(19) SUOMI - FINLAND
(FI)

PATENTTI- JA REKISTERIHALLITUS
PATENT- OCH REGISTERSTYRELSEN
FINNISH PATENT AND REGISTRATION OFFICE

(10) **FI 841301 A7**

(12) **JULKISEKSI TULLUT PATENTTIHAKEMUS**
**PATENTANSÖKAN SOM BLIVIT OFFENTLIG**
**PATENT APPLICATION MADE AVAILABLE TO THE PUBLIC**

(21) Patenttihakemus - Patentansökan - Patent application 841301

(51) Kansainvälinen patenttiluokitus - Internationell patentklassifikation - International patent classification ($IPC^4$)
C07D239/46
A01N 43/54

(22) Tekemispäivä - Ingivningsdag - Filing date **02.04.1984**

(23) Saapumispäivä - Ankomstdag - Reception date **02.04.1984**

(41) Tullut julkiseksi - Blivit offentlig - Available to the public **09.10.1984**

(43) Julkaisupäivä - Publiceringsdag - Publication date **12.06.2019**

(32) (33) (31) Etuoikeus - Prioritet - Priority

08.04.1983 CH 1899/83-9

(71) Hakija - Sökande - Applicant

1 •**Ciba-Geigy AG,** Klybeckstrasse 141, 4002 Basel, SVEITSI, (CH)

(72) Keksijä - Uppfinnare - Inventor

1 •**Hubele, Adolf,** Switzerland, SVEITSI, (CH)
2 •**Eckhardt, Wolfgang,** BRD, SAKSA, (DE)

(74) Asiamies - Ombud - Agent

**Oy Jalo Ant-Wuorinen Ab,** Iso Roobertinkatu 4 - 6 A, 00120 Helsinki

(54) Keksinnön nimitys - Uppfinningens benämning - Title of the invention
**Mikrobisidit.**

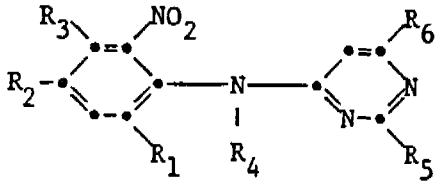
**Mikrobisider.**

# Mikrobisidit - Mikrobicider

Tämä keksintö koskee uusia N-(2-nitrofenyyli)-4-aminopyrimidiinijohdannaisia, joilla on jäljempänä esitetty kaava (I).

Keksintö koskee myös näiden aineiden valmistamista sekä mikrobisidisia aineita, jotka sisältävät aktiiviaineena ainakin yhden näistä yhdisteistä. Keksintö koskee myös mainittujen aineiden valmistamista sekä aktiiviaineen tai aineen käyttöä vahingollisten mikro-organismien torjumiseksi, mieluimmin kasveille vahingollisten sienien torjumiseksi.

Keksinnön mukaisia yhdisteitä ovat yleisen kaavan (I) mukaiset yhdisteet



(I)

joissa

$R_1$ tarkoittaa $NO_2$:ta tai $CF_3$:a;

$R_2$ tarkoittaa $NO_2$:ta tai $CF_3$:a;

$R_3$ tarkoittaa vetyä tai halogeenia;

$R_4$ tarkoittaa vetyä tai ryhmää $-C(O)R_7$, jossa $R_7$ tarkoittaa substituoimatonta tai halogeenilla, $C_1$-$C_3$-alkoksilla tai $C_1$-$C_3$-alkyylitiolla substituoitua $C_1$-$C_4$-alkyyliä;

$R_5$ ja $R_6$ tarkoittavat, toisistaan riippumatta, halogeenia, $C_1$-$C_6$-alkoksia, halogeenilla tai $C_1$-$C_3$-alkoksilla substituoitua $C_1$-$C_6$- alkyyliä, halogeenilla tai $C_1$-$C_3$-alkoksilla substituoitua $C_1$-$C_6$-alkoksia, $C_1$-$C_6$-alkyylitioa, halogeenilla tai $C_1$-$C_3$-alkoksilla substituoitua $C_1$-$C_6$-alkyylitioa, $C_3$-$C_6$-sykloalkoksia, $C_3$-$C_6$-sykloalkyylitioa, $C_3$-$C_6$-alkenyylioksia, $C_3$-$C_6$-alkenyylitioa, $C_3$-$C_6$-alkinyylioksia, $C_1$-$C_6$-alkyylisulfoksyyliä, $C_1$-$C_6$-alkyylisulfonyyliä, $C_1$-$C_6$-sulfonyylioksia, $C_3$-$C_6$-alkenyylisulfoksyyliä, $C_3$-$C_6$-alkenyylisulfonyyliä, $C_3$-$C_6$-sykloalkyylisulfoksyyliä tai $C_3$-$C_6$-sykloalkyylisulfonyyliä.

Sanonnalla alkyyli itsessään tai toisen substituentin osana, on ymmärrettävä tarkoitettavan aina mainittujen hiiliatomien lukumäärän mukaan esimerkiksi seuraavia ryhmiä: metyyli, etyyli, propyyli, butyyli, pentyyli, heksyyli, jne., sekä niiden isomeerit, kuten isopropyyli, isobutyyli, tert.-butyyli, isopentyyli, jne. Alkenyyli tarkoittaa esim. vinyyliä, propenyyli-(1), allyyliä, butenyyli-(1), butenyyli-(2), butenyyli-(3), jne. sekä useampia kaksoissidoksia sisältäviä ketjuja. Alkinyyli tarkoittaa esim. propinyyli-(1), propargyyliä, butinyyli(1), butinyyli-(2), jne. mieluimmin propargyyliä. Halogeenilla substituoitu alkyyli tarkoittaa erityisesti yksikertaisesti halogenoitua - perhalogenoitua alkyylisubstituenttia, kuten esim. seuraavia: $CHCl_2$, $CH_2Cl$, $CCl_3$, $CF_3$, $CH_2CH_2Cl$, jne. Halogeenilla tarkoitetaan tässä ja jäljempänä fluoria, klooria, bromia tai jodia, mieluimmin klooria, bromia tai fluoria. Sykloalkyyli tarkoittaa esim. syklopropyyliä, syklobutyyliä, syklopentyyliä, sykloheksyyliä tai sykloheptyyliä, mieluimmin syklopropyyliä tai sykloheksyyliä.

Kaavan (1) mukaiset yhdisteet ovat normaalioloissa stabiileja öljyjä, hartseja tai yleensä kiteisiä aineita, jotka omaavat erittäin arvokkaita mikrobisidisia ominaisuuksia. Niitä voidaan käyttää esimerkiksi maataloudessa tai läheisillä aloilla kasveille vahingollisten mikroorganismien ehkäisevään ja hoitavaan torjuntaan. Keksinnön mukaisella, kaavan (1) mukaisella aktiiviaineella on laajalla käyttökonsentraatioalueella korkea fungisidinen aktiviteetti, käytön ollessa ongelmatonta.

Huomattavan mikrobisidisen, erityisesti kasvifungisidisen vaikutuksen perusteella ovat seuraavat alaryhmät Ia - Ii edullisia:

Ryhmä Ia: Kaavan (I) mukaiset yhdisteet, joissa $R_1$ tarkoittaa $NO_2$:ta, $R_2CF_3$:a, $R_3$ tarkoittaa klooria ja $R_4$ vetyä, $R_5$ tarkoittaa halogeenia, $C_1$-$C_6$-alkoksia, kloorilla tai bromilla substituoitua $C_1$-$C_3$-alkyyli-, $C_1$-$C_3$-alkoksilla

substituoitua $C_1$-$C_3$-alkoksia, $C_1$-$C_6$-alkyylitioa, syklopentyylioksia, sykloheksyylioksia, syklopentyylitioa, sykloheksyylitioa, $C_3$-$C_6$-alkenyylioksia, $C_3$-$C_6$-alkenyylitioa, $C_3$-$C_6$-alkinyylioksia, $C_1$-$C_3$-alkyylisulfoksyyliä, $C_1$-$C_6$-alkyylisulfonyyliä, $C_1$-$C_3$-alkyylisulfonyylioksia tai sykloheksyylisulfonyyliä ja $R_6$ tarkoittaa halogeenia.

Ryhmä Ib: Kaavan (I) mukaiset yhdisteet, joissa $R_1$ tarkoittaa $NO_2$:ta, $R_2$ $CF_3$:a, $R_3$ tarkoittaa klooria tai bromia, $R_5$ tarkoittaa halogeenia, $C_1$-$C_4$-alkoksia, kloorilla tai bromilla substituoitua $C_1$-$C_3$-alkyyliä, metoksilla substituoitua $C_1$-$C_2$-alkoksia, $C_1$-$C_4$-alkyylitioa, $C_3$-$C_4$-alkenyylioksia, $C_3$-$C_4$-alkinyylioksia tai $C_1$-$C_3$-alkyylisulfonyyliä ja R 6 tarkoittaa fluoria, klooria tai bromia.

Tässä alaryhmässä Ib ovat erityisen edullisia kaikki kaavan (I) mukaiset yhdisteet, joissa $R_3$ ja $R_6$ tarkoittavat klooria ja $R_5$ tarkoittaa fluoria, klooria, bromia, $C_1$-$C_3$-alkoksia, $C_1$-$C_3$-alkyylitioa, $OCH_2CH_2OCH_3$:a, $OCH_2CH{=}CH_2$:ta tai $OCH_2C{\equiv}CH$:ta. (= ryhmä Ib')

Ryhmä Ic: Kaavan (I) mukaiset yhdisteet, joissa $R_1$ tarkoittaa $CF_3$:a, $R_2$ $NO_2$:ta, $R_3$ tarkoittaa vetyä ja $R_4$ vetyä, $R_5$ tarkoittaa halogeenia, $C_1$-$C_6$-alkoksia, kloorilla tai bromilla substituoitua $C_1$-$C_3$-alkyyliä, $C_1$-$C_3$-alkoksilla substituoitua $C_1$-$C_3$-alkoksia, $C_1$-$C_6$-alkyylitioa, syklopentyylioksia, sykloheksyylioksia, syklopentyylitioa, sykloheksyylitioa, $C_3$-$C_6$-alkenyylioksia, $C_3$-$C_6$-alkenyylitioa, $C_3$-$C_6$-alkinyylioksia, $C_1$-$C_3$-alkyylisulfoksyyliä, $C_1$-$C_6$-alkyylisulfonyyliä, $C_1$-$C_3$-alkyylisulfonyylioksia tai sykloheksyylisulfonyyliä ja $R_6$ tarkoittaa halogeenia.

Ryhmä Id: Kaavan (I) mukaiset yhdisteet, joissa $R_1$ tarkoittaa $CF_3$:a, $R_2$ $NO_2$:ta, $R_3$ tarkoittaa klooria tai bromia, $R_5$ tarkoittaa halogeenia, $C_1$-$C_4$-alkoksia, kloorilla tai bromilla substituoitua $C_1$-$C_3$-alkyyliä, metoksilla substituoitua $C_1$-$C_2$-alkoksia, $C_1$-$C_4$-alkyylitioa, $C_3$-$C_4$-alkenyylioksia, $C_3$-$C_4$-alkinyylioksia tai $C_1$-$C_3$-alkyylisulfonyyliä ja $R_6$ tarkoittaa fluoria, klooria tai bromia.

Tässä alaryhmässä Id ovat erityisen edullisia kaikki kaavan (I) mukaiset yhdisteet, joissa $R_3$ ja $R_6$ tarkoittavat klooria, ja $R_5$ tarkoittaa fluoria, klooria, bromia, $C_1$-$C_3$-alkoksia, $C_1$-$C_3$-alkyylitioa, $OCH_2CH_2OCH_3$:a, $OCH_2CH{=}CH_2$:ta tai $OCH_2C{\equiv}CH$:ta. (=ryhmä Id').

Ryhmä Ie: Kaavan (I) mukaiset yhdisteet, joissa $R_1$ tarkoittaa $NO_2$:ta, $R_2$ $CF_3$:a, $R_3$ tarkoittaa halogeenia ja $R_4$ vetyä, $R_5$ tarkoittaa $C_1$-$C_3$-alkoksia, $C_1$-$C_3$-alkyylitioa, $C_1$-$C_3$-alkyylisulfoksyyliä tai $C_1$-$C_3$-alkyylisulfonyyliä ja $R_6$ tarkoittaa halogeenia.

Ryhmä If: Kaavan (I) mukaiset yhdisteet, joissa $R_1$ tarkoittaa $NO_2$:ta, $R_2$ $CF_3$:a, $R_3$ tarkoittaa klooria ja $R_4$ vetyä, kun taas $R_5$ ja $R_6$ tarkoittavat, toisistaan riippumatta, halogeenia, $C_1$-$C_6$-alkoksia, kloorilla tai bromilla substituoitua $C_1$-$C_3$-alkyyliä, $C_1$-$C_3$-alkoksilla substituoitua $C_1$-$C_3$-alkoksia, $C_1$-$C_6$-alkyylitioa, syklopentyylioksia, sykloheksyylioksia, syklopentyylitioa, sykloheksyylitioa, $C_3$-$C_6$-alkenyylioksia, $C_3$-alkenyylitioa, $C_3$-$C_6$-alkinyylioksia, $C_1$-$C_3$-alkyylisulfoksyyliä, $C_1$-$C_6$-alkyylisulfonyyliä, $C_1$-$C_3$-alkyylisulfonyylioksia tai sykloheksyylisulfonyyliä.

Ryhmä Ig: Kaavan (I) mukaiset yhdisteet, joissa $R_1$ tarkoittaa $CF_3$:a, $R_2$ $NO_2$:ta, $R_3$ tarkoittaa vetyä ja $R_4$ vetyä ja $R_5$ ja $R_6$ tarkoittavat, toisistaan riippumatta, $C_1$-$C_3$-alkoksia, $C_1$-$C_3$-alkyylitioa, $C_3$-alkenyylioksia, $C_1$-$C_3$-alkenyylisulfoksyyliä tai $C_1$-$C_3$-alkenyylisulfonyyliä.

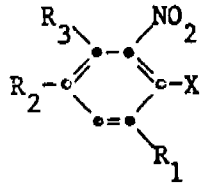
Ryhmä Ih: Kaavan (I) mukaiset yhdisteet, joissa $R_1$ tarkoittaa $CF_3$:a tai $NO_2$:ta, $R_2$ $CF_3$:a tai $NO_2$:ta, $R_3$ tarkoittaa vetyä tai klooria, $R_4$ tarkoittaa ryhmää $C(O)R_7$, jossa $R_7$ tarkoittaa $C_1$-$C_3$-alkyyliä, halogeenilla substituoitua $C_1$-$C_3$-alkyyliä tai $C_1$-$C_3$-alkoksilla substituoitua $C_1$-$C_3$-alkyyliä, $R_5$ tarkoittaa halogeenia, $C_1$-$C_3$-alkoksia tai $C_1$-$C_3$-alkyylitioa ja $R_6$ tarkoittaa klooria.

Ryhmä Ii: Kaavan (I) mukaiset yhdisteet, joissa $R_1$ tarkoittaa $NO_2$:ta, $R_2$ $CF_3$:a, $R_3$ tarkoittaa vetyä ja $R_4$ vetyä, $R_5$ tarkoittaa halogeenia, $C_1$-$C_6$-alkoksia, kloorilla tai

bromilla substituoitua $C_1$-$C_3$-alkyyliä, $C_1$-$C_3$-alkoksilla substituoitua $C_1$-$C_3$-alkoksia, $C_1$-$C_6$-alkyylitioa, syklopentyylioksia, sykloheksyylioksia, syklopentyylitioa, sykloheksyylitioa, $C_3$-$C_6$-alkenyylioksia, $C_3$-$C_6$-alkenyylitioa, $C_3$-$C_6$-alkinyylioksia, $C_1$-$C_3$-alkyylisulfoksyyliä, $C_1$-$C_6$-alkyylisulfonyyliä, $C_1$-$C_3$-alkyylisulfonyylioksia tai sykloheksyylisulfonyyliä ja $R_6$ tarkoittaa halogeenia.

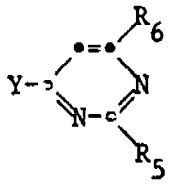
Erityisen edullisia yksittäisiä aineita ovat esim;
N-(3'-kloori-2',6'-dinitro-4'-trifluorimetyylifenyyli)-4-amino-2,6-diklooripyrimidiini; (no 1.1)
N-(2',4'-dinitro-6'-trifluorimetyylifenyyli)-4-amino-2,6-diklooripyrimidiini; (no 2.1)
N-(3'-kloori-2',6'-dinitro-4'-trifluorimetyylifenyyli)-4-amino-6-kloori-2-metyylimerkapto-pyrimidiini; (no 1.5)
N-(2',6'-dinitro-4-trifluorimetyylifenyyli)-4-amino-6-kloori-2-metyylimerkapto-pyrimidiini; (no 7.32)
N-(3'-kloori-2',6'-dinitro-4'-trifluorimetyylifenyyli)-4-amino-6-kloori-2-metoksipyrimidiini; (no 1.4)
N-(3'-kloori-2',6'-dinitro-4'-trifluorimetyylifenyyli)-4-amino-6-kloori-2-etoksipyrimidiini; (no 1.12)
N-(3'-kloori-2',6'-dinitro-4'-trifluorimetyylifenyyli)-4-amino-6-kloori-2-etyylimerkapto-pyrimidiini; (no 1.63)
N-(3'-kloori-2',6'-dinitro-4'-trifluorimetyylifenyyli)-4-amino-6-kloori-2-sek.butyylimerkapto-pyrimidiini; (no 1.80)
N-(2',6'-dinintro-4'-trifluorimetyylifenyyli)-4-amino-2,6-diklooripyrimidiini; (no 7.1)
N-(2',4'-dinitro-6'-trifluorimetyylifenyyli)-4-amino-2-metoksi-6-klooripyrimidiini; (no 2.7)
N-(2',4'-dinitro-6'-trifluorimetyylifenyyli)-4-amino-2-etoksi-6-klooripyrimidiini (no 2.6)

Kaavan (I) mukaiset yhdisteet valmistetaan keksinnön mukaisesti siten, että kaavan (II) mukainen yhdiste



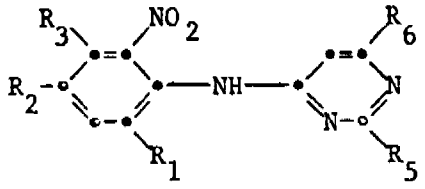
(II)

emäksen läsnäollessa saatetaan reagoimaan kaavan (III) mukaisen pyrimidiinijohdannaisen kanssa



(III)

kaavan (I') mukaiseksi yhdisteeksi



(I')

ja N-asyloidun johdannaisen valmistamiseksi viimeksi mainittu yhdiste N-asyloidaan kaavan (IV) mukaisen karboksyylihapon reaktiokykyisellä johdannaisella

$$R_7COOH \qquad (IV)$$

kaavoissa substituentit $R_1$ - $R_7$ tarkoittavat samaa kuin kaavassa (I) ja X ja Y tarkoittavat $NH_2$:ta tai halogeenia, jolloin, kun X tarkoittaa halogeenia Y tarkoittaa $NH_2$:ta, ja kun X tarkoittaa $NH_2$:ta Y tarkoittaa halogeenia.

Kaavan (I) tai (I') mukaisten yhdisteiden valmistamiseksi ovat seuraavat reaktio-olot edullisia:

Kaavan (II) mukaisen yhdisteen N-alkylointi kaavan (III) mukaisella yhdisteellä kaavan (I') mukaiseksi yhdisteeksi

sekä kaavan (I') mukaisen yhdisteen N-asylointi kaavan (IV) mukaisella yhdisteellä kaavan (I) mukaiseksi yhdisteeksi tapahtuu halogeenivetyä poislohkaisemalla. Reaktiolämpötilat ovat N-alkyloinnissa -20°C - 150°C, mieluimmin -20°C - +30°C, N-asyloinnissa 0°C - +180°C, mieluimmin 0°C - 150°C tai liuottimen tai liuotinseoksen kiehumispiste. Molemmissa tapauksissa on edullista käyttää happoa sitovia aineita tai kondensaatioaineita. Tällaisina tulevat kysymykseen orgaaniset ja epäorgaaniset emäkset, esim. tertiääriset amiinit, kuten trialkyyliamiinit (trimetyyliamiini, trietyyliamiini, tripropyyliamiini, jne.), pyridiini ja pyridiiniemäkset (4-dimetyyliaminopyridiini, 4-pyrrolidyyliaminopyridiini, jne.) alkali- ja maa-alkalimetallien oksidit ja hydroksidit, karbonaatit ja vetykarbonaatit sekä alkaliasetaatit.

Reaktiot voidaan suorittaa reaktioinerttien liuottimien tai laimennusaineiden läsnäollessa. Kysymykseen tulevat alifaattiset ja aromaattiset hiilivedyt, kuten bentseeni, tolueeni, ksyleeni, petrolieetteri; halogenoidut hiilivedyt, kuten klooribentseeni, metyleenikloridi, etyleenikloridi, kloroformi, hiilitetrakloridi, tetrakloorietyleeni; eetterit ja eetterimäiset yhdisteet, kuten dialkyylieetterit (dietyylieetteri, di-isopropyylieetteri, tert.-butyylimetyylieetteri, jne.) anisoli, dioksaani, tetrahydrofuraani; nitriilit, kuten asetonitriili, propioninitriili; N,N-dialkyloidut amidit, kuten dimetyyliformamidi; dimetyylisulfoksidi; ketonit, kuten asetoni, dietyyliketoni, metyylietyyliketoni ja tällaisten liuottimien seokset toistensa kanssa.

Kaavan (II) mukaisen yhdisteen reaktio kaava (III) mukaisen yhdisteen kanssa voidaan suorittaa myös vesipitoisessa, kaksifaasisessa systeemissä faasinsiirtokatalysaattorille yleisesti tunnetun periaatteen mukaan.

Orgaanisina, veden kanssa sekoittumattomina faaseina tulevat kysymykseen tällöin esim. seuraavat liuottimet: alifaattiset ja aromaattiset hiilivedyt, kuten pentaani, heksaani, sykloheksaani, petrolieetteri, ligroiini, bentseeni, tolueeni, ksyleeni, jne., halogenoidut hiilivedyt, kuten dikloorimetaani, kloroformi, hiilitetrakloridi, etyleenidikloridi, 1,2-dikloorietaani, tetrakloorietyleeni, jne., tai alifaattiset eetterit, kuten dietyylieetteri, di-isopropyylieetteri, tert.-butyylimetyylieetteri, jne. Esimerkkejä sopivista faasinsiirto-katalysaattoreista ovat: tetra-alkyyliammoniumhalogenidit, -vetysulfaatit tai -hydroksidit, kuten tetrabutyyliammoniumkloridi, -bromidi, -jodidi; trietyylibentsyyliammoniumkloridi, -bromidi; tetrapropyyliammoniumkloridi, -bromidi, -jodidi; jne. Faasinsiirto-katalysaattoreina tulevat kysymykseen myös fosfoniumsuolat. Reaktiolämpötilat ovat yleensä $-30^{\circ}C$ - $130^{\circ}C$ tai liuottimen tai liuotinseoksen kiehumispiste.

Yleensä kaikkien tässä mainittujen lähtöaineiden, välituotteiden ja lopputuotteiden valmistuksessa voi periaatteessa, mikäli ei nimenomaan yksityiskohtaisesti määritellä, olla läsnä yksi tai useampi reaktioinertti liuotin tai laimennusaine. Kysymykseen tulevat esimerkiksi alifaattiset ja aromaattiset hiilivedyt, kuten bentseeni, tolueeni, ksyleeni, petrolieetteri; halogenoidut hiilivedyt, kuten klooribentseeni, metyleenikloridi, etyleenikloridi, kloroformi, hiilitetrakloridi, tetrakloorietyleeni; eetterit ja eetterimäiset yhdisteet, kuten dialkyylieetterit (dietyylieetteri, di-isopropyylieetteri, tert.-butyylimetyylieetteri, jne., anisoli, dioksaani, tetrahydrofuraani; nitriilit, kuten asetonitriili, propionitriili; N,N-dialkyloidut amidit, kuten dimetyyliformamidi; dimetyylisulfoksidi; ketonit, kuten asetoni, dietyyliketoni, metyylietyyliketoni ja tällaisten liuottimien seokset toistensa kanssa. Useissa tapauksissa

voi olla myös edullista, jos reaktio tai reaktion jokin vaihe suoritetaan suojakaasuatmosfäärissä ja/tai absoluuttisissa liuottimissa. Sopivia suojakaasuja ovat inertit kaasut, kuten typpi, helium, argon ja tietyissä tapauksissa myös hiilidioksidi.

Kuvattu valmistusmenetelmä, mukaan lukien kaikki osavaiheet, on tärkeä osa tätä keksintöä.

On yllättäen todettu, että kaavan (I) mukaiset yhdisteet omaavat käytännössä tarpeellisen hyvin edullisen mikrobisidi-kirjon fytopatogeenisia sieniä ja bakteereita vastaan. Ne omaavat erittäin edullisia kuratiivisia, systeemisiä ja erityisesti preventatiivisia ominaisuuksia ja niitä voidaan käyttää lukuisten viljelykasvien suojaamiseen. Kaavan (I) mukaisilla aktiiviaineilla voidaan erilaisten hyötyviljelmien kasveilla tai kasvinosilla (hedelmissä, kukissa, lehvistössä, varsissa, mukuloissa, juurissa) esiintyvät mikro-organismit torjua tai hävittää, jolloin myös myöhemmin kasvavat kasvinosat säästyvät näiltä mikro-organismeilta.

Kaavan (I) mukaiset aktiiviaineet ovat tehokkaita seuraaviin luokkiin kuuluvia fytopatogeenisia sieniä vastaan: vaillinaissienet (Fungi imperfecti) (esim. Botrytis, Helminthosporium, Fusarium Septoria, Cercospora ja Alternaria); kantasienet (Basidomycetes) (esim. lajit Hemileia, Rhizocotonia, Puccinia); erityisen tehokkaita yhdisteet ovat kotelosieniä (Ascomycetes) vastaan (esim. Venturia, Podosphaera, Erysiphe, Monilinia, Uncinula). Lisäksi kaavan (I) mukaiset yhdisteet vaikuttavat systeemisesti. Niitä voidaan käyttää myös peittausaineina simenviljojen (hedelmät, mukulat, jyvät) ja kasvipistokkaiden sieni-infektioilta suojaavassa käsittelyssä sekä maaperässä esiintyviä fytopatogeenisia sieniä vastaan.

Keksintö koskee siten myös mikrobisidisia aineita sekä kaavan (I) mukaisten yhdisteiden käyttöä torjuttaessa fytopatogeenisia mikro-organismeja, erityisesti kasveille vahingollisia sieniä tai niiden käyttöä taudin ehkäisevässä torjunnassa kasveilla.

Edellä esitetyn lisäksi tämä keksintö koskee myös agrokemiallisten (maatalouskemiallisten) aineiden valmistusta, jossa aktiiviaine sekoitetaan hyvin yhden tai useamman, tässä esitetyn aineen tai aineryhmän kanssa. Keksinnön piiriin kuuluu myös kasvien käsittelymenetelmä, jossa käytetään kaavan (I) mukaisia yhdisteitä tai uusia aineita.

Tässä esiintyvien indikaatioalueiden kohdeviljelminä toimivat, tämän keksinnön puitteissa, esimerkiksi seuraavat kasvilajikkeet: viljat (vehnä, ohra, ruis, kaura, riisi, durra ja sukulaiset); juurikkaat (sokerijuurikas ja turnipsi); hedelmät, kivihedelmät ja marjat (omena, päärynä, luumu, persikka, manteli, kirsikka, mansikka, vadelma ja karhunvatukka); palkohedelmät (pavut, linssit, sokeriherne, soija); öljykasvit (rapsi, sinappi, unikko, oliivi, auringonkukka, kookos, risiinikasvi, kaakao, maapähkinä); kurkkukasvit (kurpitsa, kurkku, meloni); kuitukasvit (puuvilla, pellava, hamppu, juutti); sitrushedelmät (appelsiini, sitruuna, pompelus, mandariini); vihanneslajikkeet (pinaatti, keräsalaatti, parsa, kaalilajikkeet, porkkana, sipuli, tomaatti, peruna, paprika); laakerikasvit (avokado, kaneli (Cinnamonum), kamferi) tai sellaiset kasvit kuin maissi, tupakka, pähkinä, kahvi, sokeriruoko, tee, viiniköynnös, humala, banaani ja luonnonkumikasvit sekä koristekasvit (Compositen).

Kaavan (I) mukaisia aktiiviaineita käytetään tavallisesti koostumusten muodossa ja ne voidaan lisätä samanaikaisesti muiden aktiiviaineiden kanssa tai jälkeen päin käsiteltäville pinnoille tai kasveille. Näitä muita aktiiviaineita voivat olla lannoitteet, hivenaine-valmis-

teet tai muut kasvin kasvamiseen vaikuttavat valmisteet. Ne voivat olla myös selektiivisiä herbisidejä, insektisidejä, fungisidejä, bakterisidejä, nematisidejä, molluskisidejä tai useamman tällaisen valmisteen seoksia, yhdessä mahdollisesti muiden valmistustekniikassa tavallisesti käytettyjen kantaja-aineiden, tensidien tai muiden käyttöä edistävien lisäaineiden kanssa.

Sopivat kantaja- ja lisäaineet voivat olla kiinteitä tai nestemäisiä ja vastaavat valmistustekniikassa tarkoituksenmukaisia aineita, kuten esim. luonnolliset tai regeneroidut, mineraaliset aineet, liuottimet, dispergointi-, kostutus-, kiinnitys-, paksunnos-, side- tai lannoiteaineet.

Kaavan (I) mukaisen aktiiviaineen tai ainakin yhden tällaisen aktiiviaineen sisältävän agrokemiallisen (maatalouskemiallisen) aineen eräs edullinen levitysmenetelmä on levittäminen lehvistölle (lehtilevitys). Levitysten lukumäärä ja käyttömäärä riippuu tällöin vastaavan torjuttavan lajin (sienilajin) tartuntapaineesta. Kaavan (I) mukaiset aktiiviaineet voivat kuitenkin myös maaperän kautta, juuriston avulla, kulkeutua kasveihin (systeemin vaikutus), siten, että kasvien kasvupaikka kostutetaan nestemäisellä valmisteella tai aineet lisätään maahan kiinteässä muodossa, esim. granulaattien muodossa (maaperälevitys). Kaavan (I) mukaiset yhdisteet voidaan myös lisätä siemenjyviin (peittaus) siten, että jyvät joko kostutetaan aktiiviaineen nestemäisellä valmisteella tai jyvät päällystetään kiinteällä valmisteella. Edellä esitettyjen lisäksi tietyissä tapauksissa muut käyttötavat ovat mahdollisia, kuten esim. kasvivarteen tai silmuun kohdistuva käsittely.

Kaavan (I) mukaisia yhdisteitä käytetään tällöin muuttumattomassa muodossa tai mieluimmin yhdessä valmistustekniikassa tavallisesti käytettyjen apuaineiden kanssa, jolloin ne valmistetaan tavalliseen tapaan esim.

emulsiokonsentraateiksi, siveltäviksi tahnoiksi, suoraan sumutettaviksi tai laimennettaviksi liuoksiksi, laimeiksi emulsioiksi, sirotejauheiksi, liukoisiksi jauheiksi, pölytteiksi, granulaateiksi tai ne kapseloidaan esim. polymeerisiin aineisiin. Käyttömenetelmä, kuten suikutus, sumutus, pölytys, sirotus, sively tai kaataminen valitaan samoin kuin aine vastaamaan toivottua päämäärää ja lisättävää ainemäärää. Edulliset käyttömäärät ovat yleensä 50 g - 5 kg aktiiviainetta (AS) jokaista hehtaaria kohden; mieluimmin 100 g - 2 kg AS/hehtaari, erityisesti 200 g - 600 g AS/hehtaari.

Koostumukset, t.s. kaavan (I) mukaisen aktiiviaineen ja mahdollisesti kiinteän tai nestemäisen lisäaineen sisältävät aineet, valmisteet tai koostumukset valmistetaan tunnetulla tavalla, esim. aktiiviaine hyvin sekoittaen ja/tai jauhaen laimennusaineiden, kuten esim. liuottimien, kiinteiden kantaja-aineiden ja mahdollisesti pinta-aktiivisten yhdisteiden (tensidien) kanssa.

Liuottimina kysymykseen tulevat: aromaattiset hiilivedyt, mieluimmin $C_8$-$C_{12}$ -fraktiot, kuten esim. ksyoliseokset tai substituoidut naftaliinit, ftaalihappoesterit, kuten dibutyyli- tai dioktyyliftalaatti, alifaattiset hiilivedyt, kuten sykloheksaani tai parafiinit, alkoholit ja glykolit, sekä niiden eetterit ja esterit, kuten etanoli, etyleeniglykoli, etyleeniglykolimonometyyli- tai -etyylieetteri, ketonit, kuten sykloheksanoni, voimakkaasti polaariset liuottimet, kuten N-metyyli-2-pyrrolidoni, dimetyylisulfoksidi tai dimetyyliformamidi sekä mahdollisesti epoksidoidut kasviöljyt, kuten epoksidoitu kookospähkinäöljy tai soijaöljy; tai vesi.

Kiinteinä kantaja-aineina, esim. pölytteisiin ja dispergoitaviin jauheisiin, käytetään yleensä luonnollisia kivijauheita, kuten kalkkisälpää, talkkia, kaoliinia, montmorilloniittia tai attapulgiittia. Fysikaalisten ominaisuuksien parantamiseksi voidaan lisätä myös korkeadis-

persioisia piihappoja tai korkeadispersioisia imukykyisiä polymeraatteja. Granuloivina, absorptiivisina granulaattikantajina tulevat kysymykseen huokoiset aineet, esim. hohkakivi, tiilimurska, sepioliitti tai bentoniitti, eisorptisina kantaja-aineina esim. kalkkisälpä tai hiekka. Lisäksi voidaan käyttää monia epäorgaanisia tai orgaanisia, ennalta granuloituja aineita, kuten erityisesti dolomiittia tai pilkottuja kasvijätteitä. Erityisen edullisia käyttöä edistäviä lisäaineita, jotka voivat johtaa käyttömäärän huomattavaan vähentymiseen, ovat myös luonnolliset (eläimistä tai kasveista saatavat) tai synteettiset fosfolipidit, jotka kuuluvat kefaliineihin ja lesitiineihin, kuten esim. fosfatidyylietanoliamiini, fosfatidyyliseriini, fosfatidyylikoliini, sfingomyeliini, fosfatidyyli-inosiitti, fosfatidyyliglyseriini, lysolesitiini, plasmalogeenit tai kardiolipiini, jotka voidaan saada esimerkiksi eläinten tai kasvien soluista, erityisesti aivoista, sydämestä, maksasta, munanruskuaisesta tai soijapavuista. Käyttökelpoisia kauppaseoksia ovat esim. fosfatidyylikoliiniseokset. Synteettisia fosfolipidejä ovat esim. dioktanoyylifosfatidyylikoliini ja dipalmitoyylifosfatidyylikoliini.

Pinta-aktiivisina yhdisteinä kysymykseen tulevat, riippuen aina kaavan (I) mukaisesta, valmistettavasta aktiiviaineesta, ei-ionigeeniset, kationi- ja/tai anioniaktiiviset tensidit, joilla on hyvät emulgoivat, dispergoivat ja kosteuttavat ominaisuudet. Tensideillä tarkoitetaan myös tensidiseoksia.

Sopivia anionisia tensidejä voivat olla sekä niin sanotut vesiliuokoiset saippuat että myös vesiliukoiset, pinta-aktiiviset yhdisteet.

Saippuoista voidaan mainita korkeampien rasvahappojen ($C_{10}$-$C_{22}$) alkali-, maa-alkali- tai mahdollisesti substituoidut ammoniumsuolat, kuten esim. öljy- tai stearііnihapon tai luonnollisten rasvahapposeosten, jotka muodostuvat esim.

kookospähkinä- tai taliöljystä, Na- tai K-suolat. Edelleen on mainittava myös rasvahappo-metyylilauriinisuolat.

Useimmin käytetään kuitenkin niin sanottuja synteettisiä tensidejä, erityisesti rasvasulfonaatteja, rasvasulfaatteja, sulfonoituja bentsimidatsolijohdannaisia tai alkyylisulfonaatteja.

Rasvasulfonaatit tai -sulfaatit ovat yleensä alkali-, maa-alkali tai mahdollisesti substituoituina ammoniumsuoloina ja sisältävät 8 - 22 C-atomia käsittävän alkalitähteen, jolloin alkyyli käsittää myös asyylitähteen alkyyliosan, esim. ne ovat ligniinisulfonihapon, dodekyylirikkihappoesterin tai luonnollisista rasvahapoista valmistetun rasva-alkoholisulfaattiseoksen Na- tai Ca-suoloina. Näihin kuuluvat myös rikkihappoestereiden ja rasva-alkoholi-etyleenioksidi-adduktien sulfonihappojen suolat. Sulfonoidut bentsimidatsolijohdannaiset sisältävät mieluimmin 2-sulfonihapporyhmää ja yhden 8-22 C-atomia käsittävän rasvahappotähteen. Alkyyliaryylisulfonaatteja ovat esim. dodekyylibentseenisulfonihapon, dibutyylinaftaliinisulfonihapon tai naftaliinisulfonihappo-formaldehydikondensaatiotuotteen Na-, Ca- tai trietanoliamiinisuolat.

Edelleen kysymykseen tulevat vastaavat fosfaatit, kuten esim. p-nonyylifenoli-(4-14)-etyleenioksidi-adduktin fosforihappoesterin suolat.

Ei-ionisina tensideinä kysymykseen tulevat ensi sijassa alifaattisten tai sykloalifaattisten alkoholien, tyydytettyjen tai tyydyttämättömien rasvahappojen ja alkyylifenolien polyglykolieetterijohdannaiset, jotka voivat sisältää 3-30 glykolieetteriryhmää ja 8-20 hiiliatomia (alifaattisessa) hiilivetytähteessä ja 6-18 hiiliatomia alkyylifenolin alkyylitähteessä.

Muita sopivia ei-ionisia tensidejä ovat vesiliukoiset, 20-250 etyleeniglykolieetteriryhmää ja 10-100 propyleeniglykolieetteriryhmää sisältävät polyetyleenioksiadduktit

polypropyleeniglykolin, etyleenidiaminopolypropyleeniglykolin ja alkyylipolypropyleeniglykolin kanssa, joka sisältää 1-10 hiiliatomia alkyyliketjussa. Mainitut yhdisteet sisältävät tavallisesti propyleeniglykoli-yksikköä kohden 1-5 etyleeniglykoli-yksikköä.

Esimerkkeinä ei-ionisista tensideistä voidaan mainita nonyylifenolipolyetoksietanolit, risiiniöljypolyglykolieetteri, polypropyleenipolyetyleenioksidiaddukti, tributyylifenoksipolyetyleenietanoli, polyetyleeniglykoli ja oktyylifenoksipolytetoksietanoli.

Kysymykseen tulevat myös polyoksietyleenisorbitaanin rasvahappoesterit, kuten polyoksietyleenisorbitaani-trioleaatti.

Kationisia tensidejä ovat ennen kaikkea kvaternääriset ammoniumsuolat, jotka N-substituentteina sisältävät ainakin 8-22 C-atomia käsittävän alkyylitähteen ja muina substituentteina alempia, mahdollisesti halogenoituja alkyyli-, bentsyyli- tai alempihydroksialkyylitähteitä. Suolat ovat mieluimmin halogenideina, metyylisulfaatteina tai etyylisulfaatteina, esim. stearyylitrimetyyliammoniumkloridi tai bentsyylidi(2-kloorietyyli)etyyliammoniumbromi.

Valmistustekniikassa käyttäkelpoisia tensidejä on esitetty mm. seuraavissa julkaisuissa:

"Mc Cutcheon's Detergents ja Emulsifiers Annual" BC Publishing Corp., Ringwood New Jersey, 1980

Sisely and Wood, "Encyclopedia of Surgace Active Agents", Chemical Publishing Co., Inc. New York, 1980

Agrokemialliset (maatalouskemialliset) koostumukset sisältävät yleensä kaavan (I) mukaista aktiiviainetta 0,1 - 99 %, erityisesti 0,1 - 95 %, kiinteää tai nestemäistä lisäainetta 99,9 - 1 %, erityisesti 99,8 - 5 % ja tensidiä 0 - 25 %, erityisesti 0,1 - 25 %.

Konsentroidut aineet ovat edullisia kauppatavaroina, kun taas lopullisessa käytössä käytetään laimeita aineita.

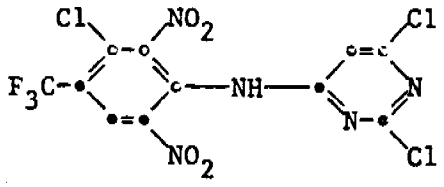
Aineet voivat sisältää myös muita lisäaineita, kuten stabilisaattoreita, vaahdonpoistoaineita, viskositeettia säätteleviä aineita, sideaineita, kiinnitysaineita sekä lannoitteita tai muita aktiiviaineita erityisten vaikutusten saavuttamiseksi.

Tällaiset agrokemialliset (maatalouskemialliset) aineet ovat myös tämän keksinnön kohteena.

Seuraavat esimerkit kuvaavat lähemmin keksintöä, rajoittamatta sitä. Lämpötilat on annettu Celsius-asteina. Prosentit ja osat tarkoittavat paino-osia tai -prosentteja.

Valmistusesimerkit:

Esimerkki H1: Kaavan (1.1) mukaisen N-(3'kloori-2',6'-dinitro-4'-trifluorimetyylifenyyli)-4-amino-2,6-diklooripyrimidiinin valmistus

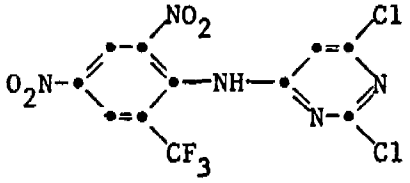


(1.1)

Liuokseen, jossa on 19,1 osaa 2,6-dikloori-4-aminopyrimidiiniä 430 ml:ssa tetrahydrofuraania, lisätään annoksittain, samalla hämmentäen huoneen lämpötilassa, 16,5 osaa 85 % hienoksi jauhettua kaliumhydroksidia, tällöin lämpötila puolen tunnin sisällä kohoaa noin 24°:een. Reaktioseos jäähdytetään 0°:een ja vaalean ruskeaan suspensioon lisätään tipoittain 1 tunnin kuluessa 35,4 osaa 2,4-dikloori-3,5-dinitro-bentsotrifluoridia 120 ml:ssa tetrahydrofuraania, tällöin suspensio värjäytyy punaiseksi. Hämmennetään 14 tuntia huoneen lämpötilassa, jonka jälkeen reaktioseos kaadetaan jääveteen, hapotetaan 15 ml:lla konsentroitua suolahappoa ja uutetaan kaksi kertaa, kummallakin kertaa 300 ml:lla etikkahappoetyyliesteriä. Yhdistetyt uutteet pestään kaksi kertaa, kummallakin kertaa

100 ml:lla vettä, kuivataan natriumsulfaatilla, suodatetaan ja haihdutetaan. Öljymäinen jäännös saadaan kiteytymään lisäämällä petrolieetteriä ja suodatuksen jälkeen kiteytetään uudestaan kloroformista. Saadaan vaalean ruskeita kiteitä, joiden sul.p. 174-177°.

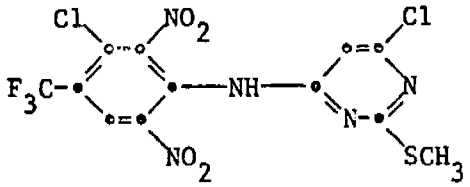
Esimerkki H2: Kaavan (2.1) mukaisen N-(2',4'-dinitro-6'-trifluorimetyylifenyyli)-4-amino-2,6-diklooripyrimidiinin valmistus



(2.1)

Liuokseen, jossa on 8,2 osaa 2,6-dikloori-4-aminopyrimidiiniä 200 ml:ssa absoluuttista tetrahydrofuraania, lisätään 7,24 osaa 85 % hienoksi jauhettua kaliumhydroksidia. Seos jäähdytetään 0°:een ja siihen lisätään annoksittain tunnin kuluessa, samalla hämmentäen, 13,5 osaa 2-kloori-3,5-dinitro-bentsotrifluoridia 100 ml:ssa absoluuttista tetrahydrofuraania; tällöin reaktioliuoksen väri vaihtuu keltaisesta punaiseksi. Hämmennetään 12 tuntia, jonka jälkeen reaktioliuos kaadetaan 500 ml:aan jäävettä, hapotetaan 8 ml:lla konsentroitua suolahappoa ja uutetaan kaksi kertaa, kummallakin kertaa 200 ml:lla etikkahappoetyyliesteriä. Yhdistetyt uutteet pestään 50 ml:lla vettä, kuivataan natriumsulfaatilla, suodatetaan ja haihdutetaan. Raakatuote kiteytetään uudestaan metanolista. Sul.p. 198-200°.

Esimerkki H3: Kaavan (1.5) mukaisen N-(3'-kloori-2',6'-dinitro-4'-trifluorimetyylifenyyli)-4-amino-6-kloori-2-metyylimerkapto-pyrimidiinin valmistus

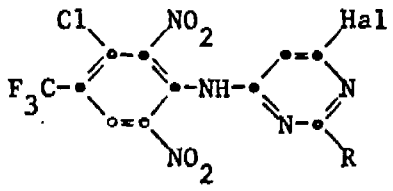


(1.5)

7,9 osaa hienoksi jauhettua, 85 % kaliumhydroksidia liuotetaan 70 ml:aan dimetyylisulfoksidia. Tähän lisätään tipoittain noin 15°:ssa liuos, jossa on 17,6 osaa 4-amino-6-kloori-2-metyylimerkaptopyrimidiiniä 80 ml:ssa dimetyylisulfoksidia, ja reaktioseosta hämmennetään puoli tuntia huoneen lämpötilassa. Sen jälkeen lisätään tipoittain noin 115°:ssa 30,5 osaa 1,3-dikloori-2,6-dinitro-4-trifluorimetyylibentseeniä 100 ml:ssa dimetyylisulfoksidia, reaktioseosta hämmennetään yön yli huoneen lämpötilassa, sen jälkeen se kaadetaan 2 litraan jäävettä ja uutetaan etikkahappoetyyliesterillä. Yhdistetyt uutteet pestään toistuvasti vedellä, kuivataan natriumsulfaatilla, suodatetaan ja haihdutetaan. Raakatuote puhdistetaan pylväskromatografisesti (piihappogeeli/dikloorimetaani). Saanto on 22,3 osaa, sul.p. 171-175°.

Vastaavalla tavalla valmistetaan myös seuraavat, kaavan (I) mukaiset yhdisteet:

Taulukko 1: Yhdisteet, joilla on kaava




| Yhd. no | R | Hal | Fysik. vakiot (°C) |
|---|---|---|---|
| 1.1 | Cl | Cl | Sp. 174-177 |
| 1.2 | $OCH_3$ | F | Hartsi |
| 1.3 | Br | Br | Hartsi |
| 1.4 | $OCH_3$ | Cl | Sp. 199-201 |
| 1.5 | $SCH_3$ | Cl | Sp. 171-175 |
| 1.6 | $O-C(CH_3)(C_2H_5)-C\equiv CH$ | Cl | |
| 1.7 | $OC_2H_5$ | F | Hartsi |
| 1.8 | $OCH_2CH_2OCH_3$ | Cl | Sp. 128-130 |
| 1.9 | F | F | Hartsi |
| 1.10 | $OC_3H_7$-i | F | |
| 1.11 | $OCH_2CH_2=CHCH_3$ | Cl | |
| 1.12 | $OC_2H_5$ | Cl | Sp. 164-169 |
| 1.13 | $OCH_2CH(C_2H_5)_2$ | F | |
| 1.14 | $OCH_2CH=CH_2$ | Cl | Puolikiteinen |
| 1.15 | $OC_3H_7$-n | Cl | Sp. 165-166 |
| 1.16 | $OCH_2CH_2OC_2H_5$ | Cl | |

Taulukko 1 (jatkuu)

| Yhd. no | R | Hal | Fysik. vakiot ($^{o}$C) |
|---|---|---|---|
| 1.17 | J | J | |
| 1.18 | $SCH_3$ | F | |
| 1.19 | $OC_3H_7$-i | Cl | |
| 1.20 | $OCH_2C{\equiv}CH$ | Cl | Puolikiteinen |
| 1.21 | $SC_2H_5$ | F | |
| 1.22 | $OC_4H_9$-n | Cl | |
| 1.23 | $SCH_2CH{=}CH_2$ | Cl | |
| 1.24 | $OC(CH_3)_2C{\equiv}CH$ | Cl | |
| 1.25 | $SC_3H_7$-i | F | |
| 1.26 | $O(CH_2)_6Cl$ | Cl | |
| 1.27 | $OCH(CH_3)C_2H_5$ | Cl | Puolikiteinen |
| 1.28 | $OCH(CH_3)C{\equiv}CH$ | Cl | |
| 1.29 | O-Sykloheksyyli | Cl | |
| 1.30 | O-$C_4H_9$-t | Cl | |
| 1.31 | S-$C_4H_9$-t | F | |
| 1.32 | $O(CH_2)_3Cl$ | Cl | Hartsi |
| 1.33 | $S(O)C_2H_5$ | Cl | |
| 1.34 | $OCH_2CH_2Cl$ | F | |
| 1.35 | S-Sykloheksyyli | Cl | |
| 1.36 | $S(O)CH_3$ | Cl | |
| 1.37 | $OCH_2CF_3$ | Cl | Puolikiteinen |
| 1.38 | $OCH_2CH_2OCH_3$ | F | |

Taulukko 1 (jatkuu)

| Yhd. no | R | Hal | Fysik. vakiot ($^{o}$C) |
|---|---|---|---|
| 1.39 | $OC_5H_{11}$-n | Cl | |
| 1.40 | $S(O)_2C_2H_5$ | Cl | |
| 1.41 | $OCH_2CCl_3$ | Cl | |
| 1.42 | $S(O)_2CH_3$ | Cl | Hajoaa alk. 102 |
| 1.43 | $OCH_2CH{=}CH_2$ | F | |
| 1.44 | $OCH_2$-$CH(CH_3)C_2H_5$ | Cl | |
| 1.45 | $OCH_2CH(Br)CH_2Br$ | Cl | |
| 1.46 | $OC(CH_3)_2C_2H_5$ | Cl | |
| 1.47 | $S(O)_2C_3H_7$-n | Cl | |
| 1.48 | $OCH(CH_3)CH_2CH_2CH_3$ | Cl | |
| 1.49 | $OCH_3$ | Br | Hartsi |
| 1.50 | $OC_2H_5$ | J | |
| 1.51 | $OCH_2$-$C{\equiv}CH$ | F | |
| 1.52 | $OC_6H_{13}$-n | Cl | |
| 1.53 | $OCH_2CH_2Br$ | Cl | Puolikiteinen |
| 1.54 | $OCH_2CH(C_2H_5)_2$ | Cl | |
| 1.55 | $SCH_3$ | Br | |
| 1.56 | $S(O)_2CH_3$ | F | |
| 1.57 | $OC_2H_5$ | Br | Hartsi |
| 1.58 | $OCH_2CH(CH_3)CH_2CH_2CH_3$ | Cl | |
| 1.59 | $S(O)_2CH_3$ | Br | |
| 1.60 | $OCH_3$ | J | |

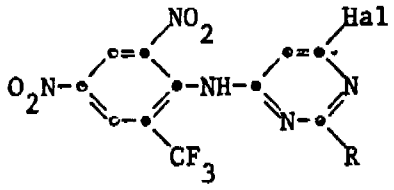
Taulukko 1 (jatkuu)

| Yhd. no | R | Hal | Fysik. vakiot ($^{o}$C) |
|---|---|---|---|
| 1.61 | $S(O)_2C_2H_5$ | F | |
| 1.62 | $OC(CH_3)(C_2H_5)C_2H_5$ | Cl | |
| 1.63 | $SC_2H_5$ | Cl | Sp. 175-176 |
| 1.64 | $SC_5H_{11}$-n | Cl | |
| 1.65 | $S(O)_2C_4H_9$-n | Cl | |
| 1.66 | $OCH(CH_3)CH_2CH(CH_3)_2$ | Cl | |
| 1.67 | $S(O)_3C_3H_7$-i | F | |
| 1.68 | $SC_3H_7$-n | Cl | |
| 1.69 | $SC_6H_{13}$-n | Cl | |
| 1.70 | $OCH_2CH_2Cl$ | Cl | |
| 1.71 | $SCH_3$ | J | |
| 1.72 | $S(O)_2CH_3$ | J | |
| 1.73 | $SC_3H_7$-i | Cl | |
| 1.74 | $SC_2H_5$ | Br | Hartsi |
| 1.75 | $S(O)_2C_6H_{13}$-n | Cl | |
| 1.76 | $OC_3H_7$-i | J | |
| 1.77 | $SC_4H_9$-n | Cl | |
| 1.78 | $SC_3H_7$-n | J | |
| 1.79 | $S(O)_2C_2H_5$ | Br | |
| 1.80 | $SCH(CH_3)C_2H_5$ | Cl | Sp. 152-155 |
| 1.81 | $OCH_2C{\equiv}CH$ | J | |

Taulukko 1 (jatkuu)

| Yhd. no | R | Hal | Fysik. vakiot (°C) |
|---|---|---|---|
| 1.82 | $SC_4H_9$-t | Cl | |
| 1.83 | $S(O)_2$Sykloheksyyli | Cl | |
| 1.84 | $OCH_2CH(CH_3)_2$ | Cl | Sp. 174-177 |

Taulukko 2: Yhdisteet, joilla on kaava




| Yhd. no | R | Hal | Fysik. vakiot (°C) |
|---|---|---|---|
| 2.1 | Cl | Cl | Sp. 198-200 |
| 2.2 | $OCH_3$ | F | Hartsi |
| 2.3 | $OC_3H_7$-i | Cl | Hartsi |
| 2.4 | $S(O)_2CH_3$ | Cl | |
| 2.5 | F | F | Hartsi |
| 2.6 | $OC_2H_5$ | Cl | Sp. 150-152 |
| 2.7 | $OCH_3$ | Cl | Sp. 170-172 |
| 2.8 | $OC_2H_5$ | F | Hartsi |
| 2.9 | $S(O)_2C_2H_5$ | Cl | |
| 2.10 | $OC_3H_7$-n | Cl | Sp. 76-78 |

Taulukko 2 (jatkuu)

| Yhd. no | R | Hal | Fysik. vakiot ($^{o}$C) |
|---|---|---|---|
| 2.11 | $S(O)CH_3$ | Cl | |
| 2.12 | Br | Br | Hartsi |
| 2.13 | $OC_4H_9$-n | Cl | |
| 2.14 | S-Sykloheksyyli | Cl | |
| 2.15 | J | J | |
| 2.16 | $OC_3H_7$-i | F | |
| 2.17 | $OC_4H_9$-t | Cl | |
| 2.18 | $S(O)C_2H_5$ | Cl | |
| 2.19 | $SCH_3$ | F | |
| 2.20 | $S(O)_2C_3H_7$-n | Cl | |
| 2.21 | $OCH_2CH(CH_3)C_2H_5$ | Cl | |
| 2.22 | $OCH(CH_3)C_2H_5$ | Cl | Puolikiteinen |
| 2.23 | $OC_5H_{11}$-n | Cl | |
| 2.24 | O-Sykloheksyyli | Cl | |
| 2.25 | $SC_2H_5$ | F | |
| 2.26 | $OC_6H_{13}$-n | Cl | |
| 2.27 | $OCH_3$ | Br | Hartsi |
| 2.28 | $OC_6H_{13}$-n | F | |
| 2.29 | $SC_4H_9$-t | F | |
| 2.30 | $OC_2H_5$ | Br | Hartsi |

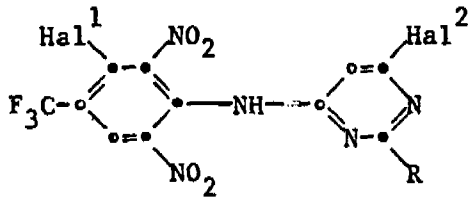
Taulukko 2 (jatkuu)

| Yhd. no | R | Hal | Fysik. vakiot (°C) |
|---|---|---|---|
| 2.31 | $OCH_2CH(CH_3)CH_2CH_2CH_3$ | Cl | |
| 2.32 | $SCH_3$ | Cl | Sp. 182-188 |
| 2.33 | $OC_3H_7$-i | Br | |
| 2.34 | $OCH_2CH(C_2H_5)_2$ | Cl | |
| 2.35 | $OCH_2CH_2OCH_3$ | F | |
| 2.36 | $SCH_3$ | Br | |
| 2.37 | $OC(CH_3)_2C{\equiv}CH$ | Cl | |
| 2.38 | $S(O)_2CH_3$ | F | |
| 2.39 | $SC_4H_9$-n | Cl | |
| 2.40 | $SC_2H_5$ | Cl | Sp. 90-93 |
| 2.41 | $SCH_2CH{=}CH_2$ | Cl | |
| 2.42 | $OCH_2CF_3$ | Cl | Puolikiteinen |
| 2.43 | $S(O)_2C_2H_5$ | F | |
| 2.44 | $SC_2H_5$ | Br | Hartsi |
| 2.45 | $SC_3H_7$-n | Cl | |
| 2.46 | $SC_3H_7$-i | Br | |
| 2.47 | $SC_3H_7$-i | Cl | |
| 2.48 | $OC(CH_3)_2C{\equiv}CH$ | Cl | |
| 2.49 | $OCH_2C{\equiv}CH$ | Cl | Puolikiteinen |
| 2.50 | $OCH_2CH_2Br$ | Br | |
| 2.51 | $S(O)_2CH_3$ | Br | |

Taulukko 2 (jatkuu)

| Yhd. no | R | Hal | Fysik. vakiot (°C) |
|---|---|---|---|
| 2.52 | $S(O)_2C_6H_{13}$-n | F | |
| 2.53 | $SC_4H_9$-n | Cl | |
| 2.54 | $SO_2C_2H_5$ | Br | |
| 2.55 | $OCH_2CH{=}CH_2$ | Cl | Puolikiteinen |
| 2.56 | $OCH_3$ | J | |
| 2.57 | $SC_4H_9$-t | Cl | |
| 2.58 | $OC_2H_5$ | J | |
| 2.59 | $SC_6H_{13}$-n | Cl | |
| 2.60 | $OCH_2CH_2OC_2H_5$ | Cl | |
| 2.61 | $OCH_2CH(CH_3)_2$ | Cl | Sp. 144-145 |
| 2.62 | $SCH_3$ | J | |
| 2.63 | $OCH_2CH_2Cl$ | Cl | |
| 2.64 | $S(O)_2CH_3$ | J | |
| 2.65 | $S(O)_2C_2H_5$ | J | |
| 2.66 | $O(CH_2)_3Cl$ | Cl | Hartsi |
| 2.67 | $SC_2H_5$ | J | |
| 2.68 | $OCH_2CH{=}CH_2$ | J | |
| 2.69 | $OCH_2CH_2OCH_3$ | Cl | Sp. 160-162 |
| 2.70 | $OCH_2C{\equiv}CH$ | J | |

Taulukko 3: Yhdisteet, joilla on kaava

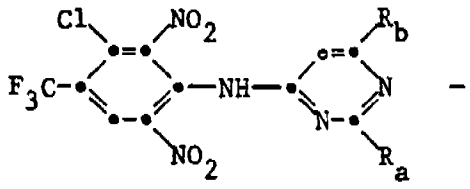



| Yhd. no | $Hal^1$ | $Hal^2$ | R | Fysik. vakiot (°C) |
|---|---|---|---|---|
| 3.1 | Br | Cl | $OCH_3$ | |
| 3.2 | F | Br | $OCH_3$ | |
| 3.3 | F | J | $OCH_3$ | |
| 3.4 | F | Cl | $OCH_3$ | |
| 3.5 | Br | Cl | $SCH_3$ | |
| 3.6 | F | Br | $SCH_3$ | |
| 3.7 | F | Cl | $SCH_3$ | |
| 3.8 | F | Br | $S(O)_2CH_3$ | |
| 3.9 | Br | Cl | $S(O)_2CH_3$ | |
| 3.10 | Br | Cl | $SC_3H_7$-i | |
| 3.11 | F | Cl | $S(O)_2CH_3$ | |
| 3.12 | F | F | $SCH_3$ | |
| 3.13 | J | Cl | $OCH_3$ | |
| 3.14 | Br | Br | $OCH_3$ | |
| 3.15 | Br | F | $OCH_3$ | |
| 3.16 | J | Cl | $SCH_3$ | |
| 3.17 | Br | F | $SCH_3$ | |

Taulukko 3 (jatkuu)

| Yhd. no | $Hal^1$ | $Hal^2$ | R | Fysik. vakiot (°C) |
|---|---|---|---|---|
| 3.18 | Br | Br | $SCH_3$ | |
| 3.19 | J | Cl | $S(O)_2CH_3$ | |
| 3.20 | J | Cl | $SC_2H_5$ | |
| 3.21 | Br | J | $OCH_3$ | |
| 3.22 | J | Cl | $OC_3H_7$ | |
| 3.23 | J | Cl | $OC_2H_5$ | |

Taulukko 4: Yhdisteet, joilla on kaava




-

| Yhd. no | $R_a$ | $R_b$ | Fysik. vakiot (°C) |
|---|---|---|---|
| 4.1 | $OCH_3$ | $SCH_3$ | |
| 4.2 | $SC_3H_7$-i | $OCH_3$ | |
| 4.3 | $S(O)_2CH_3$ | $OCH_3$ | |
| 4.4 | $OCH_3$ | $OCH_3$ | Sp. 136-140 |
| 4.5 | $SC_3H_7$-i | $OC_2H_5$ | |
| 4.6 | $S(O)_2CH_3$ | $OC_2H_5$ | |

Taulukko 4 (jatkuu)

| Yhd. no | $R_a$ | $R_b$ | Fysik. vakiot (°C) |
|---|---|---|---|
| 4.7 | $OCH_3$ | $OC_2H_5$ | |
| 4.8 | $S(O)_2CH_3$ | $OC_3H_7$-i | |
| 4.9 | $OCH_3$ | $SC_2H_5$ | |
| 4.10 | $SC_3H_7$-i | $SCH_3$ | |
| 4.11 | $S(O)_2CH_3$ | $SCH_3$ | |
| 4.12 | $OCH_3$ | $SC_3H_7$-i | |
| 4.13 | $S(O)_2CH_3$ | $SC_2H_5$ | |
| 4.14 | $SC_3H_7$-i | $SC_2H_5$ | |
| 4.15 | $S(O)_2CH_3$ | $SC_4H_9$-t | |
| 4.16 | $OCH_3$ | $SC_4H_9$-t | |
| 4.17 | $S(O)_2CH_3$ | $S(O)_2CH_3$ | |
| 4.18 | $SC_3H_7$-i | $SC_3H_7$-i | |
| 4.19 | $S(O)_2CH_3$ | $OCH_2CH=CH_2$ | |
| 4.20 | $OCH_3$ | $OCH_2CH=CH_2$ | |
| 4.21 | $SO_2CH_3$ | $OCH_2CH=CHCH_3$ | |
| 4.22 | $SC_3H_7$-i | $SC_4H_9$-t | |
| 4.23 | $OCH_3$ | $OCH_2CH_2Cl$ | |
| 4.24 | $OCH_3$ | $S(O)_2CH_3$ | |
| 4.25 | $S(O)_2CH_3$ | $S(O)_2C_2H_5$ | |
| 4.26 | $SC_3H_7$-i | $OCH_2CH=CH_2$ | |

Taulukko 4 (jatkuu)

| Yhd. no | $R_a$ | $R_b$ | Fysik. vakiot ($^oC$) |
|---|---|---|---|
| 4.27 | $OCH_3$ | $S(O)_2C_2H_5$ | |
| 4.28 | $S(O)_2C_2H_5$ | $S(O)_2CH_3$ | |
| 4.29 | $S(O)_2C_2H_5$ | $OCH_3$ | |
| 4.30 | $OC_2H_5$ | $OCH_3$ | |
| 4.31 | $S(O)_2C_2H_5$ | $S(O)_2C_2H_5$ | |
| 4.32 | $SC_3H_7$-i | $OCH_2CH_2Cl$ | |
| 4.33 | $OC_2H_5$ | $OC_2H_5$ | |
| 4.34 | $SC_4H_9$-t | $OCH_3$ | |
| 4.35 | $OC_2H_5$ | $SC_2H_5$ | |
| 4.36 | $SC_4H_9$-t | $OC_2H_5$ | |
| 4.37 | $S(O)_2C_2H_5$ | $OC_2H_5$ | |
| 4.38 | $OC_2H_5$ | $SC_3H_7$-i | |
| 4.39 | $S(O)_2C_2H_5$ | $SCH_3$ | |
| 4.40 | $SC_4H_9$-t | $SCH_3$ | |
| 4.41 | $OC_2H_5$ | $SC_4H_9$-t | |
| 4.42 | $S(O)_2C_2H_5$ | $SC_2H_5$ | |
| 4.43 | $SC_4H_9$-t | $SC_2H_5$ | |
| 4.44 | $OC_2H_5$ | $OCH_2CH=CH_2$ | |
| 4.45 | $S(O)_2C_2H_5$ | $SC_3H_7$-i | |
| 4.46 | $OC_2H_5$ | $OCH_2CH_2Cl$ | |

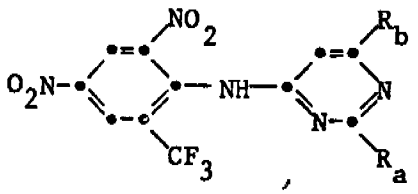
Taulukko 4 (jatkuu)

| Yhd. no | $R_a$ | $R_b$ | Fysik. vakiot ($^oC$) |
|---|---|---|---|
| 4.47 | $OC_2H_5$ | $SCH_3$ | |
| 4.48 | $S(O)_2C_2H_5$ | $SC_4H_9$-t | |
| 4.49 | $OC_2H_5$ | $S(O)_2CH_3$ | |
| 4.50 | $SC_4H_9$-t | $SC_3H_7$-i | |
| 4.51 | $S(O)_2C_2H_5$ | $OCH_2CH=CH_2$ | |
| 4.52 | $OCH_2CH=CH_2$ | $OCH_3$ | |
| 4.53 | $OC_2H_5$ | $S(O)_2C_2H_5$ | |
| 4.54 | $S(O)_2C_2H_5$ | $OCH_2CH_2Cl$ | |
| 4.55 | $SCH_3$ | $OCH_3$ | Sp. 70-74 |
| 4.56 | $SC_4H_9$-t | $SC_4H_9$-t | |
| 4.57 | $OCH_2CH=CH_2$ | $OC_2H_5$ | |
| 4.58 | $SCH_3$ | $OC_2H_5$ | |
| 4.59 | $SC_2H_5$ | $SC_2H_5$ | |
| 4.60 | $SCH_3$ | $SCH_3$ | |
| 4.61 | $OCH_2CH=CH_2$ | $SCH_3$ | |
| 4.62 | $SCH_3$ | $SC_2H_5$ | |
| 4.63 | $SC_2H_5$ | $SC_3H_7$-i | |
| 4.64 | $OCH_2CH=CH_2$ | $SC_2H_5$ | |
| 4.65 | $SCH_3$ | $C_3H_7$-i | |
| 4.66 | $SC_2H_5$ | $SC_4H_9$-t | |

Taulukko 4 (jatkuu)

| Yhd. no | $R_a$ | $R_b$ | Fysik. vakiot ($^oC$) |
|---|---|---|---|
| 4.67 | $SCH_3$ | $SC_4H_9$-t | |
| 4.68 | $OCH_2CH=CH_2$ | $SC_3H_7$-i | |
| 4.69 | $OCH_2CH=CH_2$ | $OCH_2CH=CH_2$ | |
| 4.70 | $SCH_3$ | $OCH_2CH=CH_2$ | |
| 4.71 | $SC_2H_5$ | $OCH_2CH=CH_2$ | |
| 4.72 | $SCH_3$ | $OCH_2CH_2Cl$ | |
| 4.73 | $SC_2H_5$ | $OCH_2CH_2Cl$ | |
| 4.74 | $OCH(CH_3)CH_2CH_2CH_3$ | $SCH_3$ | |
| 4.75 | $SC_2H_5$ | $OC_2H_5$ | |
| 4.76 | $OCH(CH_3)CH_2CH_2CH_3$ | $SC_2H_5$ | |
| 4.77 | $OCH_2CH_2OCH_3$ | $SCH_3$ | |
| 4.78 | $SCH_3$ | $OCH_2CH_2OCH_3$ | |
| 4.79 | $SC_2H_5$ | $OCH_3$ | |
| 4.80 | $SC_2H_5$ | $OCH_2CH_2OCH_3$ | |
| 4.81 | $SCH_3$ | $OCH_2CH_2OC_2H_5$ | |
| 4.82 | $SC_2H_5$ | $SCH_3$ | |
| 4.83 | $SC_2H_5$ | $OCH_2CH_2OC_2H_5$ | |
| 4.84 | $SCH_2CH=CH_2$ | $OCH_3$ | Hartsi |

Taulukko 5: Yhdisteet, joilla on kaava

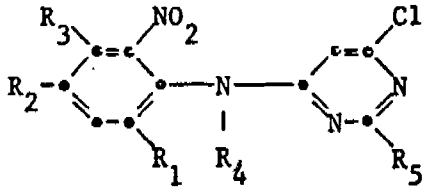


| Yhd. no | $R_a$ | $R_b$ | Fysik. vakiot |
|---|---|---|---|
| 5.1 | $OCH_3$ | $OCH_3$ | |
| 5.2 | $SCH_3$ | $OCH_3$ | |
| 5.3 | $OCH_3$ | $OC_2H_5$ | |
| 5.4 | $SCH_3$ | $OC_2H_5$ | |
| 5.5 | $OCH_3$ | $SCH_3$ | |
| 5.6 | $SCH_3$ | $SCH_3$ | |
| 5.7 | $OCH_3$ | $SC_2H_5$ | |
| 5.8 | $SCH_3$ | $SC_2H_5$ | |
| 5.9 | $OCH_3$ | $OC_3H_7$-i | |
| 5.10 | $SCH_3$ | $OCH_2CH{=}CH_2$ | |
| 5.11 | $OCH_3$ | $S(O)_2CH_3$ | |
| 5.12 | $SC_2H_5$ | $OCH_3$ | |
| 5.13 | $SC_3H_7$-i | $OCH_3$ | |
| 5.14 | $OCH_3$ | $S(O)_2C_2H_5$ | |
| 5.15 | $SC_2H_5$ | $OC_2H_5$ | |
| 5.16 | $SC_3H_7$-i | $OC_2H_5$ | |
| 5.17 | $OC_2H_5$ | $OCH_3$ | |

Taulukko 5 (jatkuu)

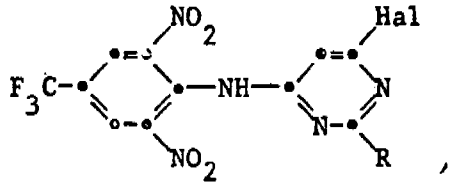
| Yhd. no | $R_a$ | $R_b$ | Fysik. vakiot (°C) |
|---|---|---|---|
| 5.18 | $SC_2H_5$ | $SCH_3$ | |
| 5.19 | $OC_2H_5$ | $OC_2H_5$ | |
| 5.20 | $SC_2H_5$ | $SC_2H_5$ | |
| 5.21 | $SC_2H_5$ | $OCH_2CH=CH_2$ | |
| 5.22 | $OC_2H_5$ | $SCH_3$ | |
| 5.23 | $OC_2H_5$ | $SC_2H_5$ | |
| 5.24 | $S(O)_2CH_3$ | $S(O)_2CH_3$ | |
| 5.25 | $SC_3H_7$-i | $SC_3H_7$-i | |
| 5.26 | $S(O)_2C_2H_5$ | $S(O)_2C_2H_5$ | |
| 5.27 | $OC_2H_5$ | $S(O)_2CH_3$ | |
| 5.28 | $S(O)_2C_3H_7$-i | $S(O)_2C_3H_7$-i | |
| 5.29 | $S(O)_2CH_3$ | $S(O)_2C_2H_5$ | |
| 5.30 | $S(O)CH_3$ | $S(O)CH_3$ | |
| 5.31 | $OC_2H_5$ | $S(O)_2C_2H_5$ | |
| 5.32 | $S(O)_2C_2H_5$ | $S(O)_2CH_3$ | |
| 5.33 | $OCH_2CH=CH_2$ | $SCH_3$ | |
| 5.34 | $OCH_2C\equiv CH$ | $SCH_3$ | |

Taulukko 6: Yhdisteet, joilla on kaava



| Yhd. no | $R_1$ | $R_2$ | $R_3$ | $R_4$ | $R_5$ | Fysik. vakiot ($^{o}C$) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 6.1 | $NO_2$ | $CF_3$ | Cl | $CO-CH_3$ | Cl | |
| 6.2 | $CF_3$ | $NO_2$ | H | $CO-CH_3$ | Cl | |
| 6.3 | $NO_2$ | $CF_3$ | Cl | $CO-CH_2Cl$ | Cl | |
| 6.4 | $NO_2$ | $CF_3$ | Cl | $CO-CH_3$ | $OCH_3$ | |
| 6.5 | $CF_3$ | $NO_2$ | H | $CO-CH_2Cl$ | Cl | |
| 6.6 | $NO_2$ | $CF_3$ | Cl | $CO-CH_3$ | $SCH_3$ | Sp. 157-159 |
| 6.7 | $NO_2$ | $CF_3$ | Cl | $CO-CH_2OCH_3$ | Cl | |
| 6.8 | $CF_3$ | $NO_2$ | H | $CO-CH_3$ | $SCH_3$ | |
| 6.9 | $CF_3$ | $NO_2$ | H | $CO-CH_2OCH_3$ | Cl | |
| 6.10 | $NO_2$ | $CF_3$ | Cl | $CO-CH_2OC_2H_5$ | Cl | |
| 6.11 | $NO_2$ | $CF_3$ | Cl | $CO-CH_2OCH_3$ | $SCH_3$ | Sp. 98-102 |
| 6.12 | $NO_2$ | $CF_3$ | Cl | $CO-CH_2Cl$ | $SCH_3$ | Sp. 45-49 |

Taulukko 7: Yhdisteet, joilla on kaava



| Yhd. no | R | Hal | Fysik. vakiot (°C) |
|---|---|---|---|
| 7.1 | Cl | Cl | Sp. 213-214 |
| 7.2 | $OCH_3$ | F | Hartsi |
| 7.3 | $OC_3H_7$-i | Cl | |
| 7.4 | $S(O)_2CH_3$ | Cl | |
| 7.5 | F | F | Hartsi |
| 7.6 | $OC_2H_5$ | Cl | |
| 7.7 | $OCH_3$ | Cl | Sp. 212-214 |
| 7.8 | $OC_2H_5$ | F | Hartsi |
| 7.9 | $S(O)_2C_2H_5$ | Cl | |
| 7.10 | $OC_3H_7$-n | Cl | Sp. 122,5-123,5 |
| 7.11 | $S(O)CH_3$ | Cl | |
| 7.12 | Br | Br | Hartsi |
| 7.13 | $OC_4H_9$-n | Cl | |
| 7.14 | S-Sykloheksyyli | Cl | |
| 7.15 | J | J | |
| 7.16 | $OC_3H_7$-i | F | |

Taulukko 7 (jatkuu)

| Yhd. no | R | Hal | Fysik. vakiot ($^{o}$C) |
|---|---|---|---|
| 7.17 | $OC_4H_9$-t | Cl | |
| 7.18 | $S(O)C_2H_5$ | Cl | |
| 7.19 | $SCH_3$ | F | |
| 7.20 | $S(O)_2C_3H_7$-n | Cl | |
| 7.21 | $OCH_2CH(CH_3)C_2H_5$ | Cl | |
| 7.22 | $OCH(CH_3)C_2H_5$ | Cl | Puolikiteinen |
| 7.23 | $OC_5H_{11}$-n | Cl | |
| 7.24 | O-Sykloheksyyli | Cl | |
| 7.25 | $SC_2H_5$ | F | |
| 7.26 | $OC_6H_{11}$-n | Cl | |
| 7.27 | $OCH_3$ | Br | Hartsi |
| 7.28 | $OC_6H_{13}$-n | F | |
| 7.29 | $SC_4H_9$-t | F | |
| 7.30 | $OC_2H_5$ | Br | Hartsi |
| 7.31 | $OCH_2CH(CH_3)CH_2CH_2CH_3$ | Cl | |
| 7.32 | $SCH_3$ | Cl | Sp. 181-183 |
| 7.33 | $OC_3H_7$-i | Br | |
| 7.34 | $OCH_2CH(C_2H_5)_2$ | Cl | |
| 7.35 | $OCH_2CH_2OCH_3$ | F | |
| 7.36 | $SCH_3$ | Br | |

Taulukko 7 (jatkuu)

| Yhd. no | R | Hal | Fysik. vakiot ($^{o}$C) |
|---|---|---|---|
| 7.37 | $OC(CH_3)C{\equiv}CH$ | Cl | |
| 7.38 | $S(O)_2CH_3$ | F | |
| 7.39 | $SC_4H_9$-n | Cl | |
| 7.40 | $SC_2H_5$ | Cl | |
| 7.41 | $SCH_2CH{=}CH_2$ | Cl | |
| 7.42 | $OCH_2CF_3$ | Cl | Puolikiteinen |
| 7.43 | $S(O)_2C_2H_5$ | F | |
| 7.44 | $SC_2H_5$ | Br | |
| 7.45 | $SC_3H_7$-n | Cl | |
| 7.46 | $SC_3H_7$-i | Br | |
| 7.47 | $SC_3H_7$-i | Cl | |
| 7.48 | $OC(CH_3)_2C{\equiv}CH$ | Cl | |
| 7.49 | $OCH_2C{\equiv}CH$ | Cl | Puolikiteinen |
| 7.50 | $OCH_2CH_2Br$ | Br | |
| 7.51 | $S(O)_2CH_3$ | Br | |
| 7.52 | $S(O)_2C_6H_{13}$-n | F | |
| 7.53 | $SC_4H_9$-n | Cl | |
| 7.54 | $S(O)_2C_2H_5$ | Br | |
| 7.55 | $OCH_2CH{=}CH_2$ | Cl | Puolikiteinen |
| 7.56 | $OCH_3$ | J | |

Taulukko 7 (jatkuu)

| Yhd. no | R | Hal | Fysik. vakiot (°C) |
|---|---|---|---|
| 7.57 | $SC_4H_9$-t | Cl | |
| 7.58 | $OCH_2CH_2Br$ | Cl | Hartsi |
| 7.59 | $OCH_2CH(CH_3)_2$ | Cl | Sp. 138-142 |
| 7.60 | $OCH_2CH_2OC_2H_5$ | Cl | |
| 7.61 | $OC_3H_7$-i | J | |
| 7.62 | $SCH_3$ | J | |
| 7.63 | $OCH_2CH_2Cl$ | Cl | |
| 7.64 | $S(O)_2CH_3$ | J | |
| 7.65 | $OCH_2CH=CH_2$ | $OCH_2CH=CH_2$ | Öljy |
| 7.66 | $OCH_2CH_2CH_2Cl$ | Cl | |
| 7.67 | $SC_2H_5$ | J | |
| 7.68 | $OCH_2CH=CH_2$ | J | |
| 7.69 | $OCH_2CH_2OCH_3$ | Cl | |
| 7.70 | $OCH_3$ | $OCH_3$ | Sp. 168-170 |

Valmistusesimerkit nestemäiselle, kaavan (I) mukaiselle aktiiviaineelle (% = painoprosentti)

| F1. Emulsio-konsentraatit | a) | b) | c) |
|---|---|---|---|
| aktiiviainetta taulukoista | 25% | 40% | 50% |
| Ca-dodekyylibentseenisulfonaattia | 5% | 8% | 6% |
| risiiniöljy-polyetyleeniglykolieetteriä (36 moolia etyleenioksidia) | 5% | - | - |
| tributyylifenoyyli-polyetyleeniglykolieetteriä (30 moolia etyleenioksidia) | - | 12% | 4% |
| sykloheksanonia | - | 15% | 20% |
| ksyloliseosta | 65% | 25% | 20% |

Tällaisista konsentraateista voidaan valmistaa vedellä laimentamalla kulloinkin toivotun konsentraation omaavat emulsiot.

| F2. Liuokset | a) | b) | c) | d) |
|---|---|---|---|---|
| aktiiviainetta taulukoista | 80% | 10% | 5% | 95% |
| etyleeniglykoli-monometyylieetteriä | 20% | - | - | - |
| polyetyleeniglykolia (MG 400) | - | 70% | - | - |
| N-metyyli-2-pyrrolidonia | - | 20% | - | - |
| epoksidoitua kookospähkinäöljyä | - | - | 1% | 5% |
| bensiiniä (kiehumisrajat 160-190°) | - | - | 94% | - |

(MG = molekyylipaino)

Liuokset ovat sopivia käytettäväksi pienten pisaroiden muodossa.

| F3. Granulaatit | a) | b) |
|---|---|---|
| aktiiviainetta taulukoista | 5% | 10% |
| kaoliinia | 94% | - |
| korkeadispersioista piihappoa | 1% | - |
| attapulgiittia | - | 90% |

Aktiiviaine liuotetaan metyleenikloridiin, levitetään kantaja-aineelle ja lopuksi liuotin haihdutetaan tyhjiössä.

| F4. Pölytteet | a) | b) |
|---|---|---|
| aktiiviainetta taulukoista | 2% | 5% |
| korkeadispersioista piihappoa | 1% | 5% |
| talkkia | 97% | - |
| kaoliinia | - | 90% |

Aktiiviaine sekoitetaan hyvin kantaja-aineiden kanssa, jolloin saadaan käyttövalmiit pölytteet.

Valmistusesimerkit kiinteille, kaavan (I) mukaisille aktiiviaineille (% = painoprosentti)

| F5. Ruiskutejauheet | a) | b) | c) |
|---|---|---|---|
| aktiiviainetta taulukoista | 25% | 50% | 75% |
| Na-ligniinisulfonaattia | 5% | 5% | - |
| Na-lauryylisulfaattia | 3% | - | 5% |
| Na-di-isobutyylinaftaliini-sulfonaattia | - | 6% | 10% |
| oktyylifenolipolyetyleeniglykoli-eetteriä (7-8 moolia etyleeni-oksidia) | - | 2% | - |
| korkeadispersioista piihappoa | 5% | 10% | 10% |
| kaoliinia | 62% | 27% | - |

Aktiiviaine sekoitetaan hyvin lisäaineiden kanssa ja jauhetaan hyvin sopivassa myllyssä. Saadaan ruiskutejauheita,

jotka voidaan laimentaa vedellä kulloinkin toivotun konsentraation omaaviksi suspensioiksi.

F6. Emulsio-konsentraatti

| | |
|---|---|
| aktiiviainetta taulukoista | 10% |
| oktyylifenolipolyetyleeniglykolieetteriä (4-5 moolia etyleenioksidia) | 3% |
| Ca-dodekyylibentseenisulfonaattia | 3% |
| risiiniöljypolyglykolieetteriä (35 moolia etyleenioksidia) | 4% |
| sykloheksanonia | 30% |
| ksyloliseosta | 50% |

Tästä konsentraatista voidaan valmistaa vedellä laimentamalla kulloinkin toivotun konsentraation omaavat emulsiot.

F7. Pölytteet

| | a) | b) |
|---|---|---|
| aktiiviainetta taulukoista | 5% | 8% |
| talkkia | 95% | - |
| kaoliinia | - | 92% |

Käyttövalmiit pölytteet saadaan siten, että aktiiviaine sekoitetaan sopivassa myllyssä kantajan kanssa.

F8. Suulakepuristusgranulaatti

| | |
|---|---|
| aktiiviainetta taulukoista | 10% |
| N-ligniinisulfonaattia | 2% |
| karboksimetyyliselluloosaa | 1% |
| kaoliinia | 87% |

Aktiiviaine sekoitetaan lisäaineiden kanssa, jauhetaan ja kostutetaan vedellä. Tämä seos suulakepuristetaan ja lopuksi kuivataan ilmavirrassa.

F9. Päällystetty granulaatti

| | |
|---|---|
| aktiiviainetta taulukoista | 3% |
| polyetyleeniglykolia (MG 200) | 3% |
| kaoliinia | 94% |

(MG = molekyylipaino)

Hienoksi jauhettu aktiiviaine ja polyetyleeniglykolilla kostutettu kaoliini laitetaan samanaikaisesti sekoittimeen. Tällä tavalla saadaan päällystettyjä granulaatteja, jotka eivät pölyä.

F10. Suspensio-konsentraatti

| | |
|---|---|
| aktiiviainetta taulukoista | 40% |
| etyleeniglykolia | 10% |
| nonyylifenolipolyetyleeniglykolieetteriä (15 moolia etyleenioksidia) | 6% |
| N-ligniinisulfonaattia | 10% |
| karboksimetyyliselluloosaa | 1% |
| 37% vesipitoista formaldehydiliuosta | 0,2% |
| silikoniöljyä, 75% vesipitoisen emulsion muodossa | 0,8% |
| vettä | 32% |

Hienoksi jauhettu aktiiviaine sekoitetaan hyvin lisäaineiden kanssa. Näin saadaan suspensio-konsentraatti, josta vedellä laimentamalla voidaan valmistaa kulloinkin toivotun konsentraation omaavat suspensiot.

Biologiset esimerkit:

Esimerkki B1: Vaikutus vehnällä Puccinia graminis'ta vastaan

a) Residuaali-suojaava vaikutus

Vehnäkasvit ruiskutetaan 6 päivän kuluttua kylvöstä aktiiviaineen ruiskutusjauheesta valmistetulla ruiskutteella (0,02 % aktiiviainetta). 24 tunnin kuluttua käsitellyt kasvit infektoidaan sienen kesäitiösuspensiolla. Inkuboidaan 48 tuntia, suhteellisen ilmankosteuden ollessa 95-100 % ja lämpötilan noin 20°, jonka jälkeen infektoidut kasvit siirretään noin 22°:n kasvihuoneeseen. Ruostenystyröiden tarkastelu suoritetaan 12 päivän kuluttua infektiosta.

b) Systeeminen vaikutus

Vehnäkasveille kaadetaan 5 päivän kuluttua kylvöstä aktiiviaineen ruiskutejauheesta valmistettua ruiskutetta (0,006 % aktiiviainetta laskettuna maatilavuudesta). 48 tunnin kuluttua käsitellyt kasvit infektoidaan sienen kesäitiösuspensiolla. Inkuboidaan 48 tuntia, suhteellisen ilmankosteuden ollessa 95-100 % ja lämpötilan noin 20°, jonka jälkeen infektoidut kasvit siirretään noin 20°:n kasvihuoneeseen. Ruostenystyröiden tarkastelu suoritetaan 12 päivän kuluttua infektioinnista.

Yhdisteet taulukoista 1, 2 ja 7, erityisesti ryhmien Ib ja Id yhdisteet omaavat erittäin hyvän vaikutuksen Puccini-sieniä vastaan. Käsittelemättömät, mutta infektoidut kontrollikasvit saivat 100 % Puccini-tartunnan. Muun muassa yhdisteet 1.1, 1.4, 1.5, 1.8, 2.1, 2.2, 2.5, 2.6, 2.7, 2.8, 2.12, 2.27, 2.32, 2.40, 2.42, 2.49, 7.2, 7.5 ja 7.32 vähentävät Puccini-tartunnan 0-5 %:iin.

Esimerkki B2: Vaikutus maapähkinäkasveilla Cersopora arachdidicola'a vastaan

Residuaali-suojaava vaikutus

10-15 cm korkeat maapähkinäkasvit ruiskutetaan aktiiviaineen ruiskutejauheesta valmistetulla ruiskutteella (0,006 % aktiiviainetta) ja 48 tuntia myöhemmin infektoidaan sienen konidiosuspensiolla. Infektoituja kasveja inkuboidaan 72 tunnin ajan noin 21°:ssa ja korkeassa ilmankosteudessa, jonka jälkeen ne siirretään kasvihuoneeseen, kunnes tyypilliset lehtilaikut tulevat esiin. Fungisidinen vaikutus arvioidaan 12 päivän kuluttua infektoinnista, perustuen esiintyvien laikkujen lukumäärään ja suuruuteen.

Verrattaessa käsittelemättömiin, mutta infektoituihin kontrollikasveihin (laikkujen lukumäärä ja suuruus = 100 %) havaittiin maapähkinäkasveilla, jotka oli käsitelty ryhmien Ib ja Id mukaisilla aktiiviaineilla, Cercospora-tautia huomattavasti vähemmän. Niinpä yhdisteet 1.1, 1.4, 1.5, 1.8, 1.63, 1.80, 2.2, 2.3, 2.32, 2.40, 7.1 ja 7.32 edellä esitetyssä kokeessa estävät laikkujen esiintymisen lähes täysin (0-10 %).

Esimerkki B3: Vaikutus ohralla Erysiphae graminis'ta vastaan

a) Residuaali-suojaava vaikutus

Noin 8 cm korkeat ohrakasvit ruiskutetaan aktiiviaineen ruiskutejauheesta valmistetulla ruiskutteella (0,002 % aktiiviainetta). 3-4 tunnin kuluttua käsitellyt kasvit pölytetään sienen konidioilla. Infektoidut ohrakasvit siirretään noin 22°:n kasvihuoneeseen ja sienitauti arvioidaan 10 päivän kuluttua.

b) Systeeminen vaikutus

Noin 8 cm korkeille ohrakasveille kaadetaan aktiiviaineen ruiskutejauheesta valmistettua ruiskutetta (0,006 % aktiiviainetta laskettuna maatilavuudesta). Tällöin on varottava, että ruiskute ei tule kosketukseen maanpäällisten kasvinosien kanssa. 48 tunnin kuluttua käsitellyt kasvit pölytetään sienen konidioilla. Infektoidut ohrakasvit siirretään noin 22°:n kasvihuoneeseen ja sienitauti arvioidaan 10 päivän kuluttua.

Kaavan (I) mukaiset yhdisteet, erityisesti ryhmien Ib ja Id yhdisteet vaikuttavat hyvin Erysiphene-sieniä vastaan. Käsittelemättömät, mutta infektoidut kontrollikasvit saivat 100 % Erysiphe-taudin. Muun muassa taulukoiden yhdisteet vähentävät sienitaudin ohralla alle 30 %:iin, esim. yhdisteet 7.1, 7.5 ja 7.12.

Esimerkki B4: Residuaali-suojaava vaikutus omenapuilla Venturia inaequalis'ta vastaan

Omenapistokkaat, joissa on 10-20 cm pitkät uudet oksat, ruiskutetaan aktiiviaineen ruiskutejauheesta valmistetulla ruiskutteella (0,006 % aktiiviainetta). 24 tunnin kuluttua käsitellyt kasvit infektoidaan sienen konidiosuspensiolla. Sen jälkeen kasveja inkuboidaan 5 päivän ajan, suhteellisen kosteuden ollessa 90-100 % ja edelleen 10 päivää kasvihuoneessa 20-24°:ssa. Rupitauti arvioidaan 15 päivää infektoinnin jälkeen. Taulukoiden yhdisteet vähentävät tartunnan alle 25 %:iin, esim. yhdisteet 1.4, 1.5 ja 1.12. Käsittelemättömät, mutta infektoidut kontrollipuut saivat sitä vastoin 100 % tartunnan.

Esimerkki B5: Vaikutus pavuilla Botrytis cinerea'a vastaan

Residuaali-suojaava vaikutus

Noin 10 cm korkeat papukasvit ruiskutetaan aktiiviaineen ruiskutejauheesta valmistetulla ruiskutteella (0,02 % aktiiviainetta). 48 tunnin kuluttua käsitellyt kasvit infektoidaan sienen konidiosuspensiolla. Infektoituja kasveja inkuboidaan 3 päivää, suhteellisen ilmankosteuden ollessa 95-100 % ja lämpötilan 21°, jonka jälkeen arvioidaan sientitauti. Taulukoiden yhdisteet vähentävät monessa tapauksessa huomattavasti sieni-infektiota. 0,02 % konsentraatiossa taulukoiden 1, 2 ja 7 yhdisteet, esim. yhdisteet 1.1, 1.4, 1.5, 1.8, 1.12, 7.1 ja 7.32, osoittautuvat täysin tehokkaiksi. Sairastuvuus oli 0-8 %. Käsittelemättömät, mutta infektoidut papukasvit saivat 100 % Botrytis-taudin.

Esimerkki B6: Vaikutus tomaattikasveilla Phytophtora infestans'ia vastaan

a) Residuaali-suojaava vaikutus

Tomaattikasvit ruiskutetaan 3-viikon kasvatuksen jälkeen aktiiviaineen ruiskutejauheesta valmistetulla ruiskutteella (0,06 % aktiiviainetta). 24 tunnin kuluttua käsitellyt kasvit infektoidaan sienen sporangisuspensiolla (itiösuspensiolla). Sienitartunta arvioidaan sen jälkeen, kun infektoituja kasveja on 5 päivän ajan inkuboitu, suhteellisen ilmankosteuden ollessa 90-100 % ja lämpötilan 20°.

b) Systeemin vaikutus

Tomaattikasveille kaadetaan 3-viikon kasvatuksen jälkeen aktiiviaineen ruiskutejauheesta valmistettua ruiskutetta (0,06 % aktiiviainetta laskettuna maatilavuudesta). Tällöin on varottava, että ruiskute ei joudu kosketukseen maanpäällisten kasvinosien kanssa. 48 tunnin kuluttua käsitellyt kasvit infektoidaan sienen sporangisuspensiolla (itiösuspensiolla). Sienitauti arvioidaan sen jälkeen, kun infektoituja kasveja on inkuboitu 5 päivän ajan, suhteellisen kosteuden ollessa 90-100 % ja lämpötilan 20°.

Erityisesti alaryhmien Ib ja Id yhdisteiden havaittiin edellä esitetyssä kokeessa omaavan erittäin hyvän systeemisen vaikutuksen, esim. yhdisteet no 1.1, 1.2, 1.4, 1.5, 1.7, 1.8, 1.12, 1.16, 1.20, 1.37, 1.49, 1.57, 1.74, 1.80, 1.84, 2.1, 2.2, 2.5, 2.6, 2.7, 2.8, 2.27, 2.32, 2.49, 2.55, 4.4, 7.7 ja 7.32. Verrattuna käsittelemättömiin kontrollikasveihin (100 % tartunta) nämä yhdisteet poistivat lähes täysin sienitaudin (0-5 %).

Esimerkki B7: Vaikutus viiniköynnöksillä Plasmapora'a vastaan

a) Residuaali-suojaava vaikutus

4-5 lehtivaiheessa olevat viiniköynnöstaimet ruiskutetaan aktiiviaineen ruiskutejauheesta valmistetulla ruiskutteella (0,06 % aktiiviainetta). 24 tunnin kuluttua käsitellyt kasvit infektoidaan sienen sporangisuspensiolla (itiösuspensiolla). Inkuboidaan 6 päivän ajan, suhteellisen ilmankosteuden ollessa 95-100 % ja lämpötilan 20°, jonka jälkeen sienitauti arvioidaan.

b) Residuaali-hoitava vaikutus

4-5 lehtivaiheessa olevat viiniköynnöstaimet infektoidaan sienen sporangisuspensiolla (itiösuspensiolla). Inkuboidaan 24 tuntia kosteushuoneessa 95-100 % suhteellisessa ilmankosteudessa ja 20°:n lämpötilassa, jonka jälkeen infektoidut kasvit kuivataan ja ruiskutetaan aktiiviaineen ruiskutejauheesta valmistetulla ruiskutteella (0,06 % aktiiviainetta). Ruiskutepäällysteen kuivuttua, käsitellyt kasvit viedään uudestaan kosteushuoneeseen. Sienitaudin arviointi suoritetaan 6 päivää infektoinnin jälkeen.

Taulukkojen 1, 2 ja 7 yhdisteet omasivat viiniköynnöksillä Plasmopara viticola'a vastaan erittäin hyvän fungisidisen vaikutuksen, erityisesti aktiiviaineet no 1.1, 1.4, 1.5, 1,8 ja 7.32 vaikuttivat sienitaudin täysin poistaen (0-5 %).

Esimerkki B8: Vaikutus riisikasveilla Piricularia oryzae'ta vastaan

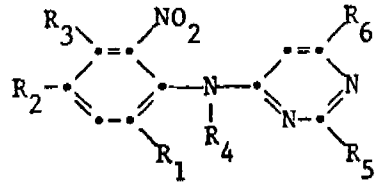
Residuaali-suojaava vaikutus

Riisikasvit ruiskutetaan kaksiviikkoisen viljelyn jälkeen aktiiviaineen ruiskutejauheesta valmistetulla ruiskutteella (0,02 % aktiiviainetta). 48 tunnin kuluttua käsitellyt kasvit infektoidaan sienen konidiosuspensiolla. Inkuboidaan 5 päivää, suhteellisen ilmankosteuden ollessa 95-100 % ja lämpötilan 24°, jonka jälkeen sienitauti arvioidaan.

Riisikasveilla, jotka oli käsitelty ruiskutteella, joka sisälsi aktiiviaineena jonkin yhdisteistä 1.1, 1.4, 1.5, 1.8 tai 7.32, oli käsittelemättömiin kontrollikasveihin (100 % tartunta) verrattuna alle 10 % sienitautia.

PATENTTIVAATIMUKSET:

1. Yleisen kaavan (I) mukaiset yhdisteet



(I)

joissa

$R_1$ tarkoittaa $NO_2$:ta tai $CF_3$:a;

$R_2$ tarkoittaa $NO_2$:ta tai $CF_3$:a;

$R_3$ tarkoittaa vetyä tai halogeenia;

$R_4$ tarkoittaa vetyä tai ryhmää $-C(O)R_7$, jossa $R_7$ tarkoittaa substituoimatonta tai halogeenilla, $C_1$-$C_3$-alkoksilla tai $C_1$-$C_3$-alkyylitiolla substituoitua $C_1$-$C_4$-alkyyliä

$R_5$ ja $R_6$ tarkoittavat, toisistaan riippumatta, halogeenia, $C_1$-$C_6$-alkoksia, halogeenilla tai $C_1$-$C_3$-alkoksilla substituoitua $C_1$-$C_6$-alkyyliä, halogeenilla tai $C_1$-$C_3$-alkoksilla substituoitua $C_1$-$C_6$-alkoksia, $C_1$-$C_6$-alkyylitioa, halogeenilla tai $C_1$-$C_3$-alkoksilla substituoitua $C_1$-$C_6$-alkyylitioa, $C_3$-$C_6$-sykloalkoksia, $C_3$-$C_6$-sykloalkyylitioa, $C_3$-$C_6$-alkenyylioksia, $C_3$-$C_6$-alkenyylitioa, $C_3$-$C_6$-alkinyylioksia, $C_1$-$C_6$-alkyylisulfoksyyliä, $C_1$-$C_6$-alkyylisulfonyyliä, $C_1$-$C_6$-sulfonyylioksia, $C_3$-$C_6$-alkenyylisulfoksyyliä, $C_3$-$C_6$-alkenyylisulfonyyliä, $C_3$-$C_6$-sykloalkyylisulfoksyyliä tai $C_3$-$C_6$-sykloalkyylisulfonyyliä.

2. Patenttivaatimuksen 1 mukaisen kaavan (I) mukaiset yhdisteet t u n n e t t u siitä, että $R_1$ tarkoittaa $NO_2$:ta, $R_2$ $CF_3$:a, $R_3$ tarkoittaa klooria ja $R_4$ vetyä, $R_5$ tarkoittaa halogeenia, $C_1$-$C_6$-alkoksia, kloorilla tai bromilla substituoitua $C_1$-$C_3$-alkyyliä, $C_1$-$C_3$-alkoksilla substituoitua $C_1$-$C_3$-alkoksia, $C_1$-$C_6$-alkyylitioa, syklopen-

tyylioksia, sykloheksyylioksia, syklopentyylitioa, sykloheksyylitioa, $C_3$-$C_6$-alkenyylioksia, $C_3$-$C_6$-alkenyylitioa, $C_3$-$C_6$-alkinyylioksia, $C_1$-$C_3$-alkyylisulfoksyyliä, $C_1$-$C_6$-alkyylisulfonyyliä, $C_1$-$C_3$-alkyylisulfonyylioksia tai sykloheksyylisulfonyyliä ja $R_6$ tarkoittaa halogeenia.

3. Patenttivaatimuksen 1 mukaisen kaavan (I) mukaiset yhdisteet, joissa $R_1$ tarkoittaa $NO_2$:ta, $R_2$ $CF_3$:a, $R_3$ tarkoittaa klooria tai bromia, $R_5$ tarkoittaa halogeenia, $C_1$-$C_4$-alkoksia, kloorilla tai bromilla substituoitua $C_1$-$C_3$-alkyyliä, metoksilla substituoitua $C_1$-$C_2$-alkoksia, $C_1$-$C_4$-alkyylitioa, $C_3$-$C_4$-alkenyylioksia, $C_3$-$C_4$-alkinyylioksia tai $C_1$-$C_3$-alkyylisulfonyyliä, ja $R_6$ tarkoittaa fluoria, klooria tai bromia.

4. Patenttivaatimuksen 1 mukaisen kaavan (I) mukaiset yhdisteet, t u n n e t t u siitä, että $R_1$ tarkoittaa $CF_3$:a, $R_2$ tarkoittaa $NO_2$:ta, $R_3$ tarkoittaa vetyä ja $R_4$ tarkoittaa vetyä, $R_5$ tarkoittaa halogeenia, $C_1$-$C_6$-alkoksia, kloorilla tai bromilla substituoitua $C_1$-$C_3$-alkyyliä, $C_1$-$C_3$-alkoksilla substituoitua $C_1$-$C_3$-alkoksia, $C_1$-$C_6$-alkyylitioa, syklopentyylioksia, sykloheksyylioksia, syklopentyylitioa, sykloheksyylitioa, $C_3$-$C_6$-alkenyylioksia, $C_3$-$C_6$-alkenyylitioa, $C_3$-$C_6$-alkinyylioksia, $C_1$-$C_3$-alkyylisulfoksyyliä, $C_1$-$C_6$-alkyylisulfonyyliä, $C_1$-$C_3$-alkyylisulfonyylioksia tai sykloheksyylisulfonyyliä, ja $R_6$ tarkoittaa halogeenia.

5. Patenttivaatimuksen 1 mukaisen kaavan (I) mukaiset yhdisteet, joissa $R_1$ tarkoittaa $CF_3$:a, $R_2$ tarkoittaa $NO_2$:ta, $R_3$ tarkoittaa klooria tai bromia, $R_5$ tarkoittaa halogeenia, $C_1$-$C_4$-alkoksia, kloorilla tai bromilla substituoitua $C_1$-$C_3$-alkyyliä, metoksilla substituoitua $C_1$-$C_2$-alkoksia, $C_1$-$C_4$-alkyylitioa, $C_3$-$C_4$-alkenyylioksia, $C_3$-$C_4$-alkinyylioksia tai $C_1$-$C_3$-alkyylisulfonyyliä, $R_6$ tarkoittaa fluoria, klooria tai bromia.

6. Patenttivaatimuksen 1 mukaisen kaavan (I) mukaiset yhdisteet, t u n n e t t u siitä, että $R_1$ tarkoittaa $NO_2$:ta, $R_2$ tarkoittaa $CF_3$:a, $R_3$ tarkoittaa halogeenia ja $R_4$ vetyä, $R_5$ tarkoittaa $C_1$-$C_3$-alkoksia, $C_1$-$C_3$-alkyylitioa, $C_1$-$C_3$-alkyylisulfoksyyliä tai $C_1$-$C_3$-alkyylisulfonyyliä ja $R_6$ tarkoittaa halogeenia.

7. Patenttivaatimuksen 1 mukaisen kaavan (I) mukaiset yhdisteet, t u n n e t t u siitä, että $R_1$ tarkoittaa $NO_2$:ta, $R_2$ tarkoittaa $CF_3$:a, $R_3$ tarkoittaa klooria ja $R_4$ vetyä, kun taas $R_5$ ja $R_6$ tarkoittavat, toisistaan riippumatta, halogeenia, $C_1$-$C_6$-alkoksia, kloorilla tai bromilla substituoitua $C_1$-$C_3$-alkyyliä, $C_1$-$C_3$-alkoksilla substituoitua $C_1$-$C_3$-alkoksia, $C_1$-$C_6$-alkyylitioa, syklopentyylioksia, sykloheksyylioksia, syklopentyylitioa, sykloheksyylitioa, $C_3$-$C_6$-alkenyylioksia, $C_3$-alkenyylitioa, $C_3$-$C_6$-alkinyylioksia, $C_1$-$C_3$-alkyylisulfoksyyliä, $C_1$-$C_6$-alkyylisulfonyyliä, $C_1$-$C_3$-alkyylisulfonyylioksia tai sykloheksyylisulfonyyliä.

8. Patenttivaatimuksen 1 mukaisen kaavan (I) mukaiset yhdisteet, t u n n e t t u siitä, että $R_1$ tarkoittaa $CF_3$:a, $R_2$ tarkoittaa $NO_2$:ta, $R_3$ tarkoittaa vetyä ja $R_4$ tarkoittaa vetyä, ja $R_5$ ja $R_6$ tarkoittavat, toisistaan riippumatta, $C_1$-$C_3$-alkoksia, $C_1$-$C_3$-alkyylitioa, $C_3$-alkenyylioksia, $C_1$-$C_3$-alkenyylisulfoksyyliä tai $C_1$-$C_3$-alkenyylisulfonyyliä.

9. Patenttivaatimuksen 1 mukaisen kaavan (I) mukaiset yhdisteet, t u n n e t t u siitä, että $R_1$ tarkoittaa $CF_3$:a tai $NO_2$:ta, $R_2$ tarkoittaa $CF_3$:a tai $NO_2$:ta, $R_3$ tarkoittaa vetyä tai klooria, $R_4$ tarkoittaa ryhmää $C(O)R_7$, jossa $R_7$ tarkoittaa $C_1$-$C_3$-alkyyliä, halogeenilla substituoitua

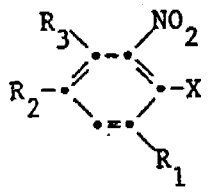
$C_1$-$C_3$-alkyyliä tai $C_1$-$C_3$-alkoksilla substituoitua $C_1$-$C_3$-alkyyliä, $R_5$ tarkoittaa halogeenia, $C_1$-$C_3$-alkoksia tai $C_1$-$C_3$-alkyylitioa ja $R_6$ tarkoittaa klooria.

10. Patenttivaatimuksen 1 mukaisen kaavan (I) mukaiset yhdisteet, t u n n e t t u siitä, että $R_1$ tarkoittaa $NO_2$:ta, $R_2$ tarkoittaa $CF_3$:a, $R_3$ tarkoittaa vetyä ja $R_4$ tarkoittaa vetyä, $R_5$ tarkoittaa halogeenia, $C_1$-$C_6$-alkoksia, kloorilla tai bromilla substituoitua $C_1$-$C_3$-alkyyliä, $C_1$-$C_3$-alkoksilla substituoitua $C_1$-$C_3$-alkoksia, $C_1$-$C_6$-alkyylitioa, syklopentyylioksia, sykloheksyylioksia, syklopentyylitioa, sykloheksyylitioa, $C_3$-$C_6$-alkenyylioksia, $C_3$-$C_6$-alkenyylitioa, $C_3$-$C_6$-alkinyylioksia, $C_1$-$C_3$-alkyylisulfoksyyliä, $C_1$-$C_6$-alkyylisulfonyyliä, $C_1$-$C_3$-alkyylisulfonyylioksia tai sykloheksyylisulfonyyliä, ja $R_6$ tarkoittaa halogeenia.

11. Patenttivaatimuksen 1 mukaisen kaavan (I) mukaiset yhdisteet:
N-(3'-kloori-2',6'dinitro-4'-trifluorimetyylifenyyli)-4-amino-2,6-diklooripyrimidiini;
N-(2',4'-dinitro-6'-trifluorimetyylifenyyli)-4-amino-2,6-diklooripyridiini;
N-(3'-kloori-2',6'-dinitro-4'-trifluorimetyylifenyyli)-4-amino-6-kloori-2-metyylimerkaptopyrimidiini;
N-(2',6'-dinitro-4'-trifluorimetyylifenyyli)-4-amino-6-kloori-2-metyylimerkaptopyridiini;
N-(3'-kloori-2',6'-dinitro-4'-trifluorimetyylifenyyli)-4-amino-6-kloori-2-metoksipyrimidiini
N-(3'-kloori-2',6'-dinitro-4'-trifluorimetyylifenyyli)-4-amino-6-kloori-2-etoksipyrimidiini;
N-(3'-kloori-2',6'-dinitro-4'-trifluorimetyylifenyyli)-4-amino-6-kloori-2-etyylimerkaptopyrimidiini;
N-(3'-kloori-2',6'-dinitro-4'-trifluorimetyylifenyyli)-4-amino-6-kloori-2-sek.butyylimerkaptopyrimidiini

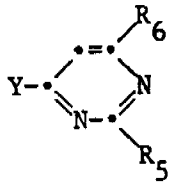
N-(2',6'-dinitro-4'-trifluorimetyylifenyyli)-4-amino-2,6-diklooripyrimidiini;
N-(2',4'-dinitro-6'-trifluorimetyylifenyyli)-4-amino-2-metoksi-6-klooripyrimidiini;
N-(2',4'-dinitro-6'-trifluorimetyylifenyyli)-4-amino-2-etoksi-6-klooripyrimidiini;

12. Menetelmä kaavan (I) mukaisten yhdisteiden valmistamiseksi, t u n n e t t u siitä, että kaavan (II) mukainen yhdiste



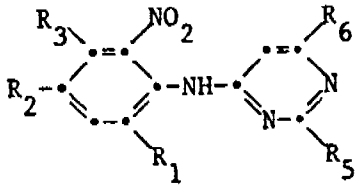
(II)

emäksen läsnäollessa saatetaan reagoimaan kaavan (III) mukaisen pyrimidiinijohdannaisen kanssa



(III)

kaavan (I') mukaiseksi yhdisteeksi



(I')

ja N-asyloidun johdannaisen valmistamiseksi, viimeksi mainittu yhdiste N-asyloidaan kaavan (IV) mukaisen karboksyylihapon reaktiokykyisellä johdannaisella

$R_7COOH$ (IV)

kaavoissa substituentit $R_1$ - $R_7$ tarkoittavat samaa kuin kaavassa (I) ja X ja Y tarkoittavat $NH_2$:ta tai halogeenia, jolloin kun X tarkoittaa halogeenia, Y tarkoittaa $NH_2$:ta ja kun X tarkoittaa $NH_2$:ta Y tarkoittaa halogeenia.

13. Aine mikro-organismien aiheuttaman taudin torjumiseksi tai vähentämiseksi, t u n n e t t u siitä, että se sisältää ainakin yhtenä aktiivisena komponenttina kaavan (I) mukaisen yhdisteen.

14. Menetelmä fytopatogeenisten mikro-organismien viljelykasveihin aiheuttamien tautien torjumiseksi tai vähentämiseksi, t u n n e t t u siitä, että levitetään jotakin patenttivaatimuksessa 1 määriteltyä, kaavan (I) mukaista yhdistettä kasveille tai niiden kasvupaikalle.

Hak.n:o 841301

Viitejulkaisuja - Anförda publikationer

Julkisia suomalaisia patenttihakemuksia: - Offentliga finska patentansökninga

Hakemus-, kuulutus- ja patenttijulkaisuja: - Ansökningspublikationer, utläggnings- och patentskrifter:

FI

CH

DE

DK

FR

GB H 1 388 825 (ICI; C07 D 239/42)

NO

SE

US P 3 906 098 (ICI; A01 N 9/22; palstat 7-10 ja 25-30,

Merkitse hakemusjulkaisun (esim. saksal. Offenlegungsschrift) numeron eteen H ja vastaavasti kuulutus- ja patenttijulkaisun numeron eteen K ja P.

Käännä Vänd

EP

WO

Muita julkaisuja: - Andra publikationer:

TVK

Allekirjoitus