



ДЕРЖАВНА СЛУЖБА  
ІНТЕЛЕКТУАЛЬНОЇ  
ВЛАСНОСТІ  
УКРАЇНИ

УКРАЇНА

(19) **UA** (11) **112844** (13) **C2**  
(51) МПК  
**C07C 69/78** (2006.01)

## (12) ОПИС ДО ПАТЕНТУ НА ВИНАХІД

(21) Номер заявки: **а 2013 01705**  
(22) Дата подання заявки: **26.07.2011**  
(24) Дата, з якої є чинними права на винахід: **10.11.2016**  
(31) Номер попередньої заявки відповідно до Паризької конвенції: **1012586.2**  
(32) Дата подання попередньої заявки відповідно до Паризької конвенції: **27.07.2010**  
(33) Код держави-учасниці Паризької конвенції, до якої подано попередню заявку: **GB**  
(41) Публікація відомостей про заявку: **10.04.2013, Бюл.№ 7**  
(46) Публікація відомостей про видачу патенту: **10.11.2016, Бюл.№ 21**  
(86) Номер та дата подання міжнародної заявки, поданої відповідно до Договору РСТ: **РСТ/IB2011/053325, 26.07.2011**

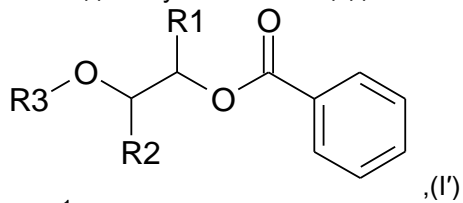
(72) Винахідник(и):  
**Белл Гордон Аластер (GB),  
Уоллер Енн (GB),  
Вейлз Джеффри Стівен (GB)**  
(73) Власник(и):  
**СІНГЕНТА ЛІМІТЕД,**  
European Regional Centre, Priestley Road,  
Surrey Research Park, Guildford Surrey GU2  
7YH, United Kingdom (GB)  
(74) Представник:  
**Петров Андрій Володимирович, реєстр.  
№139**  
(56) Перелік документів, взятих до уваги експертизою:  
EP 0268927 A2, 01.06.1988  
IL 58111 A, 30.04.1984  
DE 2443645 A1, 01.04.1976  
WO 02102329 A1, 27.12.2002  
EP 2000485, A1, 10.12.2008  
US 3649546 A, 14.03.1972  
WO 9716481, 09.05.1997  
US 2004063834 A1, 01.04.2004  
Truncated Cinchona alkaloids as catalysts in enantioselective monobenzylation of meso-1,2-diols / Kundig P. E. et al. // Chem. Commun. – 2008. – 3519 – 3521.  
Reaction of diols and triols with tryalkyl orthoesters: facile one-pot formation of oxacyclic compounds from triols / Fujioka et al. // Heterocycles. – 1993. – Vol. 35 (2). – P. 665-669.  
Homologation of boronic esters with lithiated epoxides for stereocontrolled synthesis of 1,2- and 1,3-diols and 1,2,4-triols / Vedrenne E. // Organic letters. – 2009. – Vol. 11 (1). – P. 166-168.  
Estrogenic potency of food-packaging-associated plasticizers and antioxidants as detected in ER (alpha) and ER (beta) reported gene cell lines / Marcel G. R. et. al. // Agricultural and food chemistry. – 2006. – Vol. 54. – P. 4407-4416.  
A novel and efficient method for inside selective esterification of terminal vic-diols / Ikejiri M. et al. // Tetrahedron Letters. – 2004. – Vol. 45 (6). – P. 1243 – 1246.

## (54) ПЕСТИЦИДНИЙ СКЛАД

(57) Реферат:

UA 112844 C2

Винахід стосується пестицидного складу, який містить агрохімікат і сполуку формули (I')

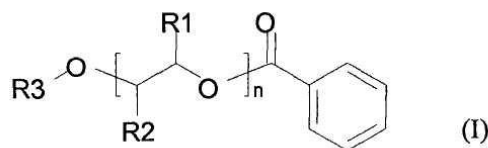


де R<sup>1</sup> являє собою водень, метил, етил, пропіл або бутил; R<sup>2</sup> являє собою метил або етил і R<sup>3</sup> являє собою водень, метил або етил; де агрохімікатом є стробілурин, триазол або інгібітор сукцинатдегідрогенази, і де склад є емульгованим концентратом або емульсією.

Даний винахід стосується використання певних алкіленглікольбензоатних сполук як розчинників, особливо в складах, зокрема, в агрохімічних складах та в складах, нешкідливих для довкілля; та певних нових сполук. Розчинники згідно з даним винаходом виявляються особливо ефективними під час розчинення пестицидів з родин стробілуринів, тріазолів та інгібіторів сукцинатдегідрогенази (SDHI) (зокрема піразолів; належним чином - піразамних хімічних складів).

В даний час від хіміка, що готує склад, вимагають враховувати ряд екологічних критеріїв під час розробки нових складів. В ідеалі належний розчинник буде виявляти більшість або усі наступні властивості: відмінну розчинювальну здатність щодо пестицидів або інших органічних молекул; бути отриманим з рослинних або тваринних поновлюваних ресурсів; слабе подразнення шкіри; низьку екотоксичність, наприклад, для дафній; низький вміст летких органічних речовин та високу температуру займання. Кожна зі сполук згідно з даним винаходом виявляє всі або більшість цих властивостей, зокрема, відмінну розчинювальну здатність; сполуки можуть бути успішно застосовані як розчинники.

Таким чином, даний винахід забезпечує склад, який містить сполуку формули (I)



де  $R^1$  являє собою водень, метил, етил, пропіл або бутил;  $R^2$  являє собою метил або етил;  $R^3$  являє собою водень, метил або етил; та  $n$  дорівнює 1, 2 або 3.

Пропільні та бутильні групи являють собою прямі або розгалужені ланцюги. Прикладами є ізопропіл, н-пропіл, н-бутил, втор-бутил та трет-бутил.

$R^1$  належно являє собою H.

$R^2$  належно являє собою метил.

$R^3$  належно являє собою H.

$n$  належно дорівнює 1.

Даний винахід належно забезпечує застосування сполуки формули (I) в агрохімічному складі.

Сполуки згідно з даним винаходом можна застосовувати як розчинники.

Більшість сполук, розкритих у даному винаході, є новими.

Отже, у додатковому аспекті даний винахід забезпечує сполуку формули (I), як визначено вище; за умови, що сполука не є 2-гідроксипропілбензоатом, 2-гідроксі-1-метилетилбензоатом, 1,2-бутандіол-2-бензоатом, 1,2-бутандіол-1-бензоатом або 1-пропанол-2-(2-гідроксипропоксі)-1-бензоатом.

В таблиці 1 забезпечуються структурні дані та певні дані спектрального аналізу для належних сполук формули (I):

Таблиця 1

Номер сполуки	$R^1$	$R^2$	$R^3$	$n$	$MH^+$ з ГХМС	смуга ІЧ- спектру $cm^{-1}$ ОН	смуга ІЧ- спектру $cm^{-1}$ складний ефір	смуга ІЧ- спектру $cm^{-1}$ ароматична речовина
1	H	CH <sub>3</sub>	H	1	181	3340	1712	1600
2	H	CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	H	1	195	3355	1715	1600

Сполуки згідно з даним винаходом легко одержати; наприклад, простий гліколевий ефір взаємодіє з ароматичною сполукою з належною заміщеною групою, наприклад, бензоїлхлоридом.

Сполуки згідно з даним винаходом можна застосовувати в ряді використань цільового призначення (включаючи агрохімічні складі), зокрема, як розчинники. Ці розчинники можна застосовувати із широким різноманіттям речовин, включаючи гербіциди, фунгіциди, акарициди, нематодциди та інсектициди [а також регулятори росту рослин].

Даний винахід охоплює всі ізомери або суміші ізомерів сполук формули (I), а також охоплює суміші двох або більше різних сполук формули (I).

Сполуки даного винаходу можна застосовувати для складання розчинів різноманітних речовин, включаючи агрохімікати, що можуть бути складені як емульсійні або дисперсійні концентрати, емульсії у воді або олії, мікроінкапсульовані склади, аерозольні розпорошені рідини або склади для дрібнокрапельного окроплення; та вони додатково можуть бути складені в гранульовані матеріали або порошки, наприклад, для використання в сухому вигляді або як дисперговані у воді склади. Сформовані в такий спосіб розчини також можна застосовувати безпосередньо на ґрунті, або рослинах, або в інших використаннях, що не стосуються агрохімії.

Приклади таких використань включають виробництво паперу, очищення води, використання в лісовому господарстві, заходи з санітарно-гігієнічної обробки, застосування в громадських басейнах та інших водотоках, у використаннях поблизу рік, озер, водосховищ або морів та у використаннях, де викиди в атмосферу повинні бути зведені до мінімуму або контролюватися та де завдання збитку атмосфері не є бажаним. Приклади включають застосування у фарбах для зовнішніх та внутрішніх робіт, покриттях, лаках, восках або інших захисних шарах або замутнювачах, барвниках або фотозахисних засобах; у фарбуванні, пігментації або застосуванні чорнила; у речовинах для очищення, призначених для домашнього, садового або промислового використання; та у використанні в милі або мийних засобах для промислового, домашнього застосування або застосування в довікллі. Сполуки згідно з даним винаходом можна також застосовувати в шампунях, побутових мийних засобах та в побутових очисниках [наприклад, в очисниках для духової шафи та очисниках поверхні].

Сполуки згідно з даним винаходом мають виняткову розчинювальну здатність щодо широкого різноманіття агрохімікатів, фармацевтичних та інших господарсько-цінних сполук, до того ж розчинювальна здатність поширюється також на розчинення бруду, жиру та воску.

Даний винахід проілюстрований наступними прикладами, у яких:

г = грами °C = градуси за Цельсієм

Якщо не зазначено інше, кожна концентрація виражається у відсотках за вагою.

Розчинники згідно з даним винаходом особливо ефективні під час розчинення пестицидів, що належать родинам: стробілуринів, тріазолів та інгібіторів сукцинатдегідрогенази (SDHI) (зокрема піразолів; належним чином - піразамних хімічних складів). Цей факт продемонстрований у прикладах, де показано, що розчинність пестицидів азоксистробіну, дифеноконазолу та ізопіразаму є вищою в розчиннику пропіленглікольбензоаті, ніж у групах широко застосовуваних розчинників. Розчинність ципродинілу, хлорталонілу та біциклопірону в пропіленглікольбензоаті є на подив нижчою, ніж у тих самих серіях широко застосовуваних розчинників. Розчинності вказано як процентні значення w/w за 20 °C.

#### ПРИКЛАД 1

Даний приклад ілюструє високу розчинність кожного з ряду агрохімічних активних інгредієнтів у розчинниках згідно з даним винаходом [сполуки 1 та 2 таблиці 1].

Скляну посудину наповнили приблизно на одну восьму активним інгредієнтом [AI], а потім додавали розчинник [у даному прикладі пропіленглікольбензоат або бутиленглікольбензоат], поки посудина не заповнювалася приблизно на одну третину. Отримуваний в результаті зразок змішали з Whirlimixer™ та потім зберігали за 25 °C. Зразок перевіряли кожні кілька днів, потім, якщо в ньому був відсутній твердий активний інгредієнт, додавали додатковий активний інгредієнт; потім, якщо в ньому не залишалося рідини, додавали додатковий розчинник. Цю процедуру повторювали доти, доки зразок не прийшов у рівновагу протягом 4 тижнів після останнього додавання або активного інгредієнта, або розчинника. Шар надосадової рідини потім аналізували за допомогою газової хроматографії на концентрацію активного інгредієнта; результати наведено в таблиці 2:

Таблиця 2

Активний інгредієнт	Розчинність у пропіленглікольбензоаті за 25°C (% w/w)	Розчинність у бутиленглікольбензоаті за 25°C (% w/w)
Дифеноконазол	50,5	-
Хлорталонил	1,32	-
Ципродиніл	18,4	-
4-гідроксі-3-[2-(2-метоксіетоксиметил)-6-трифторметилпіридин-3-карбоніл]-біцикло[3.2.1]окт-3-ен-2-он	27,4	-
Азоксистробін	5,5	8,1
Ципроконазол	4,5	6,9
Ізопіразам	12,7	12,4

ПРИКЛАД 2 Цей приклад показує, що розчинники згідно з даним винаходом є, зокрема, ефективними під час розчинення пестицидів, що належать до родин: стробілуринів, тріазолів та інгібіторів сукцинатдегідрогенази (SDHI) (зокрема піразолів; належним чином - піразамних хімічних складів). У таблицях 3а та 3b показана розчинність пестицидів азоксистробіну, дифеноконазолу, ізопіразаму, ципродинілу, хлорталонілу та біциклопірону в розчиннику пропіленглікольбензоаті [сполука 1 таблиці 1]. Для порівняння розчинності в серіях широко застосовуваних розчинників також зведені в таблицю. Дані показують, що в переважній більшості випадків пропіленглікольбензоат є кращим розчинником для перших трьох пестицидів (відповідно тріазолу, SDHI та стробілурину), ніж інші розповсюджені розчинники. Розчинності вказано як процентні значення w/w за 20 °C.

Таблиця 3а

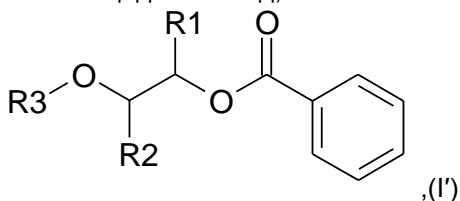
Розчинник	Дифеноконазол	Ізопіразам	Азоксистробін
Пропіленглікольбензоат	50,5	12,7	5,5
н-Бутилбензоат	29,4	7,6	4,0
Solvesso™ 100 ND/ULN	37,8	0,0	1,7
Solvesso™ 200 ND/ULN	37,7	5,8	5,6
Dowanol™ PnB	34,4	8,8	1,3
Ізоборнілацетат	24,9	6,8	1,6
Benzoflex™ 9-88	19,8	6,3	4,2
Бутиллактат	47,1	16,5	4,6
Dowanol™ PGDA	34,1	6,9	9,4
Бензилацетон	44,9	12,6	14,1
Бензилацетат	46,0	8,9	13,8
Тріацетин	22,3	4,3	6,4

**Таблиця 3б**

Розчинник	Ципродиніл	Біциклопірон	Хлорталоніл
Пропіленглікольбензоат	18,4	27,4	1,3
н-Бутилбензоат	35,5	45,6	2,3
Solvesso™ 100 ND/ULN	31,1	52,3	7,1
Solvesso™ 200 ND/ULN	34,4	50,7	9,6
Dowanol™ PnB	41,7	32,0	0,2
Ізоборнілацетат	32,8	38,4	0,5
Benzoflex™ 9-88	22,6	23,2	1,9
Бутиллактат	52,5	48,6	0,4
Dowanol™ PGDA	31,3	38,3	0,6
Бензилацетон	39,6	53,0	2,8
Бензилацетат	36,8	55,5	2,0
Тріацетин	18,9	33,3	0,4

**ФОРМУЛА ВИНАХОДУ**

- 5 1. Пестицидний склад, який містить агрохімікат і сполуку формули (I')



де R<sup>1</sup> являє собою водень, метил, етил, пропіл або бутил; R<sup>2</sup> являє собою метил або етил і R<sup>3</sup> являє собою водень, метил або етил; де агрохімікатом є стробілури, триазол або інгібітор сукцинатдегідрогенази, і де склад є емульгованим концентратом або емульсією.

2. Пестицидний склад за п. 1, де R<sup>1</sup> являє собою водень.

3. Пестицидний склад за п. 1 або п. 2, де R<sup>3</sup> являє собою водень.

4. Пестицидний склад за будь-яким з пп. 1-3, де агрохімікатом є азоксистробін, дифеноконазол або ізопіразам.

Комп'ютерна верстка М. Мацело

Державна служба інтелектуальної власності України, вул. Василя Липківського, 45, м. Київ, МСП, 03680, Україна

ДП "Український інститут інтелектуальної власності", вул. Глазунова, 1, м. Київ – 42, 01601