	3	5	5	5	5
1,341	5	4	5	5	5	5
1,342	5	1	5	4	5	
1,318	5	2	5	3	5	4
1,344	3	0	2	4	2	3
1,345	5	1	5	4	2	5
1,346	3	1	0	4	0	3
1,347	5	3	3	5	2	5
1,348	5	1	3	3	4	5
1,349	5	4	5	4	5	5
1,350	5	4	5	5	5	5
1,351	5	5	5	5	5	5
1,352	5	4	5	4	3	3
1,353	5	4	5	4	5	5
1,354	4	4	5	4	5	5
1,355	3	1	1	0	0	2
1,356	3	0	1	1	1	2
1,044	2	1	0	3	0	3
1,053	4	1	2	2	2	1
1,357	4	1	4	4	4	3
1,359	5	3	5	5	5	4
1,361	4	1	5	5	3	4
2,363	5	2	4	5	5	5
1,339	1	0	1	0	1	0

ФОРМУЛА ВИНАХОДУ

5 1. Сполука формули (I)



або її сіль, або N-оксид,

де

R¹ вибраний із групи, що складається з метилу, етилу, н-пропілу, циклопропілу, пропаргілу або C₁галогеналкілу;

R² вибраний із групи, що складається з водню, галогену, C₁-C₆алкілу, C₁-C₆галогеналкілу, C₁-C₆алкокси, C₁-C₃алкокси-C₁-C₃алкілу, C₃-C₆циклоалкілу, C₂-C₆алкенілу, C₂-C₆галогеналкенілу, C₂-C₆алкінілу та C₂-C₆галогеналкінілу;

G являє собою водень або C(O)R³, де R³ являє собою ізопропіл, трет-бутил, метил, етил, пропаргіл, метокси, етокси або трет-бутоксид;

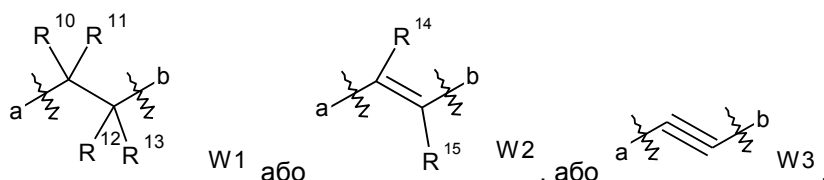
кожен із R⁴ і R⁵, незалежно, вибраний із групи, що складається з водню, C₁-C₆алкілу, C₁-C₆алкокси і C₃-C₆циклоалкілу, або R⁴ і R⁵ разом можуть утворювати морфолінільне кільце; і

X являє собою водень, галоген або C₁галогеналкіл;

Y являє собою водень, C₁-С₃алкіл, циклопропіл, C₁-С₃галогеналкіл або галоген;

D являє собою або заміщену або незаміщену нафталінову кільцеву систему або заміщену або незаміщену 8-10-членну біциклічну насичену, частково насичену або ненасичену гетероциклічну кільцеву систему, що містить 1, 2, 3 або 4 гетероатоми, незалежно вибрані з кисню, азоту і

- 5 сірки, і при цьому, якщо D заміщений, то він заміщений за щонайменше одним атомом вуглецю в кільці за допомогою R⁸ та/або за щонайменше одним атомом азоту в кільці за допомогою R⁹; кожен R⁸ являє собою, незалежно, кисень, гідроксил, галоген, ціано, C₁-С₆алкіл, C₁-С₆галогеналкіл, C₃-С₆циклоалкіл, C₁-С₆алкокси, C₁-С₆галогеналкокси, C₁-С₃алкокси-С₁-С₃алкіл, C₁-С₃галогеналкокси-С₁-С₃алкіл-, C₁-С₃алкокси-С₁-С₃алкокси-С₁-С₃алкіл-, C₂-С₆алкеніл, C₂-С₆галогеналкеніл, C₂-С₆алкініл, C₂-С₆галогеналкініл, C₁-С₆гідроксіалкіл-, C₁-С₆алкілкарбоніл-, C₁-С₆галогеналкілкарбоніл-, C₃-С₆циклоалкілкарбоніл-, C₁-С₆алкіл-S(O)_m-, -S(O)_m-C₁-С₆галогеналкіл, -S(O)_m-C₃-С₆циклоалкіл, -O-S(O)₂-C₁-С₃алкіл, -C₁-С₃алкіл-S(O)_m-C₁-С₆алкіл, -C₁-С₃алкіл-S(O)_m-C₁-С₆галогеналкіл, -C₁-С₃алкіл-S(O)_m-C₃-С₆циклоалкіл, ціано-С₁-С₆-алкіл-, -NR⁴R⁵, -C(C₁-С₃алкіл)=N-O-C₁-С₃алкіл, -C(S)NH₂, C₁-С₆алкіламініотіокарбоніл-, ді(C₁-С₆алкіл)амінотіокарбоніл-, C₃-С₆циклоалкіламініотіокарбоніл-S(O)₂NH₂, -S(O)₂NHC(O)C₁-С₃алкіл, C₁-С₆алкіламіносультоніл-, ді(C₁-С₆алкіл)аміносультоніл-, C₃-С₆циклоалкіламіносультоніл-, -C(O)OH, -C(O)OC₁-С₆алкіл, -C(O)NHS-(O)₂-C₁-С₆алкіл, -C(O)NR⁴R⁵, -NR⁴C(O)NR⁴R⁵, C₁-С₆алкілкарбоніл(C₁-С₆алкіл)аміно-, C₁-С₆галогеналкілкарбоніламіно-, C₁-С₆галогеналкілкарбоніл(C₁-С₆алкіл)аміно-, C₁-С₆алкоксикарбоніламіно-, C₁-С₆алкоксикарбоніл(C₁-С₆алкіл)аміно-, C₁-С₆алкілсультоніламіно-, C₁-С₆алкілсультоніл(C₁-С₆алкіл)аміно-, C₁-С₆галогеналкілсультоніламіно-, C₁-С₆галогеналкілсультоніл(C₁-С₆алкіл)аміно-, C₃-С₆циклоалкілсультоніламіно-, C₃-С₆циклоалкілсультоніл(C₁-С₆алкіл)аміно-, C₁-С₆алкіламінокарбоніламіно-, C₁-С₆алкіламінокарбоніл(C₁-С₆алкіл)аміно-, ді(C₁-С₆алкіл)амінокарбоніламіно-, C₁-С₆галогеналкіламінокарбоніламіно-, C₁-С₆галогеналкіламінокарбоніл(C₁-С₆алкіл)аміно-, ді(C₁-С₆галогеналкіл)амінокарбоніламіно-, ди(C₁-С₆галогеналкіл)амінокарбоніл(C₁-С₆алкіл)аміно-, гідроксіаміно-, гідроксі(C₁-С₆алкіл)аміно-, C₁-С₆алкоксиаміно-, C₁-С₆алкокси(C₁-С₆алкіл)аміно-, C₁-С₆галогеналкоксиаміно-, C₁-С₆галогеналкокси(C₁-С₆алкіл)аміно або кільцеву систему, вибрану із групи, що складається з фенільного кільця, 5-6-членного гетероарильного кільця і 3-6-членного гетероциклічного
- 10 кільця, де вказана кільцева система заміщена за допомогою 0-5 R¹⁶; т являє собою ціле число, яке дорівнює 0, 1 або 2; кожен R⁹ являє собою, незалежно, C₁-С₄алкіл, C₁-С₄галогеналкіл, гідроксил, C₁-С₄алкокси або C₁-С₄алкілтіо;
- 15 кожен R¹⁶ являє собою, незалежно, галоген, ціано, C₁-С₆алкіл, C₁-С₆галогеналкіл, C₁-С₆алкокси або C₁-С₆галогеналкокси; і W являє собою:



- 40 "a" позначає точку приєднання до фенілпіридазинового/фенілпіридазиндіонового фрагмента, "b" позначає точку приєднання до кільця D, кожен із R¹⁰, R¹², R¹⁴ і R¹⁵ являє собою водень; і кожен із R¹¹ і R¹³ являє собою водень.
- 45 2. Сполука за будь-яким із попередніх пунктів, де X знаходиться в орто-положенні відносно піридазинового/піридазиндіонового фрагмента.
3. Сполука за будь-яким із попередніх пунктів, де Y знаходиться в орто-положенні відносно -W-D-фрагмента.
4. Сполука за будь-яким із попередніх пунктів, де D являє собою заміщену або незаміщену нафталінову, індолізинову, індольную, ізоіндольную, індолінову, ізоіндолінову, 3-Н-індольную, бензофуранову, бензотіофенову, 1Н-індазолну, бензимидазолну, бензтіазольну, бензоксазолну, бензодіоксольную, пуринову, 4Н-хінолізинову, хінолінову, ізохінолінову, тетрагідрохінолінову, цінолінову, фталазинову, хіноксалинову, 1-8-нафтиридинову, птеридинову, 1Н-піроло[2,3-5b]піридинову, імідазо[1,2-a]піризинову або 1Н-бензотриазольну
- 50 кільцеву систему, і при цьому, якщо D заміщений, то він заміщений за щонайменше одним атомом азоту в кільці за допомогою R⁸ та/або за щонайменше одним атомом азоту в кільці за допомогою R⁹.
- 55

5. Сполука за будь-яким із попередніх пунктів, де D являє собою заміщену або незаміщену нафталінову, індолізову, індолюну, ізоіндолюну, 3-Н-індолюну, бензофуранову, бензотіофенову, 1Н-індазолну, бензімідазолну, бензтіазолну, бензоксазолну, пуринову, 4Н-хінолізову, хінолінову, ізохінолінову, тетрагідрохінолінову, цинолінову, фталазинову, хіноксалінову, 1-8-нафтиридинову або птеридинову кільцеву систему, і при цьому, якщо D заміщений, то він заміщений за щонайменше одним атомом вуглецю в кільці за допомогою R⁸ та/або за щонайменше одним атомом азоту в кільці за допомогою R⁹.
6. Сполука за будь-яким із попередніх пунктів, де кожен R⁸ являє собою, незалежно, кисень, гідроксил, галоген, ціано, C₁-C₆алкіл, C₁-C₆галогеналкіл, C₁-C₆галогеналкокси, C₁-C₃галогеналкокси-C₁-C₃алкіл-, C₁-C₆алкокси, C₁-C₃алкокси-C₁-C₃алкіл, C₁-C₃алкокси-C₁-C₃алкокси-C₁-C₃алкіл-, C₃-C₆циклоалкіл, C₂-C₆алкеніл, C₂-C₆галогеналкеніл, C₂-C₆алкініл, C₁-C₆гідроксіалкіл-, C₁-C₆алкілкарбоніл-, C₁-C₆алкіл-S(O)_m-, аміно, C₁-C₆алкіламіно, C₁-C₆діалкіламіно, -C(C₁-C₃алкіл)=N-O-C₁-C₃алкіл або C₂-C₆галогеналкініл.
7. Сполука за будь-яким із попередніх пунктів, де W являє собою W1.
8. Сполука за будь-яким із пп. 1-6, де W являє собою W2.
9. Гербіцидна композиція, яка містить гербіцидну сполуку за будь-яким із пп. 1-8 і прийнятний з погляду сільського господарства допоміжний засіб для складання.
10. Гербіцидна композиція за п. 9, яка додатково містить щонайменше один додатковий пестицид.
11. Гербіцидна композиція за п. 10, де додатковий пестицид являє собою гербіцид або антидот гербіциду.
12. Спосіб контролю росту небажаних рослин, відповідно до якого сполуку формули (I) за будь-яким із пп. 1-8 або гербіцидну композицію за будь-яким із пп. 9-11 застосовують щодо небажаних рослин або місця їхнього зростання.
13. Застосування сполуки формули (I) за будь-яким із пп. 1-8 як гербіциду.