



19



OFICINA ESPAÑOLA DE
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA

11 Número de publicación: **2 367 647**

51 Int. Cl.:

C07D 209/12 (2006.01)	C07D 209/42 (2006.01)
C07D 209/30 (2006.01)	C07D 207/42 (2006.01)
C07D 207/34 (2006.01)	C07D 249/08 (2006.01)
C07D 231/12 (2006.01)	C07D 231/14 (2006.01)
C07D 231/16 (2006.01)	C07D 231/54 (2006.01)
C07D 233/64 (2006.01)	A01N 43/36 (2006.01)
A01N 43/38 (2006.01)	A01N 43/50 (2006.01)
A01N 43/56 (2006.01)	A01N 43/653 (2006.01)
A01N 47/02 (2006.01)	

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

96 Número de solicitud europea: **05703792 .1**

96 Fecha de presentación : **12.01.2005**

97 Número de publicación de la solicitud: **1710234**

97 Fecha de publicación de la solicitud: **11.10.2006**

54 Título: **Compuesto de malononitrilo y uso del mismo.**

30 Prioridad: **16.01.2004 JP 2004-9150**

45 Fecha de publicación de la mención BOPI:
07.11.2011

45 Fecha de la publicación del folleto de la patente:
07.11.2011

73 Titular/es:
SUMITOMO CHEMICAL COMPANY LIMITED
27-1, Shinkawa 2-chome
Chuo-ku, Tokyo 104-8260, JP

72 Inventor/es: **Mitsudera, Hiromasa**

74 Agente: **Ungría López, Javier**

Aviso: En el plazo de nueve meses a contar desde la fecha de publicación en el Boletín europeo de patentes, de la mención de concesión de la patente europea, cualquier persona podrá oponerse ante la Oficina Europea de Patentes a la patente concedida. La oposición deberá formularse por escrito y estar motivada; sólo se considerará como formulada una vez que se haya realizado el pago de la tasa de oposición (art. 99.1 del Convenio sobre concesión de Patentes Europeas).

DESCRIPCIÓN

Compuesto de malononitrilo y uso del mismo.

5 **Campo de la Invención**

La presente invención se refiere a un compuesto de malononitrilo que tiene un anillo de cinco miembros que contiene un átomo de nitrógeno y al uso del mismo.

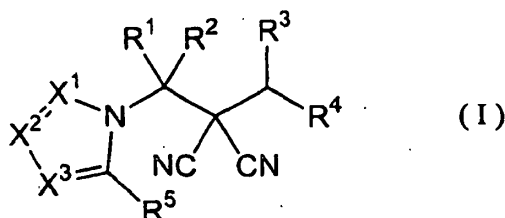
10 **Técnica Anterior**

Se han desarrollado compuestos que tienen actividad plaguicida y se han puesto en uso práctico.

Descripción de la Invención

15 El objeto de la presente invención es proporcionar un compuesto que tiene una actividad excelente contra plagas, una composición plaguicida que comprende dicho compuesto como ingrediente activo y un método para controlar plagas aplicar dicho compuesto.

20 La presente invención es un compuesto de malononitrilo representado por la fórmula (I):



donde, en la fórmula,

25 R¹ representa un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquenoilo C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquinoilo C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno;
 R² representa un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquenoilo C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquinoilo C2-C5 sustituido
 30 opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo ciano o un átomo de hidrógeno;
 cada uno de R³ y R⁴ representa un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquenoilo C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquinoilo C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo cicloalquilo C3-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o al menos un grupo alquilo C1-C3, un grupo
 35 cicloalquenoilo C4-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno, o representa un grupo alcanodiilo C2-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un grupo alquenoildiilo C4-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno donde R³ y R⁴ se acoplan entre sí en sus extremos;
 cada uno de X¹, X² y X³ representa un átomo de nitrógeno o CR⁶;
 40 cada uno de R⁵ y R⁶ representa un átomo de halógeno, un grupo ciano, un grupo nitro, un grupo hidroxilo, un grupo mercapto, un grupo formilo, un grupo SF₅, un grupo carboxilo, un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquenoilo C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquinoilo C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo cicloalquilo C3-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o al
 45 menos un grupo alquilo C1-C3, un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquenoil(C3-C6)oxi sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquinoil(C3-C6)oxi sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquenoil(C3-C5)tio sustituido
 50 opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquinoil(C3-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)sulfinilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)sulfonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C2-C6)carbonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi(C2-C5)carbonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo designado por NR¹⁰R¹¹, un grupo designado por C(=X⁵)NR¹²NR¹³, un grupo designado por (CH₂)_mQ, un grupo
 55 designado por C(=NOR¹⁷)R¹⁸ o un átomo de hidrógeno; en caso de que se añadan dos átomos y cada uno de los dos átomos añadidos se una a uno de R⁵ y R⁶ o dos R⁶; los R⁵ y R⁶, que se unen a los dos átomos

añadidos o los dos R⁶, que se unen a los dos átomos añadidos, se pueden acoplar entre sí en su extremo y representan un grupo alcanodiilo C2-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un grupo alquenodiilo C4-C6, Y en este caso, al menos un grupo metileno que estructura dicho grupo alcanodiilo o dicho grupo alquenodiilo se puede remplazar por un átomo de oxígeno, un átomo de azufre o un grupo NR⁷; R⁷ representa un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno C3-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino C3-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo cicloalquilo C3-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o al menos un grupo alquilo C1-C3, un grupo alquil(C2-C6)carbonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi(C2-C5)carbonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno; cada uno de R¹⁰ y R¹¹ representa un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno C3-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino C3-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo cicloalquilo C3-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o al menos un grupo alquilo C1-C3, un grupo (alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno)alquilo C1-C3, un grupo alquil(C1-C5)sulfinilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)sulfonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C2-C6)carbonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi(C2-C5)carbonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno; cada uno de R¹² y R¹³ representa un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno C3-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino C3-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo cicloalquilo C3-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o al menos un grupo alquilo C1-C3, un grupo designado por (CH₂)_mQ o un átomo de hidrógeno; o representa un grupo alcanodiilo C2-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un grupo alquenodiilo C4-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno donde R¹² y R¹³ se acoplan entre sí en sus extremos; cada uno de R¹⁷ y R¹⁸ representa un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno C3-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino C3-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo cicloalquilo C3-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o al menos un grupo alquilo C1-C3, un grupo designado por (CH₂)_mQ o un átomo de hidrógeno; Q representa un grupo arilo sustituido opcionalmente con al menos un R¹⁴; cada uno de R¹⁴ representa un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo cicloalquilo C3-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o al menos un grupo alquilo C1-C3, un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno(C3-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino(C3-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)sulfinilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)sulfonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C2-C6)carbonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi(C2-C5)carbonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de halógeno; m representa un número entero de 0 a 5; X⁵ representa un átomo de oxígeno o un átomo de azufre.

Dicho compuesto de malononitrilo es referido como "el compuesto de la presente invención" más adelante. La presente invención proporciona adicionalmente una composición plaguicida que comprende la cantidad eficaz del compuesto de la presente invención y un portador, un método para controlar plagas que comprende aplicar una cantidad eficaz del compuesto de la presente invención a las plagas o a un hábitat de las plagas y utilizar el compuesto de la presente invención para el control de la plaga.

En la presente invención, "grupo alcanodiilo" representa un grupo que tiene una valencia libre en dos átomos de carbono diferentes contenidos en una cadena hidrocarbonada saturada, y "grupo alquenodiilo" representa un grupo que tiene una valencia libre en dos átomos de carbono diferentes contenidos en una cadena hidrocarbonada que tiene uno o dos enlaces dobles.

En la presente invención, "grupo fluoroalquilo" representa un grupo alquilo que está sustituido con uno o más átomos de flúor, el término tal como C1-C6 indica el número total de átomos de carbono que está compuesto por cada sustituyente.

En el compuesto de la presente invención:

un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno representado por R¹ y R² incluye, por ejemplo, un grupo alquilo C1-C3 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno tal como un grupo metilo, un grupo etilo, un grupo propilo, un grupo 1-metiletilo (puede ser referido como grupo i-propilo, más adelante), un grupo clorometilo, un grupo fluorometilo, un grupo difluorometilo, un grupo trifluorometilo, un grupo 2,2,2-trifluoroetilo y un grupo 1,1,2,2-tetrafluoroetilo; y el grupo 1,1-dimetiletilo (puede ser referido como grupo t-butilo, más adelante);

un grupo alqueno C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno incluye, por ejemplo, un grupo vinilo, un grupo 2,2-difluorovinilo, un grupo 1,2,2-trifluorovinilo, un grupo 1-propenilo y un grupo 2-propenilo;

un grupo alquino C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno incluye, por ejemplo, un grupo etinilo, un grupo 1-propinilo, un grupo 2-propinilo y un grupo 3,3,3-trifluoro-1-propinilo.

Un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno representado por R² incluye, por ejemplo,

un grupo alquilo C1-C3 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno tal como un grupo metoxi, un grupo etoxi, un grupo 1-metiletoxí, un grupo trifluorometoxi, un grupo difluorometoxi, un grupo trifluoroetoxi y un grupo 1,1,2,2-tetrafluorometoxi; y un grupo butoxi.

Un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno representado por R³ y R⁴ incluye, por ejemplo, un grupo metilo, un grupo etilo, un grupo 1-metiletilo, un grupo 2-metilpropilo, un grupo propilo, un grupo butilo, un grupo 3-metilbutilo, un grupo 2,2-dimetilpropilo, un grupo fluorometilo, un grupo clorometilo, un grupo 2,2-difluoroetilo, un grupo 2,2-dicloroetilo, un grupo 3,3-difluoropropilo, un grupo 3,3-dicloropropilo, un grupo trifluorometilo, un grupo triclorometilo, un grupo 2,2,2-trifluoroetilo, un grupo 2,2,2-tricloroetilo, un grupo 3,3,3-trifluoropropilo, un grupo 3,3,3-tricloropropilo, un grupo 2,2-difluoropropilo, un grupo 3,3-difluorobutilo, un grupo 1-bromo-2,2,2-trifluoroetilo, un grupo 1-cloro-2,2,2-trifluoroetilo, un grupo 1,2,2,2-tetrafluoroetilo, un grupo pentafluoroetilo, 2,2,3,3,3-pentafluoropropilo, un grupo 1,1,2,2-tetrafluoroetilo y un grupo 2,2,3,3-tetrafluoropropilo;

un grupo alqueno C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno incluye, por ejemplo, un grupo vinilo, un grupo alilo, un grupo 1-propenilo, un grupo 3-butenilo, un grupo 2-metil-1-propenilo, un grupo 3-metil-2-butenilo, un grupo 3-pentenilo, un grupo 4-pentenilo, un grupo 3-metil-3-butenilo, un grupo 4-metil-3-pentenilo, un grupo 1-clorovinilo, un grupo 2-clorovinilo, un grupo 1-fluorovinilo, un grupo 2-fluorovinilo, un grupo 2,2-diclorovinilo, un grupo 2,2-dibromovinilo, un grupo 2,2-difluorovinilo, un grupo 1,2,2-trifluorovinilo, un grupo 1-(trifluorometil)vinilo, un grupo 2-cloro-2-propenilo, un grupo 3-cloro-2-propenilo, un grupo 2-fluoro-2-propenilo, un grupo 3-fluoro-2-propenilo, un grupo 3,3-dicloro-2-propenilo, un grupo 3,3-dibromo-2-propenilo, un grupo 3,3-difluoro-2-propenilo, un grupo 2,3,3-trifluoro-2-propenilo, un grupo 2-(trifluorometil)-2-propenilo, un grupo 2,3,3,3-tetrafluoro-1-propenilo, un grupo 1,2,3,3,3-pentafluoro-1-propenilo, un grupo 3,4,4-trifluoro-3-butenilo, un grupo 3,4,4,4-tetrafluoro-2-butenilo, un grupo 2,3,4,4,4-pentafluoro-2-butenilo y un grupo 4,5,5-trifluoro-4-pentenilo; un grupo alquino C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno incluye, por ejemplo, un grupo etinilo, un grupo 1-propinilo, un grupo 2-propinilo, un grupo 1-butinilo, un grupo 3-metil-1-butinilo, un grupo 2-cloro-1-propinilo, un grupo 3-cloro-2-propinilo, un grupo 3,3,3-trifluoro-1-propinilo y un grupo 4,4,4-trifluoro-2-butinilo; un grupo cicloalquilo C3-C5

sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o al menos un grupo alquilo C1-C3 incluye, por ejemplo, un grupo ciclopropilo, un grupo 2,2-diclorociclopropilo, un grupo 2,2-difluorociclopropilo, un grupo 2,2,3,3-tetrafluorociclopropilo, un grupo 2,2-diclorociclobutilo, un grupo 2,2-difluorociclobutilo, un grupo 2,2,3,3-tetrafluorociclobutilo, un grupo ciclobutilo, un grupo ciclopentilo y un grupo ciclohexilo; un grupo cicloalqueno C4-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno incluye, por ejemplo, un grupo 2-fluoro-2-ciclopentenilo.

Un grupo alcanodiilo C2-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno representado uniendo R³ y R⁴ incluye, por ejemplo, un grupo etileno, un grupo propileno, un grupo trimetileno y un grupo tetrametileno;

un grupo alquendiilo C4-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno representado incluye, por ejemplo, un grupo 2-butenileno y un grupo 2-pentenileno.

Un átomo de halógeno representado por R⁵, R⁶ y R¹⁴ incluye un átomo de flúor, un átomo de cloro, un átomo de bromo y un átomo de yodo.

Un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno representado por R⁵, R⁶, R⁷, R¹⁰, R¹¹, R¹², R¹³, R¹⁴, R¹⁷ y R¹⁸ incluye, por ejemplo, un grupo metilo, un grupo etilo, un grupo 1-metiletilo, un grupo 1-etiletilo, un grupo 1,1-dimetiletilo, un grupo n-propilo, un grupo 1-metilpropilo, un grupo 1-etilpropilo, un grupo 1,1-dimetilpropilo, un grupo 2,2-dimetilpropilo, un grupo 1,2-dimetilpropilo, un grupo 1,1,2-trimetilpropilo, un grupo n-butilo, un grupo 1-metilbutilo, un grupo 2-metilbutilo, un grupo 3-metilbutilo, un grupo n-pentilo, un grupo fluorometilo, un grupo clorometilo, un grupo bromometilo, un grupo yodometilo, un grupo difluorometilo, un grupo clorodifluorometilo, un grupo bromodifluorometilo, un grupo trifluorometilo, un grupo diclorometilo, un grupo triclorometilo, un grupo 1-cloroetilo, un grupo 1-bromoetilo, un grupo 1-yodoetilo, un grupo 1-fluoroetilo, un grupo 2-cloroetilo, un grupo 2-bromoetilo, un grupo 2-yodoetilo, un grupo 2-fluoroetilo, un grupo 2,2-difluoroetilo, un grupo 2,2,2-trifluoroetilo, un grupo 2,2,2-tricloroetilo, un grupo pentafluoroetilo, un grupo 2, 2, 2-trifluoro-1-cloroetilo, un

grupo 3-fluoropropilo, un grupo 3-cloropropilo, un grupo 1-fluoro-1-metiletilo, un grupo 1-cloro-1-metiletilo, un grupo 2-cloro-1,1-dimetiletilo, un grupo 2-fluoro-1,1-dimetiletilo, un grupo heptafluoropropilo, un grupo 1,1,2,2,3,3-hexafluoro-n-propilo, un grupo 4-clorobutilo, un grupo 4-fluorobutilo, un grupo 5-cloropentilo y un grupo 5-fluoropentilo.

5 Un grupo alqueno C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno representado por R^5 o R^6 incluye, por ejemplo, un grupo vinilo, un grupo 1-metilvinilo, un grupo 1-propenilo, un grupo 1-metil-1-propenilo, un grupo 2-metil-1-propenilo, un grupo 1,2-dimetil-1-propenilo, un grupo 2-propenilo, un grupo 1-metil-2-propenilo, un grupo 2-metil-2-propenilo, un grupo 1,1-dimetil-2-propenilo, un grupo 1, 2-dimetil-2-propenilo y un grupo 2,2-difluorovinilo, un grupo 2-cloro-2-propenilo, un grupo 2,2-dicloro-2-propenilo, un grupo 2-bromo-2-propenilo, un grupo 2,2-dibromo-2-propenilo, un grupo 2-fluoro-2-propenilo y un grupo 2,2-difluoro-2-propenilo.

15 A grupo alqueno C3-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno representado por R^7 , R^{10} , R^{11} , R^{12} , R^{13} , R^{17} y R^{18} incluye, por ejemplo, un grupo 1-metilvinilo, un grupo 1-propenilo, un grupo 1-metil-1-propenilo, un grupo 2-metil-1-propenilo, un grupo 1,2-dimetil-1-propenilo, un grupo 2-propenilo, un grupo 1-metil-2-propenilo, un grupo 2-metil-2-propenilo, un grupo 1,1-dimetil-2-propenilo, un grupo 1,2-dimetil-2-propenilo, un grupo 2-cloro-2-propenilo, un grupo 2,2-dicloro-2-propenilo, un grupo 2-bromo-2-propenilo, un grupo 2,2-dibromo-2-propenilo, un grupo 2-fluoro-2-propenilo y un grupo 2,2-difluoro-2-propenilo.

20 Un grupo alqueno C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno representado por R^5 y R^6 incluye, por ejemplo, un grupo etinilo, un grupo 1-propinilo, un grupo 2-propinilo y un grupo 3,3,3-trifluoro-1-propinilo.

25 Un grupo alqueno C3-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno representado por R^7 , R^{10} , R^{11} , R^{12} , R^{13} , R^{17} , R^{18} incluye, por ejemplo, un grupo 1-propinilo, un grupo 2-propinilo y un grupo 3,3,3-trifluoro-1-propinilo.

30 Un grupo cicloalquilo C3-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o al menos un grupo alquilo C1-C3 representado por R^5 , R^6 , R^7 , R^{10} , R^{11} , R^{12} , R^{13} , R^{14} , R^{17} y R^{18} incluye, por ejemplo, un grupo ciclopentilo, un grupo 1-metilciclopentilo, un grupo 2,2-diclorociclopentilo, un grupo 2,2-dicloro-1-metilciclopentilo, un grupo 2,2-difluorociclopentilo, un grupo 2,2-difluoro-1-metilciclopentilo, un grupo ciclobutilo, un grupo ciclopentilo y un grupo ciclohexilo.

35 Un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno representado por R^5 , R^6 y R^{14} incluye, por ejemplo, un grupo metoxi, un grupo etoxi, un grupo propoxi, un grupo trifluorometoxi, un grupo bromodifluorometoxi, un grupo difluorometoxi, un grupo clorodifluorometoxi, un grupo pentafluoroetoxi, un grupo trifluoroetoxi y un grupo 1,1,2,2-tetrafluoroetoxi.

40 Un grupo alqueno(C3-C6)oxi sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno representado por R^5 y R^6 incluye, por ejemplo, un grupo 1-propeniloxi, un grupo 2-propeniloxi y un grupo 2,2-difluoro-2-propeniloxi.

Un grupo alqueno(C3-C6)oxi sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno representado por R^5 y R^6 incluye, por ejemplo, un grupo 2-propeniloxi, un grupo 2-buteniloxi y un grupo 3,3,3-trifluoro-1-propeniloxi.

45 Un grupo (alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno)alquilo C1-C3 representado por R^{10} y R^{11} incluye, por ejemplo, un grupo metoximetilo, un grupo etoximetilo, un grupo 1-metoxietilo, un grupo 1-etoxietilo y un grupo trifluorometoximetilo.

50 Un grupo alquil(C1-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno representado por R^5 , R^6 y R^{14} incluye, por ejemplo, un grupo metiltio, un grupo etiltio, un grupo trifluorometiltio, un grupo clorodifluorometiltio, un grupo bromodifluorometiltio, un grupo difluorometiltio, un grupo 2,2,2-trifluoroetiltio, un grupo 1,1,2,2-tetrafluoroetiltio y un grupo pentafluoroetiltio.

55 Un grupo alqueno(C3-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno representado por R^5 , R^6 y R^{14} incluye, por ejemplo, un grupo 1-propeniltio, un grupo 2-propeniltio y un grupo 2,2-difluoro-2-propeniltio.

Un grupo alqueno(C3-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno representado por R^5 , R^6 y R^{14} incluye, por ejemplo, un grupo 2-propeniltio, un grupo 2-buteniltio y un grupo 3,3,3-trifluoro-1-propeniltio.

60 Un grupo alquil(C1-C5)sulfonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno representado por R^5 , R^6 , R^{10} , R^{11} y R^{14} incluye, por ejemplo, un grupo metilsulfonilo y un grupo trifluorometilsulfonilo.

Un grupo alquil(C1-C5)sulfonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno representado por R^5 , R^6 , R^{10} , R^{11} y R^{14} incluye, por ejemplo, un grupo metilsulfonilo y un grupo trifluorometilsulfonilo.

Un grupo alquil(C2-C6)carbonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno representado por R⁵, R⁶, R⁷, R¹⁰, R¹¹ y R¹⁴ incluye, por ejemplo, un grupo acetilo, un grupo propionilo, un grupo 2,2-dimetilpropionilo y un grupo trifluoroacetilo.

- 5 Un grupo alcoxi(C2-C5)carbonilo representado por R⁵, R⁶, R⁷, R¹⁰, R¹¹ y R¹⁴ incluye, por ejemplo, un grupo metoxycarbonilo, un grupo etoxycarbonilo, un grupo 1-metiletoxycarbonilo y un grupo t-butoxycarbonilo.

10 En caso de que los R⁵ y R⁶, que se unen a los dos átomos añadidos o los dos R⁶, que se unen a los dos átomos añadidos, se acoplen entre sí en sus extremos, un grupo alcanodiilo C2-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno representado por R⁵ y R⁶ incluye, por ejemplo, un grupo propileno, un grupo trimetileno y un grupo tetrametileno; un grupo alquendiilo C4-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno incluye, por ejemplo, un grupo 2-butenileno y un grupo 2-pentenileno.

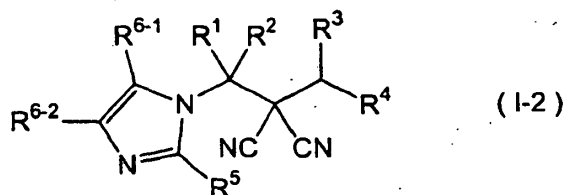
15 Un grupo alcanodiilo C2-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno representado por la combinación de R¹² y R¹³ incluye, por ejemplo, un grupo etileno, un grupo propileno, un grupo trimetileno y un grupo tetrametileno; un grupo alquendiilo C4-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno incluye, por ejemplo, un grupo 2-butenileno y un grupo 2-pentenileno.

Los aspectos del compuesto de la presente invención incluyen, por ejemplo, los siguientes compuestos:

- 20 un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) donde R¹ es un átomo de hidrógeno;
 un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) donde R² es un grupo metilo;
 un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) donde R¹ y R² son átomos de hidrógeno;
 un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) donde R¹ es un átomo de hidrógeno y R² es un grupo metilo;
 25 un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) donde R³ es un átomo de hidrógeno;
 un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) donde R⁴ es un grupo alqueniilo C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno;
 un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) donde R⁴ es un grupo vinilo;
 un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) donde R⁴ es un grupo 2-propenilo;
 30 un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) donde R⁴ es un grupo 2,2-difluorovinilo;
 un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) donde R⁴ es un grupo 1-(trifluorometil)vinilo;
 un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) donde R⁴ es un grupo 3,3-difluoro-2-propenilo;
 un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) donde R⁴ es un grupo 2,3,3-trifluoro-2-propenilo;
 un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) donde R⁴ es un grupo 3,3,3-trifluoro-1-propenilo;
 35 un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) donde R⁴ es un grupo C2-C5 haloalquiniilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno;
 un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) donde R⁴ es un grupo C1-C5 grupo fluoroalquilo;
 un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) donde R⁴ es un grupo fluorometilo;
 un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) donde R⁴ es un grupo 2,2-difluoroetilo;
 40 un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) donde R⁴ es un grupo 2,2,2-trifluoroetilo;
 un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) donde R⁴ es un grupo pentafluoroetilo;
 un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) donde R⁴ es un grupo 3,3,3-trifluoropropilo;
 un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) donde R⁴ es un grupo 2,2,3,3,3-pentafluoropropilo;
 un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) donde R⁴ es un grupo C3-C6 cicloalquilo;
 45 un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) donde R⁴ es un grupo 2,2-diclorociclopropilo;
 un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) donde R⁴ es un grupo ciclopropilo;
 un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) donde R⁴ es un grupo ciclobutilo;
 un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) donde R³ es un átomo de hidrógeno y R⁴ es un grupo vinilo o un grupo 2-propenilo;
 50 un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) donde R³ es un átomo de hidrógeno y R⁴ es un grupo 2,2-difluorovinilo, un grupo 1-(trifluorometil)vinilo, un grupo 3,3-difluoro-2-propenilo, un grupo 2,3,3-trifluoro-2-propenilo o un grupo 3,3,3-trifluoro-1-propenilo;
 un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) donde R³ es un átomo de hidrógeno y R⁴ es un grupo fluorometilo, un grupo 2,2-difluoroetilo, un grupo 2,2,2-trifluoroetilo, un grupo 1,1,2,2,2-pentafluoroetilo, un grupo 3,3,3-trifluoropropilo o un grupo 2,2,3,3,3-pentafluoropropilo;
 55 un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) donde R³ es un átomo de hidrógeno y R⁴ es un grupo ciclopropilo, un grupo ciclobutilo o un grupo 2,2-diclorociclopropilo;
 un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) donde R¹, R² y R³ son átomos de hidrógeno y R⁴ es un grupo vinilo o un grupo 2-propenilo;
 60 un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) donde R¹, R² y R³ son átomos de hidrógeno y R⁴ es un grupo 2,2-difluorovinilo, un grupo 1-(trifluorometil)vinilo, un grupo 3,3-difluoro-2-propenilo, un grupo 2,3,3-trifluoro-2-propenilo o un grupo 3,3,3-trifluoro-1-propenilo;

- un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) donde R^1 y R^3 son átomos de hidrógeno, R^2 es un grupo metilo, y R^4 es un grupo 2,2-difluorovinilo o un grupo 1-(trifluorometil)vinilo, un grupo 3,3-difluoro-2-propenilo, un grupo 2,3,3-trifluoro-2-propenilo o un grupo 3,3,3-trifluoro-1-propenilo;
- 5 un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) donde R^1 , R^2 y R^3 son átomos de hidrógeno y R^4 es un grupo fluorometilo, un grupo 2,2-difluoroetilo, un grupo 2,2,2-trifluoroetilo, un grupo pentafluoroetilo, un grupo 3,3,3-trifluoropropilo o un grupo 2,2,3,3,3-pentafluoropropilo;
- un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) donde R^1 y R^3 son átomos de hidrógeno, R^2 es un grupo metilo, y R^4 es un grupo fluorometilo, un grupo 2,2-difluoroetilo, un grupo 2,2,2-trifluoroetilo, un grupo pentafluoroetilo, un grupo 3,3,3-trifluoropropilo o un grupo 2,2,3,3,3-pentafluoropropilo;
- 10 un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) donde R^1 , R^2 y R^3 son átomos de hidrógeno y R^4 es un grupo ciclopropilo, un grupo ciclobutilo o un grupo 2,2-diclorociclopropilo;
- un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) en el que X^1 , X^2 y X^3 son cada uno CR^6 ;
- un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) en el que X^1 es un átomo de nitrógeno, y X^2 y X^3 son cada uno CR^6 ;
- 15 un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) en el que X^2 es un átomo de nitrógeno, y X^1 y X^3 son cada uno CR^6 ;
- un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) en el que X^3 es un átomo de nitrógeno, y X^1 y X^2 son cada uno CR^6 ;
- un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) en el que X^1 y X^2 son átomos de nitrógeno, y X^3 es CR^6 ;
- 20 un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) en el que X^1 y X^3 son átomos de nitrógeno, y X^2 es CR^6 ;
- un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) en el que X^1 , X^2 y X^3 son átomos de nitrógeno;
- un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) en el que X^3 es CR^6 , y el R^6 es un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno C2-C5 sustituido opcionalmente con uno o varios átomos de halógeno, o un grupo alquino C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un
- 25 átomo de halógeno;
- un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) en el que X^3 es CR^6 , y el R^6 es un grupo etilo;
- un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) en el que X^3 es CR^6 , y el R^6 es un grupo 1-metiletilo;
- un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) en el que X^3 es CR^6 , y el R^6 es un grupo 1,1-dimetiletilo;
- un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) en el que X^3 es CR^6 , y el R^6 es un grupo 2,2-dimetilpropilo;
- 30 un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) en el que X^3 es CR^6 , y el R^6 es un grupo trifluorometilo;
- un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) en el que X^3 es CR^6 , y el R^6 es un grupo pentafluoroetilo;
- un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) en el que X^3 es CR^6 , y el R^6 es un grupo 1-metilvinilo;
- un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) en el que X^3 es CR^6 , y el R^6 es un grupo etinilo;
- un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) en el que X^3 es CR^6 , y el R^6 es un grupo cicloalquilo C3-C6
- 35 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno;
- un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) en el que X^3 es CR^6 , y el R^6 es un grupo ciclopropilo;
- un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) en el que X^3 es CR^6 , y el R^6 es un grupo 1-metilciclopropilo;
- un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) en el que X^3 es CR^6 , y el R^6 es un grupo alcoxi C1-C5 sustituido
- 40 opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno(C3-C6)oxi sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, o un grupo alquino(C3-C6)oxi sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno;
- un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) en el que X^3 es CR^6 , y el R^6 es un grupo propargiloxi;
- un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) en el que X^3 es CR^6 , y el R^6 es un grupo 2-butiloxi;
- un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) en el que X^3 es CR^6 , y el R^6 es un grupo 3-butiloxi;
- 45 un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) en el que X^3 es CR^6 , y el R^6 es un grupo alquil(C1-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)sulfinilo sustituido opcionalmente con un átomo de halógeno(s), o un grupo alquil(C1-5)sulfonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno;
- un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) en el que X^3 es CR^6 , y el R^6 es un grupo metiltio;
- 50 un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) en el que X^3 es CR^6 , y el R^6 es un grupo trifluorometiltio;
- un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) en el que X^3 es CR^6 , y el R^6 es un grupo propargiltio;
- un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) en el que X^3 es CR^6 , y el R^6 es un grupo metilsulfinilo;
- un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) en el que X^3 es CR^6 , y el R^6 es un grupo trifluorometilsulfinilo;
- un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) en el que X^3 es CR^6 , y el R^6 es un grupo metilsulfonilo;
- 55 un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) en el que X^3 es CR^6 , y el R^6 es un grupo ciano;
- un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) en el que X^3 es CR^6 , y el R^6 es un átomo de halógeno;
- un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) en el que X^3 es CR^6 , y el R^6 es un átomo de bromo;
- un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) en el que X^3 es CR^6 , y el R^6 es un átomo de cloro;
- un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) en el que X^3 es CR^6 , y el R^6 es un átomo de flúor;
- 60 un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) en el que X^3 es CR^6 , y el R^6 es un grupo nitro;
- un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) donde R^1 es un átomo de hidrógeno, y R^2 es un grupo alquilo C1-C3 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno;
- un compuesto de malononitrilo de fórmula (I) donde R^1 es un grupo alquilo C1-C3 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno o un átomo de hidrógeno, y R^2 es un grupo

R⁴ es un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un grupo alqueno C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno;
y R⁶⁻¹ es un átomo de halógeno, un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)io sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno;
un compuesto de malononitrilo de fórmula (I-1) donde R¹, R², R³ y R⁵ son átomos de hidrógeno;
R⁴ es un grupo 2,2,2-trifluorometilo o un grupo vinilo;
y R⁶⁻¹ es un átomo de halógeno, un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)io sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno;
un compuesto de malononitrilo representado por la fórmula (I-2):



donde, en la fórmula,

R¹ representa un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno; R² representa un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo ciano o un átomo de hidrógeno; cada uno de R³ y R⁴ representa un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo cicloalquilo C3-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o al menos un grupo alquilo C1-C3, un grupo cicloalqueno C4-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno, o representa un grupo alcano C2-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un grupo alqueno C4-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno donde R³ y R⁴ se acoplan entre sí en sus extremos; cada uno de R⁵, R⁶⁻¹ y R⁶⁻² representa un átomo de halógeno, un grupo ciano, un grupo nitro, un grupo hidroxilo, un grupo mercapto, un grupo formilo, un grupo SF₅, un grupo carboxilo, un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo cicloalquilo C3-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o al menos un grupo alquilo C1-C3, un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno(C3-C6)oxi sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino(C3-C6)oxi sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno(C3-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino(C3-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)sulfinilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C2-C6)carbonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi(C2-C5)carbonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo fenilo o un átomo de hidrógeno; un compuesto de malononitrilo de fórmula (I-2) donde R¹ es un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno; R² es un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo ciano o un átomo de hidrógeno; cada uno de R³ y R⁴ es un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo cicloalquilo C3-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o al menos un grupo alquilo C1-C3, un grupo cicloalqueno C4-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno,

o representa un grupo alcanodiilo C2-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un grupo alquendiilo C4-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno donde R^3 y R^4 se acoplan entre sí en sus extremos;

R^5 es un átomo de hidrógeno;

y cada uno de R^{6-1} y R^{6-2} es un átomo de halógeno, un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno;

un compuesto de malononitrilo de fórmula (I-2) donde R^1 es un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueniilo C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquinilo C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno; R^2 es un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueniilo C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquinilo C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo ciano o un átomo de hidrógeno;

cada uno de R^3 y R^4 es un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueniilo C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquinilo C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo cicloalquilo C3-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o al menos un grupo alquilo C1-C3, un grupo cicloalqueniilo C4-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno; R^5 es un átomo de hidrógeno;

y cada uno de R^{6-1} y R^{6-2} es un átomo de halógeno, un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno;

un compuesto de malononitrilo de fórmula (I-2) donde R^1 , R^2 , R^3 y R^5 son átomos de hidrógeno;

R^4 es un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un grupo alqueniilo C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno;

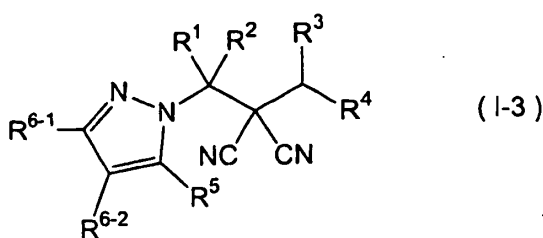
y cada uno de R^{6-1} y R^{6-2} es un átomo de halógeno, un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno;

un compuesto de malononitrilo de fórmula (I-2) donde R^1 , R^2 , R^3 y R^5 son átomos de hidrógeno;

R^4 es un grupo 2,2,2-trifluorometilo o un grupo vinilo;

y cada uno de R^{6-1} y R^{6-2} es un átomo de halógeno, un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno;

un compuesto de malononitrilo representado por la fórmula (I-3):



donde, en la fórmula,

R^1 representa un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueniilo C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquinilo C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno;

R^2 representa un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueniilo C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquinilo C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo ciano o un átomo de hidrógeno;

cada uno de R^3 y R^4 representa un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueniilo C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquinilo C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo cicloalquilo C3-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o al menos un grupo alquilo C1-C3, un grupo cicloalqueniilo C4-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno,

o representa un grupo alcanodiilo C2-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un grupo alquendiilo C4-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno donde R³ y R⁴ se acoplan entre sí en sus extremos;

cada uno de R^5 , R^{6-1} y R^{6-2} representa un átomo de halógeno, un grupo ciano, un grupo nitró, un grupo hidroxilo, un grupo mercapto, un grupo formilo, un grupo SF_5 , un grupo carboxilo, un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo cicloalquilo C3-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o al menos un grupo alquilo C1-C3, un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquenoil(C3-C6)oxi sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquinoil(C3-C6)oxi sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquenoil(C3-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquinoil(C3-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)sulfino sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)sulfonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C2-C6)carbonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi(C2-C5)carbonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo fenilo o un átomo de hidrógeno:

un compuesto de malononitrilo de fórmula (I-3) donde R¹ es un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno;

R² es un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo ciano o un átomo de hidrógeno;

cada uno de R³ y R⁴ es un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquenilo C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquinilo C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo cicloalquilo C3-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o al menos un grupo alquilo C1-C3, un grupo cicloalquenilo C4-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno, o representa un grupo alcanodiilo C2-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un grupo alquenodiilo C4-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno donde R³ y R⁴ se acoplan entre sí en sus extremos;

R^5 es un átomo de hidrógeno;
y cada uno de R^{6-1} y R^{6-2} es un átomo de halógeno, un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno;

o un compuesto de malononitrilo de fórmula (I-3) donde R¹ es un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno; R² es un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo ciano o un átomo de hidrógeno;

R⁵ es un átomo de hidrógeno;
 cada uno de R³ y R⁴ es un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo cicloalquilo C3-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o al menos un grupo alquilo C1-C3, un grupo cicloalqueno C4-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno;
 y cada uno de R⁶⁻¹ y R⁶⁻² un átomo de halógeno, un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno;

un compuesto de malononitrilo de fórmula (I-3) donde R¹, R², R³ y R⁵ son átomos de hidrógeno; R⁴ es un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un grupo alqueno C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno;

y cada uno de R^{6-1} y R^{6-2} es un átomo de halógeno, un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno;

un compuesto de malononitrilo de fórmula (I-3) donde R^1 , R^2 , R^3 y R^5 son átomos de hidrógeno;

R⁴ es un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un grupo alqueno C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno;

R⁶⁻¹ es un átomo de halógeno, un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)io sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno;

y R⁶⁻² es un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno;

un compuesto de malononitrilo de fórmula (I-3) donde R¹, R², R³ y R⁵ son átomos de hidrógeno;

R⁴ es un grupo 2,2,2-trifluorometilo o un grupo vinilo;

y cada uno de R⁶⁻¹ y R⁶⁻² un átomo de halógeno, un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)io sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno;

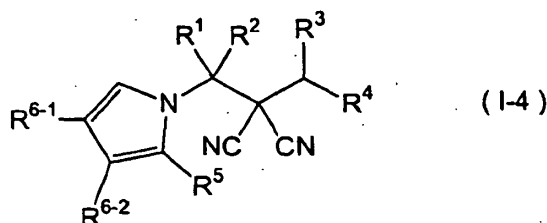
un compuesto de malononitrilo de fórmula (I-3) donde R¹, R², R³ y R⁵ son átomos de hidrógeno;

R⁴ es un grupo 2,2,2-trifluorometilo o un grupo vinilo;

R⁶⁻¹ es un átomo de halógeno, un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)io sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno;

y R⁶⁻² es un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno;

un compuesto de malononitrilo representado por la fórmula (I-4):



donde, en la fórmula,

R¹ representa un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno;

R² representa un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo ciano o un átomo de hidrógeno;

cada uno de R³ y R⁴ representa un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo cicloalquilo C3-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o al menos un grupo alquilo C1-C3, un grupo cicloalqueno C4-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno, o representa un grupo alcanodiilo C2-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un grupo alquendiilo C4-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno donde R³ y R⁴ se acoplan entre sí en sus extremos;

cada uno de R⁵, R⁶⁻¹ y R⁶⁻² representa un átomo de halógeno, un grupo ciano, un grupo nitro, un grupo hidroxilo, un grupo mercapto, un grupo formilo,

un grupo SF₅, un grupo carboxilo, un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo cicloalquilo C3-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o al menos un grupo alquilo C1-C3, un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno(C3-C6)oxi sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C3-C6)io sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)io sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno(C3-C5)io sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C3-C5)io sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)sulfinilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)sulfonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C2-C6)carbonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi(C2-C5)carbonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo fenilo o un átomo de hidrógeno;

un compuesto de malononitrilo de fórmula (I-4) donde R¹ es un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno; R² es un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo

alquenilo C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquinilo C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo ciano o un átomo de hidrógeno; cada uno de R^3 y R^4 es un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquenilo C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquinilo C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo cicloalquilo C3-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o al menos un grupo alquilo C1-C3, un grupo cicloalquenilo C4-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno de un átomo de hidrógeno,

o representa un grupo alcanodiilo C2-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un grupo alquenodiilo C4-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno donde R^3 y R^4 se acoplan entre sí en sus extremos;

R^5 es un átomo de hidrógeno;

y cada uno de R^{6-1} y R^{6-2} es un átomo de halógeno, un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno;

un compuesto de malononitrilo de fórmula (I-4) donde R^1 es un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquenilo C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquinilo C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno;

R^2 es un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquenilo C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquinilo C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo ciano o un átomo de hidrógeno;

cada uno de R^3 y R^4 es un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquenilo C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquinilo C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo cicloalquilo C3-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o al menos un grupo alquilo C1-C3, un grupo cicloalquenilo C4-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno;

R^5 es un átomo de hidrógeno;

y cada uno de R^{6-1} y R^{6-2} es un átomo de halógeno, un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno;

un compuesto de malononitrilo de fórmula (I-4) donde R^1 , R^2 , R^3 y R^5 son átomos de hidrógeno;

R^4 es un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un grupo alquenilo C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno;

y cada uno de R^{6-1} y R^{6-2} es un átomo de halógeno, un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno;

un compuesto de malononitrilo de fórmula (1-4) donde R^1 , R^2 , R^3 y R^5 son átomos de hidrógeno;

R^4 es un grupo 2,2,2-trifluorometilo o un grupo vinilo;

y cada uno de R^{6-1} y R^{6-2} es un átomo de halógeno, un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno;

En la representación de los compuestos de la fórmula (I-1) a la fórmula (1-4) que están representados por R^{6-1} o R^{6-2} , un átomo de halógeno incluye, por ejemplo, un átomo de flúor, un átomo de cloro, y un átomo de bromo;

un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno incluye, por ejemplo, un grupo fluoroalquilo C1-C5 tal como un grupo trifluorometilo, un grupo 2,2,2-trifluoroetilo y similares y un grupo alquilo que está ramificado en la posición 1 tal como un grupo i-propilo, un grupo t-butilo, un grupo 1,1-dimetilpropilo y similares;

un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno incluye, por ejemplo, un grupo metoxi, un grupo etoxi, un grupo 1-metiletoxi y similares;

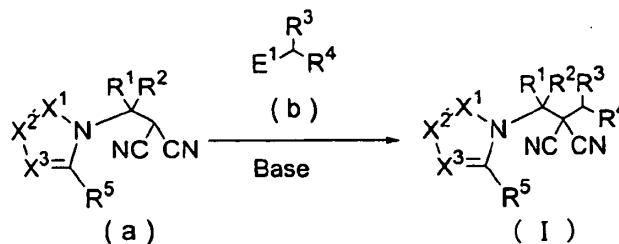
un grupo alquil(C1-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno incluye, por ejemplo, un grupo metiltio, un grupo etiltio, un grupo 1-metiletio y similares.

A continuación, se describe un método para producir el compuesto de la presente invención.

El compuesto de la presente invención se puede producir, por ejemplo, de acuerdo con los siguientes (Método de Producción 1), (Método de Producción 2).

(Método de Producción 1)

Un método para hacer reaccionar el compuesto (a) y el compuesto (b)



donde, en la fórmula,

- 5 R^1 representa un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquenilo C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquinilo C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno;
- 10 R^2 representa un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquenilo C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquinilo C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo ciano o un átomo de hidrógeno;
- 15 cada uno de R^3 y R^4 representa un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquenilo C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquinilo C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo cicloalquilo C3-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o al menos un grupo alquilo C1-C3, un grupo cicloalquenilo C4-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno, o representa un grupo alcanodiilo C2-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un grupo alquenodiilo C4-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno donde R^3 y R^4 se acoplan entre sí en sus extremos;
- 20 cada uno de X^1 , X^2 y X^3 representa un átomo de nitrógeno o CR^6 ; cada uno de R^5 y R^6 representa un átomo de halógeno, un grupo ciano, un grupo nitro, un grupo hidroxilo, un grupo mercapto, un grupo formilo, un grupo SF_5 , un grupo carboxilo, un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquenilo C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquinilo C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno; un grupo cicloalquilo C3-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o al menos un grupo alquilo C1-C3, un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquenil(C3-C6)oxi sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C3-C6)oxi sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquenil(C3-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C3-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)sulfonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C2-C6)carbonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi(C2-C5)carbonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo designado por $NR^{10}R^{11}$, un grupo designado por $C(=X^5)NR^{12}NR^{13}$, un grupo designado por $(CH_2)_mQ$, un grupo designado por $C(=NOR^{17})R^{18}$ o un átomo de hidrógeno; en caso de que se añadan dos átomos y cada uno de los dos átomos añadidos se una a uno de R^5 y R^6 o dos R^6 s; los R^5 y R^6 , que se unen a los dos átomos añadidos o los dos R^6 s, que se unen a los dos átomos añadidos, se pueden acoplar entre sí en su extremo y representan un grupo alcanodiilo C2-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un grupo alquenodiilo C4-C6, Y en este caso, al menos un grupo metileno que estructura dicho grupo alcanodiilo o dicho grupo alquenodiilo se puede remplazar por un átomo de oxígeno, un átomo de azufre o un grupo NR^7 ;
- 30 R^7 representa un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquenilo C3-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquinilo C3-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo cicloalquilo C3-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o al menos un grupo alquilo C1-C3, un grupo alquil(C2-C6)carbonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi(C2-C5)carbonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno;
- 35 cada uno de R^{10} y R^{11} representa un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquenilo C3-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquinilo C3-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo cicloalquilo C3-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o al menos un grupo alquilo C1-C3, un grupo (alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno)alquilo C1-C3, un grupo alquil(C1-C5)sulfonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)sulfonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C2-C6)carbonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi(C2-C5)carbonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de
- 40
- 45
- 50

halógeno o un átomo de hidrógeno; cada uno de R^{12} y R^{13} representa un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno C3-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino C3-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo cicloalquilo C3-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o al menos un grupo alquilo C1-C3, un grupo designado por $(CH_2)_mQ$ o un átomo de hidrógeno; o representa un grupo alcanodiilo C2-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un grupo alqueno C4-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno donde R^{12} y R^{13} se acoplan entre sí en sus extremos; cada uno de R^{11} y R^{18} representa un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno C3-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino C3-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo cicloalquilo C3-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o al menos un grupo alquilo C1-C3, un grupo designado por $(CH_2)_mQ$ o un átomo de hidrógeno; Q representa un grupo arilo sustituido opcionalmente con al menos un R^{14} ; cada uno de los R^{14} representa un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo cicloalquilo C3-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o al menos un grupo alquilo C1-C3, un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquenoil(C3-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquinoil(C3-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)sulfonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C2-C6)carbonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi(C2-C5)carbonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de halógeno; m representa un número entero de 0 a 5; X^5 representa un átomo de oxígeno o un átomo de azufre; E^1 representa un grupo eliminable tal como un átomo de cloro, un átomo de bromo, un átomo de yodo, un grupo metanosulfonilo, un grupo trifluorometanosulfonilo, un grupo toluenosulfonilo, un grupo metanosulfonilo, un grupo trifluorometanosulfonilo, y un grupo toluenosulfonilo y similares.

La reacción se lleva a cabo usualmente en un disolvente y en presencia de una base.

El disolvente utilizado para la reacción incluye, por ejemplo, amidos de ácido tales como N,N-dimetilformamida y similares, éteres tales como éter dietílico, tetrahydrofurano y similares, sulfuros orgánicos tales como dimetilsulfóxido, sulfolano y similares, hidrocarburos halogenados tales como 1,2-dicloroetano, clorobenceno y similares, hidrocarburos aromáticos tales como tolueno, xileno y similares, y mezclas de los mismos.

La base utilizada para la reacción incluye, por ejemplo, bases inorgánicas tales como hidruro de sodio, carbonato de sodio, carbonato de potasio y similares, alcóxidos de metales alcalinos tales como t-butoxido de potasio y similares, amidos de metales alcalinos tales como diisopropilamido de litio y similares, y bases orgánicas tales como 4-(dimetilamino)piridina, 1,4-diazabicyclo[2,2,2]octano, 1,8-diazabicyclo[5,4,0]-7-undeceno y similares.

La cantidad de la base utilizada para la reacción es usualmente de 1 a 10 moles por 1 mol del compuesto (a).

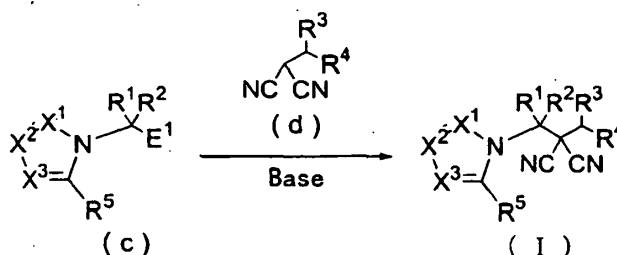
La cantidad del compuesto (b) utilizado para la reacción es usualmente de 1 a 10 moles por 1 mol del compuesto (a).

La temperatura de reacción de la reacción se encuentra usualmente en el intervalo de -20 a 100°C, y el tiempo de reacción se encuentra usualmente en el intervalo de 1 a 24 horas.

Una vez finalizada la reacción, el compuesto de la presente invención representado por la fórmula (I) se puede aislar sometiendo la mezcla de reacción a un post-tratamiento tal como vertido de la mezcla de reacción en agua, extracción con un disolvente orgánico, seguido de la concentración del extracto. El compuesto aislado de la presente invención representado por la fórmula (I) se puede purificar, si se requiere, por medio de cromatografía, recristalización y similares.

(Método de Producción 2)

Un método para hacer reaccionar el compuesto (c) y el compuesto (d)



donde, en la fórmula, E^1 , R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , R^5 , X^1 , X^2 y X^3 tienen el mismo significado que se ha descrito antes.

La reacción se lleva a cabo usualmente en un disolvente y en presencia de una base.

El disolvente utilizado para la reacción incluye, por ejemplo, amidos de ácido tales como N,N-dimetilformamida y similares, éteres tales como éter dietílico, tetrahidrofurano y similares, sulfuros orgánicos tales como dimetilsulfóxido, sulfolano y similares, hidrocarburos halogenados tales como 1,2-dicloroetano, clorobenceno y similares, hidrocarburos aromáticos tales como tolueno, xileno y similares, y mezclas de los mismos.

La base utilizada para la reacción incluye, por ejemplo, bases inorgánicas tales como hidruro de sodio, carbonato de sodio, carbonato de potasio y similares, alcóxidos de metales alcalinos tales como t-butoxido de potasio y similares, amidos de metales alcalinos tales como diisopropilamido de litio y similares, y bases orgánicas tales como 4-dimetilaminopiridina, 1,4-diazabicyclo[2,2,2]octano, 1,8-diazabicyclo[5,4,0]-7-undeceno y similares.

La cantidad de la base utilizada para la reacción es usualmente de 1 a 10 moles por 1 mol del compuesto (c).

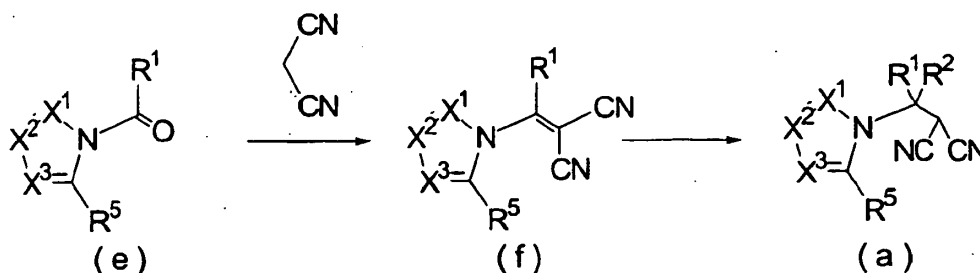
La cantidad del compuesto (d) utilizado para la reacción es usualmente de 1 a 10 moles por 1 mol del compuesto (c).

La temperatura de reacción de la reacción se encuentra usualmente en el intervalo de -20 a 100°C , y el tiempo de reacción se encuentra usualmente en el intervalo de 1 a 24 horas.

Una vez finalizada la reacción, el compuesto de la presente invención representado por la fórmula (I) se puede aislar sometiendo la mezcla de reacción a un post-tratamiento tal como vertido de la mezcla de reacción en agua, extracción con un disolvente orgánico, seguido de la concentración del extracto. El compuesto aislado de la presente invención representado por la fórmula (I) se puede purificar, si se requiere, por medio de cromatografía, recristalización y similares.

A continuación, se describe un método para producir el intermedio como Método de Producción de Referencia.

(Método de Producción de Referencia 1)



donde, en la fórmula, R^1 , R^2 , R^5 , X^1 , X^2 y X^3 tienen el mismo significado que se ha descrito antes.

(Etapa Primera)

El compuesto (f) se puede producir haciendo reaccionar el compuesto (e) con malononitrilo.

La reacción se lleva a cabo usualmente en un disolvente. El disolvente utilizado para la reacción incluye, por ejemplo, amidos de ácido tales como N,N-dimetilformamida y similares, éteres tales como éter dietílico, tetrahidrofurano y similares, hidrocarburos halogenados tales como cloroformo, 1,2-dicloroetano, clorobenceno y similares, hidrocarburos aromáticos tales como tolueno, xileno y similares, alcoholes tales como metanol, etanol, isopropanol y similares y mezclas de los mismos.

La reacción se lleva a cabo, si se requiere, en presencia de una base, y la base utilizada para la reacción incluye, por ejemplo, hidróxido de tetrabutilamonio y similares.

La cantidad de la base utilizada para la reacción es usualmente de 0,01 a 0,5 moles por 1 mol del compuesto (e).

La cantidad del malononitrilo utilizado para la reacción es usualmente de 1 a 10 moles por 1 mol del compuesto (e).

La temperatura de reacción de la reacción se encuentra usualmente en el intervalo de -20 a 100°C, y el tiempo de reacción se encuentra usualmente en el intervalo de 1 a 24 horas.

La reacción puede ser realizada, si se requiere, junto con la eliminación del agua generada por la reacción del sistema de reacción.

Una vez finalizada la reacción, el compuesto (f) se puede aislar sometiendo la mezcla de reacción a un post-tratamiento tal como vertido de la mezcla de reacción en agua, extracción con un disolvente orgánico, seguido de la concentración del extracto. El compuesto aislado (f) se puede purificar, si se requiere, por medio de cromatografía, recristalización y similares.

(Etapa Segunda)

(1) El caso de que R^2 represente un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, o un grupo alqueno sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno.

El compuesto (a) se puede producir sometiendo el compuesto (f) a reacción con un compuesto organometálico.

La reacción se lleva a cabo usualmente en un disolvente.

El disolvente utilizado para la reacción incluye, por ejemplo, éteres tales como éter dietílico, tetrahydrofurano y similares, hidrocarburos aromáticos tales como tolueno, xileno y similares, y mezclas de los mismos.

El compuesto organometálico utilizado para la reacción incluye, por ejemplo, compuestos de magnesio orgánicos tales como yoduro de metilmagnesio, bromuro de etilmagnesio, bromuro de isopropilmagnesio, bromuro de vinilmagnesio, bromuro de etinilmagnesio, dimetilmagnesio y similares, compuestos de litio orgánicos tales como metil litio y similares, compuestos de cinc orgánicos tales como dietilcinc y similares, y compuestos de cobre orgánicos tales como trifluorometilcobre y similares.

La cantidad del compuesto organometálico utilizado para la reacción es usualmente de 1 a 10 moles del compuesto (f).

La reacción se puede llevar a cabo, si se requiere, en presencia de una sal de cobre. La sal de cobre utilizada para la reacción incluye, por ejemplo, yoduro de cobre(I), bromuro de cobre(I) y similares. La cantidad de la sal de cobre utilizada para la reacción es usualmente de 0,05 a 1 mol por 1 mol del compuesto (f).

La temperatura de reacción de la reacción se encuentra usualmente en el intervalo de -20 a 100°C, y el tiempo de reacción se encuentra usualmente en el intervalo de 1 a 24 horas.

Una vez finalizada la reacción, el compuesto (a) se puede aislar sometiendo la mezcla de reacción a un post-tratamiento tal como vertido de la mezcla de reacción en agua, extracción con un disolvente orgánico, seguido de la concentración del extracto. El compuesto aislado (a) se puede purificar, si se requiere, por medio de cromatografía, recristalización y similares.

(2) El caso de que R^2 represente un átomo de hidrógeno.

El compuesto (a) se puede producir sometiendo el compuesto (f) a una reacción de reducción.

La reacción de reducción se lleva a cabo usualmente en un disolvente.

El disolvente utilizado para la reacción incluye, por ejemplo, éteres tales como éter dietílico, tetrahydrofurano y similares, hidrocarburos aromáticos tales como tolueno, xileno y similares, alcoholes tales como metanol, etanol, propanol y similares, agua y mezclas de los mismos.

El agente reductor utilizado para la reacción incluye, por ejemplo, borohidruro de sodio.

La cantidad del agente reductor utilizado para la reacción es usualmente de 0,25 a 2 moles por 1 mol del compuesto (f).

La temperatura de reacción de la reacción se encuentra usualmente en el intervalo de 0 a 50°C, y el tiempo de reacción se encuentra usualmente en el intervalo de un instante a 24 horas.

Una vez finalizada la reacción, el compuesto (a) se puede aislar sometiendo la mezcla de reacción a un post-tratamiento tal como vertido de la mezcla de reacción en agua, extracción con un disolvente orgánico, seguido de la concentración del extracto. El compuesto aislado (a) se puede purificar, si se requiere, por medio de cromatografía, recristalización y similares.

(3) El caso de que R^2 represente un grupo ciano.

El compuesto (a) se puede producir sometiendo el compuesto (f) a reacción con un compuesto de cianuro.

La reacción se lleva a cabo usualmente en un disolvente.

El disolvente utilizado para la reacción incluye, por ejemplo, éteres tales como éter dietílico, tetrahidrofurano y similares, hidrocarburos aromáticos tales como tolueno, xileno y similares, y la mezcla de los mismos.

El compuesto de cianuro utilizado para la reacción incluye, por ejemplo, cianuro de tetrabutilamonio.

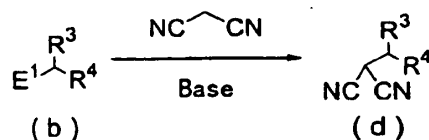
La cantidad del compuesto de cianuro utilizado para la reacción es usualmente de 1 a 10 moles por 1 mol del compuesto (f).

La temperatura de reacción de la reacción se encuentra usualmente en el intervalo de -20 a 100°C, y el tiempo de reacción se encuentra usualmente en el intervalo de 1 a 24 horas.

Una vez finalizada la reacción, el compuesto (a) se puede aislar sometiendo la mezcla de reacción a un post-tratamiento tal como vertido de la mezcla de reacción en agua, extracción con un disolvente orgánico, seguido de la concentración del extracto. El compuesto aislado (a) se puede purificar, si se requiere, por medio de cromatografía, recristalización y similares.

(Método de Producción de Referencia 2)

El compuesto (d) se puede producir sometiendo el compuesto (b) a reacción con malononitrilo.



donde, en la fórmula, E^1 , R^3 y R^4 tienen el mismo significado que se ha descrito antes.

La reacción se lleva a cabo usualmente en un disolvente y en presencia de una base.

El disolvente utilizado para la reacción incluye, por ejemplo, amidos de ácido tales como N,N-dimetilformamida y similares, éteres tales como éter dietílico, tetrahidrofurano y similares, sulfuros orgánicos tales como dimetilsulfóxido, sulfolano y similares, hidrocarburos halogenados tales como 1,2-dicloroetano, clorobenceno y similares, hidrocarburos aromáticos tales como tolueno, xileno y similares y mezclas de los mismos.

La base utilizada para la reacción incluye, por ejemplo, bases inorgánicas tales como hidruro de sodio, carbonato de sodio, carbonato de potasio y similares, alcóxidos de metales alcalinos tales como t-butoxido de potasio y similares, amidos de metales alcalinos tales como diisopropilamido de litio y similares, y bases orgánicas tales como dimetilaminopiridina, 1,4-diazabicyclo[2,2,2]octano, 1,8-diazabicyclo[5,4,0]-7-undeceno y similares.

La cantidad de la base utilizada para la reacción es usualmente de 1 a 10 moles por 1 mol del compuesto (b).

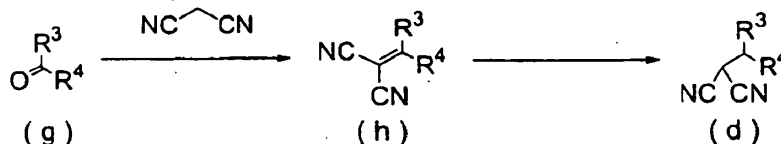
La cantidad de malononitrilo utilizado para la reacción es usualmente de 1 a 10 moles por 1 mol del compuesto (b).

La temperatura de reacción de la reacción se encuentra usualmente en el intervalo de -20 a 100°C, y el tiempo de reacción se encuentra usualmente en el intervalo de 1 a 24 horas.

Una vez finalizada la reacción, el compuesto (d) se puede aislar sometiendo la mezcla de reacción a un post-tratamiento tal como vertido de la mezcla de reacción en agua, extracción con un disolvente orgánico, seguido de la concentración del extracto. El compuesto aislado (d) se puede purificar, si se requiere, por medio de cromatografía, recristalización y similares.

(Método de Producción de Referencia 3)

El compuesto (d) se puede producir también por medio del siguiente método.



donde, en la fórmula, R^3 y R^4 tienen el mismo significado que se ha descrito antes.

(Etapa Primera)

El compuesto (h) se puede producir haciendo reaccionar el compuesto (g) con malononitrilo.

La reacción se lleva a cabo usualmente en un disolvente. El disolvente utilizado para la reacción incluye, por ejemplo, amidos de ácido tales como N,N-dimetilformamida y similares, éteres tales como éter dietílico, tetrahidrofurano y similares, hidrocarburos halogenados tales como cloroformo, 1,2-dicloroetano, clorobenceno y similares, hidrocarburos aromáticos tales como tolueno, xileno y similares, alcoholes tales como metanol, etanol, isopropanol y similares y mezclas de los mismos.

La reacción se lleva a cabo, si se requiere, en presencia de una base. La base utilizada para la reacción incluye, por ejemplo, hidróxido de tetrabutilamonio y similares.

La cantidad de la base utilizada para la reacción es usualmente de 0,01 a 0,5 moles por 1 mol del compuesto (g).

La cantidad de malononitrilo utilizado para la reacción es usualmente de 1 a 10 moles por 1 mol del compuesto (g).

La temperatura de reacción de la reacción se encuentra usualmente en el intervalo de -20 a 100°C , y el tiempo de reacción se encuentra usualmente en el intervalo de 1 a 24 horas.

La reacción puede ser realizada, si se requiere, junto con la eliminación del agua generada por la reacción del sistema de reacción.

Una vez finalizada la reacción, el compuesto (h) se puede aislar sometiendo la mezcla de reacción a un post-tratamiento tal como vertido de la mezcla de reacción en agua, extracción con un disolvente orgánico, seguido de la concentración del extracto. El compuesto aislado (h) se puede purificar, si se requiere, por medio de cromatografía, recristalización y similares.

(Etapa Segunda)

El compuesto (d) se puede producir sometiendo el compuesto (h) a reacción con un agente reductor.

La reacción se lleva a cabo usualmente en un disolvente.

El disolvente utilizado para la reacción incluye, por ejemplo, alcoholes tales como metanol, etanol, alcohol isopropílico, alcohol t-butilico y similares, éteres tales como éter dietílico, tetrahidrofurano y similares, hidrocarburos halogenados tales como 1,2-dicloroetano, clorobenceno y similares, hidrocarburos aromáticos tales como tolueno, xileno y similares, y mezclas de los mismos.

El agente reductor utilizado para la reacción incluye, por ejemplo, borohidruro de sodio, borohidruro de litio, hidruro de diisobutilaluminio y similares.

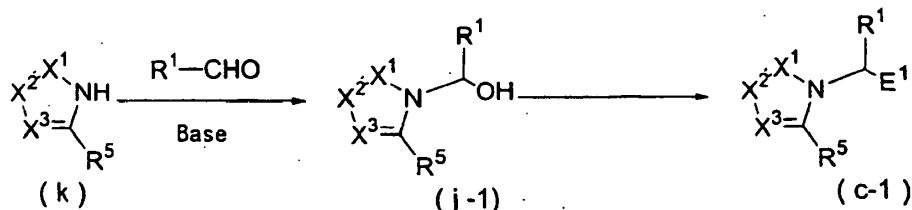
La cantidad del agente reductor utilizado para la reacción, depende de la clase de agente reductor utilizado para la reacción, usualmente de 0,25 a 5 moles por 1 mol del compuesto (h).

La temperatura de reacción de la reacción se encuentra usualmente en el intervalo de -20 a 100°C , y el tiempo de reacción se encuentra usualmente en el intervalo de 1 a 24 horas.

Una vez finalizada la reacción, el compuesto (d) se puede aislar sometiendo la mezcla de reacción a un post-tratamiento tal como vertido de la mezcla de reacción en agua, extracción con un disolvente orgánico, seguido de la concentración del extracto. El compuesto aislado (d) se puede purificar, si se requiere, por medio de cromatografía, recristalización y similares.

(Método de Producción de Referencia 4)

El compuesto (c-1) en el que R^2 es un átomo de hidrógeno en el compuesto (c) se puede producir por medio del método siguiente.



donde, en la fórmula, E^1 , R^1 , R^5 , X^1 , X^2 y X^3 tienen el mismo significado que se ha descrito antes.

(Etapa Primera)

El compuesto (j-1) se puede producir sometiendo el compuesto (k) a reacción con $R^1\text{-CHO}$.

La reacción se lleva a cabo en presencia o ausencia de un disolvente. En caso de que la reacción se lleve a cabo en presencia de un disolvente, el disolvente que se va a utilizar para la reacción incluye, por ejemplo, hidrocarburos aromáticos tales como tolueno, benceno y similares, hidrocarburos halogenados tales como clorobenceno y similares y mezclas de los mismos.

La reacción se lleva a cabo, si se requiere, en presencia de una base. En caso de que la reacción se lleve a cabo en presencia de una base, la base utilizada para la reacción incluye, por ejemplo, bases orgánicas tales como trietilamina, etilidipropilamina y similares, y la cantidad de la base utilizada para la reacción es usualmente de 0,5 a 5 moles por 1 mol del compuesto (k).

La cantidad de $R^1\text{-CHO}$ utilizado para la reacción es usualmente de 1 a 10 moles por 1 mol del compuesto (k).

La temperatura de reacción de la reacción se encuentra usualmente en el intervalo de 50 a 150°C, y el tiempo de reacción se encuentra usualmente en el intervalo de 1 a 24 horas.

Una vez finalizada la reacción, el compuesto (j-1) se puede aislar sometiendo la mezcla de reacción a un post-tratamiento tal como añadiendo un disolvente orgánico incluyendo acetona a la mezcla de reacción, si se requiere, y filtrando la mezcla de reacción, concentrando a continuación el producto filtrado. El compuesto aislado (j-1) se puede purificar, si se requiere, por medio de cromatografía, recristalización y similares.

(Etapa Segunda)

El compuesto (c-1) se puede producir sometiendo el compuesto (j-1) a halogenación, por ejemplo sometiendo el compuesto (j-1) a reacción con un agente halogenante tal como cloruro de tionilo, oxiclورو de fósforo y similares; o a esterificación con sulfonilo por ejemplo sometiendo el compuesto (j-1) a reacción con anhídrido de sulfonilo o cloruro de sulfonilo tal como anhídrido trifluorometanosulfónico, cloruro de metanosulfonilo, cloruro de toluenosulfonilo y similares.

Ente los compuestos (c), (e), (k) y (j-1), el compuesto en el que X^1 , X^2 y X^3 son CR^6 se puede sintetizar de acuerdo con el método descrito por Houben-Weilo, en Methoden der Organischen Chemi, Hetarene I, Teil. 1, págs. 556-779.

Ente los compuestos (c), (e), (k) y (j-1), el compuesto en el que X^1 es un átomo de nitrógeno y X^2 y X^3 son átomos de nitrógeno se puede sintetizar de acuerdo con el método descrito por Houben-Weilo, en Methoden der Organischen Chemi, Hetarene III, Teil. 3, págs. 399-710.

Ente los compuestos (c), (e), (k) y (j-1), el compuesto en el que X^2 es un átomo de nitrógeno y X^1 y X^3 son CR^6 se puede sintetizar de acuerdo con el método descrito por Houben-Weilo, en Methoden der Organischen Chemi, Hetarene III, Teil. 3, págs. 1-192,

Ente los compuestos (c), (e), (k) y (j-1), el compuesto en el que X^1 y X^2 son átomos de nitrógeno y X^3 es CR^6 se puede sintetizar de acuerdo con el método descrito por Houben-Weilo, Methoden der Organischen Chemi, Hetarene III, Teil. 4, págs. 305-389.

5 Ente los compuestos (c), (e), (k) y (j-1), el compuesto en el que X^1 y X^3 son átomos de nitrógeno y X^2 es CR^6 se puede sintetizar de acuerdo con el método descrito por Houben-Weilo, en Methoden der Organischen Chemi, Hetarene III, Teil. 4, págs. 479-586.

10 Ente los compuestos (c), (e), (k) y (j-1), el compuesto en el que X^1 , X^2 y X^3 son átomos de nitrógeno se puede sintetizar de acuerdo con el método descrito por Houben-Weilo, Methoden der Organischen Chemi, Hetarene III, Teil. 4, págs. 664-777.

15 Las plagas contra las que el compuesto de la presente invención tiene actividad de control pueden incluir, por ejemplo, plagas de artrópodos tales como plagas de insectos y plagas de ácaros y similares, y plagas de nematodos. Los ejemplos específicos se enumeran más abajo:

Hemiptera:

20 Delphacidae tales como *Laodelphax striatellus*, *Nilaparvata lugens*, *Sogatella furcifera* y similares,
Deltoccephalidae tales como *Nephotettix cincticeps*, *Nephotettix virescens* y similares,
Aphididae tales como *Aphis gossypii*, *Myzus persicae* y similares,
Pentatomidae tales como *Nezara antennata*, *Riptortus clavatus*, *Eysarcoris lewisi*, *Eysarcoris parvus*,
Plautia stali, Halyomorpha mista y similares,
25 Aleyrodidae tales como *Trialeurodes vaporariorum*, *Bemisia argentifolii* y similares,
Coccidae tal como *Aonidiella aurantii*, *Comstockaspis perniciosus*, *Unaspis citri*, *Ceroplastes rubens*,
Icerya purchasi y similares,
Tingidae,
Psyllidae, y similares;

30 Lepidoptera:

Pyrilidae tales como *Chilo suppressalis*, *Cnaphalocrocis medinalis*, *Notarcha derogata*, *Plodia interpunctella* y similares,
Noctuidae tales como *Spodoptera litura*, *Pseudaletia separata*, *Thoricoplusia* spp., *Heliothis* spp.,
35 Helicoverpa spp. y similares,
Pieridae tales como *Pieris rapae* y similares,
Tortricidae tales como *Adoxophyes* spp., *Grapholita molesta*, *Cydia pomonella* y similares,
Carposinidae tales como *Carposina niponensis* y similares,
Lyonetiidae tales como *Lyonetia* spp. y similares,
40 Lymantriidae tales como *Lymantria* spp., *Euproctis* spp., y similares,
Yponomeutidae tales como *Plutella xylostella* y similares,
Gelechiidae tales como *Pectinophora gossypiella* y similares,
Arctiidae tales como *Hyphantria cunea* y similares,
Tineidae tales como *Tinea translucens*, *Tineola bisselliella* y similares;

45 Diptera:

Calicidae tales como *Culex pipiens pallens*, *Culex tritaeniorhynchus*, *Culex quinquefasciatus* y similares,
Aedes spp. such as *Aedes aegypti*, *Aedes albopictus* y similares,
50 Anopheles spp. such as *Anopheles sinensis* y similares,
Chironomidae,
Muscidae tales como *Musca domestica*, *Muscina stabulans* y similares,
Calliphoridae,
Sarcophagidae,
55 Fanniidae,
Anthomyiidae tales como *Delia platura*, *Delia antiqua* y similares,
Tephritidae,
Drosophilidae,
Psychodidae,
60 Tabanidae,
Simuliidae,
Stomoxiidae,
Agromyzidae, y similares;

Coleoptera:

- 5 Diabrotica spp. tales como *Diabrotica virgifera virgifera*, *Diabrotica undecimpunctata howardi* y similares,
Scarabaeidae tales como *Anomala cuprea*, *Anomala rufocuprea* y similares,
Curculionidae tales como *Sitophilus zeamais*, *Lissorhoptrus oryzophilus*, *Callosobruchus chienensis* y
similares,
Tenebrionidae tales como *Tenebrio molitor*, *Tribolium castaneum* y similares,
10 Chrysomelidae tales como *Oulema oryzae*, *Aulacophora femoralis*, *Phyllotreta striolata*, *Leptinotarsa
decemlineata* y similares,
Anobiidae,
Epilachna spp. such as *Epilachna vigintioctopunctata* y similares,
Lyctidae,
Bostrychidae,
15 Cerambycidae,
Paederus fuscipes;
Blattodea: *Blattella germanica*, *Periplaneta fuliginosa*, *Periplaneta americana*, *Periplaneta brunnea*, *Blatta
orientalis* y similares;
Thysanoptera: *Thrips palmi*, *Thrips tabaci*, *Frankliniella occidentalis*, *Frankliniella intonsa* y similares;
20 Hymenoptera: Formicidae, Vespidae, avispa de betilidos, Tenthredinidae tales como *Athalia japonica*, y
similares;
Orthoptera: Grillotalpidae, Acrididae, y similares;
Aphaniptera: *Ctenocephalides felis*, *Ctenocephalides canis*, *Pulex irritans*, *Xenopsylla cheopis*, y
similares;
25 Anoplura: *Pediculus humanus corporis*, *Phthirus pubis*, *Haematopinus eurysternus*, *Dalmalinia ovis*, y
similares;
Isoptera: *Reticulitermes speratus*, *Coptotermes formosanus*, y similares;

Acarina:

- 30 Tetranychidae tales como *Tetranychus urticae*, *Tetranychus kanzawai*, *Panonychus citri*, *Panonychus
ulmi*, Oligonychus spp., y similares,
Eriophyidae tales como *Aculops pelekassi*, *Aculus schlechtendali*, y similares,
Tarsonemidae tales como *Polyphagotarsonemus latus*, y similares,
35 Tenuipalpidae,
Tuckerellidae,
Ixodidae tales como *Haemaphysalis longicornis*, *Haemaphysalis flava*, *Dermacentor taiwanicus*, *Ixodes
ovatus*, *Ixodes persulcatus*, *Boophilus microplus*, y similares,
Acaridae tales como *Tirophagus putrescentiae*, y similares,
40 Epidermoptidae tales como *Dermatophagoides farinae*, *Dermatophagoides pteronyssinus*, y similares,
Cheyletidae tales como *Cheyletus eruditus*, *Cheyletus malaccensis*, *Cheyletus moorei*, y similares,
Dermanyssidae;
Araneae: *Chiracanthium japonicum*, *Latrodectus hasseltii*, y similares;
Chilopoda: *Thereuonema hilgendorfi*, *Scolopendra subspinipes*, y similares;
Diplopoda: *Oxidus gracilis*, *Nedyopus tambanus*, y similares;
45 Isopoda: *Armadillidium vulgare*, y similares;
Gastropoda: *Limax marginatus*, *Limax flavus*, y similares;
Nematoda: *Pratylenchus coffeae*, *Pratylenchus fallax*, *Heterodera glycines*, *Globodera rostochiensis*,
Meloidogyne hapla, *Meloidogyne incognita*, y similares.
- 50 La composición plaguicida de la presente invención contiene una cantidad eficaz del compuesto de la presente
invención y un portador inerte. Generalmente, es una formulación obtenida mezclando el compuesto de la presente
invención y un portador tal como un portador sólido, un portador líquido y/o un portador gaseoso, y si fuera
necesario, añadiendo un tensioactivo y otro coadyuvante de formulación. La formulación incluye, por ejemplo, un
55 concentrado emulsionable, una disolución oleosa, una formulación en champú, un líquido autosuspendible, un
espolvoreable, un polvo mojable, un gránulo, una formulación en pasta, una microcápsula, una espuma, un aerosol,
una formulación con gas dióxido de carbono, un comprimido y una formulación de resina. Estas formulaciones se
pueden convertir para utilizarlas en un cebo envenenado, una espiral para mosquitos, una pastilla eléctrica para
mosquitos, un agente humeante, un fumigante o una lámina.
- 60 En la composición plaguicida de la presente invención, el compuesto de la presente invención está contenido
usualmente en una cantidad de 0,1% a 95% en peso.

El portador sólido para la formulación incluye, por ejemplo, un polvo fino y un gránulo de arcillas (p. ej., arcilla de caolín, diatomita, bentonita, arcilla Fubasami, arcilla ácida, etc.), óxido de silicio hidratado sintético, talco, cerámica,

otros minerales inorgánicos (p. ej., sericita, cuarzo, azufre, carbón activado, carbonato de calcio, sílice hidratada) o fertilizantes químicos (p. ej., sulfato de amonio, fosfato de amonio, nitrato de amonio, cloruro de amonio, urea).

El portador líquido para la formulación incluye, por ejemplo, hidrocarburos aromáticos o alifáticos (p. ej., xileno, tolueno, alquilnaftaleno, fenilxileto, queroseno, aceite ligero, hexano, ciclohexano), hidrocarburos halogenados (p. ej., clorobenceno, diclorometano, dicloroetano, tricloroetano), alcoholes (p. ej., metanol, etanol, alcohol isopropílico, butanol, hexanol, etilenglicol), éteres (p. ej., éter dietílico, dimetiléter de etilenglicol, monometiléter de dietilenglicol, monoetiléter de dietilenglicol, monometiléter de propilenglicol, tetrahidrofurano, dioxano), ésteres (p. ej., acetato de etilo, acetato de butilo), cetonas (p. ej., acetona, metiletilcetona, metilisobutylcetona, ciclohexanona), nitrilos (p. ej., acetonitrilo, isobutironitrilo), sulfóxidos (p. ej., dimetilsulfóxido), amiduros de ácido (p. ej., N,N-dimetilformamida, N,N-dimetilacetamida), aceites vegetales (p. ej., aceite de soja, aceite de semilla de algodón), aceites esenciales vegetales (p. ej., aceite de naranja, aceite de hisopo, aceite de limón) y agua.

El portador gaseoso para la formulación incluye, por ejemplo, gas butano, clorofluorocarbonos, gas de petróleo licuado (GPL), éter dimetilico, dióxido de carbono y similares.

El tensioactivo incluye, por ejemplo, sales alquilsulfato, sales de ácido alquilsulfónico, sales de ácido alquilarilsulfónico, alquilariléteres y sus derivados polioxietilénicos, éteres de polietilenglicol, ésteres de alcoholes polihidroxilados, y derivados de alcoholes de azúcares.

Los otros coadyuvantes para la formulación incluyen, aglutinantes, dispersantes, estabilizadores y similares, y específicamente por ejemplo, caseína, gelatina, polisacáridos (p. ej., almidón, goma arábiga, derivados de celulosa, ácido algínico), derivados de lignina, bentonita, azúcares, polímeros solubles en agua sintéticos (p. ej., poli(alcohol vinílico), polivinilpirrolidona, poli(ácido acrílico), PAP (fosfato ácido de isopropilo), BHT (2,6-di-t-butyl-4-metilfenol), BHA (una mezcla de 2-t-butyl-4-metoxifenol y 3-t-butyl-4-metoxifenol), aceites vegetales, aceites minerales, ácidos grasos, y ésteres de ácidos grasos.

La base para la formulación de resina incluye, por ejemplo, un copolímero con una base de poli(cloruro de vinilo), poliuretano y similares. A estas bases, si fuera necesario, se les pueden añadir plastificantes tales como los ftalatos (p. ej., ftalato de dimetilo, ftalato de dioctilo), adipatos y estearatos. La formulación de resina se puede obtener amasando el compuesto con la base utilizando una amasadora conocida y formulándola a continuación por medio de moldeo por inyección, moldeo por extrusión, moldeo con prensa y similares, y adicionalmente, si fuera necesario, a través de un procedimiento de moldeo, corte y similares, la formulación de resina se puede convertir en una formulación de resina tal como una tabla, una película, una cinta, una red, una cuerda y similares. Estas formulaciones de resina se pueden convertir, por ejemplo, en un collar para animales, un marca auricular para animales, una formulación en lámina, una cuerda atrayente, una barrita para jardinería.

La base para el cebo envenenado incluye, por ejemplo, polvos de cereales, aceites vegetales, azúcares, y celulosa cristalina, y adicionalmente, si fuera necesario, se pueden añadir a la base antioxidantes tales como dibutilhidroxitolueno y ácido nordihidroguayarático, conservantes tales como ácido deshidroacético, agentes para prevenir la ingesta por error por niños y mascotas tales como polvo de pimienta, y aromas atractivos para las plagas tales como aroma de queso, aroma de cebolla y aceite de cacahuete.

Las plagas se pueden controlar aplicando una cantidad eficaz del compuesto de la presente invención a las plagas directamente y/o a los hábitats de las plagas (p. ej., plantas, animales, suelo). Usualmente la formulación de la composición plaguicida de la presente invención se utiliza como el método para controlar plagas de la presente invención.

Cuando la composición plaguicida de la presente invención se utiliza para el control de plagas en agricultura y silvicultura, la cantidad de aplicación es usualmente de 1 a 10.000 g/ha, preferiblemente de 10 a 1.000 g/ha, como ingrediente activo. Los concentrados emulsionables, los polvos mojables, los líquidos autosuspendibles, y las formulaciones microencapsuladas se aplican usualmente después de la dilución con agua para que tengan una concentración de ingrediente activo de 1 a 10.000 ppm, mientras que los espolvoreables y los gránulos se aplican usualmente tal cual. Estas formulaciones se pueden rociar directamente a la planta que se vaya a proteger de las plagas. Las plagas que viven en el suelo se pueden controlar tratando el suelo con estas formulaciones, y las formulaciones también se pueden aplicar para tratar semilleros antes de plantar las plantas o para tratar los hoyos de plantación o los pies de plantas en la plantación. Además, la formulación en lámina de la composición plaguicida de la presente invención se puede aplicar por medio de un método tal como enrollándola alrededor de las plantas, extendiéndola en la proximidad de las plantas y colocándola sobre la superficie del suelo en el pie de la planta.

Cuando la composición plaguicida de la presente invención se utiliza para el control de epidemias, la cantidad de aplicación es usualmente de 0,001 a 10 mg/m³ como ingrediente activo en el caso de la aplicación en espacios abiertos, y de 0,001 a 100 mg/m² como ingrediente activo en el caso de la aplicación a una superficie plana. Los concentrados emulsionables, los polvos mojables, y las formulaciones microencapsuladas se aplican usualmente

después de su dilución con agua para que tengan una concentración de ingrediente activo de 0,01 a 10.000 ppm, mientras que las soluciones, los aerosoles, los agentes humeantes y los cebos envenenados se aplican usualmente tal cual.

Cuando la composición plaguicida de la presente invención se utiliza para el control de un parásito que vive fuera de ganado tal como vacas, caballos, cerdos, ovejas, cabras y pollos, y animales pequeños tales como perros, gatos, ratas y ratones, la composición plaguicida se puede aplicar a dichos animales por medio de un método conocido en veterinaria. Específicamente, para el control sistémico, la composición plaguicida se administra por medio de, por ejemplo, un comprimido, una mezcla con alimento, un supositorio o un inyectable (p. ej., intramuscular, subcutáneo, intravenoso, intraperitoneal), y para el control no sistémico, se aplica por medio de un método tal como rociando una disolución oleosa o una formulación líquida acuosa, llevando a cabo el tratamiento de vertido o el tratamiento de aplicación puntual externa sobre la piel, lavando dicho animal con una formulación en champú, sujetando la formulación de resina sobre dicho animal en forma de collar o marca auricular, y similares. Cuando el compuesto de la presente invención se administra a un animal, su cantidad se encuentra usualmente en el intervalo de 0,1 a 1.000 mg/kg de peso corporal del animal.

La composición plaguicida de la presente invención también se puede utilizar mezclada o combinada con otros insecticidas, nematocidas, acaricidas, fungicidas, herbicidas, reguladores del crecimiento vegetal, sinergistas, fertilizantes, acondicionadores del suelo, alimentos para animales, y similares.

Los ingredientes activos de tales otros insecticidas y acaricidas incluyen, por ejemplo, compuestos piretroides tales como aletrina, tetrametrina, praletrina, fenotrina, resmetrina, cifenotrina, permetrina, cipermetrina, alfa-cipermetrina, zeta-cipermetrina, deltametrina, tralometrina, ciflutrina, beta-ciflutrina, cihalotrina, lambda-cihalotrina, flumetrina, imiprotrina, etofenprox, fenvalerato, esfenvalerato, fenpropatrina, silafluofeno, bifentrina, transflutrina, flucitrinato, tau-fluvalinato, acrinatrina y teflutrina; compuestos organofosforados tales como diclorvos, fenitrotión, cianofos, profenofos, sulprofos, fentoato, isoxatión, tetraclorvinfos, fentiión, clorpirifos, diazinon, acefato, terbufos, forato, cloretoxifos, fostiazato, etoprofos, cadusafos y metidatión; compuestos de carbamato tales como propoxur, carbarilo, metoxadiazona, fenobucarb, metomilo, tiodicarb, alanicarb, benfuracarb, oxamilo, aldicarb y metiocarb; compuestos de benzoilfenilurea tales como lufenurón, clorfluazurón, hexaflumurón, diflubenzurón, triflumurón, teflubenzurón, flufenoxurón, fluazurón, novalurón y triazurón; sustancias de tipo hormona juvenil tales como piriproxi-feno, metopreno, hidropreno y fenoxicarb; compuestos neonicotinoides tales como acetamiprid, nitenpiram, tiacloprid, tiametoxam y dinotefurán; compuestos de N-fenilpirazol tales como acetoprol y etiprol; compuestos de benzoilhidrazina tales como tebufenozida, cromafenozida, metoxifenozida y halofenozida; diafentiurón; pimetozina; flonicamid; triazamato; buprofezina; espinosad; benzoato de emamectina; clorfenapir; indoxacarb MP; piridalilo; ciromazina; fenpiroximato; tebufenpirad; tolfenpirad; piridabeno; pirimidifeno; fluacripirim; etoxazol; fenazaquin; acequinocilo; hexitiazox; clofentezina; óxido de fenbutatina; dicofol, propargita; abamectina; milbemectina; amitraz; cartap; bensultap; tiociclam; endosulfan; espiroclifeno; espiromesifeno; y azadiractina.

Los ingredientes activos de tales otros fungicidas incluyen, por ejemplo, compuestos de estrobilurina tales como azoxiestrobina; compuestos organofosforados tales como tolclofos-metilo; compuestos de azol tales como triflumizol, pefurazoato y difenoconazol; ftalida; flutolanil; validamicina; probenazol; diclomezina; pencicurón; dazomet; kasugamicina; IBP; piroquilon; ácido oxolínico; tricloclazol; ferimzona; mepronil; EDDP; isoprotilano; carpropamid; diclocimet; furametpir; fludioxonil; procimidona; y dietofencarb.

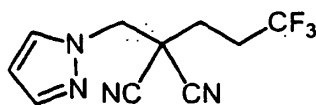
EJEMPLOS

La presente invención se imagina con más detalle por medio de los ejemplos de producción, los ejemplos de formulación, los ejemplos de ensayo y similares, pero no debe estar limitada por los mismos.

En primer lugar, se ilustran los ejemplos de producción del compuesto de la presente invención.

Ejemplo de Producción 1

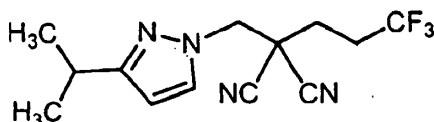
Se disolvieron 0,76 g de hidrocloreto de 1-(clorometil)-1H-pirazol y 0,81 g de (3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo en 10 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 1,38 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo con agitación, seguido de agitación a temperatura ambiente durante 5 horas. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con éter metil-t-butílico (puede ser referido como MTBE, más adelante). La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se recrystalizó en hexano-acetato de etilo para obtener 0,36 g de (1H-pirazol-1-ilmetil)(3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (1), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.



RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 2,21 - 2,27 (2H, m), 2,47 - 2,59 (2H, m), 4,76 (2H, s), 6,42 (1H, t), 7,63 - 7,64 (2H, m)

5 Ejemplo de Producción 2

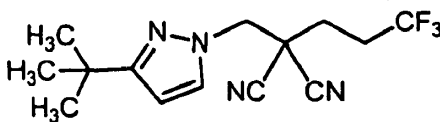
Se disolvieron 0,77 g de hidrocloreto 3-i-propil-1-(clorometil)-1H-pirazol y 0,64 g de (3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo en 8 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 1,54 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo con agitación, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con MTBE. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice, y a continuación se recristalizó en hexano-acetato de etilo para obtener 0,42 g de [(3-i-propil-1H-pirazol-1-il)metil](3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (2), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.



RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 1,24 (6H, d), 2,20 - 2,24 (2H, m), 2,47 - 2,58 (2H, m), 2,93 - 3,00 (1H, m), 9,34 (2H, s), 6,20 (1H, d), 7,50 (1H, d)

Ejemplo de Producción 3

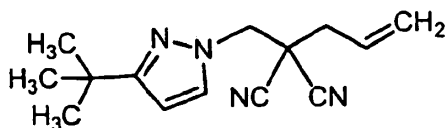
Se disolvieron 1,16 g de hidrocloreto de 3-t-butil-1-(clorometil)-1H-pirazol y 0,98 g de (3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo en 17 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 1,54 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo con agitación, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con MTBE. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 0,63 g de [(3-t-butil-1H-pirazol-1-il)metil](3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (3), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.



RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 1,28 (9H, s), 2,19 - 2,24 (2H, m), 2,48 - 2,57 (2H, m), 4,64 (2H, s), 6,23 (1H, d), 7,49 (1H, d)

Ejemplo de Producción 4

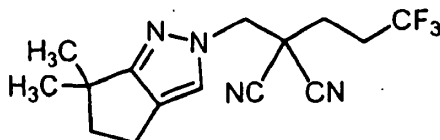
Se disolvieron 1,24 g de hidrocloreto de 3-t-butil-1-(clorometil)-1H-pirazol y 0,63 g de alilmalononitrilo en 18 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 1,63 g de carbonato de potasio a la disolución, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con MTBE. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 0,38 g de alil-[(3-t-butil-1H-pirazol-1-il)metil]malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (4), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.



RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 1,30 (9H, s), 2,69 (2H, dd), 4,58 (2H, s), 5,45 - 5,51 (2H, m), 5,88 - 5,99 (1H, m), 6,21 (1H, d), 7,98 (1H, d)

Ejemplo de Producción 5

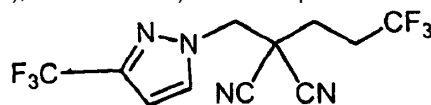
Se disolvieron 0,58 g de hidrocloreto de 2-(clorometil)-6,6-dimetil-2,4,5,6-tetrahidrociclopenta[c]pirazol y 0,43 g de (3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo en 8 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 0,73 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo con agitación, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con MTBE. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 0,27 g de [(6,6-dimetil-5,6-dihidro-ciclopenta[c]pirazol-2(4H)-il)metil](3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (5), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.



RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 1,24 (6H, s), 2,15 - 2,23 (4H, m), 2,42 - 2,65 (4H, m), 5,97 (2H, s), 7,15 (1H, s)

Ejemplo de Producción 6

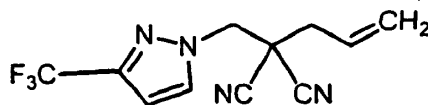
Se disolvieron 1,44 g de 1-(clorometil)-3-(trifluorometil)-1H-pirazol y 1,30 g de (3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo en 16 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 2,21 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo con agitación, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con MTBE. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se recrystalizó en hexano-acetato de etilo para obtener 0,87 g de {[3-(trifluorometil)-1H-pirazol-1-il]metil}(3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (6), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.



RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 2,25 - 2,29 (2H, m), 2,50 - 2,61 (2H, m), 4,75 (2H, s), 6,70 (1H, s), 7,72 (1H, s)

Ejemplo de Producción 7

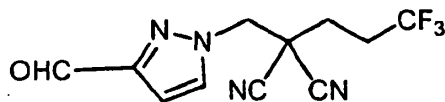
Se disolvieron 1,33 g de 1-(clorometil)-3-(trifluorometil)-1H-pirazol y 0,76 g de alilmalononitrilo en 21 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 1,99 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo con agitación, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con MTBE. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se recrystalizó en hexano-acetato de etilo para obtener 0,57 g de alil[[3-(trifluorometil)-1H-pirazol-1-il]metil]malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (7), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.



RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 2,74 (2H, d), 4,69 (2H, s), 5,49 - 5,54 (2H, m), 5,87 - 5,98 (1H, m), 6,67 (1H, s), 7,71 (1H, s)

Ejemplo de Producción 8

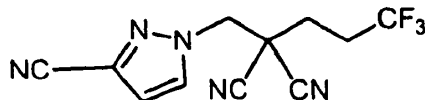
Se disolvieron 1,57 g de hidrocloreto de 1-clorometil-3-formilpirazol y 1,52 g de (3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo en 30 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 2,76 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo con agitación, seguido de agitación a temperatura ambiente durante 5 horas. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con MTBE. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 0,05 g de [(3-formil-1H-pirazol-1-il)metil](3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (8), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.



RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 2,28 - 2,34 (2H, m), 2,52 - 2,63 (2H, m), 4,77 (2H, s), 6,93 (1H, s), 7,70 (1H, s), 9,99 (1H, s)

Ejemplo de Producción 9

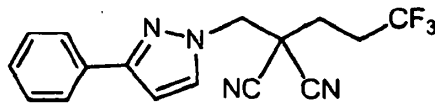
Se disolvieron 1,00 g de 1-(clorometil)-3-ciano-1H-pirazol y 1,15 g de (3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo en 21 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 1,96 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo con agitación, seguido de agitación a temperatura ambiente durante 5 horas. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con MTBE. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 1,11 g de [(3-ciano-1H-pirazol-1-il)metil](3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (9), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.



RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 2,23 - 2,27 (2H, m), 2,49 - 2,60 (2H, m), 4,75 (2H, s), 7,60 (1H, s), 7,66 (1H, s)

Ejemplo de Producción 10

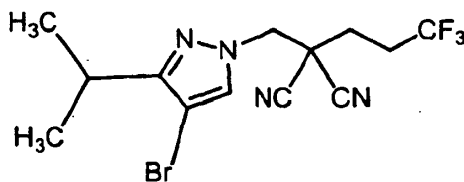
Se disolvieron 2,01 g de hidrocloreto de 1-(clorometil)-3-fenil-1H-pirazol y 1,42 g de (3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo en 27 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 2,43 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo con agitación, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con MTBE. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 0,66 g de [(3-fenil-1H-pirazol-1-il)metil](3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (10), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.



RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 2,33-2,37 (2H, m), 2,53 - 2,62 (2H, m), 4,73 (2H, s), 6,70 (1H, d), 7,33 - 7,44 (3H, m), 7,64 (1H, d), 7,78 - 7,80 (2H, m)

Ejemplo de Producción 11

Se disolvieron 1,38 g de hidrocloreto de 4-bromo-3-i-propil-1-(clorometil)-1H-pirazol y 0,81 g de (3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo en 15 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 1,38 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo con agitación, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con MTBE. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 0,91 g de [(4-bromo-3-i-propil-1H-pirazol-1-il)metil](3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (11), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.

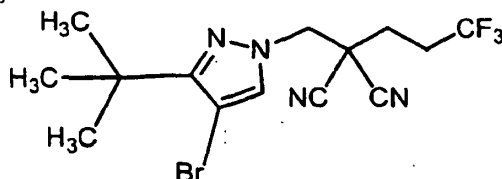


RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 1,25 (6H, d), 2,20 - 2,29 (2H, m), 2,51 - 2,58 (2H, m), 3,00 - 3,06 (1H, m), 4,60 (2H, s), 7,56 (1H, s)

Ejemplo de Producción 12

Se disolvieron 1,85 g de hidrocloreto de 4-bromo-3-t-butil-1-(clorometil)-1H-pirazol y 1,18 g de (3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo en 21 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 2,02 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo con agitación, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con MTBE. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a

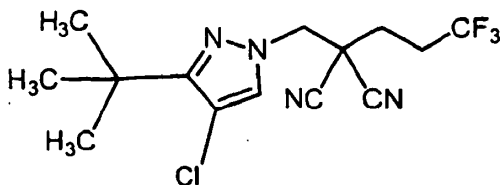
cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 1,91 g de [(4-bromo-3-t-butil-1H-pirazol-1-il)metil](3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (12), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.



5 RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 1,38 (9H, s), 2,20 - 2,23 (2H, m), 2,49 - 2,61 (2H, m), 4,57 (2H, s), 7,57 (1H, s)

Ejemplo de Producción 13

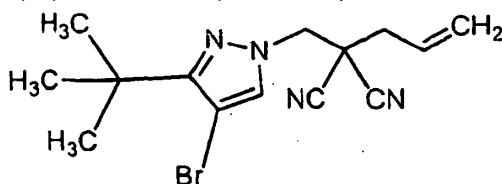
10 Se disolvieron 0,98 g de hidrocloreto de 4-cloro-3-t-butil-1-(clorometil)-1H-pirazol y 0,65 g de (3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo en 12 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 1,11 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo con agitación, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con MTBE. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 0,40 g de [(4-cloro-3-t-butil-1H-pirazol-1-il)metil](3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (13), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.



RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 1,36 (9H, s), 2,20 - 2,24 (2H, m), 2,49 - 2,61 (2H, m), 4,56 (2H, s), 7,54 (1H, s)

20 Ejemplo de Producción 14

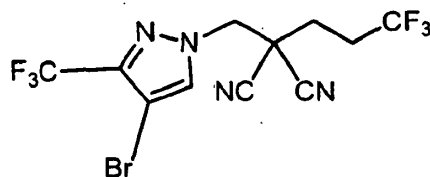
25 Se disolvieron 1,84 g de hidrocloreto de 4-bromo-3-t-butil-1-(clorometil)-1H-pirazol y 0,77 g de alilmalononitrilo en 21 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 2,02 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo con agitación, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con MTBE. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 0,84 g de alil[(4-bromo-3-t-butil-1H-pirazol-1-il)metil] malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (14), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.



30 RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 1,40 (9H, s), 2,71 (2H, d), 4,51 (2H, s), 5,43 - 5,52 (2H, m), 5,87 - 5,98 (1H, m), 7,56 (1H, s)

Ejemplo de Producción 15

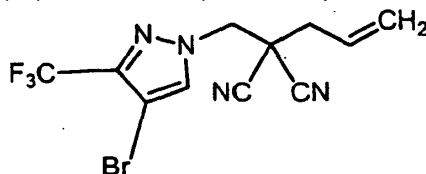
35 Se disolvieron 1,67 g de 4-bromo-1-(clorometil)-3-trifluorometil-1H-pirazol y 1,03 g de (3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo en 18 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 1,74 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo con agitación, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con MTBE. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 0,97 g de [(4-bromo-3-trifluorometil-1H-pirazol-1-il)metil](3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (15), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.



RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 2,25 - 2,30 (2H, m), 2,49 - 2,62 (2H, m), 4,70 (2H, s), 7,77 (1H, s)

Ejemplo de Producción 16

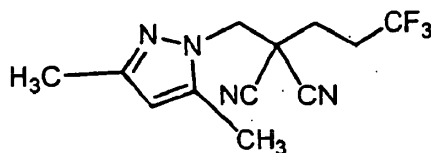
Se disolvieron 1,67 g de 4-bromo-1-(clorometil)-3-(trifluorometil)-1H-pirazol y 0,67 g de alilmalononitrilo en 18 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 1,74 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo con agitación, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con MTBE. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 0,90 g de alil[[4-bromo-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-1-il]metil]}malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (16), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.



RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 2,75 (2H, d), 4,63 (2H, s), 5,50 - 5,55 (2H, m), 5,86 - 5,97 (1H, m), 7,76 (1H, s)

Ejemplo de Producción 17

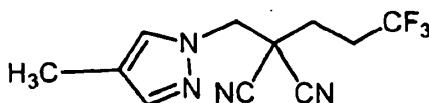
Se disolvieron 0,93 g de hidrocloreto de 1-(clorometil)-3,5-dimetil-1H-pirazol y 0,81 g de (3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo en 15 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 1,38 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo con agitación, seguido de agitación a temperatura ambiente durante 4 horas. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con MTBE. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 0,45 g del compuesto (referido como el compuesto de la presente invención (17), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.



RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 2,23 (3H, s), 2,37 (3H, s), 2,41 - 2,61 (4H, m), 4,52 (2H, s), 5,91 (1H, s)

Ejemplo de Producción 18

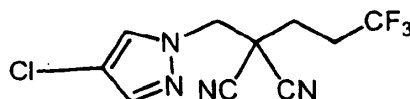
Se disolvieron 1,46 g de hidrocloreto de 1-(clorometil)-4-metil-1H-pirazol y 1,42 g de (3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo en 30 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 2,40 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo con agitación, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con MTBE. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 0,83 g del compuesto (referido como el compuesto de la presente invención (18), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.



RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 2,11 (3H, s), 2,20 - 2,24 (2H, m), 2,46 - 2,58 (2H, m), 4,64 (2H, s), 7,38 (1H, s), 7,42 (1H, s)

Ejemplo de Producción 19

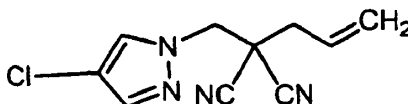
Se disolvieron 1,44 g de hidrocloreto de 4-cloro-1-(clorometil)-1H-pirazol y 1,56 g de (3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo en 30 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 2,76 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo con agitación, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con MTBE. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 1,73 g de [(4-cloro-1H-pirazol-1-il)metil](3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (19), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.



RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 2,17 - 2,31 (2H, m), 2,46 - 2,60 (2H, m), 4,64 (2H, s), 7,57 (1H, s), 7,63 (1H, s)

Ejemplo de Producción 20

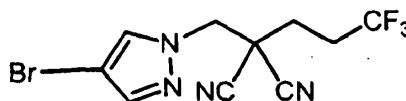
Se disolvieron 1,43 g de hidrocloreto de 4-cloro-1-(clorometil)-1H-pirazol y 1,01 g de alilmalononitrilo en 30 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 2,76 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo con agitación, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con MTBE. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 1,22 g de alil[(4-cloro-1H-pirazol-1-il)metil]malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (20), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.



RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 2,72 (2H, d), 4,58 (2H, s), 5,46 - 5,52 (2H, m), 5,87 - 5,98 (1H, m), 7,57 (1H, s), 7,63 (1H, s)

Ejemplo de Producción 21

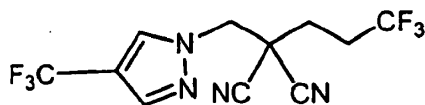
Se disolvieron 3,27 g de hidrocloreto de 4-bromo-1-(clorometil)-1H-pirazol y 2,29 g de (3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo en 28 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 3,89 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo con agitación, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con MTBE. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 3,28 g de [(4-bromo-1H-pirazol-1-il)metil](3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (21), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.



RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 2,17 - 2,27 (2H, m), 2,48 - 2,60 (2H, m), 4,66 (2H, s), 7,60 (1H, s), 7,65 (1H, s)

Ejemplo de Producción 22

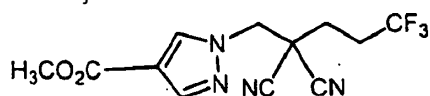
Se disolvieron 0,60 g de 1-(clorometil)-4-(trifluorometil)-1H-pirazol y 0,54 g de (3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo en 10 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 0,99 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo con agitación, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con MTBE. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice y a continuación se recrystalizó en hexano-cloroformo para obtener 0,19 g de [(4-(trifluorometil)-1H-pirazol-1-il)metil](3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (22), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.



RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 2,28 - 2,32 (2H, m), 2,53 - 2,57 (2H, m), 4,71 (2H, s), 7,85 (1H, s), 7,93 (1H, s)

Ejemplo de Producción 23

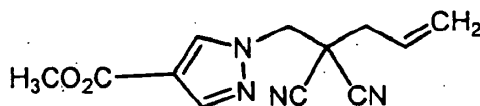
Se disolvieron 0,80 g de 1-(clorometil)-4-metoxycarbonil-1H-pirazol y 0,75 g de (3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo en 15 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 1,27 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo con agitación, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con MTBE. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice, y después se recrystalizó en hexano-cloroformo para obtener 0,48 g de [[4-(metoxycarbonil)-1H-pirazol-1-il]metil](3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (23), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.



RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 2,27 - 2,32 (2H, m), 2,47 - 2,62 (2H, m), 3,86 (3H, s), 4,71 (2H, s), 8,03 (1H, s), 8,12 (1H, s)

Ejemplo de Producción 24

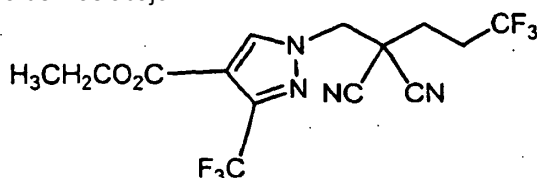
Se disolvieron 0,79 g de 1-(clorometil)-4-metoxycarbonil-1H-pirazol y 0,49 g de alilmalononitrilo en 15 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 1,26 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo con agitación, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con MTBE. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice, y a continuación se recrystalizó en hexano-cloroformo para obtener 0,50 g de alil[[4-(metoxycarbonil)-1H-pirazol-1-il]metil]malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (24), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.



RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 2,76 (2H, d), 3,85 (3H, s), 4,64 (2H, s), 5,47 - 5,54 (2H, m), 5,85 - 5,99 (1H, m), 8,02 (1H, s), 8,11 (1H, s)

Ejemplo de Producción 25

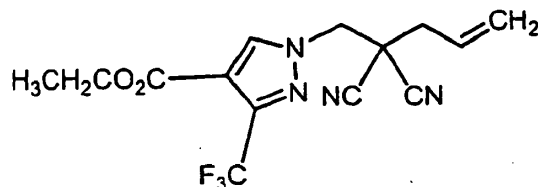
Se disolvieron 1,13 g de 1-(clorometil)-3-(trifluorometil)-4-etoxycarbonil-1H-pirazol y 0,71 g de (3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo en 13 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 1,22 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo con agitación, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con MTBE. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 0,30 g de [[4-etoxycarbonil-3-(trifluorometil)-pirazol-1-il]metil](3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (25), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.



RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 1,37 (3H, t), 2,30 - 2,34 (2H, m), 2,52 - 2,63 (2H, m), 4,35 (2H, c), 4,73 (2H, s), 8,24 (1H, s)

Ejemplo de Producción 26

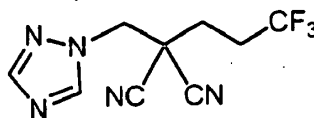
Se disolvieron 1,25 g de 1-(clorometil)-3-(trifluorometil)-4-etoxycarbonil-1H-pirazol y 0,52 g de alilmalononitrilo en 15 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 1,35 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo con agitación, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con MTBE. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice, y a continuación se recrystalizó en hexano para obtener 0,14 g de alil[4-etoxycarbonil-3-(trifluorometil)-pirazol-1H-il]metil]malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (26), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.



RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 1,36 (3H, t), 2,80 (2H, d), 4,30 (2H, c), 4,68 (2H, s), 5,46 - 5,56 (2H, m), 5,88 - 5,98 (1H, m), 8,24 (1H, s)

Ejemplo de Producción 27

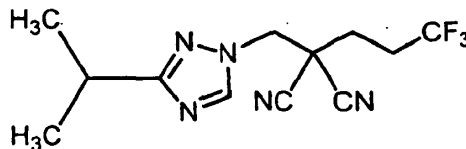
Se disolvieron 0,77 g de hidrocloreto de 1-(clorometil)-1H-1,2,4-triazol y 0,81 g de (3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo en 15 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 1,38 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo con agitación, seguido de agitación a temperatura ambiente durante 7 horas. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con MTBE. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se recrystalizó en hexano-MTBE para obtener 0,42 g de [(1H-1,2,4-triazol-1-il)metil](3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (27), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.



RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 2,31 - 2,37 (2H, m), 2,52 - 2,63 (2H, m), 4,77 (2H, s), 8,09 (1H, s), 8,33 (1H, s)

Ejemplo de Producción 28

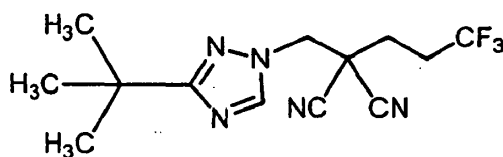
Se disolvieron 0,78 g de hidrocloreto de 3-i-propil-1-(clorometil)-1H-1,2,4-triazol y 0,65 g de (3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo en 12 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 1,10 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo con agitación, seguido de agitación a temperatura ambiente durante la noche. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con MTBE. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se recrystalizó en hexano-MTBE para obtener 0,31 g de [(3-i-propil-1H-1,2,4-triazol-1-il)metil](3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (28), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.



RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 1,32 (6H, d), 2,31 - 2,35 (2H, m), 2,45 - 2,63 (2H, m), 3,06 - 3,13 (1H, m), 4,68 (2H, s), 8,19 (1H, s)

Ejemplo de Producción 29

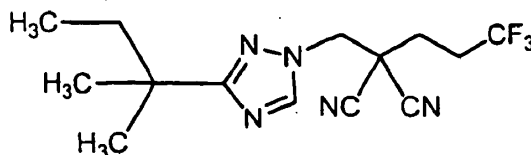
Se disolvieron 1,61 g de hidrocloreto de 3-t-butil-1-(clorometil)-1H-1,2,4-triazol y 1,24 g de (3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo en 22 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 2,13 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo con agitación, seguido de agitación a temperatura ambiente durante 4 horas. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con MTBE. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se recrystalizó en hexano-MTBE para obtener 0,77 g de [(3-t-butil-1H-1,2,4-triazol-1-il)metil](3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (29), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.



RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 1,37 (9H, s), 2,31 - 2,34 (2H, m), 2,51 - 2,63 (2H, m), 4,67 (2H, s), 8,18 (1H, s)

Ejemplo de Producción 30

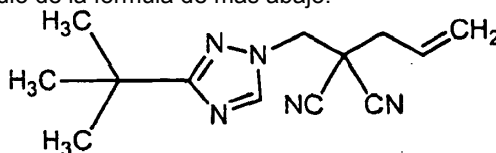
Se disolvieron 0,98 g de hidrocloreto de 3-(1,1-dimetilpropil)-1-(clorometil)-1H-1,2,4-triazol y 0,65 g de (3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo en 12 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 1,11 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo con agitación, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con MTBE. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se recrystalizó en hexano-MTBE para obtener 0,29 g de [[3-(1,1-dimetilpropil)-1H-1,2,4-triazol-1-il]metil](3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (30), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.



RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 0,72 (3H, t), 1,33 (6H, s), 1,69 (2H, c), 2,31 - 2,35 (2H, m), 2,51 - 2,63 (2H, m), 4,68 (2H, s), 8,19 (1H, s)

Ejemplo de Producción 31

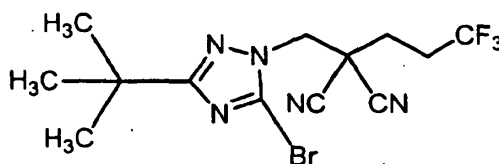
Se disolvieron 1,28 g de hidrocloreto de 1-(clorometil)-3-t-butil-1H-1,2,4-triazol y 0,77 g de alilmalononitrilo en 21 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 1,01 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo con agitación, seguido de agitación a temperatura ambiente durante 4 horas. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con MTBE. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se recrystalizó en hexano-MTBE para obtener 0,16 g de alil[[3-t-butil-1H-1,2,4-triazol-1-il]metil]malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (31), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.



RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 1,38 (9H, s), 2,79 (2H, d), 4,61 (2H, s), 5,50 - 5,54 (2H, m), 5,89 - 6,00 (1H, m), 8,16 (1H, s)

Ejemplo de Producción 32

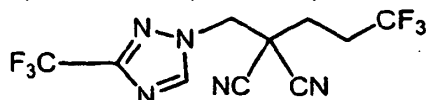
Se disolvieron 2,03 g de hidrocloreto de 5-bromo-3-t-butil-1-(clorometil)-1H-1,2,4-triazol y 1,30 g de (3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo en 24 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 2,21 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo con agitación, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con MTBE. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 0,76 g de [(5-bromo-3-t-butil-1H-1,2,4-triazol 1-il)metil](3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (32), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.



RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 1,34 (9H, s), 2,40 - 2,45 (2H, m), 2,51 - 2,64 (2H, m), 4,62 (2H, s)

Ejemplo de Producción 33

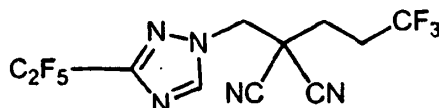
Se disolvieron 1,56 g de 1-(clorometil)-3-(trifluorometil)-1H-1,2,4-triazol y 1,38 g de (3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo en 25 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 2,35 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo con agitación, seguido de agitación a temperatura ambiente durante 4 horas. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con MTBE. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se recrystalizó en hexano-MTBE para obtener 0,15 g de {[3-(trifluorometil)-1H-1,2,4-triazol-1-il]metil}(3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (33), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.



RMN H^1 ($CDCl_3$, TMS, δ (ppm)): 2,34 - 2,38 (2H, m), 2,51 - 2,65 (2H, m), 4,82 (2H, s), 8,45 (1H, s)

Ejemplo de Producción 34

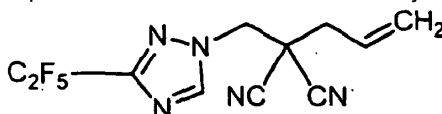
Se disolvieron 1,74 g de 1-(clorometil)-3-(pentafluoroetil)-1H-1,2,4-triazol y 1,20 g de (3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo en 21 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 2,04 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo con agitación, seguido de agitación a temperatura ambiente durante 4 horas. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con MTBE. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se recrystalizó en hexano-MTBE para obtener 0,25 g de {[3-(pentafluoroetil)-1H-1,2,4-triazol-1-il]metil}(3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (34), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.



RMN H^1 ($CDCl_3$, TMS, δ (ppm)): 2,32 - 2,36 (2H, m), 2,52 - 2,64 (2H, m), 4,84 (2H, s), 8,47 (1H, s)

Ejemplo de Producción 35

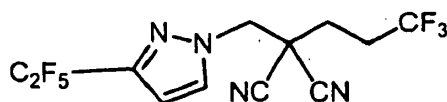
Se disolvieron 2,24 g de 1-(clorometil)-3-(pentafluoroetil)-1H-1,2,4-triazol y 1,02 g de alilmalononitrilo en 28 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 2,76 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo con agitación, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con MTBE. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice, y a continuación se sometió a cromatografía líquida de alta resolución preparativa para obtener 0,54 g de alil[3-(pentafluoroetil)-1H-1,2,4-triazol-1-il]metil}malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (35), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.



RMN H^1 ($CDCl_3$, TMS, δ (ppm)): 2,81 (2H, d), 4,76 (2H, s), 5,53 - 5,59 (2H, m), 5,88 - 5,97 (1H, m), 8,45 (1H, s)

Ejemplo de Producción 36

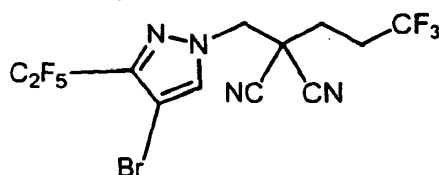
Se disolvieron 2,01 g de 1-(clorometil)-3-(pentafluoroetil)-1H-pirazol y 1,39 g de (3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo en 25 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 2,38 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo con agitación, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con MTBE. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 1,31 g de {[3-(pentafluoroetil)-1H-pirazol-1-il]metil}(3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (36), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.



RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 2,23 - 2,27 (2H, m), 2,49 - 2,59 (2H, m), 4, 77 (2H, s), 6,72 (1H, d), 7,75 (1H, d)

Ejemplo de Producción 37

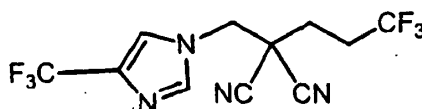
Se disolvieron 6,84 g de 4-bromo-1-(clorometil)-3-(pentafluoroetil)-1H-pirazol y 3,54 g de (3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo en 60 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 6,08 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo con agitación, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con MTBE. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 7,15 g de [(4-bromo-3-(pentafluoroetil)-1H-pirazol-1-il)metil](3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (37), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.



RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 2,24 - 2,29 (2H, m), 2,49 - 2,61 (2H, m), 4, 75 (2H, s), 7,81 (1H, s)

Ejemplo de Producción 38

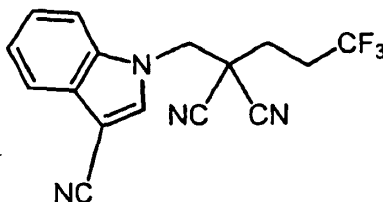
Se disolvieron 2,90 g de 1-(clorometil)-4-(trifluorometil)-1H-imidazol hidrocloreto y 2,11 g de (3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo en 39 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 3,59 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo con agitación, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con MTBE. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 1,12 g de {[4-(trifluorometil)-1H-imidazol-1-il]metil}(3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (38), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.



RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 2,24 - 2,28 (2H, m), 2,54 - 2,65 (2H, m), 4, 53 (2H, s), 7,50 (1H, s), 7,73 (1H, s)

Ejemplo de Producción 39

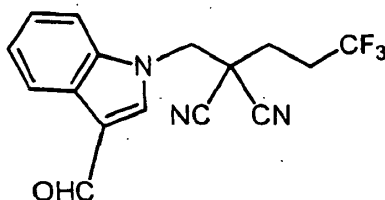
Se disolvieron 1,70 g de 1-(clorometil)-3-ciano-1H-indol y 1,45 g de (3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo en 27 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 2,49 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo con agitación, seguido de agitación a temperatura ambiente durante 7 horas. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con MTBE. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 1,48 g de [(3-ciano-1H-indol-1-il)-metil](3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (39), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.



RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 2,28 - 2,32 (2H, m), 2,51-2,63 (2H, m), 4,78 (2H, s), 7,37 - 7,47 (2H, m), 7,53 (1H, d), 7,80 - 7,83 (2H, m)

Ejemplo de Producción 40

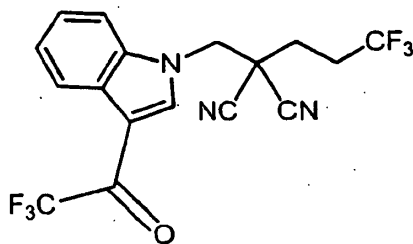
Se disolvieron 3,02 g de 1-(clorometil)-3-formil-1H-indol y 2,53 g de (3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo en 45 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 4,35 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo con agitación, seguido de agitación a temperatura ambiente durante 3 horas. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con MTBE. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 2,68 g de [{3-formil-1H-indol-1-il}metil](3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (40), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.



RMN ^1H (DMSO- d_6 , TMS, δ (ppm)): 2,33 - 2,51 (2H, m), 2,59 - 2,75 (2H, m), 5,29 (2H, s), 7,30 - 7,40 (2H, m), 7,97 (1H, d), 8,14 (1H, d), 8,36 (1H, s), 10,09 (1H, s)

Ejemplo de Producción 41

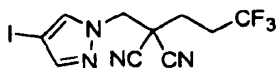
Se disolvieron 3,53 g de 1-(clorometil)-3-(trifluoroacetil)-1H-indol y 2,19 g de (3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo en 27 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 3,74 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo con agitación, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con MTBE. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 3,06 g de [{3-(trifluoroacetil)-1H-indol-1-il}metil](3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (41), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.



RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 2,33 - 2,37 (2H, m), 2,53 - 2,65 (2H, m), 4,85 (2H, s), 7,44 - 7,50 (2H, m), 7,52 - 7,57 (1H, m), 8,16 (1H, s), 8,49 - 8,47 (1H, m)

Ejemplo de Producción 42

Se disolvieron 1,21 g de [(1H-pirazol-1-il)metil](3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo (el compuesto de la presente invención (1)) en 50 ml de acetonitrilo. Se añadieron 2,19 g de nitrato de amonio y cerio (IV) y 1,02 g de yodo a la disolución, seguido de agitación a temperatura ambiente durante 10 horas. La mezcla de reacción se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 1,71 g de [(4-yodo-1H-pirazol-1-il)metil](3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (42), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.

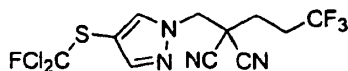


RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 2,04 - 2,27 (2H, m), 2,48 (2H, m), 4,69 (2H, s), 7,65 (1H, s), 7,67 (1H, s)

Ejemplo de Producción 43

Se disolvieron 0,21 g de 1-(clorometil)-4-[(diclorofluorometil)tio]-1H-pirazol y 0,14 g de (3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo en 2 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 0,12 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con MTBE. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró. El producto filtrado se concentró a presión reducida para obtener 0,06 g de [(4-

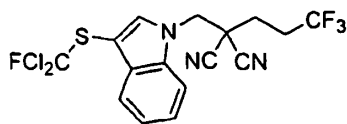
{{(diclorofluorometil)tio}-1H-pirazol-1-il)metil}[(3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (43), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.



RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 2,24 - 2,33 (2H, m), 2,49 - 2,59 (2H, m), 5,43 (2H, s), 7,83 (1H, s), 7,96 (1H, s)

Ejemplo de Producción 44

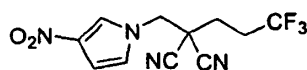
Se disolvieron 0,61 g de 1-(clorometil)-3-[[diclorofluorometil]tio]-1H-indol y 0,35 g de (3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo en 2 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 0,28 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con MTBE. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró. El producto filtrado se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 0,65 g de [(3-[[diclorofluorometil]tio]-1H-indol-1-il)metil}[(3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (44), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.



RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 2,05 - 2,28 (2H, m), 2,49 - 2,60 (2H, m), 4,80 (2H, s), 7,34 - 7,42 (2H, m), 7,50 (1H, d), 7,67 (1H, s), 7,86 (1H, s)

Ejemplo de Producción 45

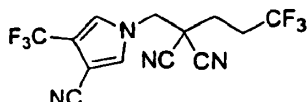
Se disolvieron 0,61 g de 1-clorometil-3-nitro-1H-pirrol y 0,65 g de (3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo en 10 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 0,28 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con acetato de etilo. La capa orgánica se lavó con una disolución acuosa saturada de cloruro de sodio, se secó sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró. El producto filtrado se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 0,80 g de [(3-nitro-1H-pirrol-1-il)metil}[(3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (45), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.



RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 2,22 - 2,26 (2H, m), 2,52 - 2,63 (2H, m), 4,46 (2H, s), 6,81 - 6,83 (1H, m), 6,88 (1H, t), 7,69 (1H, d)

Ejemplo de Producción 46

Se disolvieron 0,80 g de 1-clorometil-3-ciano-4-trifluorometil-1H-pirrol y 0,67 g de (3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo en 10 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 0,57 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con acetato de etilo. La capa orgánica se lavó con una disolución acuosa saturada de cloruro de sodio, se secó sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró. El producto filtrado se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 0,33 g de [(3-ciano-4-trifluorometil-1H-pirrol-1-il)metil}[(3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (46), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.

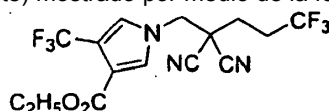


RMN ^1H ($\text{DMSO}-d_6$, TMS, δ (ppm)): 2,45 - 2,51 (2H, m), 2,62 - 2,74 (2H, m), 4,98 (2H, s), 7,76 - 7,77 (1H, m), 8,04 (1H, d)

Ejemplo de Producción 47

Se disolvieron 0,23 g de 1-clorometil-4-trifluorometil-3-etoxicarbonil-1H-pirrol y 0,15 g de (3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo en 2 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 0,13 g de carbonato de potasio a la

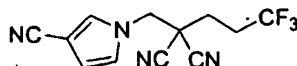
disolución enfriando con hielo, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con acetato de etilo. La capa orgánica se lavó con una disolución acuosa saturada de cloruro de sodio, se secó sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró. El producto filtrado se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 0,20 g de [(3-etoxicarbonil-4-trifluorometil-1H-pirrol-1-il)metil](3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (47), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.



RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 1,35 (3H, t), 2,21 - 2,26 (2H, m), 2,56 - 2,63 (2H, m), 4,35 (2H, c), 4,45 (2H, s), 7,20 (1H, d), 7,53 (1H, d)

Ejemplo de Producción 48

Se disolvieron 0,27 g de 1-clorometil-3-ciano-1H-pirrol y 0,34 g de (3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo en 3 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron 0,29 g de carbonato de potasio a la disolución enfriando con hielo, seguido de agitación a temperatura ambiente durante 1 hora. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y a continuación se extrajo con acetato de etilo. La capa orgánica se lavó con una disolución acuosa saturada de cloruro de sodio, se secó sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró. El producto filtrado se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 0,37 g de [(3-ciano-1H-pirrol-1-il)metil](3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo (referido como el compuesto de la presente invención (48), más adelante) mostrado por medio de la fórmula de más abajo.

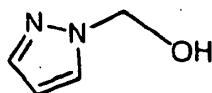


RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 2,18 - 2,23 (2H, m), 2,96 - 2,69 (2H, m), 4,46 (2H, s), 6,58 - 6,59 (1H, m), 6,87 - 6,88 (1H, m), 7,33 - 7,35 (1H, m)

A continuación, se ilustran los ejemplos de producción de referencia del compuesto intermedio.

Ejemplo de Producción de Referencia 1-1

1H-pirazol-1-ilmetanol

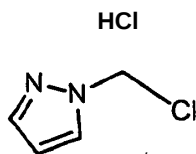


La mezcla de 2,04 g de pirazol, 2,00 g de paraformaldehído y 1 ml de trietilamina se agitó a 130°C durante 10 horas. Después de enfriar la mezcla de reacción a temperatura ambiente, se añadió acetona a la mezcla de reacción, y a continuación la mezcla se filtró. El producto filtrado se concentró a presión reducida. Se añadió hexano al residuo, y a continuación se formó un producto cristalino. El producto cristalino se recogió para obtener 3,10 g de 1H-pirazol-1-ilmetanol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 5,51 (2H, s), 6,30 (1H, t), 7,58 - 7,61 (2H, m)

Ejemplo de Producción de Referencia 1-2

hidrocloruro de 1-(clorometil)-1H-pirazol



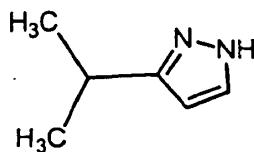
Se disolvieron 3,10 g de 1H-pirazol-1-ilmetanol en 100 ml de diclorometano. Se añadieron 6,8 ml de cloruro de tionilo a la disolución, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. La mezcla de reacción se

concentró a presión reducida. El residuo se recrystalizó en hexano-cloroformo para obtener 2,66 g de hidrocloreto de 1-(clorometil)-1H-pirazol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 5,91 (2H, s), 6,38 (1H, t), 7,61 - 7,68 (2H, m)

5 Ejemplo de Producción de Referencia 2-1

3-i-propil-1H-pirazol

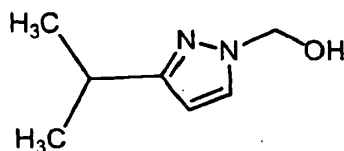


En una atmósfera de nitrógeno, una mezcla de 17,23 g de isopropilmetilcetona y 12,01 g de formiato de metilo se enfrió a 0°C, y a continuación se añadieron 22,44 g de t-butoxido de potasio disueltos en 200 ml de tetrahidrofurano a la mezcla a lo largo de un período de 1 hora. Durante el mismo, la temperatura de la mezcla se mantuvo por debajo de 20°C. Después de eso, la mezcla de reacción se agitó a 30°C durante 5 horas. Se añadieron 200 ml de éter dietílico a la mezcla de reacción que se enfrió a temperatura ambiente, como resultado, se produjo un sólido. El sólido se recogió por medio de filtración, y se lavó con 20 ml de éter dietílico. El sólido obtenido se secó a presión reducida para dar 14,14 g de sal de potasio de 1-hidroxi-4-metil-1-penten-3-ona. Se suspendieron 14,14 g de sal de potasio de 1-hidroxi-4-metil-1-penten-3-ona en 90 ml de etanol. Se añadieron 5,11 g de hidrato de hidrazina a la suspensión, y a continuación se sometió a reflujo durante 7 horas. Se añadieron 30 ml de agua a la mezcla de reacción que se enfrió a temperatura ambiente, y la mezcla se concentró a 30 ml a presión reducida. El residuo se extrajo con acetato de etilo. La capa orgánica se secó sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 6,83 g de 3-i-propil-1H-pirazol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 1,29 (6H, d), 3,01 - 3,08 (1H, m), 6,10 (1H, s), 7,49 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 2-2

3-i-propil-1H-pirazol-1-ilmetanol

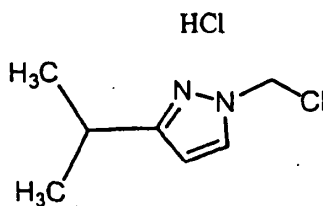


La mezcla de 1,15 g de 3-i-propil-1H-pirazol, 0,94 g de paraformaldehído y 0,14 g de trietilamina se agitó a 130°C durante 7 horas. Después de enfriar la mezcla de reacción a temperatura ambiente, se añadió acetona a la mezcla de reacción. La mezcla se filtró. El producto filtrado se concentró a presión reducida. Se añadió hexano al residuo, y a continuación se formó un producto cristalino. El producto cristalino se recogió para obtener 1,28 g de 3-i-propil-1H-pirazol-1-ilmetanol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 1,24 (6H, d), 2,94 - 3,02 (1H, m), 5,48 (2H, s), 6,10 (1H, d), 7,47 (1H, d)

Ejemplo de Producción de Referencia 2-3

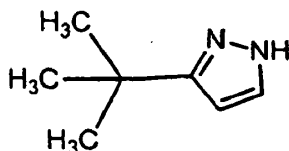
hidrocloreto de 3-i-propil-1-(clorometil)-1H-pirazol



Se añadieron 1,28 g de 3-*i*-propil-1H-pirazol-1-ilmetanol en 20 ml de diclorometano. Se añadieron 2 ml de cloruro de tionilo a la disolución, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. La mezcla de reacción se concentró a presión reducida para obtener 1,58 g de hidroccloruro de 3-*i*-propil-1-(clorometil)-1H-pirazol.

5 Ejemplo de Producción de Referencia 3-1

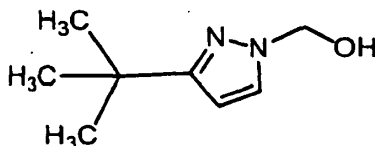
3-*t*-butil-1H-pirazol



En una atmósfera de nitrógeno, una mezcla de 50,00 g de pinacolona y 42,00 g de formiato de metilo se enfrió a 0°C, y a continuación se añadieron 56,00 g de *t*-butóxido de potasio a la mezcla a lo largo de un período de 3 horas. Durante el mismo, la temperatura de la mezcla se mantuvo por debajo de 20°C. Después de eso, la mezcla de reacción se agitó a 30°C durante 5 horas. Se añadió éter dietílico a la mezcla de reacción que se enfrió a temperatura ambiente, como resultado, se produjo un sólido. El sólido se recogió por medio de filtración, y se secó a presión reducida para producir 32,12 g de sal de potasio de 1-hidroxi-4,4-dimetil-1-penten-3-ona. Se suspendieron 21,61 g de sal de potasio de 1-hidroxi-4,4-dimetil-1-penten-3-ona en 150 ml de etanol. Se añadieron 6,52 g de hidrato de hidrazina a la suspensión, y a continuación se sometió a reflujo durante 7 horas. Se añadieron 50 ml de agua a la mezcla de reacción que se enfrió a temperatura ambiente, y la mezcla se concentró a 40 ml a presión reducida. La disolución concentrada se extrajo con acetato de etilo. La capa orgánica se secó sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 6,83 g de 3-*t*-butil-1H-pirazol. RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 1,34 (9H, s), 6,11 (1H, d), 7,47 (1H, d)

25 Ejemplo de Producción de Referencia 3-2

3-*t*-butil-1H-pirazol-1-ilmetanol

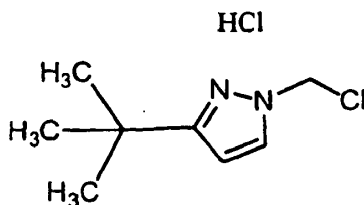


La mezcla de 1,28 g de 3-*t*-butil-1H-pirazol, 0,66 g de paraformaldehído y 0,3 g de trietilamina se agitó a 130°C durante 7 horas. Después de enfriar la mezcla de reacción a temperatura ambiente, se añadió acetona a la mezcla de reacción. La mezcla se filtró. El producto filtrado se concentró a presión reducida. Se añadió hexano al residuo, y a continuación se formó un producto cristalino. El producto cristalino se recogió para obtener 1,07 g de 3-*t*-butil-1H-pirazol-1-ilmetanol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 1,28 (9H, s), 5,50 (2H, s), 6,13 (1H, s), 7,46 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 3-3

hidroccloruro de 3-*t*-butil-1-(clorometil)-1H-pirazol

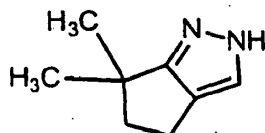


Se disolvieron 1,07 g de 3-t-butil-1H-pirazol-1-ilmetanol en 140 ml de diclorometano. Se añadieron 2 ml de cloruro de tionilo a la disolución, seguido de agitación a temperatura ambiente durante la noche. La mezcla de reacción se concentró a presión reducida para obtener 1,66 g de hidrocloreto de 3-t-butil-1-(clorometil)-1H-pirazol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 6,25 (2H, s), 6,40 (1H, d), 7,69 (1H, d)

Ejemplo de Producción de Referencia 4-1

6,6-dimetil-2,4,5,6-tetrahidrociclopenta[c]pirazol

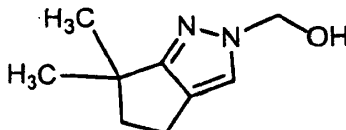


En una atmósfera de nitrógeno, una mezcla de 12,22 g de 2,2-dimetilciclopentanona y 6,01 g de formiato de metilo se enfrió a 0°C, y a continuación se añadieron 6,74 g de t-butoxido de potasio a la mezcla a lo largo de un período de 1 hora. Durante el mismo, la temperatura de la mezcla se mantuvo por debajo de 20°C. Después de eso, la mezcla de reacción se agitó a temperatura ambiente a lo largo de 18 horas. Se añadió éter dietílico a la mezcla de reacción, como resultado, se produjo un sólido. El sólido se recogió por medio de filtración. El sólido obtenido se secó a presión reducida para dar 9,94 g de sal de potasio de 1-hidroximetil-5,5-dimetilciclopentanona. Se suspendieron 9,94 g de sal de potasio de 1-hidroximetil-5,5-dimetilciclopentanona en 80 ml de etanol. Se añadieron 2,80 g de hidrato de hidrazina a la suspensión, y a continuación se sometió a reflujo durante 5 horas. Se añadieron 50 ml de agua a la mezcla de reacción que se enfrió a temperatura ambiente, y la mezcla se concentró a 40 ml a presión reducida. La disolución concentrada se extrajo con acetato de etilo. La capa orgánica se secó sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 1,68 g de 6,6-dimetil-2,4,5,6-tetrahidrociclopenta[c]pirazol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 1,32 (6H, s), 2,23 - 2,28 (2H, t), 2,60 - 2,64 (2H, t), 7,11 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 4-2

{6,6-dimetil-5,6-dihidrociclopenta[c]pirazol-2(4H)-il}metanol

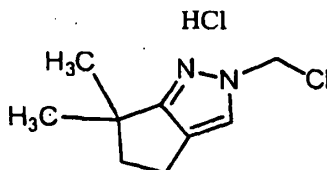


La mezcla de 1,68 g de 6,6-dimetil-2,4,5,6-tetrahidrociclopenta[c]pirazol, 0,41 g de paraformaldehído y 0,2 g de trietilamina se agitó a 130°C durante 5 horas. Después de enfriar la mezcla de reacción a temperatura ambiente, se añadió acetona a la mezcla de reacción. La mezcla se filtró. El producto filtrado se concentró a presión reducida. Se añadió hexano al residuo, y a continuación se formó un producto cristalino. El producto cristalino se recogió para obtener 0,31-g de {6,6-dimetil-5,6-dihidrociclopenta[c]pirazol-2(4H)-il}metanol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 1,28 (6H, s), 2,18 (2H, t), 2,59 (2H, t), 5,44 (2H, s), 7,13 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 4-3

hidrocloreto de 1-(clorometil)-6,6-dimetil-5,6-dihidrociclopenta[c]pirazol



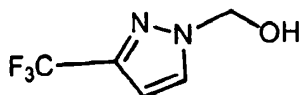
Se disolvieron 0,31 g de {6,6-dimetil-5,6-dihidrociclopenta[c]pirazol-2(4H)-il}metanol en 5 ml de diclorometano. Se añadieron 1 ml de cloruro de tionilo a la disolución, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la

noche. La mezcla de reacción se concentró a presión reducida para obtener 0,58 g de hidrocloreto de 1-(clorometil)-6,6-dimetil-5,6-dihidrociclopenta[c]pirazol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 1,46 (6H, s), 2,33 (2H, t), 2,73 (2H, t), 6,18 (2H, s), 7,45 (1H, s)

5 Ejemplo de Producción de Referencia 5-1

3-(trifluorometil)-1H-pirazol-1-ilmetanol

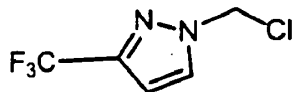


La mezcla de 4,08 g de 3-(trifluorometil)-1H-pirazol, 2,00 g de paraformaldehído y 1 ml de trietilamina se agitó a 80°C durante 5 horas. Después de enfriar la mezcla de reacción a temperatura ambiente, se añadió acetona a la mezcla de reacción. La mezcla se filtró. El producto filtrado se concentró a presión reducida. Se añadió hexano al residuo, y a continuación se formó un producto cristalino. El producto cristalino se recogió para obtener 4,31 g de 3-(trifluorometil)-1H-pirazol-1-ilmetanol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 9,73 (1H, s ancho), 5,58 (2H, s), 6,58 (1H, s), 7,66 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 5-2

1-(clorometil)-3-(trifluorometil)-1H-pirazol

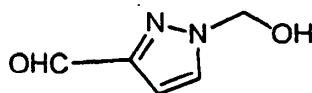


Se disolvieron 1,33 g de 3-(trifluorometil)-1H-pirazol-1-ilmetanol en 40 ml de diclorometano. Se añadieron 2,7 ml de cloruro de tionilo a la disolución, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. La mezcla de reacción se concentró a presión reducida para obtener 1,44 g de 1-(clorometil)-3-(trifluorometil)-1H-pirazol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 5,88 (2H, s), 6,62 (1H, d), 7,68 (1H, d)

Ejemplo de Producción de Referencia 6-1

1-(hidroximetil)-3-formil-1H-pirazol

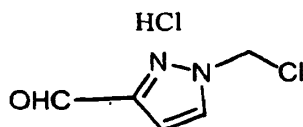


La mezcla de 0,96 g de 3-formil-1H-pirazol, 0,60 g de paraformaldehído y 0,3 ml de trietilamina se agitó a 100°C durante 5 horas. Después de enfriar la mezcla de reacción a temperatura ambiente, se añadió acetona a la mezcla de reacción. El producto filtrado se concentró a presión reducida para obtener 1,21 g de 1-(hidroximetil)-3-formil-1H-pirazol. El producto bruto se utilizó para el siguiente procedimiento sin purificación.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 5,63 (2H, s), 6,84 (1H, d), 7,67 (1H, d), 9,96 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 6-2

hidrocloreto de 1-(clorometil)-3-formil-1H-pirazol

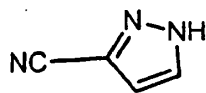


Se disolvieron 1,21 g de 1-(hidroximetil)-3-formil-1H-pirazol en 50 ml de diclorometano. Se añadieron 2,4 ml de cloruro de tionilo a la disolución, seguido de agitación a temperatura ambiente durante la noche. La mezcla de reacción se concentró a presión reducida para obtener 1,57 g de hidrocloreto de 1-(clorometil)-3-formil-1H-pirazol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 5,92 (2H, s), 6,88 (1H, s), 7,67 (1H, s), 10,00 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 7-1

3-ciano-1H-pirazol

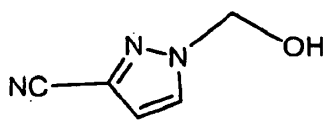


Se disolvieron 2,18 g de 3-formil-1H-pirazol en 12 ml de piridina. Se añadieron 1,58 g de hidrocloreto de hidroxilamina a la disolución, seguido de agitación a temperatura ambiente durante 5 horas. La mezcla de reacción se concentró a presión reducida. Se añadieron 30 ml de anhídrido acético al residuo seguido de agitación a 100°C durante 5 horas. Después de enfriar la mezcla de reacción a temperatura ambiente, ésta se concentró a presión reducida. Se añadieron 30 ml de etanol al residuo, y a continuación la mezcla se agitó a 100°C durante 3 horas. Después de enfriar la mezcla de reacción a temperatura ambiente, ésta se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 0,86 g de 3-ciano-1H-pirazol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 6,79 (1H, d), 7,75 (1H, d)

Ejemplo de Producción de Referencia 7-2

1-(hidroximetil)-3-ciano-1H-pirazol

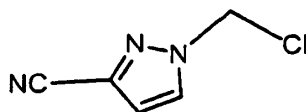


La mezcla de 0,86 g de 3-ciano-1H-pirazol y 0,55 g de paraformaldehído se agitó a 130°C durante 7 horas. Después de enfriar la mezcla de reacción a temperatura ambiente, se añadió acetona a la mezcla de reacción. Después de filtrar la mezcla, el producto filtrado se concentró a presión reducida para obtener 0,89 g de 1-(hidroximetil)-3-ciano-1H-pirazol.

RMN ^1H ($\text{DMSO}-d_6$, TMS, δ (ppm)): 5,54 (2H, s), 6,70 (1H, d), 7,72 (1H, d)

Ejemplo de Producción de Referencia 7-3

3-ciano-1-(clorometil)-1H-pirazol

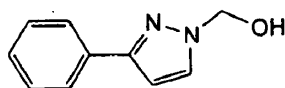


Se disolvieron 0,89 g de 1-(hidroximetil)-3-ciano-1H-pirazol en 30 ml de diclorometano. Se añadieron 1,6 ml de cloruro de tionilo a la disolución, seguido de agitación a temperatura ambiente durante la noche. La mezcla de reacción se concentró a presión reducida para obtener 1,00 g de 3-ciano-1-(clorometil)-1H-pirazol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 5,87 (2H, s), 6,76 (1H, s), 7,72 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 8-1

3-fenil-1H-pirazol-1-ilmetanol



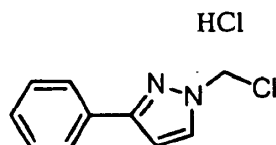
La mezcla de 2,88 g de 3-fenil-1H-pirazol, 0,67 g de paraformaldehído y 0,3 ml de trietilamina se agitó a 130°C durante 5 horas. Después de enfriar la mezcla de reacción a temperatura ambiente, se añadió acetona a la mezcla de reacción. Después de filtrar la mezcla, se añadió hexano al producto filtrado para producir un cristal. El cristal se

recogió para obtener 2,64 g de 3-fenil-1H-pirazol-1-ilmetanol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 5,56 (2H, s), 6,58 (1H, d), 7,31 - 7,42 (3H, m), 7,59 (1H, d), 7,76 - 7,79 (2H, m)

Ejemplo de Producción de Referencia 8-2

hidrocloruro de 1-(clorometil)-3-fenil-1H-pirazol



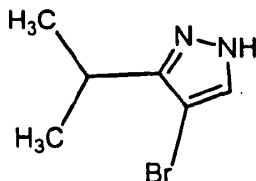
Se disolvieron 1,74 g de 3-fenil-1H-pirazol-1-ilmetanol en 50 ml de diclorometano. Se añadieron 3,4 ml de cloruro de tionilo a la disolución, seguido de agitación a temperatura ambiente durante la noche. La mezcla de reacción se concentró a presión reducida. Se añadieron hexano y cloroformo al residuo para producir un cristal. El cristal se

recogió para obtener 2,01 g de hidrocloruro de 1-(clorometil)-3-fenil-1H-pirazol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 6,15 (2H, s), 6,76 (1H, d), 7,39 - 7,49 (3H, m), 7,76 (1H, d), 7,90 - 7,94 (2H, m)

Ejemplo de Producción de Referencia 9-1

4-bromo-3-i-propil-1H-pirazol

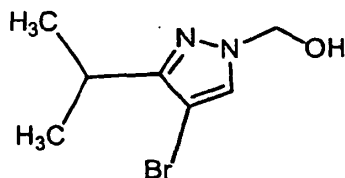


Se suspendieron 1,10 g de 3-i-propil-1H-pirazol en 20 ml de agua, y a esto se le añadieron 1,6 g de una disolución acuosa de hidróxido de sodio al 50%. La mezcla se enfrió a 0°C, y a continuación se añadieron 1,76 g de bromo a la mezcla, seguido de agitación a temperatura ambiente durante 5 horas. La mezcla de reacción se extrajo con acetato de etilo. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 1,88 g de 4-bromo-3-i-propil-1H-pirazol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 1,31 (6H, d), 3,07 - 3,18 (1H, m), 7,99 (1H, s)

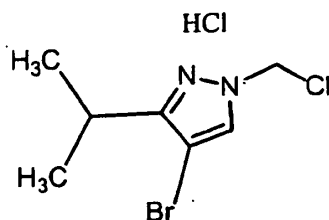
Ejemplo de Producción de Referencia 9-2

4-bromo-3-i-propil-1H-pirazol-1-ilmetanol



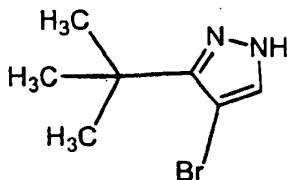
La mezcla de 1,88 g de 4-bromo-3-i-propil-1H-pirazol, 0,60 g de paraformaldehído y 0,10 g de trietilamina se agitó a 130°C durante 5 horas. Después de enfriar la mezcla de reacción a temperatura ambiente, se añadió acetona a la mezcla de reacción. La mezcla se filtró, y el producto filtrado se concentró a presión reducida para obtener 1,29 g de 4-bromo-3-i-propil-1H-pirazol-1-ilmetanol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 1,26 (6H, d), 3,02 - 3,11 (1H, m), 5,43 (2H, s), 7,54 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 9-3**hidrocloruro de 4-bromo-3-i-propil-1-(clorometil)-1H-pirazol**

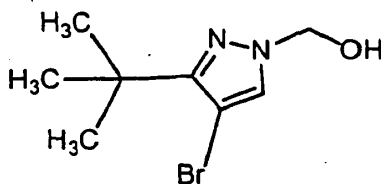
5 Se disolvieron 1,29 g de 4-bromo-3-i-propil-1H-pirazol-1-ilmetanol en 20 ml de diclorometano. Se añadieron 2 ml de cloruro de tionilo a la disolución, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. La mezcla de reacción se concentró a presión reducida para obtener 1,28 g de hidrocloruro 4-bromo-3-i-propil-1-(clorometil)-1H-pirazol.

10 RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 1,29 (6H, d), 2,99 - 3,10 (1H, m), 5,75 (2H, s), 7,54 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 10-1**4-bromo-3-t-butil-1H-pirazol**

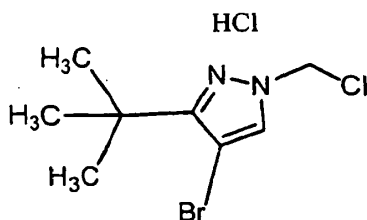
15 Se suspendieron 2,48 g de 3-t-butil-1H-pirazol en 35 ml de agua, y a esto se le añadieron 2,5 g de una disolución acuosa de hidróxido de sodio al 50%. La mezcla se enfrió a 0°C, y a continuación se añadieron 3,50 g de bromo a la mezcla, seguido de agitación a temperatura ambiente durante 7 horas. La mezcla de reacción se extrajo con acetato de etilo. La capa orgánica se lavó con agua se secó sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 3,14 de 4-bromo-3-t-butil-1H-pirazol.

20 RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 1,45 (9H, s), 7,48 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 10-2**4-bromo-3-t-butil-1H-pirazol-1-ilmetanol**

30 La mezcla de 3,14 g de 4-bromo-3-t-butil-1H-pirazol, 0,93 g de paraformaldehído y 0,11 g de trietilamina se agitó a 130°C durante 7 horas. Después de enfriar la mezcla de reacción a temperatura ambiente, se añadió acetona a la mezcla de reacción. La mezcla se filtró. Se añadió hexano al residuo obtenido mediante la concentración del producto filtrado a presión reducida, como resultado, se formó un cristal. El cristal se recogió para obtener 3,79 g de 4-bromo-3-t-butil-1H-pirazol-1-ilmetanol.

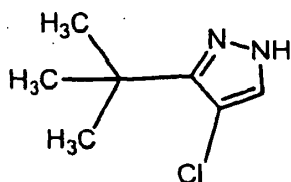
35 RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 1,37 (9H, s), 5,40 (2H, s), 7,55 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 10-3**hidrocloruro de 4-bromo-3-t-butil-1-(clorometil)-1H-pirazol**

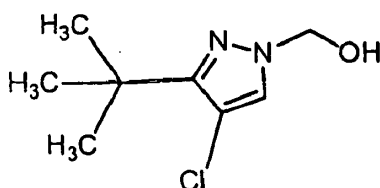
Se disolvieron 3,79 g de 4-bromo-3-t-butil-1H-pirazol-1-ilmetanol en 45 ml de diclorometano. Se añadieron 3,4 ml de cloruro de tionilo a la disolución, seguido de agitación a temperatura ambiente durante la noche. La mezcla de reacción se concentró a presión reducida. El sólido obtenido se lavó con hexano y cloroformo para obtener 3,69 g de

hidrocloruro de 4-bromo-3-t-butil-1-(clorometil)-1H-pirazol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 1,40 (9H, s), 5,76 (2H, s), 7,56 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 11-1**3-t-butil-4-cloro-1H-pirazol**

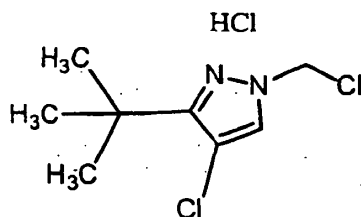
Se disolvieron 1,42 g de 3-t-butil-1H-pirazol en 230 ml de cloroformo. Se añadieron 1,55 g de N-clorosuccinimida a la disolución, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. La mezcla de reacción se concentró a presión reducida, y el residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 0,62 g de 3-t-butil-4-cloro-1H-pirazol.

Ejemplo de Producción de Referencia 11-2**3-t-butil-4-cloro-1H-pirazol-1-ilmetanol**

La mezcla de 0,62 g de 3-t-butil-4-cloro-1H-pirazol, 0,24 g de paraformaldehído y 0,10 g de trietilamina se agitó a 130°C durante 7 horas. Después de enfriar la mezcla de reacción a temperatura ambiente, se añadió acetona a la mezcla de reacción. La mezcla se filtró. Se añadió hexano al residuo obtenido mediante la concentración del producto filtrado a presión reducida, como resultado, se formó un cristal. El cristal se recogió para obtener 0,82 g de 3-t-butil-4-cloro-1H-pirazol-1-ilmetanol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 1,38 (9H, s), 5,39 (2H, s), 7,51 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 11-3**hidrocloruro de 3-t-butil-4-cloro-1-(clorometil)-1H-pirazol**

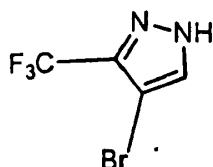


Se disolvieron 0,82 g de 3-*t*-butil-4-cloro-1H-pirazol-1-ilmetanol en 45 ml de diclorometano. Se añadieron 3,4 ml de cloruro de tionilo a la disolución, seguido de agitación a temperatura ambiente durante la noche. La mezcla de reacción se concentró a presión reducida para obtener 0,98 g de hidrocloreto de 3-*t*-butil-4-cloro-1-(clorometil)-1H-pirazol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 1,39 (9H, s), 5,75 (2H, s), 7,52 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 12-1

4-bromo-3-(trifluorometil)-1H-pirazol

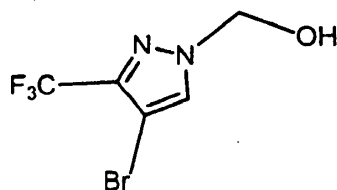


Se suspendieron 3,50 g de 3-(trifluorometil)-1H-pirazol en 45 ml de agua, y a esto se le añadieron 3,2 g de una disolución acuosa de hidróxido de sodio al 50%. La mezcla se enfrió a 0°C, y a continuación se añadieron 3,20 g de bromo a la mezcla, seguido de agitación a temperatura ambiente durante 7 horas. La mezcla de reacción se extrajo con acetato de etilo. La capa orgánica se lavó con agua se secó sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. Se añadió hexano al residuo, como resultado, se formó un cristal. El cristal se recogió para obtener 3,38 g de 4-bromo-3-(trifluorometil)-1H-pirazol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 7,72 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 12-2

4-bromo-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-1-ilmetanol

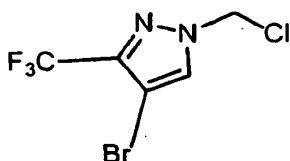


La mezcla de 3,38 g de 4-bromo-3-(trifluorometil)-1H-pirazol y 0,66 g de paraformaldehído se agitó a 140°C durante 5 horas. Después de enfriar la mezcla de reacción a temperatura ambiente, se añadió acetona a la mezcla de reacción. La mezcla se filtró. Se añadió hexano al residuo obtenido mediante la concentración del producto filtrado a presión reducida, como resultado, se formó un cristal. El cristal se recogió para obtener 3,28 g de 4-bromo-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-1-ilmetanol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 5,52 (2H, s), 7,71 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 12-3

4-bromo-1-(clorometil)-3-(trifluorometil)-1H-pirazol

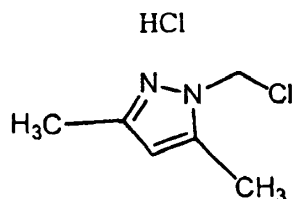


Se disolvieron 3,28 g de 4-bromo-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-1-ilmetanol en 40 ml de diclorometano. Se añadieron 2,9 ml de cloruro de tionilo a la disolución, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. La mezcla de reacción se concentró a presión reducida. El sólido obtenido se lavó con la mezcla de hexano y cloroformo para obtener 3,33 g de 4-bromo-1-(clorometil)-3-(trifluorometil)-1H-pirazol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 5,82 (2H, s), 7,74 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 13

hidrocloruro de 1-(clorometil)-3,5-dimetilpirazol

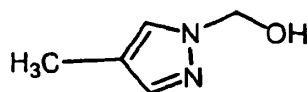


Se disolvieron 0,63 g de 3,5-dimetil-1H-pirazol-1-ilmetanol en 25 ml de diclorometano. Se añadieron 1,2 ml de cloruro de tionilo a la disolución, seguido de agitación a temperatura ambiente durante la noche. La mezcla de reacción se concentró a presión reducida para obtener 0,93 g de hidrocloruro de 1-(clorometil)-3,5-dimetil-1H-pirazol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 2,49 (3H, s), 2,50 (3H, s), 6,20 (3H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 14-1

4-metil-1H-pirazol-1-ilmetanol

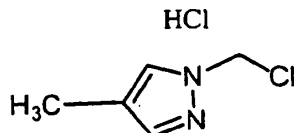


La mezcla de 1,93 g de 4-metil-1H-pirazol, 0,97 g de paraformaldehído y 0,4 ml de trietilamina se agitó a 130°C durante 5 horas. Después de enfriar la mezcla de reacción a temperatura ambiente, se añadió acetona a la mezcla de reacción. La mezcla se filtró. Se añadió hexano al residuo obtenido mediante la concentración del producto filtrado a presión reducida, como resultado, se formó un cristal. El cristal se recogió para obtener 1,72 g de 4-metil-1H-pirazol-1-ilmetanol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 2,08 (3H, s), 5,43 (2H, s), 7,36 (2H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 14-2

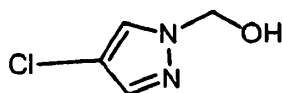
hidrocloruro de 1-(clorometil)-4-metil-1H-pirazol



Se disolvieron 1,12 g de 4-metil-1H-pirazol-1-ilmetanol en 50 ml de diclorometano. Se añadieron 3,4 ml de cloruro de tionilo a la disolución, seguido de agitación a temperatura ambiente durante la noche. La mezcla de reacción se concentró a presión reducida para obtener 1,61 g de hidrocloruro de 1-(clorometil)-4-metil-1H-pirazol.

Ejemplo de Producción de Referencia 15-1

4-cloro-1H-pirazol-1-ilmetanol

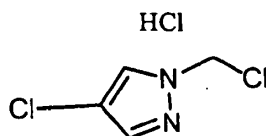


La mezcla de 2,05 g de 4-cloropirazol, 0,66 g de paraformaldehído y 0,11 g de trietilamina se agitó a 130°C durante 5 horas. Después de enfriar la mezcla de reacción a temperatura ambiente, se añadió acetona a la mezcla de reacción. La mezcla se filtró. Se añadió hexano al residuo obtenido mediante la concentración del producto filtrado a presión reducida, como resultado, se formó un cristal. El cristal se recogió para obtener 2,73 g de 4-cloro-1H-pirazol-1-ilmetanol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 5,45 (2H, s), 7,49 (1H, s), 7,60 (1H, s).

Ejemplo de Producción de Referencia 15-2

hidrocloruro de 4-cloro-1-(clorometil)-1H-pirazol

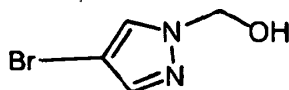


Se disolvieron 2,73 g de 4-cloro-1H-pirazol-1-ilmetanol en 20 ml de diclorometano. Se añadieron 4,4 ml de cloruro de tionilo a la disolución, seguido de agitación a temperatura ambiente durante la noche. La mezcla de reacción se concentró a presión reducida para obtener 2,90 g de hidrocloruro de 4-cloro-1-(clorometil)-1H-pirazol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 5,81 (2H, s), 7,53 (1H, s), 7,60 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 16-1

4-bromo-1H-pirazol-1-ilmetanol

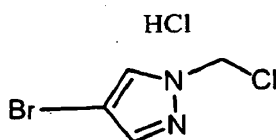


La mezcla de 2,94 g de 4-bromo-1H-pirazol, 0,66 g de paraformaldehído y 0,3 ml de trietilamina se agitó a 130°C durante 4 horas. Después de enfriar la mezcla de reacción a temperatura ambiente, se añadió acetona a la mezcla de reacción. La mezcla se filtró. Se añadió hexano al residuo obtenido mediante la concentración del producto filtrado a presión reducida, como resultado, se formó un cristal. El cristal se recogió para obtener 2,97 g de 4-bromo-1H-pirazol-1-ilmetanol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 5,46 (2H, s), 7,53 (1H, s), 7,63 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 16-2

hidrocloruro de 4-bromo-1-(clorometil)-1H-pirazol

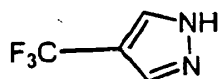


Se disolvieron 2,97 g de 4-bromo-1H-pirazol-1-ilmetanol a 100 ml de diclorometano. Se añadieron 5 ml de cloruro de tionilo a la disolución, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. La mezcla de reacción se concentró a presión reducida para obtener 3,27 g de hidrocloruro de 4-bromo-1-(clorometil)-1H-pirazol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 5,83 (2H, s), 7,57 (1H, s), 7,63 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 17-1

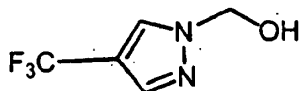
4-(trifluorometil)-1H-pirazol



El compuesto anteriormente mencionado se produjo mediante el método descrito en Tetrahedron Letters 1829(1996).

Ejemplo de Producción de Referencia 17-2

4-(trifluorometil)pirazol-1-il-1H-metanol

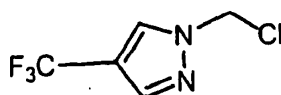


La mezcla de 0,59 g de 4-(trifluorometil)-1H-pirazol y 0,26 g de paraformaldehído se agitó a 130°C durante 4 horas. Después de enfriar la mezcla de reacción a temperatura ambiente, se añadió acetona a la mezcla de reacción. La mezcla se filtró. El residuo se concentró a presión reducida para obtener 0,60 g de 4-(trifluorometil)-1H-pirazol-1-ilmetanol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 5,58 (2H, s), 7,77 (1H, s), 7,90 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 17-3

1-(clorometil)-4-(trifluorometil)-1H-pirazol

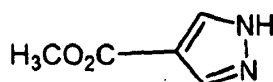


Se disolvieron 0,60 g de 4-(trifluorometil)-1H-pirazol-1-ilmetanol en 10 ml de diclorometano. Se añadió 1 ml de cloruro de tionilo a la disolución, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. La mezcla de reacción se concentró a presión reducida para obtener 0,60 g de 1-(clorometil)-4-(trifluorometil)-1H-pirazol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 5,89 (2H, s), 7,80 (1H, s), 7,91 (1H, s)

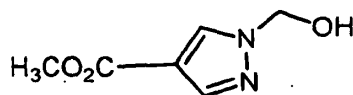
Ejemplo de Producción de Referencia 18-1

4-metoxicarbonil-1H-pirazol



Se disolvieron 44,45 g de 3,3-dimetoxipropionato de metilo y 45 ml de formiato de metilo en 180 ml de dimetoxietano. En una atmósfera de nitrógeno, se añadieron 12,8 g de hidruro de sodio al 60% a la disolución manteniendo la temperatura de la disolución a 40 a 50°C durante la adición. A continuación la mezcla se agitó a temperatura ambiente a lo largo de 18 horas. Se añadieron 180 ml de éter dietílico a la mezcla de reacción, como resultado, se formó un sólido. El sólido se recogió mediante filtración, seguido de lavado con 60 ml de éter dietílico. El sólido obtenido se secó a presión reducida durante la noche para obtener 49,41 g de sal de sodio de 2-(dimetoximetil)-3-hidroxi-acrilato de metilo. Se suspendieron 9,91 g de sal de sodio de 2-(dimetoximetil)-3-hidroxi-acrilato de metilo en 100 ml de etanol. Se añadieron 2,50 g de hidrato de hidrazina a la suspensión, seguido de agitación a temperatura ambiente durante 3 horas y a 80°C durante 1 hora. Se añadieron 100 ml de agua a la mezcla de reacción que se enfrió a temperatura ambiente. La mezcla se concentró a presión reducida a aproximadamente 100 ml. La disolución concentrada se extrajo con acetato de etilo. La capa orgánica se lavó con una disolución acuosa saturada de cloruro de sodio, se secó sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida. El residuo se disolvió en acetato de etilo, a esto se le añadió carbón activado, y se agitó durante la noche. La suspensión se filtró. El producto filtrado se concentró a presión reducida. El residuo se recristalizó en hexano-acetato de etilo para obtener 1,40 g de 4-metoxicarbonil-1H-pirazol.

RMN ^1H (DMSO-d_6 , TMS, δ (ppm)): 3,74 (3H, s), 8,08 (2H, s), 13,43 (1H, s)

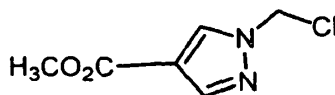
Ejemplo de Producción de Referencia 18-2**1-(hidroximetil)-4-metoxycarbonil-1H-pirazol**

5

La mezcla de 1,40 g de 4-metoxycarbonil-1H-pirazol, 0,37 g de paraformaldehído y 0,11g de trietilamina se agitó a 130°C durante 1 hora. 0,74 g de paraformaldehído y se añadieron 2 ml de trietilamina a la mezcla y se agitó a 130°C durante 2 horas. Después de enfriar la mezcla de reacción a temperatura ambiente, se añadió acetona. Después de filtrar la mezcla, el producto filtrado se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 1,38 g de 1-(hidroximetil)-4-metoxycarbonil-1H-pirazol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 3,84 (3H, s), 5,53 (2H, s), 7,96 (1H, s), 8,08 (1H, s)

10

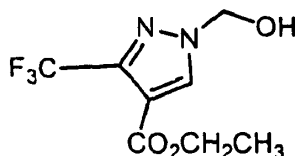
Ejemplo de Producción de Referencia 18-3**1-(clorometil)-4-metoxycarbonil-1H-pirazol**

15

Se disolvieron 1,38 g de 1-(hidroximetil)-4-metoxycarbonil-1H-pirazol en 10 ml de diclorometano. Se añadió 1 ml de cloruro de tionilo a la disolución, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. La mezcla de reacción se concentró a presión reducida para obtener 1,59 g de 1-(clorometil)-4-metoxycarbonil-1H-pirazol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 3,85 (3H, s), 5,85 (2H, s), 7,98 (1H, s), 8,10 (1H, s)

20

Ejemplo de Producción de Referencia 19-1**1-(hidroximetil)-3-(trifluorometil)-4-etoxycarbonil-1H-pirazol**

30

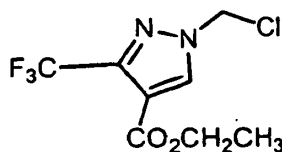
La mezcla de 2,08 g de 3-(trifluorometil)-4-etoxycarbonil-1H-pirazol y 0,66 g de paraformaldehído se agitó a 150°C durante 4 horas. Después de enfriar la mezcla de reacción a temperatura ambiente, se añadió acetona. Después de filtrar la mezcla, el producto filtrado se concentró a presión reducida para obtener 2,23 g de 1-(hidroximetil)-3-(trifluorometil)-4-etoxycarbonil-1H-pirazol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 1,34 (3H, t), 9,30 (2H, c), 5,58 (2H, s), 8,21 (1H, s)

35

Ejemplo de Producción de Referencia 19-2**1-(clorometil)-3-(trifluorometil)-4-etoxycarbonil-1H-pirazol**

40



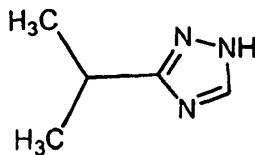
Se disolvieron 2,23 g de 1-(hidroximetil)-3-(trifluorometil)-4-etoxycarbonil-1H-pirazol en 30 ml de diclorometano. Se añadieron 1,4 ml de cloruro de tionilo a la disolución, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. La mezcla de reacción se concentró a presión reducida para obtener 2,38 g de 1-(clorometil)-3-(trifluorometil)-4-etoxycarbonil-1H-pirazol.

45

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 1,31 (3H, t), 4,31 (2H, c), 5,85 (2H, s), 8,20 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 20

5 hidrocloreto de 1-clorometil-1H-1,2,4-triazol

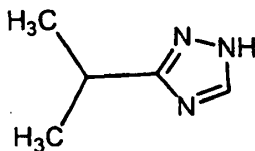


El compuesto anterior se produjo por medio del método descrito en el documento JP S57-165374 A.

10 RMN ^1H ($\text{DMSO}-d_6$, TMS, δ (ppm)): 6,26 (2H, s), 8,16 (1H, s), 8,85 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 21-1

3-i-propil-1H-1,2,4-triazol



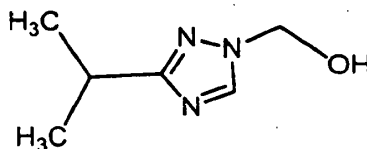
15

El compuesto anterior se produjo de una manera similar al método descrito en el documento JP H6-87839 A.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 1,39 (6H, d), 3,14 - 3,74 (1H, m), 7,99 (1H, s)

20 Ejemplo de Producción de Referencia 21-2

3-i-propil-1H-1,2,4-triazol 1-ilmetanol



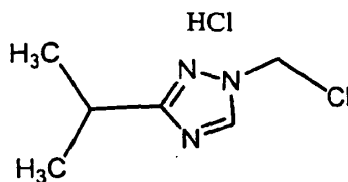
25

La mezcla de 1,15 g de 3-i-propil-1H-1,2,4-triazol, 0,94 g de paraformaldehído y 0,14 g de trietilamina se agitó a 150°C durante 5 horas. Después de enfriar la mezcla de reacción a temperatura ambiente, se añadió acetona. La mezcla se filtró. El producto filtrado se concentró a presión reducida. Se añadió hexano al residuo obtenido, como resultado, se formó un cristal. El cristal se recogió para obtener 1,28 g de 3-i-propil-1H-triazol-1-ilmetanol.

30 RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 1,32 (6H, d), 3,04 - 3,12 (1H, m), 5,54 (2H, s), 8,14 (1H, s)

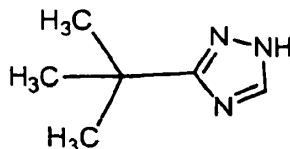
Ejemplo de Producción de Referencia 21-3

35 hidrocloreto de 1-(clorometil)-3-i-propil-1H-1,2,4-triazol

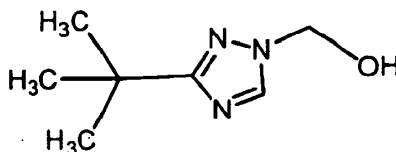


Se disolvieron 1,28 g de 3-i-propil-1H-1,2,4-triazol-ilmetanol en 20 ml de diclorometano, y se añadieron 2 ml de cloruro de tionilo a la disolución, seguido de agitación a temperatura ambiente durante 8 horas. La mezcla de reacción se concentró a presión reducida. Se añadió éter dietílico al residuo, como resultado, se formó un cristal. El cristal se recogió para obtener 1,58 g de hidrocloreto de 1-(clorometil)-3-i-propil-1H-1,2,4-triazol.

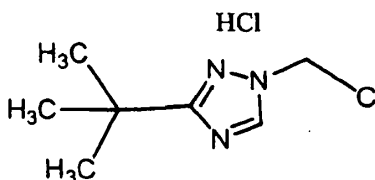
40

Ejemplo de Producción de Referencia 22-1**3-t-butil-1H-1,2,4-triazol**

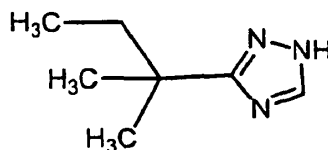
El compuesto anterior se produjo por medio del método descrito en el documento JP H6-87839 A.
RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 1,45 (9H, s), 8,25 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 22-2**3-t-butil-1H-1,2,4-triazol-ilmetanol**

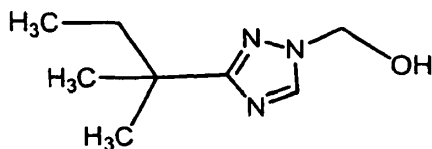
La mezcla de 3,76 g de 3-t-butil-1H-1,2,4-triazol, 1,00 g de paraformaldehído y 0,3 ml de trietilamina se agitó a 150°C durante 5 horas. Después de enfriar la mezcla de reacción a temperatura ambiente, se añadió acetona. La mezcla se filtró. El producto filtrado se concentró a presión reducida. Se añadió hexano al residuo obtenido, como resultado, se formó un cristal. El cristal se recogió para obtener 1,38 g de 3-t-butil-1H-triazol-1-ilmetanol.
RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 1,37 (9H, s), 1,81 (1H, s ancho), 5,55 (2H, s), 8,16 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 22-3**hidrocloruro de 3-t-butil-1-(clorometil)-1H-1,2,4-triazol**

La mezcla de 1,38 g de 3-t-butil-1H-1,2,4-triazol-ilmetanol y 2,7 ml de cloruro de tionilo se agitó en condiciones de reflujo a lo largo de 3 horas. Después de enfriar la mezcla de reacción a temperatura ambiente, la mezcla de reacción se concentró a presión reducida. El residuo se recrystalizó en hexano para obtener 1,72 g de hidrocloruro de 3-t-butil-1-(clorometil)-1H-1,2,4-triazol.
RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 1,36 (9H, s), 5,83 (2H, s), 8,17 (1H, s)

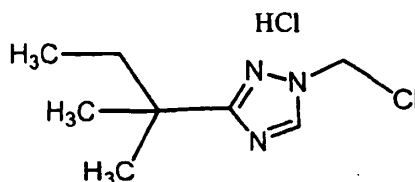
Ejemplo de Producción de Referencia 23-1**3-(1,1-dimetilpropil)-1H-1,2,4-triazol**

El compuesto anterior se produjo de una manera similar al método descrito en el documento JP H6-87839 A.
RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 0,77 (3H, t), 1,40 (6H, s), 1,74 (2H, c), 7,98 (1H, s)

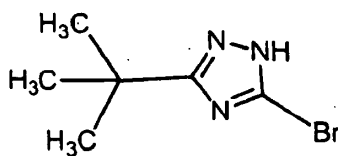
Ejemplo de Producción de Referencia 23-2**3-(1,1-dimetilpropil)-1H-1,2,4-triazol-1-ilmetanol**

La mezcla de 0,86 g de 3-(1,1-dimetilpropil)-1H-1,2,4-triazol, 0,37 g de paraformaldehído y 0,63 g de trietilamina se agitó a 150°C durante 5 horas. Después de enfriar la mezcla de reacción a temperatura ambiente, se añadió acetona. La mezcla se filtró. El producto filtrado se concentró a presión reducida para obtener 1,10 g de 3-(1,1-dimetilpropil)-1H-1,2,4-triazol-1-ilmetanol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 0,73 (3H, t), 1,33 (6H, s), 1,71 (2H, c), 5,54 (2H, s), 8,16 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 23-3**hidrocloruro de 1-(clorometil)-3-(1,1-dimetilpropil)-1H-1,2,4-triazol**

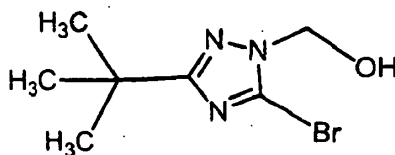
Se disolvieron 1,10 g de 3-(1,1-dimetilpropil)-1H-1,2,4-triazol-ilmetanol en 18 ml de diclorometano. Se añadieron 1,8 ml de cloruro de tionilo a la disolución, seguido de agitación a temperatura ambiente durante 8 horas. La mezcla de reacción se concentró a presión reducida para obtener 1,47 g de hidrocloruro de 1-(clorometil)-3-(1,1-dimetilpropil)-1H-1,2,4-triazol.

Ejemplo de Producción de Referencia 24-1**5-bromo-3-t-butil-1H-1,2,4-triazol**

La mezcla de 2,51 g de 3-t-butil-1H-1,2,4-triazol, 35 ml de agua y 2,5 ml de una disolución acuosa de hidróxido de sodio al 50% se enfrió a 0°C, a continuación se añadieron a esto 3,5 g de bromo. Esto se agitó a temperatura ambiente a lo largo de 3 horas. La mezcla de reacción se extrajo con acetato de etilo, se secó sobre sulfato de sodio anhidro, y se concentró a presión reducida. El residuo se recrystalizó en hexano para obtener 3,80 g de 5-bromo-3-t-butil-1H-1,2,4-triazol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 1,41 (9H, s), 11,60 (1H, s ancho)

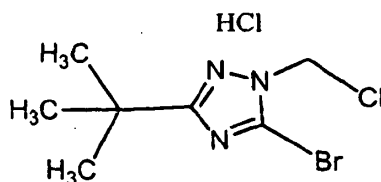
Ejemplo de Producción de Referencia 24-2**5-bromo-3-t-butil-1H-1,2,4-triazol-ilmetanol**



La mezcla de 3,45 g de 5-bromo-3-*t*-butil-1H-1,2,4-triazol, 0,61 g de paraformaldehído y 0,17 g de trietilamina se agitó a 130°C durante 5 horas. Después de enfriar la mezcla de reacción a temperatura ambiente, se añadió acetona. La mezcla se filtró. Se añadió hexano al residuo y se filtró. El producto filtrado se concentró a presión reducida para obtener 2,88 g de 5-bromo-3-*t*-butil-1H-1,2,4-triazol-ilmetanol.
RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 1,34 (9H, s), 5,55 (2H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 24-3

hidrocloruro de 5-bromo-3-*t*-butil-1-(clorometil)-1H-1,2,4-triazol

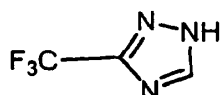


Se disolvieron 2,88 g de 5-bromo-3-*t*-butil-1H-1,2,4-triazol-1-ilmetanol en 100 ml de diclorometano. Se añadieron 4,2 ml de cloruro de tionilo a la disolución, seguido de agitación a temperatura ambiente durante 3 horas. La mezcla de reacción se concentró a presión reducida. Se añadió cloroformo al residuo al residuo y se filtró. El producto filtrado se concentró a presión reducida para obtener 2,03 g de hidrocloruro de 5-bromo-3-*t*-butil-1-(clorometil)-1H-1,2,4-triazol

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 1,35 (9H, s), 5,79 (2H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 25-1

3-(trifluorometil)-1H-1,2,4-triazol

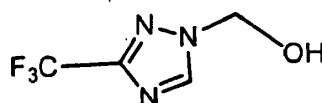


Se disolvieron 4,76 g de hidrato de hidrazina en 160 ml de etanol, y esto se enfrió a 0°C. A esto se le añadieron gota a gota 14,21 g de 2,2,2-trifluoroacetato de etilo a lo largo de un período de 30 minutos, seguido de agitación a 0°C durante 1 hora. Se añadieron 9,89 g de sal de ácido acético de formamidina a la mezcla de reacción, seguido de agitación a temperatura ambiente durante 30 minutos. La mezcla de reacción se concentró a presión reducida. Se añadieron 200 ml de ácido acético al residuo, seguido de agitación a 100°C durante 5 horas. La mezcla de reacción que se enfrió a temperatura ambiente se concentró a presión reducida. Se añadió una disolución acuosa saturada de hidrogenocarbonato de sodio al residuo de manera que tuviera pH 6. Y a continuación se extrajo con acetato de etilo. La capa orgánica se secó sobre sulfato de sodio anhidro, y se concentró a presión reducida. El residuo se recristalizó en hexano para obtener 5,44 g de 3-(trifluorometil)-1H-1,2,4-triazol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 8,45 (1H, s), 12,47 (1H, s ancho)

Ejemplo de Producción de Referencia 25-2

3-(trifluorometil)-1H-1,2,4-triazol-1-ilmetanol

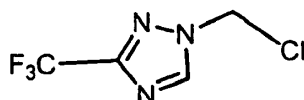


La mezcla de 2,74 g de 3-(trifluorometil)-1H-1,2,4-triazol y 1,20 g de paraformaldehído se agitó a 150°C durante 5 horas. Después de enfriar la mezcla de reacción a temperatura ambiente, se añadió acetona a la mezcla de reacción, y la mezcla se filtró. El producto filtrado se concentró. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 3,15 g de 3-(trifluorometil)-1H-1,2,4-triazol-1-ilmetanol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 4,04 (1H, t), 5,67 (2H, d), 8,37 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 25-3

1-(clorometil)-3-(trifluorometil)-1H-1,2,4-triazol

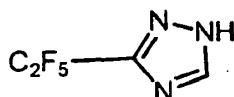


Se disolvieron 1,52 g de 3-(trifluorometil)-1H-1,2,4-triazol-1-ilmetanol en 50 ml de diclorometano, y se añadieron 2,7 ml de cloruro de tionilo a la disolución, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. La mezcla de reacción se concentró a presión reducida para obtener 1,36 g de 1-(clorometil)-3-(trifluorometil)-1H-1,2,4-triazol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 5,92 (2H, s), 8,44 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 26-1

3-(pentafluoroetil)-1H-1,2,4-triazol

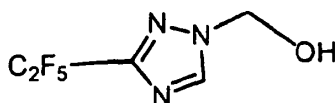


Se disolvieron 1,25 g de hidrato de hidrazina en 45 ml de etanol, y esto se enfrió a 0°C. Se añadieron a esto gota a gota 5,38 g de 2,2,3,3,3-pentafluoropropionato de etilo a lo largo de un período de 15 minutos, seguido de agitación a 0°C durante 1 hora. Se añadieron 2,61 g sal de ácido acético de formamida a la mezcla de reacción, seguido de agitación a temperatura ambiente durante 30 minutos. La mezcla de reacción se concentró a presión reducida. Se añadieron 50 ml de ácido acético al residuo, seguido de agitación a 100°C durante 5 horas. La mezcla de reacción se concentró a presión reducida. Se añadió una disolución acuosa saturada de hidrogenocarbonato de sodio al residuo de manera que tuviera un pH de alrededor de 6, y a continuación se extrajo con acetato de etilo. La capa orgánica se secó sobre sulfato de sodio anhidro, y se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 2,98 g de 3-pentafluoroetil-1H-1,2,4-triazol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 8,47 (1H, s), 12,39 (1H, s ancho)

Ejemplo de Producción de Referencia 26-2

3-(pentafluoroetil)-1H-1,2,4-triazol-1-ilmetanol

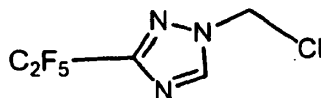


La mezcla de 1,45 g de 3-(pentafluoroetil)-1H-1,2,4-triazol y 0,46 g de paraformaldehído se agitó a 150°C durante 5 horas. Después de enfriar la mezcla de reacción a temperatura ambiente, se añadió acetona. La mezcla se filtró. El producto filtrado se concentró. Se añadió hexano al residuo, como resultado, se formó un cristal. El cristal se recogió para obtener 1,52 g de 3-(pentafluoroetil)-1H-1,2,4-triazol-1-ilmetanol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 5,69 (2H, s), 8,41 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 26-3

1-(clorometil)-3-(pentafluoroetil)-1H-1,2,4-triazol

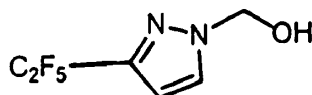


Se disolvieron 1,52 g de 3-(pentafluoroetil)-1H-1,2,4-triazol-1-ilmetanol en 50 ml de diclorometano, y se añadieron 2,7 ml de cloruro de tionilo a la disolución, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. La mezcla de reacción se concentró a presión reducida para obtener 1,36 g de 1-(clorometil)-3-(pentafluoroetil)-1H-1,2,4-triazol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 5,93 (2H, s), 8,44 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 27-1

3-(pentafluoroetil)-1H-pirazol-1-ilmetanol



La mezcla de 1,86 g de 3-(pentafluoroetil)-1H-pirazol y 0,60 g de paraformaldehído se agitó a 130°C durante 5 horas. Después de enfriar la mezcla de reacción a temperatura ambiente, se añadió acetona. La mezcla se filtró. El producto filtrado se concentró a presión reducida para obtener 1,98 g de 3-(pentafluoroetil)-1H-pirazol-1-ilmetanol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 4,54 (1H, s ancho), 5,58 (2H, d), 6,60 (1H, d), 7,68 (1H, d)

Ejemplo de Producción de Referencia 27-2

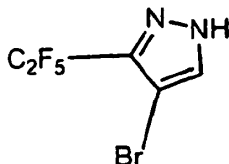
1-(clorometil)-3-(pentafluoroetil)-1H-pirazol

Se disolvieron 1,98 g de 3-(pentafluoroetil)-1H-pirazol-1-ilmetanol a 20 ml de diclorometano. Se añadieron 1,5 ml de cloruro de tionilo a la disolución, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. La mezcla de reacción se concentró a presión reducida para obtener 2,01 g de 1-(clorometil)-3-(pentafluoroetil)-1H-pirazol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 5,89 (2H, s), 6,65 (1H, d), 7,71 (1H, d)

Ejemplo de Producción de Referencia 28-1

4-bromo-3-(pentafluoroetil)-1H-pirazol

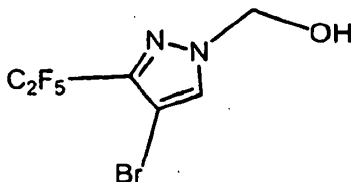


Se suspendieron 9,30 g de 3-(pentafluoroetil)-1H-pirazol en 90 ml de agua, y a la suspensión se le añadieron 6,0 g de una disolución acuosa de hidróxido de sodio al 50%. La mezcla se enfrió a 0°C, a continuación se añadieron 8,79 g de bromo a la mezcla, seguido de agitación a temperatura ambiente durante 7 horas. La mezcla de reacción se extrajo con acetato de etilo. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró, y se concentró a presión reducida para obtener 13,72 g de 4-bromo-3-(pentafluoroetil)-1H-pirazol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 7,71 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 28-2

4-bromo-3-(pentafluoroetil)-1H-pirazol-1-ilmetanol

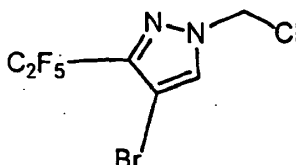


La mezcla de 13,72 g de 4-bromo-3-(pentafluoroetil)-1H-pirazol y 3,00 g de paraformaldehído se agitó a 130°C durante 5 horas. Después de enfriar la mezcla de reacción a temperatura ambiente, se añadió acetona. La mezcla se filtró. El producto filtrado se concentró a presión reducida. Se añadió hexano al producto filtrado, como resultado, se formó un cristal. El cristal se recogió para obtener 7,69 g de 4-bromo-3-(pentafluoroetil)-1H-pirazol-1-ilmetanol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 3,53 (1H, s ancho), 5,54 (2H, s), 7,73 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 28-3

4-bromo-1-(clorometil)-3-(pentafluoroetil)-1H-pirazol

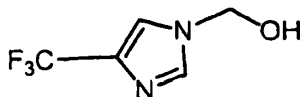


Se disolvieron 6,49 g de 4-bromo-3-(pentafluoroetil)-1H-pirazol-1-ilmetanol en 60 ml de diclorometano. Se añadieron 3,2 ml de cloruro de tionilo a la disolución, seguido de agitación a temperatura ambiente durante la noche. La mezcla de reacción se concentró a presión reducida para obtener 6,84 g de 4-bromo-1-(clorometil)-3-(pentafluoroetil)-1H-pirazol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 5,82 (2H, s), 7,75 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 29-1

4-(trifluorometil)-1H-imidazol-1-ilmetanol

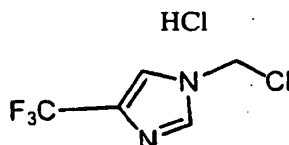


La mezcla de 1,80 g de 4-(trifluorometil)-1H-imidazol, 0,78 g de paraformaldehído se agitó a 140°C durante 4 horas. Después de enfriar la mezcla de reacción a temperatura ambiente, se añadió acetona. La mezcla se filtró, y a continuación el producto filtrado se concentró a presión reducida para obtener 2,16 g de 4-(trifluorometil)-1H-imidazol-1-ilmetanol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 5,39 (2H, d), 7,44 (1H, s), 7,61 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 29-2

hidrocloruro de 1-(clorometil)-4-(trifluorometil)-1H-imidazol

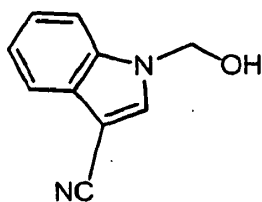


Se disolvieron 2,16 g de 4-(trifluorometil)-1H-imidazol-1-ilmetanol en 40 ml de diclorometano. Se añadieron 1,9 ml de cloruro de tionilo a la disolución, agitando a continuación a temperatura ambiente durante la noche. La mezcla de reacción se concentró a presión reducida para obtener 2,90 g de hidrocloruro de 1-(clorometil)-4-(trifluorometil)-1H-pirazol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 6,12 (2H, s), 8,10 (1H, s), 8,16 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 30-1

3-ciano-1H-indol-1-ilmetanol

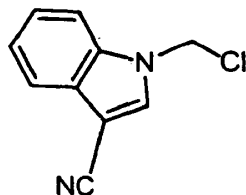


La mezcla de 1,42 g de 3-ciano-1H-indol, 0,60 g de paraformaldehído y 0,1 g de trietilamina se agitó a 130°C durante 1 hora. Después de enfriar la mezcla de reacción a temperatura ambiente, se añadió acetona a la mezcla de reacción. La mezcla se filtró. El producto filtrado se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 3,73 (1H, s ancho), 5,69 (2H, d), 7,29 - 7,39 (2H, m), 7,56 - 7,59 (1H, m), 7,71 - 7,75 (2H, m)

Ejemplo de Producción de Referencia 30-2

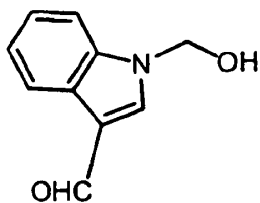
1-(clorometil)-3-ciano-1H-indol



Se disolvieron 1,69 g de 3-ciano-1H-indol-1-ylmetanol en 30 ml de diclorometano. Se añadieron 1,4 ml de cloruro de tionilo a la disolución, seguido de agitación a temperatura ambiente durante 3 horas. La mezcla de reacción se concentró a presión reducida para obtener 1,70 g de 1-(clorometil)-3-ciano-1H-indol. RMN ^1H (DMSO-d_6 , TMS, δ (ppm)): 6,44 (2H, s), 7,34 - 7,48 (2H, m), 7,64 - 7,74 (1H, m), 7,83 (1H, d), 8,47 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 31-1

3-formil-1H-indol-1-ylmetanol

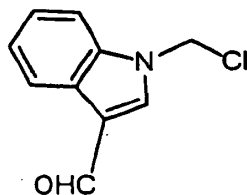


La mezcla de 5,81 g de 3-formil-1H-indol, 1,80 g de paraformaldehído y 0,40 g de trietilamina se agitó a 120°C durante 3 horas. Después de enfriar la mezcla de reacción a temperatura ambiente, se añadió acetona a la mezcla de reacción. La mezcla se filtró, y a continuación el producto filtrado se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 3,08 g de 3-formil-1H-indol-1-ylmetanol.

RMN ^1H (DMSO-d_6 , TMS, δ (ppm)): 5,61 (2H, d), 6,78 (1H, t), 7,21 - 7,34 (2H, m), 7,49 (1H, d), 8,08 (1H, d), 8,34 (1H, s), 9,94 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 31-2

1-(clorometil)-3-formil-1H-indol

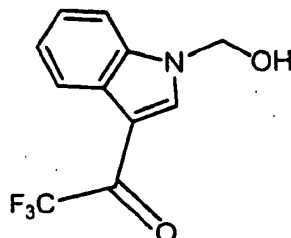


Se disolvieron 3,08 g de 3-formil-1H-indol-1-ilmetanol en 60 ml de diclorometano. Se añadieron 2,5 ml de cloruro de tionilo a la disolución, seguido de agitación a temperatura ambiente durante 3 horas. La mezcla de reacción se

concentró a presión reducida para obtener 3,02 g de 1-(clorometil)-3-formil-1H-indol.
RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 5,99 (2H, s), 7,35 - 7,52 (3H, m), 7,81 (1H, s), 7,83 (1H, d), 8,32 (1H, d), 10,05 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 32-1

3-(trifluoroacetil)-1H-indol-1-ilmetanol

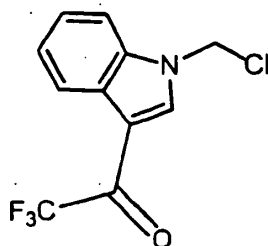


La mezcla de 4,80 g de 3-(trifluoroacetil)-1H-indol, 1,35 g de paraformaldehído y 0,10 g de trietilamina se agitó a 130°C durante 2 horas. Después de enfriar la mezcla de reacción a temperatura ambiente, se añadió acetona a la mezcla de reacción. La mezcla se filtró, y a continuación el producto filtrado se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice, y se añadió hexano al residuo, como resultado, se formó un cristal. El cristal se recogió para obtener 5,36 g de 3-(trifluoroacetil)-1H-indol-1-ilmetanol.

RMN ^1H ($\text{DMSO}-d_6$, TMS, δ (ppm)): 5,71 (2H, d), 6,92 (1H, t), 7,36 - 7,43 (2H, m), 7,76 (1H, d), 8,19 (1H, d), 8,31 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 32-2

1-(clorometil)-3-(trifluoroacetil)-1H-indol

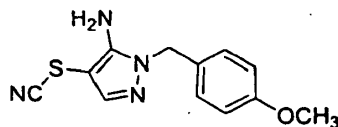


Se disolvieron 5,36 g de 3-(trifluoroacetil)-1H-indol-1-ilmetanol en 60 ml de diclorometano. Se añadieron 2,5 ml de cloruro de tionilo a la disolución, seguido de agitación a temperatura ambiente durante 3 horas. La mezcla de reacción se concentró a presión reducida y el residuo se recrystalizó en hexano-cloroformo para obtener 3,79 g de 1-(clorometil)-3-(trifluoroacetil)-1H-indol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 6,00 (2H, s), 7,30 - 7,57 (3H, m), 8,05 (1H, s), 8,39 - 8,41 (1H, m)

Ejemplo de Producción de Referencia 33-1

2-(4-metoxibencil)-4-tiocianato-2H-pirazol-3-ilamina

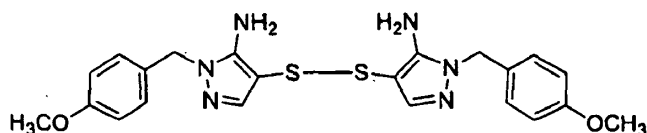


Se suspendieron 3,89 g de tiocianato de potasio en 40 ml de metanol. En una atmósfera de nitrógeno, esta suspensión se enfrió a -78°C. A esto se le añadieron gota a gota 1,76 g de bromo que se habían disuelto en 40 ml de metanol durante un período de 30 minutos, seguido de agitación durante 30 minutos. A continuación se añadieron a esto gota a gota 2,03 g de 2-(4-metoxibencil)-2H-pirazol-3-ilamina que se había disuelto en 10 ml de metanol durante un período de 10 minutos, seguido de agitación a -78°C durante 1 hora y a temperatura ambiente durante 8 horas. La mezcla de reacción se concentró a presión reducida. Se añadió agua al residuo, y se extrajo con acetato de etilo. La capa orgánica se secó sobre sulfato de sodio anhidro, y a continuación se concentró. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 1,54 g de 2-(4-metoxibencil)-4-tiocianato-2H-pirazol-3-ilamina.

RMN ^1H (DMSO- d_6 , TMS, δ (ppm)): 3,72 (3H, s), 5,07 (2H, s), 6,37 (2H, s ancho), 6,87 (2H, d), 7,14 (2H, d), 7,42 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 33-2

4-[[5-amino-1-(4-metoxibencil)-1H-pirazol-4-il]ditio]-1-(4-metoxibencil)-1H-pirazol-5-amina

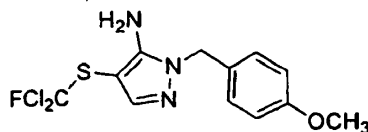


Se añadieron 1,42 g de 2-(4-metoxibencil)-4-tiocianato-2H-pirazol-3-ilamina a 20 ml de una disolución acuosa al 10% de hidróxido de sodio, y a continuación la mezcla se sometió a reflujo durante 2 horas. La mezcla de reacción se enfrió a temperatura ambiente, como resultado, se formó un cristal. El cristal se recogió por medio de filtración. El cristal se lavó con 30 ml de agua tres veces. El cristal se secó a presión reducida para obtener 1,27 g de 4-[[5-amino-1-(4-metoxibencil)-1H-pirazol-4-il]ditio]-1-(4-metoxibencil)-1H-pirazol-5-amina.

RMN ^1H (DMSO- d_6 , TMS, δ (ppm)): 3,71 (6H, s), 5,07 (4H, s), 5,73 (4H, s ancho), 6,83 (4H, d), 6,98 (2H, s), 7,07 (4H, d)

Ejemplo de Producción de Referencia 33-3

4-[[diclorofluorometil]tio]-1-(4-metoxibencil)-1H-pirazol-5-amina

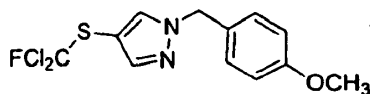


Se disolvieron 1,58 g de 4-[[5-amino-1-(4-metoxibencil)-1H-pirazol-4-il]ditio]-1-(4-metoxibencil)-1H-pirazol-5-amina en 20 ml de N,N-dimetilformamida. Se añadieron a la disolución 20 ml de agua, 1,42 g de hidrogenocarbonato de sodio y 2,93 g de hidrosulfito de sodio enfriando con hielo. Se añadieron 5,28 g de triclorofluorometano a la mezcla, seguido de agitación a temperatura ambiente durante 15 horas. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y se extrajo con acetato de etilo. La capa orgánica se lavó con agua, se secó sobre sulfato de sodio, y se filtró. El producto filtrado se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 1,04 g de 4-[[diclorofluorometil]tio]-1-(4-metoxibencil)-1H-pirazol-5-amina.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 3,79 (3H, s), 3,99 (2H, s ancho), 5,16 (2H, s), 6,86 (2H, d), 7,11 (2H, d), 7,52 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 33-4

4-[[diclorofluorometil]tio]-1-(4-metoxibencil)-1H-pirazol

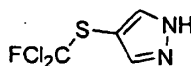


Se disolvieron 1,04 g de 4-[[diclorofluorometil]tio]-1-(4-metoxibencil)-1H-pirazol-5-amina en 20 ml de tetrahidrofurano. Se añadieron 1,55 g de nitrito de t-butilo a la disolución, seguido de reflujo durante 3 horas. Después de enfriar la mezcla de reacción a temperatura ambiente, se añadió agua a la mezcla de reacción, y se extrajo con éter dietílico. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de sodio, y se filtró. El producto filtrado se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 0,94 g de 4-[[diclorofluorometil]tio]-1-(4-metoxibencil)-1H-pirazol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 3,81 (3H, s), 5,27 (2H, s), 6,89 (2H, d), 7,19 (2H, d), 7,60 (1H, s), 7,72 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 33-5

4-[[diclorofluorometil]tio]-1H-pirazol

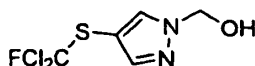


Se disolvieron 1,04 g de 4-[[diclorofluorometil]tio]-1-(4-metoxibencil)-1H-pirazol en 6 ml de ácido trifluoroacético, seguido de agitación a 65°C durante 3 horas. Después de enfriar la mezcla de reacción a temperatura ambiente, ésta se añadió a una disolución acuosa saturada de hidrogenocarbonato de sodio. La mezcla se extrajo con acetato de etilo. La capa orgánica se secó sobre sulfato de sodio anhidro, y se filtró. El producto filtrado se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 0,19 g de 4-[[diclorofluorometil]tio]-1H-pirazol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 7,88 (2H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 33-6

4-[[diclorofluorometil]tio]-1H-pirazol-1-ilmetanol

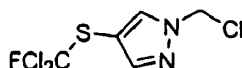


Se disolvieron 0,19 g de 4-[[diclorofluorometil]tio]-1H-pirazol en 5 ml de tetrahidrofurano. Se añadieron 5 ml de formaldehído al 36% en agua y 0,1 ml de hidróxido de tetrabutilamonio al 10% en agua a la disolución, seguido de agitación a temperatura ambiente durante 4 horas. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y se extrajo con MTBE. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, y se filtró. El producto filtrado se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 0,22 g de 4-[[diclorofluorometil]tio]-1H-pirazol-1-ilmetanol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 5,57 (2H, s), 7,77 (1H, s), 7,90 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 33-7

1-(clorometil)-4-[[diclorofluorometil]tio]-1H-pirazol

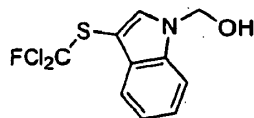


Se disolvieron 0,22 g de 9-[[diclorofluorometil]tio]-1H-pirazol-1-ilmetanol en 10 ml de cloroformo. Se añadieron 0,3 ml de cloruro de tionilo a la disolución, y se sometió a reflujo durante 4 horas. La mezcla de reacción se concentró a presión reducida para obtener 0,21 g de 1-(clorometil)-4-[[dicloro(fluoro)metil]tio]-1H-pirazol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 5,88 (2H, s), 7,79 (1H, s), 7,92 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 34-1

3-[[diclorofluorometil]tio]-1H-indol-1-ilmetanol



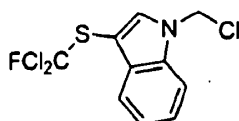
Se disolvieron 0,50 g de 3-[[diclorofluorometil]tio]-1H-indol en 10 ml de tetrahidrofurano. Se añadieron 10 ml de formaldehído al 36% en agua y 0,4 ml de hidróxido de tetrabutilamonio al 10% en agua a la disolución, seguido de

agitación a temperatura ambiente durante 30 minutos. Se añadió agua a la mezcla de reacción, y se extrajo con MTBE. La capa orgánica se lavó con agua, se seco sobre sulfato de magnesio anhidro, y se filtró. El producto filtrado se concentró a presión reducida para obtener 0,54 g de 3-[[diclorofluorometil]tio]-1H-indol-1-ilmetanol.

RMN ^1H (DMSO- d_6 , TMS, δ (ppm)): 5,61 (2H, d), 6,73 (1H, t), 7,23 - 7,33 (2H, m), 7,66 - 7,70 (2H, m), 8,04 (1H, s)

Ejemplo de Producción de Referencia 34-2

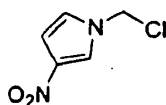
1-(clorometil)-3-[[diclorofluorometil]tio]-1H-indol



Se disolvieron 0,54 g de 3-[[diclorofluorometil]tio]-1H-indol-1-ilmetanol en 10 ml de cloroformo. Se añadieron 0,3 ml de cloruro de tionilo a la disolución, y se sometió a reflujo durante 4 horas. La mezcla de reacción se concentró a presión reducida para obtener 0,61 g de 1-(clorometil)-3-[[diclorofluorometil]tio]-1H-indol.

Ejemplo de Producción de Referencia 35

1-clorometil-3-nitro-1H-pirrol



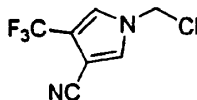
Se mezclaron 840 mg de 3-nitro-1H-pirrol, 15 ml de tetrahidrofurano y 15 ml de formaldehído al 36% en agua. Se añadieron 0,5 ml de hidróxido de tetrabutilamonio al 10% en agua a temperatura ambiente, seguido de agitación a temperatura ambiente durante 30 minutos. La mezcla de reacción se vertió en agua con hielo, y se extrajo con acetato de etilo. La capa orgánica se lavó con una disolución acuosa saturada de cloruro de sodio, se secó sobre sulfato de magnesio anhidro, y se filtró. El producto filtrado se concentró a presión reducida para obtener 1-hidroximetil-3-nitro-1H-pirrol.

El 1-hidroximetil-3-nitro-1H-pirrol obtenido se disolvió en 3 ml de cloroformo, y se añadieron 3 ml de cloruro de tionilo, seguido de agitación a temperatura ambiente durante 1 hora. Después de enfriar la mezcla de reacción a 0°C, ésta se vertió en agua con hielo. La mezcla se extrajo con acetato de etilo. La capa orgánica se lavó con una disolución acuosa saturada de hidrogenocarbonato de sodio, se secó sobre sulfato de magnesio anhidro, y se filtró. El producto filtrado se concentró a presión reducida. El residuo se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 620 mg de 1-clorometil-3-nitro-1H-pirrol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 5,63 (2H, s), 6,77 - 6,78 (2H, m), 7,68 - 7,69 (1H, m)

Ejemplo de Producción de Referencia 36

1-clorometil-3-ciano-4-trifluorometil-1H-pirrol



Se mezclaron 585 mg de 3-ciano-4-trifluorometil-1H-pirrol, 10 ml de tetrahidrofurano y 10 ml de formaldehído al 36% en agua. Se añadieron 0,1 ml de hidróxido de tetrabutilamonio al 10% en agua a la mezcla a temperatura ambiente, seguido de agitación a temperatura ambiente durante 30 minutos. La mezcla de reacción se vertió en agua con hielo, y se extrajo con acetato de etilo. La capa orgánica se lavó con una disolución acuosa saturada de cloruro de

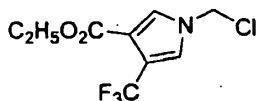
sodio, se secó sobre sulfato de magnesio anhidro, y se filtró. El producto filtrado se concentró a presión reducida para obtener 1-hidroximetil-3-ciano-4-trifluorometil-1H-pirrol.

El 1-hidroximetil-3-ciano-4-trifluorometil-1H-pirrol obtenido se disolvió en 3 ml de cloroformo, y se añadieron 3 ml de cloruro de tionilo, seguido de agitación a temperatura ambiente durante 1 hora. Después de enfriar la mezcla de reacción a 0°C, ésta se vertió en agua con hielo. La mezcla se extrajo con acetato de etilo. La capa orgánica se lavó con una disolución acuosa saturada de hidrogenocarbonato de sodio, se secó sobre sulfato de magnesio anhidro, y se filtró. El producto filtrado se concentró a presión reducida para obtener 800 mg de 1-clorometil-3-ciano-4-trifluorometil-1H-pirrol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 5,62 (2H, s), 7,21 (1H, d), 7,39 (1H, d)

Ejemplo de Producción de Referencia 37

1-clorometil-4-trifluorometil-3-etoxycarbonil-1H-pirrol



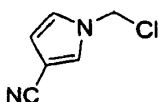
Se mezclaron 207 mg de 4-trifluorometil-3-etoxycarbonil-1H-pirrol, 5 ml de tetrahidrofurano y 5 ml de formaldehído al 36% en agua. Se añadieron 0,2 ml de hidróxido de tetrabutilamonio al 10% en agua a la mezcla a temperatura ambiente, seguido de agitación a temperatura ambiente durante 10 minutos. La mezcla de reacción se vertió en agua con hielo, y se extrajo con acetato de etilo. La capa orgánica se lavó con una disolución acuosa saturada de cloruro de sodio, se secó sobre sulfato de magnesio anhidro, y se filtró. El producto filtrado se concentró a presión reducida para obtener un producto bruto de 1-hidroximetil-4-trifluorometil-3-etoxycarbonil-1H-pirrol.

El 1-hidroximetil-4-trifluorometil-3-etoxycarbonil-1H-pirrol obtenido se disolvió en 3 ml de cloroformo, y 4 ml de cloruro de tionilo, seguido de reflujo durante 30 minutos. Después de enfriar la mezcla de reacción a 0°C, ésta se vertió en agua con hielo. La mezcla se extrajo con acetato de etilo. La capa orgánica se lavó con una disolución acuosa saturada de hidrogenocarbonato de sodio, se secó sobre sulfato de magnesio anhidro, y se filtró. El producto filtrado se concentró a presión reducida para obtener 225 mg de 1-clorometil-4-trifluorometil-3-etoxycarbonil-1H-pirrol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 1,35 (3H, t), 4,31 (2H, c), 5,64 (2H, s), 7,17 (1H, d), 7,51 (1H, d)

Ejemplo de Producción de Referencia 38

1-clorometil-3-ciano-1H-pirrol



Se mezclaron 670 mg de 3-ciano-1H-pirrol, 10 ml de tetrahidrofurano y 10 ml de formaldehído al 36% en agua. Se añadieron 0,1 ml de hidróxido de tetrabutilamonio al 10% en agua a temperatura ambiente, seguido de agitación a temperatura ambiente durante 30 minutos. La mezcla de reacción se vertió en agua con hielo, y se extrajo con acetato de etilo. La capa orgánica se lavó con una disolución acuosa saturada de cloruro de sodio, se secó sobre sulfato de magnesio anhidro, y se filtró. El producto filtrado se concentró a presión reducida para obtener 1-hidroximetil-3-ciano-1H-pirrol.

El 1-hidroximetil-3-ciano-1H-pirrol obtenido se disolvió en 3 ml de cloroformo, y se añadieron 2 ml de cloruro de tionilo, seguido de agitación a temperatura ambiente durante 1 hora. Después de enfriar la mezcla de reacción a 0°C, ésta se vertió en agua con hielo. La mezcla se extrajo con acetato de etilo. La capa orgánica se lavó con una disolución acuosa saturada de hidrogenocarbonato de sodio, se secó sobre sulfato de magnesio anhidro, y se filtró. El producto filtrado se concentró a presión reducida y se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice para obtener 290 mg de 1-clorometil-3-ciano-1H-pirrol.

RMN ^1H (CDCl_3 , TMS, δ (ppm)): 5,66 (2H, s), 6,46 - 6,97 (1H, m), 6,84 (1H, d), 7,32 - 7,33 (1H, m)

Los Ejemplos de Formulación se ilustran más abajo. Además, "parte" significa parte en peso. Los compuestos de la presente invención son designados por sus números de compuesto mostrados anteriormente.

Ejemplo de Formulación 1

Se disuelven 9 partes de cada uno de los compuestos de la presente invención (1) a (48) en 37,5 partes de xileno y a esto se le añaden 37,5 partes de dimetilformamida, y 10 partes de éter polioxietilenestirilfenílico y 6 partes de

dodecibencenosulfonato de calcio, agitando y mezclando bien a continuación, para producir un concentrado emulsionable de cada compuesto.

Ejemplo de Formulación 2

A 40 partes de cada uno de los compuestos de la presente invención (1) a (48) se les añaden 5 partes de SORPOL 5060 (marca registrada de TOHO KAGAKU KOGYO), mezclando bien a continuación. A la mezcla se le añaden 32 partes de CARPLEX Núm. 80 (marca registrada de SHIONOGI & Co., polvo fino de óxido de silicio hidratado sintético) y 23 partes de tierra de diatomeas de malla 300, mezclando después con una batidora, para producir un polvo mojabable de cada compuesto.

Ejemplo de Formulación 3

A 3 partes de cada uno del compuesto de la presente invención (1) a (48) se les añaden 5 partes de polvo fino de óxido de silicio hidratado sintético, 5 partes de dodecibencenosulfonato de sodio, 30 partes de bentonita, y 57 partes de arcilla, agitando y mezclando bien a continuación. A continuación se añade una cantidad apropiada de agua a esta mezcla, seguido de agitación adicional, granulación con una granuladora, y secado con aire, para producir un gránulo de cada compuesto.

Ejemplo de Formulación 4

Se mezclan bien 4,5 partes de cada uno de los compuestos de la presente invención (1) a (48), 1 parte de polvo fino de óxido de silicio hidratado sintético, 1 parte de Doriresu B (Sankyo Co., Ltd.) como floculante y 7 partes de arcilla con un mortero, seguido de agitación y mezclado con una batidora. A la mezcla resultante se le añaden 86,5 partes de arcilla cortada, agitando y mezclando bien a continuación, para producir un espolvoreable de cada compuesto.

Ejemplo de Formulación 5

Se mezclan y pulverizan 10 partes de cada uno de los compuestos de la presente invención (1) a (48), 35 partes de hulla blanca que contenía 50 partes de sal de amonio de polioxietilensulfato y 55 partes de agua mediante el método de molienda en mojado para producir una formulación de cada compuesto.

Ejemplo de Formulación 6

Se disuelven 0,5 partes de cada uno de los compuestos de la presente invención (1) a (48) en 10 partes de diclorometano, y la disolución resultante se mezcla con 89,5 partes de Iso-Par M (isoparafina: marca registrada de EXXON CHEMICAL LTD) para producir una disolución oleosa.

Ejemplo de Formulación 7

Se cargan 0,1 partes de cada uno de los compuestos de la presente invención (1) a (48) y 49,9 partes de NEO-CHIOZOL (CHUO KASEI Co., LTD) en un bote de aerosol, y se fija una válvula de aerosol al bote. A continuación se cargan en la lata 25 partes de éter dimetílico y 25 partes de LPG, seguido de sacudimiento y ajuste de un accionador sobre el mismo, para producir un aerosol oleoso.

Ejemplo de Formulación 8

Se mezclan y se disuelven 0,6 partes de cada uno de los compuestos de la presente invención (1) a (48), 0,01 partes de BHT, 5 partes de xileno, 3,39 partes de queroseno desodorizado y 1 parte de emulsionante [Atmos 300 (marca registrada de ATMOS CHEMICAL LTD)]. La disolución obtenida y 50 partes de agua destilada se cargan en un recipiente de aerosol, y se fija una válvula al recipiente. Se cargan 40 partes de propelente (GPL) a presión a través de la válvula para producir un aerosol acuoso.

El siguiente ejemplo de ensayo demostrará que el compuesto de la presente invención tiene actividad plaguicida como ingrediente activo de una composición para controlar plagas. Los compuestos de la presente invención son designados por sus números de compuesto mostrados anteriormente.

Ejemplo de Ensayo 1

La formulación obtenida de acuerdo con Ejemplo de Formulación 5 utilizando el compuesto de la presente invención (2), (3), (4), (5), (6), (7), (8), (9), (11), (12), (13), (14), (15), (16), (18), (20), (21), (22), (26), (28), (29), (30), (31), (32), (33), (34), (35), (36), (37), (38), (39), (45) y (48) respectivamente, se diluyó con agua de manera que la concentración de ingrediente activo llegó a 500 ppm para preparar una disolución plaguicida para el ensayo.

Se colocaron 50 gramos de molde Bonsoru 2 (producido by Sumitomo Chemical Co., Ltd.) en un vaso de polietileno, y se plantaron de 10 a 15 semillas de arroz en el vaso de polietileno. A continuación se hicieron crecer plantas de arroz hasta que se desarrollaron las segundas hojas de follaje y a continuación se cortaron a la misma altura de 5 cm. La disolución plaguicida para el ensayo preparado anteriormente se pulverizó a una velocidad de 20 ml/vaso a estas plantas de arroz. Después de secar la disolución plaguicida pulverizada sobre las plantas de arroz, estas se colocaron en un vaso de plástico para evitar el escape de las plagas de ensayo, y se liberaron treinta larvas en el primer instar de *Nilaparvata lugens* sobre las plantas de arroz, cubriendo a continuación el vaso de plástico con una tapa. A continuación el vaso de plástico se dejó en un invernadero (25°C). El sexto día después de la liberación de las larvas de *Nilaparvata lugens*, se examinó el número de *Nilaparvata lugens* parásitos sobre las plantas de arroz.

Como resultado, en el tratamiento con cada uno de los compuestos de la presente invención (2), (3), (4), (5), (6), (7), (8), (9), (11), (12), (13), (14), (15), (16), (18), (20), (21), (22), (26), (28), (29), (30), (31), (32), (33), (34), (35), (36), (37), (38), (39), (45) y (48), el número de *Nilaparvata lugens* parásitos no fue mayor de 3.

Ejemplo de Ensayo 2

La formulación obtenida de acuerdo con Ejemplo de Formulación 5 utilizando el compuesto de la presente invención (2), (4), (6), (8), (9), (11), (12), (13), (15), (18), (21), (22), (28), (30), (31), (32), (33), (34), (35), (36), (37), (38), (44), (46) y (47) respectivamente, se diluyó con agua de manera que la concentración de ingrediente activo llegó a 500 ppm para preparar una disolución plaguicida para el ensayo.

Un vaso de polietileno se sembró con pepino y se hizo crecer una planta hasta que se desarrolló la primera hoja verdadera, sobre la que se permitió que parasitaran aproximadamente veinte *Aphis gossypii*. El día siguiente, se pulverizó la disolución plaguicida anterior para su ensayo a una razón de 20 ml/vaso a la planta de pepino. El sexto día después de la aplicación, se examinó el número de *Aphis gossypii*.

Como resultado, en el tratamiento con cada uno de los compuestos de la presente invención (2), (4), (6), (8), (9), (11), (12), (13), (15), (18), (21), (22), (28), (29), (30), (31), (32), (33), (34), (35), (36), (37), (38), (44), (46) y (47), el número de insectos parásitos el sexto día después del tratamiento no fue mayor de 3.

Ejemplo de Ensayo 3

La formulación obtenida de acuerdo con Ejemplo de Formulación 5 utilizando el compuesto de la presente invención (2), (3), (4), (6), (7), (8), (11), (12), (13), (15), (16), (19), (20), (21), (22), (28), (29), (30), (31), (32), (33), (34), (36), (37), (38) y (39) respectivamente, se diluyó con agua de manera que la concentración de ingrediente activo llegó a 500 ppm para preparar una disolución plaguicida para el ensayo.

En el fondo de un vaso de polietileno que tenía un diámetro de 5,5 cm, se extendió un papel de filtro que tenía el mismo diámetro, y se añadieron gota a gota 0,7 ml de la disolución plaguicida anterior para su ensayo sobre el papel de filtro, colocando sobre el mismo a continuación 30 mg de sacarosa como cebo. Se liberaron diez imagos de *Musca domestica* en el vaso de polietileno y se cubrió con una tapa. Al cabo de 24 horas, se examinó el número de *Musca domestica* supervivientes y muertas y se calculó la tasa de plagas muertas.

Como resultado, en el tratamiento con cada uno del compuesto de la presente invención (2), (3), (4), (6), (7), (8), (11), (12), (13), (15), (16), (19), (20), (21), (22), (28), (29), (30), (31), (32), (33), (34), (36), (37), (38) y (39) la tasa de plagas muertas fue de 90% o más.

Ejemplo de Ensayo 4

La formulación obtenida de acuerdo con Ejemplo de Formulación 5 utilizando el compuesto de la presente invención (2), (3), (4), (6), (7), (8), (9), (11), (12), (13), (15), (16), (18), (19), (20), (21), (22), (27), (28), (29), (30), (31), (32), (33), (34), (35), (36), (37), (38), (43) y (43) respectivamente, se diluyó con agua de manera que la concentración de ingrediente activo llegó a 500 ppm para preparar una disolución plaguicida para el ensayo.

En el fondo de un vaso de polietileno que tenía un diámetro de 5,5 cm, se extendió un papel de filtro que tenía el mismo diámetro, y se añadieron gota a gota 0,7 ml de la disolución plaguicida anterior sobre el papel de filtro, colocando sobre el mismo a continuación 30 mg de sacarosa como cebo. Se liberaron dos imagos de *Blattella germanica* macho en el vaso de polietileno y se cubrió con una tapa. Al cabo de 6 días, se examinó el número de *Blattella germanica* supervivientes y muertas y se calculó en número de plagas muertas.

Como resultado, en el tratamiento con cada uno de los compuestos de la presente invención (2), (3), (4), (6), (7), (8), (9), (11), (12), (13), (15), (16), (18), (19), (20), (21), (22), (27), (28), (29), (30), (31), (32), (33), (34), (35), (36), (37), (38), (43) y (43), la tasa de plagas muertas fue de 100%.

Ejemplo de Ensayo 5

5 La formulación obtenida de acuerdo con Ejemplo de Formulación 5 utilizando el compuesto de la presente invención (1), (2), (3), (4), (5), (6), (7), (8), (9), (10), (11), (12), (13), (14), (15), (16), (17), (18), (19), (20), (21), (22), (23), (25), (27), (28), (29), (50), (31), (32), (33), (34), (35), (36), (37), (38), (39), (41), (44), (45), (46), (47) y (48) respectivamente, se diluyó con agua de manera que la concentración de ingrediente activo llegó a 500 ppm para preparar una disolución plaguicida para el ensayo.

10 Se añadieron 0,7 ml de la disolución plaguicida anterior a 100 ml de agua sometida a intercambio iónico (concentración de ingrediente activo: 3,5 ppm). Se liberaron veinte larvas de *Culex pipiens pallens* en el primer instar en la disolución. Después del día uno, se examinó el número de *Culex pipiens pallens* supervivientes y muertos y se calculó la tasa de plagas muertas.

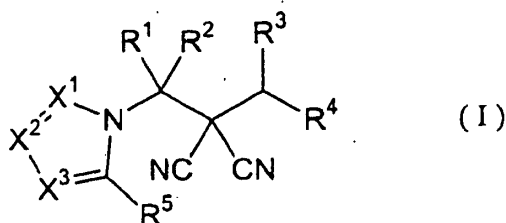
15 Como resultado, en el tratamiento con cada uno del compuesto de la presente invención (1), (2), (3), (4), (5), (6), (7), (8), (9), (10), (11), (12), (13), (14), (15), (16), (17), (18), (19), (20), (21), (22), (23), (25), (27), (28), (29), (50), (31), (32), (33), (34), (35), (36), (37), (38), (39), (41), (44), (45), (46), (47) y (48), el número de plagas muertas no fue menor de 95 %.

APLICABILIDAD INDUSTRIAL

20 Los compuestos de la presente invención tienen una actividad de control de las plagas excelente, y son útiles como ingrediente activo de un plaguicida.

REIVINDICACIONES

1. Un compuesto de malononitrilo representado por la fórmula (I):



5 donde, en la fórmula,

R¹ representa un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno;

R² representa un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo ciano o un átomo de hidrógeno;

cada uno de R³ y R⁴ representa un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo cicloalquilo C3-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o al menos un grupo alquilo C1-C3, un grupo cicloalqueno C4-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno, o representa un grupo alcanodiilo C2-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un grupo alquendiilo C4-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno donde R³ y R⁴ se acoplan entre sí en sus extremos;

cada uno de X¹, X² y X³ representa un átomo de nitrógeno o CR⁶;

cada uno de R⁵ y R⁶ representa un átomo de halógeno, un grupo ciano, un grupo nitro, un grupo hidroxilo, un grupo mercapto, un grupo formilo, un grupo SF₅, un grupo carboxilo, un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo cicloalquilo C3-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o al menos un grupo alquilo C1-C3, un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno(C3-C6)oxi sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino(C3-C6)oxi sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno(C3-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino(C3-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)sulfinilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C2-C6)carbonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi(C2-C5)carbonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo designado por NR¹⁰R¹¹, un grupo designado por C(=X⁵)NR¹²NR¹³, un grupo designado por (CH₂)_mQ, un grupo designado por C(=NOR¹⁷)R¹⁸ o un átomo de hidrógeno;

en caso de que se añadan dos átomos y cada uno de los dos átomos añadidos se una a uno de R⁵ y R⁶ o dos R⁶; los R⁵ y R⁶, que se unen a los dos átomos añadidos o los dos R⁶, que se unen a los dos átomos añadidos, se pueden acoplar entre sí en su extremo y representan un grupo alcanodiilo C2-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un grupo alquendiilo C4-C6; y en este caso, al menos un grupo metileno que estructura dicho grupo alcanodiilo o dicho grupo alquendiilo se puede remplazar por un átomo de oxígeno, un átomo de azufre o un grupo NR⁷;

R⁷ representa un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno C3-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino C3-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo cicloalquilo C3-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o al menos un grupo alquilo C1-C3, un grupo alquil(C2-C6)carbonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi(C2-C5)carbonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno;

cada uno de R¹⁰ y R¹¹ representa un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno C3-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino C3-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo cicloalquilo C3-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o al menos un grupo alquilo C1-C3, un grupo (alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno)alquilo C1-C3, un grupo alquil(C1-C5)sulfinilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-

C5)sulfonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C2-C6)carbonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi(C2-C5)carbonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno; cada uno de R^{12} y R^{13} representa un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno C3-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino C3-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo cicloalquilo C3-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o al menos un grupo alquilo C1-C3, un grupo designado por $(CH_2)_mQ$ o un átomo de hidrógeno;

o representa un grupo alcanodiilo C2-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un grupo alquendiilo C4-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno donde R^{12} y R^{13} se acoplan entre sí en sus extremos;

cada uno de R^{17} y R^{18} representa un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno C3-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino C3-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo cicloalquilo C3-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o al menos un grupo alquilo C1-C3, un grupo designado por $(CH_2)_mQ$ o un átomo de hidrógeno;

Q representa un grupo arilo sustituido opcionalmente con al menos un R^{14} ;

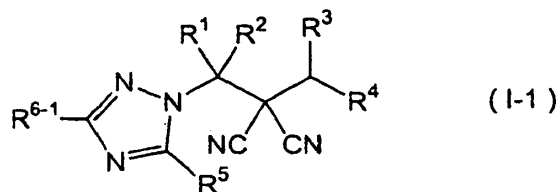
cada uno de R^{14} s representa

un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo cicloalquilo C3-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o al menos un grupo alquilo C1-C3, un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquenoil(C3-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquinoil(C3-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)sulfonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)sulfonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C2-C6)carbonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi(C2-C5)carbonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de halógeno;

m representa un número entero de 0 a 5;

X^5 representa un átomo de oxígeno o un átomo de azufre.

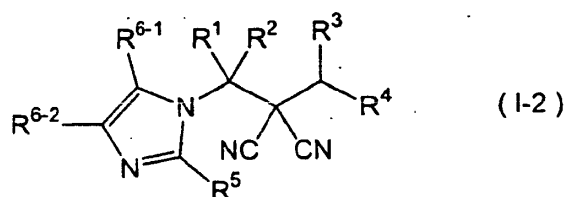
2. El compuesto de malononitrilo de acuerdo con la reivindicación 1, que está representado por la fórmula (I-1):



donde, en la fórmula,

R^1 , R^2 , R^3 y R^4 tienen el mismo significado que se ha definido en la reivindicación 1; cada uno de R^5 y R^{6-1} representa un átomo de halógeno, un grupo ciano, un grupo nitro, un grupo hidroxilo, un grupo mercapto, un grupo formilo, un grupo SF_5 , un grupo carboxilo, un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo cicloalquilo C3-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o al menos un grupo alquilo C1-C3, un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquenoil(C3-C6)oxi sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquinoil(C3-C6)oxi sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquenoil(C3-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquinoil(C3-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)sulfonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)sulfonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C2-C6)carbonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi(C2-C5)carbonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo fenilo o un átomo de hidrógeno.

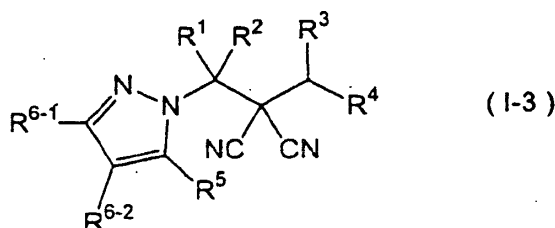
3. El compuesto de malononitrilo de acuerdo con la reivindicación 1, que está representado por la fórmula (I-2):



donde, en la fórmula,

R¹, R², R³ y R⁴ tienen el mismo significado que se ha definido en la reivindicación 1; cada uno de R⁵, R⁶⁻¹ y R⁶⁻² representa un átomo de halógeno, un grupo ciano, un grupo nitro, un grupo hidroxilo, un grupo mercapto, un grupo formilo, un grupo SF₅, un grupo carboxilo, un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo cicloalquilo C3-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o al menos un grupo alquilo C1-C3, un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno(C3-C6)oxi sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino(C3-C6)oxi sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno(C3-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino(C3-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)sulfinilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)sulfonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C2-C6)carbonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi(C2-C5)carbonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo fenilo o un átomo de hidrógeno.

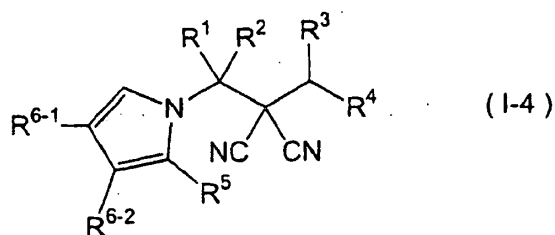
4. El compuesto de malononitrilo de acuerdo con la reivindicación 1, que está representado por la fórmula (I-3):



donde, en la fórmula,

R¹, R², R³ y R⁴ tienen el mismo significado que se ha definido en la reivindicación 1; cada uno de R⁵, R⁶⁻¹ y R⁶⁻² representa un átomo de halógeno, un grupo ciano, un grupo nitro, un grupo hidroxilo, un grupo mercapto, un grupo formilo, un grupo SF₅, un grupo carboxilo, un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo cicloalquilo C3-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o al menos un grupo alquilo C1-C3, un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno(C3-C6)oxi sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino(C3-C6)oxi sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno(C3-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino(C3-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)sulfinilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)sulfonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C2-C6)carbonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi(C2-C5)carbonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo fenilo o un átomo de hidrógeno.

5. El compuesto de malononitrilo de acuerdo con la reivindicación 1, que está representado por la fórmula (I-4):



donde, en la fórmula,

R¹, R², R³ y R⁴ tienen el mismo significado que se ha definido en la reivindicación 1;

cada uno de R⁵, R⁶⁻¹ y R⁶⁻² representa un átomo de halógeno, un grupo ciano, un grupo nitro, un grupo hidroxilo, un grupo mercapto, un grupo formilo, un grupo SF₅, un grupo carboxilo, un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo cicloalquilo C3-C6 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o al menos un grupo alquilo C1-C3, un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno(C3-C6)oxi sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino(C3-C6)oxi sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alqueno(C3-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquino(C3-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)sulfonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C2-C6)carbonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi(C2-C5)carbonilo sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo fenilo o un átomo de hidrógeno.

6. El compuesto de malononitrilo de acuerdo con una cualquiera de la reivindicación 2 a la reivindicación 5, donde R⁵ es un átomo de hidrógeno;

cada uno de R⁶, R⁶⁻¹ y R⁶⁻² es un átomo de halógeno, un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno.

7. El compuesto de malononitrilo de acuerdo con una cualquiera de la reivindicación 2 a la reivindicación 5, donde R¹, R², R³ y R⁵ son átomos de hidrógeno;

R⁴ es un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un grupo alqueno C2-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno;

cada uno de R⁶⁻¹ y R⁶⁻² es un átomo de halógeno, un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno.

8. El compuesto de malononitrilo de acuerdo con una cualquiera de la reivindicación 2 a la reivindicación 5, donde R¹, R², R³ y R⁵ son átomos de hidrógeno;

R⁴ es un grupo 2,2,2-trifluoroetilo o un grupo vinilo; cada uno de R⁶⁻¹ y R⁶⁻² es un átomo de halógeno, un grupo alquilo C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alcoxi C1-C5 sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno, un grupo alquil(C1-C5)tio sustituido opcionalmente con al menos un átomo de halógeno o un átomo de hidrógeno.

9. Una composición plaguicida que comprende una cantidad eficaz del compuesto de malononitrilo de acuerdo con una cualquiera de las reivindicaciones 1 a 8 y un portador.

10. Un método para controlar plagas que comprende aplicar una cantidad eficaz del compuesto de malononitrilo de acuerdo con cualquiera de las reivindicaciones 1 a 8 a las plagas o a un hábitat de las plagas.

11. El uso del compuesto de malononitrilo de acuerdo con cualquiera de las reivindicaciones 1 a 8 para un agente de control de plagas.